

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE Dr. TAHAR MOULAY SAIDA

FACULTE DES SCIENCES ET

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

Master

Spécialité : **PHYSIQUE**

Option : **spectroscopie moléculaire**

Par

AISSANI ASSIA

Sur le thème

Etude du spectre infrarouge haute résolution de SbHD_2 : l'état fondamental et les bandes d'élongation $\text{Sb-H } \nu_1$ et $2\nu_1$

Soutenu 24/05/2017
devant le jury composé de

M. Mohammed ELKEURTI	Professeur	Université de Saïda	Président
M. Mostefa ZEMOULI	Maître de Conférences	Université de Saïda	Rapporteur
M. Kadda Amara	Maître de Conférences	Université de Saïda	Examineur
MELLE. SAADAOUI FATIHA	Maîtrise Assistant	Université de Saïda	Examinatrice

Année Universitaire 2016- 2017

Résumé

Les spectres infrarouges à haute résolution de $^{121}\text{SbHD}_2$ et $^{123}\text{SbHD}_2$ ont été étudiés dans la région de 1780 à 1990 cm^{-1} correspondant à l'élongation fondamentale Sb-H la bande ν_1 . La bande d'élongation harmonique $2\nu_1$ de $^{123}\text{SbHD}_2$, située dans la gamme 3640-3790 cm^{-1} , a également été étudiée. La molécule SbHD_2 est un rotateur asymétrique de symétrie Cs avec le paramètre d'asymétrie $\kappa = 0,61$. La bande ν_1 est de type hybride, formée par de fortes transitions de C-type et de type B faible, et presque non perturbées. Pour $^{123}\text{SbHD}_2$, 2092 les transitions ont été attribuées: 70% appartiennent à la composante C, les autres 30% sont de type B. Les transitions attribuées ont été ajustées à l'aide d'un hamiltonien réduit de type Watson dans la représentation III' , avec une déviation standard $\sigma = 0,45 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. Afin de déterminer les paramètres de l'état fondamental, toutes les différences combinaison possibles de l'état fondamental (GSCD) ont été générées à partir des transitions ν_1 . Au total, 3942 GSCD jusqu'à $J'' = 27$, $K''_a = 25$ et $K''_c = 20$ ont été ajustées avec $\sigma = 0,52 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. Seules les transitions de type C ont été observées dans la faible bande $2\nu_1$. Les 556 transitions attribuées ont été ajustées avec $\sigma = 2,6 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ en utilisant le même hamiltonien que pour ν_1 . Dans la bande ν_1 de $^{121}\text{SbHD}_2$ 771, des transitions de type C ont été attribuées et les constantes spectroscopiques pour $\nu_1 = 1$ sont obtenues à partir d'un ajustement avec $\sigma = 0,70 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. En utilisant 618 GSCD, les constantes spectroscopiques de l'état fondamental de $^{121}\text{SbHD}_2$ ont été obtenus avec $\sigma = 1,0 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. Les paramètres moléculaires pour l'état fondamental et $\nu_1 = 1$ des deux isotopologues conviennent bien. Le champ de force quartique théorique ab initio de SbH_3 a été utilisé pour prédire tous les paramètres spectroscopiques pertinents pour $^{123}\text{SbHD}_2$, $^{121}\text{SbHD}_2$, $^{123}\text{SbH}_2\text{D}$ et $^{121}\text{SbH}_2\text{D}$. Les relations entre les fréquences harmoniques et entre les constantes d'anharmonicité obtenues dans la théorie du mode local étendu, pour la substitution isotopique $\text{XH}_3 \rightarrow \text{XH}_2\text{D} / \text{XHD}_2$, ont été comparées à celles obtenues dans le présent travail.

Abstract

High resolution infrared spectra of $^{121}\text{SbHD}_2$ and $^{123}\text{SbHD}_2$ have been studied in the region of m_1 , the Sb–H stretching fundamental, from 1780 to 1990 cm^{-1} . The $2\nu_1$ stretching overtone band of $^{123}\text{SbHD}_2$, located in the 3640–3790 cm^{-1} range, has also been investigated. The SbHD_2 molecule is an asymmetric rotor of C_s symmetry with the asymmetry parameter $j = 0.61$. The m_1 band is of hybrid type, formed by strong C-type and weak B-type transitions, and almost unperturbed. For $^{123}\text{SbHD}_2$, 2092 transitions have been assigned: 70% of these belong to the C component, the other 30% are of B-type. The assigned transitions have been fitted using a Watson type S-reduced Hamiltonian in the III. 1 representation, with a standard deviation of the fit $r = 0.45 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. In order to determine the ground state parameters all possible ground state combination differences (GSCD) have been generated from the ν_1 transitions. In total, 3942 GSCD up to $J'' = 27$, $K''_a = 25$, and $K''_c = 20$ have been fitted with $r = 0.52 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. Only C-type transitions have been observed in the weak $2m_1$ overtone band. The 556 assigned transitions have been fitted with $r = 2.6 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ using the same Hamiltonian as for m_1 . In the m_1 band of $^{121}\text{SbHD}_2$ 771 C-type transitions have been assigned, and the $\nu_1 = 1$ spectroscopic constants obtained from a fit with $r = 0.70 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. Using 618 GSCD the ground state spectroscopic constants of $^{121}\text{SbHD}_2$ have been derived with $r = 1.0 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. The molecular parameters for the ground and the $\nu_1 = 1$ states of the two isotopologues agree well. The quartic theoretical ab initio force field of SbH_3 has been used to predict all relevant spectroscopic parameters for $^{123}\text{SbHD}_2$, $^{121}\text{SbHD}_2$, $^{123}\text{SbH}_2\text{D}$, and $^{121}\text{SbH}_2\text{D}$. Relations between the harmonic frequencies and between the anharmonicity constants obtained in the expanded local mode theory, for the $\text{XH}_3 \rightarrow \text{XH}_2\text{D}/\text{XHD}_2$ isotopic substitution, have been compared with those obtained in the present study.

Remerciement

- *A Dieu, pour m'avoir donné la force dans les moments difficiles d'éditer ce mémoire.*
- *Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mon encadreur **M. ZEMOULI Mostefa**. Maître de conférences à l'université de Saida, qui a supervisé ce travail de recherche dont il est l'initiateur. Je le remercie pour son savoir, ses critiques précieuses, sa grande patience et sa disponibilité totale durant toute la période d'élaboration de ce travail.*
- *je remercie tous mes professeurs pour leurs disponibilité et conseils.*
- *Mes remerciements vont également à tous les membres de jury et à tous ceux qui ont participé de près ou de loin à l'élaboration de mon mémoire.*
- *Mes remerciements vont également à **M. KHELIFA Berriah**, pour la gentillesse et la patience qu'il a manifestées à mon égard durant ce mémoire, pour tous les conseils et les programmes qu'il a bien voulu m'envoyer.*



Dédicace

A **mon père** *et* **ma mère**, qui m'ont

comblé de leur soutien et m'ont voué un amour inconditionnel. Vous êtes pour moi un exemple de courage et de sacrifice continu, que cet humble travail témoigne mon affection, mon éternel attachement et qu'il appelle sur moi votre continuelle bénédiction.

Mes **frères**

Mes **sœurs**

Mes très **chère amies**

Mille mercis

Table des matières

Liste des tableaux.....	
Liste des figures.....	
Introduction.....	

I : Le hamiltonien moléculaire

I.1/ Le hamiltonien de vibration-rotation

..

I.1.1/ L'approximation de Born-Oppenheimer

.....

I.1.2/ Séparation de la translation et angles d'Euler

.....

I.Hamiltonien moléculaire.....

1.3 Le hamiltonien d'une molécule non-rigide

.....

Bibliographie

II : Les molécules SbH_2D

II.1 Hamiltonien exact et niveaux d'énergie

..

II.1.1 Configuration de référence moléculaire.....

II.1.2 Choix du système d'axe

.

II.1.3 Niveaux d'énergie d'inversion

II.1.4 Niveaux d'énergie de rotation-inversion

II.2	Propriétés de symétrie de SbH_2D et SbD_2H
II.3	Règles de sélection
II.3.1	Règles de sélection avec le groupe de symétrie.....
II.3.2	Règles de sélection de rotation-inversion.....
II.4	Hamiltonien utilisé pour l'analyse.....
	Bibliographie

III : Analyses de spectre SbH_2D

III.1.	Expérimental.....
III.2.	Description des spectres.....
III.2.1.	La bande ν_1 de $^{123}\text{SbHD}_2$
III.2.2.	La bande $2m_1$ de $^{123}\text{SbHD}_2$
III.2.3.	La bande m_1 de $^{121}\text{SbHD}_2$
III.3.	Analyse.....
III.3.1.	$^{123}\text{SbHD}_2$
III.3.2.	$^{121}\text{SbHD}_2$
III.3.3.	Calculs théoriques.....
III.4.	Résultats et discussion.....
III.4.1.	Résultats expérimentaux.....

Bibliographie

Conclusion.....
Résumé.....
Abstract.....

Liste des tableaux :

Tableau II.1.....

Tableau II.2.....

Tableau II.3.....

Tableau II.4.....

Tableau II.5.....

Tableau III.1.....

Tableau III.2.....

Tableau III.3.....

Tableau III.4.....

Liste des figures :

Figure II.1.....
Figure II.2.....
Figure II.3.....
Figure II.4.....
Figure II.5.....
Figure II.6.....
Figure II.7.....
Figure II.8.....
Figure II.9.....
Figure III.1.....
Figure III.2.....
Figure III.3.....
Figure III.4.....
Figure III.5.....

Introduction

La molécule de stibine, SbH_3 , et son isotopologue deutéré, SbD_3 , sont des cibles intéressantes pour les études spectroscopiques à haute résolution. Les deux molécules sont des rotateurs quasi sphériques **oblats** de symétrie C_{3v} et appartiennent à la série des molécules pyramidales $\text{XH}_3 / \text{XD}_3$, où X est Un atome du groupe 15 du tableau périodique. Comme pour les autres membres de la série $\text{XH}_3 / \text{XD}_3$, les analyses rotationnelles des états fondamentaux de SbH_3 et SbD_3 ont été accomplis avec succès en utilisant les réductions appropriées du Hamiltonien rotationnel effectif [1-3]. Les bandes fondamentales des molécules ont été analysées à l'aide d'un modèle hamiltonien qui tient compte des fortes perturbations de Coriolis et celles de type k, efficace entre les états A_1 et E dans des dyades d'élongation et de déformation [2-4].

Comme les états d'élongation Sb-H/Sb-D fortement excités remplissent les conditions de comportement en mode local [5], les harmoniques de SbH_3 et SbD_3 ont fait l'objet d'études approfondies. En effet, le modèle du mode local reproduit très bien le comportement caractéristique des états d'élongation jusqu'aux excitations élevées [6-8].

Afin d'étendre la connaissance des caractéristiques uniques spectroscopiques de ces molécules pyramidales XH_3/XD_3 , des isotopes substitutionnels ont été choisis. Dans ce but, les isotopologues asymétriques XH_2D et XHD_2 ont été étudiés. En fait, Les états fondamentaux de NH_2D et NHD_2 [9,10], de PH_2D et PHD_2 [11], et de AsH_2D [12] et AsHD_2 [13] ont été caractérisés et des constantes moléculaires précises de l'état fondamental sont disponibles. Tout les états fondamentaux ainsi que les quatre harmoniques de ν_1 de $^{14}\text{NH}_2\text{D}$ et $^{14}\text{NHD}_2$ ont été étudiés ([14, 15], tandis que seuls les paramètres fondamentaux de $^{15}\text{NH}_2\text{D}$ et $^{15}\text{NHD}_2$ ont été analysés [16]. Les premiers états excités et de nombreux états **doublément** excités de six vibrations de PH_2D ont été étudiés à haute résolution [17], tandis que dans le cas de PHD_2 , seuls les trois états fondamentaux de déformation et ν_1 , $2\nu_1$ et les bande d'élongation $6\nu_1$ P-H ont été analysées [18]. Pour X = As, les six fondamentaux de $^{75}\text{AsH}_2\text{D}$ [19] et les trois vibrations de déformation de $^{75}\text{AsHD}_2$ [13] ont été étudiés.

L'étude des états d'élongation P-H fortement excités de PH_2D et PHD_2 a été stimulée par l'extension du modèle du mode local des espèces XH_3/XD_3 au fragment $\text{XH}_2 / \text{XD}_2$ et XH / XD des molécules XH_2D et XHD_2 , en développant des relations isotopiques pour les paramètres entre des molécules parent vers des molécules filles [20].

Aucune donnée spectroscopique n'est disponible jusqu'à présent sur l'espèce partiellement deutérée avec X = Sb et Bi. Le présent travail porte sur l'analyse des bandes d'élongation Sb-H ν_1 et $2\nu_1$ de $^{123}\text{SbHD}_2$ et de ν_1 de $^{121}\text{SbHD}_2$. La fondamentale ν_1 de $^{123}\text{SbHD}_2$ a été clairement observée comme une bande isolée centrée à 1893 cm^{-1} . Un spectre haute résolution enregistré de 1780 à 2380 cm^{-1} et obtenu en utilisant un échantillon mono-isotopique $^{123}\text{SbD}_3$, comprenant une quantité de 6% de $^{123}\text{SbHD}_2$ comme impureté isotopique, a été utilisé. Similairement, la faible bande $2\nu_1$ de $^{123}\text{SbHD}_2$ a été détectée entre 3640 et 3790 cm^{-1} dans le spectre enregistré pour étudier la deuxième bandes harmonique d'élongation de $^{123}\text{SbD}_3$. Contrairement, la bande ν_1 de $^{121}\text{SbHD}_2$ a été observée dans un spectre de SbD_3 avec les isotopes ^{121}Sb et ^{123}Sb présents en abondance naturelle ($^{121}\text{Sb} / ^{123}\text{Sb} \sim 57/43$).

Les différences de combinaison de l'état fondamental (GSCD) dérivées des transitions ν_1 ont été utilisées pour déterminer pour la première fois des constantes moléculaires de l'état fondamental de $^{121}\text{SbHD}_2$ et $^{123}\text{SbHD}_2$. De plus, tous les paramètres spectroscopiques pertinents de $^{123}\text{SbHD}_2$, $^{121}\text{SbHD}_2$, $^{123}\text{SbH}_2\text{D}$ et $^{121}\text{SbH}_2\text{D}$ ont été prédites en utilisant le champ de force théorique quartique [2]. A partir de là, une comparaison entre les valeurs expérimentales et calculées de l'origine de la bande ν_1 , de la constante d'anharmonicité x_{11} , et les paramètres de rotation et de distorsion pour SbHD_2 est rendu possible.

Ce mémoire est structuré comme suit. Le chapitre 1 est consacré à l'aspect théorique de la spectroscopie moléculaire, le deuxième chapitre décrit la molécule étudiée SbH_2D ainsi que la théorie modèle utilisé. Dans le troisième chapitre, sont présentés, la procédure adoptée pour l'attribution, le modèle théorique utilisé dans les analyses et les résultats des ajustements.

Chapitre 1

Le hamiltonien moléculaire

Les noyaux et les électrons des atomes constituant une molécule stable sont liés par des forces d'origine électromagnétique. Si on néglige la vitesse des particules devant celle de la lumière, on peut utiliser l'approximation non relativiste pour l'évaluation des forces d'interaction qui, en l'absence de champ extérieur, se réduisent alors à des forces de Coulomb. Dans ces conditions l'interaction entre les particules dérive d'un potentiel qui ne dépend que des positions des particules.

La résolution de l'équation aux valeurs propres du hamiltonien du système fournit les valeurs possibles de l'énergie de la molécule. Cependant la complexité du problème, même avec l'aide de l'approximation ci-dessus, nécessite l'utilisation d'autres méthodes Simplificatrices qui permettent de se ramener à des problèmes plus faciles à résoudre. Dans ce chapitre on fera appel à de telles méthodes pour obtenir le hamiltonien moléculaire. Ces Résultats seront appliqués à la dérivation d'un hamiltonien simplifié correspondant au cas d'une molécule non-rigide présentant les degrés de liberté correspondant à un mouvement de grande amplitude et à la rotation globale.

1.1 Le hamiltonien de vibration-rotation

En tout premier lieu, afin de simplifier la recherche des valeurs propres du hamiltonien du système, on fait appel à l'approximation de Born-Oppenheimer qui permet de découpler l'équation de Schrödinger en deux équations relatives aux fonctions d'onde électroniques et nucléaires. On choisit ensuite le repère dans lequel on écrit le hamiltonien de la molécule de façon à séparer l'énergie de translation globale des termes associés à la rotation et à la vibration. Pour ce faire on prend comme référentiel de travail un référentiel lié à la molécule dont l'origine coïncide avec le centre de masse de la molécule.

1.1.1 L'approximation de Born-Oppenheimer

Cette approximation [12, 13] consiste à écrire la fonction d'onde totale de la molécule sous la forme d'un produit d'une fonction d'onde électronique par une fonction d'onde nucléaire. En raison de la petitesse de la masse de l'électron par rapport à celle du noyau, on peut négliger le gradient de la fonction d'onde électronique dans l'espace des coordonnées

nucléaires. Ceci permet de découpler l'équation de Schrödinger en deux équations : une pour les électrons l'autre pour les noyaux.

En accord avec l'approximation de Born-Oppenheimer, on suppose résolue la première équation, celle pour les électrons, qui correspond à leurs mouvements dans le champ des noyaux fixes. C'est à dire que l'on suppose connues les valeurs propres du hamiltonien électronique :

$$H_e = \sum_j \frac{P_j^2}{2m_e} + U(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) \quad (1)$$

Où m_e représente la masse de l'électron, les indices i et j correspondent respectivement aux noyaux et aux électrons ; $U(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)$ est l'énergie potentielle Coulombienne contenant le potentiel de répulsion des noyaux, celui de répulsion des électrons et celui d'attraction noyaux électrons ; les quantités \mathbf{R}_i et \mathbf{R}_j sont respectivement les vecteurs position des noyaux et des électrons dans le repère fixe $OXYZ$, lié au laboratoire et la quantité est le moment cinétique de l'électron \mathbf{P}_j . Le hamiltonien de l'Eq. (1. 1) a des états propres $\psi_e(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)$ et des valeurs propres $E_e(\mathbf{R}_i)$ qui dépendent de façon paramétrique des coordonnées nucléaires:

$$H_e \psi_e(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) = E_e(\mathbf{R}_i) \psi_e(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) \quad (2)$$

L'approximation de Born-Oppenheimer permet de décrire le mouvement de vibration et de rotation de la molécule par un hamiltonien dit de vibration rotation, H_{er} , dont l'énergie potentielle $V(\mathbf{R}_i)$ est la valeur propre du hamiltonien électronique $H_e(\mathbf{R}_i)$. Le hamiltonien du mouvement des noyaux prend la forme suivante :

$$H_{er} = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{R}_i) \quad (3)$$

Où N est le nombre de noyaux, m_i est la masse du noyau i et P_i est son moment cinétique.

1. 1. 2 Séparation de la translation et angles d'Euler

Afin de séparer la contribution à l'énergie cinétique provenant du mouvement de translation globale de la molécule de celle provenant de la vibration et de la rotation, on choisit un repère mobile $O'xyz$, lié à la molécule, dont l'origine coïncide avec le centre de masse de la molécule et dont l'orientation par rapport aux axes XYZ du laboratoire est donnée par les angles d'Euler χ , θ et ϕ . L'énergie cinétique provenant du mouvement de translation globale de la molécule ne sera pas considérée dans le cadre de ce travail.

L'équation permettant de relier les coordonnées \mathbf{R}_i dans le repère lié au laboratoire $OXYZ$ à celles r_i dans le repère lié à la molécule est la suivante :

$$\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_{O'} + S^{-1}(\chi, \theta, \phi) \cdot \mathbf{r}_i \quad (4)$$

où $\mathbf{R}_{O'}$ représente les coordonnées du centre de masse de la molécule dans le repère $OXYZ$ et S^{-1} est une matrice unitaire 3×3 dont l'expression en fonction des angles d'Euler est la suivante :

$$S^{-1}(\chi, \theta, \phi) = \begin{pmatrix} +c\chi c\theta c\phi - s\chi s\phi & -s\chi c\theta c\phi - c\chi s\phi + s\theta c\phi \\ +c\chi c\theta c\phi + s\chi s\phi & -s\chi c\theta s\phi + c\chi c\phi + s\theta s\phi \\ -c\chi s\phi & +s\chi s\theta + c\theta \end{pmatrix} \quad (5)$$

Où $c\chi = \cos\chi$ et $s\chi = \sin\chi$, etc. Il est important de noter que dans le cas d'une molécule isolée, l'énergie potentielle ne dépend ni de $\mathbf{R}_{O'}$ ni des trois angles d'Euler mais seulement des coordonnées. On l'écrira désormais $V(\mathbf{r}_i)$.

1. 2 Le hamiltonien d'une molécule non-rigide

Une molécule non-rigide est une molécule dont certains des atomes effectuent des mouvements dont l'amplitude n'est pas petite par rapport aux distances interatomiques. On dit qu'elle présente un ou des mouvements de grande amplitude. Dans le cas des deux variétés partiellement deutérées de l'ammoniac étudiées dans cette thèse, $^{15}\text{NH}_2\text{D}$ et $^{15}\text{ND}_2\text{H}$, il s'agit de l'inversion. Dans le cas de la molécule d'acétaldéhyde partiellement deutérée, CH_3COD , on a affaire à de la rotation interne ou torsion. Dans les deux cas il n'y a qu'un seul mouvement de grande amplitude. Dans ce paragraphe notre propos est d'obtenir le hamiltonien d'une molécule non-rigide ne présentant comme degré de liberté interne que celui correspondant au mouvement de grande amplitude. Il sera décrit par la coordonnée q .

Les molécules non-rigides comme celles étudiées dans cette thèse ne peuvent pas être traitées théoriquement en utilisant l'approximation harmonique [14]. Ceci provient du fait que la fonction énergie potentielle associée au mouvement de grande amplitude ne peut être reproduite par un développement polynomial. On est amené à utiliser d'autres approches pour calculer leurs niveaux d'énergie.

En 1970, Hougen, Bunker et Johns [15] ont développé une nouvelle approche pour les molécules triatomiques non-rigides dans laquelle le mouvement de grande amplitude est séparé de la partie vibrationnelle du hamiltonien en faisant appel à une configuration mobile, dite de référence. Avec cette approche seule les degrés de liberté correspondant aux petits mouvements, c'est à dire à la vibration, sont traités de façon harmonique. A l'instar de Hougen, Bunker et Johns [15], on définit une configuration de référence à l'aide des vecteurs $\mathbf{a}_i(q)$, avec $1 \leq i \leq N$, qui représentent le mouvement des noyaux au cours du mouvement de grande amplitude dans le repère lié à la molécule. Les coordonnées des atomes dans le repère lié au laboratoire sont alors données par une équation qui s'obtient à partir de l'Eq. (1. 4) et qui prend la forme :

$$\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_{O'} + S^{-1}(\chi, \theta, \phi) \cdot [\mathbf{a}_i(q), \mathbf{d}_i] \quad (6)$$

Dans cette équation \mathbf{d}_i représente les petits mouvements de l'atome i autour de la configuration de référence dans le repère lié à la molécule. Ceux-ci ne seront pas considérés dans le cadre de cette thèse. Afin de déterminer le Lagrangien de la molécule on doit tout d'abord calculer l'énergie cinétique [16] dans le repère lié au laboratoire :

$$2T = \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{R}}_i^2 \quad (7)$$

Comme le montre cette équation, il faut calculer d'abord la vitesse d'un atome dans le repère lié au laboratoire $\dot{\mathbf{R}}_i$ à l'aide de l'Eq. (1. 6). Ce calcul nécessite le calcul de la dérivée par rapport au temps de $S^{-1}(\chi, \theta, \phi)$. On peut montrer que celle-ci est donnée par la relation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} S^{-1}(\chi, \theta, \phi)_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma\delta} S^{-1}(\chi, \theta, \phi)_{\gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta\beta} \omega_\delta \quad (8)$$

Où $\alpha = X, Y, Z$ correspond aux coordonnées dans le repère du laboratoire ;

$\beta, \gamma, \delta = x, y, z$ correspondent aux coordonnées dans le repère mobile ; $\varepsilon_{\gamma\delta\beta}$ est le tenseur antisymétrique et ω est le vecteur vitesse angulaire de rotation de la molécule. Ses coordonnées dans le repère lié à la molécule s'expriment [14] en fonction des dérivées des angles d'Euler par rapport au temps :

$$\begin{cases} \omega_x = s\chi\dot{\theta} - s\theta c\chi\dot{\phi} \\ \omega_y = c\chi\dot{\theta} + s\theta s\chi\dot{\phi} \\ \omega_z = c\theta\dot{\phi} + \dot{\chi} \end{cases} \quad (9)$$

Compte tenu du fait que

$$\dot{\mathbf{a}}_i(q) = \frac{\partial \mathbf{a}_i(q)}{\partial q} \dot{q} \quad (10)$$

l'Eq. (1. 8) montre que la vitesse de l'atome i dans le repère lié au laboratoire est donnée par :

$$\dot{\mathbf{R}}_i = \dot{\mathbf{R}}_{O'} + S^{-1}(\chi, \theta, \phi) \cdot \left[\boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{a}_i(q) + \frac{\partial \mathbf{a}_i(q)}{\partial q} \dot{q} \right] \quad (11)$$

Cette équation montre que la vitesse s'exprime en fonction de $\dot{\mathbf{R}}_{O'}$, du vecteur vitesse angulaire de rotation $\boldsymbol{\omega}$ et de \dot{q} . Comme souligné plus haut, le premier terme de cette équation ne sera pas pris en compte, car il correspond à la translation globale de la molécule. L'énergie cinétique correspondant à la rotation globale de la molécule et au mouvement de grande amplitude va donc s'exprimer à l'aide de $\boldsymbol{\omega}$ et de \dot{q} seulement. En accord avec Wilson *et al.* [14] et Bunker [17], on l'exprime à l'aide du tenseur d'inertie généralisé \mathbf{I} de la façon suivante :

$$2T = \boldsymbol{\omega}^\dagger \mathbf{I} \boldsymbol{\omega} \quad (12)$$

Où $\boldsymbol{\omega}$ et $\boldsymbol{\omega}^\dagger$ sont respectivement les vecteurs colonne et ligne suivants :

$$\boldsymbol{\omega} = \begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \\ \dot{q} \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\omega}^\dagger = (\omega_x, \omega_y, \omega_z, \dot{q}) \quad (13)$$

et où \mathbf{I} est le tenseur d'inertie généralisé correspondant à la matrice 4×4 symétrique suivante :

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} I_{xx} & I_{xy} & I_{xz} & I_{xq} \\ I_{xy} & I_{yy} & I_{yz} & I_{yq} \\ I_{xz} & I_{yz} & I_{zz} & I_{zq} \\ I_{xq} & I_{yq} & I_{zq} & I_{qq} \end{pmatrix} \quad (14)$$

Dans cette équation, $I_{\alpha\beta}$, avec $\alpha, \beta = x, y, z$, représente les composantes du tenseur d'inertie habituel de la molécule, défini par :

$$I_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^N m_i [\mathbf{a}_i(q)^2 \delta_{\alpha\beta} - a_{i\alpha}(q)a_{i\beta}(q)] \quad (15)$$

Où $\delta_{\alpha\beta}$ est le symbole de Kronecker. Dans l'Eq. (1. 14), les trois composantes I_{xq} , I_{yq} et I_{zq} sont reliées à $\mathbf{L}(q)$, le moment angulaire généré par le mouvement de grande amplitude dans le repère lié à la molécule, par la relation suivante :

$$\mathbf{L}(q) = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{a}_i(q) \wedge \dot{\mathbf{a}}_i(q) = \dot{q} \begin{pmatrix} I_{xq} \\ I_{yq} \\ I_{zq} \end{pmatrix} \quad (16)$$

Enfin la composante diagonale I_{qq} du tenseur d'inertie généralisé de l'Eq. (1. 14) s'écrit :

$$I_{qq} = \sum_{i=1}^N m_i \left[\frac{\partial \mathbf{a}_i(q)}{\partial q} \right]^2 \quad (17)$$

L'Equation (1. 12) permet d'obtenir simplement le Lagrangien [16] par :

$$L = T - V(q) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}^\dagger \mathbf{I} \boldsymbol{\omega} - V(q) \quad (18)$$

Où $V(q)$ représente l'énergie potentielle de la molécule associée au mouvement de grande amplitude.

Grâce à l'Eq. (1. 18) on peut obtenir facilement la fonction de Hamilton ou hamiltonien [18] de la molécule. Celui-ci s'exprime à l'aide des moments conjugués. Dans le cas présent ils sont au nombre de quatre. Le vecteur colonne \mathbf{P} contenant les quatre moments conjugués s'écrit :

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \\ P_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial \omega_x} \\ \frac{\partial L}{\partial \omega_y} \\ \frac{\partial L}{\partial \omega_z} \\ \frac{\partial L}{\partial \omega_{\dot{q}}} \end{pmatrix} = \mathbf{I}\boldsymbol{\omega} \quad (19)$$

Où J_x , J_y et J_z sont les moments conjugués de ω_x , ω_y et ω_z et correspondent aux composantes du moment angulaire rotationnel dans le repère lié à la molécule et où P_q est le moment conjugué à la coordonnée q associée au mouvement de grande amplitude. On peut facilement montrer que le hamiltonien classique s'écrit sous la forme suivante :

$$H = \frac{1}{2} \mathbf{P}^\dagger \boldsymbol{\mu} \mathbf{P} + V(q) \quad (20)$$

Où le tenseur $\boldsymbol{\mu}$ est l'inverse du tenseur généralisé \mathbf{I} de l'Eq. (1. 14).

Le passage du hamiltonien classique de l'Eq. (1. 20) au hamiltonien quantique s'effectue en utilisant la formule de Podolsky [19]. Le hamiltonien quantique s'écrit :

$$H = \frac{1}{2} |\boldsymbol{\mu}|^{\frac{1}{4}} \mathbf{P}^\dagger |\boldsymbol{\mu}|^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu} \mathbf{P} |\boldsymbol{\mu}|^{\frac{1}{4}} + V(q) \quad (21)$$

Où $|\boldsymbol{\mu}|$ est le déterminant du $\boldsymbol{\mu}$. Dans cette équation les moments conjugués sont des opérateurs agissant sur la fonction d'onde [14]. Le moment conjugué à la coordonnée q est le suivant :

$$P_q = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \quad (22)$$

où est la constante de Planck h , divisée par 2π Tandis que les moment conjugués à ω_x , ω_y et ω_z sont les opérateurs quantiques habituels J_x , J_y et J_z correspondant aux composantes dans le repère lié à la molécule du moment angulaire rotationnel. Leur expression est donnée aux Eqs. (7-144)–(7-146) du livre de Bunker [17]. Ils satisfont aux règles de commutation anormales [17] :

$$[J_x, J_y] = -i\hbar J_z \quad [J_y, J_z] = -i\hbar J_x \quad [J_z, J_x] = -i\hbar J_y \quad (23)$$

L'utilisation du hamiltonien donné à l'Eq. (1. 21) nécessite [14] l'emploi de l'élément de volume $\sin\theta d\theta d\phi d\chi dq$ lors du calcul d'intégrale mettant en jeu des fonctions d'ondes.

Dans la suite de cette thèse, les énergies seront exprimées en cm^{-1} , les distances en ångström et les masses en unité de masse atomique. Nous n'utiliserons de plus que des coordonnées q de type angulaire et des moments conjugués sans dimension. C'est-à-dire que nous écrirons la composante du moment angulaire rotationnel J_z comme $-i\partial/\partial\chi$ tandis que le moment conjugué de l'Eq. (1. 22) devient $-i\partial/\partial q$. Dans ces conditions, il convient de transformer le hamiltonien de l'Eq. (1. 21) en multipliant chaque composante de μ par un facteur égale à $5.055. /29979. 2458$ et d'enlever le facteur $1/2$.

Bibliographie

- [1] T. L. Wilson, R. Mauersberger, and C. Henkel, *Mitteilungen der Astronomischen Gesellschaft Hamburg* **65**, 191–191 (1986).
- [2] E. Roueff, S. Tiné, L. H. Coudert, G. Pineau des Foreêts, E. Flagarone, and M. Gerin, *Astronomy and Astrophysics* **354**, L63–L66 (2000).
- [3] F. F. S. van der Tak, P. Schilke, H. S. P. Müller, D. C. Lis, T. G. Phillips, M. Gerin, and E. Roueff, *Astronomy and Astrophysics* **388**, L53–L56 (2002).
- [4] D. C. Lis, E. Roueff, T. G. Phillips, L. H. Coudert, F. F. S. van der Tak, and P. Schilke, *Astrophys. J.* **571**, L55–L58 (2002).
- [5] D. Despois, N. Biver, D. Bockelée, and J. Crovisier, Observation of molecules in comets, Proceedings IAU Symposium No. 231, page 119, 2005.
- [6] K. J. Meech and et al., *Scienceexpress* **10**, 1126–1135 (2005).
- [7] C. Arpigny, E. Jehin, J. Manfroid, D. Hutsemékers, R. Schulz, J. A. Stüwe, J. M. Zucconi, and I. Ilyin, *Science* **301**, 1522–1524 (2003).
- [8] P. M. Solomon and N. J. Woolf, *Astrophys. J.* **180**, L89–L89 (1973).
- [9] N. Fourikis, M. W. Sinclair, B. J. Robinson, P. D. Godfrey, and R. D. Brown, *Austr. J. Phys.* **27**, 425–430 (1974).
- [10] W. Gilmore, M. Morris, D. R. Johnson, F. J. Lovas, B. Zuckerman, B. E. Turner, and P. Palmer, *Astrophys. J.* **204**, 43–46 (1976).
- [11] J. N. Chengalur and N. Kanekar, *Astronomy and Astrophysics* **403**, L43–L46 (2003).
- [12] M. Born and R. Oppenheimer, *J. Chem. Phys.* **84**, 457–484 (1927).
- [13] A. Messiah, « Mécanique Quantique, Dunod, Paris », 1964.
- [14] E. Bright Wilson, J. C. Decius, and Paul C. Cross, “Molecular Vibrations. The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra, McGraw-Hill, Inc, New York Toronto London”, 1955.
- [15] J. T. Hougen, P. R. Bunker, and J. W. C. Johns, *J. Mol. Spectrosc.* **34**, 136–172 (1970).
- [16] L. Landau et E. Lifchitz, “Mécanique, Mir, Moscou”, 1973.
- [17] P. R. Bunker, “Molecular Symmetry and Spectroscopy, AP, New York San Francisco London”, 1979.
- [18] C. Cohen-Tannoudji and B. Diu et F. Laloë, Mécanique quantique, Tome II, Hermann, 1973.
- [19] B. Podolsky, *Phys. Rev.* **32**, 812–816 (1928).

Chapitre 2

Les molécules SbH₂D

Comme la variété normale, toutes les variétés isotopiques de l'ammoniac présentent de l'inversion. Historiquement, c'est sur la variété normale qu'a eu lieu la première vérification expérimentale de l'effet tunnel prédit par la mécanique quantique. En effet, les spectres de l'ammoniac sont très affectés par ce mouvement de grande amplitude. Celui-ci peut-être décrit comme un mouvement de type parapluie et permet à la molécule de passer d'une de ses configurations pyramidales d'équilibre à l'autre, en franchissant une barrière de potentiel haute de **2000 cm⁻¹**. Les effets de l'inversion ont été mis en évidence pour la première fois par Dennison et ses collaborateurs [20, 21] dans le spectre infrarouge de la variété normale. Ci-dessous, les résultats du chapitre précédent sont utilisés pour obtenir le hamiltonien de rotation-inversion des molécules **SbH₂D**.

On s'attachera à comprendre l'origine du couplage rotation-inversion et la façon d'en tenir compte. Un hamiltonien effectif permettant de calculer les niveaux d'énergie de rotation-inversion sera ensuite déduit. Le groupe de symétrie à utiliser compte tenu de l'inversion sera également décrit ainsi que les règles de sélection pour les transitions dipolaires électriques. Enfin on montrera comment incorporer les effets de la distorsion centrifuge afin de construire le hamiltonien effectif qui sera utilisé pour l'analyse des spectres haute-résolution.

2.1 Hamiltonien exact et niveaux d'énergie :

Un hamiltonien exact décrivant l'inversion de l'ammoniac est obtenu en mettant en œuvre une approche similaire à celle de Spirko et de ses collaborateurs [22, 23] développée pour la variété normale et les variétés partiellement deutérées. Cette approche est basée sur le modèle théoriques de Hougen *et al.* [15], utilisé au Paragraphe 1.2.

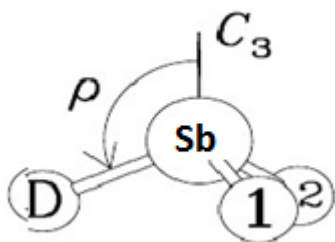


Figure 2.1 : Dans le cas de SbH_2D , la coordonnée d'inversion est l'angle ρ entre la liaisons SbD et l'axe C_3 . Dans le cas de SbD_2H , ρ est l'angle entre la liaisons SbH et ce pseudo axe de symétrie.

2.1.1 Configuration de référence moléculaire :

A l'instar de Danielis *et al.* [23] dans le cas de SbH_2D , on définit une configuration de référence et une coordonnée d'inversion en supposant que la molécule conserve son axe de symétrie d'ordre 3. Cet axe sera désigné sous le nom de C_3 ou de pseudo axe de symétrie.

Comme le montre la **Figure 2.1**, la coordonnée décrivant l'inversion est l'angle ρ entre la liaison SbD et ce pseudo axe de symétrie. On a donc $0 \leq \rho \leq \pi$. En accord avec Danielis *et al.* [23], on suppose que les angles entre cet axe et les liaisons SbH_1 et SbH_2 sont identiques et égaux à ρ . De même les trois angles de valence $\angle H_1SbD$, $\angle DSbH_2$ et $\angle H_2SbH_1$ sont supposés égaux. Si α est l'un de ces angles, la relation suivante est satisfaite :

$$\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \rho = \sin \frac{\alpha}{2} \quad (2.1)$$

Quand $\rho = \frac{\pi}{2}$ pour une configuration de référence plane, cette équation montre que les trois angles de valence valent $\frac{2\pi}{3}$. Toujours en accord avec Danielis *et al.* [23], les longueurs des liaisons SbH_1 , SbH_2 et SbD sont supposées indépendantes de ρ et prises égales à r_0 .

Le repère lié à la molécule $O'xyz$ est attaché à la molécule en plaçant le pseudo axe de symétrie de façon à ce qu'il fasse un angle $\theta(\rho)$ avec l'axe O'_z , comme le montre la **Figure 2.2**. Le plan de symétrie de la molécule reste confondu avec le plan xz . Dans le cas de SbH_2D , les coordonnées des deux atomes d'hydrogène sont alors données par :

$$\{a_{1x}=a_{2x}=\left(\frac{3m_d + m_n}{2m}\right) * r_0 \sin \rho \cos \theta + \left(\frac{m_n}{m}\right) * r_0 \cos \rho \sin \theta$$

$$\{a_{1y}=a_{2y}=\frac{-\sqrt{3}}{2} * r_0 \sin \rho \quad (2.2)$$

$$\{a_{1z}=a_{2z}=-\left(\frac{3m_d + m_n}{2m}\right) * r_0 \sin \rho \sin \theta + \left(\frac{m_n}{m}\right) * r_0 \cos \rho \cos \theta$$

Les coordonnées de l'atome de deutérium sont :

$$\{a_{Dx}=-\left(\frac{3m_H + m_n}{m}\right) * r_0 \sin \rho \cos \theta + \left(\frac{m_n}{m}\right) * r_0 \cos \rho \sin \theta$$

$$\{a_{Dy}=0 \quad (2.3)$$

$$\{a_{Dz}=a_{2z}=\left(\frac{3m_H + m_n}{m}\right) * r_0 \sin \rho \sin \theta + \left(\frac{m_n}{m}\right) * r_0 \cos \rho \cos \theta$$

Enfin, celles de l'atome d'azote s'écrivent :

$$\{a_{Nx}=-\left(\frac{m_H - m_D}{m}\right) * r_0 \sin \rho \cos \theta + \left(\frac{2m_H + m_D}{m}\right) * r_0 \cos \rho \sin \theta$$

$$\{a_{Ny}=0 \quad (2.4)$$

$$\{a_{Nz}=\left(\frac{m_H + m_D}{m}\right) * r_0 \sin \rho \sin \theta + \left(\frac{2m_H + m_D}{m}\right) * r_0 \cos \rho \cos \theta$$

Dans ces équations m_H , m_N et m_D , sont les masses des atomes **H**, **Sb** et **D**, respectivement, et $m = 2m_H + m_D + m_N$ est la masse totale de la molécule. Comme le confirment les Eqs. (2.2), (2.3) et (2.4), le repère $O'xyz$, est le repère du centre de masse.

2.1.2 Choix du système d'axe :

Le hamiltonien exact correspondant au modèle décrit ci-dessus s'obtient en principe grâce aux Eqs. (1.20) et (1.21). En choisissant la fonction $\theta(\rho)$ on peut changer qualitativement la forme de cet hamiltonien. Deux choix ont été retenus. Le premier choix consiste à prendre $\theta(\rho)$ de façon à ce que le repère $O'xyz$ soit le système principal d'inertie. Ce choix sera désigné ci-dessous sous le nom de PAM (principal axis system). Le

second choix vise à minimiser les couplages inversion-rotation. Il sera désigné sous le nom de IAM (internal axis method). Indépendamment du choix de $\theta(\rho)$ et en raison du plan de symétrie de la molécule, on peut déjà montrer que quatre composantes du tenseur d'inertie généralisé de

l'Eq. (1.14) sont identiquement nulles. Ce sont $I_{xy}(\rho)$, $I_{yz}(\rho)$, $I_x\rho(\rho)$ et $I_z\rho(\rho)$.

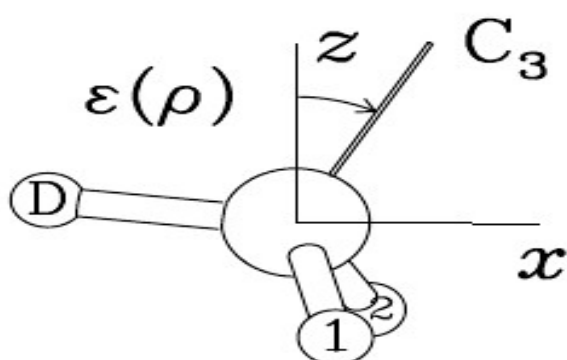


Figure 2.2 : La façon dont le système d'axes mobiles $O'xyz$ est attaché à la molécule SbH_2D . $\theta(\rho)$ est l'angle entre l'axe z et le pseudon axe de symétrie d'ordre 3, C_3 .

Choix PAM :

Le choix PAM de $\theta(\rho)$ permet d'avoir en plus une composante $I_{xz}(\rho)$ identiquement nulle. La forme analytique de la fonction $\theta(\rho)$ est alors donnée par :

$$\theta(\rho) = \frac{1}{2} \arctan \left[\frac{u_1 \cdot \tan \rho}{u_2 - (u_2 + u_3) \tan^2 \rho} \right] \quad (2.5)$$

où $u_1 = m_N(m_D - m_H)$, $u_2 = m_N(2m_H - m_D)$, et $u_3 = \frac{3}{2} m_N(3m_D - m_N)$. Les variations de cette fonction sont données à la Figure. 2.3. Avec le choix PAM, seules cinq composantes de

l'inverse du tenseur d'inertie généralisé μ seront non nulles. Ce sont μ_{xx} , μ_{yy} , μ_{zz} , $\mu_{y\rho}$ et $\mu_{\rho\rho}$. La Figure 2.4 donne les variations des quatre premières composantes.

Choix IAM :

Le choix IAM de $\theta(\rho)$ permet d'avoir une composante $I_{y\rho}$, identiquement nulle.

Comme le montre l'Eq. (1.16), le moment angulaire vibrationnel généré par le mouvement de grande amplitude d'inversion est alors nul. La forme analytique de la fonction $\theta(\rho)$ s'obtient en résolvant l'équation différentielle donnée à l'Eq. (5) de Danielis *et al.* [23]. La

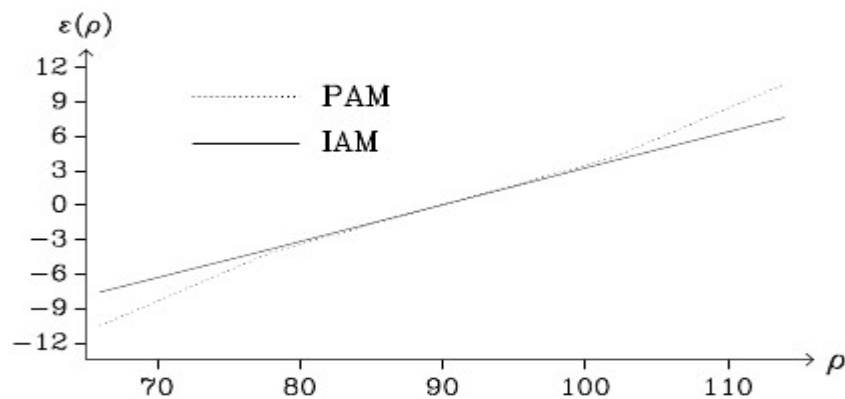


Figure 2.3 : Les variations de la fonction $\theta(\rho)$ pour les choix PAM et IAM, explicités au Paragraphe 2.1.2, dans le cas de SbH2D. La fonction $\theta(\rho)$ et l'angle ρ sont en degrés. On pourra remarquer que l'on a $\theta(\pi - \rho) = -\theta(\rho)$ pour les deux choix. fonction $\theta(\rho)$ est alors donnée par :

$$\theta(\rho) = \frac{u_1}{\sqrt{u_2(u_2+u_3)}} * (\text{arc tan}[\sqrt{\frac{u_2+u_3}{u_2}} \tan\rho] - \frac{\pi}{2}) \quad (2.6)$$

où u_1, u_2 et u_3 ont été définis pour l'Eq(2.5). Les variations de cette fonction sont données à la Figure 2.3. Avec le choix IAM, seules cinq composantes de l'inverse du tenseur d'inertie généralisé μ seront non nulles. Ce sont $\mu_{xx}, \mu_{yy}, \mu_{zz}, \mu_{xz}$ et $\mu_{\rho\rho}$. La Figure 2.5 donne les variations des quatre premières composantes.

2.1.3 Niveaux d'énergie d'inversion :

Hamiltonien d'inversion :

Toutes les variétés isotopiques de l'ammoniac possèdent deux configurations d'équilibre isoénergétiques comme celles représentée en Figure 2.6 dans le cas de SbH₂D. Chaque configuration d'équilibre correspond à un des minima de la fonction énergie potentielle $V(\rho)$ qui est tracée en fonction de la coordonnée d'inversion à la Figure 2.7. Le premier minimum s'obtient pour $\rho = \rho_e = 112^\circ$; le deuxième pour $\rho = \pi - \rho_e = 68^\circ$.

Les résultats du Chapitre 1 et le modèle ci-dessus permettent d'écrire le hamiltonien

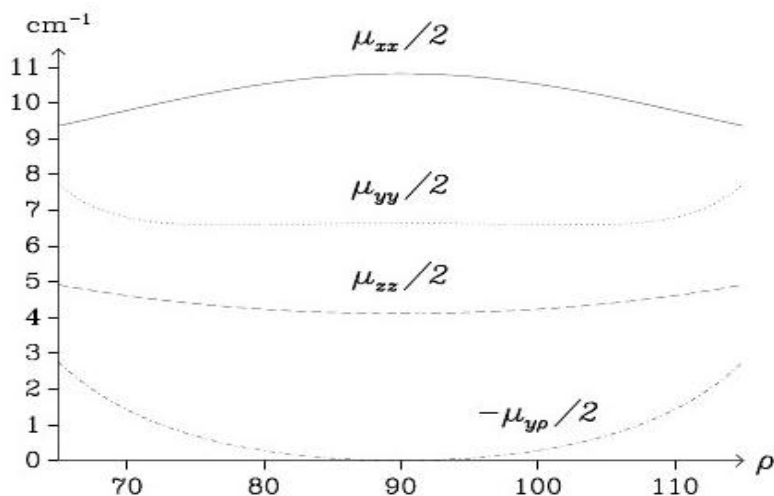


Figure 2.4 : Les variations des quatre composantes μ_{xx} , μ_{yy} , μ_{zz} μ_{xz} et $\mu_{y\rho}$ de l'inverse du tenseur d'inertie tenseur d'inertie généralisé μ en fonction de l'angle ρ en degrés pour le choix **PAM**.

quantique H_i représentant l'inversion seule. Celui-ci sera obtenu à partir de l'Eq. (1.21) en ignorant les termes en J_x , J_y ou J_z :

$$H = \frac{1}{2i} |\mu|^{\frac{1}{4}} P_\rho |\mu|^{\frac{-1}{2}} \mu_{\rho\rho} P_\rho |\mu|^{\frac{1}{4}} + V(\rho) \tag{2.7}$$

où $P_\rho = -i \frac{\partial}{\partial \rho}$ est le moment conjugué à la coordonnée ρ , $|\mu|$ est le déterminant de l'inverse du tenseur d'inertie généralisé, $\mu_{\rho\rho}$ est la composante diagonale de ce tenseur correspondant à la coordonnée ρ et $V(\rho)$ est l'énergie potentielle. Le calcul numérique des valeurs de $\mu_{\rho\rho}$ et $|\mu|$ s'effectue facilement avec le présent modèle. Il faut souligner qu'elles sont indépendantes du choix du repère lié à la molécule. En particulier, elles seront identiques pour les choix **PAM** et **IAM**. La **Figure 2.8** donne les variations de $\mu_{\rho\rho}$ et $|\mu|$ en fonction de ρ . Ces deux grandeurs varient lentement avec ρ . et on peut donc les remplacer par leur valeur pour

$\rho = \rho_e$ Ceci nous permet d'obtenir un hamiltonien quantique d'inversion simplifié :

$$H'_i = \frac{1}{2} \mu_{\rho\rho}^e P^2_\rho + V(\rho) \tag{2.8}$$

$\frac{1}{2} \mu_{\rho\rho}^e$ est la valeur de la composante $\frac{1}{2} \mu_{\rho\rho}$ pour $\rho = \rho_e$ et vaut 5.3 cm^{-1} pour **SbH₂D** et

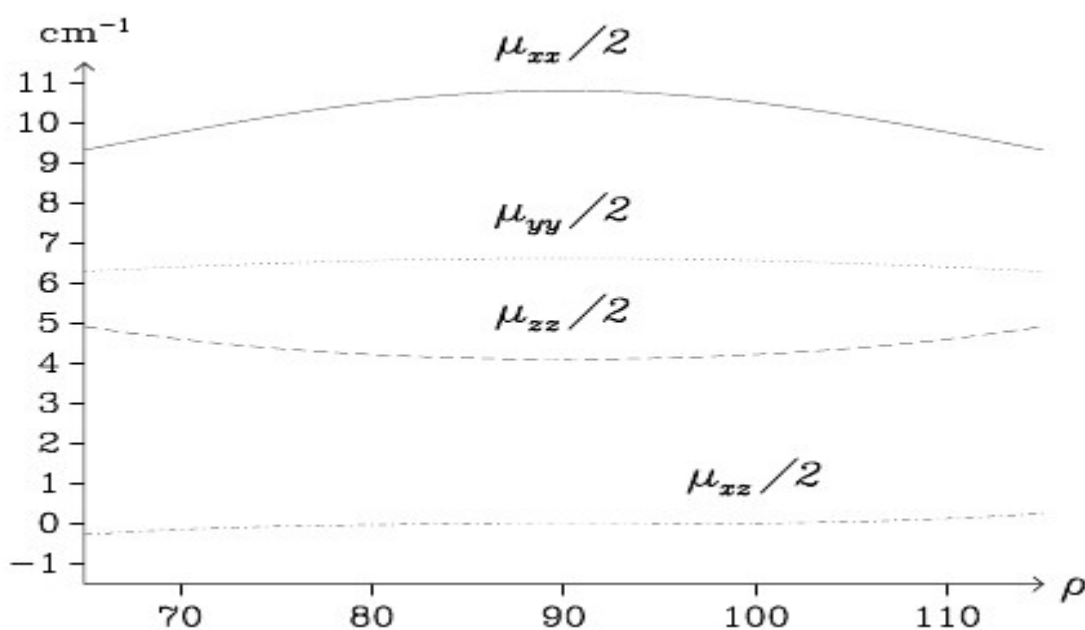


Figure 2.5 : Les variations des quatre composante μ_{xx} , μ_{yy} , μ_{zz} , μ_{xz} et μ_{xz} de l'inverse du tenseur d'inertie généralisé μ en fonction de l'angle ρ en degrés pour le choix IAM.

4.4 cm^{-1} pour **SbD₂H**.

Sous-niveaux et fonctions d’onde d’inversion :

L’agencement des sous-niveaux d’inversion et la forme des fonctions d’onde correspondantes a déjà fait l’objet de nombreux travaux. Nous nous contenterons ici de rappeler les principaux résultats.

Le passage d’une configuration d’équilibre à l’autre en franchissant par effet tunnel la barrière de potentiel de l’ordre de **2000 cm⁻¹** donne lieu à un dédoublement des niveaux d’énergie vibrationnelle de la molécule. Dans le cas de la variété normale, celui-ci vaut **0.8 cm⁻¹** pour l’état vibrationnel de base. Les sous-niveaux tunnel inférieur et supérieur seront respectivement notés **s** et **a**. Les fonctions propres correspondante, $\Psi_s(\rho)$ et $\Psi_a(\rho)$, sont les fonctions propres du hamiltonien de l’Eq. (2.7) avec les valeurs propres **E_s** et **E_a** respectivement. Ces fonctions propres peuvent être approximées par des combinaisons linéaires des fonctions d’onde vibrationnelles localisées $\Psi_1(\rho)$ et $\Psi_2(\rho)$, centrées autour de $\rho = \rho_e$ et $\rho = \pi - \rho_e$, respectivement, et satisfaisant $\Psi_2(\rho) = \Psi_1(\pi - \rho)$ Avec cette

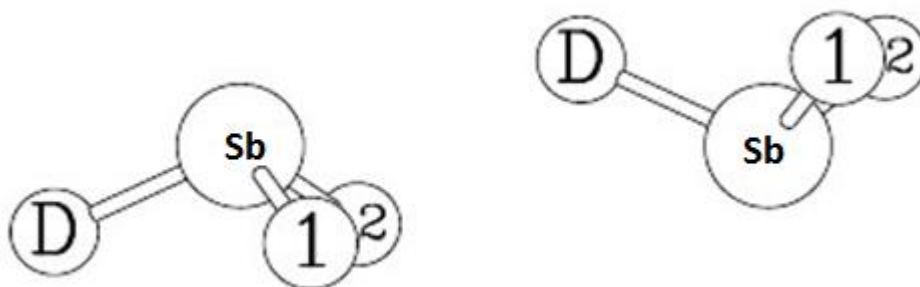


Figure 2.6 : Les deux configurations d’équilibre isoénergétiques de l’ammoniac illustrées dans le cas de SbH₂D. Les chiffres **1** et **2** indiquent les deux atomes d’hydrogène. Dans le cas de SbD₂H, **1** et **2** remplace les atomes deutérium **D₁** et **D₂** et **D** remplace l’atome d’hydrogène **H**.

approximation, on a :

$$\begin{cases} \Psi_s(\rho) = \frac{[\Psi_1(\rho) + \Psi_2(\rho)]}{\sqrt{2}} \\ \Psi_a(\rho) = \frac{[\Psi_1(\rho) - \Psi_2(\rho)]}{\sqrt{2}} \end{cases} \tag{2.9}$$

La Figure 2.9 illustre les variations obtenues alors pour les fonctions d'onde $\Psi_s(\rho)$ et $\Psi_a(\rho)$ en fonction de ρ . On peut voir que $\Psi_a(\rho)$ est une fonction symétrique satisfaisant

$\Psi_s(\pi - \rho) = +\Psi_s(\rho)$, tandis que $\Psi_a(\rho)$ est une fonction antisymétrique satisfaisant $\Psi_a(\pi - \rho) = -\Psi_a(\rho)$.

2.1.4 Niveaux d'énergie de rotation-inversion :

Afin de calculer les niveaux d'énergies de rotation-inversion, on ne résout pas l'équation de Schrödinger en traitant simultanément l'inversion et la rotation. Il est plus simple de mettre à profil le fait que les sous-niveaux s et a de l'état vibrationnel de base sont isolés pour construire un hamiltonien effectif qui sera utilisé pour l'analyse des spectre. Pour ce faire, on n'utilise pas le choix **PAM**, car il ne permet pas de minimiser les couplages rotation-inversion. Comme le montre l'Eq. (1.20), ceci est dû au fait que le hamiltonien présenterait alors un terme en $\{u_{y\rho}, P_\rho\}J_y$. On préfère calculer les niveaux d'énergie de rotation inversion en faisant le choix **IAM** [24, 25] à l'instar des investigateurs des spectres des variétés partiellement deutérées de l'ammoniac **SbH₂D**.

Hamiltonien effectif de rotation-inversion :

Le hamiltonien de rotation-inversion H_{ri} est obtenu en ajoutant au hamiltonien d'inversion H_i le hamiltonien rotationne H_r . Ce dernier se déduit du hamiltonien quantique

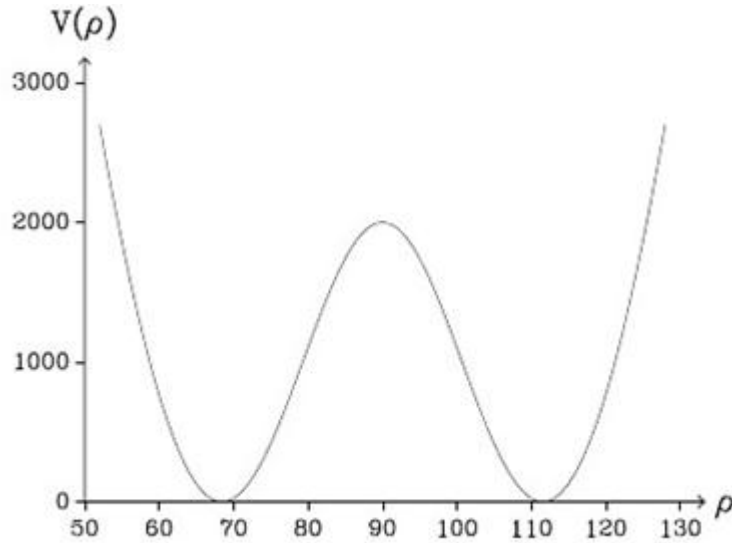


Figure 2.7 : Tracé de la fonction énergie potentielle, en cm^{-1} , en fonction de la coordonnée d'inversion ρ en degrés. On peut voir les deux minima de la fonction à $\rho = 68$ et $180 - 68 = 112^\circ$. La hauteur de la barrière de potentiel séparant les deux minima vaut 2000 cm^{-1} .

de l'Eq. (1.21) en ne retenant que les termes mettant en jeu les composantes du moment angulaire rotationnel dans le repère lié à la molécule. Compte tenu du fait que nous avons fait le choix **IAM** et que certaines composantes de l'inverse du tenseur d'inertie généralisé sont nulles, seuls quatre termes subsistent :

$$H_r = \frac{1}{2}(\mu_{xx} * J_x^2 + \mu_{yy} * J_y^2 + \mu_{zz} * J_z^2 + \mu_{xz} * \{J_x, J_z\}) \quad (2.10)$$

où les quatre composantes de l'inverse du tenseur d'inertie généralisé, $\mu_{xx}, \mu_{yy}, \mu_{zz}, \mu_{xz}$ dépendent de ρ , comme l'atteste la **Figure 2.5**. Comme le montre également cette figure, les trois premières composantes satisfont $\mu_{\alpha\alpha}(\pi - \rho) = +\mu_{\rho\rho}(\rho)$, avec $\alpha = x, y$ ou z , tandis que la dernière satisfait $\mu_{xz}(\pi - \rho) = -\mu_{xz}(\rho)$.

On construit le hamiltonien effectif rotationnel permettant d'obtenir l'énergie rotationnelle des niveaux s et a en utilisant la théorie des perturbations à l'ordre zéro et en calculant les éléments de matrice de H_{ri} entre les fonctions d'onde d'inversion $\Psi_s(\rho)$ et $\Psi_a(\rho)$.

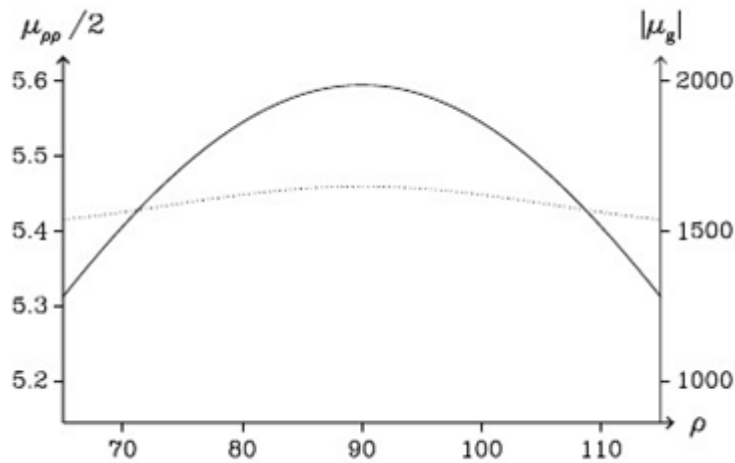


Figure 2.8 : La composante $\mu_{\rho\rho}$, en cm^{-1} échelle de gauche en traits pleins, et $|\mu_g|$ / le déterminant de l'inverse du tenseur d'energie généralisé, en cm^{-4} échelle de droite en traits pointillés, sont tracés en fonction de ρ en degrés.

L'opérateur rotationnel à considérer pour l'élément de matrice diagonal mettant en jeu la fonction de type s est le suivant :

$$H_r^s = E_s + X^s J_x^2 + Y^s J_y^2 + Z^s J_z^2 \quad (2.11)$$

avec

$$E_s = \langle \Psi_s | H_i | \Psi_s \rangle \quad (2.12)$$

Et

$$X^s = \frac{\langle \Psi_s | \mu_{xx} | \Psi_s \rangle}{2}, Y^s = \frac{\langle \Psi_s | \mu_{yy} | \Psi_s \rangle}{2}, Z^s = \frac{\langle \Psi_s | \mu_{zz} | \Psi_s \rangle}{2} \quad (2.13)$$

où E_s , introduit au Paragraphe 2.1.3, et X^s , Y^s et Z^s sont des constantes. L'opérateur rotationnel à considérer pour l'élément de matrice diagonal mettant en jeu la fonction de type a est :

$$H_r^a = E_a + X^a J_x^2 + Y^a J_y^2 + Z^a J_z^2 \quad (2.14)$$

avec

$$E_a = \langle \Psi_a | \mathbf{H}_i | \Psi_a \rangle \quad (2.15)$$

$$Et \quad X^a = \frac{\langle \Psi_a | \mu_{xx} | \Psi_a \rangle}{2}, Y^a = \frac{\langle \Psi_a | \mu_{yy} | \Psi_a \rangle}{2}, Z^a = \frac{\langle \Psi_a | \mu_{zz} | \Psi_a \rangle}{2} \quad (2.16)$$

où E_a , introduit au Paragraphe 2.1.3, et X^a, Y^a et Z^a sont des constantes. Enfin, l'opérateur

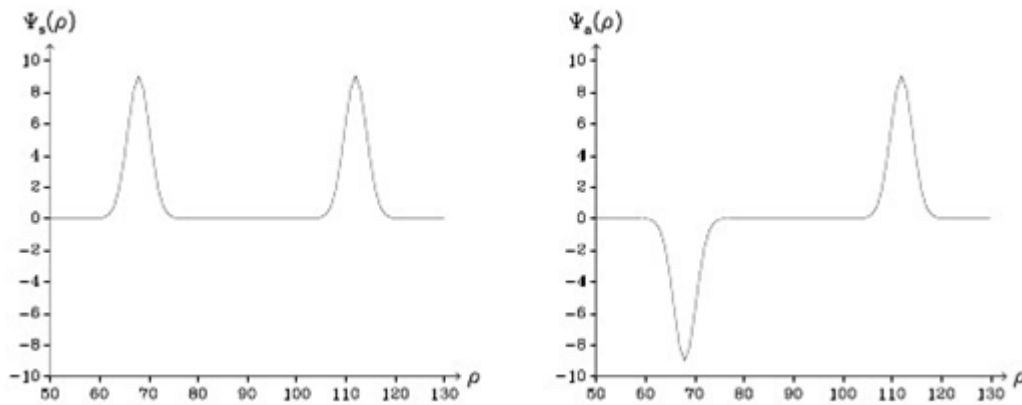


Figure 2.9 : Fonctions d'onde d'inversion $\Psi_s(\rho)$ et $\Psi_a(\rho)$ pour l'état vibrationnel de base. rotationnel à considérer pour l'élément de matrice non-diagonal entre les fonctions s et a est le suivant :

$$H_r^{sa} = F \{J_x, J_z\} \text{ avec } F = \frac{\langle \Psi_s | \mu_{xz} | \Psi_s \rangle}{2} \quad (2.17)$$

où F est une constante. Les résultats donnés aux Eqs. (2.11), (2.14) et (2.17) découlent directement des propriétés de symétrie des composantes de l'inverse du tenseur d'inertie généralisé et de celles des fonctions d'onde d'inversion $\Psi_s(\rho)$ et $\Psi_a(\rho)$. L'utilisation des Eqs. (2.9) permet d'effectuer une estimation des sept constantes introduites aux Eqs. (2.11), (2.14) et (2.17). Ceci conduit à :

$$\begin{cases} X^s = X^a = \frac{\mu_{xx}(\rho_e)}{2}, Y^s = Y^a = \frac{\mu_{yy}(\rho_e)}{2} \text{ et } Z^s = Z^a = \frac{\mu_{zz}(\rho_e)}{2} \\ F = \frac{\mu_{xz}(\rho_e)}{2} \end{cases} \quad (2.18)$$

Ces équations ont été établies en utilisant la même relation approximative que pour l'Eq. (2.8). L'utilisation du présent modèle [23] avec le choix IAM donne pour SbH₂D :

$$\begin{cases} X^s = X^a = 9.6 \text{ cm}^{-1}, Y^s = Y^a = 6.4 \text{ cm}^{-1} \text{ et } Z^s = Z^a = 4.7 \text{ cm}^{-1} \\ F = -0.18 \text{ cm}^{-1} \end{cases} \quad (2.19)$$

Dans le cas de **SbD2H**, on trouve :

$$\begin{cases} X^s = X^a = 5.3 \text{ cm}^{-1}, Y^s = Y^a = 7.4 \text{ cm}^{-1} \text{ et } Z^s = Z^a = 3.8 \text{ cm}^{-1} \\ F = 0.11 \text{ cm}^{-1} \end{cases} \quad (2.20)$$

Comme nous le verrons dans la suite, les valeurs numériques ci-dessus sont assez proches des valeurs expérimentales. Toutefois, les relations $X^s = X^a, Y^s = Y^a$ et $Z^s = Z^a$ ne sont pas satisfaites.

Énergies et fonctions d'onde rotationnelles :

Avant de traiter simultanément la rotation et l'inversion, on va s'intéresser aux valeurs propres et aux fonctions propres du hamiltonien rotationnel d'une toupie asymétrique comme celui apparaissant aux Eqs. (2.11) et (2.14) :

$$H_r = XJ_x^2 + J_y^2 Y + J_z^2 Z \quad (2.21)$$

où X, Y et Z sont trois constantes. Pour des toupies asymétriques, comme **SbH2D** ou **SbD2H**, ces constantes sont remplacées par les lettres A, B et C , avec la convention $A > B > C$, les axes correspondants étant notés a, b et c . La façon d'attacher les axes a, b et c aux axes x, y et z constitue ce que l'on appelle une représentation. Il existe six représentations qui sont données à la Table 2.1. Comme l'indiquent les Eqs. (2.19), dans le cas de **SbH2D**, il faut prendre $x = a, y = b$ et $z = c$. C'est donc la représentation III^f qui doit être utilisée. De la même façon, dans le cas de **SbD2H**, les Eqs. (2.20) montrent qu'il faut prendre $x = b, y = a$ et $z = c$ et utiliser donc la représentation III^l . Pour estimer le degré d'asymétrie d'une molécule, on introduit le paramètre sans dimension de Ray [26] :

$$k = \frac{2B-A-C}{A-C} \quad (2.22)$$

qui est compris entre -1 et $+1$. La valeur $k = -1$ correspond au rotateur symétrique allongé ($b = C$). La valeur $k = +1$ correspond à un rotateur symétrique aplati ($A = B$).

Les molécules **SbH2D** et **SbD2H**, ne sont décrites par aucun de ces cas limites puisqu'elles sont caractérisées par des valeurs de k valant respectivement -0.31 et -0.14 . Il n'existe pas de forme analytique pour les valeurs propres du hamiltonien H_r de l'Eq. (2.21). Pour obtenir les énergies rotationnelles, il faut diagonaliser cet hamiltonien dans la base des fonctions d'onde $|j, k, M\rangle$ qui sont fonctions propres du moment angulaire

Représentation	X Y Z	Représentation	X Y Z
I^r	$b \ c \ a$	I^l	$C \ b \ a$
II^r	$C \ a \ b$	II^l	$a \ c \ b$
III^r	$a \ b \ c$	III^l	$b \ a \ c$

Table 2.1 : Les six façons d'attacher les axes xyz du repère lié à la molécule aux axes a, b et c . Ces trois lettres désignent les axes correspondant aux constantes rotationnelles A, B et C .

Total J^2 , de sa projection J_z suivant l'axe Z du laboratoire et de sa projection J_z suivant l'axe Z du repère mobile. Ces fonctions d'onde satisfont à :

$$\begin{aligned} J^2|J, k, M\rangle &= J(J + 1)|J, k, M\rangle \\ J_z|J, k, M\rangle &= M|J, k, M\rangle \\ J_z|J, k, M\rangle &= k|J, k, M\rangle \end{aligned} \quad (2.23)$$

où J, M et k sont les nombres quantiques correspondant à ces trois opérateurs et satisfont à $-J \leq k, M \leq J$. L'expression de la fonction d'onde $|J, k, M\rangle$ dépend des conventions choisies. Dans le présent mémoire nous prenons les mêmes conventions que Bunker [17] et nous l'écrivons de la façon suivante :

$$|J, k, M\rangle = \left[\frac{(2J+1)}{8\pi^2} \right]^{1/2} * D_{kM}^{(J)}(\chi, \theta, \varphi) \quad (2.24)$$

où :

$$D_{kM}^{(J)}(\chi, \theta, \varphi) = e^{ik\chi} * d_{kM}^{(J)}(\theta) * e^{iM\varphi} \quad (2.25)$$

la fonction $d_{kM}^{(J)}(\theta)$ étant définie dans le livre d'Edmonds [27]. Le choix indiqué par les Eqs. (2.24) et (2.25) est compatible avec la relation suivante :

$$J_{\pm} |J, k, M\rangle = \sqrt{(2J+1) - k(k \mp 1)} * |J, k \mp 1, M\rangle \quad (2.26)$$

où $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$. Cette relation nous permet de calculer les éléments de matrice du hamiltonien H_r à l'Eq. (2.21) en le réécrivant comme suit :

$$H_r = [Z - \frac{1}{2}(X + Y)]J_z^2 + \frac{1}{2}(X + Y)J^2 + \frac{1}{4}(X - Y)(J_+^2 + J_-^2) \quad (2.27)$$

Dans le cas où la molécule est isolée, l'énergie de rotation ne dépend pas du nombre quantique M et, pour simplifier, nous utiliserons dans la suite la notation $|J, k\rangle$ au lieu de $|J, k, M\rangle$.

Afin de mettre sous forme de blocs la matrice du hamiltonien rotationnel, on utilise les combinaisons linéaires de fonctions $|J, k\rangle$ suivantes :

$$|J, k, \gamma\rangle = \begin{cases} \frac{(|J, k\rangle + \gamma |J, -k\rangle)}{\sqrt{2}} & \text{pour } K > 0 \\ |J, k = 0\rangle & \text{pour } K = 0 \end{cases} \quad (2.28)$$

où $K \geq 0$ et $\gamma = \pm 1$. Quand $K = 0$, seule la combinaison linéaire avec $\gamma = +1$ existe.

Pour distinguer les combinaisons linéaires ci-dessus, il est usuel de définir les quatre types suivants : E^+ , E^- , O^+ et O^- . La lettre E (O) indique que K est pair (impair), l'exposant $+$ ($-$), que γ vaut $+1$ (-1). Dans le cas où le hamiltonien rotationnel a la forme simple donnée à l'Eq. (2.21), ses éléments de matrice sont non nuls qu'entre les combinaisons linéaires de l'Eq. (2.28) appartenant au même type. Ce résultat est facile à démontrer si l'on tient compte du fait que le hamiltonien rotationnel n'a d'éléments de matrice non nuls

que si $\Delta K = 0, \pm 2$ et $\Delta \gamma = 0$. On peut écrire les fonctions propres du hamiltonien de rotation de la façon suivante :

$$\Psi_r^n = \sum_K a_{K\gamma}^n |J, k, \gamma\rangle \quad (2.29)$$

Où n est un nombre quantique variant de 0 à $2J$ et où $a_{K\gamma}^n$ sont les coefficients du développement sur les fonctions d'onde de base. Dans cette équation, suivant la valeur de n , la somme ne s'effectue que pour une parité donnée de K et une valeur donnée de γ afin que la fonction d'onde rotationnelle appartienne à un des types E^+ , E^- , O^+ ou O^- . Plutôt que d'utiliser le nombre quantique n pour identifier les niveaux de rotation, on préfère avoir recours aux pseudo-nombres quantiques de rotation K_a et K_c [28]. Bien que ces derniers ne soient pas de bons nombres quantiques, l'ensemble des trois nombres quantiques J , K_a et K_c avec :

$$0 \leq K_a \leq J, 0 \leq K_c \leq J, K_a + K_c = J \text{ ou } J + 1 \quad (2.30)$$

permet d'étiqueter de façon univoque les $2J + 1$ niveaux de rotation de H_r correspondant à une valeur donnée de J . En effet, on a $n = J + K_a - K_c$. On notera l'énergie et la fonction propre du niveau rotationnel J, K_a, K_c de la façon suivante :

$$E_r^{J, K_a, K_c} \text{ et } \Psi_r^{J, K_a, K_c} \quad (2.31)$$

Niveaux et fonctions d'onde de rotation-inversion :

Afin d'obtenir les niveaux et les fonctions d'onde de rotation-inversion, la matrice du hamiltonien effectif H_{ri} du Paragraphe 2.1.4 est écrite, en accord avec ce paragraphe, en prenant une base de fonctions d'onde mettant en jeu les deux fonctions d'onde d'inversion $\Psi_s(\rho)$ et $\Psi_a(\rho)$ et celles de rotation $|J, k\rangle$. On est amené à considérer la base orthonormée de fonctions d'onde suivante :

$$\Psi_{ri}^{J, k, r} = |\Psi_v\rangle |J, k\rangle \quad (2.32)$$

où $\nu = s$ ou a . Avec cette base, les éléments de matrice du hamiltonien H_{ri} s'écrivent :

$$\langle \Psi_{ri}^{J,k,r} | H_{ri} | \Psi_{ri}^{J,k',\nu'} \rangle \quad (2.33)$$

On est amené à distinguer deux types d'éléments de matrice. Ceux avec $\nu = \nu'$ qui, en utilisant les Eqs. (2.11) et (2.14), se mettent sous la forme :

$$\langle \Psi_{ri}^{J,k,r} | H_{ri} | \Psi_{ri}^{J,k',\nu} \rangle = \langle J, k | H_r^\nu | J, k' \rangle \quad (2.34)$$

$$= E_r \delta_{k,k'} + \langle J, k | X^r J_x^2 + y^r J_y^2 + Z^r J_z^2 | J, k' \rangle$$

où $\nu = s$ ou a . Ceux avec $\nu \neq \nu'$ qui, compte tenu de l'Eq. (2.17), s'écrivent :

$$\langle \Psi_{ri}^{J,k,s} | H_{ri} | \Psi_{ri}^{J,k',a} \rangle = \langle J, k | H_r^{sa} | J, k' \rangle = F \langle J, k | \{J_x, J_z\} | J, k' \rangle \quad (2.35)$$

Les Eqs. (2.34) et (2.35) nous permettent d'exprimer tous les éléments de matrice en fonctions des 9 constantes introduites au Paragraphe 2.1.4. Le calcul de la partie rotationnel de l'élément de matrice de l'Eq. (2.34) se fera en utilisant l'Eq. (2.27). De même, pour l'Eq. (2.35), on utilisera le fait que $\{J_x, J_z\} = \frac{J_+ + J_-}{2}$. Comme dans le cas du hamiltonien rotationnel du Paragraphe 2.1.4, la matrice du hamiltonien de rotation-inversion peut se mettre sous la forme de 4 blocs. Pour chacun des blocs, les fonctions de base à utiliser mettent en jeu les fonctions d'onde rotationnelles de type E^+ , E^- , O^+ et O^- . Plus précisément, pour chacun des blocs, les fonctions d'onde de rotation-inversion doivent être de la forme suivante:

$$\begin{aligned} & |\Psi_s\rangle * E^+ \text{ et } |\Psi_a\rangle * O^-, |\Psi_s\rangle * E^- \text{ et } |\Psi_a\rangle * O^+ \\ & |\Psi_s\rangle * O^+ \text{ et } |\Psi_a\rangle * E^-, |\Psi_s\rangle * O^- \text{ et } |\Psi_a\rangle * E^+ \end{aligned} \quad (2.36)$$

Dans le cas où la constante F est nulle, les Eqs. (2.34) et (2.35) montrent que l'on a deux jeux indépendants de niveaux rotationnels : un pour le sous-niveau s et l'autre pour le sous-niveau

a. Dans ce cas, ces niveaux peuvent être identifiés en utilisant les nombres quantiques rotationnels J, K_a, K_c introduit au Paragraphe 2.1.4, et le nombre ν qui vaut alors *s* ou *a*. En réalité, la constante F est non nulle, comme le montre les Eqs. (2.19) et (2.20) et l'analyse du spectre. Sa valeur est néanmoins petite par rapport à celles des constantes rotationnelles. Pour cette raison, utiliser les nombres quantiques ci-dessus demeure une très bonne approximation. Les niveaux de rotation-inversion seront donc notés :

$$J, K_a, K_c, \nu \tag{2.37}$$

Les fonctions d'onde de rotation-inversion, en accord avec l'Eq. (2.32), se mettent sous la forme :

$$|J, K_a, K_c, \nu\rangle = |\Psi_s\rangle * |\Psi_{r,s}^{J,K_a,K_c,\nu}\rangle + |\Psi_a\rangle * |\Psi_{r,a}^{J,K_a,K_c,\nu}\rangle \tag{2.38}$$

où $|\Psi_{r,s}^{J,K_a,K_c,\nu}\rangle$ et $|\Psi_{r,a}^{J,K_a,K_c,\nu}\rangle$ contiennent les parties rotationnelles de la fonction d'onde correspondant respectivement aux fonctions d'onde d'inversion *s* et *a*. La constante F étant petite et le mélange des fonctions d'onde entre les sous-niveaux *s* et *a* étant faible, la composante rotationnelle $|\Psi_{r,\nu}^{J,K_a,K_c,\nu}\rangle$ est la partie prédominante de la partie rotationnelle de la fonction d'onde à l'Eq. (2.38).

La Table 2.2 donne l'énergie des premiers niveaux de rotation-inversion de **SbH₂D** et **SbD₂H**. Ces énergies ont été calculées en prenant pour les constantes rotationnelles les valeurs données aux Eqs. (2.19) et (2.20). Les valeurs des dédoublements d'inversion, $E_a - E_s$, ont été prises égales aux valeurs présentées au Chapitre 3. Enfin E_s a été prise égale à zéro. On remarquera que l'énergie dépend principalement de **J et de K_a** . Deux niveaux caractérisés par les mêmes valeurs de ces deux nombres quantiques mais différentes valeurs de K_c ont des énergies différentes à cause du dédoublement d'asymétrie provenant du fait que $B \neq C$.

SbH₂D

	<i>S</i>		<i>A</i>	
$J K_a K_c$	<i>F</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>E</i>
0₀₀	A₁	0.000	B	0.385

1₀₁	A₂	11.094	B₂	11.476
1₁₁	B₁	14.300	A₁	14.683
1₁₀	B₂	16.007	A₂	16.389
2₀₂	A₁	32.760	B₁	33.141
2₁₂	B₂	34.780	A₂	35.162
2₁₁	B₁	39.902	A₁	40.281
2₂₁	A₂	49.520	B₂	49.902
2₂₀	A₁	50.042	B₁	50.423

SbD₂H

	S		A	
<i>J K_a K_c</i>	<i>Γ</i>	<i>E</i>	<i>Γ</i>	<i>E</i>
0₀₀	A₁	0.000	B₁	0.158
1₀₁	A₂	9.100	B₂	9.258
1₁₁	B₁	11.193	A₁	11.349
1₁₀	B₂	12.709	A₂	12.865
2₀₂	A₁	26.724	B₁	26.882
2₁₂	B₂	27.877	A₂	28.033
2₁₁	B₁	32.425	A₁	32.581
2₂₁	A₂	38.703	B₂	38.853
2₂₀	A₁	39.280	B₁	39.431

Table 2.2 : Représentation irréductible Γ et énergie en cm^{-1} des niveaux de rotation-inversion de **SbH₂D** et **SbD₂H** avec $J \leq 2$.

2.2 Propriétés de symétrie de SbD₂H

Comme l'a souligné Longuet-Higgins [29], dans le cas d'une molécule non-rigide, le groupe de symétrie à utiliser est différent de celui de sa configuration d'équilibre, qui est le groupe ponctuel. Les molécules non-rigides **SbH₂D** et **SbD₂H** ne font pas exception à cette règle. Ci-dessous, leur groupe de symétrie sera décrit, les effets des opérations de ce groupe sur les coordonnées de la molécule seront étudiés. Enfin, la symétrie des niveaux d'énergie de rotation-inversion sera obtenue. En accord avec Longuet-Higgins [29], le groupe à utiliser dans le cas présent est un groupe de permutation-inversion (**PI**) contenant quatre éléments :

$$E, (12), E^* \text{ et } (12)^* \tag{2.39}$$

où

– E est l'identité

– (12) représente la permutation des deux atomes identiques d'hydrogène dans le cas de

SbH₂D et de deutérium dans le cas de **SbD₂H**. On a $(12)R_1 = R_2$ et $(12)R_2 = R_1$ où R_1 et R_2 sont les vecteurs position des deux atomes identiques dans le repère lié au laboratoire. La permutation (12) n'affecte pas le vecteur position des autres atomes.

$C_{2v}(M)$	E	(12)	E^*	$(12)^*$	
A_1	1	1	1	1	T_x
A_2	1	1	-1	-1	R_x, T_δ
B_1	1	-1	-1	1	T_y, R_z
B_2	1	-1	1	-1	T_z, R_y

Table 2.3 : Table de caractères du groupe $C_{2v}(M)$ et représentations irréductibles auxquelles appartiennent les composantes d'opérateurs polaires T et axiaux R dans le repère lié à la molécule et dans celui lié au laboratoire. Dans ce dernier cas, les composantes sont indiquées par δ qui vaut X, Y ou Z .

– E^* est l'opération d'inversion qui consiste à changer le signe des vecteurs position de tous les atomes dans le repère lié au laboratoire. Si R_i représente le vecteur position d'un des atomes de la molécule dans ce repère, $E^*R_i = -R_i$ La table de multiplication du groupe de

symétrie est évidente. C'est un groupe commutatif isomorphe au groupe ponctuel C_{2v} . Dans la suite, en accord avec Bunker [17], on fera référence au groupe de permutation-inversion de **SbH₂D** et de **SbD₂H** en utilisant la notation $C_{2v}(\mathbf{M})$. Sa table de caractère est donnée à la **Table 2.3**.

Afin d'utiliser le groupe $C_{2v}(\mathbf{M})$, il nous reste à déterminer l'effet des quatre opérations de symétrie de l'Eq. (2.39) sur les coordonnées utilisées avec le présent modèle [23] : les trois angles d'Euler χ, θ, φ , la coordonnée d'inversion ρ et la position du centre de masse dans le repère du laboratoire $R_{O'}$. Soient $\chi', \theta', \varphi', \rho'$ et $R_{O'}$ les nouvelles valeurs de ces coordonnées après l'application de l'opération de symétrie S , elles sont obtenues en résolvant pour les quatre atomes l'équation suivante :

$$SR_i = R_{O'} + s^{-1}(\chi', \theta', \varphi') * a_i(\rho') \tag{2.40}$$

qui est écrite en utilisant la même notation que pour l'Eq. (1.6). Les résultats obtenus avec cette équation sont donnés à la **Table 2.4**.

coordonnées	E	(12)	E^*	(12)*
χ	χ	$2\pi - \chi$	$\chi + \pi$	$\pi - \chi$
θ	θ	$\pi - \theta$	θ	$\pi - \theta$
φ	φ	$\varphi + \theta$	φ	$\varphi + \pi$
ρ	ρ	$\pi - \rho$	$\pi - \rho$	ρ
$R_{O'}$	$R_{O'}$	$R_{O'}$	$-R_{O'}$	$-R_{O'}$

Table 2.4 : Transformations des angles d'Euler χ, θ, φ , de la coordonnée d'inversion ρ et du vecteur position du centre de masse $R_{O'}$, sous l'effet des quatre opérations de symétrie du groupe $C_{2v}(\mathbf{M})$.

En ce qui concerne les angles d'Euler, on peut remarquer qu'il existe trois transformations qui sont :

$$(\chi, \theta \text{ et } \varphi) \rightarrow \begin{cases} (\pi - \chi, \pi - \theta, \varphi + \pi) \\ (\pi - \chi, \pi - \theta, \varphi + \pi) \\ (\chi + \pi, \theta, \varphi) \end{cases} \quad (2.41)$$

En accord avec Bunker [17], ces transformations seront notées $C_x(\pi)$, $C_y(\pi)$ et $C_z(\pi)$, respectivement. En combinant les **Tables 2.3 et 2.4**, il est possible de déterminer la représentation irréductible à laquelle appartiennent certaines des grandeurs utilisées jusqu'à présent. On peut montrer que les fonctions d'onde d'inversion $\Psi_s(\rho)$ et $\Psi_a(\rho)$ du Paragraphe **2.1.3** appartiennent aux représentations irréductibles A_1 et B_1 de $C_{2v}(\mathbf{M})$, respectivement. Compte tenu du fait que les transformations des angles d'Euler modifient les fonctions d'onde

Fonctions	Γ	
	J pair	J impair
E^+	A_1	B_2
E^-	B_2	A_1
O^+	A_2	B_1
O^-	B_1	A_2

Table 2.5 : Représentation irréductible Γ à laquelle appartiennent les combinaisons linéaire de fonctions d'onde rotationnelles de l'Eq. (2.28).

rotationnelles $|J, k, M\rangle$ de la façon suivante :

$$\begin{cases} C_x(\pi) = |J, k, M\rangle = (-1)^J |J, -k, M\rangle \\ C_y(\pi) = |J, k, M\rangle = (-1)^{J-k} |J, -k, M\rangle \\ C_z(\pi) = |J, k, M\rangle = (-1)^k |J, +k, M\rangle \end{cases} \quad (2.42)$$

il est possible de connaître la représentation irréductible à laquelle appartiennent les combinaisons linéaires de fonctions d'onde rotationnelles de l'Eq. (2.28). Ce résultat est donné à la Table 2.5 et il a permis d'obtenir les représentations irréductibles des niveaux de rotation-inversion données à la Table 2.2.

2.3 Règles de sélection :

On considère une transition reliant les niveaux de rotation-inversion inférieur **A** et supérieur **B** caractérisés, en accord avec l'Eq. (2.37), par les fonctions d'onde suivantes :

$$\Psi_B = |J', K'_a, K'_c, \nu'\rangle$$

$$\Psi_A = |J'', K''_a, K''_c, \nu''\rangle \quad (2.43)$$

Dans cette équation, comme on le fait usuellement, les signes 'et '' indiquent respectivement les nombres quantiques des états supérieur et inférieur. L'intensité de la transition dipolaire électrique $B \leftarrow A$ est proportionnelle au carré de l'élément de matrice :

$$M_A^B = \langle J', K'_a, K'_c, \nu' | \mu_z | J'', K''_a, K''_c, \nu'' \rangle \quad (2.44)$$

où μ_z est la composante du moment dipolaire selon l'axe **Z** du repère du laboratoire. Il s'exprime en fonction des composantes du moment dipolaire dans le repère mobile μ_x , μ_y et μ_z de la façon suivante :

$$\mu_z = \varphi_{z,x}\mu_x + \varphi_{z,y}\mu_y + \varphi_{z,z}\mu_z \quad (2.45)$$

où $\varphi_{z,x}$, $\varphi_{z,y}$, $\varphi_{z,z}$ sont les cosinus directeurs des angles entre les axes **Z** et **x**, **y** et **z**, respectivement. Ils sont donnés par la dernière ligne de la matrice de l'Eq. (1.5). Une transition sera permise si l'élément de matrice de l'Eq. (2.44) est non nul.

2.3.1 Règles de sélection avec le groupe de symétrie :

Conformément à la théorie des groupes, l'élément de matrice de l'Eq. (2.44) est non nul si le produit de la symétrie des trois termes de cette équation contient la représentation irréductible complètement symétrique du groupe $C_{2v}(\mathbf{M})$. Ce qui se traduit par :

$$\Gamma(|J', K'_a, K'_c, v'\rangle) \otimes \Gamma(\mu_z) \otimes (|J'', K''_a, K''_c, v''\rangle) \supset A_1 \quad (2.46)$$

Cette équation se simplifie notablement en raison du fait que $C_{2v}(\mathbf{M})$ est un groupe commutatif ne contenant que des représentations irréductibles non-dégénérées. En tenant également compte du fait que μ_z , en tant que composante d'un vecteur polaire dans le repère du laboratoire, appartient à la représentation irréductible A_2 , on obtient :

$$\Gamma(|J', K'_a, K'_c, v'\rangle) \otimes \Gamma(\mu_z) \otimes (|J'', K''_a, K''_c, v''\rangle) = A_2, \quad (2.47)$$

Ce résultat impose la restriction suivante sur la symétrie des niveaux reliés par une transition.

Il faudra que l'on ait :

$$A_1 \leftrightarrow A_2 \text{ et } B_1 \leftrightarrow B_2 \quad (2.48)$$

Ce résultat obtenu par la théorie des groupes est très important. Néanmoins, il ne permet pas de connaître les restrictions supplémentaires imposées par les valeurs des nombres quantiques vibrationnels et rotationnels.

2.3.2 Règles de sélection de rotation-inversion :

Afin d'obtenir les règles de sélection de rotation-inversion, on part de l'expression de la composante Z du moment dipolaire, donnée à l'Eq. (2.45). Dans cette équation, en raison de la symétrie de la molécule et du modèle choisi [23], la composante $\mu_x(\rho)$ est une fonction symétrique, appartenant à la représentation irréductible A_1 , satisfaisant $\mu_x(\pi - \rho) = +\mu_x(\rho)$. La composante $\mu_z(\rho)$ est une fonction antisymétrique, appartenant à la représentation irréductible B_1 , satisfaisant $\mu_z(\pi - \rho) = -\mu_z(\rho)$. Enfin, la composante $\mu_y(\rho)$ est nulle.

On est amené à considérer deux types de transitions. Pour celles mettant en jeu la composante μ_z , l'élément de matrice de l'Eq. (2.44) se met sous la forme suivante, compte tenu de la forme de la fonction d'onde données à l'Eq. (2.38) :

$$M_A^B = \langle \Psi_a | \mu_z | \Psi_s \rangle * \langle \Psi_{r,s}^{J', K'_a, K'_c, v'} | \varphi_{z,z} | \Psi_{r,a}^{J'', K''_a, K''_c, v''} \rangle + \langle \Psi_{r,a}^{J', K'_a, K'_c, v'} | \varphi_{z,z} | \Psi_{r,s}^{J'', K''_a, K''_c, v''} \rangle \quad (2.49)$$

Comme souligné pour l'Eq. (2.38), cet élément de matrice est approximé en ne gardant que la partie prépondérante de la fonction d'onde rotationnelle, ce qui donne :

$$M_A^B = \langle \Psi_{v'} | \mu_z | \Psi_{v''} \rangle * \langle \Psi_{r,v'}^{J', K'_a, K'_c, v'} | \varphi_{z,z} | \Psi_{r,v''}^{J'', K''_a, K''_c, v''} \rangle \quad (2.50)$$

On peut montrer, compte tenu des propriétés mathématiques des fonctions d'onde rotationnelles, que cette équation est non nulle si :

$$\{v', v'' = s, a \quad \text{ou } a, s$$

$$\left\{ \begin{array}{l} v', v'' = s, a \quad \text{ou } a, s \\ \Delta J = J' - J'' = 0, \pm 1 \\ \Delta K_a = K'_a - K''_a = \pm 1, \pm 3 \dots \\ \Delta K_c = K'_c - K''_c = 0, \pm 2 \dots \end{array} \right. \quad (2.51)$$

Pour les deux variétés isotopiques **SbH₂D** et **SbD₂H**, ces transitions sont dites de type **c** [30], car elles mettent en jeu la composante du moment dipolaire suivant l'axe $z = c$.

Pour les transitions mettant en jeu la composante μ_x , l'élément de matrice de l'Eq. (2.44) se met sous une forme analogue à celle de l'Eq. (2.49) :

$$M_A^B = \langle \Psi_s | \mu_x | \Psi_s \rangle * \langle \Psi_{r,s}^{J', K'_a, K'_c, v'} | \varphi_{z,x} | \Psi_{r,s}^{J'', K''_a, K''_c, v''} \rangle + \langle \Psi_a | \mu_x | \Psi_a \rangle * \langle \Psi_{r,a}^{J', K'_a, K'_c, v'} | \varphi_{z,x} | \Psi_{r,a}^{J'', K''_a, K''_c, v''} \rangle \quad (2.52)$$

Comme dans la cas de l'Eq. (2.49), cet élément de matrice est approximé par :

$$M_A^B = \langle \Psi_{v'} | \mu_x | \Psi_{v''} \rangle * \langle \Psi_{r,v'}^{J', K'_a, K'_c} | \varphi_{z,x} | \Psi_{r,v''}^{J'', K''_a, K''_c} \rangle \quad (2.53)$$

On peut montrer de nouveau, compte tenu des propriétés mathématiques des fonctions D'onde rotationnelles, que cette équation est non nulle pour **SbH₂D** si :

$$\left\{ \begin{array}{l} v', v'' = s \quad \text{ou} \quad a \\ \Delta J = J' - J'' = 0, \pm 1 \\ \Delta K_a = K'_a - K''_a = 0, \pm 2 \dots \\ \Delta K_c = K'_c - K''_c = \pm 1, \pm 3 \dots \end{array} \right. \quad (2.54)$$

Ces transitions sont dite de type *a* [30], car elles mettent en jeu la composante du moment Dipolaire suivant l'axe $x = a$. Dans le cas de la molécule **SbD₂H**, l'élément de matrice de l'Eq. (2.53) sera non nul si :

$$\left\{ \begin{array}{l} v', v'' = s \quad \text{ou} \quad a \\ \Delta J = J' - J'' = 0, \pm 1 \\ \Delta K_a = K'_a - K''_a = \pm 1, \pm 3 \dots \\ \Delta K_c = K'_c - K''_c = \pm 1, \pm 3 \dots \end{array} \right. \quad (2.55)$$

Ces transitions sont dites de type *b* [30], car elles mettent en jeu la composante du moment dipolaire suivant l'axe $x = b$. Pour les trois types de transitions, les transitions avec $\Delta J = J' - J'' = +1, 0$ ou -1 sont dites *R*, *Q* ou *P*. En utilisant la Table 2.2, on pourra remarquer que les règles de sélection données aux Eqs. (2.51), (2.54) et (2.55) sont compatibles avec celles données à l'Eq. (2.48), obtenues en utilisant des considérations de symétrie. A l'intérieur de l'état vibrationnel de base, les transitions de type *c* sont plus intenses que celles de type *a* pour **SbH₂D** et de type *b* pour **SbD₂H**. Pour $\rho = \rho_e$ les valeurs de μ_z et μ_x mesurées pour Cohen et Pickett [25] sont respectivement **1.465** et **-0.185** Debye pour **SbH₂D** et **1.482** et **0.211** Debye pour **SbD₂H**.

2.4 Hamiltonien utilisé pour l'analyse :

Les hamiltoniens rotationnels donnés aux Eqs. (2.11) et (2.14) ne suffisent par pour rendre compte des niveaux d'énergies de rotation-inversion des variétés isotopiques de l'ammoniac **SbH₂D** et **SbD₂H**. Il faut pour cela prendre en compte les effets de la distorsion centrifuge. Ces effets seront pris en compte en réécrivant les hamiltoniens des Eqs. (2.11) et (2.14) comme un développement polynômial suivant les puissances des composantes du moment angulaire rotationnel. Un tel hamiltonien, dit Hamiltonien de Watson, sera écrit en prenant la réduction de type *S*, introduite par Watson [31–33], jusqu'au troisième ordre.

Le hamiltonien rotationnel modifié prend la forme :

$$\begin{aligned}
 H_r^v = & E_v + X^v J_x^2 + y^v J_y^2 + Z^v J_z^2 - D_J^v J^4 - D_{KJ}^v J^2 J_z^2 - D_K^v J_z^4 + d_1^v J^2 (J_+^2 + J_-^2) + \\
 & d_2^v J^2 (J_+^4 + J_-^4) + H_J^v J^6 + H_{J,K}^v J^4 d_z^2 + H_{J,K}^v J^2 d_z^4 + H_J^v J_z^6 + h_1^v d^4 (J_+^2 + J_-^2) + h_2^v \\
 & J^2 (J_+^4 + J_-^4) + h_3^v (J_+^6 + J_-^6) + L_J^v J^8 + L_{JJJK}^v J^6 J_z^2 + L_{JJKK}^v J^4 J_z^4 + L_{JKKK}^v J^2 J_z^6 + J_K^v J_z^8 + l_1^v J^6 (J_+^2 + J_-^2) + l_2^v \\
 & J^4 (J_+^4 + J_-^4) + l_3^v J^2 (J_+^6 + J_-^6) + l_4^v (J_+^8 + J_-^8)
 \end{aligned} \tag{2.56}$$

où $v = s$ ou a et $D_J^v, D_{J,K}^v, \dots, l_4^v$ sont des constantes dites de distorsion et les opérateurs J_{\pm} ont été définis à l'Eq. (2.26). Les effets de la distorsion centrifuge nous amènent également à modifier le terme de couplage de Coriolis entre les sous niveaux s et a donné à l'Eq. (2.17). La forme adoptée est également un développement de type polynômial :

$$\begin{aligned}
 H_r^{sa} = & F \{J_x, J_z\} + F_J J^2 \{J_x, J_z\} + F_k \{J_z^2, \{J_x, J_z\}\} + F_{JJ} J^4 \{J_x, J_z\} + F_{KJ} J^2 \{J_z^2, \{J_x, J_z\}\} + \\
 & F_{KK} \{J_z^4, \{J_x, J_z\}\}
 \end{aligned} \tag{2.57}$$

Où F_k, F_J, F_{KK}, F_{KJ} , et F_{JJ} sont également des constantes de distorsion.

1. aspect expérimental

Les bandes spectrales de la molécule SbHD₂ ont été étudiées dans les spectres infrarouges à haute résolution de ¹²³SbD₃ mono-isotopique [2,8] et de SbD₃ naturel [3] enregistré à Wuppertal à l'aide d'un interféromètre Bruker 120HR. Ces spectres ont été précédemment explorés dans les régions de rotation pure et des fondamentaux [2, 3] et des bandes harmoniques d'élongation Sb-D [8]. Grâce à une concertation de ca. 2% de H dans LiAlD₄ employé pour la synthèse de SbD₃ [2], ceci était 'contaminé' par environ 6% de l'isotopologue SbHD₂.

Les détails expérimentaux des trois spectres I, II et III utilisés dans l'étude de SbHD₂ ont été reportées dans les références [2, 3,8] et sont donc rappelés brièvement dans ce qui suit. Spectre I: échantillon ¹²³SbD₃, 1780-2380 cm⁻¹, détecteur InSb, séparateur de faisceau CaF₂, résolution (1 / différence de chemin optique maximum) 2,4× 10⁻³ cm⁻¹, parcours optique 1,2 m, 200 Pa, - 9 °C.

Spectre II: ¹²³SbD₃, 3600-3850 cm⁻¹, détecteur InSb, CaF₂ répartiteur de faisceau, résolution 4,5× 10⁻³ cm⁻¹, parcours optique 1,2 m, 460 Pa, -9 °C.

Spectre III: SbD₃ naturel, 1750-2000 cm⁻¹, détecteur MCT, KBr répartiteur de faisceau, résolution 2,8×10⁻³ cm⁻¹, parcours optique 0,28 m, 400 Pa, température ambiante.

La précision pour le nombre d'onde des spectres I et III est d'environ 0,2×10⁻³ cm⁻¹, du spectre II est d'environ 1×10⁻³ cm⁻¹. La **précision** pour le nombre d'onde des spectres I et III est d'environ 0,5×10⁻³ cm⁻¹ [22], Celle du spectre II ca. 1×10⁻³ cm⁻¹ [23]. Alors que le spectre I était Calibré avec des raies de CO₂ [22, 24] situé à environ 500 cm⁻¹ au-dela du centre de bande d'élongation Sb-H, le spectre III a été comparé aux raies de H₂O [22,24] situées à environ 500 cm⁻¹ au-dela du centre Sb-H. Par conséquent, les nombres d'ondes des raies identiques appartenant à ¹²³SbHD₂ peuvent différer dans les spectres I et III de plu de 1×10⁻³ cm⁻¹.

Cette divergence peut se produire à cause d'effets non linéaires liés à l'étalonnage du nombre d'onde et à une incompatibilité mineure des échelles des nombres d'ondes par rapport à l'étalonnage standards.

2. Description des spectres

2.1. La bande ν_1 de $^{123}\text{SbHD}_2$

Dans le spectre I, la bande fondamentale isolée ν_1 s'étend de 1800 à 2020 cm^{-1} . Comme la stibine partiellement deutérée appartient au groupe de symétrie C_3 et l'état $\nu_1=1$ est totalement symétrique, la bande hybride observée est composée de transitions de type B et de type C. La bande doit l'importance de sa forme à la forte transition C-type. Ceci est semblable à celui d'une bande parallèle d'une toupie symétrique, qui est en corrélation avec une bande de type C d'un rotateur asymétrique lorsque le paramètre d'asymétrie $\kappa = \frac{(2B-A-C)}{(A-C)}$ s'approche de 1 à la limite oblate. Pour SbHD_2 , κ est bien 0.61, par conséquent la composante C de ν_1 est importante et donc facilement attribuée.

Des branches Q fortes et superposées sont observées entre l'origine de bande à 1893,0 cm^{-1} et 1888,0 cm^{-1} , alors que certaines faibles transitions Q s'étendent vers des nombres d'onde élevés à partir de l'origine de bande jusqu'à environ 1895,0 cm^{-1} . Les fortes branches P et R apparaissent à des nombres d'ondes faibles et élevés à partir de l'origine, respectivement, et se reproduisent partout dans le spectre en tant que groupes de transitions avec le même ΔJ . Les groupes adjacents sont bien séparés pour J' allant jusqu'à 13 et 17, respectivement dans les branches P et R. Dans chaque groupe, le fractionnement de l'asymétrie des transitions avec le même K_c , observé pour K_c allant jusqu'à 9, est clairement apparente et devient un guide utile pour l'attribution. Les formes détaillées des branches P et R sont représentées dans les Fig. 1 et 2, respectivement. Aucune perturbation rovibrationnelle n'est indiquée par les positions et intensités relatives des raies.

Les transitions de type B sont beaucoup plus faibles que celles de la composante C et sont évidentes dans les deux Fig. 1 et 2, où leurs raies d'absorption sont repérées par des points. Le rapport d'intensité des composantes B et C de la bande hybride est approximativement estimé entre 1/15 et 1/20. L'attribution des transitions de type B sont guidées par des prédictions basées sur l'analyse de la bande de type C.

Dans la plage spectrale étudiée, un certain nombre de faibles raies demeuraient non attribuées. Ces raies pourraient appartenir à la combinaison, harmonique, ou les bandes chaudes de $^{123}\text{SbHD}_2$ ou peut être due à $^{123}\text{SbH}_2\text{D}$.

2.2. La bande $2\nu_1$ de $^{123}\text{SbHD}_2$

La première bande harmonique d'élongation s'étend de 3640 à 3790 cm^{-1} . Elle apparaît comme une bande faible et isolée superposée par des raies d'absorption intenses de H_2O . Les transitions $2\nu_1$ libres de ce recouvrement sont nettement apparents à cause du bon rapport signal/bruit de spectre. La forme globale de la bande est très semblable à celle de ν_1 , mais seule la composante C a pu être observée. Le fractionnement d'asymétrie est résolu pour K_c jusqu'à 8. Contrairement à la bande fondamentale, de très fortes perturbations localisées sont mises en évidence par des espacements anormaux des raies pour $K_c \geq 8$. Ces irrégularités.

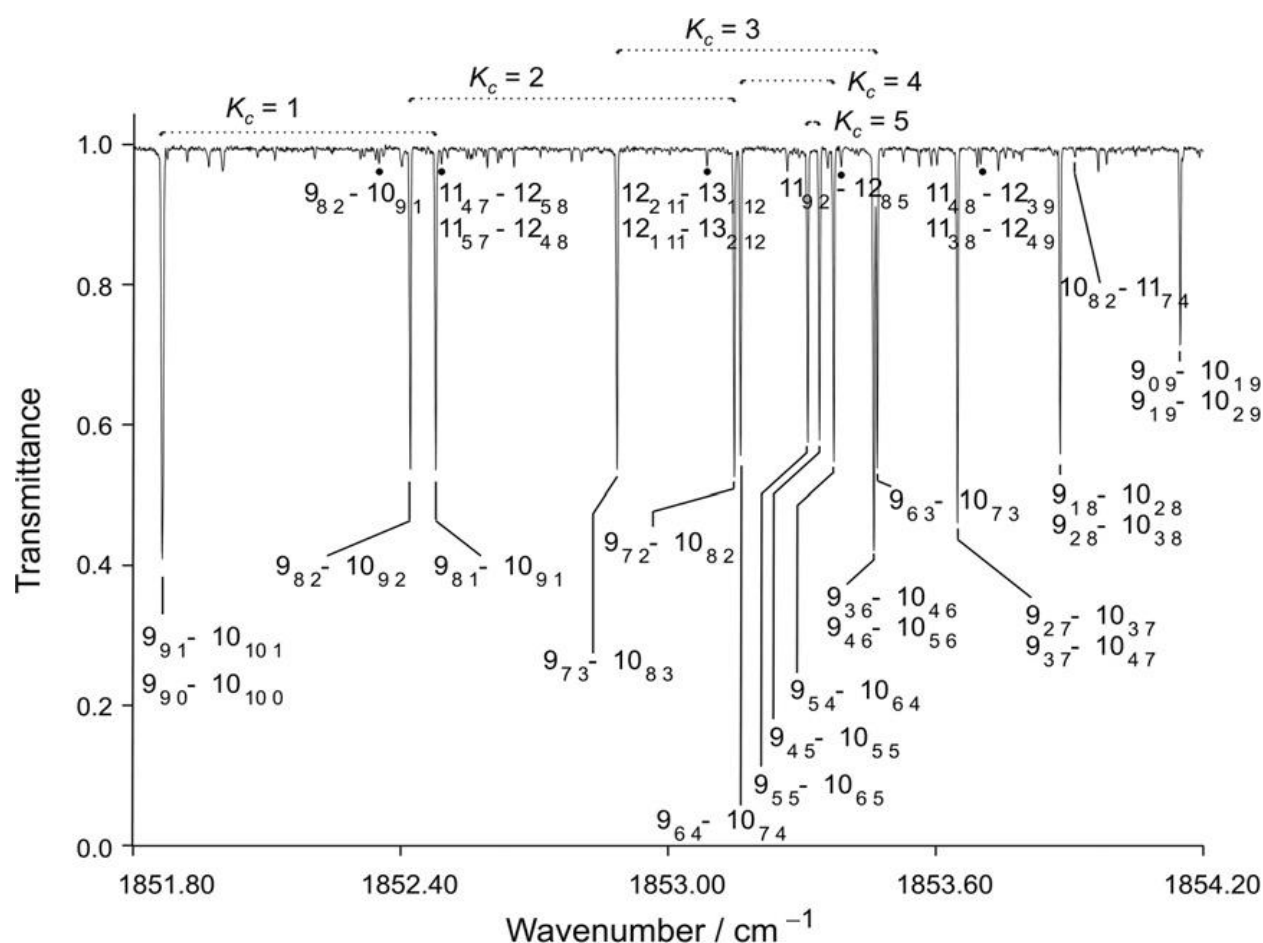


Figure. 1. Les fortes transitions de type C dans la sous-branche P (10) de ν_1 de $^{123}\text{SbHD}_2$. La transition faible à 1853.92 cm^{-1} suit les règles de sélection $\Delta J = -1$; $\Delta K_a = +1$; $\Delta K_c = -2$. Les transitions faibles de type B sont mises en évidence par des points pleins. Les écarts d'asymétrie sont observés pour K_c jusqu'à 5.

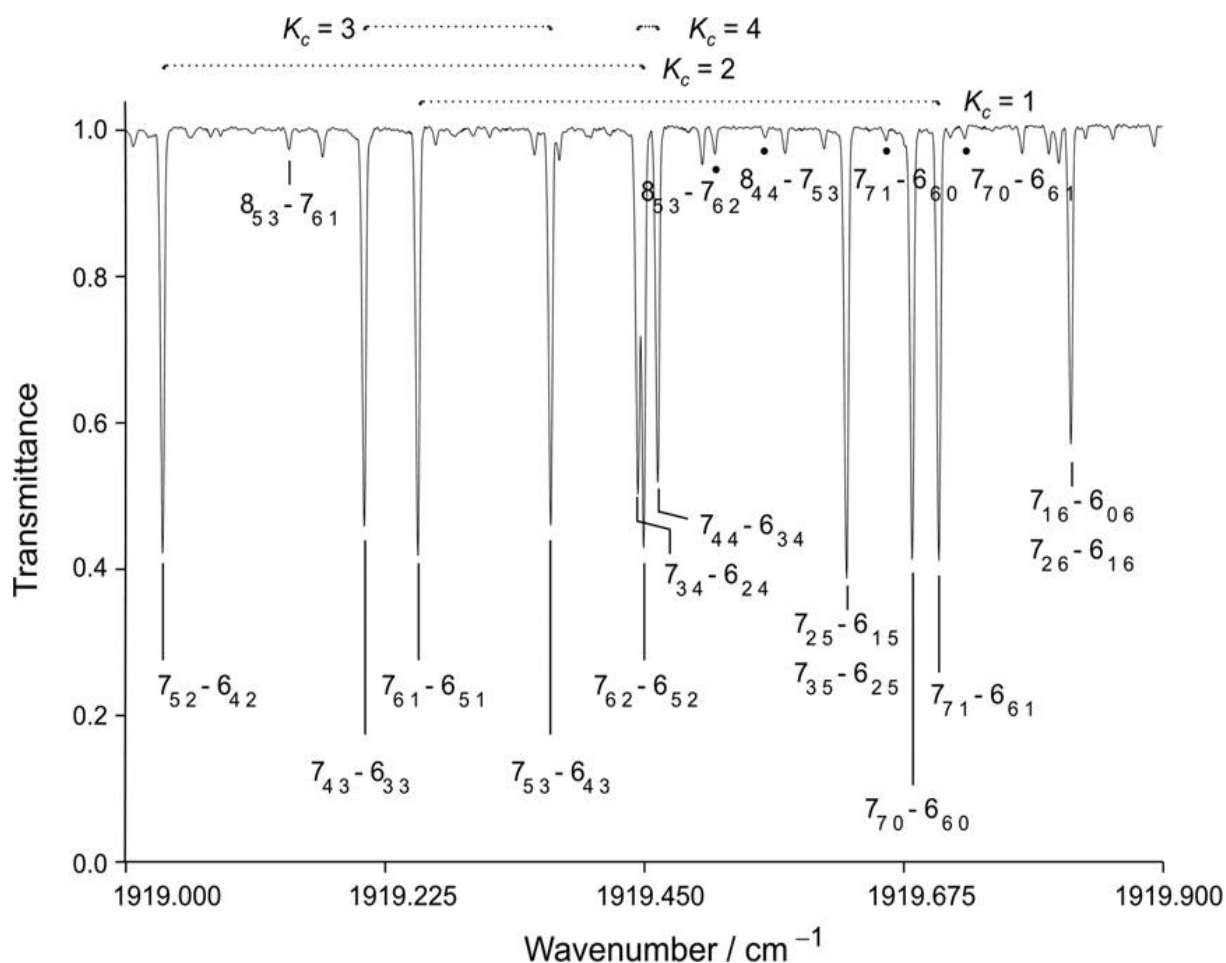


Figure. 2. Les fortes transitions de type C dans la sous-branche R (6) de ν_1 de $^{123}\text{SbHD}_2$. La transition faible à 1919.15 cm^{-1} suit les règles de sélection $\Delta J = +1$; $\Delta K_a = +1$; $\Delta K_c = +2$. Les transitions faibles de type B sont mises en évidence par des points pleins. Les dissociations d'asymétrie sont observées pour K_c jusqu'à 4.

sont clairement évidentes dans les branches Q où les transitions avec $K_c = J$; $J-1$; $J-2$; et $J-3$ portent la majeure partie de l'intensité de la branche. Une portion de la branche P avec des transitions caractérisées par $J' = 5$ est représenté dans la Fig. 3. La région illustrée est l'une de ces quelques-unes qui sont plutôt exemptes de raies d'absorption de H_2O , identifiées dans la figure par un astérisque. La faiblesse de la bande peut être évaluée en comparant l'échelle de transmission de la Fig. 3 avec celles des fig. 1 et 2.

2.3. La bande ν_1 de $^{121}\text{SbHD}_2$

Comme $^{121}\text{SbHD}_2$ et $^{123}\text{SbHD}_2$ sont simultanément présents dans l'échantillon sous forme d'impuretés isotopiques, avec des quantités de 3,4 et 2,6%, respectivement, les bandes ν_1 des deux isotopologues apparaissent ensemble dans le spectre III. Les bandes sont très faibles dans les conditions d'enregistrement données de sorte que seuls les composants C sont détectables. L'échelle de la transmittance des Fig. 4 et 5 par rapport à celles des Fig. 1 et 2 illustrent la faiblesse des bandes dans le spectre disponible. L'origine de bande pour $^{121}\text{SbHD}_2$ est approximativement située à $1893,1 \text{ cm}^{-1}$ et le déplacement isotopique rouge des raies de l'isotopologues le plus lourd est environ $0,13 \text{ cm}^{-1}$. La présence des raies d'absorption de $^{123}\text{SbHD}_2$ facilite grandement l'identification des transitions correspondantes pour $^{121}\text{SbHD}_2$ en dépit du mauvais rapport signal / bruit, estimé à environ 5: 1 dans les régions de branche R et P et de 10: 1 dans l'intervalle de la branche Q. Les inconvénients causés par le chevauchement des raies sont négligeable devant les avantages de la ressemblance étroite des deux bandes isotopiques.

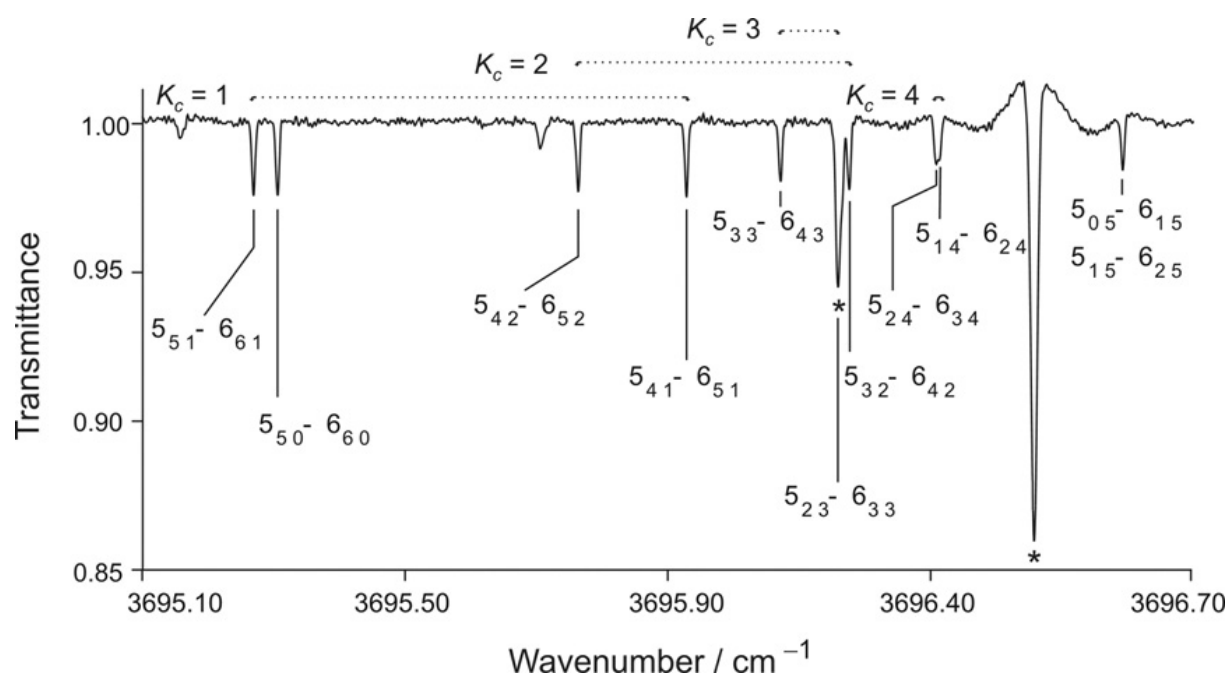


Figure. 3. Les transitions de type C dans la sous-branche P (6) de ν_1 de $^{123}\text{SbHD}_2$. Les dissociations d'asymétrie sont observées pour K_c jusqu'à 4. Les deux fortes absorptions d' H_2O sont mises en évidence Par un astérisque.

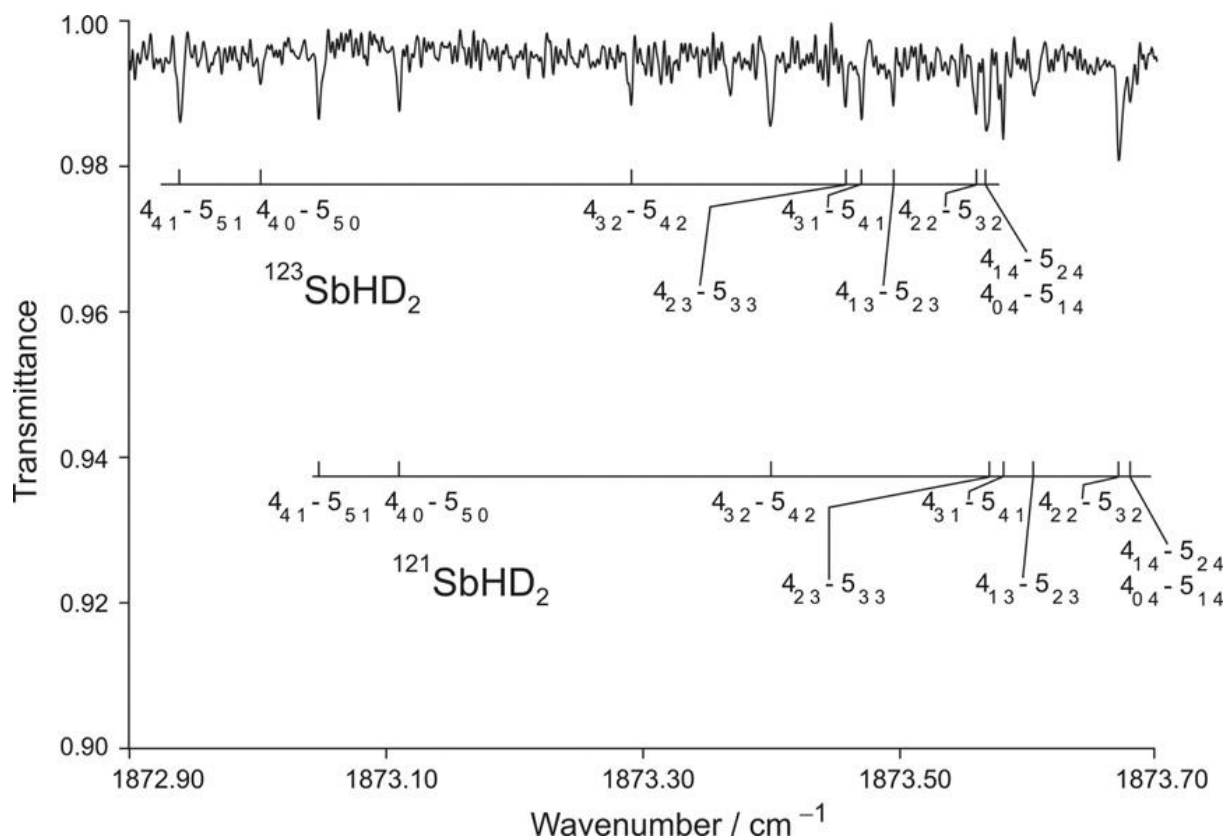


Figure. 4. Les transitions de type C dans la sous-branche P (5) de ν_1 de $^{121}\text{SbHD}_2$. Les affectations de l'isotopologue plus lourd $^{123}\text{SbHD}_2$ sont également indiquées. Les divisions asymétriques sont Observées pour K_c jusqu'à 3

3. Analyse

3.1. $^{123}\text{SbHD}_2$

Tout d'abord, la bande ν_1 , qui est assez forte et révèle facilement reconnaissable est analysée. Une étude minutieuse des sous-branches R et P due la composante de type C permet d'attribuer provisoirement une centaine de transitions suivant les règles de sélection $\Delta J = -1$; $\Delta K_a = -1$; $\nu K_c = 0$, avec J' allant jusqu'à 6. Puisque les constantes spectroscopiques de l'état fondamental sont inconnues, les nombres d'onde de transition ont été ajustés aux paramètres de l'état inférieur et supérieur à l'aide en affinant simultanément les paramètres des

deux états. Un modèle hamiltonien de type W de Watson [25] dans la représentation III^l a été adoptée, en incluant des termes jusqu'à la huitième puissance du moment cinétique:

$$\begin{aligned}
 H = & {}^{(v)}E + {}^{(v)}B\chi J_x^2 + {}^{(v)}By J_y^2 + (v)B_z J_z^2 - D_j J^4 - DjkJ^2 J_z^2 - DkJ_z^2 + HJJ^6 + \\
 & HjkJ^4 J_z^2 + HkjJ^2 J_z^4 + HkJ_z^6 + L_j J^8 + LjjkJ^6 J_z^2 + LjkJ^4 J_z^4 + LkkjJ^2 J_z^6 + LkJ_z^8 + \\
 & (d1J^2 + h1J^4 + l1J^6)(J_+^2 + J_-^2) + (d1 + d2J^2 + l2J^4)(J_+^4 + J_-^4) + (h3 + l3J^2)(J_+^6 + J_-^6) \\
 & + l4(J_+^8 + J_-^8). \tag{1}
 \end{aligned}$$

où $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$ et l'exposant (v) est le nombre quantique de vibration, il vaut 0 pour l'état inférieur et 1 pour l'état supérieur de la transition; Il a été omis pour les termes de distorsion. Les résultats de Ces ajustements préliminaires sont très encourageants et seuls quelques ajustements des attributions sont nécessaires pour obtenir l'origine de la bande ν_1 et un ensemble restreint de paramètres moléculaires pour les deux états. Ces paramètres ont guidé l'attribution des branches P et R à des valeurs de J' plus élevées et a permis celle de la branches Q. Les paramètres spectroscopiques sont progressivement améliorés et les constantes de distorsion jusqu'à la 6^{ème} puissance pourraient être comprises dans la procédure d'ajustement. Le nombre total de transitions de type C attribuées et qui correspondent à de $\Delta J = 0; \pm 1; \Delta K_a = 1; \Delta K_c = 0$ est 1327, avec $J'_{\max} = 27, K'_{a, \max} = 25$ et $K'_{c, \max} = 20$.

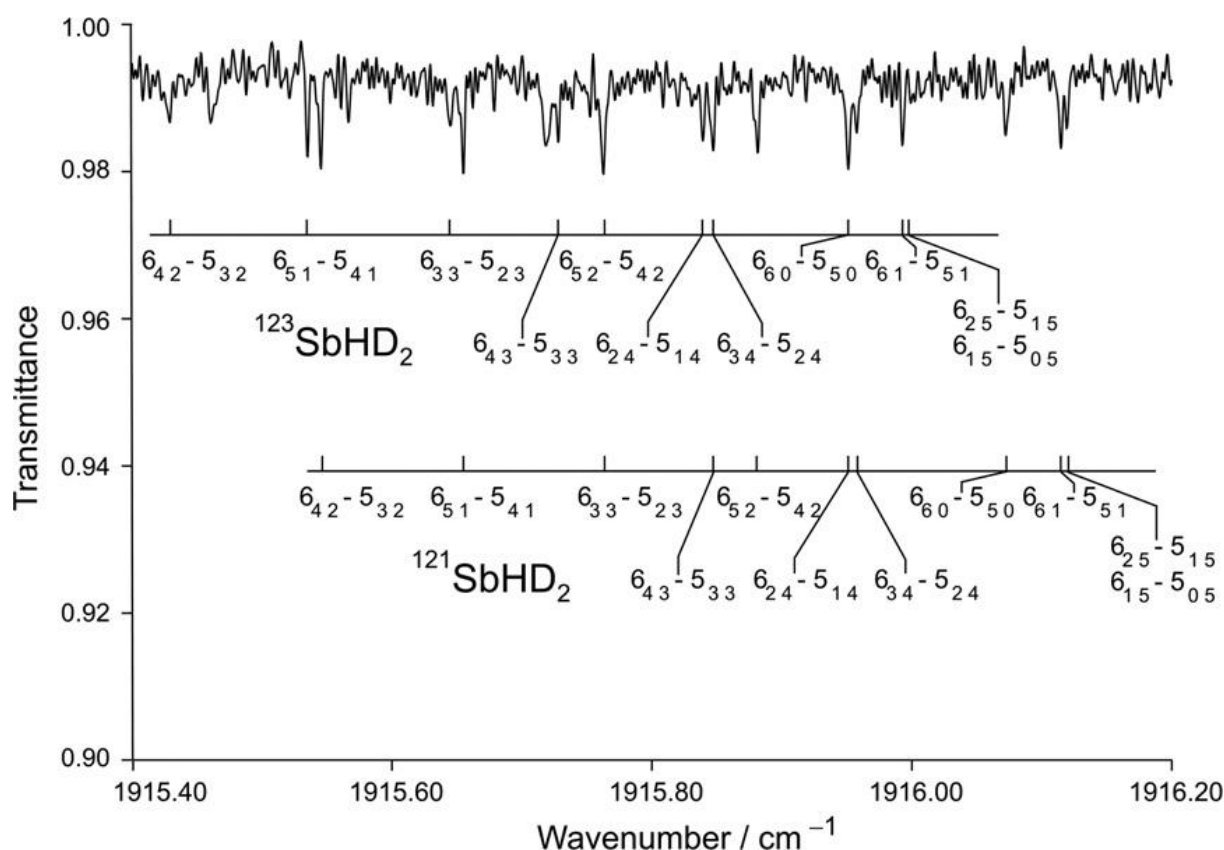


Figure. 5. Les transitions de type C dans la sous-branche R (5) de ν_1 de $^{121}\text{SbHD}_2$. Les affectations de l'isotopologues plus lourd $^{123}\text{SbHD}_2$ sont également indiquées. Les divisions asymétriques sont Observées pour Kc jusqu'à 4.

D'autres raies faibles ont été trouvées. Il s'agit de 135 de type C après suivant la règles de sélection $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = \pm 1; \pm 3$; $\Delta K_c = 0; \pm 2$, tandis que 630 sont de type B avec $\Delta J = 0; \pm 1$; $\Delta K_a = \pm 1; \pm 3$; $\Delta K_c = \pm 1; \pm 3$ et $J'_{\text{Max}} = K_{0a; \text{max}} = 18$ et $K_{0c; \text{max}} = 16$.

Après l'attribution de 2092 ν_1 de transitions au total, toutes les GSCD possibles ont été ajustées par rapport aux paramètres de l'état fondamental. Un poids, W_{GSCD} , a été attribué à chaque GSCD calculé à partir des incertitudes σ_i et σ_j des transitions utilisées pour dériver les différences de combinaison, selon la relation: $W_{\text{GSCD}} = 1/\sigma^2_{\text{GSCD}} = 1/(\sigma_i^2 + \sigma_j^2)$. Afin de prendre en compte les GSCD, chaque w_{GSCD} est ensuite multiplié par un facteur égal à

$(n-1)/N$, où n est le nombre de transitions ayant un niveau supérieur commun et N est le nombre de GSCD possible dérivé de celui-ci.

Des raies de rotation pure d'un échantillon de SbHD₂ [2,3] sont trouvées dans un spectre enregistré de 20 à 100 cm⁻¹ en utilisant un échantillon naturel de SbD₃. Bien que leurs positions aient été calculées à partir d'un ensemble préliminaire de constantes de rotation de l'état fondamental, aucune raie n'a pu être détectée.

Au total, 3942 GSCD jusqu'à $J'' = 27$, $K_a'' = 25$ et $k_c'' = 20$ ont été ajustés en utilisant le modèle hamiltonien donné dans l'équation (1). Dans le dernier cycle du raffinement 405 GSCD ont été rejetés, car différaient des valeurs calculées correspondantes de plus que la limite de rejet fixée à 40 MHz, $1,33 \times 10^{-3}$ cm⁻¹. La déviation standard (écart-type) de l'ajustement est de $0,52 \times 10^{-3}$ cm⁻¹. Les paramètres moléculaires obtenus de l'état fondamental, y compris les constantes de distorsion jusqu'à H_s , sont énumérés dans le tableau 1, colonne 2.

En utilisant des énergies calculées à partir de ces constantes de l'état fondamental, 2092 transitions rovibrationnelles de ν_1 sont finalement ajustées pour donner les paramètres de l'état supérieur de ν_1 , (voir tableau 1, colonne 3).

Un poids statistique unitaire est attribué à chaque transition. Dans le cas où le fractionnement d'asymétrie est plus petit que la résolution spectrale, Le poids est réduit à 1/2 pour chaque composant de paire non résolue attribuée au même nombre d'onde. Puisque ν_1 est essentiellement non perturbés, les nombres d'ondes expérimentaux sont correctement reproduits en utilisant le hamiltonien dans l'équation (1).

Il existe cependant deux perturbations très localisées impliquant des niveaux de rotation avec $K_c' = 10$ et $J' = 12, 13$ et 14 et K_c élevé, $K_c \leq J$ avec $J = 18, 19$ et 20 . Nous concluons à partir des calculs théoriques décrits dans le paragraphe suivante, que pour ces perturbations l'état d'interaction le plus probable est $\nu_2 = \nu_4 = 1$ de symétrie A' à environ 1948 cm⁻¹, mais aucune raie correspondant à cette perturbation n'a été identifiée. Dans l'ajustement les transitions affectées par les interactions mentionnées ont été exclus de l'ensemble de données.

Dans le dernier cycle du raffinement, 185 transitions ont été rejetées avec la limite de rejet fixée à 40 MHz. L'écart-type De l'ajustement est de $0,45 \times 10^{-3}$ cm⁻¹, qui est deux fois plus grande que la précision des mesures estimée. Les constantes moléculaires dérivées pour l'état $\nu_1=1$ sont énumérés dans le tableau 1, colonne 3.

L'analyse de l'harmonique $2\nu_1$ a bénéficié des résultats de l'étude spectroscopique de l'état fondamental et $\nu_1 = 1$. En supposant que, similairement à la fondamentale ν_1 , la première bande harmonique $2\nu_1$ est aussi isolée et presque i perturbée, le spectre est prédit en utilisant le modèle hamiltonien de l'équation (1). Dans ce but, Les niveaux de rotation de l'état fondamental sont calculés en utilisant les constantes du tableau 1, colonnes 2. Les Valeurs de départ pour les constantes de l'état $\nu_1 = 2$ sont obtenues par extrapolation linéaire de celles de l'état fondamental et les états $\nu_1 = 1$ et sont listées dans le tableau 1, colonne 4. De tels paramètres extrapolés linéairement sont utilisés aussi bien pour les bandes isolées $2\nu_1$ et $6\nu_1$ de PHD₂ où ils ont fourni d'excellentes prédictions [14]. L'origine de la bande $2\nu_1$ à 3720 cm^{-1} est approximativement estimée à partir du début de la branche Q dans le spectre.

L'accord immédiat entre les nombres d'onde observé et prédits est si satisfaisante que les transitions correspondant à $\Delta J = 0, \pm 1, \Delta K_a = \pm 1; \Delta K_c = 0$ avec J' allant jusqu'à 8 pourrait être directement attribuées. Le raffinement des paramètres initiaux de l'état excité nous d'étendre les attributions à des valeurs de J plus élevées, jusqu'à $J'_{max} = 16, 18, \text{ et } 20$ dans les branches P, Q et R, respectivement. Au total, 556 transitions ont été attribuées, avec $k_{c,max} = 12, 15 \text{ et } 13$ dans Les branches P, Q et R, respectivement. Parmi celles-ci, 86% ont des valeurs de K_c Inférieur à 10, car la plupart des transitions avec $K_c > 10$ sont trop faibles pour être détecté. Dans le dernier cycle de la procédure d'ajustement, 133 des 556 transitions ont été rejetées, étant donné que la différence entre leurs nombres d'ondes expérimentaux et calculés dépasse la limite de rejet fixée à $300\text{ MHz}, 10,0 \times 10^{-3}\text{ cm}^{-1}$. Cette Valeur représente presque un ordre de grandeur plus grand que celui utilisé dans l'analyse de la bande fondamentale, mais, néanmoins, c'est le meilleur compromis entre paramètres spectroscopie statistiquement bien déterminés d'une part et une réduction radicale de l'ensemble des données expérimentales, d'autre part. Un grand nombre de transitions ayant $K_c \geq 10$ et les déviations de leurs nombres d'ondes par rapport des valeurs calculées vont de 150×10^{-3} à $10 \times 10^{-3}\text{ cm}^{-1}$.

Tableau 1

Paramètres moléculaires (en cm^{-1}) pour le sol, $v_{1=}$ 1, et $v_{1=}$ 2 états de $^{123}\text{SbHD}_2$.a S réduction, III' représentation.

Paramètre	État fondamental	V1=1	V1=2 Extrapolé	V1=2
V0		1893.0247580(326)		3720.033153(313)
Bx	1.89086556(121)	1.876257373(955)	1.861649	1.86125144(921)
By	1.99623099(118)	1.977412934(941)	1.958594	1.95824404(805)
Bz	1.45387820(211)	1.45385749(112)	1.453364	1.4534652(171)
Dj $\times 10^5$	2.554153(335)	2.487542(214)	2.4209	2.42489(147)
Djk $\times 10^5$	-0.93707(112)	-0.676810(792)	-0.4169	-0.50053(932)
Dk $\times 10^5$	-0.98161(192)	-1.148722(964)	-1.316	-1.6945(132)
d 1 $\times 10^5$	0.215797(204)	0.203636(199)	0.1914	0.19431(136)
d 2 $\times 10^5$	-0.6039862(785)	-0.5830462(755)	-0.56210	-0.561859(564)
Hj $\times 10^9$	1.08706(377)	0.98965(233)	0.892	0.892 ^b
Hjk $\times 10^9$	-0.4943(197)	0.3295(144)	1.15	1.15 ^b
Hkj $\times 10^9$	-1.5163(540)	-3.6111(412)	-5.71	-5.71 ^b
Hk $\times 10^9$	0.5619(579)	3.0749(414)	5.59	5.59 ^b
H 1 $\times 10^9$	-0.16839(279)	-0.16375(228)	-0.159	-0.159 ^b
H 2 $\times 10^9$	0.49827(173)	0.48393(145)	0.47	0.47 ^b
H3 $\times 10^9$	-0.058092(756)	-0.051087(432)	-0.0441	-0.0441 ^b
Nombre de données	3537	1907		423
Déviati on standard de l'ajustement	0.52×10^{-3}	0.45×10^{-3}		2.6×10^{-3}

^a: Les incertitudes standard (1r) entre parenthèses se réfèrent aux chiffres les moins significatifs.

^b: Paramètres fixés aux valeurs linéaires extrapolées correspondantes, voir texte.

Puisque l'attribution correcte des raies exclues est établie à l'aide de GSCD, il faut en conclure que les perturbations affectent les niveaux supérieurs de ces transitions. Compte tenu de la complétude de l'attribution, d'une part, et de l'identification moins fiable du perturbateur par rapport à l'état $v_1 = 1$, d'autre part, le modèle hamiltonien utilisé dans l'analyse de l'état $v_1 = 2$ ne peut être amélioré pour tenir compte de perturbations. La déviation standard de l'ajustement, égal à $2,6 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, est satisfaisante, malgré les limitations du modèle et est d'environ deux fois et demie la valeur de la précision expérimentale. L'origine de la bande obtenue, la rotation et les constantes de distorsion de centrifugation quartique pour l'état $v_1 = 2$ sont listées dans le tableau 1, colonne 5. Les constantes de distorsion centrifuge sextiques sont contraintes aux valeurs linéairement extrapolées de l'état fondamental et des états $v_1 = 1$.

Enfin, dans une tentative d'améliorer des constantes de l'état fondamental, 336 GSCD dérivés de la bande harmonique sont ajoutés à GSCD obtenu à partir de v_1 . Cependant, en raison de leur plus grande incertitude, leur petit nombre, et leur faible J ; K_a ; et K_c , par rapport au GSCD correspondant de v_1 , ils n'améliorent pas les paramètres cités dans le tableau 1, colonne 2.

3.2. ¹²¹SbHD₂

L'analyse de v_1 est guidée par les attributions correspondantes de l'isotopologues ¹²³SbHD₂. En premier lieu, environ 60 transitions avec J' allant jusqu'à 6 dans les branches P et R sont attribuées et ajustées, en utilisant comme paramètres de départ ceux de l'état fondamental et des états excités de ¹²³SbHD₂, et en estimant de l'origine de bande à $1893,1 \text{ cm}^{-1}$. Une fois que les valeurs initiales des paramètres de ¹²¹SbHD₂ sont affinées, L'ensemble du spectre est prédit, à l'aide de laquelle Les attribution de v_1 pourraient être étendues jusqu'à $J' = K_c = 17$. Comme dans ¹²³SbHD₂, les perturbations des niveaux de rotation de l'état supérieur sont efficaces pour $k'_c = 10$ et $J' = 12, 13$ et 14 . Au total 771 transitions ont été attribuées et ajustées selon la même procédure et le même modèle Hamiltonien tel qu'adopté pour ¹²³SbHD₂. Dans l'étape suivante, 618 GSCD Jusqu'à $J'' = 18$, $k'_a = 17$ et $k''_c = 17$ sont générés et ajustés pour obtenir des paramètres impartial de l'état fondamental. Les constantes B_X , B_Y , B_Z , D_J , D_{JK} , D_1 et D_2 de l'état vibrationnel fondamental sont dérivés avec une bonne précision. Puisque D_K ne pourrait pas être déterminé, sa valeur a été limitée à celle obtenue en ajustant les transitions v_1 simultanément aux états inférieurs et supérieurs. Les constantes H et h ne

peuvent pas non plus être affinées. Ils sont fixés aux valeurs correspondantes des paramètres dans ¹²³SbHD₂ pour faire la comparaison des constantes d'ordre inférieur des deux isotopologues physiquement plus significatifs. Dans le dernier cycle de l'affinement, 42 GSCD dépassant la limite de rejet de 70 MHz, $2,33 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, ont été rejetés. L'ajustement convergé avec une déviation standard de $1,0 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. Les paramètres obtenus sont listés dans la colonne 2 du tableau 2, ainsi que les valeurs de ¹²³SbHD₂ dans la colonne 3, pour faciliter une comparaison.

Avec les constantes de l'état fondamental contraintes aux valeurs du tableau 2, colonne 2, les transitions ν_1 sont ensuite ajustées. Dans le dernier cycle de cet ajustement, 78 transitions dépassant la limite de rejet de 50 MHz, $1,67 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, sont rejetés. La déviation standard de l'ajustement est de $0,70 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. L'origine de la bande obtenue et les paramètres rotationnels et de distorsion centrifuge constantes sont indiqués dans le tableau 2, colonne 4. Les constantes H et h sont contraintes aux valeurs correspondantes dans ¹²³SbHD₂. A titre de comparaison, les paramètres de l'état excité ν_1 de ¹²³SbHD₂ sont également inclus dans le tableau 2, voir colonne 5.

3.3. Calculs théoriques.

La géométrie d'équilibre théorique et champ de force quartique totale de la stibine en coordonnées de symétrie interne ont été récemment rapporté [2]. Cela a donné un champ de force qui reproduit Les états fondamentaux de SbH₃ et SbD₃ avec un écart quadratique moyen (RMSD) de $7,6 \text{ cm}^{-1}$, l'écart maximal étant $+ 14,1 \text{ cm}^{-1}$ pour ν_2 de SbH₃.

Le champ de force quartique théorique a été utilisé pour prédire des paramètres spectroscopiques pertinents pour ¹²³SbHD₂, ¹²¹SbHD₂, ¹²³SbH₂D et ¹²¹SbH₂D au moyen du programme SPECTRO [26], qui applique des formules standard basées sur le Théorie des perturbations rovibrationnel de second ordre [27]. Ces paramètres calculés sont groupés dans les tableaux 3a et 3b. Les constantes de rotation et de distorsion ont été calculés en réduction S et en représentation III^l et correspondent donc à ceux utilisés dans l'analyse de la méthode des données expérimentale.

4. Résultats et discussion

4.1. Résultats expérimentaux

Les paramètres du tableau 1 sont statistiquement bien déterminés. Les paramètres des états excités, en particulier ceux d'ordre inférieur, sont comparables à celles correspondantes de l'état fondamental en intensité, l'incertitude et le signe, à l'exception de H_{JK} pour $V_1 = 1$ qui a un signe opposé. Les valeurs des constantes rotationnelles et de presque toutes les constantes de distorsion de $v_1 = 1$ et $v_1 = 2$ diminution par rapport à celles de l'état fondamental. Les paramètres raffinés de l'état $v_1 = 2$ est en bon accord avec les valeurs dans la colonne 4, extrapolées linéairement à partir des constantes correspondantes de l'état fondamental et des états $v_1 = 1$. Ils diffèrent en effet des valeurs l'extrapolées de moins de 1%, à l'exception de D_{JK} et D_K , qui s'écartent d'environ 20%. Le grand désaccord pour observé D_{JK} et D_K est due au fait que ces constantes compensent partiellement les effets des perturbations sur les niveaux de rotation des états $V_1 = 2$.

Tableau 2

Paramètres moléculaires (en cm^{-1}) pour le sol et $v_1 = 1$ états de $^{121}\text{SbHD}_2$.a Les paramètres correspondants de $^{123}\text{SbHD}_2$ sont listés à titre de comparaison. S réduction, III' représentation.

Paramètre	État fondamental		V1=1	
	$^{121}\text{SBHD}_2$	$^{123}\text{SBHD}_2$	$^{121}\text{SBHD}_2$	$^{123}\text{SBHD}_2$
V0			1.893.1394760(746)	1893.0247580(326)
Bx	1.890988285(489)	1.89086556(121)	1.87638444(235)	1.876257373(355)
By	1.996965533(494)	1.99623099(118)	1.79813276(229)	1.977412934(941)
Bz	1.4541334(515)	1.45387820(211)	1.45411097(208)	1.45385749(112)
$D_j \times 10^5$	2.557339(952)	2.554153(335)	2.491459(468)	2.487542(214)
$D_{jk} 10^5$	-0.931734(325)	-0.93707(112)	-0.67457(140)	-0.676810(792)
$D_k \times 10^5$	-0.95698 ^b	-0.98161(192)	-1.12342(124)	-1.148722(964)
$d_1 \times 10^5$	0.214211(839)	0.215797(204)	0.201271(440)	0.203636(199)

$d \times 10^5$	-0.602201(667)	-0.6039862(785)	-0.561189(166)	-0.5830462(775)
$H_j \times 10^9$	1.087 ^c	1.08706(377)	0.990	0.98965(233)
$H_{jk} \times 10^9$	-0.49 ^c	-0.4943(197)	0.33	0.3295(144)
$H_{kj} \times 10^9$	-1.52 ^c	-1.5163(540)	-3.61	-3.6111(412)
$H_k \times 10^9$	0.56 ^c	0.5619(579)	3.07	3.0749(414)
$H_1 \times 10^9$	-0.168 ^c	-0.16839(279)	-0.164	-0.16375(228)
$H_2 \times 10^9$	0.498 ^c	0.49827(173)	0.484	0.48393(145)
$H_3 \times 10^9$	-0.0581 ^c	-0.058092(756)	-0.0511	-0.051087(432)
Nombre de données	576	3537	693	1907
Déviaton standard de l'ajustement	1.0×10^{-3}	0.52×10^{-3}	0.66×10^{-3}	0.45×10^{-3}

^a: Les incertitudes standard (1 σ) entre parenthèses se réfèrent aux chiffres les moins significatifs.

^b: Paramètre fixé à cette valeur, voir texte.

^c: Paramètre fixé à la valeur des constantes correspondantes de ¹²³SbHD₂.

Tableau 3a

Les paramètres de vibration spectroscopiques calculés (cm⁻¹) de ¹²³SbHD₂, ¹²¹SbHD₂, ¹²³SbH₂D et ¹²¹SbH₂D.

Paramètre	¹²³ SbHD ₂	¹²¹ SbHD ₂	¹²³ SbH ₂ D	¹²¹ SbH ₂ D
V1(a')	1896.868	1896.982	1895.969	
V2(a')	1361.199	1361.355	1363.112	
V3(a')	703.658	703.746	825.394	
V4(a')	587.044	587.136	703.915	
V5(a')	1365.305	1365.483	1898.453	
V6(a')	728.965	728.999	725.644	
ω1	1974.801	1974.928	1972.691	
ω2	1400.748	1400.915	1402.660	
ω3	715.474	715.564	842.210	
ω4	594.596	594.690	714.692	
ω5	1404.340	1404.529	1977.058	
ω6	741.551	741.587	737.735	
X11	-31.989	-31.993	-16.202	
X12	-0.889	-0.890	-0.873	
X13	-12.547	-12.551	-12.239	
X14	0.382	0.382	-4.743	
X15	-0.640	-0.641	-64.067	
X16	-14.215	-14.218	-6.683	
X22	-8.164	-8.166	-16.129	

X23	-3.529	-3.530	-0.102
X24	-5.805	-5.807	-5.617
X25	-32.294	-32.302	-0.640
X26	-3.928	-3.929	-7.347
X33	-1.288	-1.288	-1.725
X34	-0.361	-0.361	1.447
X35	-2.870	-2.869	-16.574
X36	0.828	0.828	0.734
X44	-1.028	-1.028	-1.361
X45	-5.597	-5.600	-5.166
X46	0.390	0.390	-2.032
X55	-8.158	-8.161	-16.134
X56	-4.035	-4.035	-6.196
X66	-1.053	-1.053	-0.665

a : Le nombre de décimales n'est pas lié à la précision des données mais Choisie pour faciliter la comparaison entre les paramètres des différents isotopologues.

Les constantes de distorsion H pour $v_1 = 2$ sont maintenues fixes à leurs valeurs extrapolées, puisque, d'une part, les valeurs raffinées de H_J ; H_{JK} ; H_1 ; H_2 ; Et H_3 sont indéterminés. D'autre part, H_{kJ} Et H_K , une fois raffinés, sont grands de plus de deux ordres de grandeur que les valeurs extrapolées, parce qu'elles absorbent fortement des perturbations affectant presque toutes les transitions attribuées avec des valeurs élevées de J et de K_c .

Certains paramètres des états analysés sont fortement corrélés. Ces corrélations élevées sont: 94% entre h1 et d1 dans l'état fondamental; dans l'état $v_1= 1$ 96% entre HJ et DJ, 98% entre

h1 et d1, et 97% entre h2 et d2. Dans l'état $\nu_1 = 2$, tous les coefficients de corrélations sont inférieurs à 90%.

Les paramètres moléculaires de $^{121}\text{SbHD}_2$ listés dans le tableau 2 sont statistiquement bien déterminés, malgré le nombre limité de données comparées à celle disponible pour $^{123}\text{SbHD}_2$. La comparaison des résultats des deux isotopologues, Tableaux 1 et 2, montre un bon accord entre les valeurs des constantes correspondantes à la fois dans l'état fondamental et dans les états $\nu_1 = 1$. Les incertitudes de la plupart des paramètres des espèces légères sont plus grandes que celles de $^{123}\text{SbHD}_2$, bien qu'elles sont comparables en intensité. Il n'y a aucune corrélation majeure entre les paramètres raffinés des états analysés.

Les origines de ν_1 pour $^{121}\text{SbHD}_2$ et $^{123}\text{SbHD}_2$ sont proches des valeurs des états fondamentaux d'élongation, $\nu_1(\text{A}_1)$ et $\nu_3(\text{E})$, pour l'espèce SbH_3 . Ils sont situés respectivement à 1890.5028 (1) et 1894,49724 (6) cm^{-1} pour $^{121}\text{SbH}_3$ et à 1890,4006 (1) et 1894,37515 (7) cm^{-1} pour $^{123}\text{SbH}_3$ [1]. L'origine de bande $2\nu_1$ de $^{123}\text{SbHD}_2$ est encore plus proche des valeurs de ν_0 pour la paire du mode local (200A1/E) respectivement à 3719,7139 (7) et 3719,6375 (4) cm^{-1} [6]. Cet accord est cohérent avec le comportement du mode local de la premier harmonique d'élongation Sb-H. Il met en évidence le fait que le mouvement d'élongation de la liaison Sb-H se comporte comme s'il était dissocié des autres vibrations de la moléculaire, en correspondance avec l'extension de la théorie du mode local. [20]. La différence entre les origines de ν_1 pour $^{121}\text{SbHD}_2$ et $^{123}\text{SbHD}_2$ est égale à 0,115 cm^{-1} .

Les origines expérimentales de la bande ν_1 des deux isotopologues sont en bon accord avec les valeurs théoriques dans le tableau 3a. De même, La constante d'anharmonicité x_{11} de $^{123}\text{SbHD}_2$, telle que dérivée du ν_1 et des origines de bande $2\nu_1$, 33.1882 (4) cm^{-1} , concorde très bien avec la valeur ab initio, 32,0 cm^{-1} . Une comparaison entre les paramètres expérimentaux (Tableaux 1 et 2) et calculés (Tableau 3b) de l'état fondamental montrent que les constantes de rotation diffèrent de la valeur moyenne d'environ 0,25%. De grandes divergences sont observées pour la quartique et les constantes de distorsion sextique. Ces divergences peuvent en partie être attribué au fait que les valeurs théoriques se réfèrent à l'équilibre plutôt qu' l'état fondamental. Seulement pour ν_1 les constantes d'interaction de rotation et de vibration du tableau 3b peuvent être comparées avec les valeurs expérimentales. L'accord n'est pas entièrement satisfaisant: alors que les valeurs de α_1^x sont en accord raisonnable, les valeurs ab initio de x_1^y sont plus petits d'environ 30%. Les valeurs théorique

dex_1^z , en revanche, sont deux ordres de grandeur plus grands que leurs très faibles homologues expérimentaux.

Tableau 3b

Les paramètres ro-vibratoires et de rotation spectroscopiques calculés (cm^{-1}) de $^{123}\text{SbHD}_2$, $^{121}\text{SbHD}_2$, $^{123}\text{SbH}_2\text{D}$ et $^{121}\text{SbH}_2\text{D}$.

Paramètre	$^{123}\text{SBHD}_2$	$^{121}\text{SBHD}_2$	$^{123}\text{SBH}_2\text{D}$	$^{121}\text{SBH}_2\text{D}$
a_1^x	1.10322	1.10376	1.93767	1.93657
a_2^x	1.10363	1.10374	0.77042	0.77026
a_3^x	4.23670(-0.67852) ^b	4.24104(-0.67947) ^b	-0.77727	-0.77788
a_4^x	0.58508	0.58677	6.97553(-0.79569) ^c	7.00090(-0.79570) ^c
a_5^x	1.10542	1.10549	1.12509	1.12717
a_6^x	-5.12394(-0.20871) ^b	-5.13057(-0.21005) ^b	-7.20727(0.563948) ^c	-7.23185(0.564755) ^c
a_1^y	0.71040	0.71045	1.63598	1.63526
a_2^y	1.84163	1.84043	3.28000	3.28136
a_3^y	16.06724(-1.17254) ^b	16.12136(-1.17202) ^b	-10.23368(-3.159736) ^d	-10.24137(-3.16029) ^d
a_4^y	2.12043	2.11966	8.79014(1.716193) ^d	8.80209(1.721013) ^d
a_5^y	1.68669	1.68962	1.94099	1.94207
a_6^y	-18.48559(-1.2458) ^b	-18.53896(-1.24558) ^b	1.17421	1.16948
a_1^z	0.71831	0.71852	0.99073	0.99090
a_2^z	1.68970	1.69658	1.44155	1.44184
a_3^z	1.68970	1.69658	-3.33896	-3.34006
a_4^z	0.26069	0.26160	1.20452	1.20742
a_5^z	0.72866	0.72880	0.70845	0.70880
a_6^z	-2.31313	-2.32057	2.18569	2.18374
a_7^z	1.882218	1.882329	1.962751	1.963235
Bx	1.993290	1.994027	2.886912	2.887334
By	1.455418	1.455743	1.906515	1.906789
Bz	2.40850	2.40944	4.85547	4.85691
$D_j \times 10^5$	-0.66693	-0.66565	-4.37485	-4.37697
$D_{jk} \times 10^5$	-1.11055	-1.11273	1.20310	1.20497
$D_k \times 10^5$	0.38835	0.38930	1.67489	1.67552
$d_1 \times 10^5$	-0.05842	-0.05870	-0.12570	-0.12576
$d_2 \times 10^5$	0.721190	0.72141	4.17201	4.16768
$H_j \times 10^9$	0.173490	0.17840	-20.26597	-20.20616
$H_{jk} \times 10^9$	-0.895612	-0.90680	34.56413	34.44058
$H_{kj} \times 10^9$	-0.015189	-0.00900	-18.39611	-18.32643
$H_k \times 10^9$	-0.350762	-0.35110	-0.98471	-0.98626

H 1×10 ⁹	-0.043943	-0.04278	-0.01157	-0.00979
H 2×10 ⁹	-0.279347	-0.27849	0.02331	0.02247
H3×10 ⁹				

^a : Le nombre de décimales n'est pas lié à la précision des données mais a été choisi pour faciliter la comparaison entre les paramètres des différents isotopologues.

Les paramètres de rotation et de distorsion ont été calculés dans la représentation de la réduction S, III^l.

^b : Coriolis interaction entre ν_3 et ν_6 enlevé.

^c : Interaction de Coriolis entre ν_4 et ν_6 éliminée.

^d : Interaction de Coriolis entre ν_3 et ν_4 éliminée.

5.2. Résultats informatiques

Les constantes calculées indiquées dans le tableau 3a ont été utilisées pour Tester les relations dérivées pour la substitution isotopique XH₃→ XH₂D / XHD₂ En appliquant une expansion de la théorie des modes locaux [20]. Dans le cas de La substitution isotopique XH₃→XH₂D, les fréquences harmoniques de Parentales et filles (symboles en pointillés) sont liées par:

$$\dot{\omega}_1 = \dot{\omega}_5 = \omega, \dot{\omega}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \omega \quad (2)$$

$$\dot{\omega}_3 = \bar{\omega}, \dot{\omega}_4 = \dot{\omega}_6 = \frac{\sqrt{3}}{2} \bar{\omega} \quad (3)$$

Ici, ω et $\bar{\omega}$ sont les valeurs moyennes de l'étirement, ω_1 et ω_3 ,
Et de la flexion, ω_2 et ω_4 , des fréquences harmoniques, respectivement,
De l'espèce isotopique mère, c'est-à-dire SbH₃. Les constantes d'anharmonicité
Des espèces XH₂D sont reliées par [20]:

$$\dot{\chi}_{11} = \dot{\chi}_{55} = \frac{1}{4} \dot{\chi}_{15} \quad (4)$$

$$\dot{\chi}_{12} = \dot{\chi}_{25}, \dot{\chi}_{13} = \dot{\chi}_{35}, \dot{\chi}_{14} = \dot{\chi}_{45}, \dot{\chi}_{16} = \dot{\chi}_{56} \quad (5)$$

Dans le cas de la substitution isotopique XH₃→ XHD₂, les relations Entre les fréquences harmoniques du parent et de la fille Molécules sont [20]:

$$\omega_1 = \omega, \omega_2 = \omega_5 = \frac{1}{\sqrt{2}} \omega \quad (6)$$

$$\omega_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \bar{\omega}, \omega_3 = \omega_6 = \frac{\sqrt{3}}{2} \bar{\omega} \quad (7)$$

En ce qui concerne les constantes d'anharmonicité, les relations Sont [20]:

$$\chi_{22} = \chi_{55} = \frac{1}{4} \chi_{25} \quad (8)$$

$$\chi_{12} = \chi_{15}, \chi_{23} = \chi_{35}, \chi_{24} = \chi_{45}, \chi_{26} = \chi_{56}, \quad (9)$$

E. Cané et al. / Journal of Molecular Spectroscopy 265 (2011) 1-9

Tableau 4

Comparaison entre les paramètres xi et xij obtenus à partir du mode local étendu Théorie (" ELMT ") et des calculs ab initio (" ab initio ") de ¹²³SbH₂D et ¹²³SbHD₂.

Rapport	¹²³ SBH ₂ D		¹²³ SBHD ₂	
	ELMT ^a	Ab initio ^b	ELMT ^a	Ab initio ^b
$\omega_1:\omega_5:\omega_2$	1 : 1 : 0.71	1 : 1 : 0.71		
$\omega_3:\omega_6:\omega_4$	1 : 0.86 : 0.86	1 : 0.88 : 0.85		
$\omega_1:\omega_2:\omega_5$			1 : 0.71 : 0.71	1 : 0.71 : 0.71
$\omega_4:\omega_6:\omega_3$			1 : 1.22 : 1.22	1 : 1.25 : 1.20
$\chi_{11}:\chi_{55}:\chi_{15}$	1 : 1 : 4	1 : 1 : 3.96		
$\chi_{12}:\chi_{25}$	1 : 1	1.36 : 1		
$\chi_{13}:\chi_{35}$	1 : 1	0.74 : 1		

$\chi_{14}:\chi_{45}$	1 : 1	0.92 : 1		
$\chi_{16}:\chi_{56}$	1 : 1	1.08 : 1		
$\chi_{22}:\chi_{55}:\chi_{25}$			1 : 1 : 4	1 : 1 : 3.96
$\chi_{12}:\chi_{15}$			1 : 1	1.39 : 1
$\chi_{23}:\chi_{35}$			1 : 1	1.23 : 1
$\chi_{24}:\chi_{45}$			1 : 1	1.04 : 1
$\chi_{25}:\chi_{56}$			1 : 1	0.97 : 1

^a : De la théorie du mode local élargie [20].

^b : À partir du champ de force ab initio quartique [2].

Réorganiser les équations (2-9) entre ω'_i et entre x'_{ij} valeurs Pour ¹²³SbH₂D et ¹²³SbHD₂ ont été dérivées, Tableau 4. Données numériques Les résultats de la théorie du mode local étendu (" ELMT ") [20] sont listés Dans le tableau 4, colonnes 2 et 4. Les mêmes ratios ont également été calculés En utilisant les fréquences harmoniques et les constantes d'anharmonicité De ¹²³SbH₂D et ¹²³SbHD₂ du Tableau 3a. Ces résultats (Dénomme «ab initio») sont rassemblés dans les colonnes 3 et 5 du tableau 4. En général, les valeurs " ELMT " et " ab initio " sont en bon accord. Nous notons cependant que les rapports $\chi_{12}:\chi_{15}$ et $\chi_{13}:\chi_{35}$ pour ¹²³SbH₂D et $\chi_{12}:\chi_{15}$ et $\chi_{23}:\chi_{12}$ pour ¹²³SbHD₂ diffèrent significativement. L'inspection d'enquêtes analogues sur PH₂D et PHD₂ révèle L'image suivante. Pour PHD₂, l'anharmonicité expérimentale requise Constantes ne sont pas encore disponibles. Au contraire, pour PH₂D les constantes d'anharmonicité $\chi_{12}:\chi_{25}:\chi_{13}$ et χ_{35} peut être Déterminé à partir d'observations expérimentales [17, 28]. On remarque que Les rapports $\chi_{12}:\chi_{25}$, 1.32 :1, et $\chi_{13}:\chi_{35}$, 0.79 :1 sont tout à fait semblables à Celles de ¹²³SbH₂D citées dans le tableau 4 et de 1,36: 1 et de 0,74: 1, respectivement. Supposé, l'origine responsable de ces écarts est Le même dans les deux espèces. La raison peut-être trouvée dans les approximations Utilisées pour dériver les constantes d'anharmonicité X_{ij} de Cubiques et quartiques [20]. Néanmoins, les résultats Que le modèle de mode local étendu convient pour décrire également Le comportement en mode local dans XH₂D et XHD₂ isotopologues pour

X= P et Sb. Dans le cas présent, cette évaluation est basée sur la quartique Champ de force calculé ab initio, qui représente de manière fiable les Données expérimentales sur ¹²³SbHD₂. Il est à espérer que la présente étude Travail sur les bandes fondamentales de SbHD₂ et une L'étude de SbH₂D.

Références

- [1] L. Fusina, G. Di Lonardo, P. De Natale, *J. Chem. Phys.* 109 (1998) 997-1003.
- [2] E. Cané, G. Di Lonardo, L. Fusina, W. Jerzembeck, H. Bürger, J. Breidung, W. Thiel, *Mol. Phys.* 103 (2005) 557-577.
- [3] E. Cané, G. Di Lonardo, L. Fusina, W. Jerzembeck, H. Bürger, J. Breidung, W. Thiel, *J. Mol. Struct.* 780-781 (2006) 98-110.
- [4] L. Fusina, G. Di Lonardo, *J. Mol. Spectrosc.* 216, (2002) 493-500.
- [5] T. Lukka, L. Halonen, *J. Chem. Phys.* 101 (1994) 8380-8390.
- [6] M. Halonen, L. Halonen, H. Bürger, P. Moritz, *J. Chem. Phys.* 95 (1991) 7099-7107.
- [7] J. Lummi, T. Lukka, L. Halonen, H. Bürger, O. Polanz, *J. Chem. Phys.* 104 (1996) 488-498.
- [8] E. Cané, L. Fusina, W. Jerzembeck, M. Litz, H. Bürger, *J. Mol. Spectrosc.* 260 (2010) 105-114.
- [9] L. Fusina, G. Di Lonardo, J.W.C. Johns, L. Halonen, *J. Mol. Spectrosc.* 127 (1988) 240-254.
- [10] M. Elkeurti, L.H. Coudert, J. Orphal, J. Wlodarczak, C.E. Fellows, S. Toumi, *J. Mol. Spectrosc.* 251 (2008) 90-101; M. Elkeurti, L.H. Coudert, J. Orphal, J. Wlodarczak, C.E. Fellows, S. Toumi, *J. Mol. Spectrosc.* 260 (2010) 139-140.
- [11] O.N. Ulenikov, H. Bürger, W. Jerzembeck, G.A. Onopenko, E.S. Bekhtereva, O.L. Petrunina, *J. Mol. Struct.* 599 (2001) 225-237.
- [12] O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, O.V. Gromova, T.D. Chudinova, W. Jerzembeck, H. Bürger, *J. Mol. Spectrosc.* 251 (2008) 114-122.
- [13] O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, A.S. Bulavenkova, C. Leroy, W. Jerzembeck, H. Bürger, *J. Mol. Spectrosc.* 240 (2006) 102-111.
- [14] M. Snels, H. Hollenstein, M. Quack, *J. Chem. Phys.* 125 (2006) 194319.
- [15] H. Akagi, K. Yokoyama, A. Yokoyama, A. Wada, *J. Mol. Spectrosc.* 231 (2005) 37-49.
- [16] M. Elkeurti, L.H. Coudert, J. Orphal, J. Wlodarczak, C.E. Fellows, S. Toumi, *J. Mol. Spectrosc.* 261 (2010) 101-118.
- [17] C. Leroy, O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, G.A. Onopenko, T.D. Chudinova, *J. Mol. Spectrosc.* 234 (2005) 228-237.
- [18] O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, T.D. Homiak, T.R. Huet, F. Herregodts, H. Bürger,

- W. Jerzembeck, *J. Mol. Spectrosc.* 222 (2003) 153 à 158.
- [19] O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, Yu.B. Yukhnik, O.G. Vershinina, W. Jerzembeck, H. Bürger, *J. Mol. Spectrosc.* 252 (2008) 41-46.
- [20] O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, C. Leroy, *Mol. Phys.* 107 (2009) 1409-1416.
- [21] S.N. Yurchenko, R.I. Ovsyannikov, W. Thiel, P. Jensen, *J. Mol. Spectrosc.* 256 (2009) 119-127.
- [22] G. Guelachvili, M. Birk, Ch.J. Bordé, J.W. Brault, L.R. Brun, B. Carli, A.R.H. Cole, K.M. Evenson, A. Fayt, D. Hausamann, J.W.C. Johns, J. Kauppinen, Q. Kou, A.G. Maki, K. Narahari Rao, R.A. Toth, W. Urban, A. Valentin, J. Vergès, G. Wagner, M.H. Wappelhorst, J.S. Wells, B.P. Winnewisser, M. Winnewisser, *Appl. Chem.* 68 (1996) 193-208.
- [23] R.A. Toth, *J. Opt. Soc. Un m. B* 10 (1993) 2006-2029.
- [24] G. Guelachvili, K. Narahari Rao, *Manuel des normes infrarouges*, Académique Press, San Diego, 1986.
- [25] J.K.G. Watson, dans: James R. Durig (Ed.), *Vibrational Spectra and Structures*, Dekker, New York, 1977, p. 1-89.
- [26] J.F. Gaw, A. Willetts, W.H. Vert, N.C. Handy, *SPECTRO: un spectroscopique Analyse*, dans: J. Bowman (Ed.), *Advances in Molecular Vibrations and Collision Dynamics*, JAI Press, Greenwich, CT, 1991.
- [27] D. Papousek, M.R. Aliev, *Molecular Vibrational Spectra*, Elsevier, Amsterdam, 1982.
- [28] O.N. Ulenikov, E.S. Bekhtereva, S.V. Grebneva, H. Bürger, W. Jerzembeck, C. Leroy, *J. Mol. Spectrosc.* 226 (2004) 7-23.

Nombres d'onde de transition observées et calculées la bande harmonique ν_1 de $^{121}\text{SbHD}_2$

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)			(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)		
17	11	7	18	12	7	*1819.90087	1819.89806	282	14	6	8	15	7	8	1832.93068	1832.93040	28												
17	10	8	18	11	8	*1820.07685	1820.07465	220	14	6	9	15	7	9	1833.16399	1833.16313	85												
17	10	7	18	11	7	*1820.08173	1820.07832	340	14	5	9	15	6	9	1833.16399	1833.16313	85												
17	8	10	18	9	10	*1820.52619	1820.52368	251	14	4	10	15	5	10	*1833.43988	1833.44171	-184												
17	7	10	18	8	10	*1820.52619	1820.52368	251	14	5	10	15	6	10	*1833.43988	1833.44171	-184												
17	7	11	18	8	11	1820.82009	1820.82024	-15	14	4	11	15	5	11	1833.76263	1833.76188	75												
17	6	11	18	7	11	1820.82009	1820.82024	-15	14	3	11	15	4	11	1833.76263	1833.76188	75												
17	6	12	18	7	12	*1821.16415	1821.16032	382	14	3	12	15	4	12	1834.12191	1834.12170	21												
17	5	12	18	6	12	*1821.16415	1821.16032	382	14	2	12	15	3	12	1834.12191	1834.12170	21												
16	16	1	17	17	1	*1821.29105	1821.28331	774	14	1	13	15	2	13	*1834.52236	1834.52043	193												
16	16	0	17	17	0	*1821.29105	1821.28331	774	14	2	13	15	3	13	*1834.52236	1834.52043	193												
16	15	2	17	16	2	1821.84558	1821.84580	-22	13	13	1	14	14	1	1834.57381	1834.57326	55												
16	15	1	17	16	1	1821.84558	1821.84580	-22	13	13	0	14	14	0	1834.57381	1834.57326	55												
16	14	3	17	15	3	1822.45717	1822.45696	-21	14	1	14	15	2	14	1834.95670	1834.95810	-141												
16	14	2	17	15	2	1822.46690	1822.46702	-12	14	0	14	15	1	14	1834.95670	1834.95810	-141												
16	13	3	17	14	3	1823.17925	1823.17883	42	13	12	2	14	13	2	1835.15411	1835.15482	-71												
16	12	5	17	13	5	1823.63276	1823.63140	136	13	12	1	14	13	1	1835.16037	1835.15940	97												
16	11	6	17	12	6	1823.99577	1823.99596	-19	13	11	3	14	12	3	1835.75209	1835.75213	-4												
16	9	7	17	10	7	1824.29758	1824.29626	132	13	11	2	14	12	2	1835.81244	1835.81313	-69												
16	9	8	17	10	8	1824.37716	1824.37575	141	13	10	4	14	11	4	1836.28113	1836.28116	-3												
16	8	8	17	9	8	1824.38735	1824.38709	26	13	10	3	14	11	3	1836.58121	1836.58184	-62												
16	11	5	17	12	5	1824.53059	1824.52994	65	13	9	5	14	10	5	1836.63311	1836.63257	54												
16	8	9	17	9	9	*1824.58932	1824.58742	190	13	8	6	14	9	6	1836.82467	1836.82562	-95												
16	7	9	17	8	9	*1824.58932	1824.58742	190	13	7	6	14	8	6	1836.90287	1836.90209	78												
16	7	10	17	8	10	1824.84835	1824.84724	111	13	7	7	14	8	7	1836.98358	1836.98471	-113												
16	6	10	17	7	10	1824.84835	1824.84724	111	13	6	7	14	7	7	1836.99321	1836.99261	60												
16	5	12	17	6	12	*1825.50292	1825.50017	275	13	8	5	14	9	5	1837.02327	1837.02322	5												
16	4	12	17	5	12	*1825.50292	1825.50017	275	13	9	4	14	10	4	1837.07807	1837.07827	-19												
15	15	1	16	16	1	*1825.73948	1825.73419	529	13	5	9	14	6	9	1837.42414	1837.42408	6												
15	15	0	16	16	0	*1825.73948	1825.73419	529	13	4	9	14	5	9	1837.42414	1837.42408	6												
16	4	13	17	5	13	1825.88719	1825.88779	-61	13	4	10	14	5	10	*1837.70374	1837.71008	-633												
16	3	13	17	4	13	1825.88719	1825.88779	-61	13	3	10	14	4	10	*1837.70374	1837.71008	-633												
15	14	2	16	15	2	1826.30598	1826.30592	6	13	3	11	14	4	11	1838.03657	1838.03626	32												
15	14	1	16	15	1	1826.30598	1826.30592	6	13	2	11	14	3	11	1838.03657	1838.03626	32												
16	2	15	17	3	15	1826.78095	1826.78201	-106	13	2	12	14	3	12	1838.40063	1838.40129	-66												
16	1	15	17	2	15	1826.78095	1826.78201	-106	13	1	12	14	2	12	1838.40063	1838.40129	-66												
15	13	2	16	14	2	1826.93596	1826.93568	28	13	0	13	14	1	13	1838.80477	1838.80480	-3												
16	0	16	17	1	16	*1827.28357	1827.28940	-583	13	1	13	14	2	13	1838.80477	1838.80480	-3												
16	1	16	17	2	16	*1827.28357	1827.28940	-583	12	12	0	13	13	0	1838.95943	1838.95913	30												
15	12	4	16	13	4	1827.52057	1827.52141	-84	12	12	1	13	13	1	1838.95943	1838.95913	30												
15	12	3	16	13	3	1827.67509	1827.67481	28	12	11	2	13	12	2	1839.54104	1839.54162	-58												
15	10	6	16	11	6	1828.30522	1828.30604	-82	12	11	1	13	12	1	1839.55059	1839.55064	-5												
15	11	4	16	12	4	1828.46096	1828.46195	-99	12	10	3	13	11	3	*1840.11952	1840.12153	-201												
15	9	7	16	10	7	1828.48391	1828.48344	47	12	10	2	13	11	2	1840.22378	1840.22292	86												
15	8	7	16	9	7	1828.52724	1828.52808	-84	12	9	4	13	10	4	1840.59542	1840.59593	-51												
15	9	6	16	10	6	1828.57970	1828.57897	72	12	8	5	13	9	5	1840.88070	1840.88075	-5												
15	8	8	16	9	8	1828.66073	1828.66085	-11	12	9	3	13	10	3	1840.95069	1840.95223	-154												
15	7	8	16	8	8	1828.66478	1828.66533	-56	12	7	6	13	8	6	1841.04316	1841.04456	-140												
15	7	9	16	8	9	1828.88286	1828.88376	-89	12	6	6	13	7	6	1841.07957	1841.07949	7												
15	6	9	16	7	9	1828.88286	1828.88376	-89	12	7	5	13	8	5	1841.11910	1841.12018	-109												
15	5	11	16	6	11	1829.46747	1829.46700	46	12	6	7	13	7	7	1841.20730	1841.20752	-22												
15	4	11	16	5	11	1829.46747	1829.46700	46	12	5	7	13	6	7	1841.21025	1841.21041	-16												
14	13	2	15	14	2	1830.74355	1830.74337	18	12	8	4	13	9	4	1841.25878	1841.25929	-51												
14	13	1	15	14	1	1830.74355	1830.74337	18	12	5	8	13	6	8	1841.41472	1841.41407	66												
14	12	3	15	13	3	1831.34950	1831.34939	11	12	4	8	13	5	8	1841.41472	1841.41407	66												
14	12	2	15	13	2	1831.38476	1831.38407	69	12	4	9	13	5	9	1841.66538	1841.66524	14												
14	11	4	15	12	4	1831.92189	1831.92207	-18	12	3	9	13	4	9	1841.66538	1841.66524	14												
14	11	3	15	12	3	1832.14732	1832.14824	-92	12	2	10	13	3	10	*1841.96057	1841.95763	294												
14	10	5	15	11	5	1832.34284	1832.34338	-53	12	3	10	13	4	10	*1841.96057	1841.95763	294												
14	9	6	15	10	6	1832.58112	1832.58091	21	12	2	11	13	3	11	1842.28935	1842.28907	28												
14	8	6	15	9	6	1832.73301	1832.73278	22	12	1	11	13	2	11	1842.28935	1842.28907	28												
14	8	7	15	9	7	1832.74361	1832.74350	11	12	1	12	13	2	12	1842.65895	1842.65875	20												
14	7	7	15	8	7	1832.76192	1832.76312	-120	12	0	12	13	1	12	1842.65895	1842.65875	20												
14	10	4	15	11	4	1832.81528	1832.81534	-6	11	11	0	12	12	0	1843.32163	1843.32100	62												
14	9	5	15	10	5	1832.91213	1832.91152	61	11	11	1	12	12	1	1843.32163	1843.32100	62												
14	7	8	15	8	8	1832.93068	1832.93040	28	11	10	2	12	11	2	1843.90001	1843.90079	-78												

(I) Valeurs de J, Ka et Kc pour le niveau supérieur de la transition.

(II) Valeurs de J, Ka et Kc pour le niveau inférieur de la transition.

(III) Nombre d'ondes observées (en cm^{-1}). Les nombres d'onde observés identifiés par un * dans la colonne (III) n'ont pas été inclus dans l'ajustement.

(IV) Nombre d'ondes calculé (en cm^{-1}).

(V) Observé - Valeurs calculées (en 10^{-5}cm^{-1}).

Continue

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)			(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)		
11	10	1	12	11	1	1843.91858	1843.91809	49	8	1	8	9	2	8	1858.13448	1858.13474	-27												
11	9	2	12	10	2	1844.60967	1844.60940	26	7	7	1	8	8	1	1860.49992	1860.49981	10												
11	8	4	12	9	4	1844.86474	1844.86521	-47	7	7	0	8	8	0	1860.51188	1860.51112	77												
11	7	5	12	8	5	1845.09107	1845.09220	-113	7	6	2	8	7	2	1861.00703	1861.00687	16												
11	6	5	12	7	5	1845.22265	1845.22255	10	7	6	1	8	7	1	1861.14137	1861.14150	-12												
11	8	3	12	9	3	1845.24224	1845.24252	-28	7	5	3	8	6	3	1861.35193	1861.35118	76												
11	6	6	12	7	6	1845.24224	1845.24081	143	7	4	4	8	5	4	1861.52455	1861.52456	-1												
11	5	6	12	6	6	1845.25629	1845.25523	107	7	3	4	8	4	4	1861.57560	1861.57551	10												
11	7	4	12	8	4	1845.37338	1845.37279	60	7	5	2	8	6	2	1861.62366	1861.62389	-23												
11	4	7	12	5	7	1845.41244	1845.41195	49	7	3	5	8	4	5	1861.65337	1861.65327	11												
11	5	7	12	6	7	1845.41244	1845.41195	49	7	2	5	8	3	5	1861.65651	1861.65647	3												
11	4	8	12	5	8	1845.62756	1845.62714	43	7	4	3	8	5	3	1861.66301	1861.66301	1												
11	3	8	12	4	8	1845.62756	1845.62714	43	7	1	6	8	2	6	1861.81455	1861.81434	22												
11	3	9	12	4	9	1845.88456	1845.88537	-80	7	2	6	8	3	6	1861.81455	1861.81434	22												
11	2	9	12	3	9	1845.88456	1845.88537	-80	7	0	7	8	1	7	1862.01624	1862.01608	16												
11	2	10	12	3	10	1846.18401	1846.18324	77	7	1	7	8	2	7	1862.01624	1862.01608	16												
11	1	10	12	2	10	1846.18401	1846.18324	77	6	6	1	7	7	1	1864.71979	1864.71922	57												
11	0	11	12	1	11	1846.51930	1846.51930	-1	6	6	0	7	7	0	1864.74035	1864.74088	-54												
11	1	11	12	2	11	1846.51930	1846.51930	-1	6	5	2	7	6	2	1865.18448	1865.18429	18												
10	10	1	11	11	1	1847.65823	1847.65772	50	6	5	1	7	6	1	1865.35590	1865.35634	-43												
10	10	0	11	11	0	1847.65823	1847.65772	50	6	4	3	7	5	3	1865.46407	1865.46386	21												
10	9	2	11	10	2	1848.22993	1848.23000	-7	6	3	4	7	4	4	1865.60368	1865.60359	10												
10	9	1	11	10	1	1848.26126	1848.26204	-78	6	2	4	7	3	4	1865.62438	1865.62312	126												
10	8	3	11	9	3	1848.74511	1848.74515	-4	6	3	3	7	4	3	1865.65078	1865.65028	49												
10	8	2	11	9	2	1848.95939	1848.96019	-80	6	4	2	7	5	2	1865.69805	1865.69842	-36												
10	7	4	11	8	4	1849.08815	1849.08971	-155	6	2	5	7	3	5	1865.73361	1865.73402	-41												
10	6	5	11	7	5	1849.27192	1849.27162	30	6	1	5	7	2	5	1865.73361	1865.73402	-41												
10	5	5	11	6	5	1849.33516	1849.33468	48	6	1	6	7	2	6	1865.90082	1865.90140	-57												
10	5	6	11	6	6	1849.41638	1849.41598	41	6	0	6	7	1	6	1865.90082	1865.90140	-57												
10	4	6	11	5	6	1849.42165	1849.42129	36	5	5	1	6	6	1	1868.90414	1868.90384	31												
10	6	4	11	7	4	1849.43927	1849.43933	-6	5	5	0	6	6	0	1868.94291	1868.94260	31												
10	7	3	11	8	3	1849.44966	1849.44970	-4	5	4	1	6	5	1	1869.50723	1869.50585	138												
10	3	7	11	4	7	1849.59546	1849.59571	-26	5	3	3	6	4	3	1869.53616	1869.53575	41												
10	4	7	11	5	7	1849.59546	1849.59571	-26	5	2	3	6	3	3	1869.62867	1869.62896	-29												
10	3	8	11	4	8	1849.81975	1849.81912	64	5	2	4	6	3	4	1869.65655	1869.65549	106												
10	2	8	11	3	8	1849.81975	1849.81912	64	5	1	4	6	2	4	1869.66157	1869.66153	3												
10	2	9	11	3	9	1850.08361	1850.08328	33	5	3	2	6	4	2	1869.71160	1869.71132	28												
10	1	9	11	2	9	1850.08361	1850.08328	33	5	0	5	6	1	5	1869.78993	1869.79030	-37												
9	9	1	10	10	1	1851.96636	1851.96676	-40	5	1	5	6	2	5	1869.78993	1869.79030	-37												
9	9	0	10	10	0	1851.96956	1851.96951	5	4	4	1	5	5	1	1873.05053	1873.05062	-9												
9	8	2	10	9	2	1852.52564	1852.52637	-73	4	4	0	5	5	0	1873.11348	1873.11286	62												
9	8	1	10	9	1	1852.58290	1852.58273	17	4	3	2	5	4	2	1873.40219	1873.40344	-126												
9	7	3	10	8	3	1852.99214	1852.99266	-52	4	2	3	5	3	3	1873.57019	1873.57069	-50												
9	7	2	10	8	2	1853.25639	1853.25544	94	4	3	1	5	4	1	1873.58357	1873.58318	39												
9	6	4	10	7	4	1853.27175	1853.27183	-8	4	1	3	5	2	3	1873.60741	1873.60805	-65												
9	5	5	10	6	5	1853.42372	1853.42317	55	4	2	2	5	3	2	1873.67352	1873.67350	2												
9	4	5	10	5	5	1853.45002	1853.45019	-17	4	1	4	5	2	4	1873.68231	1873.68252	-20												
9	5	4	10	6	4	1853.48482	1853.48416	66	4	0	4	5	1	4	1873.68231	1873.68252	-20												
9	4	6	10	5	6	1853.57022	1853.57126	-104	3	3	1	4	4	1	1877.15639	1877.15664	-25												
9	3	6	10	4	6	1853.57022	1853.57126	-104	3	3	0	4	4	0	1877.24183	1877.24144	39												
9	6	3	10	7	3	1853.58082	1853.58073	9	3	2	2	4	3	2	1877.44402	1877.44529	-127												
9	3	7	10	4	7	1853.75786	1853.75861	-75	3	1	3	4	2	3	*1877.57013	1877.57269	-255												
9	2	7	10	3	7	1853.75786	1853.75861	-75	3	0	3	4	1	3	1877.58300	1877.58370	-70												
9	2	8	10	3	8	1853.98910	1853.98873	37	3	2	1	4	3	1	1877.59373	1877.59377	-4												
9	1	8	10	2	8	1853.98910	1853.98873	37	3	1	2	4	2	2	1877.60092	1877.60029	63												
9	0	9	10	1	9	1854.25746	1854.25784	-38	17	16	1	17	17	1	*1881.04241	1881.03265	976												
9	1	9	10	2	9	1854.25746	1854.25784	-38	2	2	1	3	3	1	*1881.22217	1881.21979	238												
8	8	1	9	9	1	1856.24840	1856.24827	13	2	2	0	3	3	0	1881.31198	1881.31200	-2												
8	8	0	9	9	0	1856.25460	1856.25391	68	2	1	2	3	2	2	1881.44474	1881.44403	71												
8	7	2	9	8	2	1856.78643	1856.78651	-9	2	0	2	3	1	2	1881.51194	1881.51129	66												
8	7	1	9	8	1	1856.87791	1856.87841	-50	2	1	1	3	2	1	1881.54761	1881.54808	-47												
8	6	3	9	7	3	1857.19555	1857.19466	89	17	15	2	17	16	2	*1881.56999	1881.56718	281												
8	5	4	9	6	4	1857.41543	1857.41534	10	16	13	3	16	14	3	1883.42561	1883.42681	-119												
8	6	2	9	7	2	1857.47861	1857.47820	41	15	13	2	15	14	2	1883.51153	1883.51074	79												
8	4	4	9	5	4	1857.52747	1857.52746	2	17	13	4	17	14	4	*1883.69704	1883.69914	-210												
8	4	5	9	5	5	1857.54861	1857.54987	-126	14	12	2	14	13	2	1884.46724	1884.46680	44												
8	3	5	9	4	5	1857.55967	1857.55998	-31	15	12	3	15	13	3	1884.52588	1884.52485	103												
8	5	3	9	6	3	1857.64697	1857.64676	21	13	12	1	13	13	1	1884.62704	1884.62775	-71												
8	3	6	9	4	6	1857.70360	1857.70376	-16	16	12	4	16	13	4	1885.00826	1885.00882	-56												
8	2	6	9	3	6	1857.70360	1857.70376	-16	13	11	2	13	12	2	1885.41906	1885.41885	21												
8	2	7	9	3	7	1857.89885	1857.89919	-34	12	11	1	12	12	1	1885.48823	1885.48843	-20												
8	1	7	9	2	7	1857.89885	1857.89919	-34	17	12	5	17	13	5	1885.87216	1885.87229	-12												
8	0	8	9	1	8	1858.13448	1858.13474	-27	11	10	1	11	11	1	1886.33256	1886.33379	-123												

Continue

(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)	(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)								
12	10	2	12	11	2	1886.37412	1886.37406	6	15	4	12	15	3	12	1891.53167	1891.53178	-11
13	10	3	13	11	3	1886.78084	1886.78155	-71	15	3	12	15	4	12	1891.53167	1891.53178	-11
10	9	1	10	10	1	1887.16541	1887.16605	-64	11	5	6	11	6	6	1891.54840	1891.54954	-115
16	11	5	16	12	5	1887.19366	1887.19238	128	12	5	8	12	4	8	1891.61384	1891.61383	1
11	9	2	11	10	2	1887.33857	1887.33780	77	12	4	8	12	5	8	1891.61384	1891.61383	1
14	10	4	14	11	4	1887.55828	1887.55887	-60	14	4	11	14	3	11	1891.65207	1891.65200	7
17	11	6	17	12	6	1887.86282	1887.86276	5	14	3	11	14	4	11	1891.65207	1891.65200	7
10	8	2	10	9	2	*1888.30801	1888.30588	214	10	5	5	10	6	5	1891.70246	1891.70247	-2
13	9	4	13	10	4	*1888.70762	1888.70507	255	9	5	4	9	6	4	1891.74887	1891.74766	121
16	10	6	16	11	6	1888.79509	1888.79593	-84	13	3	10	13	4	10	*1891.76566	1891.77166	-600
17	10	7	17	11	7	1888.79509	1888.79593	-84	13	4	10	13	3	10	*1891.76566	1891.77166	-600
11	8	3	11	9	3	*1888.97861	1888.97686	175	11	4	7	11	5	7	1891.76566	1891.76539	27
16	9	7	16	10	7	1889.42367	1889.42357	10	11	5	7	11	4	7	1891.76566	1891.76539	27
12	8	4	12	9	4	1889.71282	1889.71191	91	17	2	15	17	3	15	1891.77063	1891.77090	-27
16	9	8	16	8	8	1889.72819	1889.72851	-32	17	3	15	17	2	15	1891.77063	1891.77090	-27
17	7	10	17	8	10	1889.73402	1889.73475	-73	10	6	5	10	5	5	1891.78116	1891.78042	74
17	8	10	17	7	10	1889.73402	1889.73475	-73	4	3	1	4	4	1	1891.79407	1891.79543	-136
10	7	3	10	8	3	1889.95654	1889.95489	166	16	3	14	16	2	14	1891.85743	1891.85759	-16
17	7	11	17	6	11	1890.06962	1890.06946	16	16	2	14	16	3	14	1891.85743	1891.85759	-16
17	6	11	17	7	11	1890.06962	1890.06946	16	12	3	9	12	4	9	1891.89097	1891.89075	21
15	10	6	15	9	6	1890.07913	1890.07929	-16	12	4	9	12	3	9	1891.89097	1891.89075	21
13	8	5	13	9	5	1890.14422	1890.14431	-9	10	5	6	10	4	6	1891.91744	1891.91871	-127
8	6	2	8	7	2	1890.15876	1890.15836	40	15	2	13	15	3	13	1891.94447	1891.94428	19
14	8	6	14	9	6	1890.17128	1890.17101	26	15	3	13	15	2	13	1891.94447	1891.94428	19
15	7	8	15	8	8	1890.23887	1890.23844	44	11	8	4	11	7	4	1891.94965	1891.95022	-57
14	9	6	14	8	6	1890.41926	1890.41887	39	10	7	4	10	6	4	1891.98088	1891.98110	-22
14	7	7	14	8	7	1890.48139	1890.48161	-22	11	4	8	11	3	8	1892.00971	1892.00930	40
14	8	7	14	7	7	1890.50487	1890.50419	69	11	3	8	11	4	8	1892.00971	1892.00930	40
15	7	9	15	6	9	1890.50944	1890.50998	-54	12	9	4	12	8	4	1892.02653	1892.02754	-101
15	6	9	15	7	9	1890.50944	1890.50998	-54	14	3	12	14	2	12	1892.03111	1892.03077	34
16	6	11	16	5	11	1890.62777	1890.62791	-14	14	2	12	14	3	12	1892.03111	1892.03077	34
16	5	11	16	6	11	1890.62777	1890.62791	-14	9	4	5	9	5	5	1892.05389	1892.05389	0
13	7	6	13	8	6	1890.69105	1890.69210	-104	7	4	3	7	5	3	1892.05871	1892.05807	64
14	6	8	14	7	8	1890.72900	1890.72910	-9	9	5	5	9	4	5	1892.08104	1892.08102	2
14	7	8	14	6	8	1890.72900	1890.72910	-9	9	6	4	9	5	4	1892.10601	1892.10587	15
12	7	5	12	8	5	1890.78009	1890.77996	12	13	3	11	13	2	11	1892.11669	1892.11695	-25
13	8	6	13	7	6	1890.79912	1890.79850	62	13	2	11	13	3	11	1892.11669	1892.11695	-25
9	6	3	9	7	3	1890.80715	1890.80662	53	10	3	7	10	4	7	1892.12746	1892.12736	10
15	5	10	15	6	10	1890.81433	1890.81502	-69	10	4	7	10	3	7	1892.12746	1892.12736	10
15	6	10	15	5	10	1890.81433	1890.81502	-69	8	4	4	8	5	4	1892.14415	1892.14454	-38
17	5	13	17	4	13	1890.84623	1890.84656	-34	12	2	10	12	3	10	*1892.20563	1892.20274	289
17	4	13	17	5	13	1890.84623	1890.84656	-34	12	3	10	12	2	10	*1892.20563	1892.20274	289
14	10	5	14	9	5	*1890.93175	1890.93349	-174	5	3	2	5	4	2	*1892.22713	1892.22950	-237
13	6	7	13	7	7	1890.94260	1890.94378	-118	9	4	6	9	3	6	1892.24466	1892.24501	-35
13	7	7	13	6	7	1890.95237	1890.95163	75	9	3	6	9	4	6	1892.24466	1892.24501	-35
15	11	5	15	10	5	1890.97009	1890.97094	-84	11	3	9	11	2	9	1892.28913	1892.28942	-28
7	5	2	7	6	2	1890.97009	1890.97094	-84	17	2	16	17	1	16	1892.28913	1892.28876	37
14	6	9	14	5	9	1891.00175	1891.00138	37	11	2	9	11	3	9	1892.28913	1892.28974	-61
16	5	12	16	4	12	1891.00175	1891.00135	41	17	1	16	17	2	16	1892.28913	1892.28974	-61
14	5	9	14	6	9	1891.00175	1891.00137	38	8	5	4	8	4	4	1892.29258	1892.29256	2
16	4	12	16	5	12	1891.00175	1891.00137	38	16	2	15	16	1	15	1892.34225	1892.34200	25
13	9	5	13	8	5	1891.02170	1891.02228	-58	16	1	15	16	2	15	1892.34225	1892.34200	25
16	12	5	16	11	5	*1891.12264	1891.12537	-273	8	3	5	8	4	5	1892.35799	1892.35836	-38
5	4	1	5	5	1	1891.14305	1891.14364	-59	8	4	5	8	3	5	1892.36664	1892.36636	27
12	6	6	12	7	6	1891.14669	1891.14544	126	10	2	8	10	3	8	1892.37322	1892.37304	17
15	4	11	15	5	11	1891.15522	1891.15554	-32	10	3	8	10	2	8	1892.37322	1892.37304	17
15	5	11	15	4	11	1891.15522	1891.15554	-32	15	1	14	15	2	14	1892.39365	1892.39382	-17
13	6	8	13	5	8	1891.18649	1891.18699	-50	15	2	14	15	1	14	1892.39365	1892.39382	-17
12	7	6	12	6	6	1891.18649	1891.18688	-39	14	1	13	14	2	13	1892.44578	1892.44590	-11
13	5	8	13	6	8	1891.18649	1891.18688	-39	14	2	13	14	1	13	1892.44578	1892.44590	-11
12	8	5	12	7	5	1891.21874	1891.21749	125	7	3	4	7	4	4	1892.45339	1892.45375	-36
10	6	4	10	7	4	1891.22803	1891.22846	-43	9	2	7	9	3	7	1892.45761	1892.45759	3
11	6	5	11	7	5	1891.28715	1891.28709	6	9	3	7	9	2	7	1892.45761	1892.45759	3
14	4	10	14	5	10	1891.30739	1891.30898	-159	13	1	12	13	2	12	1892.49827	1892.49803	24
14	5	10	14	4	10	1891.30739	1891.30898	-159	13	2	12	13	1	12	1892.49827	1892.49803	24
12	5	7	12	6	7	1891.37135	1891.37202	-67	7	4	4	7	3	4	1892.50546	1892.50550	-3
12	6	7	12	5	7	1891.37135	1891.37202	-67	8	2	6	8	3	6	1892.54023	1892.54177	-153
16	3	13	16	4	13	1891.41094	1891.41105	-11	8	3	6	8	2	6	1892.54023	1892.54177	-153
16	4	13	16	3	13	1891.41094	1891.41105	-11	12	1	11	12	2	11	1892.55016	1892.55006	10
13	4	9	13	5	9	1891.46237	1891.46172	65	12	2	11	12	1	11	1892.55016	1892.55006	10
13	5	9	13	4	9	1891.46237	1891.46172	65	11	2	10	11	1	10	1892.60269	1892.60188	81
11	7	5	11	6	5	1891.48338	1891.48286	52	11	1	10	11	2	10	1892.60269	1892.60188	81
8	5	3	8	6	3	1891.51073	1891.51031	42	7	2	5	7	3	5	1892.62496	1892.62472	24

Continue

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)			(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)		
7	3	5	7	2	5	1892.62714	1892.62661	54	12	11	2	12	10	2	1894.83165	1894.83115	50												
10	2	9	10	1	9	1892.65343	1892.65345	-2	14	13	2	14	12	2	1894.87079	1894.87234	-156												
10	1	9	10	2	9	1892.65343	1892.65345	-2	13	12	2	13	11	2	1894.88899	1894.88987	-88												
7	5	3	7	4	3	1892.68287	1892.68189	97	15	15	1	15	14	1	1894.99365	1894.99502	-137												
6	2	4	6	3	4	1892.70420	1892.70341	79	9	9	1	9	8	1	1895.21368	1895.21283	84												
9	1	8	9	2	8	1892.70420	1892.70407	13	10	10	1	10	9	1	1895.32493	1895.32553	-60												
9	2	8	9	1	8	1892.70420	1892.70407	13	11	11	1	11	10	1	1895.37424	1895.37407	17												
8	6	3	8	5	3	1892.71456	1892.71310	146	1	1	0	0	0	0	1896.99472	1896.99389	83												
6	4	3	6	3	3	1892.73377	1892.73441	-65	2	1	1	1	0	1	*1900.72949	1900.73143	-194												
15	12	4	15	11	4	1892.73377	1892.73441	-65	2	2	0	1	1	0	1900.83056	1900.83053	3												
5	2	3	5	3	3	1892.74372	1892.74461	-89	2	2	1	1	1	1	1900.93036	1900.93057	-21												
2	1	1	2	2	1	1892.74372	1892.74461	-89	3	2	1	2	1	1	1904.48159	1904.48187	-28												
8	1	7	8	2	7	1892.75568	1892.75572	-4	3	1	2	2	0	2	1904.60392	1904.60482	-90												
8	2	7	8	1	7	1892.75568	1892.75572	-4	3	3	0	2	2	0	1904.66276	1904.66164	112												
7	1	6	7	2	6	1892.80623	1892.80644	-21	3	2	2	2	1	2	1904.66799	1904.66751	48												
7	2	6	7	1	6	1892.80623	1892.80644	-21	3	3	1	2	2	1	1904.77278	1904.77224	53												
9	7	3	9	6	3	*1892.83698	1892.84377	-679	4	3	1	3	2	1	1908.21322	1908.21469	-146												
17	1	17	17	0	17	*1892.83698	1892.84730	-1032	4	2	2	3	1	2	1908.29116	1908.29084	32												
17	0	17	17	1	17	*1892.83698	1892.84730	-1032	4	3	2	3	2	2	1908.43169	1908.43162	7												
5	3	3	5	2	3	1892.84175	1892.84128	46	4	1	3	3	0	3	1908.46416	1908.46362	54												
6	1	5	6	2	5	1892.85563	1892.85692	-129	4	2	3	3	1	3	1908.47356	1908.47389	-33												
6	2	5	6	1	5	1892.85563	1892.85692	-129	4	4	0	3	3	0	1908.48868	1908.48886	-17												
16	0	16	16	1	16	1892.86627	1892.86550	77	4	4	1	3	3	1	*1908.58333	1908.58504	-171												
16	1	16	16	0	16	1892.86627	1892.86550	77	5	3	2	4	2	2	1911.93186	1911.93237	-50												
15	1	15	15	0	15	1892.88091	1892.88144	-53	5	4	1	4	3	1	1911.93668	1911.93748	-80												
15	0	15	15	1	15	1892.88091	1892.88144	-53	5	2	3	4	1	3	1912.14425	1912.14394	31												
14	0	14	14	1	14	1892.89791	1892.89824	-34	5	4	2	4	3	2	1912.17057	1912.17038	19												
14	1	14	14	0	14	1892.89791	1892.89824	-34	5	3	3	4	2	3	1912.17888	1912.17816	71												
5	2	4	5	1	4	1892.90707	1892.90721	-14	5	2	4	4	1	4	1912.29675	1912.29742	-67												
5	1	4	5	2	4	1892.90707	1892.90721	-14	5	1	4	4	0	4	1912.29675	1912.29742	-67												
13	0	13	13	1	13	1892.91552	1892.91559	-8	5	5	0	4	4	0	1912.29968	1912.29939	28												
13	1	13	13	0	13	1892.91552	1892.91559	-8	5	5	1	4	4	1	1912.36676	1912.36779	-103												
3	1	2	3	2	2	1892.92472	1892.92560	-88	6	4	2	5	3	2	1915.54859	1915.54881	-23												
12	1	12	12	0	12	1892.93339	1892.93325	14	6	5	1	5	4	1	1915.65828	1915.65795	32												
12	0	12	12	1	12	1892.93339	1892.93325	14	6	3	3	5	2	3	1915.76599	1915.76589	10												
11	0	11	11	1	11	1892.95124	1892.95104	20	6	4	3	5	3	3	1915.85062	1915.84966	95												
11	1	11	11	0	11	1892.95124	1892.95104	20	6	5	2	5	4	2	1915.88486	1915.88462	24												
10	0	10	10	1	10	1892.96947	1892.96882	65	6	2	4	5	1	4	1915.95440	1915.95529	-89												
10	1	10	10	0	10	1892.96947	1892.96933	15	6	3	4	5	2	4	1915.96088	1915.96083	5												
4	2	3	4	1	3	1892.96947	1892.96933	15	6	6	0	5	5	0	1916.07533	1916.07613	-80												
9	1	9	9	0	9	1892.98655	1892.98651	3	6	6	1	5	5	1	1916.11804	1916.11787	17												
9	0	9	9	1	9	1892.98655	1892.98651	3	6	2	5	5	1	5	1916.12256	1916.12240	16												
16	13	4	16	12	4	1892.99754	1892.99752	2	6	1	5	5	0	5	1916.12256	1916.12240	16												
8	0	8	8	1	8	1893.00381	1893.00407	-26	7	5	2	6	4	2	1919.15439	1919.15381	58												
8	1	8	8	0	8	1893.00381	1893.00407	-26	7	4	3	6	3	3	1919.32797	1919.32804	-6												
7	0	7	7	1	7	1893.02138	1893.02147	-9	7	6	1	6	5	1	1919.37852	1919.37834	17												
7	1	7	7	0	7	1893.02138	1893.02147	-9	7	5	3	6	4	3	1919.49217	1919.49196	21												
6	0	6	6	1	6	1893.03864	1893.03870	-6	7	3	4	6	2	4	1919.56686	1919.56680	6												
6	1	6	6	0	6	1893.03864	1893.03870	-6	7	6	2	6	5	2	1919.57372	1919.57405	-33												
5	1	5	5	0	5	1893.05550	1893.05578	-28	7	4	4	6	3	4	1919.58443	1919.58445	-3												
5	0	5	5	1	5	1893.05550	1893.05578	-28	7	3	5	6	2	5	1919.74838	1919.74856	-18												
4	0	4	4	1	4	1893.07282	1893.07273	9	7	2	5	6	1	5	1919.74838	1919.74856	-18												
4	1	4	4	0	4	1893.07282	1893.07273	9	7	7	0	6	6	0	1919.80933	1919.80909	23												
3	2	2	3	1	2	1893.08863	1893.08858	5	7	7	1	6	6	1	1919.83210	1919.83208	3												
3	0	3	3	1	3	1893.08863	1893.08899	-36	7	2	6	6	1	6	1919.94486	1919.94374	111												
2	0	2	2	1	2	1893.08863	1893.08899	-36	7	1	6	6	0	6	1919.94486	1919.94374	111												
3	1	3	3	0	3	1893.09095	1893.09137	-42	8	6	2	7	5	2	1922.75555	1922.75561	-6												
4	3	2	4	2	2	1893.10735	1893.10631	103	8	5	3	7	4	3	1922.84118	1922.84102	15												
2	1	2	2	0	2	1893.12340	1893.12325	14	8	7	1	7	6	1	1923.08871	1923.08916	-46												
17	14	4	17	13	4	1893.19155	1893.19248	-93	8	6	3	7	5	3	*1923.10445	1923.10816	-372												
11	9	3	11	8	3	1893.30681	1893.30723	-42	8	4	4	7	3	4	1923.12585	1923.12548	37												
6	5	2	6	4	2	1893.36611	1893.36644	-33	8	5	4	7	4	4	1923.17078	1923.17080	-2												
2	2	1	2	1	1	1893.36884	1893.36731	153	8	7	2	7	6	2	1923.23742	1923.23706	37												
3	3	1	3	2	1	1893.57538	1893.57589	-52	8	3	5	7	2	5	1923.33244	1923.33170	74												
13	11	3	13	10	3	1893.86134	1893.86095	39	8	4	5	7	3	5	1923.33542	1923.33461	82												
8	7	2	8	6	2	1893.88836	1893.88928	-93	8	8	0	7	7	0	1923.49563	1923.49550	13												
17	15	3	17	14	3	1894.12279	1894.12282	-2	8	8	1	7	7	1	1923.50821	1923.50735	85												
5	5	1	5	4	1	1894.15653	1894.15554	98	8	2	6	7	1	6	1923.53347	1923.53387	-40												
9	8	2	9	7	2	1894.19161	1894.19060	101	8	3	6	7	2	6	1923.53347	1923.53387	-40												
10	9	2	10	8	2	*1894.46890	1894.47123	-233	8	1	7	7	0	7	1923.75991	1923.76111	-120												
17	17	1	17	16	1	*1894.46890	1894.47123	-233	8	2	7	7	1	7	1923.75991	1923.76111	-120												
16	16	1	16	15	1	1894.76118	1894.76202	-84	9	6	3	8	5	3	1926.32603	1926.32506	96												
15	14	2	15	13	2	1894.78585	1894.78670	-85	9	7	2	8	6	2	1926.36056	1926.36033	23												

Continue

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)			(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)		
9	5	4	8	4	4	1926.62371	1926.62489	-118	12	3	10	11	2	10	*1938.62430	1938.62138	292												
9	7	3	8	6	3	1926.70076	1926.70025	51	12	1	11	11	0	11	1938.98023	1938.98179	-156												
9	6	4	8	5	4	1926.72286	1926.72295	-8	12	2	11	11	1	11	1938.98023	1938.98179	-156												
9	8	1	8	7	1	1926.77215	1926.77221	-6	13	9	4	12	8	4	1940.13692	1940.13668	24												
9	8	2	8	7	2	1926.87062	1926.87057	5	13	10	3	12	9	3	1940.25535	1940.25446	90												
9	4	5	8	3	5	1926.87062	1926.87057	5	13	8	5	12	7	5	1940.48240	1940.48105	135												
9	5	5	8	4	5	1926.87845	1926.87941	-96	13	10	4	12	9	4	1940.65607	1940.65719	-112												
9	3	6	8	2	6	1927.08239	1927.08302	-63	13	9	5	12	8	5	1940.68249	1940.68206	43												
9	4	6	8	3	6	1927.08239	1927.08302	-63	13	11	2	12	10	2	1940.70818	1940.70837	-20												
9	9	0	8	8	0	1927.13517	1927.13538	-21	13	11	3	12	10	3	1940.81476	1940.81414	63												
9	9	1	8	8	1	1927.14142	1927.14123	18	13	7	6	12	6	6	1940.83316	1940.83435	-120												
9	2	7	8	1	7	1927.31420	1927.31412	9	13	8	6	12	7	6	1940.86285	1940.86445	-160												
9	3	7	8	2	7	1927.31420	1927.31412	9	13	12	1	12	11	1	1941.03143	1941.03187	-44												
10	7	3	9	6	3	1929.79865	1929.79893	-28	13	12	2	12	11	2	1941.04101	1941.04101	0												
10	8	2	9	7	2	1929.97030	1929.97011	19	13	6	7	12	5	7	1941.11146	1941.11076	70												
10	6	4	9	5	4	1930.06234	1930.06250	-16	13	7	7	12	6	7	1941.11146	1941.11076	70												
10	7	4	9	6	4	1930.24533	1930.24461	72	13	13	1	12	12	1	1941.23316	1941.23319	-3												
10	8	3	9	7	3	1930.26865	1930.26871	-5	13	13	0	12	12	0	1941.23316	1941.23319	-3												
10	5	5	9	4	5	1930.35984	1930.36032	-47	13	5	8	12	4	8	1941.38719	1941.38672	47												
10	6	5	9	5	5	1930.38530	1930.38412	118	13	6	8	12	5	8	1941.38719	1941.38672	47												
10	9	1	9	8	1	1930.41272	1930.41212	60	13	4	9	12	3	9	1941.68742	1941.68723	19												
10	9	2	9	8	2	1930.47014	1930.47149	-135	13	5	9	12	4	9	1941.68742	1941.68723	19												
10	4	6	9	3	6	1930.58985	1930.59028	-42	13	4	10	12	3	10	*1942.01017	1942.01677	-660												
10	5	6	9	4	6	1930.58985	1930.59028	-42	13	3	10	12	2	10	*1942.01017	1942.01677	-660												
10	10	1	9	9	1	1930.73004	1930.73051	-46	13	3	11	12	2	11	1942.37891	1942.37793	98												
10	10	0	9	9	0	1930.73004	1930.73051	-46	13	2	11	12	1	11	1942.37891	1942.37793	98												
10	3	7	9	2	7	1930.82587	1930.82633	-47	13	2	12	12	1	12	1942.77401	1942.77253	149												
10	4	7	9	3	7	1930.82587	1930.82633	-47	13	1	12	12	0	12	1942.77401	1942.77253	149												
10	3	8	9	2	8	1931.08849	1931.08905	-56	14	10	4	13	9	4	1943.48155	1943.48228	-72												
10	2	8	9	1	8	1931.08849	1931.08905	-56	14	9	5	13	8	5	1943.73377	1943.73375	2												
10	2	9	9	1	9	1931.38215	1931.38213	2	14	11	3	13	10	3	1943.75570	1943.75450	120												
10	1	9	9	0	9	1931.38215	1931.38213	2	14	10	5	13	9	5	1944.05465	1944.05459	6												
11	8	3	10	7	3	1933.27529	1933.27452	77	14	11	4	13	10	4	1944.07937	1944.08084	-147												
11	7	4	10	6	4	1933.44643	1933.44647	-5	14	8	6	13	7	6	1944.14398	1944.14389	8												
11	9	2	10	8	2	1933.57742	1933.57718	23	14	9	6	13	8	6	1944.20878	1944.20888	-10												
11	8	4	10	7	4	1933.73815	1933.73936	-121	14	12	3	13	11	3	1944.26480	1944.26447	33												
11	6	5	10	5	5	1933.79674	1933.79589	84	14	7	7	13	6	7	*1944.44633	1944.44853	-220												
11	9	3	10	8	3	1933.81308	1933.81242	66	14	8	7	13	7	7	1944.45579	1944.45536	43												
11	7	5	10	6	5	1933.85022	1933.85065	-43	14	13	1	13	12	1	1944.47400	1944.47346	53												
11	10	1	10	9	1	1934.00286	1934.00225	62	14	13	2	13	12	2	1944.47839	1944.47806	32												
11	10	2	10	9	2	1934.03596	1934.03552	43	14	14	0	13	13	0	1944.64122	1944.64104	18												
11	5	6	10	4	6	1934.05327	1934.05228	99	14	14	1	13	13	1	1944.64122	1944.64104	18												
11	6	6	10	5	6	1934.05713	1934.05697	16	14	7	8	13	6	8	1944.73460	1944.73475	-15												
11	11	0	10	10	0	1934.27754	1934.27742	12	14	6	8	13	5	8	1944.73460	1944.73475	-15												
11	11	1	10	10	1	1934.27754	1934.27742	12	14	5	9	13	4	9	1945.04033	1945.03898	135												
11	4	7	10	3	7	1934.29647	1934.29704	-57	14	6	9	13	5	9	1945.04033	1945.03898	135												
11	5	7	10	4	7	1934.29647	1934.29704	-57	14	4	10	13	3	10	*1945.36785	1945.37056	-271												
11	4	8	10	3	8	1934.56220	1934.56323	-103	14	5	10	13	4	10	*1945.36785	1945.37056	-271												
11	3	8	10	2	8	1934.56220	1934.56323	-103	14	4	11	13	3	11	1945.73320	1945.73269	51												
11	2	9	10	1	9	1934.85777	1934.85828	-51	14	3	11	13	2	11	1945.73320	1945.73269	51												
11	3	9	10	2	9	1934.85777	1934.85828	-51	14	2	12	13	1	12	*1946.12930	1946.12751	179												
11	2	10	10	1	10	1935.18579	1935.18485	94	14	3	12	13	2	12	*1946.12930	1946.12751	179												
11	1	10	10	0	10	1935.18579	1935.18485	94	14	1	13	13	0	13	1946.55638	1946.55669	-31												
12	9	3	11	8	3	1936.75899	1936.75886	13	14	2	13	13	1	13	1946.55638	1946.55669	-31												
12	8	4	11	7	4	1936.79583	1936.79692	-108	15	10	5	14	9	5	1946.94885	1946.94878	7												
12	10	2	11	9	2	1937.16336	1937.16311	25	15	12	3	14	11	3	1947.24134	1947.24021	113												
12	7	5	11	6	5	1937.17112	1937.17062	50	15	9	6	14	8	6	1947.39106	1947.39037	69												
12	9	4	11	8	4	1937.20958	1937.20983	-26	15	11	5	14	10	5	1947.40353	1947.40273	81												
12	8	5	11	7	5	1937.28180	1937.28203	-24	15	12	4	14	11	4	*1947.47678	1947.47853	-175												
12	10	3	11	9	3	1937.32735	1937.32877	-142	15	10	6	14	9	6	1947.51615	1947.51752	-137												
12	6	6	11	5	6	1937.46798	1937.46855	-57	15	13	2	14	12	2	1947.64216	1947.64086	129												
12	7	6	11	6	6	1937.48020	1937.48114	-94	15	13	3	14	12	3	1947.67634	1947.67597	37												
12	11	1	11	10	1	1937.54190	1937.54181	9	15	8	7	14	7	7	*1947.73713	1947.73939	-226												
12	11	2	11	10	2	1937.55863	1937.55955	-92	15	9	7	14	8	7	1947.75524	1947.75615	-91												
12	5	7	11	4	7	1937.72511	1937.72546	-35	15	14	1	14	13	1	1947.86733	1947.86716	17												
12	6	7	11	5	7	1937.72511	1937.72546	-35	15	14	2	14	13	2	1947.86933	1947.86943	-10												
12	12	0	11	11	0	1937.77904	1937.77849	55	15	15	0	14	14	0	1948.00228	1948.00159	69												
12	12	1	11	11	1	1937.77904	1937.77849	55	15	15	1	14	14	1	1948.00228	1948.00159	69												
12	4	8	11	3	8	1937.99659	1937.99599	60	15	7	8	14	6	8	1948.03933	1948.03935	-3												
12	5	8	11	4	8	1937.99659	1937.99599	60	15	8	8	14	7	8	1948.03933	1948.03935	-3												
12	3	9	11	2	9	1938.29407	1938.29349	58	15	6	9	14	5	9	1948.34919	1948.34818	100												
12	4	9	11	3	9	1938.29407	1938.29349	58	15	7	9	14	6	9	1948.34919	1948.34818	100												
12	2	10	11	1	10	*1938.62430	1938.62138	292	15	5	10	14	4	10	1948.68263	1948.68228	34												

Continue

(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)	(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)								
15	6	10	14	5	10	1948.68263	1948.68228	34	16	7	10	15	6	10	1951.95080	1951.95147	-67
15	4	11	14	3	11	1949.04575	1949.04567	9	16	5	11	15	4	11	*1952.31453	1952.31645	-191
15	5	11	14	4	11	1949.04575	1949.04567	9	16	6	11	15	5	11	*1952.31453	1952.31645	-191
15	3	12	14	2	12	1949.44067	1949.44086	-19	16	4	12	15	3	12	1952.71076	1952.71220	-144
15	4	12	14	3	12	1949.44067	1949.44086	-19	16	5	12	15	4	12	1952.71076	1952.71220	-144
15	2	13	14	1	13	*1949.87311	1949.86974	337	16	2	14	15	1	14	1953.60581	1953.60430	151
15	3	13	14	2	13	*1949.87311	1949.86974	337	16	3	14	15	2	14	1953.60581	1953.60430	151
16	12	4	15	11	4	*1950.22417	1950.22241	177	17	13	4	16	12	4	*1953.61113	1953.61368	-256
15	1	14	14	0	14	1950.33535	1950.33396	139	17	11	6	16	10	6	*1953.68425	1953.68769	-345
15	2	14	14	1	14	1950.33535	1950.33396	139	17	12	6	16	11	6	*1954.04073	1954.04340	-267
16	10	6	15	9	6	1950.57018	1950.56969	48	17	14	3	16	13	3	1954.08309	1954.08410	-101
16	13	3	15	12	3	*1950.68680	1950.68861	-181	17	10	7	16	9	7	*1954.15557	1954.15751	-194
16	12	5	15	11	5	*1950.72621	1950.72816	-195	17	14	4	16	13	4	1954.17988	1954.18117	-128
16	11	6	15	10	6	1950.79351	1950.79432	-81	17	11	7	16	10	7	*1954.23128	1954.23540	-412
16	13	4	15	12	4	1950.84816	1950.84671	145	17	15	2	16	14	2	*1954.35803	1954.36084	-281
16	9	7	15	8	7	1950.97781	1950.97778	3	17	15	3	16	14	3	1954.37162	1954.37079	83
16	10	7	15	9	7	1951.01572	1951.01545	27	17	16	1	16	15	1	1954.51217	1954.51164	53
16	14	2	15	13	2	1951.02739	1951.02658	81	17	16	2	16	15	2	1954.51217	1954.51164	53
16	14	3	15	13	3	1951.04700	1951.04552	148	17	10	8	16	9	8	*1954.51621	1954.51954	-333
16	15	1	15	14	1	1951.21354	1951.21369	-15	17	17	0	16	16	0	*1954.57136	1954.57930	-795
16	15	2	15	14	2	1951.21354	1951.21369	-15	17	17	1	16	16	1	*1954.57136	1954.57930	-795
16	8	8	15	7	8	1951.29850	1951.29777	73	17	8	9	16	7	9	*1954.83224	1954.83659	-435
16	9	8	15	8	8	1951.30234	1951.30161	72	17	9	9	16	8	9	*1954.83224	1954.83659	-435
16	16	0	15	15	0	1951.31482	1951.31446	36	17	7	10	16	6	10	1955.17705	1955.17765	-60
16	16	1	15	15	1	1951.31482	1951.31446	36	17	8	10	16	7	10	1955.17705	1955.17765	-60
16	7	9	15	6	9	1951.61506	1951.61427	80	17	5	12	16	4	12	1955.94107	1955.94119	-12
16	8	9	15	7	9	1951.61506	1951.61427	80	17	6	12	16	5	12	1955.94107	1955.94119	-12
16	6	10	15	5	10	1951.95080	1951.95147	-67									

Nombres d'onde de transition observés et calculés dans la bande harmonique $2\nu_1$ de $^{123}\text{SbHD}_2$

(I)			(II)			(III)	(IV)	(V)	(I)			(II)			(III)	(IV)	(V)
16	16	0	17	17	0	3643.20290	3643.20237	53	11	11	0	12	12	0	3667.81503	3667.81469	33
16	16	1	17	17	1	3643.20290	3643.20237	53	12	3	10	13	4	10	*3667.99226	3667.91598	7628
15	15	1	16	16	1	3648.23979	3648.23969	11	12	2	10	13	3	10	*3667.99226	3667.91598	7628
15	15	0	16	16	0	3648.23979	3648.23969	11	11	10	2	12	11	2	3668.56431	3668.56433	-2
15	13	3	16	14	3	3649.86028	3649.86139	-112	11	10	1	12	11	1	3668.58094	3668.58155	-61
15	11	4	16	12	4	3651.73454	3651.73824	-370	12	2	11	13	3	11	*3668.64346	3668.61513	2833
15	9	7	16	10	7	3652.18776	3652.18240	536	12	1	11	13	2	11	*3668.64346	3668.61513	2833
15	8	7	16	9	7	3652.23250	3652.22769	481	11	9	3	12	10	3	3669.26811	3669.26772	39
15	6	9	16	7	9	*3653.07690	3653.10833	-3143	12	0	12	13	1	12	3669.39746	3669.39418	328
15	7	9	16	8	9	*3653.07690	3653.10833	-3143	12	1	12	13	2	12	3669.39746	3669.39418	328
14	14	0	15	15	0	3653.22210	3653.22108	102	11	9	2	12	10	2	3669.41881	3669.41712	168
14	14	1	15	15	1	3653.22210	3653.22108	102	11	8	4	12	9	4	3669.81765	3669.81722	43
14	12	3	15	13	3	3654.81559	3654.81663	-104	11	8	3	12	9	3	3670.14626	3670.14622	-56
14	12	2	15	13	2	3654.85475	3654.85149	326	11	7	5	12	8	5	3670.18849	3670.19211	-362
14	11	3	15	12	3	3655.78476	3655.78520	-43	11	6	5	12	7	5	3670.32188	3670.32535	-347
14	6	8	15	7	8	3657.36355	3657.37070	-715	11	7	4	12	8	4	3670.35484	3670.35397	88
14	7	8	15	8	8	3657.36355	3657.37070	-715	11	6	6	12	7	6	3670.52590	3670.51878	712
14	5	9	15	6	9	*3657.84248	3657.88828	-4580	11	5	6	12	6	6	3670.54048	3670.53326	722
14	6	9	15	7	9	*3657.84248	3657.88828	-4580	11	5	7	12	6	7	3670.90290	3670.90474	-184
13	13	1	14	14	1	3658.14427	3658.14504	-77	11	4	7	12	5	7	3670.90290	3670.90474	-184
13	13	0	14	14	0	3658.14427	3658.14504	-77	11	4	8	12	5	8	*3671.35097	3671.37217	-2120
14	5	10	15	6	10	*3658.60638	3658.49096	11542	11	3	8	12	4	8	*3671.35097	3671.37217	-2120
14	4	10	15	5	10	*3658.60638	3658.49096	11542	11	3	9	12	4	9	*3671.74393	3671.92054-17662	
13	12	2	14	13	2	3658.92742	3658.92848	-106	11	2	9	12	3	9	*3671.74393	3671.92054-17662	
13	12	1	14	13	1	3658.92742	3658.92848	-106	10	10	1	11	11	1	3672.55741	3672.55744	-3
14	3	11	15	4	11	*3659.20583	3659.17544	3039	10	10	0	11	11	0	3672.55741	3672.55744	-3
14	4	11	15	5	11	*3659.20583	3659.17544	3039	10	9	2	11	10	2	3673.28406	3673.28404	2
13	11	3	14	12	3	3659.70521	3659.70511	10	10	9	1	11	10	1	3673.31576	3673.31556	20
13	11	2	14	12	2	3659.76966	3659.76564	403	10	8	3	11	9	3	3673.93558	3673.93474	83
13	10	4	14	11	4	3660.39671	3660.39684	-13	10	8	2	11	9	2	3674.13699	3674.13652	47
13	10	3	14	11	3	3660.67955	3660.68006	-52	10	7	4	11	8	4	3674.40913	3674.40844	69
13	9	5	14	10	5	3660.90277	3660.90524	-248	10	4	7	11	5	7	3675.45394	3675.45749	-355
13	9	4	14	10	4	3661.27005	3661.27042	-38	10	3	7	11	4	7	3675.45394	3675.45749	-355
13	8	6	14	9	6	*3661.28883	3661.27399	1484	10	2	8	11	3	8	*3675.90636	3675.93457	-2821
13	8	5	14	9	5	3661.31208	3661.31366	-158	10	3	8	11	4	8	*3675.90636	3675.93457	-2821
13	7	6	14	8	6	*3661.36786	3661.35182	1604	9	9	1	10	10	1	3677.23672	3677.23551	121
13	7	7	14	8	7	3661.64495	3661.64338	157	9	9	0	10	10	0	3677.23672	3677.23824	-152
13	6	7	14	7	7	3661.65393	3661.65130	263	9	8	2	10	9	2	3677.93382	3677.93370	11
13	4	9	14	5	9	*3662.54975	3662.61808	-6833	9	8	1	10	9	1	3677.98814	3677.98840	-26
13	5	9	14	6	9	*3662.54975	3662.61808	-6833	9	7	3	10	8	3	3678.52311	3678.52194	118
12	12	1	13	13	1	3663.00991	3663.01007	-17	9	7	2	10	8	2	3678.76123	3678.76125	-2
12	12	0	13	13	0	3663.00991	3663.01007	-17	9	6	4	10	7	4	3678.92473	3678.92384	89
13	3	10	14	4	10	*3663.31975	3663.23002	8973	9	5	4	10	6	4	3679.14269	3679.14220	49
13	4	10	14	5	10	*3663.31975	3663.23002	8973	9	6	3	10	7	3	3679.15210	3679.15178	32
12	11	2	13	12	2	3663.77793	3663.77754	40	9	5	5	10	6	5	3679.21536	3679.22187	-651
12	11	1	13	12	1	3663.78549	3663.78661	-112	9	4	5	10	5	5	3679.24293	3679.24906	-613
13	3	11	14	4	11	*3663.95123	3663.92230	2893	9	4	6	10	5	6	3679.55426	3679.55151	275
13	2	11	14	3	11	*3663.95123	3663.92230	2893	9	3	6	10	4	6	3679.55426	3679.55151	275
12	10	3	13	11	3	3664.52427	3664.52337	91	9	3	7	10	4	7	3679.95071	3679.95686	-615
12	10	2	13	11	2	3664.62537	3664.62248	289	9	2	7	10	3	7	3679.95071	3679.95686	-615
13	2	12	14	3	12	3664.69660	3664.69504	155	9	1	8	10	2	8	*3680.40442	3680.44181	-3739
13	1	12	14	2	12	3664.69660	3664.69504	155	9	2	8	10	3	8	*3680.40442	3680.44181	-3739
12	9	4	13	10	4	3665.14737	3665.14715	22	8	8	1	9	9	1	3681.84949	3681.84883	66
12	9	3	13	10	3	3665.47162	3665.47218	-56	8	8	0	9	9	0	3681.85499	3681.85439	60
12	8	5	13	9	5	3665.58026	3665.58317	-291	8	7	2	9	8	2	3682.51013	3682.50999	14
12	7	5	13	8	5	3665.82879	3665.83041	-162	8	7	1	9	8	1	3682.59722	3682.59776	-54
12	8	4	13	9	4	3665.86023	3665.86062	-38	8	6	3	9	7	3	3683.02911	3683.02825	86
12	7	6	13	8	6	*3665.93370	3665.92348	1022	8	6	2	9	7	2	3683.27594	3683.27606	-12
12	6	6	13	7	6	*3665.96893	3665.95878	1014	8	5	4	9	6	4	3683.36863	3683.36760	103
12	5	7	13	6	7	3666.30106	3666.30059	47	8	4	4	9	5	4	3683.48280	3683.48169	110
12	6	7	13	7	7	3666.30106	3666.30059	47	8	5	3	9	6	3	3683.50099	3683.50427	-328
12	4	8	13	5	8	*3666.74129	3666.75621	-1492	8	4	5	9	5	5	*3683.63891	3683.64967	-1076
12	5	8	13	6	8	*3666.74129	3666.75621	-1492	8	3	5	9	4	5	*3683.64913	3683.65977	-1064
12	4	9	13	5	9	*3667.18737	3667.29603-10866		8	2	6	9	3	6	3683.98757	3683.98652	104
12	3	9	13	4	9	*3667.18737	3667.29603-10866		8	3	6	9	4	6	3683.98757	3683.98652	104
11	11	1	12	12	1	3667.81503	3667.81469	33	8	1	7	9	2	7	3684.39159	3684.40105	-946

(I) Valeurs de J, Ka et Kc pour le niveau supérieur de la transition.

(II) Valeurs de J, Ka et Kc pour le niveau inférieur de la transition.

(III) Nombre d'ondes observées (en cm^{-1}). Les nombres d'onde observés identifiés par un * dans la colonne (III) n'ont pas été inclus dans l'ajustement.

(IV) Nombre d'ondes calculé (en cm^{-1}).

(V) Observé - Valeurs calculées (en 10^{-5}cm^{-1}).

Continue

(I)			(II)			(III)	(IV)	(V)	(I)			(II)			(III)	(IV)	(V)
8	2	7	9	3	7	3684.39159	3684.40105	-946	14	7	8	14	6	8	3715.15206	3715.15841	-636
8	1	8	9	2	8	*3684.84347	3684.89240	-4893	15	6	10	15	5	10	*3715.44694	3715.35050	9645
8	0	8	9	1	8	*3684.84347	3684.89240	-4893	15	5	10	15	6	10	*3715.44694	3715.35050	9645
7	7	1	8	8	1	3686.39469	3686.39478	-9	14	6	9	14	5	9	*3715.67083	3715.71610	-4527
7	7	0	8	8	0	3686.40540	3686.40580	-40	14	5	9	14	6	9	*3715.67083	3715.71610	-4527
7	6	2	8	7	2	3687.00964	3687.00955	9	16	5	12	16	4	12	3715.76192	3715.76358	-166
7	6	1	8	7	1	3687.13501	3687.13555	-54	16	4	12	16	5	12	3715.76192	3715.76358	-166
7	5	3	8	6	3	3687.45525	3687.45432	94	13	6	8	13	5	8	*3716.07412	3716.08445	-1033
7	5	2	8	6	2	3687.67848	3687.67862	-14	13	5	8	13	6	8	*3716.07412	3716.08445	-1033
7	4	4	8	5	4	3687.74528	3687.74428	100	15	4	11	15	5	11	*3716.08403	3716.05313	3090
7	4	3	8	5	3	3687.77836	3687.77762	74	15	5	11	15	4	11	*3716.08403	3716.05313	3090
7	3	4	8	4	4	3687.79657	3687.79567	91	9	6	3	9	7	3	3716.38388	3716.38427	-39
7	1	7	8	2	7	*3688.77647	3688.78844	-1197	12	6	7	12	5	7	3716.45529	3716.45484	45
7	0	7	8	1	7	*3688.77647	3688.78844	-1197	12	5	7	12	6	7	3716.45529	3716.45484	45
6	6	1	7	7	1	3690.87085	3690.87105	-20	14	5	10	14	4	10	*3716.46301	3716.34758	11543
6	6	0	7	7	0	3690.89128	3690.89192	-64	14	4	10	14	5	10	*3716.46301	3716.34758	11543
6	5	2	7	6	2	3691.43007	3691.42963	44	10	6	4	10	7	4	3716.56731	3716.56429	303
6	5	1	7	6	1	3691.58574	3691.58630	-56	13	5	9	13	4	9	*3716.57775	3716.64579	-6803
6	4	3	7	5	3	3691.80337	3691.80236	100	13	4	9	13	5	9	*3716.57775	3716.64579	-6803
6	4	2	7	5	2	3691.97644	3691.97673	-29	15	4	12	15	3	12	3716.83269	3716.83312	-43
6	3	3	7	4	3	3691.99375	3691.99306	69	15	3	12	15	4	12	3716.83269	3716.83312	-43
6	3	4	7	4	4	3692.05904	3692.05798	106	11	6	6	11	5	6	3716.84084	3716.83362	722
6	2	4	7	3	4	3692.07875	3692.07753	122	12	4	8	12	5	8	*3716.93167	3716.94678	-1511
6	2	5	7	3	5	3692.34511	3692.33802	709	12	5	8	12	4	8	*3716.93167	3716.94678	-1511
6	1	5	7	2	5	3692.34511	3692.33802	709	14	3	11	14	4	11	*3717.08462	3717.05474	2987
6	1	6	7	2	6	3692.68793	3692.69026	-233	14	4	11	14	3	11	*3717.08462	3717.05474	2987
6	0	6	7	1	6	3692.68793	3692.69026	-233	11	4	7	11	5	7	3717.24827	3717.24977	-150
5	5	1	6	6	1	3695.27436	3695.27496	-60	11	5	7	11	4	7	3717.24827	3717.24977	-150
5	5	0	6	6	0	3695.31106	3695.31182	-76	13	3	10	13	4	10	*3717.37046	3717.28148	8898
5	4	2	6	5	2	3695.76872	3695.76863	10	13	4	10	13	3	10	*3717.37046	3717.28148	8898
5	4	1	6	5	1	3695.93346	3695.93423	-77	8	5	3	8	6	3	3717.37046	3717.37156	-110
5	3	3	6	4	3	3696.07658	3696.07584	74	12	3	9	12	4	9	*3717.40417	3717.51212	-10795
5	3	2	6	4	2	3696.18107	3696.18134	-27	12	4	9	12	3	9	*3717.40417	3717.51212	-10795
5	2	4	6	3	4	3696.31302	3696.31159	143	9	5	4	9	6	4	3717.40417	3717.40479	-63
5	1	4	6	2	4	3696.31884	3696.31760	124	10	4	6	10	5	6	3717.55861	3717.55416	445
5	1	5	6	2	5	3696.59759	3696.59677	82	10	5	6	10	4	6	3717.55861	3717.55416	445
5	0	5	6	1	5	3696.59759	3696.59677	82	15	3	13	15	2	13	*3717.66323	3717.69262	-2939
4	4	1	5	5	1	3699.60302	3699.60357	-56	15	2	13	15	3	13	*3717.66323	3717.69262	-2939
4	4	0	5	5	0	3699.65983	3699.66174	-192	11	4	8	11	3	8	*3717.72443	3717.74565	-2122
4	3	2	5	4	2	3700.02649	3700.02645	4	11	3	8	11	4	8	*3717.72443	3717.74565	-2122
4	3	1	5	4	1	3700.17335	3700.17438	-102	9	6	4	9	5	4	3717.74752	3717.74710	42
4	2	3	5	3	3	3700.27954	3700.27887	67	14	2	12	14	3	12	3717.84008	3717.83929	80
4	2	2	5	3	2	3700.30409	3700.30436	-27	14	3	12	14	2	12	3717.84008	3717.83929	80
4	1	3	5	2	3	3700.31705	3700.31628	77	9	5	5	9	4	5	3717.86634	3717.87246	-612
4	0	4	5	1	4	3700.50823	3700.50711	112	10	3	7	10	4	7	3717.97766	3717.98122	-356
4	1	4	5	2	4	3700.50823	3700.50711	112	10	4	7	10	3	7	3717.97766	3717.98122	-356
3	3	1	4	4	1	3703.85339	3703.85419	-80	13	3	11	13	2	11	*3718.02176	3717.99273	2904
3	3	0	4	4	0	3703.93038	3703.93152	-114	13	2	11	13	3	11	*3718.02176	3717.99273	2904
3	2	2	4	3	2	3704.20419	3704.20437	-18	8	4	4	8	5	4	3718.09684	3718.09555	129
3	2	1	4	3	1	3704.31284	3704.31379	-95	11	2	9	11	3	9	*3718.13755	3718.31441	-17687
3	1	2	4	2	2	3704.36148	3704.36155	-7	11	3	9	11	2	9	*3718.13755	3718.31441	-17687
3	1	3	4	2	3	3704.41649	3704.41547	102	7	4	3	7	5	3	3718.17486	3718.17366	119
3	0	3	4	1	3	3704.42759	3704.42641	119	9	4	6	9	3	6	3718.22102	3718.21813	289
2	2	1	3	3	1	3708.02457	3708.02506	-48	9	3	6	9	4	6	3718.22102	3718.21813	289
2	2	0	3	3	0	3708.10454	3708.10572	-118	12	2	10	12	3	10	*3718.22820	3718.15151	7669
2	1	2	3	2	2	3708.30423	3708.30460	-37	12	3	10	12	2	10	*3718.22820	3718.15151	7669
2	1	1	3	2	1	3708.36219	3708.36396	-177	8	5	4	8	4	4	3718.23774	3718.23684	90
1	0	1	2	1	1	3712.33353	3712.33500	-147	10	3	8	10	2	8	*3718.45145	3718.48036	-2890
16	10	7	16	9	7	3712.72385	3712.72542	-157	10	2	8	10	3	8	*3718.45145	3718.48036	-2890
15	9	6	15	10	6	3713.06186	3713.05679	507	15	1	14	15	2	14	*3718.56926	3718.63439	-6513
18	14	5	18	13	5	3713.21448	3713.21384	64	15	2	14	15	1	14	*3718.56926	3718.63439	-6513
15	8	7	15	9	7	3713.67443	3713.67038	405	9	3	7	9	2	7	3718.64207	3718.64845	-638
16	12	5	16	11	5	3713.86240	3713.86688	-448	9	2	7	9	3	7	3718.64207	3718.64845	-638
19	17	3	19	16	3	3714.19236	3714.19029	207	14	2	13	14	1	13	*3718.67491	3718.70352	-2861
17	6	12	17	5	12	3714.62772	3714.63134	-362	14	1	13	14	2	13	*3718.67491	3718.70352	-2861
17	5	12	17	6	12	3714.62772	3714.63134	-362	7	3	4	7	4	4	3718.67491	3718.66954	537
18	15	4	18	14	4	3714.62772	3714.63116	-344	5	3	2	5	4	2	3718.70020	3718.70102	-82
15	6	9	15	7	9	*3714.69183	3714.72378	-3195	7	4	4	7	3	4	3718.72030	3718.71890	140
15	7	9	15	6	9	*3714.69183	3714.72378	-3195	13	2	12	13	1	12	3718.78298	3718.78143	155
14	8	7	14	7	7	3714.69183	3714.68860	323	13	1	12	13	2	12	3718.78298	3718.78143	155
18	17	2	18	16	2	3715.02177	3715.02234	-58	6	3	3	6	4	3	3718.80242	3718.80187	55
14	6	8	14	7	8	3715.15206	3715.15676	-471	8	3	6	8	2	6	3718.81891	3718.81792	99
17	14	4	17	13	4	3715.15206	3715.15841	-636	8	2	6	8	3	6	3718.81891	3718.81792	99

Continue

(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)	(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)								
12	1	11	12	2	11	*3718.89536	3718.86644	2893	6	5	2	5	4	2	3742.11691	3742.11675	15
12	2	11	12	1	11	*3718.89536	3718.86644	2893	6	4	3	5	3	3	3742.17884	3742.17785	99
11	2	10	11	1	10	*3719.02617	3718.95707	6910	6	6	0	5	5	0	3742.20893	3742.20950	-57
11	1	10	11	2	10	*3719.02617	3718.95707	6910	6	6	1	5	5	1	3742.25203	3742.25247	-43
6	4	3	6	3	3	3719.06508	3719.06466	42	6	2	4	5	1	4	3742.40230	3742.40055	175
9	2	8	9	1	8	*3719.11266	3719.15028	-3761	6	3	4	5	2	4	3742.40728	3742.40559	169
9	1	8	9	2	8	*3719.11266	3719.15028	-3761	6	2	5	5	1	5	3742.72399	3742.71654	745
6	2	4	6	3	4	3719.15288	3719.15187	101	6	1	5	5	0	5	3742.72399	3742.71654	745
6	3	4	6	2	4	3719.16696	3719.16575	121	7	5	2	6	4	2	3745.19857	3745.19894	-36
8	1	7	8	2	7	3719.24143	3719.25079	-937	7	6	1	6	5	1	3745.35508	3745.35570	-62
8	2	7	8	1	7	3719.24143	3719.25079	-937	7	4	3	6	3	3	3745.43642	3745.43596	46
5	2	3	5	3	3	3719.28402	3719.28330	71	7	6	2	6	5	2	3745.56095	3745.56071	24
7	2	6	7	1	6	3719.35215	3719.35281	-66	7	5	3	6	4	3	3745.58353	3745.58276	77
7	1	6	7	2	6	3719.35215	3719.35281	-66	7	7	0	6	6	0	3745.68275	3745.68320	-44
5	3	3	5	2	3	3719.37421	3719.37594	-173	7	7	1	6	6	1	3745.70648	3745.70681	-33
6	2	5	6	1	5	3719.46266	3719.45567	698	7	3	4	6	2	4	3745.77841	3745.77731	110
6	1	5	6	2	5	3719.46266	3719.45567	698	7	4	4	6	3	4	3745.79450	3745.79324	126
15	0	15	15	1	15	*3719.54962	3719.66175-11214		7	1	6	6	0	6	3746.48386	3746.48473	-87
15	1	15	15	0	15	*3719.54962	3719.66175-11214		7	2	6	6	1	6	3746.48386	3746.48473	-87
2	1	1	2	2	1	3719.55991	3719.55890	101	8	6	2	7	5	2	3748.54101	3748.54052	49
5	1	4	5	2	4	3719.55991	3719.55890	101	8	5	3	7	4	3	3748.68810	3748.69119	-310
5	2	4	5	1	4	3719.55991	3719.56027	-36	8	7	1	7	6	1	3748.78774	3748.78820	-46
14	0	14	14	1	14	*3719.58590	3719.65031	-6441	8	6	3	7	5	3	3748.92785	3748.92707	77
14	1	14	14	0	14	*3719.58590	3719.65031	-6441	8	7	2	7	6	2	3748.94182	3748.94154	28
13	1	13	13	0	13	*3719.62253	3719.65003	-2750	8	4	4	7	3	4	3749.07177	3749.07135	42
13	0	13	13	1	13	*3719.62253	3719.65003	-2750	8	8	0	7	7	0	3749.07177	3749.07135	42
4	1	3	4	2	3	3719.65078	3719.65005	73	8	8	1	7	7	1	3749.08451	3749.08468	-17
12	1	12	12	0	12	3719.66105	3719.65893	212	8	5	4	7	4	4	3749.11176	3749.11071	104
12	0	12	12	1	12	3719.66105	3719.65893	212	8	3	6	7	2	6	3749.80494	3749.80400	94
4	2	3	4	1	3	3719.67465	3719.67395	70	8	2	6	7	1	6	3749.80494	3749.80400	94
3	1	2	3	2	2	3719.68537	3719.68563	-26	8	2	7	7	1	7	3750.24092	3750.25004	-912
4	3	2	4	2	2	3719.72208	3719.72230	-22	8	1	7	7	0	7	3750.24092	3750.25004	-912
8	1	8	8	0	8	3719.76175	3719.75484	691	9	7	2	8	6	2	3751.84885	3751.84899	-15
8	0	8	8	1	8	3719.76175	3719.75484	691	9	8	1	8	7	1	3752.15335	3752.15444	-109
7	0	7	7	1	7	*3719.77526	3719.78768	-1243	9	8	2	8	7	2	3752.25607	3752.25606	1
7	1	7	7	0	7	*3719.77526	3719.78768	-1243	9	5	4	8	4	4	3752.27501	3752.27403	98
6	1	6	6	0	6	3719.81977	3719.82218	-241	9	6	4	8	5	4	3752.36192	3752.36096	96
6	0	6	6	1	6	3719.81977	3719.82218	-241	9	9	0	8	8	0	3752.37734	3752.37777	-42
3	2	2	3	1	2	3719.84370	3719.84404	-33	9	9	1	8	8	1	3752.38412	3752.38377	35
5	0	5	5	1	5	3719.85844	3719.85764	80	9	4	5	8	3	5	3752.65039	3752.65673	-633
5	1	5	5	0	5	3719.85844	3719.85764	80	9	5	5	8	4	5	3752.65831	3752.66477	-646
4	0	4	4	1	4	3719.89481	3719.89555	-74	9	4	6	8	3	6	3753.05238	3753.04953	286
1	0	1	1	1	1	3719.89481	3719.89460	21	9	3	6	8	2	6	3753.05238	3753.04953	286
4	1	4	4	0	4	3719.89481	3719.89460	21	9	3	7	8	2	7	3753.49192	3753.49819	-627
3	0	3	3	1	3	3719.92958	3719.92929	30	9	2	7	8	1	7	3753.49192	3753.49819	-627
3	1	3	3	0	3	3719.92958	3719.92929	30	9	2	8	8	1	8	*3753.97515	3754.01271	-3756
2	0	2	2	1	2	3719.94792	3719.94834	-43	9	1	8	8	0	8	*3753.97515	3754.01271	-3756
2	1	2	2	0	2	3719.98214	3719.98107	106	10	7	3	9	6	3	3755.04075	3755.04090	-15
1	1	1	1	0	1	3720.09883	3720.10010	-127	10	8	2	9	7	2	3755.12506	3755.12472	34
1	1	0	0	0	0	3723.85102	3723.85254	-152	10	6	4	9	5	4	3755.38792	3755.38755	38
2	1	1	1	0	0	3727.54378	3727.54442	-64	10	9	1	9	8	1	3755.43902	3755.43875	28
2	2	0	1	1	0	3727.61820	3727.61908	-88	10	8	3	9	7	3	3755.43902	3755.43875	28
3	2	1	2	1	1	3731.19637	3731.19744	-106	10	9	2	9	8	2	3755.50083	3755.50047	36
3	3	0	2	2	0	3731.34276	3731.34356	-80	10	7	4	9	6	4	3755.54807	3755.54737	69
3	1	2	2	0	2	3731.36171	3731.36210	-39	10	10	1	9	9	1	3755.60066	3755.60099	-33
3	2	2	2	1	2	3731.42094	3731.42047	47	10	10	0	9	9	0	3755.60066	3755.60099	-33
3	3	1	2	2	1	3731.46044	3731.46125	-82	10	5	6	9	4	6	3756.22554	3756.22078	477
4	3	1	3	2	1	3734.79873	3734.79935	-62	10	4	6	9	3	6	3756.22554	3756.22078	477
4	4	0	3	3	0	3735.02550	3735.02630	-80	10	3	7	9	2	7	3756.66915	3756.67281	-365
4	3	2	3	2	2	3735.04634	3735.04638	-4	10	4	7	9	3	7	3756.66915	3756.67281	-365
4	4	1	3	3	1	3735.12581	3735.12666	-85	10	3	8	9	2	8	*3757.16059	3757.18883	-2824
4	1	3	3	0	3	3735.16579	3735.16559	19	10	2	8	9	1	8	*3757.16059	3757.18883	-2824
4	2	3	3	1	3	3735.17600	3735.17509	91	11	8	3	10	7	3	3758.16251	3758.16283	-32
5	4	1	4	3	1	3738.35585	3738.35652	-68	11	9	2	10	8	2	3758.36029	3758.35897	132
5	5	0	4	4	0	3738.65322	3738.65396	-74	11	7	4	10	6	4	3758.41950	3758.41915	34
5	2	3	4	1	3	3738.67913	3738.67838	75	11	9	3	10	8	3	3758.60386	3758.60306	80
5	3	3	4	2	3	3738.71067	3738.70971	96	11	10	1	10	9	1	3758.63654	3758.63684	-30
5	5	1	4	4	1	3738.72411	3738.72466	-56	11	10	2	10	9	2	3758.67223	3758.67202	20
5	1	4	4	0	4	3738.94675	3738.94524	152	11	8	4	10	7	4	3758.67223	3758.67202	20
5	2	4	4	1	4	3738.94675	3738.94524	152	11	11	1	10	10	1	3758.73870	3758.73893	-23
6	4	2	5	3	2	3741.82254	3741.81996	258	11	11	0	10	10	0	3758.73870	3758.73893	-23
6	5	1	5	4	1	3741.87456	3741.87507	-51	11	6	5	10	5	5	3758.88380	3758.88679	-299
6	3	3	5	2	3	3742.10248	3742.10196	52	11	7	5	10	6	5	3758.93135	3758.93483	-348

Continue

(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)	(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)								
11	6	6	10	5	6	3759.32409	3759.31715	695	14	4	10	13	3	10	*3770.51410	3770.39903	11507
11	5	6	10	4	6	3759.32409	3759.31715	695	15	13	2	14	12	2	3770.55059	3770.54917	142
11	4	8	10	3	8	*3760.27024	3760.29144	-2120	15	14	1	14	13	1	3770.56042	3770.56106	-64
11	3	8	10	2	8	*3760.27024	3760.29144	-2120	15	14	2	14	13	2	3770.56042	3770.56106	-64
12	9	3	11	8	3	3761.25718	3761.25778	-60	15	13	3	14	12	3	3770.58378	3770.58545	-166
12	8	4	11	7	4	3761.38812	3761.38800	12	15	12	4	14	11	4	3770.58378	3770.58545	-166
12	10	2	11	9	2	3761.53594	3761.53336	258	14	4	11	13	3	11	*3771.15492	3771.12517	2975
12	10	3	11	9	3	3761.70472	3761.70417	55	14	3	11	13	2	11	*3771.15492	3771.12517	2975
12	9	4	11	8	4	3761.74080	3761.74002	78	15	8	7	14	7	7	3771.42544	3771.42116	427
12	11	1	11	10	1	3761.74514	3761.74626	-112	15	9	7	14	8	7	3771.44029	3771.43561	469
12	11	2	11	10	2	3761.76425	3761.76446	-21	14	2	12	13	1	12	3771.92621	3771.92567	54
12	12	1	11	11	1	3761.79394	3761.79430	-36	14	3	12	13	2	12	3771.92621	3771.92567	54
12	12	0	11	11	0	3761.79394	3761.79430	-36	15	7	8	14	6	8	3771.95647	3771.96123	-476
12	7	5	11	6	5	3761.86780	3761.87023	-243	15	8	8	14	7	8	3771.95647	3771.96123	-476
12	8	5	11	7	5	3761.96408	3761.96718	-310	15	7	9	14	6	9	*3772.52017	3772.55160	-3143
12	6	6	11	5	6	3762.34233	3762.33242	992	15	6	9	14	5	9	*3772.52017	3772.55160	-3143
12	7	6	11	6	6	*3762.35378	3762.34343	1035	16	12	4	15	11	4	3772.95221	3772.95495	-274
12	6	7	11	5	7	3762.80029	3762.79988	41	16	16	1	15	15	1	3773.18651	3773.18646	5
12	5	7	11	4	7	3762.80029	3762.79988	41	16	16	0	15	15	0	3773.18651	3773.18646	5
12	4	8	11	3	8	*3763.30508	3763.32026	-1518	16	13	3	15	12	3	3773.24485	3773.24524	-40
12	5	8	11	4	8	*3763.30508	3763.32026	-1518	15	6	10	14	5	10	*3773.30047	3773.20712	9335
12	3	9	11	2	9	*3763.79772	3763.90599-10827		15	5	10	14	4	10	*3773.30047	3773.20712	9335
12	4	9	11	3	9	*3763.79772	3763.90599-10827		16	15	1	15	14	1	3773.33059	3773.32986	72
13	9	4	12	8	4	3764.31492	3764.31520	-28	16	15	2	15	14	2	3773.33059	3773.32986	72
13	11	2	12	10	2	3764.63340	3764.62888	452	16	14	2	15	13	2	3773.37322	3773.37323	-1
13	11	3	12	10	3	3764.73763	3764.73756	7	16	13	4	15	12	4	3773.40505	3773.40740	-234
13	10	4	12	9	4	3764.74879	3764.74883	-3	15	5	11	14	4	11	*3773.96262	3773.93244	3018
13	13	1	12	12	1	3764.76579	3764.76687	-108	15	4	11	14	3	11	*3773.96262	3773.93244	3018
13	13	0	12	12	0	3764.76579	3764.76687	-108	16	9	7	15	8	7	3774.14192	3774.13588	604
13	12	1	12	11	1	3764.76579	3764.76909	-330	16	10	7	15	9	7	3774.17388	3774.16811	577
13	8	5	12	7	5	3764.76579	3764.76220	359	16	8	8	15	7	8	3774.68790	3774.69201	-411
13	12	2	12	11	2	3764.77822	3764.77846	-24	16	9	8	15	8	8	3774.68790	3774.69201	-411
13	9	5	12	8	5	3764.93287	3764.93552	-264	15	4	12	14	3	12	3774.73084	3774.73126	-42
13	7	6	12	6	6	*3765.28472	3765.26908	1563	15	3	12	14	2	12	3774.73084	3774.73126	-42
13	8	6	12	7	6	*3765.31016	3765.29524	1492	16	8	9	15	7	9	*3775.26232	3775.28506	-2274
13	6	8	12	5	8	*3766.26447	3766.27502	-1055	16	7	9	15	6	9	*3775.26232	3775.28506	-2274
13	5	8	12	4	8	*3766.26447	3766.27502	-1055	15	3	13	14	2	13	*3775.57754	3775.60707	-2953
13	5	9	12	4	9	*3766.79383	3766.86188	-6805	15	2	13	14	1	13	*3775.57754	3775.60707	-2953
13	4	9	12	3	9	*3766.79383	3766.86188	-6805	17	12	5	16	11	5	3775.68543	3775.68961	-418
14	10	4	13	9	4	3767.21945	3767.21515	430	17	17	0	16	16	0	3775.82682	3775.82683	-1
14	11	3	13	10	3	3767.35917	3767.35995	-78	17	17	1	16	16	1	3775.82682	3775.82683	-1
14	9	5	13	8	5	3767.56736	3767.56960	-224	17	16	2	16	15	2	3776.01475	3776.01543	-69
13	4	10	12	3	10	*3767.60626	3767.51701	8925	17	16	1	16	15	1	3776.01475	3776.01543	-69
13	3	10	12	2	10	*3767.60626	3767.51701	8925	17	14	3	16	13	3	3776.05896	3776.05954	-57
14	12	2	13	11	2	3767.63796	3767.63491	305	17	15	2	16	14	2	3776.11069	3776.10931	138
14	14	1	13	13	1	3767.65832	3767.65648	184	17	14	4	16	13	4	3776.15527	3776.15887	-360
14	14	0	13	13	0	3767.65832	3767.65648	184	17	10	7	16	9	7	3776.77148	3776.76444	704
14	12	3	13	11	3	3767.69813	3767.69912	-99	17	11	7	16	10	7	3776.83763	3776.83059	704
14	11	4	13	10	4	3767.69813	3767.69831	-18	17	10	8	16	9	8	3777.34868	3777.35143	-275
14	13	1	13	12	1	3767.71161	3767.70902	259	16	5	12	15	4	12	3777.46093	3777.46291	-197
14	13	2	13	12	2	3767.71161	3767.70902	259	16	4	12	15	3	12	3777.46093	3777.46291	-197
14	10	5	13	9	5	3767.83995	3767.84319	-324	17	8	9	16	7	9	*3777.92578	3777.94401	-1823
13	3	11	12	2	11	*3768.27338	3768.24403	2935	17	9	9	16	8	9	*3777.92578	3777.94401	-1823
13	2	11	12	1	11	*3768.27338	3768.24403	2935	18	13	5	17	12	5	3778.34928	3778.35441	-513
13	2	12	12	1	12	3769.04736	3769.04618	118	18	18	0	17	17	0	3778.38388	3778.38422	-34
13	1	12	12	0	12	3769.04736	3769.04618	118	18	18	1	17	17	1	3778.38388	3778.38422	-34
14	6	8	13	5	8	3769.14829	3769.15544	-715	18	17	1	17	16	1	3778.61636	3778.61783	-148
14	7	8	13	6	8	3769.14829	3769.15544	-715	18	17	2	17	16	2	3778.61636	3778.61783	-148
14	5	9	13	4	9	*3769.69842	3769.74381	-4539	18	9	9	17	8	9	*3780.51261	3780.52819	-1557
14	6	9	13	5	9	*3769.69842	3769.74381	-4539	18	10	9	17	9	9	*3780.51261	3780.52819	-1557
15	11	4	14	10	4	3770.09238	3770.09477	-240	19	13	6	18	12	6	3781.12349	3781.12196	152
15	10	5	14	9	5	3770.30895	3770.31140	-245	19	18	2	18	17	2	3781.13596	3781.13718	-121
15	12	3	14	11	3	3770.33993	3770.34040	-47	19	18	1	18	17	1	3781.13596	3781.13718	-121
15	15	0	14	14	0	3770.46319	3770.46302	17	19	13	7	18	12	7	3781.96014	3781.95859	155
15	15	1	14	14	1	3770.46319	3770.46302	17	20	17	4	19	16	4	3783.95589	3783.95488	100
14	5	10	13	4	10	*3770.51410	3770.39903	11507	20	16	5	19	15	5	3784.04732	3784.04339	394

Nombres d'ondes de transition observés et calculés dans la bande harmonique $2\nu_1$ de $^{123}\text{SbHD}_2$

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)			(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)		
26	19	7	27	20	7	1780.54826	1780.54707	119	21	7	15	22	8	15	*1804.70516	1804.70654	-138												
26	12	14	27	13	14	1781.96180	1781.96230	-50	21	6	15	22	7	15	*1804.70516	1804.70654	-138												
26	13	14	27	14	14	1781.96180	1781.96230	-50	20	17	4	21	18	4	1804.94083	1804.9404	41												
24	24	1	25	25	1	1784.99493	1784.99546	-53	20	17	3	21	18	3	1804.95062	1804.95005	58												
24	24	0	25	25	0	1784.99493	1784.99546	-53	18	6	13	19	7	12	*1805.15182	1805.15327	-145												
24	22	2	25	23	2	1785.92064	1785.92051	13	20	16	5	21	17	5	*1805.61374	1805.61160	215												
24	22	3	25	23	3	1785.92064	1785.92051	13	18	7	11	19	10	10	*1806.43240	1806.43442	-201												
24	21	4	25	22	4	1786.53294	1786.53284	10	20	15	5	21	16	5	1806.61053	1806.61070	-17												
24	21	3	25	22	3	1786.53294	1786.53284	10	20	14	7	21	15	7	1806.69204	1806.69187	18												
24	20	5	25	21	5	1787.20890	1787.20789	101	20	13	8	21	14	8	1806.96012	1806.96050	-38												
23	23	0	24	24	0	1789.57088	1789.57019	69	18	8	10	19	11	9	1807.17465	1807.17548	-83												
23	23	1	24	24	1	1789.57088	1789.57019	69	20	12	8	21	13	8	1807.17465	1807.17458	7												
24	16	8	25	17	8	*1790.28456	1790.28109	347	20	11	10	21	12	10	1807.36153	1807.36271	-118												
23	21	2	24	22	2	1790.54017	1790.54103	-86	20	14	6	21	15	6	1807.36153	1807.36189	-36												
23	21	3	24	22	3	1790.54017	1790.54103	-86	20	13	7	21	14	7	1807.41440	1807.41394	46												
24	11	13	25	12	13	1790.56012	1790.56112	-100	20	10	11	21	11	11	*1807.63100	1807.62557	543												
24	12	13	25	13	13	1790.56012	1790.56112	-100	20	9	11	21	10	11	*1807.63100	1807.62557	543												
23	20	3	24	21	3	1791.16410	1791.16336	74	19	19	0	20	20	0	1807.73661	1807.73690	-29												
23	20	4	24	21	4	1791.16410	1791.16336	74	19	19	1	20	20	1	1807.73661	1807.73690	-29												
24	9	16	25	10	16	1791.77808	1791.77778	30	20	8	12	21	9	12	1807.93829	1807.93768	61												
24	8	16	25	9	16	1791.77808	1791.77778	30	20	9	12	21	10	12	1807.93829	1807.93768	61												
23	19	5	24	20	5	1791.84117	1791.84231	-114	17	2	16	18	3	15	1807.99124	1807.99092	32												
24	7	17	25	8	17	1792.26981	1792.26971	10	17	1	16	18	4	15	1807.99124	1807.99092	32												
24	8	17	25	9	17	1792.26981	1792.26971	10	19	18	2	20	19	2	1808.25443	1808.25470	-27												
23	17	6	24	18	6	1793.65052	1793.65161	-110	19	18	1	20	19	1	1808.25443	1808.25470	-27												
22	21	1	23	22	1	1794.58669	1794.58586	84	20	8	13	21	9	13	1808.29546	1808.29515	31												
22	21	2	23	22	2	1794.58669	1794.58586	84	20	7	13	21	8	13	1808.29546	1808.29515	31												
22	20	2	23	21	2	1795.14518	1795.14492	26	20	7	14	21	8	14	1808.69429	1808.69510	-81												
22	20	3	23	21	3	1795.14518	1795.14492	26	20	6	14	21	7	14	1808.69429	1808.69510	-81												
23	10	14	24	11	14	*1795.38315	1795.38533	-219	18	10	8	19	13	7	*1808.74961	1808.75096	-135												
23	9	14	24	10	14	*1795.38315	1795.38533	-219	19	17	3	20	18	3	1808.84757	1808.84743	15												
22	19	4	23	20	4	1795.77465	1795.77482	-17	19	17	2	20	18	2	1808.84757	1808.84884	-127												
22	19	3	23	20	3	1795.77818	1795.77747	71	20	5	15	21	6	15	1809.13540	1809.13627	-88												
22	18	5	23	19	5	1796.45531	1796.45602	-71	20	6	15	21	7	15	1809.13540	1809.13627	-88												
22	18	4	23	19	4	1796.48271	1796.48254	17	19	16	4	20	17	4	1809.49130	1809.49103	27												
22	17	5	23	18	5	*1797.32281	1797.32077	205	19	16	3	20	17	3	1809.50839	1809.50896	-57												
22	16	7	23	17	7	*1797.75070	1797.74886	184	20	5	16	21	6	16	*1809.62385	1809.61840	545												
22	15	8	23	16	8	*1798.15864	1798.15556	308	20	4	16	21	5	16	*1809.62385	1809.61840	545												
21	21	1	22	22	1	1798.68199	1798.68181	19	17	5	12	18	8	11	*1810.08450	1810.08598	-148												
21	21	0	22	22	0	1798.68199	1798.68181	19	17	6	12	18	7	11	*1810.08450	1810.08598	-148												
22	15	7	23	16	7	1798.88652	1798.88630	23	19	15	5	20	16	5	1810.14734	1810.14686	48												
22	10	12	23	11	12	1799.11730	1799.11691	39	19	15	4	20	16	4	1810.28322	1810.28300	23												
22	11	12	23	12	12	1799.11730	1799.11691	39	16	13	4	17	16	1	1810.34653	1810.34771	-118												
22	9	13	23	10	13	*1799.45558	1799.45381	177	19	14	6	20	15	6	*1810.71865	1810.71670	195												
22	10	13	23	11	13	*1799.45558	1799.45381	177	17	7	11	18	8	10	1810.74033	1810.73929	104												
22	8	14	23	9	14	1799.83727	1799.83611	116	19	13	7	20	14	7	1811.09713	1811.09720	-7												
22	9	14	23	10	14	1799.83727	1799.83611	116	19	14	5	20	15	5	1811.19774	1811.19680	95												
21	17	5	22	18	5	1801.04718	1801.04676	43	19	12	8	20	13	8	1811.31847	1811.31872	-25												
21	17	4	22	18	4	1801.09525	1801.09421	103	19	11	8	20	12	8	1811.43253	1811.43245	8												
21	15	7	22	16	7	1802.24305	1802.24315	-9	19	11	9	20	12	9	*1811.50093	1811.50487	-394												
21	13	9	22	14	9	1802.78126	1802.78204	-78	19	10	9	20	11	9	*1811.52279	1811.52061	218												
21	15	6	22	16	6	*1802.89345	1802.89172	173	19	12	7	20	13	7	1811.59571	1811.59591	-20												
21	13	8	22	14	8	*1802.94802	1802.94588	214	19	13	6	20	14	6	1811.72315	1811.72254	62												
20	20	1	21	21	1	1803.21764	1803.21690	74	19	10	10	20	11	10	*1811.72834	1811.73001	-167												
20	20	0	21	21	0	1803.21764	1803.21690	74	19	9	10	20	10	10	*1811.72834	1811.73001	-167												
21	10	12	22	11	12	1803.53437	1803.53377	60	19	8	11	20	9	11	*1812.00673	1812.00465	208												
21	9	12	22	10	12	1803.53437	1803.53377	60	19	9	11	20	10	11	*1812.00673	1812.00465	208												
20	19	1	21	20	1	1803.71553	1803.71582	-29	18	18	1	19	19	1	1812.24066	1812.24078	-12												
20	19	2	21	20	2	1803.71553	1803.71582	-29	18	18	0	19	19	0	1812.24066	1812.24078	-12												
21	8	13	22	9	13	1803.88098	1803.88154	-56	18	18	1	19	19	0	1812.24066	1812.24078	-12												
21	9	13	22	10	13	1803.88098	1803.88154	-56	18	18	0	19	19	1	1812.24066	1812.24078	-12												
18	4	15	19	5	14	*1804.08638	1804.08785	-146	19	7	12	20	8	12	1812.32763	1812.32726	37												
21	8	14	22	9	14	*1804.27174	1804.27308	-133	19	8	12	20	9	12	1812.32763	1812.32726	37												
21	7	14	22	8	14	*1804.27174	1804.27308	-133	19	6	13	20	7	13	1812.69362	1812.69344	18												
20	18	2	21	19	2	1804.29926	1804.29937	-11	19	7	13	20	8	13	1812.69362	1812.69344	18												
20	18	3	21	19	3	1804.29926	1804.29937	-11	18	17	2	19	18	2	1812.77457	1812.77495	-39												

(I) Valeurs de J, Ka et Kc pour le niveau supérieur de la transition.

(II) Valeurs de J, Ka et Kc pour le niveau inférieur de la transition.

(III) Nombre d'ondes observées (en cm^{-1}). Les nombres d'onde observés identifiés par un * dans la colonne (III) n'ont pas été inclus dans l'ajustement.

(IV) Nombre d'ondes calculé (en cm^{-1}).

(V) Observé - Valeurs calculées (en 10^{-5}cm^{-1}).

Continue

(I)					(II)					(III)					(IV)					(V)													
18	17	1	19	18	1	1812.77457	1812.77495	-39	17	10	7	18	11	7	1819.97151	1819.97172	-21																
18	17	1	19	18	2	1812.77457	1812.77495	-39	17	9	8	18	10	8	1819.99747	1819.99765	-19																
18	17	2	19	18	1	1812.77457	1812.77495	-39	17	12	5	18	13	5	1820.11361	1820.11378	-16																
17	9	8	18	12	7	1813.05693	1813.05794	-101	17	9	9	18	10	9	1820.17260	1820.17337	-77																
19	6	14	20	7	14	1813.10079	1813.10109	-30	17	8	9	18	9	9	1820.17260	1820.17337	-77																
19	5	14	20	6	14	1813.10079	1813.10109	-30	17	11	6	18	12	6	*1820.17607	1820.17755	-148																
18	16	3	19	17	3	1813.37535	1813.37531	4	17	7	10	18	8	10	1820.42044	1820.42164	-120																
18	16	2	19	17	2	1813.37811	1813.37809	3	17	8	10	18	9	10	1820.42044	1820.42164	-120																
18	16	2	19	17	3	*1813.37811	1813.38084	-273	17	7	11	18	8	11	1820.71855	1820.71834	21																
17	10	8	18	11	7	1813.39756	1813.39651	104	17	6	11	18	7	11	1820.71855	1820.71834	21																
19	5	15	20	6	15	*1813.54798	1813.54940	-142	15	7	9	16	8	8	1820.74584	1820.74632	-48																
19	4	15	20	5	15	*1813.54798	1813.54940	-142	17	6	12	18	7	12	1821.05850	1821.05844	6																
18	15	4	19	16	4	1814.01768	1814.01764	4	17	5	12	18	6	12	1821.05850	1821.05844	6																
19	4	16	20	5	16	1814.03882	1814.03842	40	16	11	6	17	12	5	1821.12233	1821.12292	-60																
19	3	16	20	4	16	1814.03882	1814.03842	40	16	16	0	17	17	0	1821.19615	1821.19593	22																
18	15	3	19	16	3	1814.05030	1814.05032	-2	16	16	1	17	17	1	1821.19615	1821.19593	22																
18	15	3	19	16	4	*1814.08587	1814.08742	-155	16	16	0	17	17	1	1821.19615	1821.19593	22																
16	4	12	17	7	11	1814.39582	1814.39503	79	16	16	1	17	17	0	1821.19615	1821.19593	22																
16	5	12	17	6	11	1814.39582	1814.39503	79	15	10	5	16	13	4	1821.35423	1821.35495	-72																
18	14	5	19	15	5	1814.64812	1814.64830	-18	14	11	3	15	14	2	1821.39364	1821.39386	-23																
18	14	4	19	15	4	1814.86042	1814.86009	33	17	4	13	18	5	13	1821.43948	1821.43956	-8																
18	13	6	19	14	6	1815.15404	1815.15376	28	17	5	13	18	6	13	1821.43948	1821.43956	-8																
18	14	4	19	15	5	*1815.18098	1815.17948	150	15	7	8	16	10	7	1821.54951	1821.54946	6																
18	12	7	19	13	7	1815.46348	1815.46331	17	16	15	1	17	16	1	1821.75537	1821.75563	-27																
18	11	8	19	12	8	1815.65467	1815.65463	4	16	15	2	17	16	2	1821.75537	1821.75563	-27																
18	13	5	19	14	5	1815.70457	1815.70405	52	16	15	2	17	16	1	1821.75537	1821.75563	-27																
18	10	8	19	11	8	1815.71038	1815.71071	-33	16	15	1	17	16	2	1821.75537	1821.75563	-27																
18	11	7	19	12	7	1815.77468	1815.77428	40	14	9	6	15	12	3	*1821.83360	1821.83494	-134																
18	10	9	19	11	9	*1815.84797	1815.84538	259	17	4	14	18	5	14	1821.86039	1821.86072	-33																
18	9	9	19	10	9	1815.85296	1815.85197	99	17	3	14	18	4	14	1821.86039	1821.86072	-33																
15	12	3	16	15	2	1815.96122	1815.96085	37	18	13	6	19	12	7	1821.95879	1821.95901	-23																
18	12	6	19	13	6	1815.98654	1815.98659	-5	17	2	15	18	3	15	1822.32171	1822.32182	-11																
16	11	5	17	14	4	1815.98654	1815.98587	67	17	3	15	18	4	15	1822.32171	1822.32182	-11																
18	8	10	19	9	10	1816.08172	1816.08290	-118	15	8	7	16	11	6	1822.32171	1822.32269	-98																
18	9	10	19	10	10	1816.08172	1816.08290	-118	16	14	3	17	15	2	1822.35294	1822.35362	-68																
18	7	11	19	8	11	1816.37036	1816.36937	99	16	14	3	17	15	3	1822.36454	1822.36441	13																
18	8	11	19	9	11	1816.37036	1816.36937	99	16	14	2	17	15	2	1822.37475	1822.37476	-1																
16	7	9	17	10	8	1816.49792	1816.49778	14	16	14	2	17	15	3	1822.38673	1822.38556	118																
18	6	12	19	7	12	1816.70166	1816.70125	41	18	12	7	19	11	8	1822.42252	1822.42307	-55																
18	7	12	19	8	12	1816.70166	1816.70125	41	16	12	5	17	13	4	1822.68661	1822.68690	-29																
17	17	1	18	18	1	1816.72736	1816.72749	-13	17	2	16	18	3	16	1822.82436	1822.82334	102																
17	17	0	18	18	0	1816.72736	1816.72749	-13	17	1	16	18	2	16	1822.82436	1822.82334	102																
17	17	0	18	18	1	1816.72736	1816.72749	-13	18	14	5	19	13	6	*1822.98786	1822.99015	-229																
17	17	1	18	18	0	1816.72736	1816.72749	-13	16	13	4	17	14	4	1822.98786	1822.98784	2																
18	5	13	19	6	13	1817.07556	1817.07528	28	16	13	3	17	14	3	1823.08553	1823.08560	-6																
18	6	13	19	7	13	1817.07556	1817.07528	28	17	1	17	18	2	17	*1823.37938	1823.36630	1309																
18	13	5	19	14	6	1817.26099	1817.26000	99	17	0	17	18	1	17	*1823.37938	1823.36630	1309																
17	16	2	18	17	2	1817.27548	1817.27560	-11	18	11	8	19	10	9	1823.51977	1823.52083	-106																
17	16	1	18	17	1	1817.27548	1817.27560	-11	16	12	5	17	13	5	1823.53289	1823.53278	11																
17	16	2	18	17	1	1817.27548	1817.27560	-11	16	11	6	17	12	6	1823.89384	1823.89404	-19																
17	16	1	18	17	2	1817.27548	1817.27560	-11	16	12	4	17	13	4	1823.92430	1823.92412	18																
16	9	8	17	10	7	1817.48167	1817.48119	48	16	10	7	17	11	7	1824.09923	1824.09941	-18																
18	4	14	19	5	14	1817.48998	1817.48997	1	14	10	4	15	13	3	1824.17680	1824.17697	-17																
18	5	14	19	6	14	1817.48998	1817.48997	1	16	9	7	17	10	7	1824.18992	1824.19055	-63																
15	1	14	16	4	13	1817.58244	1817.58346	-102	14	5	10	15	6	9	*1824.24664	1824.24822	-157																
15	2	14	16	3																													

Continue

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)			(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)								
15	15	0	16	16	1	1825.64506	1825.64500	6	15	1	15	16	2	15	1831.01528	1831.01589	-61	15	15	0	16	16	1	1825.64506	1825.64500	6	15	1	15	16	2	15	1831.01528	1831.01589	-61
14	6	8	15	9	7	1825.76282	1825.76352	-70	16	10	7	17	9	8	*1831.06368	1831.06514	-147	16	10	7	17	9	8	1825.76282	1825.76352	-70	16	10	7	17	9	8	*1831.06368	1831.06514	-147
16	4	13	17	5	13	1825.78536	1825.78523	14	14	12	3	15	13	2	*1831.21130	1831.21283	-153	14	12	3	15	13	2	1825.78536	1825.78523	14	14	12	3	15	13	2	*1831.21130	1831.21283	-153
16	3	13	17	4	13	1825.78536	1825.78523	14	14	12	3	15	13	3	1831.25332	1831.25335	-3	14	12	3	15	13	2	1825.78536	1825.78523	14	14	12	3	15	13	3	1831.25332	1831.25335	-3
14	7	8	15	8	7	*1825.79232	1825.79383	-151	14	12	2	15	13	2	1831.28874	1831.28877	-3	14	12	2	15	13	2	*1825.79232	1825.79383	-151	14	12	2	15	13	2	1831.28874	1831.28877	-3
17	12	6	18	11	7	1825.95357	1825.95457	-100	18	4	14	19	5	15	*1831.34565	1831.34704	-139	18	4	14	19	5	15	1825.95357	1825.95457	-100	18	4	14	19	5	15	*1831.34565	1831.34704	-139
18	9	10	19	8	11	1826.01862	1826.01743	119	18	5	14	19	4	15	*1831.34565	1831.34704	-139	18	5	14	19	4	15	1826.01862	1826.01743	119	18	5	14	19	4	15	*1831.34565	1831.34704	-139
18	8	10	19	9	11	1826.01862	1826.01743	119	13	7	6	14	10	5	1831.47331	1831.47291	40	13	7	6	14	10	5	1826.01862	1826.01743	119	13	7	6	14	10	5	1831.47331	1831.47291	40
16	2	14	17	3	14	1826.21333	1826.21233	101	17	6	11	18	7	12	1831.69188	1831.69080	108	17	6	11	18	7	12	1826.21333	1826.21233	101	17	6	11	18	7	12	1831.69188	1831.69080	108
16	3	14	17	4	14	1826.21333	1826.21233	101	17	7	11	18	6	12	1831.69188	1831.69080	108	17	7	11	18	6	12	1826.21333	1826.21233	101	17	7	11	18	6	12	1831.69188	1831.69080	108
15	14	1	16	15	1	1826.21333	1826.21404	-71	14	11	4	15	12	4	1831.82296	1831.82303	-7	14	11	4	15	12	4	1826.21333	1826.21404	-71	14	11	4	15	12	4	1831.82296	1831.82303	-7
15	14	2	16	15	2	1826.21333	1826.21404	-71	17	13	4	18	12	7	1831.82755	1831.82792	-37	17	13	4	18	12	7	1826.21333	1826.21404	-71	17	13	4	18	12	7	1831.82755	1831.82792	-37
15	14	2	16	15	1	1826.21333	1826.21404	-71	14	11	3	15	12	3	1832.05161	1832.05161	-1	14	11	3	15	12	3	1826.21333	1826.21404	-71	14	11	3	15	12	3	1832.05161	1832.05161	-1
15	14	1	16	15	2	1826.21333	1826.21404	-71	14	10	5	15	11	5	1832.24087	1832.24103	-15	14	10	5	15	11	5	1826.21333	1826.21404	-71	14	10	5	15	11	5	1832.24087	1832.24103	-15
17	13	5	18	12	6	1826.40345	1826.40227	118	16	9	8	17	8	9	1832.25972	1832.25981	-9	16	9	8	17	8	9	1826.40345	1826.40227	118	16	9	8	17	8	9	1832.25972	1832.25981	-9
18	16	3	19	15	4	1826.42638	1826.42648	-10	14	9	6	15	10	6	1832.47636	1832.47662	-26	14	9	6	15	10	6	1826.42638	1826.42648	-10	14	9	6	15	10	6	1832.47636	1832.47662	-26
17	10	7	18	11	8	1826.54598	1826.54692	-94	14	8	6	15	9	6	1832.62492	1832.62512	-20	14	8	6	15	9	6	1826.54598	1826.54692	-94	14	8	6	15	9	6	1832.62492	1832.62512	-20
14	7	7	15	10	6	1826.57546	1826.57646	-100	14	8	7	15	9	7	1832.63889	1832.63903	-14	14	8	7	15	9	7	1826.57546	1826.57646	-100	14	8	7	15	9	7	1832.63889	1832.63903	-14
15	11	5	16	12	4	1826.65347	1826.65285	62	14	7	7	15	8	7	1832.65785	1832.65811	-25	14	7	7	15	8	7	1826.65347	1826.65285	62	14	7	7	15	8	7	1832.65785	1832.65811	-25
16	1	15	17	2	15	1826.67875	1826.67913	-38	14	10	4	15	11	4	1832.71192	1832.71194	-2	14	10	4	15	11	4	1826.67875	1826.67913	-38	14	10	4	15	11	4	1832.71192	1832.71194	-2
16	2	15	17	3	15	1826.67875	1826.67913	-38	12	3	10	13	4	9	*1832.71192	1832.71026	166	12	3	10	13	4	9	1826.67875	1826.67913	-38	12	3	10	13	4	9	*1832.71192	1832.71026	166
15	13	3	16	14	2	1826.80158	1826.80138	20	14	9	5	15	10	5	1832.80190	1832.80194	-4	14	9	5	15	10	5	1826.80158	1826.80138	20	14	9	5	15	10	5	1832.80190	1832.80194	-4
13	9	5	14	12	2	1826.81493	1826.81473	20	14	6	8	15	7	8	1832.82611	1832.82626	-15	14	6	8	15	7	8	1826.81493	1826.81473	20	14	6	8	15	7	8	1832.82611	1832.82626	-15
15	13	3	16	14	3	1826.82251	1826.82246	5	14	7	8	15	8	8	1832.82611	1832.82626	-15	14	7	8	15	8	8	1826.82251	1826.82246	5	14	7	8	15	8	8	1832.82611	1832.82626	-15
15	13	2	16	14	2	1826.84178	1826.84187	-9	14	5	9	15	6	9	1832.05962	1832.05928	34	14	5	9	15	6	9	1826.84178	1826.84187	-9	14	5	9	15	6	9	1832.05962	1832.05928	34
14	8	7	15	9	6	1826.85301	1826.85247	55	14	6	9	15	7	9	1833.05962	1833.05928	34	14	6	9	15	7	9	1826.85301	1826.85247	55	14	6	9	15	7	9	1833.05962	1833.05928	34
18	17	2	19	16	3	*1826.89943	1826.90102	-160	16	14	3	17	13	4	1833.27821	1833.27855	-33	16	14	3	17	13	4	*1826.89943	1826.90102	-160	16	14	3	17	13	4	1833.27821	1833.27855	-33
16	1	16	17	2	16	1827.18669	1827.18632	37	14	5	10	15	6	10	*1833.33538	1833.33798	-260	14	5	10	15	6	10	1827.18669	1827.18632	37	14	5	10	15	6	10	*1833.33538	1833.33798	-260
16	0	16	17	1	16	1827.18669	1827.18632	37	14	4	10	15	5	10	*1833.33538	1833.33798	-260	14	4	10	15	5	10	1827.18669	1827.18632	37	14	4	10	15	5	10	*1833.33538	1833.33798	-260
15	12	4	16	13	4	1827.42436	1827.42432	4	14	4	11	15	5	11	1833.65813	1833.65818	-4	14	4	11	15	5	11	1827.42436	1827.42432	4	14	4	11	15	5	11	1833.65813	1833.65818	-4
15	12	3	16	13	3	1827.58012	1827.58010	2	14	3	11	15	4	11	1833.65813	1833.65818	-4	14	3	11	15	4	11	1827.58012	1827.58010	2	14	3	11	15	4	11	1833.65813	1833.65818	-4
15	11	5	16	12	5	1827.90943	1827.90950	-7	14	2	12	15	3	12	1834.01813	1834.01795	18	14	2	12	15	3	12	1827.90943	1827.90950	-7	14	2	12	15	3	12	1834.01813	1834.01795	18
15	10	6	16	11	6	1828.20254	1828.20278	-24	14	3	12	15	4	12	1834.01813	1834.01795	18	14	3	12	15	4	12	1828.20254	1828.20278	-24	14	3	12	15	4	12	1834.01813	1834.01795	18
15	11	4	16	12	4	1828.36220	1828.36220	0	12	4	8	13	7	7	1834.15508	1834.15478	30	12	4	8	13	7	7	1828.36220	1828.36220	0	12	4	8	13	7	7	1834.15508	1834.15478	30
15	9	7	16	10	7	1828.37936	1828.37948	-13	12	5	8	13	6	7	1834.15867	1834.15877	-10	12	5	8	13	6	7	1828.37936	1828.37948	-13	12	5	8	13	6	7	1834.15867	1834.15877	-10
15	8	7	16	9	7	1828.42284	1828.42293	-10	15	10	6	16	9	7	1834.30219	1834.30302	-83	15	10	6	16	9	7	1828.42284	1828.42293	-10	15	10	6	16	9	7	1834.30219	1834.30302	-83
15	9	6	16	10	6	1828.47010	1828.47024	-14	17	4	13	18	5	14	*1834.35693	1834.35875	-182	17	4	13	18	5	14	1828.47010	1828.47024	-14	17	4	13	18	5	14	*1834.35693	1834.35875	-182
13	3	10	14	6	9	1828.48691	1828.48710	-19	14	2	13	15	3	13	1834.41671	1834.41660	11	14	2	13	15	3	13	1828.48691	1828.48710	-19	14	2	13	15	3	13	1834.41671	1834.41660	11
13	4	10	14	5	9	1828.48691	1828.48710	-19	14	1	13	15	2	13	1834.41671	1834.41660	11	14	1	13	15	2	13	1828.48691	1828.48710	-19	14	1	13	15	2	13	1834.41671	1834.41660	11
14	9	6	15	10	5	1828.53793	1828.53701	92	13	13	1	14	14	1	1834.48061	183																			

Continue

(I)					(II)					(III)					(IV)					(V)				
13	4	9	14	5	9	1837.31995	1837.31965	30	11	11	1	12	12	1	1843.22485	1843.22475	9							
13	5	9	14	6	9	1837.31995	1837.31965	30	11	11	0	12	12	0	1843.22485	1843.22475	9							
13	4	10	14	5	10	*1837.61829	1837.60573	1256	11	8	4	12	9	3	1843.43229	1843.43239	-10							
13	3	10	14	4	10	*1837.61829	1837.60573	1256	11	10	2	12	11	1	1843.78408	1843.78339	69							
11	8	3	12	11	2	1837.71746	1837.71865	-119	11	10	2	12	11	2	1843.80209	1843.80203	6							
14	10	5	15	9	6	1837.76565	1837.76535	30	11	10	1	12	11	1	1843.81973	1843.81965	8							
15	14	2	16	13	3	1837.83278	1837.83272	6	11	9	3	12	10	3	1844.35231	1844.35231	-1							
15	7	9	16	6	10	1837.83640	1837.83556	84	15	1	14	16	2	15	1844.45979	1844.46001	-22							
13	2	11	14	3	11	1837.93197	1837.93191	6	11	9	2	12	10	2	1844.50938	1844.50938	0							
13	3	11	14	4	11	1837.93197	1837.93191	6	9	5	5	10	8	2	*1844.63221	1844.63377	-156							
13	1	12	14	2	12	1838.29708	1838.29689	19	14	3	11	15	4	12	1844.70918	1844.70881	37							
13	2	12	14	3	12	1838.29708	1838.29689	19	14	4	11	15	3	12	1844.70918	1844.70881	37							
15	12	3	16	11	6	1838.48463	1838.48514	-51	11	8	4	12	9	4	1844.76076	1844.76084	-9							
17	2	16	18	1	17	1838.60392	1838.60288	104	11	7	5	12	8	5	1844.98603	1844.98613	-10							
17	1	16	18	2	17	1838.60392	1838.60288	104	11	6	5	12	7	5	1845.11374	1845.11385	-11							
13	0	13	14	1	13	1838.70030	1838.70032	-2	11	6	6	12	7	6	1845.13474	1845.13456	18							
13	1	13	14	2	13	1838.70030	1838.70032	-2	11	8	3	12	9	3	1845.13767	1845.13727	41							
16	4	13	17	3	14	1838.72682	1838.72634	48	11	5	6	12	6	6	1845.14847	1845.14861	-14							
16	3	13	17	4	14	1838.72682	1838.72634	48	13	6	8	14	5	9	1845.20067	1845.20131	-64							
12	12	0	13	13	0	1838.86474	1838.86443	31	13	5	8	14	6	9	1845.20067	1845.20131	-64							
12	12	1	13	13	0	1838.86474	1838.86442	32	11	7	4	12	8	4	1845.26266	1845.26273	-8							
12	12	1	13	13	1	1838.86474	1838.86469	5	11	5	7	12	6	7	1845.30581	1845.30596	-16							
12	12	0	13	13	1	1838.86474	1838.86469	5	11	4	7	12	5	7	1845.30581	1845.30596	-16							
15	6	10	16	5	11	1839.09849	1839.09953	-104	11	3	8	12	4	8	1845.52139	1845.52137	2							
15	5	10	16	6	11	1839.09849	1839.09953	-104	11	4	8	12	5	8	1845.52139	1845.52137	2							
11	5	7	12	6	6	1839.14705	1839.14726	-21	9	6	4	10	9	1	1845.59796	1845.59862	-67							
12	11	2	13	12	1	1839.43505	1839.43527	-22	11	2	9	12	3	9	1845.77987	1845.77969	18							
12	11	2	13	12	2	1839.44461	1839.44458	3	11	3	9	12	4	9	1845.77987	1845.77969	18							
12	11	1	13	12	1	1839.45383	1839.45379	4	15	1	15	16	0	16	1845.88202	1845.88241	-39							
12	11	1	13	12	2	1839.46363	1839.46311	52	15	0	15	16	1	16	1845.88202	1845.88241	-39							
12	9	4	13	10	3	*1839.54915	1839.55101	-186	12	8	5	13	7	6	1846.00811	1846.00773	38							
11	7	4	12	10	3	*1839.88244	1839.88109	135	14	3	12	15	2	13	1846.03498	1846.03507	-8							
12	10	3	13	11	2	1839.88244	1839.88229	15	14	2	12	15	3	13	1846.03498	1846.03507	-8							
12	10	3	13	11	3	1840.02186	1840.02188	-2	11	1	10	12	2	10	1846.07830	1846.07758	72							
16	2	14	17	3	15	1840.11121	1840.11118	3	11	2	10	12	3	10	1846.07830	1846.07758	72							
16	3	14	17	2	15	1840.11121	1840.11118	3	11	0	11	12	1	11	1846.41362	1846.41362	0							
12	10	2	13	11	2	1840.12464	1840.12465	-1	11	1	11	12	2	11	1846.41362	1846.41362	0							
12	9	4	13	10	4	1840.49310	1840.49319	-8	13	4	9	14	5	10	1846.43842	1846.43828	14							
12	8	5	13	9	5	1840.77555	1840.77565	-10	13	5	9	14	4	10	1846.43842	1846.43828	14							
12	9	3	13	10	3	1840.84995	1840.84995	1	10	7	4	11	8	3	1847.23373	1847.23448	-75							
10	7	4	11	10	1	1840.86640	1840.86583	57	14	1	13	15	2	14	1847.39429	1847.39372	57							
12	7	6	13	8	6	1840.93868	1840.93886	-18	14	2	13	15	1	14	1847.39429	1847.39372	57							
12	6	6	13	7	6	1840.97272	1840.97293	-20	10	10	1	11	11	1	*1847.55974	1847.55840	134							
12	7	5	13	8	5	1841.01063	1841.01074	-11	10	10	1	11	11	0	1847.55974	1847.55995	-21							
15	11	4	16	10	7	1841.02166	1841.02245	-80	10	10	0	11	11	1	1847.55974	1847.56014	-40							
10	0	10	11	3	9	1841.10227	1841.10189	38	10	10	0	11	11	0	1847.55974	1847.56014	-40							
10	1	10	11	2	9	1841.10227	1841.10189	38	10	9	2	11	10	2	1848.12955	1848.12951	5							
12	6	7	13	7	7	1841.10227	1841.10208	20	10	9	1	11	10	1	1848.16209	1848.16204	6							
12	5	7	13	6	7	1841.10524	1841.10488	36	8	4	5	9	7	2	1848.63367	1848.63304	64							
12	8	4	13	9	4	1841.15055	1841.15060	-5	10	8	3	11	9	3	1848.64190	1848.64191	-2							
12	5	8	13	6	8	1841.30888	1841.30889	-1	14	1	14	15	0	15	1848.78513	1848.78569	-56							
12	4	8	13	5	8	1841.30888	1841.30889	-1	14	0	14	15	1	15	1848.78513	1848.78569	-56							
13	8	5	14	9	6	1841.30888	1841.30848	40	10	8	2	11	9	2	1848.85798	1848.85800	-1							
16	1	15	17	2	16	1841.52875	1841.52958	-83	10	7	4	11	8	4	1848.98388	1848.98392	-4							
16	2	15	17	1	16	1841.52875	1841.52958	-83	13	2	11	14	3	12	1849.00125	1849.00138	-13							
12	3	9	13	4	9	1841.56046	1841.56020	26	13	3	11	14	2	12	1849.00125	1849.00138	-13							
12	4	9	13	5	9	1841.56046	1841.56020	26	10	6	5	11	7	5	1849.16468	1849.16476	-8							
12	2	10	13	3	10	*1841.85434	1841.85263	170	10	5	5	11	6	5	1849.22639	1849.22647	-8							
12	3	10	13	4	10	*1841.85434	1841.85263	170	10	5	6	11	6	6	1849.30906	1849.30919	-13							
12	1	11	13	2	11	1842.18411	1842.18407	4	10	4	6	11	5	6	1849.31424	1849.31437	-13							
12	2	11	13	3	11	1842.18411	1842.18407	4	10	6	4	11	7	4	1849.32878	1849.32880	-2							
12	1	12	13	2	12	1842.55381	1842.55369	12	10	7	3	11	8	3	1849.34201	1849.34199	2							
12	0	12	13	1	12	1842.55381	1842.55369	12	12	5	8	13	4	9	1849.46527	1849.46521	6							
13	7	6	14	8	7	1842.76136	1842.76147	-11	12	4	8	13	5	9	1849.46527	1849.46521	6							
13	8	6	14	7	7	1842.82259	1842.82297	-38	10	3	7	11	4	7	1849.48906	1849.48917	-11							
14	9	5	15	8	7	1842.82259	1842.82320	-62	10	4	7	11	5	7	1849.48906	1849.48917	-11							
16	0	16	17	1	17	1842.98305	1842.98272	33	10	2	8	11	3	8	1849.71271	1849.71272	-1							
16	1	16	17	0	17	1842.98305	1842.98272	33	10	3	8	11	4	8	1849.71271	1849.71272	-1							
10	5	5	11	8	3	1843.03274	1843.03177	97	10	1	9	11	2	9	1849.97703	1849.97693	10							
15	2	13	16	3	14	1843.07175	1843.07157	18	10	2	9	11	3	9	1849.97703	1849.97693	10							
15	3	13	16	2	14	1843.07175	1843.07157	18	10	0	10	11	1	10	1850.27977	1850.27951	27							
11	11	1	12	12	0	1843.22485	1843.22467	17	10	1	10	11	2	10	1850.27977	1850.27951	27							
11	11	0	12	12	1	1843.22485	1843.22452	33	13	1	12	14	2	13	1850.33077	1850.33032	46							

Continue

(I)					(II)					(III)					(IV)					(V)				
13	2	12	14	1	13	1850.33077	1850.33032	46	10	1	9	11	2	10	1859.15487	1859.15454	33							
12	4	9	13	3	10	1850.70300	1850.70258	42	10	2	9	11	1	10	1859.15487	1859.15454	33							
12	3	9	13	4	10	1850.70300	1850.70258	42	9	4	6	10	3	7	1859.71047	1859.71079	-32							
13	1	13	14	0	14	1851.69217	1851.69206	11	9	3	6	10	4	7	1859.71047	1859.71079	-32							
9	9	1	10	10	1	1851.86743	1851.86696	47	7	7	1	8	8	0	1860.38565	1860.38534	31							
9	9	0	10	10	0	1851.87042	1851.86975	67	7	7	1	8	8	1	1860.39676	1860.39660	15							
9	8	2	10	9	1	1852.35426	1852.35414	12	7	7	0	8	8	0	1860.40819	1860.40805	15							
9	8	2	10	9	2	1852.42420	1852.42415	5	7	7	0	8	8	1	1860.41927	1860.41931	-4							
9	8	1	10	9	1	1852.48123	1852.48116	7	10	1	10	11	0	11	1860.42621	1860.42591	30							
11	5	7	12	4	8	1852.49407	1852.49440	-33	10	0	10	11	1	11	1860.42621	1860.42591	30							
11	4	7	12	5	8	1852.49407	1852.49440	-33	6	2	4	7	5	2	1860.50568	1860.50556	12							
9	7	3	10	8	3	1852.88774	1852.88775	-1	11	4	7	12	3	9	1860.67521	1860.67623	-103							
9	7	2	10	8	2	1853.15078	1853.15074	3	11	5	7	12	4	9	1860.67521	1860.67623	-103							
9	6	4	10	7	4	1853.16480	1853.16487	-7	7	6	2	8	7	1	1860.67521	1860.67494	27							
12	1	11	13	2	12	1853.26945	1853.26949	-4	9	3	7	10	2	8	1860.89020	1860.89040	-20							
12	2	11	13	1	12	1853.26945	1853.26949	-4	9	2	7	10	3	8	1860.89020	1860.89040	-20							
9	5	5	10	6	5	1853.31556	1853.31565	-9	7	6	2	8	7	2	1860.90132	1860.90127	5							
9	4	5	10	5	5	1853.34199	1853.34207	-8	7	6	1	8	7	1	1861.03647	1861.03641	6							
9	5	4	10	6	4	1853.37381	1853.37385	-3	7	5	3	8	6	3	1861.24340	1861.24339	1							
11	9	2	12	8	5	1853.39066	1853.39039	26	6	4	2	7	7	1	1861.26254	1861.26309	-55							
9	3	6	10	4	6	1853.46362	1853.46390	-28	7	6	1	8	7	2	1861.26254	1861.26274	-20							
9	4	6	10	5	6	1853.46362	1853.46390	-28	8	7	1	9	6	3	1861.35710	1861.35726	-16							
9	6	3	10	7	3	1853.47122	1853.47121	1	7	4	4	8	5	4	1861.41575	1861.41580	-5							
9	2	7	10	3	7	1853.65135	1853.65146	-11	7	3	4	8	4	4	1861.46576	1861.46581	-5							
9	3	7	10	4	7	1853.65135	1853.65146	-11	7	5	2	8	6	2	1861.51483	1861.51476	7							
11	3	8	12	4	9	1853.70310	1853.70320	-10	7	3	5	8	4	5	1861.54465	1861.54453	12							
11	4	8	12	3	9	1853.70310	1853.70320	-10	7	2	5	8	3	5	1861.54786	1861.54766	19							
9	1	8	10	2	8	1853.88160	1853.88166	-6	7	4	3	8	5	3	1861.55184	1861.55174	10							
9	2	8	10	3	8	1853.88160	1853.88166	-6	7	2	6	8	3	6	1861.70559	1861.70575	-16							
10	8	2	11	7	4	1853.91503	1853.91499	4	7	1	6	8	2	6	1861.70559	1861.70575	-16							
9	0	9	10	1	9	1854.15083	1854.15080	3	7	1	7	8	2	7	1861.90742	1861.90757	-15							
9	1	9	10	2	9	1854.15083	1854.15080	3	7	0	7	8	1	7	1861.90742	1861.90757	-15							
10	5	5	11	6	6	1854.34200	1854.34230	-30	8	6	2	9	5	4	1862.05487	1862.05478	9							
11	8	4	12	7	6	1854.37355	1854.37376	-21	9	1	8	10	2	9	1862.10020	1862.10001	20							
10	6	5	11	5	6	1854.38631	1854.38646	-15	9	2	8	10	1	9	1862.10020	1862.10001	20							
12	0	12	13	1	13	1854.60103	1854.60111	-7	8	3	5	9	4	6	1862.71455	1862.71466	-11							
12	1	12	13	0	13	1854.60103	1854.60111	-7	8	4	5	9	3	6	1862.71916	1862.71901	15							
15	4	12	16	3	14	1854.67716	1854.67638	78	7	5	2	8	6	3	1862.75653	1862.75628	24							
7	5	3	8	8	0	1854.71336	1854.71456	-120	9	0	9	10	1	10	1863.34119	1863.34112	7							
11	2	9	12	3	10	1854.94172	1854.94151	21	9	1	9	10	0	10	1863.34119	1863.34112	7							
11	3	9	12	2	10	1854.94172	1854.94151	21	8	2	6	9	3	7	1863.86739	1863.86768	-28							
8	8	1	9	9	1	1856.14687	1856.14675	12	8	3	6	9	2	7	1863.86739	1863.86768	-28							
8	8	0	9	9	0	1856.15265	1856.15248	17	7	4	3	8	5	4	1864.42150	1864.42185	-35							
8	8	0	9	9	1	1856.15798	1856.15786	12	6	6	1	7	7	0	1864.59144	1864.59124	20							
11	1	10	12	2	11	1856.21171	1856.21097	74	6	6	1	7	7	1	1864.61447	1864.61434	13							
11	2	10	12	1	11	1856.21171	1856.21097	74	6	6	0	7	7	0	1864.63632	1864.63620	12							
10	9	2	11	8	4	1856.21171	1856.21102	70	6	6	0	7	7	1	1864.65979	1864.65930	49							
8	7	2	9	8	1	1856.55301	1856.55342	-41	7	5	3	8	4	4	1864.79649	1864.79644	5							
8	7	2	9	8	2	1856.68264	1856.68258	6	9	4	5	10	3	7	1864.79649	1864.79703	-54							
10	3	7	11	4	8	1856.70634	1856.70604	29	8	6	3	9	5	5	1864.97204	1864.97227	-23							
10	4	7	11	3	8	1856.70634	1856.70604	29	7	6	1	8	5	3	1865.00360	1865.00362	-2							
8	7	1	9	8	1	1856.77526	1856.77519	7	8	2	7	9	1	8	1865.04700	1865.04720	-19							
8	7	1	9	8	2	1856.90406	1856.90435	-28	8	1	7	9	2	8	1865.04700	1865.04720	-19							
9	7	3	10	6	4	1857.00040	1856.99924	117	6	5	2	7	6	2	1865.07716	1865.07712	5							
8	6	3	9	7	3	1857.08821	1857.08822	-1	6	5	1	7	6	1	1865.24924	1865.24918	6							
8	5	4	9	6	4	1857.30734	1857.30740	-6	6	4	3	7	5	3	1865.35493	1865.35492	0							
8	6	2	9	7	2	1857.37111	1857.37107	4	6	3	4	7	4	4	1865.49407	1865.49412	-5							
8	4	4	9	5	4	1857.41753	1857.41756	-3	6	2	4	7	3	4	1865.51324	1865.51328	-4							
8	4	5	9	5	5	1857.44165	1857.44174	-9	6	3	3	7	4	3	1865.53898	1865.53894	4							
8	3	5	9	4	5	1857.45155	1857.45162	-7	6	4	2	7	5	2	1865.58793	1865.58781	12							
11	1	11	12	0	12	1857.51247	1857.51249	-2	6	1	5	7	2	5	1865.62446	1865.62464	-17							
11	0	11	12	1	12	1857.51247	1857.51249	-2	6	2	5	7	3	5	1865.62446	1865.62464	-17							
8	5	3	9	6	3	1857.53608	1857.53606	2	7	7	1	8	6	2	1865.67243	1865.67265	-22							
8	2	6	9	3	6	1857.59565	1857.59581	-17	7	3	4	8	4	5	1865.70822	1865.70827	-6							
8	3	6	9	4	6	1857.59565	1857.59581	-17	6	0	6	7	1	6	1865.79195	1865.79212	-17							
8	1	7	9	2	7	1857.79126	1857.79137	-12	6	1	6	7	2	6	1865.79195	1865.79212	-17							
8	2	7	9	3	7	1857.79126	1857.79137	-12	8	1	8	9	0	9	1866.25772	1866.25790	-18							
9	7	2	10	6	4	1857.90124	1857.90123	1	8	0	8	9	1	9	1866.25772	1866.25790	-18							
10	2	8	11	3	9	1857.91500	1857.91495	5	7	3	5	8	2	6	1866.84632	1866.84649	-17							
10	3	8	11	2	9	1857.91500	1857.91495	5	7	2	5	8	3	6	1866.84632	1866.84649	-17							
8	1	8	9	2	8	1858.02690	1858.02698	-8	7	1	6	8	2	7	1867.99592	1867.99596	-3							
8	0	8	9	1	8	1858.02690	1858.02698	-8	7	2	6	8	1	7	1867.99592	1867.99596	-3							
9	5	5	10	4	6	1858.56380	1858.56404	-24	6	3	3	7	4	4	1868.64660	1868.64623	38							

Continue

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)					
5	5	1	6	6	0	1868.75166	1868.75141	25	3	3	1	4	2	2	1879.29813	1879.29715	97
5	5	1	6	6	1	1868.79741	1868.79731	10	19	17	3	19	18	1	1879.48521	1879.48627	-106
6	5	1	7	4	3	1868.82793	1868.82773	20	3	3	0	4	2	2	1879.53568	1879.53533	35
5	5	0	6	6	0	1868.83643	1868.83630	13	3	2	2	4	1	3	1879.84749	1879.84742	7
5	5	0	6	6	1	1868.88229	1868.88219	10	12	5	7	12	8	5	*1879.88744	1879.88902	-158
7	1	7	8	0	8	1869.17585	1869.17608	-23	14	8	7	14	9	5	1879.89215	1879.89217	-2
7	0	7	8	1	8	1869.17585	1869.17608	-23	10	4	6	10	7	3	1880.07292	1880.07418	-125
5	4	2	6	5	2	1869.20814	1869.20806	7	3	1	3	4	0	4	1880.85944	1880.85960	-15
5	4	1	6	5	1	1869.39674	1869.39668	6	3	0	3	4	1	4	1880.85944	1880.85960	-15
5	3	3	6	4	3	1869.42581	1869.42581	0	2	2	1	3	3	1	1881.10885	1881.10873	12
5	2	3	6	3	3	1869.51772	1869.51770	2	2	2	0	3	3	0	1881.20070	1881.20058	12
5	2	4	6	3	4	1869.54525	1869.54534	-9	4	1	3	5	0	5	1881.20887	1881.20919	-33
5	1	4	6	2	4	1869.55120	1869.55127	-7	2	1	2	3	2	2	1881.33198	1881.33190	8
5	3	2	6	4	2	1869.59975	1869.59969	6	2	0	2	3	1	2	1881.39846	1881.39845	1
5	1	5	6	2	5	1869.68012	1869.68024	-12	2	1	1	3	2	1	1881.43524	1881.43515	9
5	0	5	6	1	5	1869.68012	1869.68024	-12	17	15	3	17	16	1	1881.47011	1881.47107	-96
6	2	4	7	3	5	1869.82261	1869.82230	31	3	3	0	4	2	3	1881.80226	1881.80331	-105
6	3	4	7	2	5	1869.83020	1869.83018	2	16	14	3	16	15	1	1882.43642	1882.43620	22
5	4	1	6	5	2	1869.95344	1869.95403	-59	9	3	6	9	6	4	1882.54831	1882.54754	77
6	1	5	7	2	6	1870.94593	1870.94612	-19	16	11	6	16	12	4	1882.54831	1882.54825	5
6	2	5	7	1	6	1870.94593	1870.94612	-19	15	10	6	15	11	4	1882.60288	1882.69081	-53
5	3	2	6	4	3	1871.44939	1871.44934	5	14	6	9	14	7	8	1882.76283	1882.76246	37
6	1	6	7	0	7	1872.09535	1872.09550	-14	14	5	9	14	6	8	1882.76283	1882.76246	37
6	0	6	7	1	7	1872.09535	1872.09550	-14	15	7	8	15	8	7	1883.09414	1883.09289	126
5	2	3	6	3	4	1872.77808	1872.77844	-36	16	13	4	16	14	2	1883.09414	1883.09447	-33
5	4	1	6	3	3	1872.80238	1872.80208	30	13	5	9	13	6	8	1883.19146	1883.19104	41
4	4	1	5	5	0	1872.85563	1872.85555	8	13	4	9	13	5	8	1883.19146	1883.19104	41
4	4	1	5	5	1	1872.94261	1872.94250	11	16	13	3	16	14	3	1883.34116	1883.34059	57
4	4	0	5	5	0	1873.00500	1873.00488	11	15	13	3	15	14	1	1883.37966	1883.37932	33
4	4	0	5	5	1	1873.09206	1873.09183	23	16	12	5	16	13	3	1883.46502	1883.46491	12
4	3	2	5	4	2	1873.29358	1873.29350	8	12	3	9	12	4	8	1883.59352	1883.59446	-94
4	2	3	5	3	3	1873.45991	1873.45990	2	12	4	9	12	5	8	1883.59352	1883.59446	-94
4	3	1	5	4	1	1873.47246	1873.47236	9	14	13	1	14	14	1	1883.66346	1883.66272	73
4	1	3	5	2	3	1873.49671	1873.49669	2	14	13	1	14	14	0	1883.66346	1883.66272	73
4	2	2	5	3	2	1873.56130	1873.56124	6	10	0	10	10	1	9	1883.66346	1883.66380	-35
4	1	4	5	2	4	1873.57153	1873.57166	-14	10	1	10	10	2	9	1883.66346	1883.66380	-35
4	0	4	5	1	4	1873.57153	1873.57166	-14	2	0	2	3	1	3	1883.77367	1883.77316	51
20	12	8	20	15	6	1873.82441	1873.82471	-31	2	1	2	3	0	3	1883.79136	1883.79134	2
5	1	4	6	2	5	1873.89715	1873.89745	-30	11	3	9	11	4	8	1883.97175	1883.97133	42
5	2	4	6	1	5	1873.89715	1873.89745	-30	11	2	9	11	3	8	1883.97175	1883.97133	42
18	9	9	18	12	7	1873.91522	1873.91507	16	15	12	4	15	13	2	1884.01609	1884.01580	29
4	3	1	5	4	2	1874.24070	1874.24099	-29	15	11	5	15	12	3	1884.13336	1884.13321	15
18	10	9	18	11	7	1874.24070	1874.24142	-71	14	12	3	14	13	1	1884.29633	1884.29595	37
14	10	5	14	13	2	1875.00860	1875.00923	-63	12	4	8	12	5	7	1884.31104	1884.31103	1
5	0	5	6	1	6	1875.01581	1875.01599	-18	12	5	8	12	6	7	1884.31104	1884.31103	1
5	1	5	6	0	6	1875.01581	1875.01599	-18	10	2	9	10	3	8	1884.32100	1884.32049	51
4	3	2	5	2	3	1875.92317	1875.92356	-40	10	1	9	10	2	8	1884.32100	1884.32049	51
4	1	3	5	2	4	1876.84260	1876.84269	-9	13	12	1	13	13	0	1884.53573	1884.53684	-111
4	2	3	5	1	4	1876.85617	1876.85612	5	13	12	1	13	13	1	*1884.53573	1884.53710	-136
4	3	1	5	2	3	1876.87140	1876.87105	35	14	10	5	14	11	3	1884.63416	1884.63406	10
3	3	1	4	4	0	1876.89417	1876.89353	64	11	4	8	11	5	7	1884.67809	1884.67797	12
3	3	1	4	4	1	1877.04710	1877.04699	11	11	3	8	11	4	7	1884.67809	1884.67797	12
3	3	0	4	4	0	1877.13182	1877.13171	12	14	11	4	14	12	2	1884.86846	1884.86819	28
5	3	3	6	2	5	1877.17799	1877.17745	53	16	12	4	16	13	4	1884.92820	1884.92822	-2
3	3	0	4	4	1	1877.28517	1877.28517	1	13	9	5	13	10	3	1884.95863	1884.95892	-29
3	2	2	4	3	2	1877.33428	1877.33419	9	10	3	8	10	4	7	1885.01982	1885.01957	25
3	1	3	4	2	3	1877.46114	1877.46111	4	10	2	8	10	3	7	1885.01982	1885.01957	25
3	0	3	4	1	3	1877.47195	1877.47195	1	1	1	1	2	2	1	1885.12729	1885.12721	8
3	2	1	4	3	1	1877.48180	1877.48173	7	11	7	5	11	8	3	1885.17156	1885.17166	-11
3	1	2	4	2	2	1877.48777	1877.48770	7	13	11	3	13	12	1	1885.18004	1885.17949	55
5	5	1	6	2	4	*1877.53594	1877.53754	-160	1	1	0	2	2	0	1885.20126	1885.20111	14
13	5	8	13	8	6	1877.78234	1877.78272	-38	14	10	5	14	11	4	1885.25690	1885.25663	27
4	1	4	5	0	5	1877.93777	1877.93742	35	19	13	6	19	14	6	1885.31424	1885.31417	6
4	0	4	5	1	5	1877.93777	1877.93742	35	13	11	2	13	12	2	1885.32728	1885.32717	11
11	6	6	11	9	3	1877.93777	1877.93836	-59	9	1	8	9	2	7	1885.33428	1885.33430	-2
4	4	0	5	3	3	1877.96939	1877.96964	-25	9	2	8	9	3	7	1885.33428	1885.33430	-2
12	9	3	12	12	0	1878.24732	1878.24851	-119	1	0	1	2	1	1	1885.34198	1885.34201	-3
3	2	1	4	3	2	1878.46020	1878.45986	33	12	11	2	12	12	1	1885.37723	1885.37708	15
11	3	8	11	6	6	1878.46020	1878.46085	-66	12	11	2	12	12	0	1885.37723	1885.37653	70
11	4	8	11	5	6	1878.46735	1878.46810	-75	12	11	1	12	12	0	1885.39632	1885.39505	127
20	17	3	20	18	3	1879.02866	1879.02822	45	12	11	1	12	12	1	1885.39632	1885.39561	72
15	2	14	15	3	13	*1879.29813	1879.30172	-360	11	5	7	11	6	6	1885.43469	1885.43404	64
15	1	14	15	2	13	*1879.29813	1879.30172	-360	13	8	6	13	9	5	1885.45139	1885.45092	47

Continue

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)			(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)		
14	11	3	14	12	3	1885.55838	1885.55847	-8	8	3	5	8	4	4	1888.00140	1888.00146	-6												
13	10	4	13	11	2	1885.62856	1885.62852	4	19	10	9	19	11	9	*1888.12264	1888.12041	223												
17	12	5	17	13	5	1885.79318	1885.79299	19	9	7	3	9	8	1	1888.12873	1888.12866	7												
12	10	3	12	11	1	1886.02044	1886.02027	17	21	8	13	21	9	13	1888.16863	1888.16946	-83												
12	6	6	12	7	5	1886.06410	1886.06379	31	21	9	13	21	8	13	1888.16863	1888.16946	-83												
7	4	3	7	7	1	1886.06410	1886.06404	6	7	2	5	7	3	4	1888.20088	1888.20114	-26												
9	3	7	9	4	6	1886.07147	1886.07118	29	10	8	2	10	9	2	1888.21041	1888.21040	1												
9	2	7	9	3	6	1886.07147	1886.07118	29	9	6	4	9	7	3	1888.22899	1888.22909	-10												
21	13	8	21	14	8	1886.20269	1886.20180	89	9	7	3	9	8	2	1888.25743	1888.25782	-38												
11	10	2	11	11	1	1886.20269	1886.20167	102	15	10	5	15	11	5	1888.26552	1888.26595	-43												
11	10	2	11	11	0	1886.20269	1886.20167	102	19	13	7	19	12	7	1888.26552	1888.26477	75												
11	6	6	11	7	5	1886.22770	1886.22769	2	19	9	10	19	10	10	*1888.41885	1888.42062	-177												
15	11	4	15	12	4	1886.22770	1886.22796	-26	19	10	10	19	9	10	*1888.41885	1888.42062	-177												
11	10	1	11	11	0	1886.23924	1886.23838	86	18	10	8	18	11	8	1888.44342	1888.44366	-24												
11	10	1	11	11	1	1886.23924	1886.23838	86	20	9	12	20	8	12	1888.45993	1888.45932	61												
12	9	4	12	10	2	1886.27027	1886.27007	20	20	8	12	20	9	12	1888.45993	1888.45932	61												
12	10	2	12	11	2	1886.28157	1886.28126	31	11	8	3	11	9	2	1888.47372	1888.47291	81												
8	1	7	8	2	6	1886.35097	1886.35091	6	8	7	2	8	8	0	1888.47372	1888.47395	-24												
8	2	7	8	3	6	1886.35097	1886.35091	6	8	7	2	8	8	1	1888.48536	1888.48522	14												
12	8	5	12	9	4	1886.45374	1886.45361	12	18	11	8	18	10	8	1888.52346	1888.52365	-19												
10	5	6	10	6	5	1886.55583	1886.55584	-1	18	12	7	18	11	7	1888.58035	1888.58063	-28												
7	0	7	7	1	6	1886.60335	1886.60344	-9	21	8	14	21	7	14	1888.59730	1888.59755	-25												
7	1	7	7	2	6	1886.60335	1886.60344	-9	21	7	14	21	8	14	1888.59730	1888.59755	-25												
18	12	6	18	13	6	1886.64079	1886.64038	41	13	9	4	13	10	4	1888.61258	1888.61257	1												
1	0	1	2	1	2	1886.65224	1886.65259	-35	8	5	4	8	6	3	1888.62384	1888.62358	25												
13	10	3	13	11	3	1886.69321	1886.69307	14	8	6	3	8	7	1	1888.62384	1888.62380	4												
23	11	13	23	10	13	1886.71197	1886.71081	116	17	10	7	17	11	7	1888.68582	1888.68607	-25												
23	10	13	23	11	13	1886.71197	1886.71081	116	16	10	6	16	11	6	1888.69388	1888.69408	-21												
11	8	4	11	9	2	1886.76784	1886.76806	-23	8	7	1	8	8	1	1888.70691	1888.70698	-7												
21	12	9	21	13	9	1886.76784	1886.76806	-23	18	9	9	18	10	9	1888.73813	1888.73706	107												
11	9	3	11	10	1	1886.80492	1886.80470	22	19	9	11	19	8	11	1888.74690	1888.74797	-107												
9	3	6	9	4	5	*1886.86554	1886.86693	-139	19	8	11	19	9	11	1888.74690	1888.74797	-107												
21	13	9	21	12	9	*1886.87862	1886.88038	-177	18	10	9	18	9	9	*1888.74690	1888.74436	254												
21	14	8	21	13	8	1886.97521	1886.97586	-64	20	7	13	20	8	13	1888.85499	1888.85507	-8												
14	9	5	14	10	4	1886.97521	1886.97586	-64	20	8	13	20	7	13	1888.85499	1888.85507	-8												
10	9	2	10	10	0	1886.99829	1886.99778	51	11	8	3	11	9	3	1888.88228	1888.88244	-16												
22	11	12	22	10	12	*1887.06949	1887.06722	228	10	6	4	10	7	3	1888.95238	1888.95217	21												
22	10	12	22	11	12	*1887.06949	1887.06722	228	7	5	3	7	6	1	1888.98446	1888.98448	-2												
10	9	1	10	10	1	1887.06949	1887.06943	6	17	11	7	17	10	7	1888.99019	1888.99035	-16												
19	12	7	19	13	7	1887.07815	1887.07881	-65	18	9	10	18	8	10	1889.03424	1889.03554	-131												
16	11	5	16	12	5	1887.10718	1887.10674	44	18	8	10	18	9	10	1889.03424	1889.03554	-131												
23	9	14	23	10	14	*1887.13329	1887.13000	329	17	9	8	17	10	8	1889.04398	1889.04408	-10												
23	10	14	23	9	14	*1887.13329	1887.13000	329	21	6	15	21	7	15	1889.06305	1889.06255	50												
11	9	2	11	10	2	1887.24419	1887.24387	32	21	7	15	21	6	15	1889.06305	1889.06255	50												
24	9	16	24	8	16	1887.29251	1887.29225	25	17	10	8	17	9	8	1889.07673	1889.07678	-5												
24	8	16	24	9	16	1887.29251	1887.29225	25	19	7	12	19	8	12	1889.11169	1889.11143	26												
9	6	4	9	7	2	1887.30456	1887.30443	13	19	8	12	19	7	12	1889.11169	1889.11143	26												
10	6	5	10	7	4	1887.31474	1887.31454	20	7	6	2	7	7	0	1889.13124	1889.13135	-10												
7	1	6	7	2	5	1887.37007	1887.37081	-74	0	0	0	1	1	0	1889.13790	1889.13776	14												
7	4	4	7	5	2	1887.38231	1887.38271	-40	8	4	4	8	5	3	1889.16000	1889.16130	-130												
8	5	4	8	6	2	1887.38231	1887.38206	25	9	7	2	9	8	2	1889.16000	1889.15981	19												
20	13	8	20	12	8	1887.44185	1887.44103	81	6	4	3	6	5	1	1889.21140	1889.21182	-42												
22	9	13	22	10	13	1887.45466	1887.45456	10	10	7	3	10	8	2	1889.21760	1889.21729	31												
22	10	13	22	9	13	1887.45466	1887.45456	10	7	3	4	7	4	3	1889.23236	1889.23240	-3												
14	10	4	14	11	4	1887.47171	1887.47157	15	14	9	5	14	10	5	1889.24437	1889.24442	-6												
10	8	3	10	9	1	1887.51428	1887.51478	-50	20	6	14	20	7	14	1889.28690	1889.28724	-33												
20	12	9	20	11	9	1887.51428	1887.51515	-87	20	7	14	20	6	14	1889.28690	1889.28724	-33												
11	6	5	11	7	4	1887.53244	1887.53305	-61	16	9	7	16	10	7	1889.31148	1889.31178	-30												
9	5	5	9	6	4	1887.64674	1887.64685	-11	17	9	9	17	8	9	1889.32198	1889.32223	-25												
9	8	2	9	9	0	1887.75851	1887.75845	6	17	8	9	17	9	9	1889.32198	1889.32223	-25												
9	8	2	9	9	1	1887.76364	1887.76383	-19	7	5	3	7	6	2	1889.35498	1889.35475	24												
21	10	12	21	9	12	1887.77827	1887.77831	-4	18	7	11	18	8	11	1889.36759	1889.36666	94												
20	11	10	20	10	10	1887.77827	1887.77802	25	18	8	11	18	7	11	1889.36759	1889.36666	94												
21	9	12	21	10	12	1887.77827	1887.77802	25	15	9	6	15	10	6	1889.44496	1889.44493	3												
19	11	8	19	12	8	*1887.78488	1887.78756	-269	5	1	4	5	2	3	1889.44496	1889.44493	3												
9	4	5	9	5	4	1887.81456	1887.81473	-17	16	10	7	16	9	7	1889.44911	1889.44914	-2												
12	9	3	12	10	3	1887.81456	1887.81451	5	19	7	13	19	6	13	1889.51097	1889.51096	0												
22	8	14	22	9	14	1887.87889	1887.87833	56	19	6	13	19	7	13	1889.51097	1889.51096	0												
22	9	14	22	8	14	1887.87889	1887.87833	56	7	6	1	7	7	1	1889.51542	1889.51592	-50												
9	8	1	9	9	1	1887.89114	1887.89085	29	17	12	6	17	11	6	*1889.55005	1889.55228	-222												
8	4	5	8	5	4	1887.93061	1887.93059	2	18	13	6	18	12	6	*1889.55005	1889.55229	-224												
18	11	7	18	12	7	1887.95591	1887.95618	-27	16	8	8	16	9	8	1889.60216	1889.60212	3												
19	12	8	19	11	8	1887.96990	1887.96995	-5	12	8	4	12	9	4	1889.61415	1889.61379	36												

Continue

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)					
16	9	8	16	8	8	1889.61415	1889.61451	-35	16	5	12	16	4	12	1890.88729	1890.88693	37
17	7	10	17	8	10	1889.61989	1889.62084	-95	13	9	5	13	8	5	1890.89929	1890.89939	-10
17	8	10	17	7	10	1889.61989	1889.62084	-95	19	4	16	19	3	16	1890.93211	1890.93180	31
16	11	6	16	10	6	1889.69574	1889.69579	-5	19	3	16	19	4	16	1890.93211	1890.93180	31
6	5	2	6	6	0	1889.71419	1889.71433	-14	16	12	5	16	11	5	1890.98418	1890.98395	23
18	7	12	18	6	12	1889.73391	1889.73367	24	12	6	6	12	7	6	1891.03164	1891.03172	-8
18	6	12	18	7	12	1889.73391	1889.73367	24	15	5	11	15	4	11	1891.04123	1891.04114	10
20	5	15	20	6	15	1889.75563	1889.75647	-84	15	4	11	15	5	11	1891.04123	1891.04114	10
20	6	15	20	5	15	1889.75563	1889.75647	-84	13	5	8	13	6	8	1891.07247	1891.07271	-24
6	5	2	6	6	1	1889.76048	1889.76023	25	13	6	8	13	5	8	1891.07247	1891.07271	-24
9	6	3	9	7	2	1889.77926	1889.77904	22	12	7	6	12	6	6	1891.07247	1891.07204	43
8	6	2	8	7	1	1889.83087	1889.83131	-44	3	2	2	3	3	1	1891.09859	1891.09761	98
10	7	3	10	8	3	1889.85621	1889.85629	-8	12	8	5	12	7	5	1891.09859	1891.09860	-1
15	8	7	15	9	7	1889.86558	1889.86563	-5	10	6	4	10	7	4	1891.12042	1891.12045	-3
16	8	9	16	7	9	1889.87458	1889.87411	47	17	3	14	17	4	14	1891.17491	1891.17508	-17
16	7	9	16	8	9	1889.87458	1889.87411	47	17	4	14	17	3	14	1891.17491	1891.17508	-17
15	9	7	15	8	7	1889.92261	1889.92291	-30	11	6	5	11	7	5	1891.17491	1891.17491	-1
19	6	14	19	5	14	1889.94667	1889.94699	-32	14	4	10	14	5	10	*1891.19211	1891.19461	-250
19	5	14	19	6	14	1889.94667	1889.94699	-32	14	5	10	14	4	10	*1891.19211	1891.19461	-250
17	6	11	17	7	11	1889.95581	1889.95535	46	12	5	7	12	6	7	1891.25692	1891.25655	37
17	7	11	17	6	11	1889.95581	1889.95535	46	12	6	7	12	5	7	1891.25941	1891.25891	50
15	10	6	15	9	6	1889.95978	1889.95916	63	16	3	13	16	4	13	1891.29651	1891.29637	14
13	8	5	13	9	5	1890.03873	1890.03886	-13	16	4	13	16	3	13	1891.29651	1891.29637	14
8	6	2	8	7	2	*1890.05915	1890.05764	151	13	4	9	13	5	9	1891.34770	1891.34736	34
14	8	6	14	9	6	1890.05915	1890.06004	-89	13	5	9	13	4	9	1891.34770	1891.34736	34
15	7	8	15	8	8	1890.12466	1890.12452	14	11	7	5	11	6	5	1891.36631	1891.36636	-5
15	8	8	15	7	8	1890.12892	1890.12883	9	8	5	3	8	6	3	1891.40329	1891.40334	-6
18	5	13	18	6	13	1890.13676	1890.13674	3	15	4	12	15	3	12	1891.41745	1891.41720	25
18	6	13	18	5	13	1890.13676	1890.13674	3	15	3	12	15	4	12	1891.41745	1891.41720	25
16	6	10	16	7	10	1890.17502	1890.17606	-104	11	5	6	11	6	6	1891.43530	1891.43539	-9
16	7	10	16	6	10	1890.17502	1890.17606	-104	11	6	6	11	5	6	1891.44938	1891.44940	-2
5	4	2	5	5	0	1890.20445	1890.20455	-10	12	5	8	12	4	8	1891.49952	1891.49946	6
6	5	1	6	6	1	1890.30173	1890.30256	-82	12	4	8	12	5	8	1891.49952	1891.49946	6
14	9	6	14	8	6	1890.30173	1890.30178	-5	18	14	5	18	13	5	1891.49952	1891.50056	-103
17	6	12	17	5	12	1890.32588	1890.32563	25	14	4	11	14	3	11	1891.53749	1891.53748	1
17	5	12	17	6	12	1890.32588	1890.32563	25	14	3	11	14	4	11	1891.53749	1891.53748	1
14	7	7	14	8	7	1890.36773	1890.36788	-15	4	2	2	4	3	1	*1891.55778	1891.55623	155
7	4	3	7	5	2	1890.38952	1890.38876	77	6	4	2	6	5	2	1891.56218	1891.56108	110
14	8	7	14	7	7	1890.38952	1890.38981	-29	10	5	5	10	6	5	1891.58884	1891.58895	-11
15	6	9	15	7	9	1890.39634	1890.39588	46	9	5	4	9	6	4	1891.63640	1891.63644	-4
15	7	9	15	6	9	1890.39634	1890.39588	46	11	5	7	11	4	7	1891.65089	1891.65100	-11
19	5	15	19	4	15	1890.41893	1890.42025	-132	11	4	7	11	5	7	1891.65089	1891.65100	-11
19	4	15	19	5	15	1890.41893	1890.42025	-132	13	4	10	13	3	10	*1891.65575	1891.65719	-144
11	7	4	11	8	4	1890.45153	1890.45143	10	13	3	10	13	4	10	*1891.65575	1891.65719	-144
23	4	20	23	3	20	1890.45153	1890.45135	18	17	2	15	17	3	15	1891.65575	1891.65581	-6
23	3	20	23	4	20	1890.45153	1890.45135	18	17	3	15	17	2	15	1891.65575	1891.65581	-6
7	5	2	7	6	1	1890.49774	1890.49737	37	2	0	2	2	1	1	1891.66508	1891.66430	78
6	3	3	6	4	2	1890.49774	1890.49810	-37	10	6	5	10	5	5	1891.66508	1891.66513	-6
16	5	11	16	6	11	1890.51381	1890.51364	17	4	3	1	4	4	1	1891.68574	1891.68667	-94
16	6	11	16	5	11	1890.51381	1890.51364	17	16	3	14	16	2	14	1891.74260	1891.74268	-8
18	4	14	18	5	14	1890.57632	1890.57640	-7	16	2	14	16	3	14	1891.74260	1891.74268	-8
18	5	14	18	4	14	1890.57632	1890.57640	-7	12	3	9	12	4	9	1891.77652	1891.77630	22
13	7	6	13	8	6	1890.57997	1890.57930	68	12	4	9	12	3	9	1891.77652	1891.77630	22
4	3	2	4	4	0	1890.58607	1890.58573	35	10	4	6	10	5	6	1891.80010	1891.79997	13
14	7	8	14	6	8	1890.61494	1890.61497	-3	10	5	6	10	4	6	1891.80426	1891.80423	3
14	6	8	14	7	8	1890.61494	1890.61497	-3	15	3	13	15	2	13	1891.82966	1891.82950	16
12	7	5	12	8	5	1890.67031	1890.67033	-3	15	2	13	15	3	13	1891.82966	1891.82950	16
13	8	6	13	7	6	1890.68289	1890.68300	-11	11	8	4	11	7	4	*1891.82966	1891.82503	464
15	5	10	15	6	10	1890.69951	1890.70078	-126	10	7	4	10	6	4	1891.86031	1891.86027	4
15	6	10	15	5	10	1890.69951	1890.70078	-126	11	4	8	11	3	8	1891.89486	1891.89485	1
9	6	3	9	7	3	1890.70376	1890.70370	6	11	3	8	11	4	8	1891.89486	1891.89485	1
17	5	13	17	4	13	1890.73212	1890.73199	12	12	9	4	12	8	4	*1891.89486	1891.89722	-236
17	4	13	17	5	13	1890.73212	1890.73199	12	14	2	12	14	3	12	1891.91629	1891.91609	20
4	3	2	4	4	1	1890.73799	1890.73919	-120	14	3	12	14	2	12	1891.91629	1891.91609	20
14	10	5	14	9	5	1890.80494	1890.80505	-11	9	4	5	9	5	5	1891.93962	1891.93973	-12
13	6	7	13	7	7	1890.82969	1890.82971	-2	7	4	3	7	5	3	1891.94772	1891.94778	-6
13	7	7	13	6	7	1890.83719	1890.83733	-14	9	5	5	9	4	5	1891.96592	1891.96624	-32
15	11	5	15	10	5	*1890.83719	1890.83527	192	9	6	4	9	5	4	1891.98813	1891.98813	0
3	2	2	3	3	0	1890.85238	1890.85213	25	13	2	11	13	3	11	1892.00235	1892.00234	2
7	5	2	7	6	2	1890.86735	1890.86764	-29	13	3	11	13	2	11	1892.00235	1892.00234	2
14	6	9	14	5	9	1890.88729	1890.88710	19	10	3	7	10	4	7	1892.01277	1892.01289	-13
14	5	9	14	6	9	1890.88729	1890.88710	19	10	4	7	10	3	7	1892.01277	1892.01289	-13
16	4	12	16	5	12	1890.88729	1890.88693	37	8	4	4	8	5	4	1892.03147	1892.03228	-81

Continue

(I)			(II)			(III)	(IV)	(V)	(I)			(II)			(III)	(IV)	(V)
21	17	5	21	16	5	1892.03147	1892.03228	-81	12	1	12	12	0	12	1892.81843	1892.81844	-2
12	3	10	12	2	10	*1892.08987	1892.08817	171	12	0	12	12	1	12	1892.81843	1892.81844	-2
12	2	10	12	3	10	*1892.08987	1892.08817	171	4	1	3	4	2	3	1892.83043	1892.83046	-3
5	3	2	5	4	2	1892.11941	1892.11937	3	11	0	11	11	1	11	1892.83622	1892.83629	-8
9	4	6	9	3	6	1892.13034	1892.13052	-17	11	1	11	11	0	11	1892.83622	1892.83629	-8
9	3	6	9	4	6	1892.13034	1892.13052	-17	4	2	3	4	1	3	1892.85439	1892.85497	-59
17	1	16	17	2	16	1892.17457	1892.17536	-80	10	1	10	10	0	10	1892.85439	1892.85412	27
17	2	16	17	1	16	1892.17457	1892.17536	-80	10	0	10	10	1	10	1892.85439	1892.85412	27
8	5	4	8	4	4	*1892.17457	1892.17663	-207	16	13	4	16	12	4	*1892.85439	1892.85206	233
11	2	9	11	3	9	1892.17457	1892.17356	101	9	0	9	9	1	9	1892.87169	1892.87184	-15
11	3	9	11	2	9	1892.17457	1892.17356	101	9	1	9	9	0	9	1892.87169	1892.87184	-15
16	2	15	16	1	15	1892.22643	1892.22685	-42	8	1	8	8	0	8	1892.88921	1892.88941	-20
16	1	15	16	2	15	1892.22643	1892.22685	-42	8	0	8	8	1	8	1892.88921	1892.88941	-20
3	2	1	3	3	1	*1892.22643	1892.22329	314	1	0	1	1	1	1	*1892.90634	1892.90478	156
8	3	5	8	4	5	1892.24382	1892.24393	-12	7	1	7	7	0	7	1892.90634	1892.90681	-47
8	4	5	8	3	5	1892.25163	1892.25174	-11	7	0	7	7	1	7	1892.90634	1892.90681	-47
10	3	8	10	2	8	1892.25843	1892.25851	-8	10	8	3	10	7	3	1892.91289	1892.91276	14
10	2	8	10	3	8	1892.25843	1892.25851	-8	6	1	6	6	0	6	1892.92368	1892.92404	-36
15	1	14	15	2	14	1892.27864	1892.27884	-20	6	0	6	6	1	6	1892.92368	1892.92404	-36
15	2	14	15	1	14	1892.27864	1892.27884	-20	5	1	5	5	0	5	1892.94088	1892.94111	-23
14	11	4	14	10	4	1892.31382	1892.31380	1	5	0	5	5	1	5	1892.94088	1892.94111	-23
14	2	13	14	1	13	1892.33110	1892.33105	5	4	0	4	4	1	4	1892.95784	1892.95805	-21
14	1	13	14	2	13	1892.33110	1892.33105	5	4	1	4	4	0	4	1892.95784	1892.95805	-21
7	3	4	7	4	4	1892.33963	1892.33968	-6	3	2	2	3	1	2	1892.97441	1892.97385	56
9	2	7	9	3	7	1892.34303	1892.34304	-1	3	1	3	3	0	3	1892.97441	1892.97487	-46
9	3	7	9	2	7	1892.34303	1892.34304	-1	3	0	3	3	1	3	1892.97441	1892.97487	-46
6	3	3	6	4	3	1892.34783	1892.34775	8	2	0	2	2	1	2	1892.97441	1892.97488	-46
13	1	12	13	2	12	1892.38339	1892.38328	12	15	12	3	15	11	4	1892.97441	1892.97317	125
13	2	12	13	1	12	1892.38339	1892.38328	12	4	3	2	4	2	2	1892.98943	1892.98935	8
7	4	4	7	3	4	1892.39035	1892.39043	-8	2	1	2	2	0	2	1893.00840	1893.00837	3
8	2	6	8	3	6	1892.42700	1892.42721	-21	14	10	4	14	9	5	1893.02092	1893.01999	93
8	3	6	8	2	6	1892.42700	1892.42721	-21	5	4	2	5	3	2	1893.07851	1893.07803	48
12	2	11	12	1	11	1892.43531	1892.43537	-6	1	1	1	1	0	1	1893.11152	1893.11127	25
12	1	11	12	2	11	1892.43531	1892.43537	-6	20	20	1	20	19	1	1893.11152	1893.11187	-35
11	2	10	11	1	10	1892.48782	1892.48725	57	11	9	3	11	8	3	*1893.17167	1893.17335	-169
11	1	10	11	2	10	1892.48782	1892.48725	57	6	5	2	6	4	2	1893.24494	1893.24456	38
7	3	5	7	2	5	1892.51077	1892.51108	-31	2	2	1	2	1	1	1893.24986	1893.25081	-96
7	2	5	7	3	5	1892.51077	1892.51108	-31	3	3	1	3	2	1	1893.45761	1893.45765	-5
4	2	2	4	3	2	1892.53420	1892.53436	-16	12	10	3	12	9	3	1893.45761	1893.45751	10
10	2	9	10	1	9	1892.53888	1892.53884	4	7	6	2	7	5	2	1893.47912	1893.47917	-5
10	1	9	10	2	9	1892.53888	1892.53884	4	19	17	3	19	16	3	1893.61280	1893.61254	26
7	5	3	7	4	3	1892.56282	1892.56303	-21	9	7	2	9	6	3	1893.61280	1893.61272	8
9	1	8	9	2	8	1892.58935	1892.59013	-78	13	9	4	13	8	5	*1893.61280	1893.61087	194
9	2	8	9	1	8	1892.58935	1892.59013	-78	4	4	1	4	3	1	1893.72334	1893.72402	-69
15	12	4	15	11	4	*1892.58935	1892.59130	-195	13	11	3	13	10	3	1893.72334	1893.72219	115
8	6	3	8	5	3	*1892.58935	1892.59101	-166	8	7	2	8	6	2	1893.76125	1893.76126	-1
6	2	4	6	3	4	*1892.58935	1892.58762	173	6	5	1	6	4	2	1893.78655	1893.78689	-34
6	3	4	6	2	4	1892.60178	1892.60189	-11	8	6	2	8	5	3	1893.79865	1893.79851	13
6	4	3	6	3	3	1892.61729	1892.61722	7	5	4	1	5	3	2	1893.82425	1893.82399	26
2	1	1	2	2	1	1892.63057	1892.63155	-98	7	6	1	7	5	2	1893.84085	1893.84064	21
5	2	3	5	3	3	1892.63057	1892.63089	-32	4	4	0	4	3	1	1893.87211	1893.87335	-124
8	2	7	8	1	7	1892.64082	1892.64111	-29	14	12	3	14	11	3	1893.92511	1893.92538	-27
8	1	7	8	2	7	1892.64082	1892.64111	-29	4	3	1	4	2	2	1893.93737	1893.93684	53
7	2	6	7	1	6	1892.69153	1892.69183	-30	10	7	3	10	6	4	1893.96799	1893.96778	21
7	1	6	7	2	6	1892.69153	1892.69183	-30	8	7	1	8	6	2	1893.98332	1893.98302	30
9	7	3	9	6	3	1892.71087	1892.71073	14	18	18	1	18	17	1	1893.98332	1893.98259	74
5	3	3	5	2	3	1892.72593	1892.72591	2	17	15	3	17	14	3	1893.98332	1893.98391	-58
17	1	17	17	0	17	*1892.72593	1892.73519	-925	5	5	1	5	4	1	1894.03262	1894.03270	-8
17	0	17	17	1	17	*1892.72593	1892.73519	-925	18	17	2	18	16	2	1894.03262	1894.03184	79
6	2	5	6	1	5	1892.74199	1892.74229	-30	15	13	3	15	12	3	1894.03903	1894.03932	-30
6	1	5	6	2	5	1892.74199	1892.74229	-30	9	8	2	9	7	2	1894.05983	1894.05994	-11
16	0	16	16	1	16	1892.74925	1892.75011	-86	7	5	2	7	4	3	1894.07611	1894.07592	19
16	1	16	16	0	16	1892.74925	1892.75011	-86	10	9	2	10	8	2	1894.33647	1894.33687	-40
15	1	15	15	0	15	1892.76558	1892.76625	-67	15	12	4	15	11	5	1894.33647	1894.33532	114
15	0	15	15	1	15	1892.76558	1892.76625	-67	6	6	1	6	5	1	1894.35493	1894.35499	-6
14	0	14	14	1	14	1892.78288	1892.78321	-33	6	4	2	6	3	3	1894.40889	1894.40913	-24
14	1	14	14	0	14	1892.78288	1892.78321	-33	15	13	2	15	12	4	*1894.46386	1894.46521	-135
5	1	4	5	2	4	1892.79132	1892.79111	21	9	6	3	9	5	4	1894.46386	1894.46274	112
5	2	4	5	1	4	1892.79421	1892.79417	5	11	10	2	11	9	2	1894.55609	1894.55629	-20
21	18	4	21	17	4	1892.79421	1892.79417	5	16	16	1	16	15	1	1894.62341	1894.62215	126
13	1	13	13	0	13	1892.80058	1892.80069	-11	16	16	0	16	15	2	1894.62341	1894.62215	126
13	0	13	13	1	13	1892.80058	1892.80069	-11	14	12	2	14	11	4	1894.62341	1894.62389	-48
3	1	2	3	2	2	1892.81179	1892.81178	1	7	7	1	7	6	1	1894.65498	1894.65526	-28

Continue

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)			(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)		
12	11	2	12	10	2	1894.69694	1894.69702	-8	10	2	8	10	1	9	1900.47626	1900.47685	-60												
12	11	1	12	10	2	1894.71672	1894.71555	117	10	3	8	10	2	9	1900.47626	1900.47685	-60												
14	13	2	14	12	2	1894.73656	1894.73692	-36	2	1	1	1	0	1	1900.61564	1900.61561	3												
13	12	2	13	11	2	1894.75482	1894.75519	-37	2	2	0	1	1	0	1900.71407	1900.71395	11												
5	5	1	5	4	2	1894.80230	1894.80133	98	2	2	1	1	1	1	1900.81355	1900.81358	-3												
14	13	1	14	12	3	1894.81738	1894.81783	-45	12	3	9	12	2	10	1900.93839	1900.93811	27												
15	15	1	15	14	2	1894.85920	1894.85883	38	12	4	9	12	3	10	1900.93839	1900.93811	27												
15	15	0	15	14	2	1894.85920	1894.85883	38	2	2	0	1	1	1	*1901.14714	1901.15092	-378												
13	12	1	13	11	3	1894.90338	1894.90408	-69	12	7	5	12	6	7	1902.03734	1902.03787	-53												
8	8	1	8	7	1	1894.90338	1894.90310	29	15	5	11	15	4	12	*1902.09419	1902.09177	242												
8	5	3	8	4	4	1894.95709	1894.95639	70	15	4	11	15	3	12	*1902.09419	1902.09177	242												
6	6	0	6	5	2	1894.95709	1894.95729	-20	3	0	3	2	1	2	1902.17516	1902.17481	35												
12	11	1	12	10	3	1894.96123	1894.96106	18	3	1	3	2	0	2	1902.19369	1902.19368	1												
11	10	1	11	9	3	1895.00269	1895.00206	62	9	9	1	9	6	4	1902.21742	1902.21659	83												
8	7	2	8	6	3	1895.00269	1895.00278	-10	9	8	2	9	5	5	1902.86964	1902.86864	100												
12	10	2	12	9	4	1895.02826	1895.02833	-7	3	3	1	2	2	0	*1904.30332	1904.30558	-226												
10	9	1	10	8	3	1895.04520	1895.04498	21	3	2	1	2	1	1	1904.36548	1904.36538	10												
4	2	2	4	1	3	1895.04790	1895.04760	30	16	10	7	16	7	9	1904.42431	1904.42453	-22												
7	7	0	7	6	2	1895.04790	1895.04823	-33	3	1	2	2	0	2	1904.48833	1904.48825	8												
10	8	3	10	7	4	*1895.08264	1895.08103	161	3	3	0	2	2	0	1904.54384	1904.54375	9												
9	9	1	9	8	1	1895.08264	1895.08342	-78	3	2	2	2	1	2	1904.55037	1904.55028	9												
6	5	2	6	4	3	1895.09432	1895.09421	12	3	3	1	2	2	1	1904.65412	1904.65405	6												
9	8	1	9	7	3	1895.11156	1895.11162	-6	4	1	3	3	2	1	1904.72335	1904.72298	37												
8	8	0	8	7	2	1895.14035	1895.14054	-19	9	7	3	9	4	6	1904.84541	1904.84426	115												
13	13	1	13	12	2	1895.16947	1895.16962	-15	4	1	4	3	0	3	1905.07343	1905.07332	11												
5	4	2	5	3	3	1895.16947	1895.16962	-15	4	0	4	3	1	3	1905.07343	1905.07332	11												
13	13	0	13	12	2	1895.16947	1895.17020	-73	5	2	4	4	3	1	1905.30134	1905.30150	-17												
9	9	0	9	8	2	1895.21781	1895.21790	-9	4	2	2	3	3	0	1906.05258	1906.05231	27												
8	7	1	8	6	3	1895.22457	1895.22455	3	6	0	6	5	1	4	1906.48326	1906.48341	-15												
11	11	1	11	10	1	1895.24180	1895.24220	-40	6	1	6	5	2	4	1906.48326	1906.48341	-15												
12	12	0	12	11	2	1895.24858	1895.24896	-38	4	3	2	3	2	1	1907.14967	1907.14985	-17												
12	12	1	12	11	2	1895.24858	1895.24841	17	6	2	4	5	5	1	1907.56263	1907.56226	38												
13	8	5	13	7	6	*1895.26924	1895.27094	-170	4	3	1	3	2	1	1908.09743	1908.09734	9												
11	11	0	11	10	2	1895.27905	1895.27938	-32	4	2	2	3	1	2	1908.17409	1908.17403	6												
11	11	1	11	10	2	1895.27905	1895.27938	-32	4	4	1	3	3	0	*1908.21855	1908.22010	-156												
11	9	2	11	8	4	1895.32530	1895.32538	-7	4	3	2	3	2	2	1908.31349	1908.31343	6												
7	6	1	7	5	3	1895.39963	1895.39966	-3	4	1	3	3	0	3	1908.34599	1908.34601	-1												
8	6	3	8	5	4	1895.46120	1895.46112	8	4	2	3	3	1	3	1908.35604	1908.35612	-8												
13	9	5	13	8	6	1895.63633	1895.63510	123	4	4	0	3	3	0	1908.36952	1908.36943	8												
6	5	1	6	4	3	1895.63633	1895.63654	-21	4	4	1	3	3	1	1908.46559	1908.46558	1												
10	8	2	10	7	4	1895.70645	1895.70664	-19	4	4	0	3	3	1	1908.61588	1908.61491	97												
13	10	3	13	9	5	1895.77908	1895.77921	-12	5	1	4	4	2	3	1908.77889	1908.77888	1												
12	7	5	12	6	6	1895.87960	1895.87962	-2	5	2	4	4	1	3	1908.79304	1908.79287	17												
6	4	3	6	3	4	*1895.87960	1895.87796	165	5	2	3	4	3	2	1909.51261	1909.51274	-13												
5	4	1	5	3	3	1895.91513	1895.91527	-14	6	3	4	5	4	2	1909.86666	1909.86567	99												
9	5	4	9	4	5	1895.95552	1895.95583	-31	14	5	9	14	4	11	1910.10499	1910.10438	61												
14	8	6	14	7	7	1896.16339	1896.16246	93	14	6	9	14	3	11	1910.10499	1910.10438	61												
9	7	2	9	6	4	1896.16339	1896.16382	-43	4	2	2	3	1	3	*1910.55075	1910.54874	201												
8	4	4	8	3	5	1896.35244	1896.35256	-13	7	3	4	6	6	1	1910.70816	1910.70722	94												
8	5	4	8	4	5	1896.41899	1896.41910	-11	6	0	6	5	1	5	1910.84903	1910.84916	-13												
1	1	1	0	0	0	1896.45472	1896.45595	-123	6	1	6	5	0	5	1910.84903	1910.84916	-13												
15	11	4	15	10	6	1896.48314	1896.48423	-109	6	2	5	5	1	4	1911.63667	1911.63741	-74												
11	7	5	11	6	6	1896.48314	1896.48220	95	6	1	5	5	2	4	1911.63667	1911.63741	-74												
8	6	2	8	5	4	1896.66924	1896.66863	62	5	3	2	4	2	2	1911.81546	1911.81522	24												
1	1	0	0	0	0	1896.87853	1896.87833	20	5	4	1	4	3	1	1911.81920	1911.81898	22												
11	8	3	11	7	5	1897.17258	1897.17177	81	5	2	3	4	1	3	1912.02597	1912.02597	0												
12	7	6	12	6	7	1897.22927	1897.23028	-101	5	4	2	4	3	2	1912.05120	1912.05115	5												
9	5	5	9	4	6	1897.22927	1897.22928	-1	5	3	3	4	2	3	1912.05965	1912.05968	-3												
7	3	5	7	2	6	1897.83241	1897.83256	-16	5	5	1	4	4	0	1912.09295	1912.09355	-60												
7	2	5	7	1	6	1897.83241	1897.83256	-16	5	5	0	4	4	0	1912.17854	1912.17843	11												
6	1	5	6	0	6	1898.07739	1898.07804	-65	5	1	4	4	0	4	1912.17854	1912.17895	-40												
6	2	5	6	1	6	1898.07739	1898.07804	-65	5	2	4	4	1	4	1912.17854	1912.17895	-40												
8	3	6	8	2	7	1898.71682	1898.71742	-60	5	5	1	4	4	1	1912.24705	1912.24701	4												
8	2	6	8	1	7	1898.71682	1898.71742	-60	5	5	0	4	4	1	1912.33224	1912.33190	35												
11	5	7	11	4	8	1898.86794	1898.86788	6	6	2	4	5	3	3	1912.44022	1912.44007	15												
11	4	7	11	3	8	1898.86794	1898.86788	6	6	3	4	5	2	3	1912.49563	1912.49574	-11												
12	8	4	12	7	6	1899.22699	1899.22671	28	6	3	3	5	4	2	1913.01769	1913.01778	-9												
2	0	2	1	1	1	1899.22699	1899.22707	-8	7	0	7	6	1	6	1913.73536	1913.73536	0												
10	4	7	10	3	8	1899.25170	1899.25183	-13	7	1	7	6	0	6	1913.73536	1913.73536	0												
10	3	7	10	2	8	1899.25170	1899.25183	-13	7	5	3	6	6	1	1914.03715	1914.03786	-71												
7	5	3	7	2	5	1900.00573	1900.00638	-65	10	0	10	9	1	8	1914.15445	1914.15392	53												
12	11	2	12	8	4	1900.32300	1900.32417	-116	10	1	10	9	2	8	1914.15445	1914.15392	53												
2	2	1	1	1	0	1900.37659	1900.37661	-2	7	1	6	6	2	5	1914.48795	1914.48800	-5												

Continue

(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)	(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)								
7	2	6	6	1	5	1914.48795	1914.48800	-5	8	3	6	7	2	6	1923.41319	1923.41329	-10
10	3	7	9	6	4	1914.84967	1914.84987	-20	8	2	7	7	1	7	1923.64021	1923.64036	-14
7	2	5	6	3	4	1915.27552	1915.27548	4	8	1	7	7	0	7	1923.64021	1923.64036	-14
7	3	5	6	2	4	1915.28329	1915.28371	-42	10	2	8	9	3	7	1923.71133	1923.71115	17
6	4	2	5	3	2	1915.43110	1915.43104	6	10	3	8	9	2	7	1923.71133	1923.71115	17
6	5	1	5	4	1	1915.53802	1915.53795	7	10	4	7	9	3	6	1924.43271	1924.43262	9
6	3	3	5	2	3	1915.64784	1915.64785	-1	10	3	7	9	4	6	1924.43271	1924.43262	9
6	4	3	5	3	3	1915.73040	1915.73041	-1	12	7	5	11	10	2	*1924.52548	1924.52381	168
6	5	2	5	4	2	1915.76428	1915.76424	3	10	5	6	9	4	5	1925.20655	1925.20643	12
6	2	4	5	1	4	1915.83617	1915.83630	-12	11	1	11	10	0	10	1925.26454	1925.26451	4
6	3	4	5	2	4	1915.84170	1915.84173	-3	11	0	11	10	1	10	1925.26454	1925.26451	4
6	6	1	5	5	0	1915.90896	1915.90881	14	9	7	3	8	6	2	1925.33780	1925.33650	130
6	6	0	5	5	0	1915.95374	1915.95377	-3	11	9	3	10	10	1	1925.71313	1925.71210	103
6	6	1	5	5	1	1915.99583	1915.99576	7	11	2	10	10	1	9	1925.87226	1925.87154	72
6	2	5	5	1	5	1916.00302	1916.00316	-14	11	1	10	10	2	9	1925.87226	1925.87154	72
6	1	5	5	0	5	1916.00302	1916.00316	-14	9	6	3	8	5	3	1926.20650	1926.20648	2
7	4	4	6	3	3	1916.20472	1916.20403	70	9	7	2	8	6	2	1926.23854	1926.23849	5
8	0	8	7	1	7	1916.62009	1916.62014	-5	9	5	4	8	4	4	1926.50561	1926.50568	-7
8	1	8	7	0	7	1916.62009	1916.62014	-5	11	3	9	10	2	8	1926.51736	1926.51712	24
8	6	3	7	7	0	1917.08080	1917.08020	59	9	7	3	8	6	3	1926.57800	1926.57802	-2
8	1	7	7	2	6	1917.33701	1917.33698	3	9	6	4	8	5	4	1926.60193	1926.60198	-6
8	2	7	7	1	6	1917.33701	1917.33698	3	9	8	1	8	7	1	1926.64721	1926.64720	1
8	2	6	7	3	5	1918.09183	1918.09180	2	9	8	2	8	7	2	1926.74667	1926.74651	16
8	3	6	7	2	5	1918.09183	1918.09180	2	9	4	5	8	3	5	1926.75014	1926.74973	41
8	3	5	7	4	4	1918.87592	1918.87534	58	9	5	5	8	4	5	1926.75842	1926.75855	-13
7	6	2	6	5	1	1918.89539	1918.89509	30	9	3	6	8	2	6	1926.96175	1926.96191	-16
8	4	5	7	3	4	1918.90516	1918.90522	-6	9	4	6	8	3	6	1926.96175	1926.96191	-16
7	5	2	6	4	2	1919.03514	1919.03508	5	9	9	0	8	8	0	1927.00917	1927.00927	-10
8	5	3	7	6	1	1919.14477	1919.14443	34	9	9	1	8	8	1	1927.01515	1927.01521	-6
7	4	3	6	3	3	1919.21005	1919.21008	-3	9	3	7	8	2	7	1927.19266	1927.19278	-13
7	6	1	6	5	1	1919.25662	1919.25656	6	9	2	7	8	1	7	1927.19266	1927.19278	-13
7	5	3	6	4	3	1919.37181	1919.37184	-3	11	3	8	10	4	7	1927.20182	1927.20169	12
7	3	4	6	2	4	1919.44736	1919.44745	-9	11	4	8	10	3	7	1927.20182	1927.20169	12
7	6	2	6	5	2	1919.45247	1919.45244	4	9	2	8	8	1	8	1927.45249	1927.45256	-7
7	4	4	6	3	4	1919.46468	1919.46476	-8	9	1	8	8	0	8	1927.45249	1927.45256	-7
8	5	3	7	6	2	1919.51428	1919.51470	-42	12	1	12	11	0	11	1928.14222	1928.14225	-3
8	4	4	7	5	3	1919.55772	1919.55734	37	12	0	12	11	1	11	1928.14222	1928.14225	-3
9	4	5	8	5	3	1919.55772	1919.55847	-75	12	10	3	11	11	1	1928.43818	1928.43900	-81
7	3	5	6	2	5	1919.62853	1919.62874	-21	12	10	3	11	11	0	1928.43818	1928.43900	-81
7	2	5	6	1	5	1919.62853	1919.62874	-21	11	7	4	10	8	2	1928.57766	1928.57743	24
7	7	1	6	6	0	1919.66292	1919.66274	18	12	10	2	11	11	1	1928.68121	1928.68136	-15
7	7	0	6	6	0	1919.68544	1919.68544	0	12	10	2	11	11	0	1928.68121	1928.68136	-15
7	7	1	6	6	1	1919.70861	1919.70863	-2	11	5	6	10	6	5	1928.68121	1928.68204	-82
7	7	0	6	6	1	1919.73148	1919.73134	14	12	2	11	11	1	10	1928.71177	1928.71165	12
7	1	6	6	0	6	1919.82358	1919.82374	-16	12	1	11	11	2	10	1928.71177	1928.71165	12
7	2	6	6	1	6	1919.82358	1919.82374	-16	10	8	3	9	7	2	1929.22036	1929.22059	-22
8	5	4	7	4	3	1919.94319	1919.94322	-3	12	2	10	11	3	9	*1929.32207	1929.32022	185
9	1	8	8	2	7	1920.18410	1920.18405	5	12	3	10	11	2	9	*1929.32207	1929.32022	185
9	2	8	8	1	7	1920.18410	1920.18405	5	10	7	3	9	6	3	1929.67932	1929.67928	4
9	2	7	8	3	6	1920.90250	1920.90258	-7	10	8	2	9	7	2	1929.84624	1929.84619	5
9	3	7	8	2	6	1920.90250	1920.90258	-7	10	6	4	9	5	4	1929.94366	1929.94371	-5
9	3	6	8	4	5	1921.65841	1921.65924	-83	12	3	9	11	4	8	1929.96837	1929.96794	43
9	5	4	8	6	2	1921.71099	1921.71111	-11	12	4	9	11	3	8	1929.96837	1929.96794	43
10	1	10	9	0	9	1922.38526	1922.38485	41	10	7	4	9	6	4	1930.12280	1930.12286	-6
10	0	10	9	1	9	1922.38526	1922.38485	41	10	8	3	9	7	3	1930.14523	1930.14524	-2
9	4	5	8	5	4	1922.42833	1922.42858	-26	10	9	2	9	8	1	1930.21558	1930.21678	-120
8	6	2	7	5	2	1922.63559	1922.63553	5	10	5	5	9	4	5	1930.23945	1930.23954	-9
8	5	3	7	4	3	1922.72292	1922.72298	-6	10	6	5	9	5	5	1930.26272	1930.26280	-8
8	7	2	7	6	1	1922.74407	1922.74387	20	10	9	1	9	8	1	1930.28587	1930.28589	-3
8	7	1	7	6	1	1922.96566	1922.96563	3	10	9	2	9	8	2	1930.34589	1930.34594	-4
8	6	3	7	5	3	1922.98702	1922.98705	-3	10	5	6	9	4	6	1930.46848	1930.46872	-24
8	4	4	7	3	4	1923.00595	1923.00604	-9	10	4	6	9	3	6	1930.46848	1930.46872	-24
10	2	9	9	1	8	1923.02959	1923.02896	64	9	8	2	8	5	3	1930.48708	1930.48738	-30
10	1	9	9	2	8	1923.02959	1923.02896	64	10	10	0	9	9	0	1930.60199	1930.60178	20
8	5	4	7	4	4	1923.05044	1923.05051	-7	10	10	1	9	9	1	1930.60506	1930.60465	41
8	7	2	7	6	2	1923.11412	1923.11414	-2	12	4	8	11	5	7	1930.65624	1930.65606	18
8	3	5	7	2	5	1923.21161	1923.21140	21	12	5	8	11	4	7	1930.65624	1930.65606	18
8	4	5	7	3	5	1923.21456	1923.21424	32	10	4	7	9	3	7	1930.70437	1930.70448	-10
8	8	1	7	7	0	1923.35961	1923.35950	11	10	3	7	9	2	7	1930.70437	1930.70448	-10
8	8	0	7	7	0	1923.37058	1923.37061	-3	10	3	8	9	2	8	1930.96697	1930.96698	-1
8	8	1	7	7	1	1923.38255	1923.38260	-5	10	2	8	9	1	8	1930.96697	1930.96698	-1
8	8	0	7	7	1	1923.39353	1923.39372	-18	13	1	13	12	0	12	1931.01794	1931.01803	-9
8	2	6	7	1	6	1923.41319	1923.41329	-10	13	0	13	12	1	12	1931.01794	1931.01803	-9

Continue

(I)					(II)					(III)					(IV)					(V)				
10	1	9	9	0	9	1931.25997	1931.25988	9	12	3	10	11	2	10	*1938.49960	1938.49783	177							
10	2	9	9	1	9	1931.25997	1931.25988	9	12	2	10	11	1	10	*1938.49960	1938.49783	177							
13	11	2	12	12	1	1931.25997	1931.25967	30	14	8	6	13	9	5	1938.79114	1938.79042	72							
12	6	7	11	5	6	1931.39323	1931.39347	-23	12	1	11	11	0	11	1938.85811	1938.85805	7							
13	1	12	12	2	11	1931.54924	1931.54916	9	12	2	11	11	1	11	1938.85811	1938.85805	7							
13	2	12	12	1	11	1931.54924	1931.54916	9	15	5	10	14	6	9	1939.43775	1939.43877	-102							
13	3	11	12	2	10	1932.11990	1932.12025	-35	15	6	10	14	5	9	1939.43775	1939.43877	-102							
13	2	11	12	3	10	1932.11990	1932.12025	-35	16	0	16	15	1	15	1939.63494	1939.63395	99							
11	8	3	10	7	3	1933.15333	1933.15328	5	16	1	16	15	0	15	1939.63494	1939.63395	99							
9	4	6	8	1	7	1933.25126	1933.25212	-86	13	9	4	12	8	4	1940.01664	1940.01660	4							
9	3	6	8	2	7	1933.25126	1933.25212	-86	16	1	15	15	2	14	1940.04552	1940.04568	-15							
11	7	4	10	6	4	1933.32791	1933.32792	-1	16	2	15	15	1	14	1940.04552	1940.04568	-15							
13	5	9	12	4	8	1933.38224	1933.38162	62	13	10	3	12	9	3	1940.12877	1940.12871	6							
13	4	9	12	5	8	1933.38224	1933.38162	62	12	8	4	11	7	5	*1940.31847	1940.31984	-137							
11	9	2	10	8	2	1933.45125	1933.45123	2	13	8	5	12	7	5	1940.36174	1940.36180	-6							
9	9	1	8	6	3	*1933.53129	1933.53278	-149	16	2	14	15	3	13	1940.50064	1940.50061	3							
11	8	4	10	7	4	1933.61661	1933.61667	-6	16	3	14	15	2	13	1940.50064	1940.50061	3							
11	6	5	10	5	5	1933.67520	1933.67529	-10	13	10	4	12	9	4	1940.53214	1940.53220	-5							
11	9	3	10	8	3	1933.68765	1933.68765	0	13	9	5	12	8	5	1940.55888	1940.55899	-11							
11	7	5	10	6	5	1933.72878	1933.72884	-7	13	11	2	12	10	2	1940.57958	1940.57961	-3							
11	10	1	10	9	1	1933.87489	1933.87493	-4	13	11	3	12	10	3	1940.68669	1940.68675	-6							
11	10	2	10	9	2	1933.90862	1933.90869	-7	13	7	6	12	6	6	1940.71240	1940.71247	-7							
11	5	6	10	4	6	1933.93038	1933.93043	-4	13	8	6	12	7	6	1940.74173	1940.74180	-6							
11	6	6	10	5	6	1933.93498	1933.93500	-2	13	12	1	12	11	1	1940.90239	1940.90247	-7							
13	5	8	12	6	7	1934.07485	1934.07485	1	13	12	2	12	11	2	1940.91181	1940.91180	1							
13	6	8	12	5	7	1934.07485	1934.07485	1	13	6	7	12	5	7	1940.98746	1940.98777	-32							
15	9	7	14	10	4	1934.07485	1934.07576	-91	13	7	7	12	6	7	1940.98746	1940.98777	-32							
11	11	0	10	10	0	1934.14867	1934.14891	-25	16	3	13	15	4	12	1940.99758	1940.99751	7							
11	11	1	10	10	1	1934.14867	1934.14891	-25	16	4	13	15	3	12	1940.99758	1940.99751	7							
11	4	7	10	3	7	1934.17462	1934.17472	-10	13	13	1	12	12	1	1941.10212	1941.10229	-18							
11	5	7	10	4	7	1934.17462	1934.17472	-10	13	13	0	12	12	0	1941.10212	1941.10229	-18							
14	1	13	13	2	12	1934.38394	1934.38401	-6	13	13	0	12	12	1	1941.10212	1941.10229	-18							
14	2	13	13	1	12	1934.38394	1934.38401	-6	13	13	1	12	12	0	1941.10212	1941.10229	-18							
13	8	5	12	9	3	1934.38868	1934.38836	32	18	8	10	17	9	8	1941.25260	1941.25178	82							
11	4	8	10	3	8	1934.44067	1934.44064	3	13	6	8	12	5	8	1941.26337	1941.26328	9							
11	3	8	10	2	8	1934.44067	1934.44064	3	13	5	8	12	4	8	1941.26337	1941.26328	9							
11	3	9	10	2	9	1934.73567	1934.73547	21	11	10	2	10	7	4	*1941.40299	1941.40493	-194							
11	2	9	10	1	9	1934.73567	1934.73547	21	13	10	3	12	9	4	*1941.45558	1941.45717	-158							
13	6	7	12	7	6	1934.80550	1934.80626	-76	15	8	7	14	9	6	1941.51362	1941.51399	-37							
14	3	12	13	2	11	1934.91733	1934.91705	28	13	4	9	12	3	9	1941.56384	1941.56345	39							
14	2	12	13	3	11	1934.91733	1934.91705	28	13	5	9	12	4	9	1941.56384	1941.56345	39							
11	1	10	10	0	10	1935.06261	1935.06186	75	15	9	7	14	8	6	1941.66726	1941.66642	84							
11	2	10	10	1	10	1935.06261	1935.06186	75	12	10	3	11	7	4	1941.84985	1941.85016	-31							
14	4	11	13	3	10	1935.49053	1935.49029	24	17	9	8	16	10	6	1941.86032	1941.86124	-91							
14	3	11	13	4	10	1935.49053	1935.49029	24	13	4	10	12	3	10	*1941.90538	1941.89272	1266							
12	9	3	11	8	3	1936.63560	1936.63555	5	13	3	10	12	2	10	*1941.90538	1941.89272	1266							
12	8	4	11	7	4	1936.67800	1936.67798	2	12	10	2	11	7	4	1942.09262	1942.09252	11							
12	10	2	11	9	2	1937.03552	1937.03552	0	16	6	11	15	5	10	1942.11603	1942.11489	114							
12	7	5	11	6	5	1937.05047	1937.05057	-10	16	5	11	15	6	10	1942.11603	1942.11489	114							
12	9	4	11	8	4	1937.08603	1937.08606	-3	11	11	0	10	8	3	*1942.12783	1942.12633	150							
12	8	5	11	7	5	1937.15959	1937.15966	-7	13	3	11	12	2	11	1942.25373	1942.25364	9							
12	10	3	11	9	3	1937.20267	1937.20268	-2	13	2	11	12	1	11	1942.25373	1942.25364	9							
15	1	14	14	2	13	1937.21603	1937.21617	-14	13	1	12	12	0	12	1942.64771	1942.64803	-32							
15	2	14	14	1	13	1937.21603	1937.21617	-14	13	2	12	12	1	12	1942.64771	1942.64803	-32							
12	6	6	11	5	6	1937.34648	1937.34656	-8	17	13	5	16	14	3	*1942.91170	1942.91015	154							
12	7	6	11	6	6	1937.35868	1937.35882	-14	15	10	6	14	9	5	1942.99919	1942.99886	33							
12	11	1	11	10	1	1937.41335	1937.41344	-10	17	3	15	16	2	14	1943.28686	1943.28731	-45							
12	11	2	11	10	2	1937.43143	1937.43150	-7	17	2	15	16	3	14	1943.28686	1943.28731	-45							
12	5	7	11	4	7	1937.60265	1937.60277	-12	16	11	5	15	12	3	1943.33081	1943.33045	36							
12	6	7	11	5	7	1937.60265	1937.60277	-12	14	10	4	13	9	4	1943.36046	1943.36036	11							
12	12	1	11	11	1	1937.64858	1937.64878	-20	16	7	9	15	8	8	1943.40225	1943.40272	-46							
12	12	0	11	11	0	1937.64858	1937.64878	-20	14	9	5	13	8	5	1943.61513	1943.61510	3							
12	12	0	11	11	1	1937.64858	1937.64878	-20	14	11	3	13	10	3	1943.62624	1943.62636	-12							
12	12	1	11	11	0	1937.64858	1937.64878	-20	17	4	14	16	3	13	1943.74433	1943.74511	-78							
15	2	13	14	3	12	1937.71050	1937.71052	-2	17	3	14	16	4	13	1943.74433	1943.74511	-78							
15	3	13	14	2	12	1937.71050	1937.71052	-2	14	10	5	13	9	5	1943.93056	1943.93065	-9							
16	10	7	15	11	4	1937.83609	1937.83692	-83	14	11	4	13	10	4	1943.95450	1943.95455	-5							
12	4	8	11	3	8	1937.87301	1937.87294	6	14	8	6	13	7	6	1944.02243	1944.02250	-6							
12	5	8	11	4	8	1937.87301	1937.87294	6	14	12	2	13	11	2	1944.07215	1944.07219	-3							
17	10	8	16	11	5	1937.97500	1937.97453	47	14	9	6	13	8	6	1944.08574	1944.08587	-14							
12	3	9	11	2	9	1938.17047	1938.17017	30	14	12	3	13	11	3	1944.13578	1944.13584	-6							
12	4	9	11	3	9	1938.17047	1938.17017	30	17	5	13	16	4	12	1944.24578	1944.24495	83							
14	8	7	13	7	6	1938.25106	1938.24984	122	17	4	13	16	5	12	1944.24578	1944.24495	83							

Continue

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)			(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)		
14	7	7	13	6	7	1944.32532	1944.32546	-14	16	14	3	15	13	3	1950.91458	1950.91465	-7												
14	8	7	13	7	7	1944.33208	1944.33209	-1	16	15	2	15	14	2	1951.08103	1951.08120	-17												
14	13	1	13	12	1	1944.34295	1944.34302	-7	16	15	1	15	14	1	1951.08103	1951.08120	-17												
14	13	2	13	12	2	1944.34767	1944.34773	-6	16	15	1	15	14	2	*1951.08103	1951.08288	-185												
14	14	0	13	13	0	1944.50879	1944.50896	-17	16	15	2	15	14	1	*1951.08103	1951.07952	151												
14	14	1	13	13	1	1944.50879	1944.50896	-17	16	8	8	15	7	8	1951.17387	1951.17376	11												
14	14	1	13	13	0	1944.50879	1944.50896	-17	16	9	8	15	8	8	*1951.17923	1951.17748	174												
14	14	0	13	13	1	1944.50879	1944.50896	-17	16	16	1	15	15	1	1951.17923	1951.18002	-80												
14	7	8	13	6	8	1944.92737	1944.61100	7	16	16	0	15	15	0	1951.49016	1951.18002	-80												
14	6	8	13	5	8	1944.61107	1944.61100	7	16	16	0	15	15	1	1951.17923	1951.18002	-80												
14	5	9	13	4	9	1944.91527	1944.91481	46	16	16	1	15	15	0	1951.17923	1951.18002	-80												
14	6	9	13	5	9	1944.91527	1944.91481	46	16	8	9	15	7	9	1951.49016	1951.48956	61												
16	10	6	15	11	5	1944.92737	1944.92614	123	16	7	9	15	6	9	1951.49016	1951.48956	61												
14	4	10	13	3	10	*1945.24360	1945.24606	-246	16	7	10	15	6	10	1951.82537	1951.82628	-91												
14	5	10	13	4	10	*1945.24360	1945.24606	-246	16	6	10	15	5	10	1951.82537	1951.82628	-91												
17	6	11	16	7	10	1945.36999	1945.36975	24	19	13	6	18	14	4	1951.88740	1951.88797	-56												
17	7	11	16	6	10	1945.36999	1945.36975	24	16	6	11	15	5	11	1952.19115	1951.19085	30												
12	11	1	11	8	4	1945.53183	1945.53154	29	16	5	11	15	4	11	1952.19115	1952.19085	30												
14	3	11	13	2	11	1945.60805	1945.60791	14	16	5	12	15	4	12	1952.58659	1952.58626	34												
14	4	11	13	3	11	1945.60805	1945.60791	14	16	4	12	15	3	12	1952.58659	1952.58626	34												
14	2	12	13	1	12	1946.00278	1946.00247	31	14	6	8	13	5	9	1952.76708	1952.76732	-23												
14	3	12	13	2	12	1946.00278	1946.00247	31	14	7	8	13	4	9	1952.76708	1952.76732	-23												
12	12	1	11	9	2	1946.00278	1946.00267	11	16	4	13	15	3	13	1953.01477	1953.01463	15												
19	11	9	18	12	7	*1946.20449	1946.20293	156	16	3	13	15	2	13	1953.01477	1953.01463	15												
14	2	13	13	1	13	1946.43155	1946.43142	13	15	9	6	14	8	7	1953.23748	1953.23617	132												
14	1	13	13	0	13	1946.43155	1946.43142	13	17	12	5	16	11	5	1953.24427	1953.24416	11												
15	11	4	14	10	4	1946.71882	1946.71873	8	13	2	11	12	1	12	1953.35145	1953.35251	-106												
15	10	5	14	9	5	1946.83012	1946.82997	15	13	3	11	12	0	12	1953.35145	1953.35251	-106												
18	4	14	17	5	13	1946.94851	1946.94964	-113	16	2	14	15	1	14	1953.47768	1953.47773	-5												
18	5	14	17	4	13	1946.94851	1946.94964	-113	16	3	14	15	2	14	1953.47768	1953.47773	-5												
15	12	3	14	11	3	1947.11024	1947.11022	2	17	13	4	16	12	4	1953.48378	1953.48369	10												
15	9	6	14	8	6	1947.26992	1947.26990	2	17	11	6	16	10	6	1953.56930	1953.56948	-19												
15	11	5	14	10	5	1947.27766	1947.27775	-9	21	15	7	20	16	5	*1953.86104	1953.85949	155												
15	12	4	14	11	4	1947.35102	1947.35092	10	17	13	5	16	12	5	1953.90325	1953.90331	-6												
15	10	6	14	9	6	1947.39398	1947.39408	-9	17	12	6	16	11	6	1953.91855	1953.91858	-4												
15	13	2	14	12	2	1947.51031	1947.51037	-6	17	14	3	16	13	3	1953.95225	1953.95224	1												
15	13	3	14	12	3	1947.54611	1947.54618	-7	16	2	15	15	1	15	1953.97689	1953.97721	-33												
15	8	7	14	7	7	1947.61634	1947.61641	-7	16	1	15	15	0	15	1953.97689	1953.97721	-33												
15	9	7	14	8	7	1947.63260	1947.63269	-9	17	10	7	16	9	7	1954.03555	1954.03580	-24												
15	14	1	14	13	1	1947.73654	1947.73684	-31	17	14	4	16	13	4	1954.05087	1954.05107	-20												
15	14	2	14	13	2	1947.73654	1947.73684	-31	14	5	9	13	4	10	*1954.05853	1954.05718	135												
15	15	1	14	14	1	1947.86817	1947.86833	-16	14	6	9	13	3	10	*1954.05853	1954.05718	135												
15	15	0	14	14	0	1947.86817	1947.86833	-16	17	11	7	16	10	7	1954.11138	1954.11158	-20												
15	15	1	14	14	0	1947.86817	1947.86833	-16	17	15	2	16	14	2	1954.22869	1954.22870	-1												
15	15	0	14	14	1	1947.86817	1947.86833	-16	17	15	3	16	14	3	1954.23890	1954.23890	-1												
15	8	8	14	7	8	1947.91532	1947.91539	-7	14	11	3	13	8	6	1954.30133	1954.30254	-120												
15	7	8	14	6	8	1947.91532	1947.91539	-7	15	11	4	14	8	6	*1954.31075	1954.30939	136												
15	7	9	14	6	9	1948.22423	1948.22370	53	17	16	1	16	15	1	1954.37809	1954.37812	-3												
15	6	9	14	5	9	1948.22423	1948.22370	53	17	16	2	16	15	2	1954.37809	1954.37812	-3												
15	5	10	14	4	10	1948.55620	1948.55740	-120	17	16	1	16	15	2	1954.37809	1954.37812	-3												
15	6	10	14	5	10	1948.55620	1948.55740	-120	17	16	2	16	15	1	1954.37809	1954.37812	-3												
15	4	11	14	3	11	1948.92062	1948.92044	17	17	9	8	16	8	8	1954.38596	1954.38604	-8												
15	5	11	14	4	11	1948.92062	1948.92044	17	17	10	8	16	9	8	1954.39537	1954.39535	2												
15	11	4	14	10	5	*1948.98956	1948.98710	246	17	17	0	16	16	0	1954.44351	1954.44369	-18												
21	11	11	20	12	9	1949.17405	1949.17342	63	17	17	1	16	16	1	1954.44351	1954.44369	-18												
15	3	12	14	2	12	1949.31568	1949.31534	34	17	17	0	16	16	1	1954.44351	1954.44369	-18												
15	4	12	14	3	12	1949.31568	1949.31534	34	17	17	1	16	16	0	1954.44351	1954.44369	-18												
15	3	13	14	2	13	1949.74420	1949.74395	25	17	9	9	16	8	9	1954.71249	1954.71175	74												
15	2	13	14	1	13	1949.74420	1949.74395	25	17	8	9	16	7	9	1954.71249	1954.71175	74												
16	11	5	15	10	5	1950.03255	1950.03251	3	17	7	10	16	6	10	1955.05132	1955.05223	-91												
16	12	4	15	11	4	1950.09530	1950.09519	11	17	8	10	16	7	10	1955.05132	1955.05223	-91												
15	2	14	14	1	14	1950.20785	1950.20791	-5	17	6	11	16	5	11	1955.41924	1955.41873	51												
15	1	14	14	0	14	1950.20785	1950.20791	-5	17	7	11	16	6	11	1955.41924	1955.41873	51												
16	13	4	15	12	3	*1950.33409	1950.33241	168	17	5	12	16	4	12	1955.81525	1955.81488	37												
16	10	6	15	9	6	1950.45023	1950.45046	-23	17	6	12	16	5	12	1955.81525	1955.81488	37												
16	13	3	15	12	3	1950.55749	1950.55746	3	17	5	13	16	4	13	1956.24339	1956.24314	25												
16	12	5	15	11	5	1950.60195	1950.60200	-5	17	4	13	16	3	13	1956.24339	1956.24314	25												
16	11	6	15	10	6	1950.67020	1950.67028	-8	18	13	5	17	12	5	1956.47775	1956.47760	15												
16	13	4	15	12	4	1950.71778	1950.71781	-3	18	12	6	17	11	6	1956.64702	1956.64707	-5												
18	11	8	17	10	7	*1950.77706	1950.77872	-166	17	4	14	16	3	14	1956.70547	1956.70544	3												
16	9	7	15	8	7	1950.85494	1950.85521	-28	17	3	14	16	2	14	1956.70547	1956.70544	3												
16	10	7	15	9	7	1950.89188	1950.89183	5	18	14	4	17	13	4	1956.86517	1956.86507	11												
16	14	2	15	13	2	1950.89531	1950.89527	4	18	13	6	17	12	6	1957.14265	1957.14247	18												

Continue

(I)			(II)			(III)			(IV)			(V)					
18	11	7	17	10	7	1957.15060	1957.15097	-38	19	4	15	18	3	15	1963.52784	1963.52882	-99
18	14	5	17	13	5	1957.17970	1957.17977	-8	19	5	15	18	4	15	1963.52784	1963.52882	-99
17	3	15	16	2	15	1957.20346	1957.20354	-7	20	14	7	19	13	7	1963.57034	1963.57050	-16
17	2	15	16	1	15	1957.20346	1957.20354	-7	20	16	5	19	15	5	1963.64391	1963.64356	35
16	13	3	15	10	5	1957.25989	1957.25953	36	20	12	8	19	11	8	1963.70332	1963.70347	-15
18	15	3	17	14	3	1957.28909	1957.28906	3	20	17	3	19	16	3	1963.79388	1963.79333	54
18	12	7	17	11	7	1957.29483	1957.29516	-33	20	13	8	19	12	8	1963.79679	1963.79614	65
18	15	4	17	14	4	1957.34653	1957.34656	-3	20	17	4	19	16	4	1963.81104	1963.81072	33
14	10	4	13	7	7	*1957.46150	1957.45991	159	20	18	3	19	17	3	1963.93223	1963.93205	18
18	16	2	17	15	2	1957.51210	1957.51206	4	20	18	2	19	17	2	1963.93223	1963.93205	18
18	16	3	17	15	3	1957.51719	1957.51732	-13	20	20	0	19	19	0	1963.94381	1963.94382	-1
18	10	8	17	9	8	1957.54836	1957.54854	-19	20	20	1	19	19	1	1963.94381	1963.94382	-1
18	11	8	17	10	8	1957.56999	1957.57008	-8	20	19	2	19	18	2	1963.98182	1963.98164	18
18	17	2	17	16	2	1957.62729	1957.62733	-3	20	19	1	19	18	1	1963.98182	1963.98164	18
18	17	1	17	16	1	1957.62729	1957.62733	-3	19	4	16	18	3	16	1964.06096	1964.06054	42
18	17	2	17	16	1	1957.62729	1957.62693	37	19	3	16	18	2	16	1964.06096	1964.06054	42
18	17	1	17	16	2	1957.62729	1957.62772	-43	20	11	9	19	10	9	*1964.10674	1964.10190	484
18	18	1	17	17	1	1957.65893	1957.65903	-10	20	12	9	19	11	9	*1964.11276	1964.11495	-219
18	18	0	17	17	0	1957.65893	1957.65903	-10	20	10	10	19	9	10	*1964.46493	1964.46717	-224
18	18	1	17	17	0	1957.65893	1957.65903	-10	20	11	10	19	10	10	*1964.46493	1964.46717	-224
18	18	0	17	17	1	1957.65893	1957.65903	-10	19	2	17	18	1	17	*1964.67817	1964.63047	4770
18	14	4	17	13	5	1957.71171	1957.71095	76	19	3	17	18	2	17	*1964.67817	1964.63047	4770
17	2	16	16	1	16	1957.74012	1957.73916	96	20	9	11	19	8	11	*1964.84805	1964.84305	501
17	1	16	16	0	16	1957.74012	1957.73916	96	20	10	11	19	9	11	*1964.84805	1964.84305	501
18	9	9	17	8	9	1957.88980	1957.88848	132	17	14	3	16	11	6	1964.85647	1964.85728	-81
18	10	9	17	9	9	*1957.89336	1957.89066	270	20	8	12	19	7	12	1965.24417	1965.24349	68
18	8	10	17	7	10	1958.23353	1958.23474	-121	20	9	12	19	8	12	1965.24417	1965.24349	68
18	9	10	17	8	10	1958.23353	1958.23474	-121	17	15	2	16	12	5	1965.24417	1965.24293	124
18	7	11	17	6	11	1958.60462	1958.60367	95	20	8	13	19	7	13	1965.67254	1965.67260	-6
18	8	11	17	7	11	1958.60462	1958.60367	95	20	7	13	19	6	13	1965.67254	1965.67260	-6
18	6	12	17	5	12	1959.00129	1959.00086	43	21	15	6	20	14	6	1965.90267	1965.90267	1
18	7	12	17	6	12	1959.00129	1959.00086	43	20	7	14	19	6	14	1966.13290	1966.13314	-24
18	6	13	17	5	13	1959.42938	1959.42917	21	20	6	14	19	5	14	1966.13290	1966.13314	-24
18	5	13	17	4	13	1959.42938	1959.42917	21	20	6	15	19	5	15	1966.62665	1966.62732	-67
19	13	6	18	12	6	1959.71295	1959.71271	24	20	5	15	19	4	15	1966.62665	1966.62732	-67
19	14	5	18	13	5	1959.73757	1959.73737	20	21	15	7	20	14	7	*1966.66840	1966.67047	-207
17	13	5	16	10	6	1959.79532	1959.79420	112	21	13	8	20	12	8	*1966.68354	1966.68141	213
18	5	14	17	4	14	1959.89073	1959.89076	-3	21	17	4	20	16	4	1966.74130	1966.74164	-34
18	4	14	17	3	14	1959.89073	1959.89076	-3	21	17	5	20	16	5	1966.82153	1966.82211	-59
19	12	7	18	11	7	1960.19580	1960.19612	-32	18	9	9	17	8	10	1966.90092	1966.90097	-5
19	15	4	18	14	4	1960.21328	1960.21323	5	21	21	1	20	20	1	1967.01292	1967.01295	-3
19	14	6	18	13	6	1960.34508	1960.34405	103	21	21	0	20	20	0	1967.01292	1967.01295	-3
18	3	15	17	2	15	*1960.39214	1960.38749	465	20	4	16	19	3	16	*1967.16328	1967.15711	617
18	4	15	17	3	15	*1960.39214	1960.38749	465	20	5	16	19	4	16	*1967.16328	1967.15711	617
19	15	5	18	14	5	1960.42791	1960.42796	-5	21	13	9	20	12	9	*1967.16328	1967.16136	192
19	13	7	18	12	7	1960.44635	1960.44667	-32	21	10	11	20	9	11	*1967.90939	1967.89654	1285
19	16	3	18	15	3	1960.56879	1960.56860	19	21	11	11	20	10	11	*1967.90939	1967.89654	1285
19	16	4	18	15	4	1960.60072	1960.60070	2	21	9	12	20	8	12	1968.30057	1968.29941	116
19	11	8	18	10	8	1960.65632	1960.65659	-27	21	10	12	20	9	12	1968.30057	1968.29941	116
19	12	8	18	11	8	1960.70293	1960.70290	3	18	16	3	17	13	4	1968.43048	1968.43145	-97
19	17	2	18	16	2	1960.74618	1960.74615	3	21	9	13	20	8	13	1968.72848	1968.72939	-90
19	17	3	18	16	3	1960.74934	1960.74883	51	21	8	13	20	7	13	1968.72848	1968.72939	-90
19	19	0	18	18	0	1960.82603	1960.82580	23	22	15	7	21	14	7	1969.04498	1969.04428	70
19	19	1	18	18	1	1960.82603	1960.82580	23	21	7	14	20	6	14	1969.18949	1969.18969	-20
19	18	2	18	17	2	1960.82905	1960.82856	49	21	8	14	20	7	14	1969.18949	1969.18969	-20
19	18	1	18	17	1	1960.82905	1960.82856	49	22	17	5	21	16	5	1969.54296	1969.54266	30
19	11	9	18	10	9	*1961.02109	1961.02492	-383	21	7	15	20	6	15	1969.68339	1969.68274	64
19	10	9	18	9	9	*1961.02109	1961.01940	170	21	6	15	20	5	15	1969.68339	1969.68274	64
19	9	10	18	8	10	*1961.37162	1961.37326	-165	22	16	7	21	15	7	1969.74798	1969.74896	-99
19	10	10	18	9	10	*1961.37162	1961.37326	-165	22	15	8	21	14	8	1969.88015	1969.87887	128
19	9	11	18	8	11	*1961.74742	1961.74526	216	22	18	4	21	17	4	1969.91289	1969.91385	-96
19	8	11	18	7	11	*1961.74742	1961.74526	216	22	18	5	21	17	5	1969.95871	1969.95965	-95
19	8	12	18	7	12	1962.14431	1962.14385	46	22	22	1	21	21	1	1970.03296	1970.03311	-15
19	7	12	18	6	12	1962.14431	1962.14385	46	22	22	0	21	21	0	1970.03296	1970.03311	-15
17	10	8	16	7	9	1962.43630	1962.43616	14	22	19	3	21	18	3	1970.08667	1970.08641	26
19	7	13	18	6	13	1962.57250	1962.57242	8	22	19	4	21	18	4	1970.09123	1970.09121	2
19	6	13	18	5	13	1962.57250	1962.57242	8	22	21	1	21	20	1	1970.14318	1970.14279	40
20	14	6	19	13	6	1962.79232	1962.79256	-25	22	21	2	21	20	2	1970.14318	1970.14279	40
20	15	5	19	14	5	1963.01729	1963.01701	28	22	20	3	21	19	3	1970.15606	1970.15587	19
19	6	14	18	5	14	1963.03322	1963.03341	-19	22	20	2	21	19	2	1970.15606	1970.15587	19
19	5	14	18	4	14	1963.03322	1963.03341	-19	17	4	14	16	1	15	*1970.62027	1970.62166	-139
20	13	7	19	12	7	1963.17658	1963.17681	-22	17	3	14	16	2	15	*1970.62027	1970.62166	-139
20	16	4	19	15	4	1963.50841	1963.50814	28	22	11	12	21	10	12	*1971.31330	1971.31121	208

Continue

(I)			(II)			(III)	(IV)	(V)	(I)			(II)			(III)	(IV)	(V)
22	10	12	21	9	12	*1971.31330	1971.31121	208	24	18	7	23	17	7	1975.84002	1975.84087	-85
22	9	13	21	8	13	1971.74257	1971.74249	8	24	19	5	23	18	5	1975.86245	1975.86251	-6
22	10	13	21	9	13	1971.74257	1971.74249	8	24	24	1	23	23	1	1975.92642	1975.92650	-8
22	9	14	21	8	14	1972.20324	1972.20280	44	24	24	0	23	23	0	1975.92642	1975.92650	-8
22	8	14	21	7	14	1972.20324	1972.20280	44	24	20	4	23	19	4	1976.08684	1976.08634	50
23	17	6	22	16	6	1972.22122	1972.22178	-56	24	20	5	23	19	5	1976.09907	1976.09996	-89
23	18	5	22	17	5	1972.73487	1972.73512	-25	24	21	3	23	20	3	1976.17878	1976.17862	16
23	17	7	22	16	7	*1972.80409	1972.80637	-228	24	21	4	23	20	4	1976.17878	1976.17862	16
23	18	6	22	17	6	*1972.90626	1972.90413	213	24	22	2	23	21	2	1976.18537	1976.18522	16
23	23	0	22	22	0	1973.00401	1973.00428	-27	24	22	3	23	21	3	1976.18537	1976.18522	16
23	23	1	22	22	1	1973.00401	1973.00428	-27	24	12	13	23	11	13	*1977.63910	1977.63626	284
23	19	4	22	18	4	1973.02856	1973.02776	80	24	11	13	23	10	13	*1977.63910	1977.63626	284
23	19	5	22	18	5	1973.05304	1973.05302	2	23	4	20	22	3	20	1978.66208	1978.66142	66
23	22	1	22	21	1	1973.15147	1973.15075	72	23	3	20	22	2	20	1978.66208	1978.66142	66
23	22	2	22	21	2	1973.15147	1973.15075	72	25	25	1	24	24	1	1978.79993	1978.79987	7
23	20	4	22	19	4	1973.15789	1973.15834	-45	25	25	0	24	24	0	1978.79993	1978.79987	7
23	20	3	22	19	3	1973.15789	1973.15834	-45	25	20	5	24	19	5	1978.92427	1978.92462	-35
23	21	2	22	20	2	1973.19520	1973.19489	31	25	24	1	24	23	1	1979.02125	1979.02159	-34
23	21	3	22	20	3	1973.19520	1973.19489	31	25	24	2	24	23	2	1979.02125	1979.02159	-34
23	12	12	22	11	12	*1974.28259	1974.27845	413	24	8	16	23	7	16	1979.11136	1979.11144	-8
23	11	12	22	10	12	*1974.28259	1974.27845	413	24	9	16	23	8	16	1979.11136	1979.11144	-8
23	10	13	22	9	13	1974.71223	1974.71156	67	24	8	17	23	7	17	1979.66788	1979.66885	-98
23	11	13	22	10	13	1974.71223	1974.71156	67	24	7	17	23	6	17	1979.66788	1979.66885	-98
22	3	19	21	2	19	1975.02423	1975.02479	-56	26	19	7	25	18	7	1981.09698	1981.09569	129
22	4	19	21	3	19	1975.02423	1975.02479	-56	26	24	2	25	23	2	1982.01935	1982.01968	-33
23	10	14	22	9	14	*1975.17524	1975.17222	302	26	24	3	25	23	3	1982.01935	1982.01968	-33
23	9	14	22	8	14	*1975.17524	1975.17222	302	27	19	8	26	18	8	1983.72570	1983.72566	3
24	16	8	23	15	8	1975.22115	1975.22146	-31	26	12	14	25	11	14	1983.81590	1983.81552	39
24	18	6	23	17	6	1975.39740	1975.39798	-57	26	13	14	25	12	14	1983.81590	1983.81552	39
23	9	15	22	8	15	1975.66358	1975.66355	3	27	18	9	26	17	9	1983.95548	1983.95645	-97
23	8	15	22	7	15	1975.66358	1975.66355	3	27	21	7	26	20	7	1984.76526	1984.76523	3

Conclusion

Dans cette thèse les spectres haute résolution de la molécule SbH_2D ont été étudiés. Cette molécule a été choisie d'une part pour leur intérêt astrophysique et d'autre part pour leur intérêt théorique. Il s'agit en effet de molécule non-rigide, présentant un mouvement de grande amplitude et redevables de traitements théoriques spécifiques pour le calcul de leurs niveaux d'énergie.

La molécule étudiée est la variété isotopique SbH_2D de la Stibine, Cette molécule est éminemment non-rigide, car elle présente un mouvement de grande amplitude d'inversion, et les effets de cette inversion sont bien visibles sur les spectres **infrarouge** dont nous avons disposé. Dans le cas de cette molécule, le calcul des niveaux d'énergie de rotation-inversion est complexe et requiert une prise en compte simultanée de la rotation globale et de l'inversion. La première approche théorique visant à calculer les niveaux d'énergie d'une molécule non-rigide présentant un mouvement d'inversion est développée. Elle est appliquée à l'analyse de la position des raies du spectre à haute résolution de la molécule non rigide de SbH_2D et permet de réaliser une analyse globale d'un ensemble de données constitué de données déjà disponibles, et des transitions **infrarouges** mesurées dans ce travail.. Dans les **deux** spectres plus de **8329** transitions ont été attribuées et l'analyse de ces raies a permis d'obtenir de nombreux paramètres spectroscopiques (**103** paramètres) et notamment l'énergie cinétique, la hauteur de la barrière de potentielle gênant l'inversion avec une déviation standard sans unité est de **2,6**. Grâce à ces résultats nous avons pu également compiler une base de données spectroscopique à usage astrophysique.

Les bases de données compilées dans cette thèse devraient apporter aux astrophysiciens les éléments nécessaires à la détection dans le milieu interstellaire de la molécule étudiée. Elles apporteront de ce fait des informations sur les rapports isotopiques D/H.