REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « D. TAHAR MOULAY » DE SAIDA FACULTE DES SCIENCES DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité: PHYSIQUE

Option : Physique des rayonnements

Par

KADDOURI Zohra

Sur le thème

Spectroscopie infrarouge des deux bandes isolées v₃ et v₄ de la molécule ⁸⁰SeF₆

Soutenu le : 23/06/2020 devant le jury composé de :

Président M. DJAAFRI Abdelkader **MCB** Université D. TAHAR Moulay de Saida Encadreur M. MESKINE Mohamed Université D. TAHAR Moulay de Saida MCA Co-encadreur M. KAAROUR Abdelkrim Université D. TAHAR Moulay de Saida **MCB** Examinateur M. DJAAFRI Tayeb MCA Université D. TAHAR Moulay de Saida

Année Universitaire 2019 - 2020

Remerciements

Tout d'abord, je remercie ALLAH le tout puissant qui m'a donné la force et la volonté, la santé et la patience durant mes années d'études et surtout pendant la réalisation de ce travail.

J'exprime mes profondes reconnaissances à mon encadreur Docteur «MESKINE Mohamed» pour sa disponibilité, sa patience et la qualité de son encadrement, ses compétences et ses conseils inestimable qui m'ont permis de mener à bien ce modeste travail.

Mes remerciements vont également aux membres du jury, d'avoir accepté de lire ce mémoire et de l'évaluer et pour l'intérêt qu'ils ont porté à mes recherche en acceptant d'examiner mon travail et de l'enrichir par leurs propositions.

Je remercie de tout cœur les enseignants de département des physiques.

Mes remerciements s'étendent également à tous les professeurs qui nous ont enseigné et qui par leurs compétences nous ont soutenu dans la poursuite de nos études, Spécialement : A. DJaafri, O. Ouardi, F. Saadaoui, M. Boutaleb, H. Boutaleb et M. Elkeurti.

A ma mère, je dis un immense merci. Je remercie également mon frère et deux sœurs, ainsi que mes amis et surtout spécialité du physique des rayonnements.

De plus, je remercie tous à l'ensemble des permanents et les professionnels de la bibliothèque.

Enfin, J'adresse plus sincères remerciements à toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

« Mercí Beaucoup »

« Kaddouri Zohra »



« Grâce à mon Díeu »

Je tiens a dédié ce modeste travail :

À mes chers parents, pour tous leurs sacrifices, leur amour pour leur soutien, leur patience, leurs conseils, et leurs encouragements.

À mon frère manssour et à ma sœur ainée : Plus qu'une mère pour moi, toujours présente quand j'avais besoin de vous et son mari Abdel Wahab.

À ma sœur Aida et son mari Abdel Jabbar et son fils Houssem Khalil.

À mon Encadreur Docteur « Meskine Mohamed » qui j'ai toute l'appréciation et le respect, qui était avec moi par son encouragement et m'aidé à la réalisation de ce travail du début à la fin.

À tous les professeurs de l'université de Saida et spécialement les professeurs de la physique des Rayonnements.

À toutes mes chères copines Spécialement: B. Messaouda, D. Meriem, M. Fatima.

À tous mes chères amis Spécialement : T. Cheikh, M. Lahrache, K. Abdelhaq, B. Yassine.

À celui qui était avec moi par son encouragement et m'aidé à la réalisation de ce travail.

À tous mes collègues la promotion de la physique des Rayonnements 2019-2020.

À tous ceux qui me sont chers.

« Kaddouri Zohra »



Remerciements			
Dédicaces			
Liste des figures			
Liste des tableau	ux		
Introduction gén	iérale		01
Références bibli	ographiques	S	04
Chapitre I : Gér	iéralités sur	· le groupe octaédrique	06
<i>I-1</i>	Introduct	ion	06
<i>I-2</i>	Symétrie	moléculaire	06
	<i>I-2-1</i>	Définitions	06
	<i>I-2-2</i>	Opérations de symétrie	06
	<i>I-2-3</i>	Éléments de symétrie	07
<i>I-3</i>	le groupe	O_h	09
<i>I-4</i>	Les mode	s normaux de vibration des molécules octaédriques	10
	I-4-1	Théorie des caractères	10
	<i>I-4-2</i>	Théorème	11
Références bibli	ographiques	S.	20
Chapitre II : Fo	rmalisme O	Octaédrique	21
II-1	Introduct	ion	21
II-2	Transform	nations de contact	21
<i>II-3</i>	Expression	on de l'Hamiltonien	22
II-4	Expression	on de moment dipolaire	25
II-5	Expression	on de la polarisabilité	28
II-6	Les règle	s de sélection	30
Références bibli	ographiques	S	32
Chapitre III : A	nalyse des d	leux bandes isolées v ₃ et v ₄ de la molécule ⁸⁰ SeF ₆	33
III-1	Introduct		33
III-2	Programi	mes utilisés	33
	<i>III-2-1</i>	XTDS et SPVIEW	33
	<i>III-2-2</i>	Fichier de paramètres	35
	<i>III-2-3</i>	Génération du spectre	35
	<i>III-2-4</i>	Simulation du spectre	35
<i>III-3</i>	La métho	de d'analyse	35
III-4	Analyse a	les positions des raies de la bande $oldsymbol{v_3}$ de la molécule $^{80}SeF_6$	39
	III-4-1	Résultats et discussion	39
	III-4-2	Les niveaux d'énergies réduits	42
	<i>III-4-3</i>	Prédiction du spectre IR de la bande v_3 de la molécule 80 Se F_6	43
III-5		des positions des raies de la bande v_4 de la molécule $^{80}{ m SeF}_6$	49
	III-5-1	Résultats et discussion	50
	III-5-2	Les niveaux d'énergies réduits	51
	III-5-3	Prédiction du spectre IR de la bande v_4 de la molécule $^{80}SeF_6$	52
Références bibli			59
Conclusion géné	~	•	60
Résumé	inic		00



Figure (I-1).	La rotation de 180° d'une molécule d'eau autour d'un axe la laisse inchangée, ainsi que la réflexion au travers de deux plans miroirs.	06
Figure (I-2).	Effet de rotation de l'axe C_2 .	07
Figure (I-3).	Effet de l'opération de plan.	08
Figure (I-4).	Effet de l'opération d'inversion i sur la molécule de SF_6 .	08
Figure (I-5).	Rotation impropre S_4 .	09
Figure (I-6).	Géométrie d'une molécule octaédrique.	09
Figure (II-1).	Illustration schématique de l'extrapolation vibrationnelle de l'Hamiltonien et de moment dipolaire dans le cas de polyades et de bandes chaudes.	31
Figure (III-1).	L'onglet "creat a job" dans XTDS.	34
Figure (III-2).	Visualisation des spectres avec SPVIEW.	34
Figure (III-3).	Méthode d'utilisation des deux logiciels XTDS et SPVIEW.	37
Figure (III-4).	Organigramme des programmes utilisés dans le calcul.	38
Figure (III-5).	Configuration d'équilibre de la molécule XY_6 .	39
Figure (III-6).	Spectres des transitions rovibrationnelles de la bande $ \nu_3 $ de la molécule $^{80} SeF_6 $	42
Figure (III-7).	Répartitions des niveaux d'énergies réduits de niveau $ u_3$ de la molécule $^{80}{ m SeF}_6$	43
Figure (III-8).	Spectre des transitions rovibrationnelles de la bande $ u_4$ de la molécule $^{80}SeF_6$	51
Figure (III-9).	Répartitions des niveaux des énergies de niveau de $ u_4$ de la molécule $^{80}{ m SeF}_6$	52

Liste des tableaux :

Tableau (I-1).	Table de caractères du groupe <i>Oh</i> .	10
Tableau (1-2).	Table de produits de caractères du groupe <i>Oh</i> .	12
Tableau (1-3).	Caractères des opérations de symétrie.	15
Tableau (1-4).	Valeurs des caractères des opérations de symétrie des molécules XY_6 .	16
Tableau (I-5).	Caractères vibrationnels des opérations de symétrie des molécules XY_6 .	16
Tableau (I-6).	Table de caractères et valeurs de caractères vibrationnels des molécules XY_6 .	17
Tableau (I-7).	Symétries des modes de vibrations des molécules octaédriques.	18
Tableau (I-8).	Caractéristiques des bandes d'absorption des molécules octaédriques	19
Tableau (II-1).	Les symétries des opérateurs (Hamiltonien, moment dipolaire et polarisabilité) dans les repères (MFF) et (LFF) des molécules octaédriques.	30
Tableau (III-1).	Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à la bande $ u_3$ de la molécule $^{80}{ m SeF}_6$.	41
Tableau (III-2).	Informations sur le spectre IR de la bande ν_3 de la molécule $^{80}SeF_6$.	41
Tableau (III-3).	Prédiction du spectre IR de la bande $ u_3$ de la molécule $^{80}{ m SeF}_6$.	44
Tableau (III-4).	Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à la bande ν_4 de la molécule $^{80}{\rm SeF}_6$.	50
Tableau (III-5).	Informations sur le spectre IR de la bande ν_4 de la molécule $^{80}{\rm SeF}_6$.	50
Tableau (III-6).	Prédiction du spectre IR de la bande $ u_4$ de la molécule $^{80}{ m SeF}_6$.	53



Introduction générale

Introduction:

La spectroscopie infrarouge est l'une des techniques employée pour l'identification des composés organiques et inorganiques ou pour déterminer la composition d'un échantillon et de déterminer la nature des liaisons chimiques présentes dans une molécule à partir de leurs propriétés vibrationnelles (en complément d'autres méthodes, la Raman et la spectrométrie de masse). Elle est basée sur l'interaction du rayonnement infrarouge avec les molécules en excitantes leur modes de vibration (déformation, élongation) spécifiques de liaisons chimiques. Les fréquences des modes vibrationnels dépendent de la forme des surfaces d'énergie potentielle, les masses atomiques et du couplage vibronique associé.

Il est nécessaire de découvrir des méthodes faciles à appliquer, et qui permettent d'interpréter les résultats expérimentaux, et d'en tirer des informations sur la structure des molécules. C'est ici que la théorie des groupes joue un rôle primordial, elle fournit à l'expérimentateur un outil pour interpréter et expliquer ses résultats expérimentaux, et au théoricien un guide indispensable pour affronter le problème complexe de corrélation des résultats expérimentaux avec la structure moléculaire [1]

Parmi les systèmes moléculaires qui occupent une place importante dans le domaine de la recherche, les molécules octaédriques XY_6 , et dans ce travail on s'est intéressé à la molécule $^{80}SeF_6$ et plus précisément à son spectre d'absorption infrarouge.

Les travaux consacrés à l'étude des spectres de vibration - rotation des molécules (toupie sphérique) de type XY_4 et XY_6 font appel à des méthodes spécifiques, caractérisées principalement par une utilisation très large de la théorie des groupes et des techniques tensorielles associées.

La structure octaédrique de la molécule SF_6 a été reconnue depuis longtemps, grâce aux spectres infrarouge à faible résolution [2] et Raman [3].

Durant les années 1970 et le début des années 1980, plusieurs études de résolutions moyennes (de quelques) ont été effectuées sur cette molécule. Ces études ont été publiées par Mc Dowell et al [4,5], elles incluent toute à fait une étude systématique de toutes les bandes fondamentales, et quelques bandes de combinaison et harmoniques de molécules de type XY_6 .

Cependant, et du fait de la faible résolution, ces bandes n'ont pas été analysées en utilisant des modèles bruts. En particulier, pour les bandes harmoniques et de combinaison, seuls les sous niveaux actives en infrarouge (avec une symétrie F_{1u}) ont été considérés et traités comme étant des bandes isolées. Nous devrions également remarquer que ces travaux s'intéressent aux spectres d'absorption infrarouge, plus qu'aux spectres Raman [6,7].

La plupart des études à haute résolution réalisées jusqu'à maintenant ont été sur les bandes fondamentales $\nu_4[8]$ et ν_3 [9].

D'autres efforts ont été également consacrés à l'étude de la bande ν_3 , en utilisant des diodes lasers [10,11]. Le groupe Bordé à Villetaneuse (France) a effectué des études à haute résolution [12,13], en utilisant des techniques d'absorption saturées de la structure hyperfine.

Baldacchini et al [11] ont analysé le spectre de la diode laser de $^{34}SF_6$, en utilisant un modèle simple.

Introduction générale

Entre 1977 et 1982, quelques autres travaux ont été également effectués sur les spectres de la bande $2\nu_3$ en utilisant la technique de double résonance (par observation des raies de ($2\nu_3 - \nu_3$) [14,15] et de la bande $3\nu_3$ [16,17].

Concernant la bande ν_3 , nous pouvons mentionner aussi les travaux de Hartmann et al [18], et qui ont observé la bande de SF_6 dans les groupes d'Hélium liquide pour atteindre une température rotationnelle de 0.37^0k seulement.

La spectroscopie infrarouge à transformé de Fourier FTIR (Fourier Transformed Infrared) et les techniques diodes lasers sont aussi utilisées pour étudier les spectres à haute résolution de la bande ν_4 à Los Alamos par W. Person et al [8,19]. Les chercheurs pourraient observer des raies rotationnelles pour une valeur de nombre quantique rotationnel allant jusqu'à J = 150.

Li et al [20], ont étudié la bande de combinaison $(\nu_1 + \nu_4)$, en utilisant le même modèle utilisé par W. Person et al.

À la fin des années 1970, Berger et al [21,7], qui ont étudié le spectre Raman de la molécule SF_6 à une résolution de $0.02~cm^{-1}$ ont préliminairement analysé la bande ν_2 et ont ainsi déterminé quelques paramètres de l'Hamiltonien effectif.

V. Boudon et al [22] ont présenté les premiers détails sur le spectre infrarouge FTIR de la bande de combinaison ($\nu_2 + \nu_6$) de la molécule SF_6 .

Tandis que, Ch. Wenger et al [23]ont développé un logiciel nommé **HTDS** (Highly-Spherical Top Data Système) permettant de simuler les spectres des molécules octaédriques XY_6 , V. Boudon et al [24] ont, ensuite, étudié simultanément les bandes ν_4 et ($\nu_4 + \nu_6 - \nu_6$) de la molécule $^{32}SF_6$, en utilisant un spectre **FTIR** à haute résolution. Tandis que, M. Ray et al [25] ont développés le calcul de la matrice G intervenant dans l'orientation de O(3) et $SU(2) \otimes CI$ des représentations dans les molécules XY_4 et XY_6 .

M. Ray et al [26], ont développé un formalisme tensoriel rovibronique de l'Hamiltonien et moment de transition (moment dipolaire et polarisabilité) pour les molécules XY_6 , ce qui a permis à N. Cheblal et al [27] de donner l'expression de l'opérateur rovibrationnel de moment dipolaire et de la polarisabilité des molécules XY_6 . V. Boudon et al [28] ont analysé, ensuite, le spectre FTIR de la bande de combinaison $\nu_2 + \nu_4$ de la molécule $^{32}SF_6$.

CH. Wenger et al **[29]** ont finalisé les deux logiciels nommés **XTDS** et **SPVIEW**, utilisés dans l'analyse, la simulation et le calcul des spectres à haute résolution de quelques types de molécules.

Pour cela, et du fait que la spectroscopie SeF_6 reste encore mal connue, nous avons entrepris dans ce travail une étude systématique des deux bandes d'absorption ν_3 et ν_4 de la molécule $^{80}SeF_6$, en utilisant le formalisme octaédrique et les logiciels SPVIEW et XTDS développés à Dijon, université de Bourgogne.

Le premier chapitre, contient des généralités sur le symétries moléculaires, et la théorie des groupes, et plus particulièrement sur le groupe octaédrique auquel appartenant la molécule en question.

Le deuxième chapitre sera consacré au développement complet de l'opérateur Hamiltonien et moment de transition (moment dipolaire et polarisabilité) des molécules octaédriques XY_6 .

Introduction générale

Ensuite et dans un dernier chapitre, nous décrivons brièvement la méthode d'analyse et les logiciels utilisés dans le calcul des spectres infrarouges des deux bandes en questions. Puis nous allons présenter et discuter les résultats obtenus lors de cette étude.

Enfin, la conclusion résume l'essentiel de notre travail.

Références Bibliographiques

Références bibliographiques:

- [1] Frédric Fauré and Boris Zhilinski, Lettres in Mathématical Physics, 55,219-238, (2001). https://link.springer.com/article/10.1023/A:1010912815438
- [2] J. Gaunt. Trans. Faraday Soc, 49:1122, (1953). https://doi.org/10.1016/0371-1951(58)80107-1
- [3] H. Claassen, G. Goodmann, J. Holloway, and H. Selig. *J. Chem. Phys*, 53:341, (1970). https://doi.org/10.1063/1.1673786
- [4] R. Mc Dowell. Informel report la-6025-ms. Technical report, Los Alamos National Laboratory (unpublished).
- [5] R. Mc Dowell and B. Krohn. Spectrochim. Acta, 42A:371, (1986). https://doi.org/10.1016/0584-8539(86)80199-4
- [6] J. Cahen et al. Non-linear behaviour of molecules, atoms and ions in electric, magnetic or electromagnetic fields. In 31st international meeting, pages 127–140, Abbaye de Fontevraud, France, sept (1978). PUBLISHER, ADRESS, 1979.
- [7] A. Aboumajd, H. Burger, and R. Saint-Loup. J. Mol. Spectrosc, 78:486, (1979). https://doi.org/10.1006/jmsp.1998.7699
- [8] K. Kim, W. Person, D. Seitz, and B. Krohn. J. Mol. Spectrosc, 76:322, (1979).
- [9] O.Acef, Ch.J.Bordé, A.Clairon, G.Pierre and B.Sartakov. J. Mol. Spectrosc, 199:188-204, (2000). https://doi.org/10.1006/jmsp.1999.8015
- [10] Aldridge, Jack P. Filip, Henry, Flicker, Herbert, Holland Redus, F. McDowell, Robin S.Nereson, Norris G. Fox, Kenneth. J. Mol. Spectrosc, 58 issue 01 p:165-168, (1975). https://doi.org/10.1016/0022-2852(75)90164-2
- [11] G. Baldacchini, S. Marchetti, and V. Montelatici. J. Mol. Spectrosc, Volume 91, issue 01:80-86, (1982). https://doi.org/10.1016/0022-2852(82)90032-7
- [12] J. Bordé and C. Bordé. J. Chem. Phys, 71:417, (1982).
- [13] B. Bobin, C. Bordé, J. Bordé, and C. Bréant. *J. Mol. Spectrosc*, Volume 121, issue 01. p:91-127, (1987). https://doi.org/10.1016/0022-2852(87)90174-3
- [14] C. Reiser, J. Steinfeld, and H. Galbraith. J. Chem. Phys. **74**, 2189 (1981); https://doi.org/10.1063/1.441379
- [15] M. Dubs, D. Harradine, E. Schweitzer, and J. I. Steinfeld. J. Chem. Phys. 77, 3824 (1982); https://doi.org/10.1063/1.444357
- [16] H. Kildal. J. Chem. Phys, 67:1287, (1977). https://doi.org/10.1063/1.434948

Références bibliographiques

- [17] A. Pine and A. Robiette. J. Mol. Spectrosc, Volume 80, Issue 2 :p: 388-402, (1980). https://doi.org/10.1016/0022-2852(80)90150-2
- [18] H. Hatmann, R. E. Miller, J. P. Toennies, and A. Vilesov. *Phys. Rev. Lett*, 75:1566, (1995). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.1566
- [19] W. Person and B. Krohn. J. Mol. Spectrosc, Volume 98. issue 01. p: 229-257, (1983). https://doi.org/10.1016/0022-2852(83)90217-5
- [20] B. Li, Q. Zhu, and Z. Shen. Spectrochim. Acta A, Volume 43, Issue 11, p:13611363, (1987). https://doi.org/10.1016/S0584-8539(87)80011-9
- [21] H. Berger, A. Aboumajd et R. Saint-Loup. J. Phys. Letteres, Volume 38. Issue 18: 373-375, (1977). https://doi.org/10.1051/jphyslet:019770038018037300
- [22] V.Boudon M.Hepp, M.Herman, I.Pak, and G.Pierre. J. Mol. Spectrosc, Volume 192. Issue 02. p:359-367, (1998). https://doi.org/10.1006/jmsp.1998.7699
- [23] Ch. Wenger, V. Boudon, J-P. Champion, and G. Pierre. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, volume 66. Issue 01. p:1–16, (2000). https://doi.org/10.1016/S0022-4073(99)00161-2
- [24] V. Boudon, G. Pierre, and H. Burger. J. Mol. Spectrosc, volume 205. Issue 02. p:304–311, (2001). https://doi.org/10.1006/jmsp.2000.8267
- [25] M. Rey, V. Boudon, Ch. Wenger, G. Pierre, and B. Sartakov. *J. Mol. Spectrosc*, volume 219. Issue 2 :313–325, (2003). https://doi.org/10.1016/S0022-2852(03)00056-0
- [26] Michael Rey, Vincent Boudon, and Michel Loete. J. Mol. Structure, volume 599. Issue 1-3. p:125–137, (2001).
 https://doi.org/10.1016/S0022-2860(01)00841-9
- [27] N. Cheblal, M. Loete, and V. Boudon. J. Mol. Spectrosc, Volume 197. Issue 02. p:222–231, (1999). https://doi.org/10.1006/jmsp.1999.7902
- [28] V. Boudon and N. Lacome. J. Mol. Spectrosc, Volume 222. Issue 02. p :291–295, (2003). https://doi.org/10.1016/j.jms.2003.09.003
- [29] Ch.Wenger, V. Boudon, M. Rotger, and M. Sanzharov. *J. Mol. Spectrosc*, Volume 251. Issue 01-02. p :102–113, (2008). https://doi.org/10.1016/j.jms.2008.01.011



I-1.Introduction:

La théorie des groupes est une discipline mathématique. C'est la partie de l'algèbre générale qui étudie les structures algébriques appelées groupes. Le développement de la théorie des groupes est issu de la théorie des nombres, de la théorie des équations algébriques et de la géométrie.

La théorie des groupes est étroitement liée à la théorie des représentations. elle sont très utilisées en chimie et aussi en physique théoriques, sciences des matériaux et cryptographie asymétrique, surtout pour le développement des théories de jauge.

La théorie des groupes permet de simplifier l'écriture de l'Hamiltonien d'une molécule en exploitant ses symétries, et le calcul des orbitales moléculaires. Elle permet de prédire le type de déformation que peut subir une molécule et selon la symétrie de sa déformation, elle permet de prévoir si une transition peut être visible dans les spectres IR/ou Raman.

I-2.Symétrie moléculaire:

I-2-1.Définitions:

L'étude des symétries d'une molécule est fondée sur l'étude de son infrastructure géométrique constituée par les noyaux de ses atomes. La molécule peut contenir des noyaux identiques et occupants, dans l'infrastructure, des positions équivalentes du point de vue physique. Dans la théorie de la symétrie moléculaire, Nous considérerons, parmi les permutations de noyaux identiques et physiquement équivalents, les permutations obtenues par des rotations de l'infrastructure considérée comme un solide indéformable, on par des symétries par rapport à un plan, on encore par des combinaisons de ces deux types de transformation. [1]

I-2-2. Opération de symétrie :

L'opération de symétrie c'est le mouvement de déplacement d'un objet le conduisant soit à une position équivalente soit à une position identique, chaque opération de symétrie possède un **élément de symétrie. [2]**

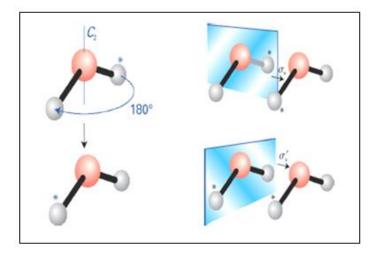


Figure (I-1): La rotation de 180° d'une molécule d'eau autour d'un axe la laisse inchangée, ainsi que la réflexion au travers de deux plans miroirs.

I-2-3. Éléments de symétrie :

Un élément de symétrie est un objet géométrique qui sert à définir l'opération de symétrie un point, une droite, un planetc.

Les cinq opérations de symétrie possibles pour les molécules sont :[3]

- ❖ *L'opération d'identité E*: Est une opération de symétrie qui consiste à ne rien faire à la molécule.
- * Axe propres de rotation C_n : La rotation d'ordre n, c'est à dire d'un angle de $2\pi/n$ laisse la molécule inchangée. Certaines molécules ont plusieurs axes de symétrie la plus grande valeur de n est appelé l'axe principal.

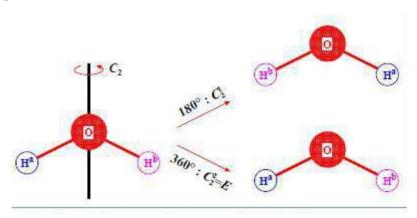


Figure (I-2): Effet de rotation de l'axe C_2 .

- **Plans de symétries** σ : Il définit une opération de symétrie plane ou réflexion, il existe trois types de plan de symétrie selon son positionnement par rapport à l'axe principal :
 - \triangleright *Plan* σ_h: On note σ_h un plan de symétrie horizontal, il est perpendiculaire à l'axe d'ordre n.
 - Plan σ_v : Plan de réflexion est appelé plan vertical et est noté σ_v , il est perpendiculaire à σ_h qui contient l'axe principal C_n .
 - Plan σ_d : Plan de réflexion est note σ_d , il est perpendiculaire à σ_v , s'il contient l'axe principal et au même temps il est bissecteur d'un angle formé par deux axes C_2 .

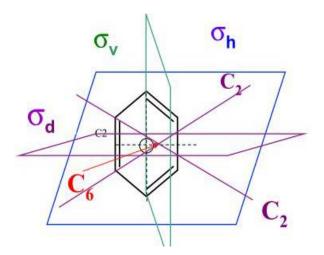


Figure (I-3): Effet de l'opération de plan.

Centre d'inversion « i » : l'opération de symétrie associée à un centre d'inversion Consiste à faire une réflexion par rapport à un point, notée i. Si le centre de symétrie coïncide avec l'origine des coordonnées, l'opérateur i a pour effet de changer le signe des coordonnées selon : i(x, y, z) _ (-x,-y,-z).

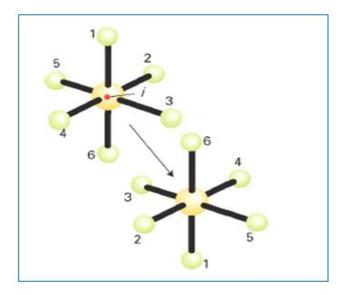


Figure (I-4): Effet de l'opération d'inversion i sur la molécule de SF_6 .

* Axe de rotation impropre S_n : Appelée aussi rotation-réflexion, consiste en une rotation propre de $2\pi/n$ et une réflexion dans un plan perpendiculaire à l'axe de rotation.

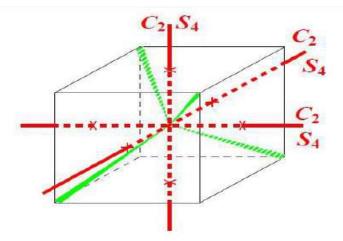


Figure (I-5): Rotation impropre S_4 .

I-3.le groupe O_h :

Il est le groupe de l'octaèdre régulier qui dérive du groupe O en lui ajoutant un centre d'inversion donc :

$$O + I \rightarrow O_h$$
.

Il contient tous les éléments de symétrie d'un octaèdre régulier: 8 axes d'ordre 3; 6 axes d'ordre 2; 6 axes d'ordre 4; 3 axes d'ordre 4 joignant les centres de deux faces opposées du cube ; un centre d'inversion i; 8 axes impropre d'ordre 6; 6 axes impropre d'ordre 4 ; 3 plans de symétrie σ_h ; 6 plans de symétrie σ_d .

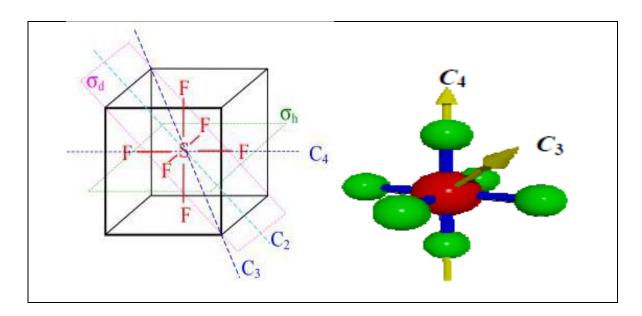


Figure (I-6): Géométrie d'une molécule octaédrique.

Chaque groupe ponctuel possède sa table de caractères (ou table caractéristique) que vous trouverez cidessous. [4]

O _h E	8 <i>C</i> ₃	6 <i>C</i> ₂	6C ₄	3C2"	i	6 S4	8 S ₆	3 σ _h	6σ _d
Alg 1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Atu 1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A_{2g} 1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
A2u 1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
E g 2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
E_u 2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
F_{1g} 3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
Fiu 3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
F_{2g} 3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
F_{2u} 3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1

Tableau (I-1) : Table de caractères du groupe O_h .

- A_{1g} , A_{1u} , A_{2g} , A_{2u} : Représentation irréductible à une dimension.
- E_a , E_u : Représentation irréductible à deux dimensions.
- F_{1q} , F_{1u} , F_{2q} , F_{2u} : Représentation irréductible à trois dimensions.

I-4.Les modes normaux de vibration des molécules octaédriques:

Un mode de vibration d'une molécule est un mouvement pour lequel tous les atomes de la molécule vibrent en phase, à la même fréquence mais dans des directions ou avec des amplitudes différentes.

Chaque atome d'une molécule a 3degrés de liberté ; il y a donc 3N degrés de liberté dans une molécule formée de N atomes, mais comme parmi ces 3N degrés il y en a 3 pour la translation globale de la molécule et3 Pour sa rotation, il n'en reste que 3N-6 pour les mouvements relatifs des atomes formant ce que l'on appelle les modes de vibration de la molécule. Il faut toutefois ajouter que pour une molécule linéaire, il n'y a que 3N-5 modes de vibration puisque il n'y a pas de degré de liberté associé à la rotation de la molécule autour de son axe principal.

En résumé: [1]

- ightharpoonup 3N-6 degrés de liberté pour une molécule non linéaire.
- > 3N 5 degrés de liberté pour une molécule linéaire.

I-4-1. Théorie des caractères :

 χ_i^{μ} : le caractère d'un élément appartenant à la classe K_i dans la représentation irréductible Γ_i .

Le caractère χ_i^{μ} des différentes représentations irréductibles satisfait les relations suivantes.

$$\sum_{i=1}^{k} g_{i}.\chi_{i}^{*(\mu)}.\chi_{i}^{*(\nu)} = g.\delta_{\mu\nu} \tag{I.1}$$

où:

- $\chi_i^{*(\mu)}$: Le complexe conjugué de $\chi_i^{u_i}$.
- **k**: Le nombre des représentations irréductibles (classes d'éléments).
- \triangleright g: Le nombre d'élément de symétrie de groupeG.
- \triangleright gi: Le nombre d'élément de symétrie de classe K_i .
- $\chi_i^{*(v)}$: Le caractère d'un élément de symétrie appartenant à la classe K_i dans la représentation Γ_v .
- \triangleright δ_{uv} : Le symbole de Kronecker.

I-4-2. Théorème:

L'énumération des représentations irréductibles. Contenant dans une représentation réductible Γ est :

$$a_{(\mu)} = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^{K} g_{i} \cdot \chi^{*(\mu)} \cdot \chi^{*(\Gamma)}$$
 (I.2)

- $a_{(\mu)}$: Le nombre de fois où Γ μ apparaît dans la représentation réductible Γ.
- **g**: Ordre du groupe.
- **gi** : nombre d'éléments (l'ordre) de la 2ième classe d'opérations.
- $\chi_i^{*(\Gamma)}$: Caractère de la matrice du ou des opérateur(s) de cette classe k dans la RR.

La méthode des opérateurs de projection nous permet de déterminer une base qui sert à décomposer une représentation réductible comme suit :

$$p^{(\mu)} \cdot f_{g}^{(\nu)} = \frac{g}{n_{u}} \cdot \delta_{\mu\nu} \cdot \delta_{ig} \cdot f_{i}^{(\mu)}$$
 (I.3)

Tel que:

$$p^{(\mu)} = \sum_{i=1}^{n} \chi^{*(\mu)}(g) \cdot g$$
 (I.4)

Avec:

- $p^{(\mu)}$: L'opérateur de projection dans la base de la représentation irréductible Γ_{μ} .
- $f_{\mathbf{g}}^{(\mathbf{v})}$: Vecteurs de base de la représentation irréductible $\Gamma_{\!_{\mathbf{v}}}$.
- $\chi^{*(\mu)}$: Le complexe conjugué de $\chi^{(\mu)}$.
- $\delta_{\mu v}$ et δ_{ig} : Symboles de Kronecker.
- $f_i^{(\mu)}$: Vecteurs de base de la représentation irréductible $\Gamma_{\!\mu}$.
- n_u : La dimension de la représentation irréductible Γ_u .

Multiplication des représentations dans le groupe Oh de la molécule XY_6 :

Tableau(I-2): Table de produit de caractères du groupe O_h .

$\mathbf{O}_{\mathbf{h}}$	E	8 <i>C</i> ₃	6 <i>C</i> ₂	6C4	3C2'	' i	6 <i>S</i> 4	8 <i>S</i> 6	3σ h	6 _{od}
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
A_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
$\boldsymbol{\mathit{E}}_{g}$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
$\boldsymbol{E_u}$	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
F_{1g}	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
F_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
F_{2g}	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
F_{2u}	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
$A_{1g} \otimes A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_{1g} \otimes A_{1u}$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
$A_{1g} \otimes A_{2g}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
$A_{1g} \otimes A_{2u}$	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
$A_{1g} \otimes E_g$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
$A_{1g} \otimes E_g$	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
$A_{1g} \otimes F_{1g}$	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
$A_{1g}\otimes F_{1u}$	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
$A_{1g} \otimes F_{2g}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
$A_{1g} \otimes F_{2u}$	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
$A_{1g} \otimes F_{2g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_{1g} \otimes F_{2g}$	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1

La suite est dans la page suivante.

	l 	0.0	60		u(I-2): (si		60	0.0		
Oh	E	8C 3	6 <i>C</i> ₂	6C ₄	3C2"	i	6 S4	8 <i>S</i> ₆	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
$A_{1g} \otimes F_{2g}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
$A_{1g} \otimes F_{2g}$	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
$A_{1g} \otimes F_{2g}$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
$A_{1g} \otimes F_{2g}$	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
$A_{1g} \otimes F_{2g}$	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
$A_{1g} \otimes F_{2g}$	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
$A_{1g}\otimes F_{2g}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
$A_{1u} \otimes A_{1u}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_{1u} \otimes A_{2g}$	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
$A_{1u} \otimes A_{2u}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
$A_{1u} \otimes E_u$	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
$A_{1u} \otimes E_g$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
$A_{1u} \otimes F_{1g}$	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
$A_{1u}\otimes F_{1u}$	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
$A_{1u} \otimes F_{2g}$	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
$A_{1u}\otimes F_{2u}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
$A_{2g} \otimes A_{2g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_{2g} \otimes A_{2u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
$A_{2g} \otimes E_g$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
$A_{2g}\otimes E_u$	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
$A_{2g}\otimes F_{1u}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
$A_{2g}\otimes F_{1g}$		0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
			La	suite est d	lans la pag	- suivar	nte			

La suite est dans la page suivante.

					u(I-2) : (s	uite).				
Oh	E	8 <i>C</i> ₃	6 <i>C</i> ₂	6C ₄	3C2"	i	6 S4	8 S ₆	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
$A_{2g}\otimes F_{2u}$	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
$A_{2g}\otimes F_{2g}$	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
$A_{2g}\otimes F_{1u}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_{2g} \otimes F_{1u}$	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
$A_{2g} \otimes F_{1u}$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
$A_{2g}\otimes F_{1u}$	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
$A_{2g}\otimes F_{1u}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
$A_{2g}\otimes F_{1u}$	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
$A_{2g} \otimes F_{1u}$	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
$A_{2u} \otimes A_{2u}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_{2u}\otimes E_g$	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
$A_{2u}\otimes E_u$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
$A_{2u}\otimes F_{1u}$	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1
$A_{2u} \otimes F_{1g}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
$A_{2u}\otimes F_{2u}$	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
$A_{2u} \otimes F_{2g}$	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
$E_g \otimes E_g$	4	1	0	0	4	4	0	1	4	0
$E_g \otimes E_u$	4	1	0	0	-4	4	0	-1	-4	0
$E_g \otimes F_{1g}$	6	0	0	0	-2	6	0	0	-2	0
$E_g \otimes F_{1u}$	6	0	0	0	-2	-6	0	0	2	0
$E_g \otimes F_{2g}$	6	0	0	0	-2	6	0	0	-2	0
$E_g \otimes F_{2u}$	6	0	0	0	-2	-6	0	0	2	0

La suite est dans la page suivante.

	Tableau(I-2): (suite).										
Oh	E	8 <i>C</i> ₃	6 <i>C</i> 2	6C ₄	3C2"		6S 4	8 <i>S</i> ₆	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$	
$E_u \otimes E_u$	4	1	0	0	4	4	0	1	4	0	
$E_u \otimes F_{1g}$	6	0	0	0	-2	-6	0	0	2	0	
$E_u \otimes F_{1u}$	6	0	0	0	-2	6	0	0	-2	0	
$E_u \otimes F_{2g}$	6	0	0	0	-2	-6	0	0	2	0	
$E_u \otimes F_{2u}$	6	0	0	0	-2	6	0	0	-2	0	
$F_{1g} \otimes F_{1g}$	9	0	1	1	1	9	1	0	1	1	
$F_{1g} \otimes F_{1u}$	9	0	1	1	1	-9	-1	0	-1	-1	
$F_{1g} \otimes F_{2g}$	9	0	-1	-1	1	9	-1	0	1	-1	
$F_{1g} \otimes F_{2u}$	9	0	-1	-1	1	-9	1	0	-1	1	
$F_{1u} \otimes F_{1u}$	9	0	1	1	1	9	1	0	1	1	
$F_{1u} \otimes F_{2g}$	9	0	-1	-1	1	-9	1	0	-1	1	
$F_{1u} \otimes F_{2u}$	9	0	-1	-1	1	9	-1	0	1	-1	
$F_{2u} \otimes F_{2g}$	9	0	1	1	1	9	1	0	1	1	
$F_{2g} \otimes F_{2u}$	9	0	1	1	1	-9	-1	0	-1	-1	
$F_{2u}\otimes F_{2u}$	9	0	1	1	1	9	1	0	1	1	

Fin du tableau.

Le tableau ci-dessous présente les caractères de quelques opérations de symétrie :

Tableau (I-3): Caractères des opérations de symétrie.

	sy:	métries propres	symétries impropres				
Symétrie (R)	E	C(a)	σ	S(a)	i		
Caractères χ_R	3	1+2 cos(a)	1	-1+2 cos(α)	-3		

Tel que:

- \bullet $E = C(2\pi)$
- $i = S(\pi)$

Les valeurs correspondantes de χ_R sont données par le tableau ci-dessous :

$R \equiv C_n^k$	χ_R	$\mathbf{R} \equiv \mathbf{S}_{\mathrm{n}}^{\mathrm{k}}$	χ_R
E	3	$\sigma_h \equiv S_1$	1
C 3	0	$\sigma_d \equiv S_1$	1
C_2	-1	$i \equiv S_2$	-3
<i>C</i> 4	1	$S_4 \equiv S_4^3$	-1
C ".	-1	$S_6 \equiv S_6^5$	0

Tableau (I-4): Valeurs des caractères des opérations de symétrie des molécules XY₆.

• Les coordonnées normales de vibrations et leur type de symétrie de la molécule octaédrique. Le caractère d'une symétrie *R* vérifie :

$$\chi_0(R) = n_R \cdot \chi_R \tag{I-5}$$

Où:

 \triangleright n_R : Le nombre des noyaux que R laisse dans leurs positions initiales.

le caractère χ_{vib} de la représentation Γ_{vib} à partir de la formule :

$$\chi_{vib} = (n_R - 2) \cdot \chi_R$$
 pour les rotations propres. (I.6)

$$\chi_{vib} = n_R \cdot \chi_R$$
 pour les rotations impropres (I.7)

Tableau(I-5): Caractères vibrationels des opérations de symétrie des molécules XY₆.

		syméti	ries pro	opres	symétries impropres					
symétrie <i>R</i>	E	8 <i>C</i> 3	6C2	6C4	3C2"	i	6S4	8 <i>S</i> 6	3 _o h	6 o d
n_R	7	1	1	3	3	1	1	1	5	3
χ_R	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
χ_{vib}	15	0	1	1	-1	-3	-1	0	5	3

• On utilise la table de caractères du groupe $oldsymbol{O}_h$ et les valeurs obtenues de $oldsymbol{\chi_{vib}}$:

	sy	métrie	es prop	res		sy	symétries impropres					
symétrie R	E	8 <i>C</i> ₃	6 <i>C</i> ₂	6C ₄	3C2"	i	6 <i>S</i> ₄	8 <i>S</i> ₆	3 σh	6 o d		
A_{Ig}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
A1u	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
A_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1		
A_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1		
E_g	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0		
E_u	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0		
F_{lg}	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1		
F_{1u}	3	0	-1	1	- 1	-3	-1	0	1	1		
F_{2g}	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1		
F_{2u}	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1		
χ_{vib}	15	0	1	1	-1	-3	-1	0	5	3		

Tableau(I-6): Table de caractères et valeurs de caractères vibrationels des molécules XY_6 .

et on obtient, ainsi:

- $a(A_{1g}) = \frac{1}{48} [1 \times 1 \times 15 + 1 \times 8 \times 0 + 1 \times 6 \times 1 + 1 \times 6 \times 1 + 1 \times 3 \times (-1) + 1 \times 1 \times (-3) + 1 \times 6 \times (-1) + 1 \times 8 \times 0 + 1 \times 3 \times 5 + 1 \times 6 \times 3] = 1.$
- $a(A_{1u}) = \frac{1}{48} [1 \times 1 \times 15 + 1 \times 8 \times 0 + 1 \times 6 \times 1 + 1 \times 6 \times 1 + 1 \times 3 \times (-1) + (-1) \times 1 \times (-3) + (-1) \times 6 \times (-1) + (-1) \times 8 \times 0 + (-1) \times 3 \times 5 + (-1) \times 6 \times 3] = 0.$
- $a(A_{2g}) = \frac{1}{48} [1 \times 1 \times 15 + 1 \times 8 \times 0 + (-1) \times 6 \times 1 + (-1) \times 6 \times 1 + 1 \times 3 \times (-1) + 1 \times 1 \times (-3) + (-1) \times 6 \times (-1) + 1 \times 8 \times 0 + 1 \times 3 \times 5 + (-1) \times 6 \times 3] = 0.$
- $a(A_{2u}) = \frac{1}{48} [1 \times 1 \times 15 + (-1) \times 8 \times 0 + (-1) \times 6 \times 1 + (-1) \times 6 \times 1 + 1 \times 3 \times (-1) + (-1) \times 1 \times (-3) + 1 \times 6 \times (-1) + (-1) \times 8 \times 0 + (-1) \times 3 \times 5 + 1 \times 6 \times 3] = 0.$

- $a(E_g) = \frac{1}{48} [2 \times 1 \times 15 + (-1) \times 8 \times 0 + 0 \times 6 \times 1 + 0 \times 6 \times 1 + 2 \times 3 \times (-1) + 2 \times 1 \times (-3) + 0 \times 6 \times (-1) + (-1) \times 8 \times 0 + 2 \times 3 \times 5 + 0 \times 6 \times 3] = 1.$
- $a(E_u) = \frac{1}{48} [2 \times 1 \times 15 + (-1) \times 8 \times 0 + 0 \times 6 \times 1 + 0 \times 6 \times 1 + 2 \times 3 \times (-1) + (-2) \times 1 \times (-3) + 0 \times 6 \times (-1) \times + 1 \times 8 \times 0 + (-2) \times 3 \times 5 + 0 \times 6 \times 3] = 0.$
- $a(F_{1g}) = \frac{1}{48} [3 \times 1 \times 15 + 0 \times 8 \times 0 + (-1) \times 6 \times 1 + 1 \times 6 \times 1 + (-1) \times 3 \times (-1) + 3 \times 1 \times (-3) + 1 \times 6 \times (-1) + 0 \times 8 \times 0 + (-1) \times 3 \times 5 + (-1) \times 6 \times 3] = 0.$
- $a(F_{1u}) = \frac{1}{48} [3 \times 1 \times 15 + 0 \times 8 \times 0 + (-1) \times 6 \times 1 + 1 \times 6 \times 1 + (-1) \times 3 \times (-1) + (-3) \times 1 \times (-3) + (-1) \times 6 \times (-1) + 0 \times 8 \times 0 + 1 \times 3 \times 5 + 1 \times 6 \times 3] = 2.$
- $a(F_{2g}) = \frac{1}{48} [3 \times 1 \times 15 + 0 \times 8 \times 0 + 1 \times 6 \times 1 + (-1) \times 6 \times 1 + (-1) \times 3 \times (-1) + 3 \times 1 \times (-3) + (-1) \times 6 \times (-1) + 0 \times 8 \times 0 + (-1) \times 3 \times 5 + 1 \times 6 \times 3] = 1.$
- $a(F_{2u}) = \frac{1}{48} [3 \times 1 \times 15 + 0 \times 8 \times 0 + 1 \times 6 \times 1 + (-1) \times 6 \times 1 + (-1) \times 3 \times (-1) + (-3) \times 1 \times (-3) + 1 \times 6 \times (-1) + 0 \times 8 \times 0 + 1 \times 3 \times 5 + (-1) \times 6 \times 3] = 1.$

Donc:

$$\Gamma_{vib} = A_{1a} \oplus E_a \oplus 2 F_{1u} \oplus F_{2a} \oplus F_{2u} \tag{I-8}$$

On peut conclure que, les molécules octaédriques possèdent six modes fondamentaux de

vibration:

Tableau (I-7): Symétries des modes de vibrations des molécules octaédriques.

v_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6
A_{1g}	E_g	F_{1u}	F_{1u}	F_{2g}	F_{2u}

Les quinze coordonnés de vibrations correspondent à six fréquences fondamentales différentes : [5]

- v_1 : une fréquence non dégénéré de type A_{1g} , et dont la coordonnée normale est Q_{11} .
- v_2 : une fréquence doublement dégénérée de type E_g , et dont les coordonnées normales sont Q_{21} et Q_{22} .
- v_3 : une fréquence Triplement dégénérée de symétrie F_{1u} , etdont les coordonnées normales sont Q_{31} , Q_{32} et Q_{33} .
- v_4 : une fréquence Triplement dégénérée de symétrie F_{1u} , et dont les coordonnées normales sont Q_{41} , Q_{42} et Q_{43} .
- v_5 : une fréquence Triplement dégénérée de symétrie F_{2g} , et dont les coordonnées normales sont Q_{51} , Q_{52} et Q_{53} .
- v_6 : une fréquence Triplement dégénérée de symétrie F_{2u} , et dont les coordonnées normales sont Q_{61} , Q_{62} et Q_{63} .

Tableau (I-8): Caractéristiques des bandes d'absorption des molécules octaédriques.

ν_1	ν_2	ν_3	ν_4	ν_5	ν_6
A_{1g}	$\boldsymbol{E}_{\mathbf{g}}$	F_{1u}	F_{1u}	F_{2g}	F _{2g}
Raman	Raman	IR	IR	Raman	inactif
Elongation			Pliage		

Références Bibliographiques

Références bibliographiques:

- [1] D. S. Scholland, «La symétrie moléculaire » ; collection "Enseignement de chimie" GOULLIER VILARS
- [2] Symétrie moléculaire, théorie des groupes Applications aux petites molécules, Hubert Klein, 2008. https://cdn-cms.f-static.com/uploads/181234/normal_584b85aa3b85e.pdf
- [3] Peter F. Bernath. Spectra of atoms and molecules. Oxford university press, 1995. http://www.chemistry.uoc.gr/lapkin/Bernath Spectra%20of%20Atoms%20and%20Molecules.pdf
- [4] M. Meskine, Mémoire de MAGISTER, Université e SAIDA, Avril (2006).
- [5] M. Meskine, Thèse de DOCTORAT, Université de SAIDA, Janvier (2015). http://rdoc.univ-sba.dz/handle/123456789/1547



II-1. Introduction:

La résolution de l'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien moléculaire fournit les valeurs possibles de l'énergie de la molécule. Cependant la complexité du problème, même avec l'approximation de Born-Oppenheimer [1,2], nécessite l'utilisation d'autres méthodes simplificatrices, qui permettent de se ramener à des problèmes plus faciles à résoudre.

Dans ce chapitre, nous présentons une méthode tensorielle, valable pour tous les modes de vibration, et des méthodes d'extrapolation vibrationnelles développées à Dijon. Cette méthode est utilisée pour écrire l'opérateur Hamiltonien, et moment de transition (moment dipolaire et polarisabilité), des molécules toupie sphériques.

Nous présentons, brièvement, la notion de transformations de contact, et nous donnons l'expression de l'opérateur Hamiltonien, et de moment de transition (moment dipolaire et polarisabilité) sous une forme tensorielle, avec leurs éléments matriciels.

Les résultats de la théorie des groupes qu'on a présentés au premier chapitre, montre que les transitions rovibrationnelles entre les niveaux d'énergie, ne sont pas toutes permises. Alors, nous donnons, à la fin de ce chapitre, les règles de sélection rovibrationnelles des molécules octaédriques XY_6 .

II-2. Transformations de contact :

Pour simplifier le calcul de l'énergie de vibration-rotation ou les intensités des transitions rovibrationnelles, la méthode la plus utilisée est la méthode de la transformation de contact (Van Velck) [3,4].

Ces transformations de contact sont appliquées à l' Hamiltonien pour le rend diagonal complètement ou partiellement par rapport au nombre quantique vibrationnel ϑ_s .

Si A représente soit l'Hamiltonien (H), le moment dipolaire (μ) ou la polarisabilité (α) , l'opérateur transformé \tilde{A} est donné par : [5].

$$\widetilde{A} = TAT^{-1} \tag{II.1}$$

T est pris sous la forme :

$$T = e^{i\lambda s}$$
 (II.2)

Telle que:

- ➤ S : est hermétique (appelé générateur de transformations de contact).
- ➤ 1 est un paramètre égale à l'unité indiquant simplement l'ordre de grandeur de chaque terme de développement.

On peut encore écrire:

$$T = 1 + i\lambda s - \frac{1}{2} \lambda^2 s^2 + \dots$$
 (II.3)

II-3. Expression de l'Hamiltonien :

La procédure habituelle utilisée pour transformer l'Hamiltonien de vibration-rotation est : [6]

L'Hamiltonien initial est développé sous la forme :

$$H = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \dots$$
 (II.4)

• On applique une première transformation de contact :

$$T_1 = e^{i\lambda s_1}$$
 (II.5)

❖ L'Hamiltonien transformé ⁽¹⁾H s'écrit :

⁽¹⁾
$$H = T_1 H \ T_1^{-1} = {}^{(1)}H_0 + \lambda {}^{(1)}H_1 + \lambda^2 {}^{(1)}H_2 + \dots$$
 (II.6)

Avec:

$$\begin{cases} {}^{(1)}H_0 = H_0 \\ {}^{(1)}H_1 = H_1 + i [S_1, H_0] \\ {}^{(1)}H_2 = H_2 + i [S_1, H_1] - \frac{1}{2} [S_1, [S_1, H_0]] \end{cases}$$
(II.7)

- \gt 1: est choisi de manière à ce que $^{(1)}H_1$ soit complètement diagonale dans le cas d'une étude d'une bande vibrationnelle isolée ou de manière de conserver que les termes non diagonaux internes à la polyandre dans le cas de l'étude simultanée de bandes vibrationnelles en interaction.
- L'Hamiltonien deux fois transformé s'écrit :

$$^{(2)}H = T_2^{(1)} H T_2^{-1} = {}^{2}H_0 + \lambda {}^{(2)}H_1 + \lambda^2 {}^{(2)}H_2 + \dots$$
 (II.8)

Avec:

$$\begin{cases} ^{(2)}H_0 = H_0 \\ ^{(2)}H_1 = ^{(1)}H_1 \\ ^{(2)}H_2 = ^{(1)}H_1 + i [S_2, H_0] \end{cases}$$
 (II.9)

- L'Hamiltonien possède les mêmes propriétés que l'Hamiltonien initial, il est :
 - ✓ Hermétique.
 - ✓ Invariant par les opérations du groupe de symétrie de la molécule.
 - ✓ invariant dans un renversement du temps.

Les fonctions propres $\widetilde{\Psi}_i$ de e H se déduisent des fonctions propres Ψ_i de H par :

$$\widetilde{\Psi}_{:} = H \ \Psi_{:} \tag{II.10}$$

L'expression de l'Hamiltonien, développé en utilisant le formalisme tensoriel dans le groupe O_h , est très proche à celle utilisée dans le groupe T_d . Le groupe O_h possède un indice supplémentaire pour caractériser ses représentations irréductibles, la parité (g) ou (u).

L'Hamiltonien est écrit comme une combinaison linéaire des opérateurs rovibrationnelles $T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega}(K_g,n\Gamma_g)$ $\alpha_1\Gamma_{1\chi}\alpha_2\Gamma_{2\chi}$.

$$H = \sum_{\text{tous les indices}} t_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\mathfrak{a}(K_g, n\Gamma_g)} \alpha_1 \Gamma_{1\chi} \alpha_2 \Gamma_{2\chi} \otimes T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\mathfrak{a}(K_g, n\Gamma_g)} \alpha_1 \Gamma_{1\chi} \alpha_2 \Gamma_{2\chi}$$
(II. 11)

Où:

Les opérateurs rovibrationnelles sont obtenus par couplage des deux opérateurs rotationnel $\mathbf{R}^{\Omega\,(\,K_g,\,n\Gamma_g)}$ (de degré Ω) et l'opérateur vibrationnel $V^{\Omega\,(\,K_g,\,n\Gamma_g)\,\alpha_1\Gamma_{1\chi}\alpha_2\Gamma_{2\chi}}_{\{n_s\}\{m_s\}}$ (de degré $\Sigma_s(\,\mathbf{n}_s+\mathbf{m}_s)$). [7]

$$T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g)\alpha_1\Gamma_{1\chi}\alpha_2\Gamma_{2\chi}} = \beta \left(R^{\Omega(K_g, n\Gamma_g)} \otimes^{(\epsilon)} V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g)\alpha_1\Gamma_{1\chi}\alpha_2\Gamma_{2\chi}}\right)$$
(II.12)

Où:

 \triangleright β : est un facteur numérique qui vaut :

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{cases} \sqrt{\left[\Gamma_{v}\right]\left(\frac{-\sqrt{3}}{4}\right)\Omega \setminus 2} & \text{Si} \quad (K, n\Gamma) = (0, 0A_{1g}) \\ \mathbf{1} & \text{si non} \end{cases}$$
(II.13)

La parité de ces opérateurs est **g**.

$$\varepsilon = (-1) \tag{II.14}$$

- **E:** est la symétrie par renversement de temps et est liée au degré de l'opérateur rotationnel.
- L'opérateur rotationnel est construit en utilisant une méthode introduite par **MoretBailly [8]** et l'expression récursive de **Zhinlinski [9]**:

$$\begin{cases} R^{1(1)} = 2J^{(1)} \\ R^{\Omega(K)} = R^{\Omega - K(0)} . R^{K(K)} \\ R^{\Omega - K(0)} = \left(\left(R^{1(1)} \otimes R^{1(1)} \right)^{(0)} \right)^{\left(\frac{\Omega - K}{2} \right)} \\ R^{K(K)} = \left(R^{(K-1)(K-1)} \otimes R^{1(1)} \right)^{(K)} \end{cases}$$
(II. 15)

Ces opérateurs sont symétriques dans le groupe O_h , grâce à la matrice d'orientation G: [10]

$$R_{\vartheta\gamma}^{\Omega(K,n\Gamma)} = \sum_{m} {}^{(K)}G_{n\Gamma\gamma}R_{m}^{\Omega(K)}$$
 (II.16)

L'opérateur vibrationnel ${}^{\varepsilon}V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g,n\Gamma_g)} \alpha_1\Gamma_{1\chi}\alpha_2\Gamma_{2\chi}$ est obtenu par couplage des opérateurs de création $(a_{s\sigma}^+)$ et d'annihilation $(a_{s\sigma}^-)$, pour obtenir des tenseurs de symétrie: [11].

$$a_{s\sigma}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q_{s\sigma} - i p_{s\sigma} \right) \tag{II.17}$$

$$a_{s\,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} (q_{s\,\sigma} + i p_{s\,\sigma})$$
 (II.18)

On considère que les niveaux d'énergie sont regroupés dans des séries de polyades $\{P_K\}$ $(k = 0, \ldots, n, \ldots)$, avec $\{P_0\}$ est le niveau de base GS.

$$H = H_{\{P_0 = GS\}} + H_{\{P_1\}} + \dots + H_{\{p_n\}} + \dots$$
 (II.19)

 \diamond L'Hamiltonien effectif d'une polyade $\{P_n\}$ est obtenu par projection dans le sous espace correspondant;

$$H^{\langle P_n \rangle} = P^{\langle P_n \rangle} H P^{\langle P_n \rangle} \tag{II.20}$$

$$H^{\langle P_n \rangle} = H_{\{GS\}}^{\langle P_n \rangle} + \ldots + H_{\{P_n\}}^{\langle P_n \rangle} + \ldots$$
 (II.21)

L'Hamiltonien effectif de niveau de base vaut :

$$H^{\langle GS \rangle} = H_{\langle GS \rangle}^{\langle GS \rangle} \tag{II.22}$$

ightharpoonup L'Hamiltonien effectif de la bande v_4 vaut :

$$H^{\langle \nu_4 \rangle} = H^{\langle \nu_4 \rangle}_{\{GS\}} + H^{\langle \nu_4 \rangle}_{\{\nu_4\}} \tag{II.23}$$

 \bullet L'Hamiltonien transformé \widetilde{H} a la même forme que l'Hamiltonien initial :

$$\widetilde{H} = \sum_{\text{tous les indices}} \widetilde{t}_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g) \alpha_1 \Gamma_{1\chi} \alpha_2 \Gamma_{2\chi}} \otimes T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(K_g, n\Gamma_g) \alpha_1 \Gamma_{1\chi} \alpha_2 \Gamma_{2\chi}}$$
(II.24)

Les éléments matriciels de l'Hamiltonien des molécules octaédriques sont donnés par l'expression : [5]

$$\langle \left[\Psi^{(f_{g}, n'C'_{rg})} \otimes \Psi^{(C'_{v\tau})}_{v'} \right] \sigma^{(C_{\tau})} | \left[R^{\Omega(K_{g}, n\Gamma_{g})} \otimes {}^{\varepsilon}V^{\Omega(K_{g}, n\Gamma_{g})}_{\{n_{s}\}\{m_{s}\}} \alpha_{1}\Gamma_{1\chi}\alpha_{2}\Gamma_{2\chi} \right]^{(A_{1u})} | \left[\Psi^{(J_{g}, nC_{g})} \otimes \Psi^{(C_{v\tau})}_{v'} \right] \sigma^{(C_{\tau})} \delta_{Jf} \rangle = (-1)^{\Gamma + C + C_{r} + C'_{v}} \frac{(-1)^{J}}{\sqrt{|\Gamma|}} K^{(J_{g}, K_{g}, J_{g})}_{(n'C'_{rg}, n_{r}\Gamma_{g}, n_{r}C_{rg})}$$

$$\begin{cases} C'_{rg} C'_{v\tau} C_{\tau} \\ C_{v\tau} C_{rg} \Gamma_{g} \end{cases} \langle J_{g} | | R^{\Omega(K_{g})} | | J_{g} \rangle \langle \Psi^{(C'_{v\tau})}_{v'} | | {}^{\varepsilon}V^{\Omega(K_{g}, n_{g})}_{\{n_{s}\}\{m_{s}\}} \alpha_{1}\Gamma_{1\chi}\alpha_{2}\Gamma_{2\chi} | | \Psi^{(C_{v\tau})}_{v} \rangle$$
(II.25)

- Les K sont les facteurs iso scalaires de la chaîne $O(3) \supset O_h$.
- Les termes entre accolades sont les coefficients **6C** du groupe $\mathbf{0}_{h}$. (J = 2j+1).
- C: est la dimension de la représentation irréductible C.

Ces éléments matriciels sont calculés dans la base couplée :

$$\mid \Psi_{M\,\sigma}^{(\,C_{\sigma})} \, \rangle = \mid \, [\, \Psi_{M}^{(\,J_{g},\,nC_{rg})} \, \otimes \, \Psi_{\sigma}^{(\,C_{\sigma\tau})} \,] \, \sigma^{(\,C_{\tau})} \, \rangle \tag{II.26}$$

Avec:

- $\checkmark \quad \Psi_{M}^{(J_g, nC_{rg})}$: est la fonction rotationnelle de symétrie C_{rg} .
- ✓ **n**: indice de multiplication.

- $\checkmark \Psi_{\sigma}^{(C_{\sigma\tau})}$: est la fonction d'onde vibrationnelle de symétrie $C_{\sigma\tau}$.
- ✓ **J**: Nombre quantique rotationnel.
- ✓ M : La composante sphérique dans le repère (LFF).
- \checkmark C_T: La symétrie rovibrationnelles de composante σ .
- \checkmark $\tau = g \text{ ou } u : \text{La parit\'e}.$

Les fonctions propres de l'Hamiltonien sont notées $|\Psi_{M\alpha}^{(J,C_{\tau\alpha})}\rangle$; α numérote les niveaux d'énergie dans l'ordre croissant dans le bloc (J,C_{τ}) .

II-4. Expression de moment dipolaire :

Le moment dipolaire transformé est donné par : [12]

$$\widetilde{\mu} = T \,\mu \, T^{-1} \tag{II.27}$$

De même façon que celle suivie dans la construction de l'Hamiltonien transformé, l'expression de moment dipolaire transformé est :

$$^{(2)}\mu_{\alpha} = ^{(2)}\mu_{0\alpha} + \lambda^{2(2)}\mu_{1\alpha} + \lambda^{2(2)}\mu_{2\alpha}$$
 (II.28)

Avec:

$$^{(2)}\mu_{0\alpha} = \mu_{0\alpha} \tag{II.29}$$

(130)
$$\mu_{1\alpha} = \mu_{1\alpha} + i [S_1, \mu_{0\alpha}]$$

$${}^{(2)}\mu_{2} = \mu_{2\alpha} + i \left[S_{1}, \mu_{1\alpha} \right] + \frac{i^{2}}{2} \left[S_{1}, \left[S_{1}, \mu_{0\alpha} \right] \right] + i \left[S_{2}, \mu_{0\alpha} \right]$$
 (II.31)

La probabilité de transition entre l'état initial Ψ_i et l'état final Ψ_f est proportionnelle à $|\langle \Psi_i/\mu_z/\Psi_f \rangle|^2$, μ_z est la composante du moment dipolaire suivant l'axe des Z dans le repère lié au laboratoire.

Après une série de transformations de contact, le moment dipolaire transformé $\widetilde{\mu}_z$ s'exprime (en première approximation) en fonction de composante $\widetilde{\mu}_\alpha$ par :

$$\widetilde{\mu}_{z} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (\lambda_{z\alpha} \widetilde{\mu}_{\alpha} + \widetilde{\mu}_{\alpha} \lambda_{z\alpha})$$
 (II. 32)

Où:

 $\lambda_{z\alpha}$: sont les cosinus directeurs de l'axe fixe (OZ).

Chaque composante de moment dipolaire initiale (non transformé) dans le repère (MFF) est développée en série d'opérateurs vibrationnels :

$$\mu_{\theta}^{(F_{1u})} = \sum_{\text{tous les indices}} \mu^{\alpha_1 \Gamma_1 \tilde{\chi}^{\alpha_2 \Gamma_2 \tilde{\chi}^{(F_{1u})}}} \otimes {}^{\varepsilon}V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1 \Gamma_1 \tilde{\chi}^{\alpha_2 \Gamma_2 \tilde{\chi}}} \theta^{(F_{1u})}$$
(II. 33)

Où:

- $\geq \chi = g \text{ ou } u.$
- $\widetilde{\chi} = \chi \otimes$, ici, la parité, généralement, est u et $\varepsilon = +1 \mu^{\alpha_1 \Gamma_1 \tilde{\chi} \alpha_2 \Gamma_2 \tilde{\chi}^{(F_{1u})}}$ sont les paramètres du moment dipolaire.

L'opérateur transformé de moment dipolaire vaut : [10]

$$\widetilde{\mu}_{\theta}^{(F_{1u})} = \sum_{i} \widetilde{\mu}^{\{i\}} \otimes M_{\theta}^{(\{i\}, F_{1u})}$$
 (II. 34)

Les $\widetilde{\mu}^{\{i\}}$ sont les paramètres de moment dipolaire transformé.

$$M_{\theta}^{(\{i\}, F_{1u})} = (R^{\Omega(K_g, n_r \Gamma_{rg})} \otimes {}^{\varepsilon}V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1 \Gamma_1 \check{\chi} \alpha_2 \Gamma_2 \check{\chi}(F_{1u})}) \theta^{(F_{1u})}$$
 (II.35)

Le symbole $\{i\}$ remplace tous les indices de l'équation (II-33) pour simplifier cette équation.

Les composantes de moment dipolaire transformé peuvent être exprimées par l'équation :

$$\mu_{(\Theta)}^{(A_{1u})} = \sqrt{3} \sum_{m} \langle 1 \; ; \; m \setminus \Theta \rangle \sum_{\{i\}} [\; C^{(\; 1_{g'} \, F_{1u})} \; \otimes M^{(\; \{i\}, \, F_{1u})} \;]^{(\; A_{1g})} \eqno(II.\,36)$$

Les termes entre crochets représentent le produit des tenseurs de symétrie définie par :

$$[A^{(\Gamma_1)} \otimes B^{(\Gamma_2)}] = \frac{1}{2} [(A^{(\Gamma_1)} \otimes B^{(\Gamma_2)})^{(\Gamma)} + (-1)^{\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3} (B^{(\Gamma_2)} \otimes A^{(\Gamma_1)})] \quad \text{(II.37)}$$

Finalement, nous rappelons l'intensité d'une transition entre l'état rovibrationnel ϕ_i (d'énergie E_i) et l'état ϕ_f (d'énergie E_f):

$$S_{if} = K_{if} g_i \, e^{-(\frac{hCE_i}{KT})} \, \sum_{M_i,\,M_f} \langle \widetilde{\varphi}_i | \, \widetilde{\mu}_z | \, \widetilde{\varphi}_f \rangle \eqno(II.38)$$

Où:

- \checkmark K_{if} : Coefficient numérique, qui dépend des fréquences des transitions et de la température.
- \checkmark $\mathbf{g_i}$: Le poids statistique du spin de l'état $\widetilde{\boldsymbol{\phi}_i}$.
- ✓ La somme et réalisée sur M_i et M_f des deux états dans le repère (LFF).

Les composantes de moment dipolaire dans le repère lié au laboratoire (LFF : Laboratory fixed frame) μ_{θ} (avec : $\theta = X$, Y ou Z) peuvent liées aux composant μ_{θ} (avec $\theta = x$, y ou z) du repère lié à la molécule (MFF : molécule fixed frame), à partir de l'expression :

$$\mu_{\theta} = \sum_{\theta} \lambda_{\theta,\,\theta} \,.\,\, \mu_{\theta} \tag{II.39}$$

Où λ_{Θ} , sont les cosinus directeurs.

Dans l'approximation de mouvement de faibles amplitudes, on peut développer chaque composant μ_{θ} en série des coordonnées normales sans dimensions $q_{s\sigma}$, (s présente l'indice de l'oscillateur et σ sa composante):

$$\mu_{\theta} = \sum_{s,\sigma} \left(\frac{\partial \mu_{\theta}}{\partial q_{s,\sigma}} \right) q_{s,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{s,\sigma,\dot{s},\dot{\sigma}} \left(\frac{\partial^{2} \mu_{\theta}}{\partial q_{s,\sigma} \partial q_{\dot{s},\dot{\sigma}}} \right) q_{s,\sigma} q_{\dot{s},\dot{\sigma}} + \cdots$$
 (II.40)

Où:

 $\succ \mu_{\theta}^{e}$: est le moment dipolaire permanent de la molécule, les autres termes sont introduits par les interactions moléculaire.

Après certaines transformations de contact, le moment dipolaire transformé s'écrit sous la forme :

$$\widetilde{\mu}_{\Theta} = \frac{1}{2} \sum_{\theta} (\lambda_{\Theta,\theta} \cdot \widetilde{\mu}_{\theta} + \widetilde{\mu}_{\theta} \cdot \lambda_{\Theta,\theta})$$
 (II.41)

Pour établir l'expression de $\tilde{\mu}_{\theta}$ et $\tilde{\mu}_{\theta}$, il est nécessaire d'introduire les coordonnées sphériques des opérateurs de moment dipolaire.

Les coordonnées sphériques dans le repère (LFF) du moment dipolaire noté $\mu_m^{(1)}$ sont liées aux ceux dans le repère (MFF) du moment dipolaire noté $\mu_k^{(1)}$ par la relation : [13]

$$\mu_m^{(1)} = \sum_K D_{Km}^{(1)} \mu_K^{(1)} \tag{II.42}$$

Où:

 \triangleright $D_{km}^{(1)}$: sont les fonctions harmoniques de Wigner, et \mathbf{k} , $\mathbf{m} = -1$, $\mathbf{0}$, ou $\mathbf{1}$.

Les coordonnées cartésiennes et sphériques dans les deux repères sont liées par :

$$\mu_{\Theta} = \sum_{m} (\text{ 1, } m \setminus \Theta \text{). } \mu_{m}^{(\text{1})} \tag{II.43}$$

$$\mu_{\theta} = \sum_{K} (1, K \setminus \theta) \cdot \mu_{K}^{(1)}$$
 (II.44)

Où < 1 , $m \setminus 0$ > et < 1 , $k \setminus \theta$ > sont les coefficients de Stone. [14]

L'expression générale des éléments matriciels est donnée par :

$$\langle [\Psi^{(J_{g'}, \mathbf{n}'C_{rg}')} \otimes \Psi_{\mathbf{v}}^{(C_{v\tau}')}] \sigma^{(C_{\tau})} | [C^{(1_{g'}, F_{1g})} \otimes M^{(\{i\}, F_{1u})}]^{(A_{1u})} | [\Psi^{(J_{g'}, \mathbf{n}C_{rg})} \otimes \Psi_{\mathbf{v}}^{(C_{v\tau})}] \sigma^{(C_{\tau})} \rangle$$

$$= -\frac{C_{\mathbf{v}}' + C_{\mathbf{\tau}}'}{2} (-1)^{C_{\mathbf{v}}' + C_{\mathbf{\tau}}' + C} \langle J_{g}' | | C^{(1_{g})} | | J_{g} \rangle \langle \Psi_{\mathbf{v}'}^{(C_{v\tau})} | |^{\mathcal{E}} V^{\alpha_{1}\Gamma_{1\chi}\alpha_{2}\Gamma_{2\chi}(F_{\sigma g})} | | \Psi_{\mathbf{v}}^{(C_{v\tau})} \rangle$$

$$\{ (-1)^{C + \Gamma_{\mathbf{v}} + \Gamma_{\mathbf{r}}} \langle J_{g}' | R^{\Omega(K_{g})} | J_{g}' \rangle \sum_{\tilde{C}_{\mathbf{r}}} \begin{cases} \Gamma_{vu} C_{rg} C_{rg}' \\ C_{\tau'} C_{v\tau'}' C_{v\tau} \end{cases} \times \begin{cases} \Gamma_{vu} C_{rg} C_{rg}' \\ C_{rg} \Gamma_{rg} F_{1u} \end{cases}$$

$$\sum_{\tilde{h}} K^{(1_{g}, J_{g}, f_{g})}_{(0F_{1g}, nC_{rg}, \tilde{h}, C_{rg}')} K^{(K_{g}, f_{g}, f_{g})}_{(n_{r}\Gamma_{rg}, \tilde{h}, C_{rg}')} + (-1)^{J + J'} (-1)^{C'} \langle J_{g} | R^{\Omega(K_{g})} | J_{g} \rangle$$

$$\sum_{\tilde{h}} [C_{\tau} C_{v\tau} C_{rg} C_{rg} \\ C_{\tau} C_{v\tau} C_{v\tau} C_{v\tau} \end{cases} \times \begin{cases} \Gamma_{vu} C_{rg} C_{rg} C_{rg} \\ C_{rg} \Gamma_{rg} F_{1u} \end{cases}$$

$$\sum_{\tilde{h}} K^{(1_{g}, J_{g}, J_{g}')}_{(0F_{1g}, \tilde{h}, C_{rg}')} K^{(K_{g}, J_{g}, J_{g})}_{(n_{r}\Gamma_{rg}, \tilde{h}, C_{rg}')} \} \times \begin{cases} \Gamma_{vu} C_{rg} C_{rg} C_{rg} \\ C_{rg} \Gamma_{rg} F_{1u} \end{cases}$$

II-5. Expression de la polarisabilité :

Malgré que notre travail n'est pas consacré aux spectres Raman, où l'opérateur polarisabilité intervient dans l'écriture de l'intensité, nous avons préféré de donner toutes les formules utiles pour cet opérateur, et ceci en prévisions d'éventuelles études sur les spectres Raman.

L'application d'un champ électrique \vec{E} à la molécule induit un moment dipolaire définit par :

$$\mu_{\theta_1} = \sum_{\theta_2} \alpha_{\theta_1 \theta_2}. E_{\theta_2}$$
 (II.46)

Où:

 \checkmark $\alpha_{\theta_1\theta_2}$: sont les composantes du tenseur de la polarisabilité dans le repère lié au laboratoire (LFF), qui sont reliées aux composantes du repère lié à la molécule (MFF) par :

$$\alpha_{\Theta_1\Theta_2} = \sum_{\theta_1,\,\theta_2} \lambda_{\Theta_1,\,\theta_1}.\,\,\lambda_{\Theta_2,\,\theta_2}.\,\,\alpha_{\theta_1,\,\theta_2} \tag{II.47}$$

L'approximation de faibles amplitudes permet de développer les composantes $\pmb{\alpha}_{\theta_1,\,\theta_2}$ en série de coordonnées normales $\pmb{q}_{s,\sigma}$:

$$\alpha_{\theta_1,\,\theta_2} = \alpha_{\theta_1,\,\theta_2}^e + \sum_{s,\sigma} \left(\frac{\partial\,\alpha_{\theta_1,\,\theta_2}}{\partial\,q_{s,\sigma}} \right) q_{s,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{s,\sigma,\,\dot{s},\,\dot{\sigma}} \left(\frac{\partial^2\alpha_{\theta_1,\,\theta_2}}{\partial\,q_{s,\sigma}\partial\,q_{\dot{s},\,\dot{\sigma}}} \right) q_{s,\sigma} q_{\dot{s},\,\dot{\sigma}} + \cdots \tag{II.48} \label{eq:alpha_theta_1}$$

Telle que:

 $\alpha_{\theta_1,\theta_2}^e$: est la polarisabilité permanente, les autres termes sont introduits par les vibrations moléculaires.

La polarisabilité transformée dans repère (LFF) vaut :

$$\widetilde{\alpha}_{\Theta_1,\Theta_2} = \frac{1}{2} \sum_{\Theta} \left(\lambda_{\Theta_1,\theta_1} \lambda_{\Theta_2,\theta_2} \widetilde{\alpha}_{\theta_1,\theta_2} + \widetilde{\alpha}_{\theta_1,\theta_2} \lambda_{\Theta_1,\theta_1} \lambda_{\Theta_2,\theta_2} \right)$$
(II. 49)

Les coordonnées sphérique $\pmb{lpha}_m^{(L)}$ dans le repère (LFF) et ceux dans le repère (MFF) sont liées par :

$$\alpha_m^{(L)} = \sum_K D_{Km}^{(L)} \alpha_K^{(L)}$$
 (II. 50)

Telle que:

L: prend les valeurs 0 et 2.

Pour les Harmonique de Wigner [15], on a :

$$\begin{cases}
L = 0 \Rightarrow m, K = 0 \\
L = 2 \Rightarrow m, K = 0, \pm 1, \pm 2
\end{cases}$$
(II.51)

Finalement, on aura:

$$\alpha_{\Theta_1,\Theta_2} = \sum_{L,M} \langle L; M \setminus \Theta_1 \Theta_2 \rangle \alpha_m^{(L)}$$
 (II. 52)

$$\alpha_{\theta_1, \theta_2} = \sum_{LK} \langle L; K \setminus \theta_1 \theta_2 \rangle \alpha_K^{(L)}$$
 (II. 53)

Où:

 \triangleright $\langle L; M \setminus \Theta_1 \Theta_2 \rangle$ et $\langle L; K \setminus \Theta_1 \Theta_2 \rangle$ sont les coefficients de **Stone**.

L'opérateur de la polarisabilité est développé de la même méthode que l'Hamiltonien et le moment dipolaire. Pour les composantes dans le repère (MFF) de l'opérateur initial de la polarisabilité, nous obtenons :

$$\alpha_{\theta}^{(\,L_g,\,\Gamma_g)} = \sum_{\substack{\text{tous les indices}\\ }} \alpha_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1\Gamma_{1\chi}\alpha_2\Gamma_{2\chi}(\,\Gamma_g)} \, \otimes \, {}^{\epsilon}V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1\Gamma_{1\chi}\alpha_2\Gamma_{2\chi}} \, \theta^{(\,\Gamma_g)} \tag{II.\,54})$$

Où:

- \triangleright $\chi = g$ ou u.
- $m{ heta}$: est la composante de l'opérateur $m{lpha}_{m{ heta}}^{(\, \mathbf{L_g}, \, \mathbf{\Gamma_g})}$.
- La parité est généralement g et ε = 1.
- $\qquad \alpha_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1\Gamma_{1\chi}\alpha_2\Gamma_{2\chi}(\Gamma_g)} : \text{Sont les paramètres de la polarisabilit\'e}.$

Comme dans le cas de moment dipolaire, la polarisabilité transformée vaut :

$$\widetilde{\alpha}_{\theta}^{(L_g, \Gamma_g)} = \sum_{\{i\}} \widetilde{\alpha}^{(\{i\}, \Gamma_g)} \cdot P_{\theta}^{(\{i\}, \Gamma_g)}$$
 (II.55)

Où:

 \succ $\widetilde{\alpha}^{(\{i\}, \Gamma_g)}$: sont les paramètres transformés.

$$P_{\theta}^{(\{i\},\,\Gamma_g)} \,=\, [\,R^{\Omega\,(K_g\,,\,n\Gamma_g)}\,\otimes\, {}^{\epsilon}V^{\alpha_1\Gamma_{1\chi}\alpha_2\Gamma_{2\chi}(\,\Gamma_{\sigma_g})}\,]\,\theta^{(\,\sigma_g)} \tag{II.56}$$

Avec: $\varepsilon = (-1)^{\Omega}$

Les composantes de la polarisabilité transformée dans (LFF) vaut :

$$\widetilde{\alpha}_{\Theta_{1}\Theta_{2}}^{(A_{1g})} = \langle \mathbf{0} ; \mathbf{0} \setminus \Theta_{1}\Theta_{2} \rangle \sum_{\{i\}} \widetilde{\alpha}^{(A_{1g})} \left[C^{(\mathbf{0}_{g}; A_{1g})} \otimes P^{(\{i\}, A_{1g})} \right]^{(A_{1g})} \\
+ \sqrt{2} \sum_{m} \langle \mathbf{0} ; m\mathbf{0} \setminus \Theta_{1}\Theta_{2} \rangle \sum_{\{i\}} \widetilde{\alpha}^{(E_{g})} \left[C^{(\mathbf{2}_{g}; E_{g})} \otimes P^{(\{i\}, E_{g})} \right]^{(A_{1g})} \\
+ \sqrt{3} \sum_{m} \langle \mathbf{0} ; m\mathbf{0} \setminus \Theta_{1}\Theta_{2} \rangle \sum_{\{i\}} \widetilde{\alpha}^{(F_{2g})} \left[C^{(\mathbf{2}_{g}; F_{2g})} \otimes P^{(\{i\}, FE_{2g})} \right]^{(A_{1g})}$$
(II. 57)

Avec: Θ_1 , $\Theta_2 = X$, Y ou Z.

Le premier terme dans cette équation (symétrie (A_{1g})) représente la partie isotropique de la polarisabilité, les deux autres parties (de symétrie (E_g) et (F_{2g})) sont sa partie anisotropique.

L'intensité Raman est donnée par :

$$I_{if} = R_{if}. \ \mathbf{g}_{i}. \ e^{\left(\frac{-hCE_{i}}{KT}\right)} \sum_{\boldsymbol{\theta}, \, \dot{\boldsymbol{\theta}}} \sum_{M_{i}, \, M_{f}} |\langle \widetilde{\boldsymbol{\phi}}_{i} | \, \widetilde{\boldsymbol{\alpha}}_{\boldsymbol{\theta}, \, \dot{\boldsymbol{\theta}}} | \, \widetilde{\boldsymbol{\phi}}_{f} \rangle|^{2}$$
 (II. 58)

L'expression générale des éléments matriciels de l'opérateur de la polarisabilité est :

$$\begin{split} \langle [\Psi^{(\int_{g},\hat{n}\cdot\hat{C}_{rg})} \otimes \Psi^{(\hat{C}_{v\tau})}_{\hat{\nu}}] \, \sigma^{(C_{\tau})} \, | [\, C^{(L_g,\Gamma_g)} \otimes P^{(\{i\},\Gamma_g)}\,]^{(A_{1g})} \, | [\, \Psi^{(J_g,\,nC_{rg})} \otimes \Psi^{(C_{v\tau})}_{\hat{\nu}}\,] \, \sigma^{(C_{v\tau})}\,) \, = \\ & \frac{1}{2} (-1)^{\hat{C}_{\upsilon} + \hat{C}_{\tau} + C} \, \langle \hat{J}_{\hat{g}} | |\, C^{(L_g)} \, | |\, J_g \rangle \, \langle \Psi^{(\hat{C}_{\upsilon\tau})}_{\hat{\upsilon}} \, | |\, {}^{\epsilon} V^{\alpha_1 \Gamma_{1\chi}\alpha_2 \Gamma_{2\chi}(\Gamma_{\sigma_g})} \, | |\, \Psi^{(C_{\upsilon\tau})}_{\upsilon} \, \rangle \, \\ & \left\{ \hat{C}_{\upsilon\tau} \, \, \, \hat{C}_{rg} \, \, C_{\tau} \right\}_{\{ C_{rg} \, \, C_{\tau} \, C_{\nug} \}} \{ \, \, (-1)^{J + \hat{\jmath}} \, \langle J_g | |\, R^{\Omega(K_g)} \, | |\, J_g \rangle \times \sum_{\hat{C}_r} \, [\, \left\{ \hat{C}_{rg} \, \, \, \hat{C}_{rg} \, \, C_{rg} \, \right\} \\ & \sum_{\hat{n}} K^{(L_g \, J_g \, \hat{J}_g)}_{(0\Gamma_g \, \, nC_{rg} \, \, \hat{n}\, \hat{C}_{rg})} \, K^{(K_g \, J_g \, J_g)}_{(n_r\Gamma_{rg} \, \, \hat{n}\, \hat{C}_{rg} \, nC_{rg})} \,] \, + (-1)^{\Gamma_r + \, \Gamma_\upsilon} \, \langle J_g | |\, R^{\Omega(K_g)} \, | |\, J_g \rangle \\ & \times \sum_{\hat{C}_r} [\, \left\{ \hat{C}_{rg} \, \, \, \, C_{rg} \, \, \, \hat{C}_{rg} \, \right\} \, \sum_{\hat{n}} K^{(L_g \, J_g \, \hat{J}_g)}_{(0g \, \, \hat{n}\, \hat{C}_{rg} \, \, \hat{n}\, \hat{C}_{rg})} \, K^{(K_g \, J_g \, \hat{J}_g)}_{(n_r\Gamma_{rg} \, \, \hat{n}\, \hat{C}_{rg} \, \hat{n}\, \hat{C}_{rg})} \,] \} \end{split}$$

Les éléments matriciels réduits $\boldsymbol{C}^{(\;L_g)}$ sont donnés par :

$$\langle \Psi_{\acute{M}}^{(\acute{J}_g)} \, | \, C_m^{(L_g)} \, | \, \Psi_M^{(J_g)} \, \rangle = (-1)^{1 \, + \, \acute{J} \, - \, \acute{M}} \, . \, \sqrt{[J] \big[\acute{J} \big]} \, . \, \begin{pmatrix} \acute{J} & L & J \\ - \acute{M} & m & M \end{pmatrix} \tag{II.60}$$

II-6. Les règles de sélection :

Considérons deux fonctions rovibrationnelles $|\Psi_{M,\sigma}^{(C_{\tau})}\rangle$ et $|\Psi_{M,\dot{\sigma}}^{(C_{\tau})}\rangle$. Les règles de sélection proviennent directement des expressions des éléments matriciels et des différents symboles de couplage [10, 13]. Ces règles de sélection sont regroupées dans le tableau (II-1):

Tableau (II-1) : Les symétries des opérateurs (Hamiltonien, moment dipolaire et polarisabilité) dans les repères (**MFF**) et (**LFF**) des molécules octaédriques.

Opérateur	MFF	LFF			
Н	A_{1g}	$A_{1 m g}$			
μ	F_{1u}	A_{1u}			
α	$A_{1g} \oplus E_{1g} \oplus F_{2g}$	$A_{1 m g}$			

Concernant le nombre quantique J, les règles de sélection proviennent du non nullité des facteurs isoscalaires K qui interviennent dans l'expression des éléments matriciels.

La règle $\hat{C} = C$ provient du fait que les trois opérateurs sont de symétrie (A_{1g}) dans le repère (LFF), tandis que, la règle de sélection de la parité dépend de la parité de l'opérateur à étudier.

Dans le cas de l'absorption ou l'émission, les transitions se produisent seulement entre états de parité opposées ($\mathbf{g} \leftrightarrow \mathbf{u}$), et les transitions Raman se produisent seulement entre états de même parité ($\mathbf{g} \leftrightarrow \mathbf{g}$ ou $\mathbf{u} \leftrightarrow \mathbf{u}$).

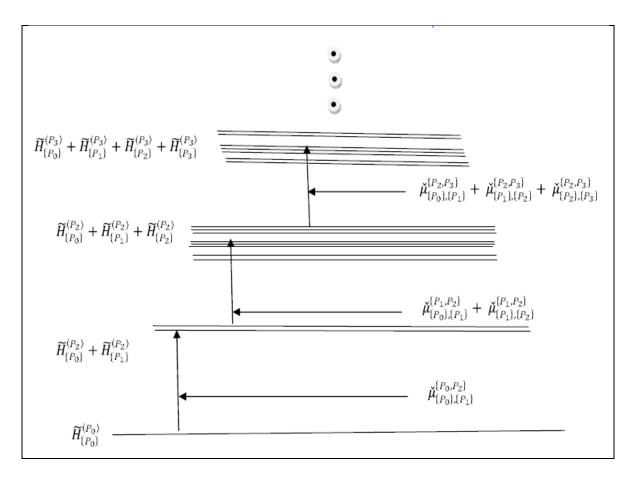


Figure (II-1) : Illustration schématique de l'extrapolation vibrationnelle de l'Hamiltonien et de moment dipolaire dans le cas de polyades et de bandes chaudes.

Références Bibliographiques

Références bibliographiques:

- [1] Wave H. Shaffer, Harald H. Nielsen, and L. H. Thomas. Phys. Rev. 56, 895. (November 1939). https://doi.org/10.1103/PhysRev.56.895
- [2] H.A. Jahn, Proc. R. Soc, A168, 469. (1938). https://doi.org/10.1098/rspa.1938.0187
- [3] H. Pickett. J. Mol. Spectrosc, Volume 148, Issue 2 .p: 371–377, (1991). https://doi.org/10.1016/0022-2852(91)90393-0
- [4] Jahn. Van Velck. Phys. Rev, volume 33. Issue 04:467, (1929). https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.33.467
- [5] N. Cheblal, M. Loete, and V. Boudon. J. Mol. Spectrosc, Volume 197, Issue 2. p:222–231, (1999). https://doi.org/10.1006/jmsp.1999.7902
- [6] Jean Paul Champion. PhD thesis, université de Bourgogne, Dijon, France, (1978).
- [7] Michel Loete. PhD thesis, université de Bourgogne, Dijon, France, (1984).
- [8] J. Moret Bailly. Can. J. Phys, Volume 15, Issue 3. p: 344-354, (1965). https://doi.org/10.1016/0022-2852(65)90150-5
- [9] B.I.Zhilinskii, Opt. Spectrosc. Volume 156, Issues 7–8,p: 377-380 (1981). https://doi.org/10.1016/0375-9601(91)90710-P
- [10] Wave H. Shaffer, Harald H. Nielsen, and L. H. Thomas. Phys. Rev. 56, 895. (November 1939). https://doi.org/10.1103/PhysRev.56.895
- [11] J-P. Champion, G. Pierre, F. Michelot, and J. Moret Bailly. Can. J. Phys, 55. 512. (1977). https://doi.org/10.1139/p77-070
- [12] M. Loete. Can. J. Phys, 61(8): 1242-1259. (1983). https://doi.org/10.1139/p83-158
- [13] A.R. Edomnds. Angular Moment in Quantum Mechanics. Princeton University Press, (1982). https://press.princeton.edu/books/paperback/9780691025896/angular-momentum-in-quantum-mechanics
- [14] A.J. Stone. Mol. Phys, 29:1461–1471, (1975). https://doi.org/10.1080/00268977500101281
- [15] A.Boutahar and M. Loete. Can. J. Phys, 69:26–35, (1990). https://doi.org/10.1139/p91-005



III-1. Introduction:

Dans ce travail on s'est proposé de faire une analyse et une prédiction du spectre des transitions rovibrationnelles des deux bandes isolées ν_3 et ν_4 de la molécule 80 SeF₆. Pour ce faire, on est besoin d'un jeu de paramètres entrant dans le développement de l'Hamiltonien à certain ordre de et de logiciels de calcul.

Concernant le jeu de paramètres de l'Hamiltonien, on utilise celui de :

- \triangleright M. Terki-Hassaine, G. Pierre, H. Burger et H. Willner [1], pour la bande ν_3 .
- M. Rotger, V. Boudon, H. Burger et H. Willner [2], pour la bande ν_4 .

Les logiciels utilisés lors de l'analyse et le calcul sont XTDS et SPVIEW [3], dérivés au-dessous.

III-2. Programmes utilisés:

III-2-1. XTDS et SPVIEW:

Les spectroscopistes ont toujours œuvré pour rendre leurs résultats disponibles à tous les chercheurs. Ainsi, beaucoup de logiciels ont été mis au point et sont généralement disponibles gratuitement via le web. Parmi ces logiciels, XTDS et SPVIEW.

XTDS est un logiciel développé à l'institut Carnot de Bourgogne (ICB) à Dijon. Mettant en œuvre le formalisme tensoriel (pour Top Data System), il est un logiciel permettant la simulation des spectres.

Il contient plusieurs programmes, correspondant aux différents groupes de symétrie, permettant de calculer, de prédire et de simuler des spectres d'une molécule donnée.

- > STDS: Pour les molécules XY_4 (groupe T_d).[4]
- **HTDS**: Pour les molécules XY_6 (groupe O_h). [5]
- \triangleright **D**_{2h} **TDS**: Pour les molécules X_2Y_4 (groupe D_{2h}). [6]
- \triangleright C_{4v} TDS: Pour les molécules XY_5Z (groupe C_{4v}). [7]
- \triangleright C_{2v} TDS: Pour les molécules XY_2Z_2 (groupe C_{2v}). [8]
- \triangleright $C_{3v}TDS$: Pour les molécules XY_3Z (groupe C_{3v}). [9]
- \succ $C_{3vs}TDS$: Pour les molécules XY_3Z (groupe C_{3vs} rovibronic). [9]

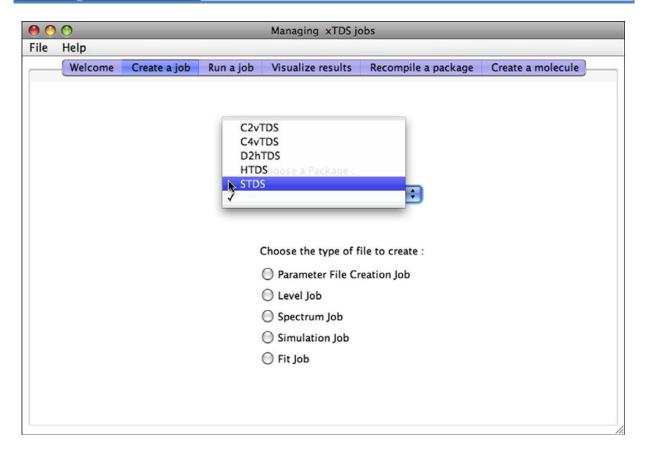


Figure (III-1): L'onglet "creat a job" dans XTDS.

SPVIEW est également un logiciel développé à l'ICB. Celui-ci permet l'affichage des spectres simulés, et des spectres mesurés en laboratoire. Chaque spectre ayant un fichier spectre t qui lui est associé, contenant la liste des transitions ainsi que leur fréquence et les nombres d'onde et les intensités.

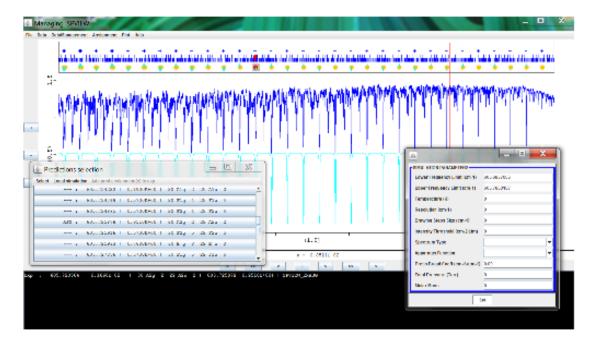


Figure (III-2): Visualisation des spectres avec SPVIEW.

III-2-2. Fichier de paramètres :

XTDS permet la création d'un *job_par*. C'est donc un programme en FORTRAN, permettant la création du fichier de paramètre nécessaire. A la création du *job*, il est demandé de renseigner plusieurs éléments :

- le schéma de polyade.
- > la polyade inférieure, et son degré de développement.
- la polyade supérieure et son degré de développement.
- le moment de transition et son degré de développement.

Il sera calculé les transitions entre la polyade supérieure et la polyade inférieure et dipolaire pour les spectres analysés en infrarouge.

Un fichier de paramètres, est créé. Ce fichier contient les paramètres des bandes rovibrationnelles qui seront utilisés pour la création des spectres. Ce fichier est une structure du fichier de paramètre final. Le fichier de paramètre ne contient que la structure des bandes sélectionnées par le schéma de polyade initial.

Une fois le fichier de paramètre créé, il convient donc de le remplir avec les paramètres déjà connu et publiés dans la littérature.

Ces paramètres correspondent aux opérateurs nécessaires au calcul de l'Hamiltonien.

III-2-3. Génération du spectre :

Une fois le fichier de paramètres créé, le calcul du spectre peut être initié. Une fois le programme exécuté, il y a création de deux fichiers : un fichier *spectre.xy*, ainsi qu'un fichier *spectre.t*.

- > spectre.xy est un fichier qui contient la liste des fréquences et des transitions calculées par le job_spe.
- > spectre.t contient quant à lui les états et les paramètres caractérisant le système étudié, puis, la liste des transitions associées.

III-2-4. Simulation du spectre :

Une fois le *job_spe* est exécuté, les fichiers *spectre.xy* et *spectre.t sont* créés. Il permet de calculer des spectres simulés sous les conditions de l'expérience (température, pression, ...).

III-3. La méthode d'analyse :

La méthode d'analyse qui peut être utilisée lors de l'analyse de ce type de molécules est celle des moindres carrées pondérée itérative. C'est la plus fréquente pour réaliser ces travaux, et qui nous permet encore d'obtenir des spectres simulés avec une grande précision, surtout que l'expérience se fait avec des équipements plus développés actuellement.

Cette méthode consiste à rapprocher le plus possible les valeurs calculées aux valeurs observées pour déterminer les paramètres de l'Hamiltonien.

$$Q = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{{}^{(o)}E_{i} - {}^{(c)}E_{i}}{\Delta E_{i}} \right)^{2} + \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{{}^{(o)}t_{j} - {}^{(c)}t_{j}}{\Delta t_{j}} \right)^{2}$$
(III-1)

Où ces termes représentent respectivement :

(o)E_i: La i^{ème} valeur de la transition observée

 $^{(c)}E_i$: La i^{ème} valeur de la transition calculée.

 ΔE_i : L'estimation de l'incertitude de la transition observée.

N : Le nombre des transitions utilisées.

 ${}^{(o)}t_i$: La j^{ème} valeur du paramètre observé.

 $^{(c)}t_i$: La j^{ème} valeur du paramètre calculé.

 Δt_i : L'estimation de l'incertitude du paramètre observé.

n: Le nombre total des paramètres utilisés.

On peut calculer ${}^{(c)}E_i^{n+1}$ à la (n+1) $i^{\grave{e}me}$ itération en faisant la somme de la transition calculée $n^{\grave{e}me}$ et la quantité $d^{(c)}E_i$ (sa différentielle totale :

$$^{(c)}E_i^{n+1} = {^{(c)}E_i^n + d^{(c)}E_i}$$
 (III-2)

De la même façon que ${}^{(c)}E_i^{n+1}$; le paramètre ${}^{(c)}t_l^{n+1}$ à la (n+1) $i^{\grave{e}me}$ itération s'obtient par :

$$^{(c)}t_l^{n+1} = {^{(c)}t_l^n + d^{(c)}t_l}$$
 (III-3)

Dans le but de rapprocher le plus possible les transitions calculées aux transitions observées, en utilisant cette méthode qui nous permet de minimiser une quantité dépendante des énergies de transition observées et des paramètres de l'Hamiltonien. Qui s'écrive sous la forme :

$$E. Q. M = \sqrt{\left(\frac{\sum_{i=1}^{N} p_i^{(oc)} E_i^2}{\sum_{i=1}^{N} p_i}\right)}$$
 (III-4)

Où les P_i : Sont les poids donnés par :

$$p_i = \frac{1}{\Delta E_i^2} \tag{III-5}$$

L'organigramme ci-dessous explique comment peut-on utilisé les deux logiciels dans l'analyse et le calcul des spectres :

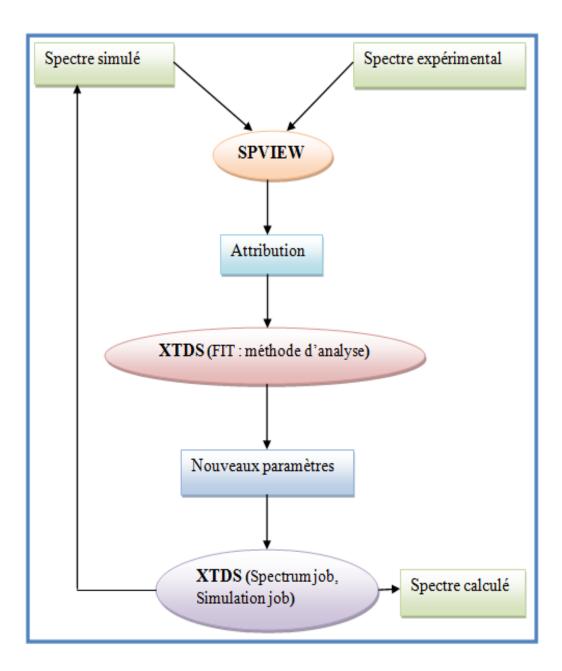


Figure (III-3): Méthode d'utilisation des deux logiciels XTDS et SPVIEW.

Le calcul des spectres des bandes ν_3 et ν_4 de la molécule $^{80}SeF_6$ ce fait par le logiciel HTDS inclus dans XTDS, de la façon suivante :

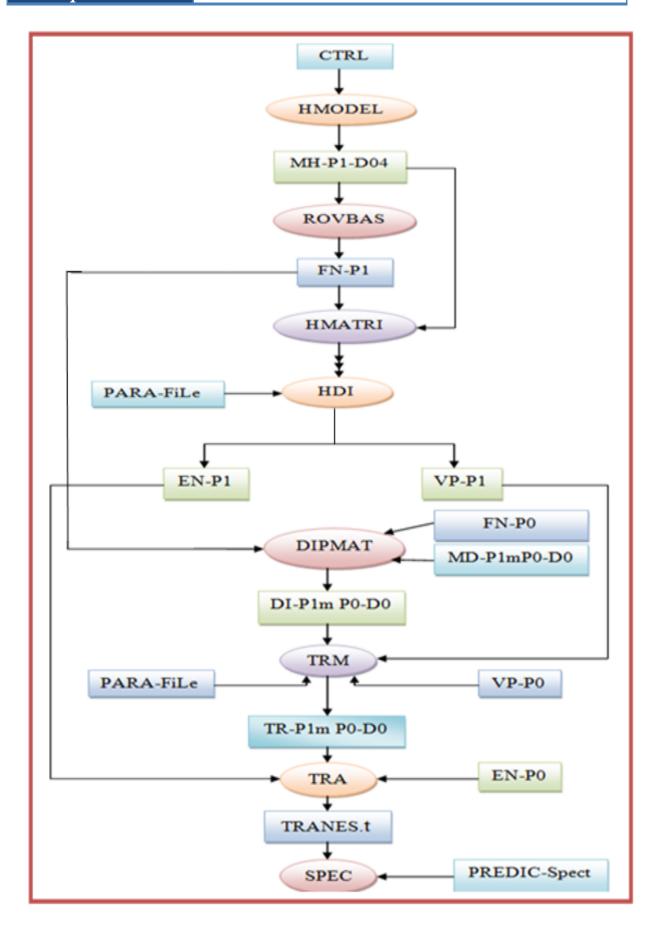


Figure (III-4): Organigramme des programmes utilisés dans le calcul.

III-4. Analyse des positions des raies de la bande ν_3 de la molécule $^{80}SeF_6$:

Les vibrations des atomes et les rotations possibles de la molécule, ainsi que les interactions entre les vibrations et les rotations correspondent à des énergies.

La configuration d'équilibre de la molécule XY_6 est un octaèdre au sommet duquel se trouvent les atomes Y et au centre duquel st trouve l'atome X ces molécules ont pour groupe de symétrie O_h .

La molécule possède six modes normaux de vibration :

- v_1 : Complètement symétrique non dégénéré de symétrie A_{1g} , actif en Raman.
- ν_2 : Doublement dégénéré de symétrie E_q , actif en Raman.
- v_3 et v_4 : triplement dégénérés de symétrie F_{1u} , actif en IR.
- ν_5 : Triplement dégénérés de symétrie F_{2g} , actif en Raman.
- ν_6 : Triplement dégénérés de symétrie F_{2u} , totalement inactif.

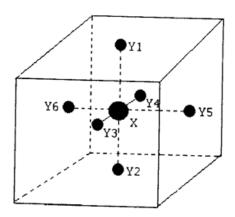


Figure (III-5): Configuration d'équilibre de la molécule XY₆.

Il existe quatre types des niveaux d'énergie rovibrationnels ν_s qui sont :

- Le niveau de base ou tous les v_s sont nuls.
- Les niveaux fondamentaux ou un seul v_s et non nul et égal 1.
- Les niveaux harmoniques ou un seul v_s et non nul et différent de 1.
- Les niveaux de combinaisons ou plusieurs v_s sont non nuls.

III-4-1. Résultats et discussion:

Dans un premier lieu, nous allons calculer et prédire le spectre complet des transitions rovibrationnelles entre le niveau v_3 et le niveau de base GS de la molécule $^{80}SeF_6$.

La bande v_3 est l'ensemble des transitions rovibrationnelles entre les niveaux rovibrationnels ayant le nombre quantique $v_3 = 1$ et les niveaux de base GS.

La variation de nombre quantique rotationnel J peut nous donne l'ensemble des niveaux rovibrationnels possibles.

Le niveau vibrationnel v_3 se décompose en sous niveaux vibrationnels caractérisés par des nombres quantiques secondaires ls et par leurs symétries dans le groupe O_h .

On peut obtenir des niveaux rovibrationnels appartenant au même niveau vibrationnel par la variation des nombres quantiques rotationnels J.

Dans le but de calculer le spectre des transitions rovibrationnelles de la bande v_3 de la molécule $^{80}SeF_6$ en utilise :

États vibratoires supérieurs :

v1v2 $\mathbf{C}\mathbf{v}$ v3v4**v**5 **v6** $1 \mid [[[[0(0,0A1g)*0(0,0A1g)*1(1,0F1u)]F1u*0(0,0A1g)]F1u*0(0,0A1g)]F1u*0(0,0A1g)]F1u*$ **États vibrationnels inférieurs :** v1 v2# v3**v**5 $\mathbf{C}\mathbf{v}$ **v6**

 $1 \mid [[[[0(0,0A1g)*\ 0(0,0A1g)*\ 0(0,0A1g)]\ A1g*\ 0(0,0A1g)]\ A1g*\ 0(0,0A1g)]\ A1g*\ 0(0,0A1g)]\ A1g*$

L'analyse complète du spectre des transitions rovibrationnelles de la bande ν_3 de la molécule $^{80}SeF_6$, dans la région (750 – 800 cm^{-1}), se fait par l'utilisation de 19 paramètres relatifs à la bande ν_3 de la molécule $^{80}SeF_6$, dont 6 relatifs au niveau de base GS et 13 relatifs au niveau ν_3 . Ces paramètres sont trouvés par M. Terki-Hassaine et al [1].

L'ensemble de paramètres utilisé dans le développement de l'Hamiltonien de la bande ν_3 en question à l'ordre 4 pour les deux niveaux ont été reportés dans le tableau ci-dessous :

Où les différents termes (colonnes) de ce tableau représentent :

- i: Indice permettant de numéroter les différents paramètres.
- \bullet Ω (K, n Γ): Les caractéristiques de l'opérateur relatif au paramètre i.
- n_s : Le nombre de fois qu'a \tilde{a}^+ été couple pour former un tenseur de symétrie Γ_1 .
- Γ_1 : La symétrie de l'opérateur résultant de couplage des \tilde{a}^+ .
- * m_s : Le nombre de fois qu'a \tilde{a}^- été couplé pour former un tenseur de symétrie Γ_2 .
- Γ_2 : La symétrie de l'opérateur résultant de couplage des \tilde{a}^- .
- ❖ **Γ**: la symétrie de l'opérateur rovibrationnel.
- **Hmn:** Le degré de polynôme rovibrationnel.
- ❖ Les deux dernières colonnes représentent la valeur du paramètre i et sa précision respectivement.

Tableau (III-1): Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à la bande ν_3 de la molécule 80 SeF₆.

i	$\Omega(K, n\Gamma)$	n_s Γ_1	m_s Γ_2	Γ	Hmn	Value/cm-1	St.Dev./cm-1
1	2(0,0A1g)	000000A1g	000000A1g	A1g	02	0.78130718020E-01	0.000000E+00
2	4(0,0A1g)	000000A1g	000000A1g	A1g	04	0.0000000000E+00	0.0000000E+00
3	4(4,0A1g)	000000A1g	000000A1g	A1g	04	0.0000000000E+00	0.000000E+00
4	6(0,0A1g)	000000A1g	000000A1g	A1g	06	0.0000000000E+00	0.000000E+00
5	6(4,0A1g)	000000A1g	000000A1g	A1g	06	0.0000000000E+00	0.000000E+00
6	6(6,0A1g)	000000A1g	000000A1g	A1g	06	0.0000000000E+00	0.000000E+00
7	0(0,0A1g)	001000F1u	001000F1u	A1g	20	0.78007748648E+03	0.1412353E-04
8	1(1,0F1g)	001000F1u	001000F1u	F1g	21	0.99914193861E-01	0.6766449E-06
9	2(0,0A1g)	001000F1u	001000F1u	A1g	22	-0.93516018822E-04	0.1223724E-07
10	2(2,0E g)	001000F1u	001000F1u	E g	22	-0.77311288919E-04	0.2526490E-07
11	2(2,0F2g)	001000F1u	001000F1u	F2g	22	0.53873290085E-04	0.3301042E-07
12	3(1,0F1g)	001000F1u	001000F1u	F1g	23	0.23985560694E-08	0.1343194E-09
13	3(3,0F1g)	001000F1u	001000F1u	F1g	23	-0.15647162169E-07	0.1792522E-09
14	4(0,0A1g)	001000F1u	001000F1u	A1g	24	-0.65287335959E-10	0.1769927E-11
15	4(2,0E g)	001000F1u	001000F1u	E g	24	0.0000000000E+00	0.000000E+00
16	4(2,0F2g)	001000F1u	001000F1u	F2g	24	0.95222285922E-10	0.3110158E-11
17	4(4,0A1g)	001000F1u	001000F1u	A1g	24	-0.12940010005E-10	0.1287909E-11
18	4(4,0E g)	001000F1u	001000F1u	E g	24	0.68732279102E-10	0.3947080E-11
19	4(4,0F2g)	001000F1u	001000F1u	F2g	24	0.56283139358E-10	0.3767962E-11

L'ensemble de ces paramètres, nous ont permis de calculer et de prédire le spectre complet de la bande v_3 de la molécule $^{80}SeF_6$ dans la fenêtre (750-800 cm^{-1}), pour une valeur maximale de nombre quantique rotationnel Jmax = 95, avec un écart quadratique moyen de 0,643. 10^{-3} cm^{-1} , très proche de la précision expérimentale.

Tableau (III-2): Informations sur le spectre IR de la bande v_3 de la molécule 80 SeF₆.

Nombre de transitions calculées	11520
première transition	768,202989 1.77E-02 P 96 F1g
Transition la plus intense	783,961365 2.35E-01 R 36 A2g
Dernière transition	789,722577 2.10E-02 R 94 F2g
J_{max}	95
Intensité sommet	$0.93.10^3 cm^{-2}$. atm^{-1} avec seuil = $0.1.10^{-2} cm^{-1}$

La figure ci-dessous montre que les rais calculées sont réparties selon trois branches P, Q et R suivant les règles de sélections rovibrationnelles (Voir chapitre II).

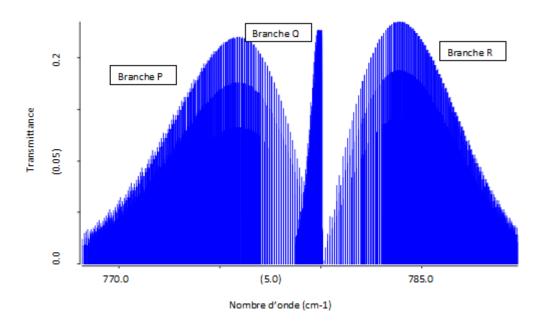


Figure (III-6): Spectres des transitions rovibrationnelles de la bande v_3 de la molécule $^{80}SeF_6$.

III-4-2. Les niveaux d'énergies réduits :

La figure (III-7) montre la répartition des niveaux d'énergie réduits calculés en fonction de nombre quantique rotationnel J pour les différentes Transitions de la bande v_3 . Ces niveaux sont calculés par la relation :

$$E_{red} = E - B_0 J (J + 1) + \dots$$
 (III.6)

$$\tilde{v}_{red}^{C} = \tilde{v}^{C} + \sum_{\Omega} t_{\{GC\}\{GC\}}^{\Omega (0,0A_{1g}) A_{1g}A_{1g}} . (J(J+1))^{\Omega/2}$$

$$\tilde{v}_{red}^{C} = \frac{E}{hC} - B_{0}.J(J+1) + D_{0}.J^{2}(J+1)^{2} +$$
(III.8)

$$\tilde{v}_{red}^{C} = \frac{E}{hC} - B_0.J(J+1) + D_0.J^2(J+1)^2 + \dots$$
 (III.8)

M. Terki-Hassaine [1], a déterminé la valeur numérique de la constante rotationnelle B_0 qui vaut :

$$B_0 = h/_{8\pi^2 C I_0}$$
 (III.9)

Avec:

$$B_0 = 0.78130718020 \text{E} \cdot 01 cm^{-1}$$
 (III.10)

 \triangleright B_0 : Est la valeur du paramètre qui correspond à i = 1 dans le tableau (III-1).

$$t_{\{0\}\{0\}}^{2\ (\ 0,\ 0A_{1g})\ A_{1g}A_{1g}} = B_0 = 0.78130718020E-01cm^{-1}$$
 (III.11)

Ces niveaux sont répartir suivant trois branches P, Q, R, selon les règles de sélection rovibrationnelles $\Delta J = -1, 0, +1$ respectivement.

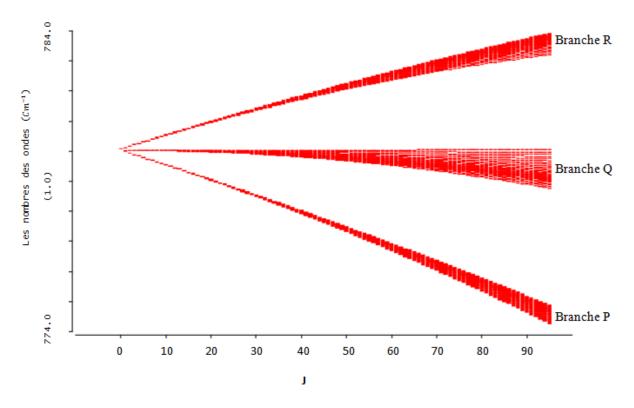


Figure (III-7): Répartitions des niveaux d'énergies réduits de niveau v_3 de la molécule $^{80}SeF_6$.

III-4-3. Prédiction du spectre IR de la bande v_3 de la molécule 80 Se F_6 :

Dans le tableau (III-3), nous reportons un ensemble de transitions rovibrationnelles appartenant au spectre calculé de la bande ν_3 de la molécule en question.

Dans ce tableau, chaque ligne explique l'origine de la transition calculée. Par exemple et pour la première ligne, la raie de fréquence 779.921225 cm^{-1} résulte d'une transition de niveau supérieur caractérisé par J=0 de symétrie F1u au nivau inferieur caractérisé par J=1 de symétrie F1g, et puisque $\Delta j=-1$, cette raie appartient à la branche P.

Tableau (III-3): Prédiction du spectre IR de la bande ν_3 de la molécule $^{80} \text{SeF}_6$.

779. \$21225 \$ 3.08E-03	Fréquence	Intensité		J''	C''	n''	J	C	n	Energie inf	Population inf
779. 811738	779.921225			1		1	0	F1u	1	0.156261	0.357201E-05
780.030215 9.23E-03 P 2 F1G 1 1 F1u 1 0.156261 0.357201C-05 779.702866 9.22E-03 P 2 F2G 1 1 F2u 1 0.468784 0.594444E-05 779.702866 1.53E-02 P 3 A2g 1 2 A2u 1 0.337569 0.138392E-04 780.030023 2.05E-02 P 3 A2g 1 2 A2u 1 0.337569 0.138392E-04 780.030023 1.53E-02 P 3 F1G 1 2 F1u 1 0.468784 0.59352E-05 779.702800 1.53E-02 P 3 F1G 1 2 F1u 2 0.337569 0.830352E-05 780.03800 1.54E-02 Q 2 F2G 1 2 F2U 1 0.468784 0.830352E-05 779.702414 1.53E-02 P 3 F1G 1 2 F1u 2 0.937569 0.830352E-05 779.702414 1.53E-02 P 3 F2G 1 2 F2U 1 0.468784 0.830352E-05 780.028726 3.58E-02 Q 3 A2g 1 3 A2u 1 0.337569 0.830352E-05 780.028726 3.58E-02 Q 3 A2G 1 3 A2u 1 0.337569 0.830352E-05 780.028726 3.58E-02 Q 3 A2G 1 3 A2u 1 0.337569 0.830352E-05 779.5912475 2.85E-02 P 4 F1G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.5912475 2.85E-02 P 4 F1G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.592330 2.15E-02 Q 3 F1G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 780.028726 3.58E-02 P 4 F1G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 780.029743 2.15E-02 P 3 F2G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 780.029200 2.15E-02 P 3 F2G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.593207 2.15E-02 P 4 F1G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.593208 2.15E-02 P 4 F1G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.593208 2.15E-02 P 4 F1G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.593208 2.15E-02 P 4 F1G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 F2G 1 3 F2U 1 0.468784 0.594444E-05 780.029290 2.15E-02 P 4 F1G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 F2G 1 4 E U 1 1.562614 0.106440E-04 780.59290 2.15E-02 P 4 F1G 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 F2G 1 4 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 F1G 1 4 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 F1G 1 4 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 F1G 1 4 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 F1U 1 4 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 F1U 1 4 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 F1U 1 4 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.593300 0.93030000000000000000000000000000											
779.702866 2.55E-02 P 3 A29 1 2 A2U 1 0.937569 0.138392E-04 780.030027 2.05E-02 Q 2 E g 0 1 2 E U 1 0.468784 0.792592E-05 780.0248083 1.54E-02 R 1 F1g 1 2 F1U 1 0.156261 0.357201E-05 779.702050 1.53E-02 Q 2 F1g 1 2 F1U 1 0.156261 0.357201E-05 779.023801 1.53E-02 Q 2 F1g 1 2 F1U 1 0.337569 0.337569 0.33035E-05 779.023801 1.53E-02 Q 2 F1g 1 2 F1U 1 0.468784 0.337569 0.330348E-05 779.591892 7.13E-03 P 4 A29 1 2 F1U 1 0.337569 0.330348E-05 780.028726 3.58E-02 Q 3 A29 1 3 A2U 1 0.937569 0.138392E-04 780.028726 7.87E-02 R 2 E g 1 3 E U 1 0.468784 0.792592E-05 779.591475 2.85E-02 P 4 E g 1 3 E U 1 0.937569 0.138392E-04 780.02973 2.15E-02 R 2 F1g 1 3 F1U 1 0.937569 0.33035E-05 779.592475 2.85E-02 P 4 E g 1 3 E U 1 0.562614 0.141920E-04 780.029743 2.15E-02 Q 3 A29 1 3 F1U 1 0.937569 0.33035E-05 779.592205 2.14E-02 P 4 E g 1 3 F1U 1 0.937569 0.33035E-05 779.592207 2.85E-02 P 4 E g 1 3 F1U 1 0.937569 0.33035E-05 779.592207 2.85E-02 P 4 E g 1 3 F1U 1 0.937569 0.33035E-05 779.592207 2.85E-02 P 4 E g 1 3 F1U 1 0.937569 0.33035E-05 779.592207 2.14E-02 P 4 F2g 1 3 F1U 1 0.937569 0.33035E-05 779.592207 2.14E-02 P 4 F2g 1 3 F1U 1 0.937569 0.33035E-05 779.593207 2.14E-02 P 4 F2g 1 3 F1U 1 0.937569 0.33035E-05 780.465216 4.60E-02 R 3 A29 1 4 A2U 1 1.562614 0.106440E-04 780.029707 9.17E-03 Q 4 A19 1 4 A1U 1 1.562614 0.1306440E-04 780.028886 3.67E-02 Q 5 F1U 1 4 F1U 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1											
780.030027 2.05E-02 Q 2 E Ğ 1 2 E U 1 0.468784 0.792592-05 780.248083 1.54E-02 R 1 F1g 1 2 F1u 1 0.15E661 0.357201E-05 779.702030 1.53E-02 R 2 F1g 1 2 F1u 1 0.35E661 0.357201E-05 779.702030 1.53E-02 R 3 F1g 1 2 F1u 1 0.367869 0.83033E-05 779.591891 1.53E-02 R 3 F1g 1 2 F1u 2 0.337569 0.83033E-05 779.591892 7.13E-03 P 4 A1g 1 3 A1u 1 1.562614 0.354800E-05 780.02876 3.58E-02 R 2 E g 1 3 A1u 1 1.562614 0.354800E-05 780.02876 2.87E-02 R 2 E g 1 3 E u 1 0.468784 0.792592E-05 780.02872 2.87E-02 R 2 E g 1 3 E u 1 0.468784 0.792592E-05 779.592475 2.88E-02 P 4 E g 1 3 E u 1 0.468784 0.792592E-05 779.592475 2.88E-02 P 3 F1g 1 3 F1u 1 0.337569 0.83033E-05 779.592475 2.88E-02 P 4 F1g 1 3 F1u 1 0.337569 0.83033E-05 779.592242 2.15E-02 P 3 F1g 1 3 F1u 1 0.337569 0.83032E-05 779.592262 2.15E-02 P 3 F1g 1 3 F1u 2 1.562614 0.83033E-05 779.592262 2.15E-02 P 3 F1g 1 3 F1u 2 1.562614 0.83033E-05 779.592262 2.15E-02 P 3 F1g 1 3 F1u 2 1.562614 0.83033E-05 779.592265 2.14E-02 P 4 F2g 1 3 F1u 2 1.562614 0.83032E-05 779.592265 2.14E-02 P 4 F2g 1 3 F1u 2 1.562614 0.354800E-05 780.028780 3.67E-02 P 4 F2g 1 3 F1u 2 1.562614 0.354800E-05 780.028780 3.67E-02 P 4 F2g 1 4 A1u 1 1.562614 0.354800E-05 780.028386 3.67E-02 P 4 F1g 1 4 F1u 1 1.562614 0.354800E-05 779.483265 3.67E-02 P 5 F1g 1 4 F1u 1 1.562614 0.354800E-05 779.483265 3.76E-02 P 5 F1g 1 4 F1u 1 2 1.562614 0.354800E-05 779.483265 3.76E-02 P 5 F1g 1 4 F1u 1 1.562614 0.354800E-05 779.483456 2.76E-02 P 5 F1g 1 4 F1u 1 2 1.562614 0.354800E-05 779.483456 2.76E-02 P 5 F1g 1 4 F1u 1 2 1.562614 0.106440E-04 779.483456 2.76E-02 P 5 F1g 1 4 F1u 1 2 1.562614 0.106440E-04 779.483456 2.76E-02 P 5 F1g 1 5 F1u 1 1 2 1.562614 0.106440E-04 779.483456 2.76E-02 P 5 F1g 1 4 F1u 1 2 1.562614 0.106440E-04 779.483456 2.76E-02 P 5 F1g 1 4 F1u 1 2 1.562614 0.106440E-04 779.483456 2.76E-02 P 5 F1g 1 5 F1u 1 2 1.562614 0.106440E-04 779.483456 2.76E-02 P 5 F1g 1 5 F1u 1 2 1.562614 0.106440E-04 779.483456 2.76E-02 P 5 F1g 1 5 F1u 1 2 1.562614 0.106440E-04 779.483476 2.77E-02 P 6 F2g 1 1 6 F1u 1 2 1.562614 0.1064			-								
780.0248083											
780.029800 1.54E-02 Q 2 F2\(\text{d}\) 1 2 F2\(\text{d}\) 1 0.468784 0.594444E-05 779.702414 1.53E-02 P 3 F2\(\text{d}\) 1 3 A1\(\text{d}\) 1 1.55\(\text{c}\) 614 0.354800E-05 779.591892 7.13E-03 P 4 A1\(\text{d}\) 1 3 A1\(\text{d}\) 1 1.55\(\text{c}\) 614 0.354800E-05 780.028726 3.58E-02 Q 8 2 E 9 1 3 E U 1 0.468784 0.79253E-05 780.028737 2.85E-02 R 2 4 E 9 1 3 E U 1 0.468784 0.79253E-05 779.59273 2.85E-02 R 2 4 E 9 1 3 E U 1 0.468784 0.79253E-05 779.59273 2.85E-02 R 2 4 E 9 1 3 E U 1 0.468784 0.79253E-05 779.59273 2.85E-02 R 2 4 E 9 1 3 E U 1 0.468784 0.79253E-05 779.59273 2.14E-02 P 4 F1\(\text{d}\) 1 3 F1\(\text{d}\) 2 0.5875\(\text{d}\) 0.15326-05 779.59273 2.14E-02 P 4 F1\(\text{d}\) 1 3 F1\(\text{d}\) 2 0.5875\(\text{d}\) 0.15326-05 780.02866 2.15E-02 R 2 F2\(\text{d}\) 1 3 F2\(\text{d}\) 1 3 F2\(\text{d}\) 2 0.9375\(\text{d}\) 0.1544\(\text{d}\) 0.04 780.02920 2.15E-02 R 2 F2\(\text{d}\) 1 3 F2\(\text{d}\) 1 3 F2\(\text{d}\) 2 0.9375\(\text{d}\) 0.8335\(\text{d}\) 0.8335\(\text{d}\) 2 0.779.593205 2.14E-02 P 4 F2\(\text{d}\) 1 3 F2\(\text{d}\) 1 3 F2\(\text{d}\) 2 0.9375\(\text{d}\) 0.8335\(\text{d}\) 0.8335\(\text{d}\) 0.780.466216 4.60E-02 R 3 A2\(\text{d}\) 1 4 A1\(\text{d}\) 1 1.562614 780.029807 9.17E-03 Q 4 A1\(\text{d}\) 1 4 A1\(\text{d}\) 1 1.562614 780.02886 3.67E-02 Q 4 E 9 1 4 E U 1 1.562614 780.02886 3.67E-02 Q 4 F2\(\text{d}\) 1 4 E U 1 1.562614 780.02888 3.67E-02 R 3 A2\(\text{d}\) 1 4 E U 1 1.562614 0.16440E-04 780.02888 5 3.67E-02 R 3 F2\(\text{d}\) 1 4 E U 1 1.562614 0.1780.02888 5 3.67E-02 R 3 F2\(\text{d}\) 1 4 E U 1 1.562614 0.1780.02888 5 3.67E-02 R 3 F2\(\text{d}\) 1 4 E U 1 1.562614 0.1780.02888 6 3.67E-02 R 3 F2\(\text{d}\) 1 4 F2\(\text{d}\) 1 4 F2\(\text{d}\) 1 3 F2\(\text{d}\) 1 4 F2\(\text{d}\) 1 3 F2\(\text{d}\) 1 4 F2\(\text{d}\) 1 5 F2\(\text{d}\) 1 4 F2\(\text{d}\) 1 5 F2\(\text{d}\) 1 5 F2\(\text{d}\) 1 5 F2\(\text{d}\) 1											
779.702414											
779. 591892 7. 13E-03 P 4 Alg 1 3 Alu 1 1.562614 0.354800E-05 780.028726 3.58E-02 P 4 E g 1 3 E U 1 0.468784 0.792592E-05 779.592475 2.85E-02 P 4 E g 1 3 E U 1 0.468784 0.792592E-05 779.592475 2.85E-02 P 4 E g 1 3 E U 1 0.468784 0.792592E-05 779.592475 2.85E-02 P 4 E g 1 3 E U 1 0.562614 0.354800E-05 779.592475 2.85E-02 P 4 E g 1 3 E U 1 0.562614 0.354800E-05 779.592475 2.85E-02 P 4 E g 1 3 E U 1 0.562614 0.354800E-05 779.592475 2.85E-02 P 4 E g 1 3 E U 1 0.562614 0.354800E-05 779.592205 2.14E-02 P 4 F 2 G 1 3 F 2 U 2 0.487569 0.830352E-05 779.593205 2.14E-02 P 3 F 2 G 1 3 F 2 U 3 0.487569 0.830352E-05 779.593205 2.14E-02 P 3 F 2 G 1 3 F 2 U 3 0.487569 0.830352E-05 779.593205 2.14E-02 P 3 F 2 G 1 3 F 2 U 3 0.487569 0.830352E-05 779.593205 2.14E-02 P 3 F 2 G 1 3 F 2 U 3 0.487569 0.830352E-05 779.593205 2.14E-02 P 3 F 2 G 1 3 F 2 U 3 0.487569 0.830352E-05 779.593205 2.14E-02 P 3 F 2 G 1 3 F 2 U 3 0.487569 0.830352E-05 779.593205 2.14E-02 P 3 F 2 G 1 4 E U 1 1.562614 0.354800E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 E g 1 4 E U 1 1.562614 0.354800E-05 779.39322E-04 780.028886 3.67E-02 R 3 F 1 G 1 4 E U 1 1.562614 0.141920E-04 780.464875 2.76E-02 R 3 F 1 G 1 4 E U 1 1.562614 0.171890E-04 779.483456 2.76E-02 R 3 F 1 G 1 4 E U 1 1.562614 0.171890E-04 779.483456 2.76E-02 R 3 F 1 G 1 4 E U 1 2.562614 0.171890E-04 779.483456 2.76E-02 R 3 F 1 G 1 4 F 1 U 2 1.562614 0.171890F-04 779.483456 2.76E-02 R 3 F 1 G 1 4 F 1 U 2 1.562614 0.18040E-04 779.483456 2.76E-02 R 3 F 1 G 1 4 F 1 U 2 1.562614 0.18040E-04 779.373774 1.11E-02 P 5 F 2 G 1 4 F 2 U 1 1.562614 0.18040E-04 779.373774 1.11E-02 P 5 F 2 G 1 4 F 2 U 1 1.562614 0.18040E-04 779.373774 1.11E-02 P 6 Alg 1 5 F 1 U 1 1.562614 0.18040E-04 779.373774 1.11E-02 P 6 Alg 1 5 F 1 U 1 1.562614 0.354800E-05 779.373774 1.11E-02 P 6 Alg 1 5 F 1 U 1 1.562614 0.354800E-05 779.373774 1.11E-02 P 6 Alg 1 5 F 1 U 1 1.562614 0.354800E-05 779.373774 1.11E-02 P 6 Alg 1 5 F 1 U 1 1.562614 0.354800E-05 779.373774 1.11E-02 P 6 Alg 1 5 F 1 U 1 1 1.562614 0.354800E-05 779.373774 1.11E-02 P 6 Alg 1 5 F 1 U 1 1 1				2							
780.356597 2.8Fz-02 P 4 E g 1 3 E u 1 0.468784 0.792592E-05 779.592475 2.85z-02 P 4 E g 1 3 E u 2 1.562614 0.141920E-04 780.029743 2.15z-02 Q 3 F1g 1 3 F1u 1 0.937569 0.83035zE-05 779.59223 2.14z-02 P 4 F1g 1 3 F1u 2 1.562614 0.106440E-04 780.356662 2.15z-02 Q 3 F2g 1 3 F2u 2 0.937569 0.83035zE-05 779.592290 2.15z-02 Q 3 F2g 1 3 F2u 2 0.937569 0.83035zE-05 779.593205 2.14z-02 P 4 F1g 1 3 F2u 2 0.937569 0.83035zE-05 779.593205 2.14z-02 P 4 F1g 1 3 F2u 2 0.937569 0.83035zE-05 779.593205 2.14z-02 P 4 F2g 1 3 F2u 2 0.937569 0.83035zE-05 779.593205 2.14z-02 P 5 E g 1 4 F2u 1 1.562614 0.15640E-04 779.843263 3.65z-02 P 5 E g 1 4 E u 2 1.562614 0.15640E-04 779.843263 3.65z-02 P 5 E g 1 4 E u 2 1.352614 0.1562614 0.15640E-04 779.843563 3.65z-02 P 5 E g 1 4 E u 2 2.343922 0.172809E-04 779.84356 2.76z-02 P 5 F1g 2 4 F1u 1 0.937569 0.83035zE-05 779.843760 2.25z 2.74z-02 P 5 F1g 2 4 F1u 1 0.937569 0.83035zE-05 779.84356 2.76z-02 P 5 F1g 2 4 F1u 3 2.343922 0.172809E-04 779.84356 2.76z-02 P 5 F1g 2 4 F1u 3 2.343922 0.129607E-04 780.465026 2.76z-02 P 5 F1g 1 4 F1u 2 1.352614 0.106400E-04 779.883456 2.76z-02 P 5 F1g 1 4 F1u 3 2.343922 0.129607E-04 780.465026 2.76z-02 P 5 F1g 1 4 F2u 1 0.937569 0.83035zE-05 780.027875 2.75z-02 Q 4 F1g 1 4 F2u 2 1.562614 0.106400E-04 779.882169 2.74z-02 P 5 F1g 1 4 F2u 3 2.343922 0.129607E-04 780.727875 2.74z-02 P 5 F1g 1 4 F2u 3 2.343922 0.129607E-04 779.783779 1.11z-02 P 6 A1g 1 5 F1u 1 1.562614 0.106400E-04 779.783779 1.11z-02 P 6 F2g 1 4 F2u 3 2.343922 0.129607E-04 779.783779 1.11z-02 P 6 F2g 1 4 F2u 3 2.343922 0.129607E-04 779.7737719 1.55560 2.76z-02 P 5 F1g 2 2 4 F1u 3 2.343922 0.129607E-04 779.7737719 1.55660 3.35z-02 Q 5 F1g 2 2 5 F1u 3 2.343922 0.129607E-04 779.7737719 1.55660 3.35z-02 Q 5 F1g 2 2 5 F1u 3 3.281490 0.508281z-05 779.573779 1.11z-02 P 6 A1g 1 5 F1u 1 1.562614 0.106400E-04 779.7737379 1.33z-02 P 6 F2g 1 5 F2u 3 3.281490 0.129607E-04 779.773129 4 44400E-04 F2u 3 5 F2u 3 3.281490 0.129607E-04 779.773129 4 44400E-04 F2u 3 3.281490 0.129607E-04 779.78368 3.35z-02 Q 5 F1g 2 5 F1		7.13E-03	-	4		1	3		1	1.562614	0.354800E-05
778.029475 2.85E-02 P 4 E 0 1 3 E U 2 1.562614 0.141920E-04 780.029743 2.15E-02 Q 3 F19 1 3 F1U 1 0.937569 0.830352E-05 779.592233 2.14E-02 P 4 F19 1 3 F1U 2 1.562614 0.106440E-04 780.029290 2.15E-02 Q 3 F29 1 3 F2U 1 0.468784 0.594444E-05 779.593205 2.14E-02 P 4 F29 1 3 F2U 2 0.937569 0.830352E-05 779.593205 2.14E-02 Q 3 F29 1 3 F2U 2 0.937569 0.830352E-05 780.625616 4.60E-02 R 3 A29 1 4 A1U 1 1.562614 0.354800E-05 780.465216 4.60E-02 R 3 A29 1 4 A2U 1 0.937569 0.138392E-04 780.029807 3.7E-03 Q 4 A19 1 4 A1U 1 1.562614 0.354800E-05 779.59326 3.65E-02 P 5 F19 1 4 E U 2 1.562614 0.354800E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 F19 1 4 E U 2 1.562614 0.354800E-05 779.483263 3.65E-02 P 5 F19 1 4 F1U 2 1.562614 0.354800E-05 779.4834366 2.76E-02 P 5 F19 1 4 F1U 2 1.562614 0.354800E-05 779.4834366 2.74E-02 P 5 F19 1 4 F1U 2 1.562614 0.354800E-05 780.027875 2.75E-02 Q 4 F29 1 4 F1U 2 1.562614 0.354800E-05 780.027875 2.75E-02 Q 4 F29 1 4 F1U 2 1.562614 0.354800E-05 780.6263 2.76E-02 R 3 F29 1 4 F1U 2 1.562614 0.354800E-05 780.027875 2.75E-02 Q 4 F29 1 4 F1U 2 1.562614 0.354800E-05 780.6263 2.74E-02 P 5 F19 1 4 F1U 2 1.562614 0.354800E-05 780.6263 2.74E-02 P 5 F19 1 4 F1U 2 1.562614 0.354800E-05 780.627879 1.12E-02 R 4 A19 1 5 A1U 1 1.562614 0.354800E-05 780.62799 1.12E-02 R 4 A19 1 5 A1U 1 1.562614 0.354800E-05 780.627879 1.12E-02 R 4 A19 1 5 A1U 1 1.562614 0.354800E-05 779.37779 1 1.55E-02 R 4 A19 1 5 A1U 1 1.562614 0.354800E-05 779.377191 5.55E-02 P 6 A29 1 5 A2U 1 1.562614 0.354800E-05 779.377191 5.55E-02 P 6 A29 1 5 A2U 1 1.562614 0.354800E-05 779.377199 4.47E-02 P 5 F19 1 5 F1U 1 1.562614 0.354800E-05 779.377199 4.47E-02 P 5 F19 1 5 F1U 1 1.562614 0.354800E-05 779.377199 4.47E-02 P 6 F19 1 5 F1U 1 1.562614 0.16490E-04 780.026903 3.35E-02 P 6 F19 1 5 F1U 1 1.562614 0.16490E-04 780.026903 3.35E-02 P 6 F19 1 5 F1U 1 1.562614 0.16490E-04 780.026903 3.35E-02 P 6 F19 1 5 F1U 1 1.562614 0.16490E-04 780.026903 3.35E-02 P 6 F19 1 5 F1U 1 1.562614 0.106440E-04 780.026808 3.35E-02 P 6 F19 1 5 F1U 1 1.562614 0.106440E-04 780.026808 3.35E											
780.029743											
780. 356662 2.15E-02 R 2 F2g 1 3 F2u 2 0.468784 0.594444E-05 780. 02920 2.15E-02 Q 3 F2g 1 3 F2u 3 1.562614 0.106440E-04 780. 029707 9.17E-03 Q 4 Alg 1 4 Alu 1 1.562614 0.354800E-05 780. 04886 3.67E-02 Q 4 Eg 1 4 Eu 1 1.562614 0.141920E-04 780. 46847 2.76E-02 P 5 Eg 1 4 Eu 1 1.562614 0.141920E-04 780. 46847 2.76E-02 P 5 Eg 1 4 Elu 2 2.343922 0.172809E-04 780. 46502 2.74E-02 P 5 Flg 1 4 Flu 1 1.562614 0.106440E-04 779. 483456 2.74E-02 P 5 Flg 1 4 Flu	780.029743	2.15E-02	Q	3	F1g	1	3	F1u	1	0.937569	0.830352E-05
780.029290											
779. 593205											
780. 465216			P	-	F2g						
780. 028886											
780. 464875				4							
780.029228											
779. 481792							•				
780. 465026	779.481792	2.74E-02		5		2	4		3	2.343922	
780. 027875			-								
779.482199											
779.373774	779.482199	2.74E-02		5	F2g	1	4	F2u	3	2.343922	0.129607E-04
779.371791 5.55E-02 P 6 A2g 1 5 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 780.073091 4.49E-02 R 4 E g 1 5 E u 1 1.562614 0.141920E-04 780.026999 4.47E-02 Q 5 E g 1 5 E u 2 2.343922 0.172809E-04 779.371298 4.44E-02 P 6 E g 1 5 E u 3 3.281490 0.203313E-04 780.572968 3.35E-02 Q 5 F1g 1 5 F1u 1 1.562614 0.106440E-04 780.026703 3.35E-02 Q 5 F1g 1 5 F1u 2 2.343922 0.129607E-04 780.029188 3.35E-02 Q 5 F1g 2 5 F1u 3 2.343922 0.129607E-04 779.373469 3.33E-02 P 6 F1g 1 5 F1u 4 3.281490 0.152484E-04 780.573464 3.37E-02 R 4 F2g 1 5 F2u 1 1.562614 0.106440E-04 780.028568 3.35E-02 Q 5 F2g 1 5 F2u 2 2.343922 0.129607E-04 779.373123 3.33E-02 P 6 F2g 1 5 F2u 2 2.343922 0.129607E-04 779.373123 3.33E-02 Q 6 A2g 1 5 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 780.028568 3.35E-02 Q 6 F2g 1 5 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 780.028568 3.35E-02 Q 6 A2g 1 6 A2u 1 3.281490 0.152484E-04 780.028568 1.31E-02 Q 6 A1g 1 6 A1u 1 3.281490 0.508281E-05 780.028016 6.57E-02 Q 6 A2g 1 6 A2u 1 3.281490 0.508281E-05 780.028016 6.57E-02 Q 6 A2g 1 6 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 779.262303 6.53E-02 P 7 A2g 1 6 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 779.262303 6.53E-02 P 7 F2g 1 6 E u 1 2.343922 0.172809E-04 780.028808 5.25E-02 Q 6 E g 1 6 E u 1 2.343922 0.172809E-04 780.028808 5.25E-02 Q 6 E g 1 6 E u 1 2.343922 0.172809E-04 780.028808 5.25E-02 Q 6 F1g 1 6 E u 1 2.343922 0.172809E-04 780.68808 5.25E-02 Q 6 F1g 1 6 F1u 2 3.281490 0.203313E-04 779.260309 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F2g 2 6 F2u 4 4.375320 0.175023E-04 779.260											
780.573091											
779.371298	780.573091	4.49E-02	-	4	Εğ	1	5	Εu	1	1.562614	0.141920E-04
780.572968 3.37E-02 R 4 F1g 1 5 F1u 1 1.562614 0.106440E-04 780.026703 3.35E-02 Q 5 F1g 1 5 F1u 2 2.343922 0.129607E-04 780.029188 3.35E-02 Q 6 F1g 1 5 F1u 3 2.343922 0.129607E-04 779.373469 3.35E-02 P 6 F1g 1 5 F1u 4 3.281490 0.152484E-04 780.028568 3.35E-02 P 6 F2g 1 5 F2u 1 1.562614 0.106440E-04 779.371421 3.33E-02 P 6 F2g 1 5 F2u 2 2.343922 0.129607E-04 779.373123 3.33E-02 P 6 F2g 1 5 F2u 4 3.281490 0.152484E-04 780.028016 6.57E-02 Q 6 A2g 1 6 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 779.263187 5.2EE-02 R											
780.026703			-								
779.373469 3.33E-02 P 6 F1g 1 5 F1u 4 3.281490 0.152484E-04 780.573464 3.37E-02 R 4 F2g 1 5 F2u 1 1.562614 0.106440E-04 780.028568 3.35E-02 Q 5 F2g 1 5 F2u 2 2.343922 0.129607E-04 779.371421 3.33E-02 P 6 F2g 1 5 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 779.373123 3.33E-02 P 6 F2g 2 5 F2u 4 3.281490 0.152484E-04 780.024938 1.31E-02 Q 6 A1g 1 6 A1u 1 3.281490 0.508281E-05 780.028016 6.57E-02 Q 6 A2g 1 6 A2u 1 3.281490 0.508281E-05 780.028016 6.57E-02 Q 6 A2g 1 6 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 779.262303 6.53E-02 P 7 A2g 1 6 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.681461 5.28E-02 R 5 E g 1 6 E u 1 2.343922 0.172809E-04 780.028808 5.25E-02 Q 6 E g 1 6 E u 2 3.281490 0.203313E-04 779.263684 3.96E-02 R 5 F1g 2 6 F1u 1 2.343922 0.129607E-04 780.68614 3.96E-02 R 5 F1g 2 6 F1u 1 2.343922 0.129607E-04 780.681575 3.96E-02 R 5 F1g 2 6 F1u 1 2.343922 0.129607E-04 780.025423 3.94E-02 Q 6 F1g 1 6 F1u 2 2.343922 0.129607E-04 780.68668 3.92E-02 P 7 F1g 2 6 F1u 4 3.281490 0.152484E-04 779.263668 3.92E-02 P 7 F1g 2 6 F1u 4 3.281490 0.152484E-04 779.263668 3.92E-02 P 7 F1g 2 6 F1u 4 3.281490 0.152484E-04 779.263668 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 3 3.281490 0.152484E-04 779.263668 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 5 4.375320 0.175023E-04 780.025423 3.94E-02 Q 6 F2g 2 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.025673 3.94E-02 Q 6 F2g 2 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 779.263668 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 5 4.375320 0.175023E-04 780.025673 3.94E-02 Q 6 F2g 2 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 780.025673 3.94E-02 Q 6 F2g 1 6 F2u 1 3.281490 0.152484E-04 780.025673 3.94E-02 Q 6 F2g 1 6 F2u 1 3.281490 0.152484E-04 779.262877 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 1 5 3.281490 0.152484E-04 780.025673 3.94E-02 Q 7 F2g 1 6 F2u 1 3.281490 0.152484E-04 780.025673 3.94E-02 Q 7 F2g 1 6 F2u 1 3.281490 0.152484E-04 780.025673 3.94E-02 Q 7 F2g 1 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 780.025675 3.94E-02 Q 7 R2g 1 6 F2u 1 3.281490 0.152484E-04 780.025605 7.54E-02 R 6 A2g 1 7 A2u 1 3.281490 0.152484E-04 780.025605 7.54E-02 R 6 A2g 1 7 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 780.025605 7.54E-02 Q 7 R2g 1 7 E u 3 5.625412 0.262898E-04 779.15		3.35E-02		5	F1g	1	5		2		
780.573464 3.37E-02 R 4 F2g 1 5 F2u 1 1.562614 0.106440E-04 780.028568 3.35E-02 Q 5 F2g 1 5 F2u 2 2.343922 0.129607E-04 779.373123 3.33E-02 P 6 F2g 1 5 F2u 4 3.281490 0.152484E-04 780.024938 1.31E-02 Q 6 A1g 1 6 A1u 1 3.281490 0.152484E-04 780.028016 6.57E-02 Q 6 A2g 1 6 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 779.262303 6.53E-02 P 7 A2g 1 6 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.6881661 5.28E-02 R 5 E g 1 6 E u 2 3.281490 0.203313E-04 779.263187 5.22E-02 Q 6 E g 1 6 E u 2 3.281490 0.203313E-04 77											
779.371421 3.33E-02 P 6 F2g 1 5 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 779.373123 3.33E-02 P 6 F2g 2 5 F2u 4 3.281490 0.152484E-04 779.373123 3.33E-02 Q 6 A1g 1 6 A1u 1 3.281490 0.508281E-05 780.028016 6.57E-02 Q 6 A2g 1 6 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 779.262303 6.53E-02 P 7 A2g 1 6 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.681461 5.28E-02 R 5 E g 1 6 E u 1 2.343922 0.172809E-04 780.028808 5.25E-02 Q 6 E g 1 6 E u 2 3.281490 0.203313E-04 779.263187 5.22E-02 P 7 E g 1 6 E u 3 4.375320 0.233364E-04 780.680514 3.96E-02 R 5 F1g 2 6 F1u 1 2.343922 0.129607E-04 780.681575 3.96E-02 R 5 F1g 1 6 F1u 2 2.343922 0.129607E-04 780.681575 3.96E-02 R 5 F1g 1 6 F1u 2 2.343922 0.129607E-04 780.025423 3.94E-02 Q 6 F1g 1 6 F1u 3 3.281490 0.152484E-04 779.263688 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 5 4.375320 0.175023E-04 780.680644 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F1u 5 4.375320 0.175023E-04 780.6806848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F1u 5 4.375320 0.175023E-04 780.680848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.680848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.680848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.680848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F2u 1 3.281490 0.152484E-04 779.263668 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.025973 3.94E-02 Q 6 F2g 2 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 2 6 F2u 4 4.375320 0.175023E-04 779.262877 3.92E-02 P 7 F2g 2 6 F2u 4 4.375320 0.175023E-04 779.262877 3.92E-02 P 7 F2g 2 6 F2u 4 4.375320 0.175023E-04 779.262877 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 779.262877 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 4 4.375320 0.175023E-04 779.262877 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 5 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 5 3.281490 0.25248E-05 779.149350 1.50E-02 P 8 E g 1 7 E u 1 3.281490 0.203313E-04 780.024129 6.03E-02 P 8 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.233364E-04 780.02											
779.373123											
780.024938 1.31E-02 Q 6 A1g 1 6 A1u 1 3.281490 0.508281E-05 780.028016 6.57E-02 Q 6 A2g 1 6 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 779.262303 6.53E-02 P 7 A2g 1 6 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.681461 5.28E-02 R 5 E g 1 6 E u 1 2.343922 0.172809E-04 780.028808 5.25E-02 Q 6 E g 1 6 E u 1 2.343922 0.172809E-04 780.680614 3.96E-02 R 5 F1g 1 6 E u 3 4.375320 0.2331364E-04 780.681575 3.96E-02 R 5 F1g 1 6 F1u 1 2.343922 0.129607E-04 780.025423 3.94E-02 Q 6 F1g 1 6 F1u 2 2.343922 0.129607E-04 <t< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></t<>											
779.262303 6.53E-02 P 7 A2g 1 6 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.681461 5.28E-02 R 5 E g 1 6 E u 1 2.343922 0.172809E-04 780.028808 5.25E-02 Q 6 E g 1 6 E u 2 3.281490 0.203313E-04 779.263187 5.22E-02 P 7 E g 1 6 E u 3 4.375320 0.233364E-04 780.680614 3.96E-02 R 5 F1g 2 6 F1u 1 2.343922 0.129607E-04 780.680614 3.96E-02 R 5 F1g 1 6 F1u 2 2.343922 0.129607E-04 780.025423 3.94E-02 Q 6 F1g 1 6 F1u 3 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 2 6 F1u 4 4.375320 0.175023E-04 779.263668 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 5 4.375320 0.175023E-04 780.025973 3.94E-02 Q 6 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.025973 3.94E-02 Q 6 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.025973 3.94E-02 Q 6 F2g 2 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.028613 3.94E-02 Q 6 F2g 2 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 1 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 2 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 1 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 1 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 1 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 1 3.281490 0.152484E-04 780.789665 1.52E-02 R 6 A1g 1 7 A1u 1 3.281490 0.508281E-05 779.149350 1.50E-02 P 8 A1g 1 7 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 780.025605 7.54E-02 Q 7 A2g 1 7 A2u 1 3.281490 0.203313E-04 780.788414 7.59E-02 R 6 A2g 1 7 A2u 1 3.281490 0.203313E-04 780.788410 6.07E-02 R 6 E g 1 7 E u 1 3.281490 0.203313E-04 780.788107 6.07E-02 R 6 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.233364E-04 780.788107 6.07E-02 R 6 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.233364E-04 780.024129 6.03E-02 P 8 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.233364E-04 780.024129 6.03E-02 P 8 E g 1 7 E u 3 5.625412 0.262898E-04 779.149572 5.99E-02 P 8 E g 1 7 E u 3 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04 779.15		1.31E-02		6					1		
780.681461 5.28E-02 R 5 E g 1 6 E u 1 2.343922 0.172809E-04 780.028808 5.25E-02 Q 6 E g 1 6 E u 2 3.281490 0.203313E-04 779.263187 5.22E-02 P 7 E g 1 6 E u 2 3.281490 0.233364E-04 780.680614 3.96E-02 R 5 F1g 1 6 F1u 1 2.343922 0.129607E-04 780.681575 3.96E-02 R 5 F1g 1 6 F1u 2 2.343922 0.129607E-04 780.025423 3.94E-02 Q 6 F1g 1 6 F1u 3 3.281490 0.152484E-04 779.263699 3.92E-02 P 7 F1g 2 6 F1u 4 4.375320 0.175023E-04 780.680848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04											
780.028808 5.25E-02 Q 6 E g 1 6 E u 2 3.281490 0.203313E-04 779.263187 5.22E-02 P 7 E g 1 6 E u 3 4.375320 0.233364E-04 780.680614 3.96E-02 R 5 F1g 2 6 F1u 1 2.343922 0.129607E-04 780.681575 3.96E-02 R 5 F1g 1 6 F1u 2 2.343922 0.129607E-04 780.025423 3.94E-02 Q 6 F1g 1 6 F1u 2 3.481490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 4 4.375320 0.175023E-04 779.263668 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 5 4.375320 0.175023E-04 780.680848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780											
780.680614 3.96E-02 R 5 F1g 2 6 F1u 1 2.343922 0.129607E-04 780.681575 3.96E-02 R 5 F1g 1 6 F1u 2 2.343922 0.129607E-04 780.025423 3.94E-02 Q 6 F1g 1 6 F1u 3 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 2 6 F1u 4 4.375320 0.175023E-04 779.263668 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 5 4.375320 0.175023E-04 780.680848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.025973 3.94E-02 Q 6 F2g 2 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 780.025973 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 780.786613 3.92E-02 P	780.028808	5.25E-02		6	Εğ	1	6		2	3.281490	0.203313E-04
780.681575 3.96E-02 R 5 F1g 1 6 F1u 2 2.343922 0.129607E-04 780.025423 3.94E-02 Q 6 F1g 1 6 F1u 3 3.281490 0.152484E-04 779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 2 6 F1u 4 4.375320 0.175023E-04 779.263668 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 5 4.375320 0.175023E-04 780.680848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.025973 3.94E-02 Q 6 F2g 1 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 780.028613 3.94E-02 Q 6 F2g 1 6 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 3 3.281490 0.175023E-04 780.789665 1.52E-02 R											
779.260509 3.92E-02 P 7 F1g 2 6 F1u 4 4.375320 0.175023E-04 779.263668 3.92E-02 P 7 F1g 1 6 F1u 5 4.375320 0.175023E-04 780.680848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.025973 3.94E-02 Q 6 F2g 2 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 780.028613 3.94E-02 Q 6 F2g 1 6 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 2 6 F2u 4 4.375320 0.175023E-04 779.262877 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 5 4.375320 0.175023E-04 780.789665 1.52E-02 R 6 A1g 1 7 A1u 1 3.281490 0.508281E-05 780.788414 7.59E-02 R 6 A2g 1 7 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 780.025605 7.54E-02 Q 7 A2g 1 7 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 780.025605 7.54E-02 Q 7 A2g 1 7 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.788107 6.07E-02 R 6 E g 1 7 E u 1 3.281490 0.203313E-04 780.024129 6.03E-02 Q 7 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.2033164E-04 780.024129 6.03E-02 P 8 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.23364E-04 779.149572 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04											
779.263668 3.92E-02 P 7 Flg 1 6 Flu 5 4.375320 0.175023E-04 780.680848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.025973 3.94E-02 Q 6 F2g 2 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 780.028613 3.94E-02 Q 6 F2g 1 6 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 2 6 F2u 4 4.375320 0.175023E-04 779.262877 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 5 4.375320 0.175023E-04 780.789665 1.52E-02 R 6 A1g 1 7 A1u 1 3.281490 0.508281E-05 779.149350 1.50E-02 P 8 A1g 1 7 A1u 2 5.625412 0.657245E-05 780.788414 7.59E-02 R 6 A2g 1 7 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 780.025605 7.54E-02 Q 7 A2g 1 7 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.788107 6.07E-02 R 6 E g 1 7 E u 1 3.281490 0.203313E-04 780.024129 6.03E-02 Q 7 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.2033164E-04 779.149572 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04						1					
780.680848 3.96E-02 R 5 F2g 1 6 F2u 1 2.343922 0.129607E-04 780.025973 3.94E-02 Q 6 F2g 2 6 F2u 2 3.281490 0.152484E-04 780.028613 3.94E-02 Q 6 F2g 1 6 F2u 3 3.281490 0.152484E-04 779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 2 6 F2u 4 4.375320 0.175023E-04 779.262877 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 5 4.375320 0.175023E-04 780.789665 1.52E-02 R 6 A1g 1 7 A1u 1 3.281490 0.508281E-05 779.149350 1.50E-02 P 8 A1g 1 7 A1u 2 5.625412 0.657245E-05 780.788414 7.59E-02 R 6 A2g 1 7 A2u 2 5.625412 0.657245E-05 780.788414 7.59E-02 R 6 A2g 1 7 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 780.025605 7.54E-02 Q 7 A2g 1 7 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.788107 6.07E-02 R 6 E g 1 7 E u 1 3.281490 0.203313E-04 780.024129 6.03E-02 Q 7 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.233364E-04 789.024129 6.03E-02 P 8 E g 1 7 E u 3 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04	779.260509 779.263668					2 1					
780.028613				5		1			1	2.343922	
779.260709 3.92E-02 P 7 F2g 2 6 F2u 4 4.375320 0.175023E-04 779.262877 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 5 4.375320 0.175023E-04 780.789665 1.52E-02 R 6 A1g 1 7 A1u 1 3.281490 0.508281E-05 779.149350 1.50E-02 P 8 A1g 1 7 A1u 2 5.625412 0.657245E-05 780.788414 7.59E-02 R 6 A2g 1 7 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 780.025605 7.54E-02 Q 7 A2g 1 7 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.788107 6.07E-02 R 6 E g 1 7 E u 1 3.281490 0.20313E-04 780.024129 6.03E-02 Q 7 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.23364E-04 779.149572 5.99E-02 P 8 E g 1 7 E u 3 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04						2					
779.262877 3.92E-02 P 7 F2g 1 6 F2u 5 4.375320 0.175023E-04 780.789665 1.52E-02 R 6 A1g 1 7 A1u 1 3.281490 0.508281E-05 779.149350 1.50E-02 P 8 A1g 1 7 A1u 2 5.625412 0.657245E-05 780.788414 7.59E-02 R 6 A2g 1 7 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 780.025605 7.54E-02 Q 7 A2g 1 7 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.788107 6.07E-02 R 6 E g 1 7 E u 1 3.281490 0.203313E-04 780.024129 6.03E-02 Q 7 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.233364E-04 780.142572 5.99E-02 P 8 E g 1 7 E u 3 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04											
779.149350	779.262877	3.92E-02		7	F2g	1	6	F2u	5	4.375320	0.175023E-04
780.788414 7.59E-02 R 6 A2g 1 7 A2u 1 3.281490 0.254141E-04 780.025605 7.54E-02 Q 7 A2g 1 7 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.788107 6.07E-02 R 6 E g 1 7 E u 1 3.281490 0.203313E-04 780.024129 6.03E-02 Q 7 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.233364E-04 779.149572 5.99E-02 P 8 E g 1 7 E u 3 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04											
780.025605 7.54E-02 Q 7 A2g 1 7 A2u 2 4.375320 0.291705E-04 780.788107 6.07E-02 R 6 E g 1 7 E u 1 3.281490 0.203313E-04 780.024129 6.03E-02 Q 7 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.23336E-04 779.149572 5.99E-02 P 8 E g 1 7 E u 3 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04											
780.024129 6.03E-02 Q 7 E g 1 7 E u 2 4.375320 0.233364E-04 779.149572 5.99E-02 P 8 E g 1 7 E u 3 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04	780.025605	7.54E-02	Q		A2g	1	7	A2u	2	4.375320	0.291705E-04
779.149572 5.99E-02 P 8 E g 1 7 E u 3 5.625412 0.262898E-04 779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04				6							
779.153274 5.99E-02 P 8 E g 2 7 E u 4 5.625412 0.262898E-04											
/U/O /U/O / O E E DO D C =1 1 7 =1 1 0 001/00 0 1=0/0/- 0/	779.153274	5.99E-02	Р	8	Εg	2		Εu	4	5.625412	0.262898E-04
780.789469 4.55E-02 R 6 F1g 1 7 F1u 1 3.281490 0.152484E-04 780.023349 4.52E-02 Q 7 F1g 1 7 F1u 2 4.375320 0.175023E-04				6 7							
780.028441 4.52E-02 Q 7 F1g 2 7 F1u 3 4.375320 0.175023E-04							7				
779.149490 4.49E-02 P 8 F1g 1 7 F1u 4 5.625412 0.197174E-04	779.149490	4.49E-02	P	8	F1g	1	7	F1u	4	5.625412	0.197174E-04
779.152565 4.49E-02 P 8 F1g 2 7 F1u 5 5.625412 0.197174E-04 780.788183 4.55E-02 R 6 F2g 1 7 F2u 1 3.281490 0.152484E-04											
780.789248 4.55E-02 R 6 F2g 2 7 F2u 2 3.281490 0.152484E-04	780.789248	4.55E-02		6	F2g	2	7	F2u	2	3.281490	0.152484E-04
780.024642 4.52E-02 Q 7 F2g 1 7 F2u 3 4.375320 0.175023E-04				7	F2g					4.375320	
780.028110											
779.153483 4.49E-02 P 8 F2g 2 7 F2u 6 5.625412 0.197174E-04	779.153483	4.49E-02	Р	8	F2g	2	7	F2u	6	5.625412	0.197174E-04
780.028215			Q P								

Suite du tableau (III-3).

Fréquence	Intensité	<u>J</u> ''	C''	n'' J	C	n	Energie inf	Population inf
780.896502 779.043321	8.56E-02 8.43E-02	R 7 P 9	A2g A2g	1 8 1 8	A2u A2u	1 2	4.375320 7.031765	0.291705E-04 0.364815E-04
780.897101	6.84E-02	R 7	E g	1 8	E u	1	4.375320	0.233364E-04
780.021745	6.79E-02	Q 8	E g	2 8	Εu	2	5.625412	0.262898E-04
780.027838	6.79E-02	Q 8	Εg	1 8	Εu	3	5.625412	0.262898E-04
779.040859 780.895316	6.74E-02 5.13E-02	P 9 R 7	E g F1q	1 8 2 8	E u F1u	4 1	7.031765 4.375320	0.291852E-04 0.175023E-04
780.897428	5.13E-02	R 7	F1g	1 8	F1u	2	4.375320	0.175023E-04
780.022917	5.10E-02	Q 8	F1g	2 8	F1u	3	5.625412	0.197174E-04
780.027978 779.038032	5.10E-02 5.06E-02	Q 8 P 9	F1g F1g	1 8 3 8	F1u F1u	4 5	5.625412 7.031765	0.197174E-04 0.218889E-04
779.030032	5.05E-02	P 9	F1g	2 8	F1u	6	7.031765	0.218889E-04
779.042725	5.05E-02	Р 9	F1g	1 8	F1u	7	7.031765	0.218889E-04
780.895447 780.896890	5.13E-02 5.13E-02	R 7 R 7	F2g F2g	2 8 1 8	F2u F2u	1 2	4.375320 4.375320	0.175023E-04 0.175023E-04
780.021388	5.10E-02	Q 8	F2g F2g	2 8	F2u F2u	3	5.625412	0.173023E-04 0.197174E-04
780.024284	5.10E-02	Q 8	F2g	1 8	F2u	4	5.625412	0.197174E-04
779.038144	5.06E-02	P 9 P 9	F2g	2 8	F2u	5	7.031765	0.218889E-04
779.043060 781.002187	5.05E-02 1.90E-02	P 9 R 8	F2g A1g	$\begin{array}{cc} 1 & 8 \\ 1 & 9 \end{array}$	F2u A1u	6 1	7.031765 5.625412	0.218889E-04 0.657245E-05
780.021265	1.89E-02	Q 9	A1g	1 9	A1u	2	7.031765	0.729630E-05
778.931115	1.87E-02	P 10	A1g	1 9	A1u	3	8.594379	0.800412E-05
780.018875 778.926469	9.43E-02 9.34E-02	Q 9 P 10	A2g A2g	$\begin{matrix} 1 & 9 \\ 1 & 9 \end{matrix}$	A2u A2u	1 2	7.031765 8.594379	0.364815E-04 0.400206E-04
781.002339	7.60E-02	R 8	E q	1 9	E u	1	5.625412	0.262898E-04
781.004931	7.60E-02	R 8	Εğ	2 9	Εu	2	5.625412	0.262898E-04
780.023117 778.926353	7.54E-02 7.48E-02	Q 9 P 10	E g E g	$\begin{array}{cc} 1 & 9 \\ 1 & 9 \end{array}$	E u E u	3 4	7.031765 8.594379	0.291852E-04 0.320165E-04
778.920333	7.48E-02 7.48E-02	P 10 P 10	E g	2 9	Eu	5	8.594379	0.320165E-04
781.002283	5.70E-02	R 8	F1g	1 9	F1u	1	5.625412	0.197174E-04
781.004426	5.70E-02	R 8	F1g	2 9	F1u	2	5.625412	0.197174E-04
780.019901 780.022754	5.66E-02 5.66E-02	Q 9 Q 9	F1g F1g	1 9 2 9	F1u F1u	3 4	7.031765 7.031765	0.218889E-04 0.218889E-04
780.027779	5.66E-02	Q 9	F1g	3 9	F1u	5	7.031765	0.218889E-04
778.930049	5.61E-02	P 10	F1g	1 9	F1u	6	8.594379	0.240124E-04
778.932080 781.003863	5.61E-02 5.70E-02	P 10 R 8	F1g F2g	2 9 1 9	F1u F2u	7 1	8.594379 5.625412	0.240124E-04 0.197174E-04
781.005082	5.70E-02	R 8	F2g	2 9	F2u F2u	2	5.625412	0.197174E-04 0.197174E-04
780.019325	5.66E-02	Q 9	F2g	1 9	F2u	3	7.031765	0.218889E-04
780.027582	5.66E-02	Q 9 P 10	F2g	2 9 1 9	F2u	4 5	7.031765 8.594379	0.218889E-04
778.926390 778.929668	5.61E-02 5.61E-02	P 10 P 10	F2g F2g	1 9 2 9	F2u F2u	6	8.594379	0.240124E-04 0.240124E-04
778.932771	5.61E-02	P 10	F2g	3 9	F2u	7	8.594379	0.240124E-04
781.111659	2.09E-02	R 9	A1g	1 10	A1u	1	7.031765	0.729630E-05
780.019462 781.112710	2.07E-02 1.04E-01	Q 10 R 9	A1g A2g	$\begin{array}{cc} 1 & 10 \\ 1 & 10 \end{array}$	A1u A2u	2 1	8.594379 7.031765	0.800412E-05 0.364815E-04
780.027264	1.03E-01	Q 10	A2g	1 10	A2u	2	8.594379	0.400206E-04
778.818010	1.02E-01	P 11	A2g	1 10	A2u	3	10.313255	0.434722E-04
781.110887 780.017145	8.35E-02 8.27E-02	R 9 Q 10	E g E g	1 10 2 10	E u E u	1 2	7.031765 8.594379	0.291852E-04 0.320165E-04
780.017143	8.27E-02	Q 10 Q 10	E g	1 10	Eu	3	8.594379	0.320165E-04
778.818532	8.19E-02	P 11	Εg	2 10	Εu	4	10.313255	0.347778E-04
778.821946 781.108862	8.19E-02 6.26E-02	P 11 R 9	E g F1g	1 10 3 10	E u F1u	5	10.313255 7.031765	0.347778E-04 0.218889E-04
781.110862	6.26E-02	R 9 R 9	F1g	3 10 2 10	F1u F1u	1 2	7.031765	0.218889E-04
781.112264	6.26E-02	R 9	F1g	1 10	F1u	3	7.031765	0.218889E-04
780.017715	6.21E-02	Q 10	F1g	2 10	F1u	4	8.594379	0.240124E-04
780.021262 778.814376	6.21E-02 6.15E-02	Q 10 P 11	F1g F1g	1 10 3 10	F1u F1u	5 6	8.594379 10.313255	0.240124E-04 0.260833E-04
778.820139	6.14E-02	P 11	F1g	2 10	F1u	7	10.313255	0.260833E-04
778.822158	6.14E-02	P 11	F1g	1 10	F1u	8	10.313255	0.260833E-04
781.108942 781.112514	6.26E-02 6.26E-02	R 9 R 9	F2g F2g	2 10 1 10	F2u F2u	1 2	7.031765 7.031765	0.218889E-04 0.218889E-04
780.016513	6.21E-02	Q 10	F2g	3 10	F2u	3	8.594379	0.240124E-04
780.021933	6.21E-02	Q 10	F2g	2 10	F2u	4	8.594379	0.240124E-04
780.027408 778.814427	6.21E-02 6.15E-02	Q 10 P 11	F2g F2g	1 10 3 10	F2u F2u	5 6	8.594379 10.313255	0.240124E-04 0.260833E-04
778.818329	6.14E-02	P 11	F2g	2 10	F2u F2u	7	10.313255	0.260833E-04
778.821448	6.14E-02	P 11	F2g	1 10	F2u	8	10.313255	0.260833E-04
781.218732	2.27E-02	R 10	A1g	1 11	A1u	1	8.594379	0.800412E-05
778.702087 778.711537	2.22E-02 2.22E-02	P 12 P 12	Alg Alg	$\begin{array}{cc} 1 & 11 \\ 2 & 11 \end{array}$	A1u A1u	2 3	12.188392 12.188392	0.936588E-05 0.936588E-05
781.215286	1.13E-01	R 10	A2g	1 11	A2u	1	8.594379	0.400206E-04
780.021078	1.12E-01	Q 11	A2g	1 11	A2u	2	10.313255	0.434722E-04
778.710507 781.215201	1.11E-01 9.08E-02	P 12 R 10	A2g E g	$\begin{array}{cc} 1 & 11 \\ 1 & 11 \end{array}$	A2u E u	3 1	12.188392 8.594379	0.468294E-04 0.320165E-04
781.219725	9.08E-02	R 10	E g	2 11	Eu	2	8.594379	0.320165E-04
780.014119	8.99E-02	Q 11	Εg	1 11	Εu	3	10.313255	0.347778E-04
780.020133 778.702137	8.99E-02 8.89E-02	Q 11 P 12	E g E g	2 11 1 11	E u E u	4 5	10.313255 12.188392	0.347778E-04 0.374635E-04
778.702137	8.89E-02	P 12	E g	2 11	Eu	6	12.188392	0.374635E-04
781.217927	6.81E-02	R 10	F1g	1 11	F1u	ĺ	8.594379	0.240124E-04

Suite du tableau (III-3).

181, 1914	Fréquence	Intensité	J''	C ''	n''	J	C	n	Energie inf	Population inf
780. 017381										
788.027194			•							
778. 702120 6. 6.67e-0.2 p 12 pig 2 11 pig 3 11 pig 6 12.188392 0.280376e-04 pig 778. 706608 6. 6.67e-0.2 p 12 pig 2 11 pig 2 11 pig 7 11 pig 7 12.188392 0.280376e-04 pig 7 12.1828 6. 6.67e-0.2 p 12 pig 9 111 pig 7 12.1828 0.280376e-04 pig 7 12.1828 6. 6.81e-0.2 R 10 pig 9 111 pig 1 12.18393 0.280376e-04 pig 7 12.1828 6. 81e-0.2 R 10 pig 9 111 pig 1 12.18393 0.280376e-04 pig 7 12.1828 6. 81e-0.2 R 10 pig 9 111 pig 1 12.18393 0.280376e-04 pig 7 12.1828 6. 81e-0.2 R 10 pig 9 111 pig 1 12.18393 0.280376e-04 pig 7 12.1828 6. 81e-0.2 R 10 pig 9 11 pig 1 12.1828 6. 8. 594379 0.240124e-04 pig 7 12.1828 6. 81e-0.2 R 10 pig 9 11 pig 1 12.18393 0.280376e-04 pig 1 12.1828 6. 6. 61e-0.2 R 10 pig 1 12.1828 6. 8. 594379 0.240124e-04 pig 1 12.1828 6. 6. 61e-0.2 R 10 pig 1 12.1828 6. 8. 594379 0.240124e-04 pig 1 12.1828 6. 6. 61e-0.2 R 10 pig 1 12.1828										
778. 7113122. 6. 68.10-02. R 10. F20. 1 11. F20. 1 2. 8. 594379 0. 240124E-04. F81. 123288 6. 68.10-02. R 10. F20. 1 11. F20. 1 2. 8. 594379 0. 240124E-04. F81. 1220007 6. F81. 120007 6.			P 12							
781. 215228 6. 81E-02 R 10 F20 1 11 F2u 1 8.594379 0.240124E-04 781. 2250007 6. 81E-02 R 10 F20 2 11 F2u 3 8.594379 0.240124E-04 782. 220007 6. 81E-02 R 10 F20 3 11 F2u 3 8.594379 0.240124E-04 782. 220007 6. 81E-02 R 10 F20 3 11 F2u 3 8.594379 0.240124E-04 782. 220007 6. 67E-02 Q 11 F20 3 11 F2u 3 8.594379 0.240124E-04 780. 020503 6. 74E-02 Q 11 F20 3 11 F2u 6 10. 313255 0.260838E-04 780. 020503 6. 74E-02 Q 11 F20 3 11 F2u 7 12. 188392 0.260838E-04 788. 020507 6. 67E-02 P 12 F20 1 11 F2u 7 12. 188392 0.260838E-04 778. 709055 6. 67E-02 P 12 F20 1 11 F2u 7 12. 188392 0.260838E-04 778. 709055 6. 67E-02 P 12 F20 1 11 F2u 7 12. 188392 0.280976E-04 778. 709055 6. 67E-02 P 12 F20 1 11 F2u 7 12. 188392 0.280976E-04 778. 709055 6. 67E-02 P 12 F20 1 11 F2u 7 12. 188392 0.93588E-05 780. 026988 2. 42E-02 Q 12 Alg 1 12 Alu 1 21. 188392 0.93588E-05 780. 026988 2. 42E-02 Q 12 Alg 1 12 Alu 2 12. 188392 0.93588E-05 780. 026988 2. 42E-02 Q 12 Alg 1 12 Alu 1 12. 41u 3 14. 219791 0.93688E-05 780. 026988 2. 43E-02 Q 13 Alg 1 12 Alu 2 12. 188392 0.93588E-05 780. 026988 2. 43E-02 Q 13 Alg 1 12 Alu 3 14. 219791 0.900858E-05 780. 026988 2. 43E-02 Q 12 Alg 1 12 Alu 3 14. 219791 0.900858E-05 780. 026988 2. 43E-02 Q 12 Alg 1 12 Alu 3 14. 219791 0.900858E-05 780. 02698 2. 43E-02 Q 12 Alg 1 12 Alu 3 10. 333355 0.347778E-04 788. 026467 0.978E-02 R 11 E 9 1 12 E u 1 10. 313255 0.34778E-04 781. 324376 9.79E-02 R 11 E 9 1 12 E u 2 10. 313255 0.34778E-04 781. 324376 9.79E-02 R 11 E 9 1 12 E u 1 10. 313255 0.34778E-04 781. 324376 9.79E-02 R 11 E 9 1 12 E u 1 10. 313255 0.34778E-04 781. 324376 9.79E-02 R 11 E 9 1 12 E u 1 10. 313255 0.34778E-04 781. 324376 9.79E-02 R 11 E 9 1 12 E u 1 10. 313255 0.34778E-04 781. 324376 9.79E-02 R 11 E 9 1 12 E u 1 10. 313255 0.34778E-04 781. 324376 9.79E-02 R 11 E 9 1 12 E u 1 10. 313255 0.34778E-04 781. 324376 9.79E-02 R 11 E 9 1 12 E u 1 10. 313255 0.34778E-04 781. 324376 9.79E-02 R 11 E 9 1 12 E U 1 10. 313255 0.34778E-04 781. 324376 9.79E-02 R 11 E 9 1 12 E U 1 10. 313255 0.34778E-04 781. 324376 9.79E-02 R 12										
781, 127640 6. 81E-02 R 10 F26 2 11 F2u 2 8.594379 0.240124E-04 788.014983 6. 74E-02 Q 11 F26 1 11 F2u 3 8.594379 0.240124E-04 788.014983 6. 74E-02 Q 11 F26 1 11 F2u 4 10.313255 0.260838E-04 778.706377 6. 6. 74E-02 Q 11 F26 1 11 F2u 6 10.313255 0.260838E-04 778.706377 6. 6. 67E-02 P 12 F26 1 11 F2u 7 12.188392 0.280976E-04 778.706377 6. 6. 67E-02 P 12 F26 1 11 F2u 7 12.188392 0.280976E-04 778.706377 6. 6. 67E-02 P 12 F26 1 11 F2u 7 12.188392 0.280976E-04 778.710121 6. 67E-02 P 12 F26 1 11 F2u 8 12.188392 0.280976E-04 778.799056 6. 67E-02 P 12 F26 1 11 F2u 8 12.188392 0.280976E-04 778.799056 6. 67E-02 P 12 F26 1 11 F2u 9 11.188392 0.280976E-04 778.791057 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1										
780.014982										
780.020503 6.74E-02	781.220007	6.81E-02	R 10	F2g	3		F2u	3	8.594379	0.240124E-04
788.			•							
778. 790975 6 .6.7E-02 P 12 F26 1 11 F2U 7 12.188392 0.280976E-04 778. 779075 6 .6.7E-02 P 12 F29 2 11 F2U 8 12.188392 0.280976E-04 778. 778. 790976 6 .6.7E-02 P 12 F29 3 11 F2U 8 12.188392 0.280976E-04 778. 7910615 2 .42E-02 Q 12 F29 3 11 F2U 8 12.188392 0.280976E-04 778. 7910615 2 .42E-02 Q 12 Ady 1 12 Adu 1 12.188392 0.380976E-04 778. 794074 1.22E-01 R 11 Ady 1 12 Adu 1 12.188392 0.380976E-04 778. 794074 1.22E-01 R 11 Ady 1 12 Adu 1 10.313255 0.4877782E-04 780. 012667 1.21E-01 R 11 Ady 1 12 Adu 1 10.313255 0.4877782E-04 780. 01266 3 .68E-02 Q 12 Ady 1 12 Adu 1 14.189791 0.50068E-04 780. 01266 3 .68E-02 Q 12 E 9 1 12 E U 1 10.313255 0.487778E-04 780. 01266 3 .68E-02 Q 12 E 9 1 12 E U 1 10.313255 0.487778E-04 780. 01266 3 .68E-02 Q 12 E 9 1 12 E U 1 10.313255 0.487778E-04 780. 01266 7 .68E-02 Q 12 E 9 1 12 E U 1 10.313255 0.347778E-04 780. 01267 7 .34E-02 Q R 11 E 9 2 12 E U 1 10.313255 0.347778E-04 780. 01267 7 .34E-02 Q R 11 E 9 2 12 E U 1 10.313255 0.347778E-04 780. 01267 7 .34E-02 Q R 11 E 9 2 12 E U 1 10.313255 0.34638E-04 780. 01267 7 .34E-02 Q R 11 E 9 2 12 E U 1 10.313255 0.046838E-04 780. 01267 7 .34E-02 Q R 11 E 9 2 12 E U 1 10.313255 0.046838E-04 780. 01267 7 .34E-02 Q R 11 E 9 2 12 E U 1 10.313255 0.05638E-04 780. 01267 7 .34E-02 Q R 11 F19 1 12 F1U 1 10.313255 0.05638E-04 780. 01268 7 .76E-02 Q 1 12 F19 1 12 F1U 1 10.313255 0.266838E-04 780. 01268 7 .76E-02 Q 1 12 F19 1 12 F1U 1 10.313255 0.266838E-04 780. 01269 7 .76E-02 Q 1 12 F19 1 12 F1U 1 10.313255 0.266838E-04 780. 01269 7 .76E-02 Q 1 12 F19 1 12 F1U 1 10.313255 0.266838E-04 780. 01269 7 .76E-02 Q 1 12 F19 1 12 F1U 1 10.313255 0.266838E-04 780. 01269 7 .76E-02 Q 1 12 F19 1 12 F1U										
778. 790956 6.67E-02 P 12 F29 2 11 F20 8 12.188392 0.280976E-04 778. 71021 6.67E-02 P 12 F29 31 F20 9 12.188392 0.280976E-04 778. 100455 6.7E-02 P 12 A19 2 12 A29 12.188392 0.280976E-04 778. 100455 7.2E-02 P 13 A29 12 A										
780. 010455				F2g						
780.026968										
781. 323974 1. 22E-01 R 11			•					2		
781. 323974 1. 22E-01 R 11								3		
781.327047 9.79E-02 R 11 E G 2 12 E U 1 10.313255 0.347778E-04 780.015466 9.68E-02 Q 12 E G 2 12 E U 3 10.313255 0.347778E-04 780.026874 9.68E-02 Q 12 E G 2 12 E U 3 12.188392 0.374635E-04 7778.034324 9.68E-02 P 13 E G 1 12 E U 4 12.188392 0.374635E-04 7778.034324 9.57E-02 P 13 E G 1 12 E U 5 14.219731 0.40063E-04 7778.04024 9.68E-02 P 13 E G 1 12 E U 5 14.219731 0.40063E-04 778.1321247 7.34E-02 R 11 F 19 3 12 F 11 1 10.313255 0.26083E-04 781.327216 7.34E-02 R 11 F 19 3 12 F 11 1 10.313255 0.26083E-04 781.327216 7.34E-02 R 11 F 19 3 12 F 11 1 10.313255 0.26083E-04 780.010857 7.26E-02 Q 12 F 19 3 12 F 11 4 12.188392 0.280976E-04 780.010973 7.26E-02 Q 12 F 19 2 12 F 11 5 12.188392 0.280976E-04 780.026906 7.26E-02 Q 12 F 19 3 12 F 11 5 12.188392 0.280976E-04 7778.599432 7.18E-02 P 13 F 19 4 12 F 11 10 7 14.219791 0.300512E-04 7778.599432 7.18E-02 P 13 F 19 3 12 F 11 10 7 14.219791 0.300512E-04 778.599432 7.18E-02 P 13 F 19 3 12 F 11 10 7 14.219791 0.300512E-04 778.304662 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 11 10 7 14.219791 0.300512E-04 781.327219 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 11 10 7 14.219791 0.300512E-04 781.321285 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 11 10 8 14.219791 0.300512E-04 781.321285 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.332665 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.332665 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 3 12 F 20 3 10.313255 0.26083E-04 781.332665 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 3 12 F 20 3 10.313255 0.26083E-04 782.3328 8 8 8 8 8 8 8 8 8				A2g				1		
781.327047 9.79E-02 R 11 E G 2 12 E U 1 10.313255 0.347778E-04 780.015466 9.68E-02 Q 12 E G 2 12 E U 3 10.313255 0.347778E-04 780.026874 9.68E-02 Q 12 E G 2 12 E U 3 12.188392 0.374635E-04 7778.034324 9.68E-02 P 13 E G 1 12 E U 4 12.188392 0.374635E-04 7778.034324 9.57E-02 P 13 E G 1 12 E U 5 14.219731 0.40063E-04 7778.04024 9.68E-02 P 13 E G 1 12 E U 5 14.219731 0.40063E-04 778.1321247 7.34E-02 R 11 F 19 3 12 F 11 1 10.313255 0.26083E-04 781.327216 7.34E-02 R 11 F 19 3 12 F 11 1 10.313255 0.26083E-04 781.327216 7.34E-02 R 11 F 19 3 12 F 11 1 10.313255 0.26083E-04 780.010857 7.26E-02 Q 12 F 19 3 12 F 11 4 12.188392 0.280976E-04 780.010973 7.26E-02 Q 12 F 19 2 12 F 11 5 12.188392 0.280976E-04 780.026906 7.26E-02 Q 12 F 19 3 12 F 11 5 12.188392 0.280976E-04 7778.599432 7.18E-02 P 13 F 19 4 12 F 11 10 7 14.219791 0.300512E-04 7778.599432 7.18E-02 P 13 F 19 3 12 F 11 10 7 14.219791 0.300512E-04 778.599432 7.18E-02 P 13 F 19 3 12 F 11 10 7 14.219791 0.300512E-04 778.304662 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 11 10 7 14.219791 0.300512E-04 781.327219 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 11 10 7 14.219791 0.300512E-04 781.321285 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 11 10 8 14.219791 0.300512E-04 781.321285 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.32129 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.332665 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 1 10.313255 0.26083E-04 781.332665 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 3 12 F 20 3 10.313255 0.26083E-04 781.332665 7.34E-02 R 11 F 20 3 12 F 20 3 12 F 20 3 10.313255 0.26083E-04 782.3328 8 8 8 8 8 8 8 8 8								2		
781.327047 9.79E-02 R 11 E 0 1 12 E U 2 10.312555 0.347778E-04 780.015466 9.68E-02 Q 12 E 9 2 12 E U 3 12.188392 0.374635E-04 780.026874 9.68E-02 Q 12 E 9 1 12 E U 4 12.188392 0.374635E-04 778.594324 9.57E-02 P 13 E 9 1 12 E U 5 14.219791 0.400683E-04 778.594324 9.57E-02 P 13 E 9 1 12 E U 5 14.219791 0.400683E-04 778.594324 7.34E-02 R 11 F1g 3 12 F1U 1 10.313255 0.260833E-04 781.31247 7.34E-02 R 11 F1g 3 12 F1U 1 10.313255 0.260833E-04 780.010687 7.34E-02 R 11 F1g 3 12 F1U 1 10.313255 0.260833E-04 780.0109073 7.26E-02 Q 12 F1g 3 12 F1U 4 12.188392 0.380976E-04 780.0109073 7.26E-02 Q 12 F1g 1 12 F1U 5 12.188392 0.280976E-04 778.598536 7.18E-02 P 13 F1g 3 12 F1U 6 12.188392 0.300512E-04 778.599432 7.18E-02 P 13 F1g 3 12 F1U 6 12.188392 0.300512E-04 778.599432 7.18E-02 P 13 F1g 3 12 F1U 1 14.219791 0.300512E-04 778.599432 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F1U 1 14.219791 0.300512E-04 778.599432 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F1U 1 14.219791 0.300512E-04 778.599432 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F1U 1 0.41.219791 0.300512E-04 778.1324219 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 1 10.313255 0.260838E-04 780.132657 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 1 10.313255 0.260838E-04 780.134076 7.78E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 1 10.313255 0.260838E-04 780.104606 7.78E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 1 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 1 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 2 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 1 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 2 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 2 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 3 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 3 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 3 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 3 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 3 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 3 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2U 3 10.313255 0.260838E-04 780.104970 7.34E-02 R 11 F										
780. 0.15466 9				Eq	1					
778. 594324 9. 576-02 P 13 E g 2 12 E u 5 14.219791 0. 400683E-04 778. 6000284 9. 576-02 P 13 E g 1 12 E u 6 14.219791 0. 400683E-04 778. 1312247 7. 34E-02 R 11 F1g 3 12 F1u 1 10.313255 0. 260833E-04 781. 327216 7. 34E-02 R 11 F1g 1 12 F1u 2 10.313255 0. 260833E-04 781. 327216 7. 34E-02 R 11 F1g 1 12 F1u 1 10.313255 0. 260833E-04 780. 010877 7. 26E-02 Q 12 F1g 3 12 F1u 2 10.313255 0. 260833E-04 780. 010877 7. 26E-02 Q 12 F1g 3 12 F1u 4 12 F1u 6 12.188392 0. 280976E-04 778. 590432 7. 18E-02 P 13 F1g 4 12 F1u 6 12.188392 0. 280976E-04 778. 591432 7. 18E-02 P 13 F1g 3 12 F1u 8 14.219791 0. 300512E-04 778. 591432 7. 18E-02 P 13 F1g 3 12 F1u 8 14.219791 0. 300512E-04 778. 591432 7. 18E-02 P 13 F1g 3 12 F1u 10 14.219791 0. 300512E-04 778. 59253 7. 18E-02 P 13 F1g 3 12 F1u 10 14.219791 0. 300512E-04 778. 5925 7. 18E-02 P 13 F1g 1 12 F1u 10 14.219791 0. 300512E-04 778. 5925 7. 18E-02 P 13 F1g 1 12 F1u 10 14.219791 0. 300512E-04 778. 31.3124219 7. 34E-02 R 11 F2g 3 12 F2u 1 10.313255 0. 260833E-04 781. 3124219 7. 34E-02 R 11 F2g 3 12 F2u 1 10.313255 0. 260833E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 1 10.313255 0. 260833E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 4 12.188392 0. 280976E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 4 12.188392 0. 280976E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 4 12.188392 0. 280976E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 4 12.188392 0. 280976E-04 780. 014980 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 5 10.313255 0. 260833E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 5 10.313255 0. 260833E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 5 10.313255 0. 260833E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 5 10.313255 0. 260833E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 5 10.313255 0. 260833E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 5 10.313255 0. 260833E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 5 10.313255 0. 260833E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 5 10.313255 0. 260833E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 5 10.313255 0. 260833E-04 780. 014970 7. 26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 5 10.313255				Εg				3		
778. 600284 9.57E-02 P 13 E g 1 12 E u 6 14.219791 0.400683E-04 781.321247 7.34E-02 R 11 F1g 3 12 F1u 1 0.313255 0.260833E-04 781.327216 7.34E-02 R 11 F1g 2 12 F1u 1 0.313255 0.260833E-04 780.010857 7.26E-02 Q 12 F1g 1 12 F1u 4 12.188392 0.280976E-04 780.019073 7.26E-02 Q 12 F1g 1 12 F1u 5 1.12 F1u 6 1.2.188392 0.280976E-04 780.028906 7.26E-02 Q 12 F1g 1 12 F1u 6 1.2.188392 0.280976E-04 780.028906 7.26E-02 Q 12 F1g 1 12 F1u 6 1.2.188392 0.280976E-04 780.589515 7.18E-02 P 13 F1g 1 12 F1u 6 1.2.188392 0.280976E-04 780.599169 7.18E-02 P 13 F1g 2 12 F1u 7 1.2.188392 0.280976E-04 780.599169 7.36E-02 R 11 F2g 1 12 F1u 10 1.2.183395 0.260833E-04 781.321285 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F1u 10 1.2.183395 0.260833E-04 781.321285 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2u 1 10.313255 0.260833E-04 781.322197 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2u 1 10.313255 0.260833E-04 781.322197 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2u 1 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 1 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 1 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 1 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 12.188392 0.280976E-04 780.014968 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 12.188392 0.280976E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 780.600002 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 780.600002 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 781.426988 2.65E-02 R 12 A1g 1 13 A1u 1 12.188392 0.280976E-04 781.434387 2.65E-02 R 12 A1g 1 13 A1u 1 12.188392 0.380976E-04 781.434387 2.65E-02 R 12 A1g 1 13 A1u 1 12.188392 0.380976E-04 781.434380 1.3EE-02 P 13 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 781.434380 1.3EE-02 P 13 F1g 1 13 F1u 10 12.188392 0.380976E-04 781.434380 1.3EE-02 P 13 F1g 1 13 F1u 1 10 12.188392 0.380976E-04 781.434380 1.3EE-02 P 13 F1g 1 13 F1u 1 10 12.188392 0.380976E-04 781.				Εg						
781.321247 7.34E-02 R 11 F1g 3 12 F1u 1 10.313255 0.260833E-04 781.327216 7.34E-02 R 11 F1g 1 12 F1u 3 10.313255 0.260833E-04 781.327216 7.34E-02 R 11 F1g 1 12 F1u 3 10.313255 0.260833E-04 780.010857 7.26E-02 Q 12 F1g 3 12 F1u 4 12.188392 0.280976E-04 780.02606 7.26E-02 Q 12 F1g 1 12 F1u 5 12.188392 0.280976E-04 780.02606 7.26E-02 Q 12 F1g 1 12 F1u 6 12.188392 0.280976E-04 778.589536 7.18E-02 P 13 F1g 4 12 F1u 6 12.188392 0.280976E-04 778.589536 7.18E-02 P 13 F1g 4 12 F1u 6 12.188392 0.280976E-04 778.589536 7.18E-02 P 13 F1g 1 12 F1u 6 12.188392 0.280976E-04 778.580536 7.38E-02 P 13 F1g 1 12 F1u 6 14.219791 0.300512E-04 778.580536 7.38E-02 R 11 F2g 2 12 F2u 10.313255 0.260833E-04 781.324219 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2u 11 0.313255 0.260833E-04 781.324219 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2u 1 0.313255 0.260833E-04 780.01376 7.26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 1 0.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 4 12.188392 0.280976E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 4 12.188392 0.280976E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 4 12.188392 0.280976E-04 778.590672 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 5 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 6 12.188392 0.280976E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 6 12.188392 0.280976E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 6 12.188392 0.280976E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 6 12.188392 0.280976E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 9 14.219991 0.300512E-04 780.016860 7.26E-02 R 12 F2G 1 13 F2G 1 12 F2G				E g	2 1					
781.327216 7.34E-02 R 11 F1g 1 12 F1u 3 10.313255 0.260833E-04 780.010857 7.26E-02 Q 12 F1g 3 12 F1u 4 12.188392 0.280976E-04 780.026906 7.26E-02 Q 12 F1g 1 12 F1u 5 12.188392 0.280976E-04 778.589536 7.18E-02 P 13 F1g 1 12 F1u 6 12.188392 0.280976E-04 778.594432 7.18E-02 P 13 F1g 3 12 F1u 8 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.18E-02 P 13 F1g 3 12 F1u 8 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.18E-02 P 13 F1g 1 12 F1u 9 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.18E-02 P 13 F1g 1 12 F1u 10 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.38E-02 P 13 F1g 1 12 F1u 10 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.38E-02 R 11 F2g 1 12 F1u 10 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.38E-02 R 11 F2g 1 12 F1u 10 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.38E-02 R 11 F2g 1 12 F2u 1 10.313255 0.260833E-04 781.32613 7.34E-02 R 11 F2g 1 12 F2u 1 10.313255 0.260833E-04 781.32613 7.34E-02 R 11 F2g 1 12 F2u 1 10.313255 0.260833E-04 781.32613 7.34E-02 R 11 F2g 1 12 F2u 3 10.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 2 1 1.313255 0.260833E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 12.188392 0.280976E-04 778.599559 7.18E-02 P 13 F2g 2 12 F2u 5 12.188392 0.280976E-04 778.5997672 7.18E-02 P 13 F2g 2 12 F2u 8 14.219791 0.300512E-04 778.5997672 7.18E-02 P 13 F2g 2 12 F2u 8 14.219791 0.300512E-04 778.5997672 7.18E-02 P 13 F2g 2 12 F2u 8 14.219791 0.300512E-04 778.4690002 7.18E-02 P 13 F2g 2 12 F2u 8 14.219791 0.300512E-04 778.48993 0.28097672 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 778.48993 0.28997672 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 778.48993 0.28997672 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 778.48993 0.28997672 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 778.48993 0.28997672 7.18E-02 P 13 F2g 1 13 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 778.48993 0.28997672 7.18E-02 P 13 F2g 1 13 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 778.48993 0.28997672 7.18E-02 P 13 F2g 1 13 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 778.48993 0.28997672 0.28997672 0.28997672 0.28997672 0.28997672 0.28997672 0.28997672 0.28997672 0.28997672 0.28997672 0.28997672 0.28997672 0				F1g	3					
780.010857 7.26E-02 Q 12 F10 3 12 F1U 4 12.188392 0.280976E-04 780.019073 7.26E-02 Q 12 F10 5 12.188392 0.280976E-04 780.026906 7.26E-02 Q 12 F10 1 12 F1U 6 12.188392 0.280976E-04 778.589536 7.18E-02 P 13 F10 4 12 F1U 7 14.219791 0.300512E-04 778.594432 7.18E-02 P 13 F10 3 12 F1U 8 14.219791 0.300512E-04 778.5997169 7.18E-02 P 13 F10 2 12 F1U 9 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.18E-02 P 13 F10 2 12 F1U 9 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.18E-02 P 13 F10 2 12 F1U 9 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.18E-02 P 13 F10 2 12 F1U 9 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.18E-02 P 13 F10 2 12 F1U 10 14.219791 0.300512E-04 781.321285 7.34E-02 R 11 F20 3 12 F1U 10 14.219791 0.300512E-04 781.321285 7.34E-02 R 11 F20 3 12 F2U 1 10.313255 0.260833E-04 781.326652 7.34E-02 R 11 F20 3 12 F2U 2 10.313255 0.260833E-04 780.011376 7.26E-02 Q 12 F20 3 12 F2U 4 12.188392 0.280976E-04 780.014970 7.26E-02 Q 12 F20 3 12 F2U 4 12.188392 0.280976E-04 788.014970 7.26E-02 Q 12 F20 3 12 F2U 5 12.188392 0.280976E-04 778.59959 7.18E-02 P 13 F20 3 12 F2U 7 14.219791 0.300512E-04 778.5997677 7.18E-02 P 13 F20 3 12 F2U 7 14.219791 0.300512E-04 778.5997677 7.18E-02 P 13 F20 3 12 F2U 7 14.219791 0.300512E-04 778.60000 7.18E-02 P 13 F20 1 12 F2U 8 14.219791 0.300512E-04 778.60000 7.18E-02 P 13 F20 1 12 F2U 8 14.219791 0.300512E-04 778.434387 2.62E-02 R 12 A10 1 13 A1U 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A10 1 13 A1U 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A10 1 13 A1U 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A10 1 13 A1U 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A10 1 13 A1U 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A10 1 13 A1U 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A10 1 13 A1U 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A10 1 13 A1U 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A10 1 13 A1U 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A10 1 13 A1U 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A10 1 13 A1U 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A10 1 13 A1U					2			2		
780.019073										
780.026906 7.26E-02 Q 12 F1g 1 12 F1u 6 12.188392 0.280976E-04 778.589536 7.18E-02 P 13 F1g 4 12 F1u 7 14.219791 0.300512E-04 778.599169 7.18E-02 P 13 F1g 3 12 F1u 8 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.18E-02 P 13 F1g 3 12 F1u 8 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.18E-02 P 13 F1g 2 12 F1u 9 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.18E-02 P 13 F1g 2 12 F1u 10 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.34E-02 P 13 F1g 2 12 F1u 10 14.219791 0.300512E-04 778.597169 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2u 1 10.313255 0.260833E-04 781.321285 7.34E-02 R 11 F2g 3 12 F2u 1 10.313255 0.260833E-04 781.324219 7.34E-02 R 11 F2g 1 12 F2u 3 10.313255 0.260833E-04 778.010470 7.26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 4 12.188392 0.280976E-04 778.0104970 7.26E-02 Q 12 F2g 2 12 F2u 5 12.188392 0.280976E-04 778.598559 7.18E-02 P 13 F2g 3 12 F2u 6 12.188392 0.280976E-04 778.598559 7.18E-02 P 13 F2g 3 12 F2u 7 14.219791 0.300512E-04 778.597672 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 778.600002 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 778.43888 2.62E-02 R 12 A1g 1 13 A1u 1 12.188392 0.936588E-05 7780.017801 2.59E-02 Q 13 A1g 1 13 A1u 1 12.188392 0.936588E-05 778.438893 2.5EE-02 R 12 A1g 1 13 A1u 1 12.188392 0.936588E-05 778.43893 2.5EE-04 R 12 A1g 1 13 A1u 4 16.407451 0.1006468E-04 778.43989 2.5EE-04 R 12 A2g 1 13 A2u 1 12.188392 0.936588E-05 778.439893 1.31E-01 R 12 A2g 1 13 A2u 1 12.188392 0.936588E-05 778.0407771 1.04E-01 Q 13 E g g 1 13 E u 1 2 12.188392 0.376588E-04 778.439893 1.02E-01 P 14 A2g 1 13 A2u 1 12.188392 0.376588E-04 778.439893 1.02E-01 P 14 A2g 1 13 A2u 1 12.188392 0.376588E-04 778.439939 1.02E-01 P 14 A2g 1 13 A2u 1 12.188392 0.376588E-04 778.439939 1.02E-01 P 14 A2g 1 13 A2u 1 12.188392 0.37638E-04 778.439939 1.02E-01 P 14 A2g 1 13 A2u 1 12.188392 0.37638E-04 778.439939 1.02E-01 P 14 A2g 1 13 F1u 6 14.219791 0.300512E-04 778.43939 1.02E-01 P 14 E g 1 13 F1u 6 14.219791 0.300512E-04 778.43939 1.02E-01 P 14 E g 1 13 F1u 6 14.219791 0.300512E-04 778.43939 1.02E-01 P 14 F1u 7 14			•							
778. \$94432	780.026906	7.26E-02	Q 12		1	12	F1u	6	12.188392	0.280976E-04
778. 597169										
778.600562										
781.324219 7.34E-02 R 11 F2g 2 12 F2u 2 10.313255 0.260833E-04 780.011376 7.26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 4 12.188392 0.280976E-04 780.011376 7.26E-02 Q 12 F2g 3 12 F2u 5 12.188392 0.280976E-04 780.011970 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 5 12.188392 0.280976E-04 780.019668 7.26E-02 Q 12 F2g 1 12 F2u 6 12.188392 0.280976E-04 778.598559 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 6 12.188392 0.280976E-04 778.598559 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 7 14.219791 0.300512E-04 778.598659 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 7 14.219791 0.300512E-04 778.600002 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 778.600002 7.18E-02 P 13 F2g 1 12 F2u 9 14.219791 0.300512E-04 778.460888 2.62E-02 R 12 A1g 2 13 A1u 1 12.188392 0.936588E-05 781.434387 2.62E-02 R 12 A1g 2 13 A1u 1 12.188392 0.936588E-05 781.434387 2.62E-02 R 12 A1g 1 13 A1u 1 12.188392 0.936588E-05 780.017801 2.59E-02 Q 13 A1g 1 13 A1u 3 14.219791 0.100171E-04 778.484936 2.56E-02 P 14 A1g 1 13 A1u 3 14.219791 0.100171E-04 778.476697 1.28E-01 P 14 A2g 1 13 A2u 1 12.188392 0.468294E-04 778.476697 1.28E-01 P 14 A2g 1 13 A2u 1 12.188392 0.468294E-04 778.476697 1.05E-01 R 12 E g 1 13 A2u 2 14.219791 0.500854E-04 781.432159 1.05E-01 R 12 E g 1 13 E u 1 12.188392 0.374635E-04 780.007771 1.05E-01 R 12 E g 1 13 E u 1 12.188392 0.374635E-04 780.007771 1.04E-01 Q 13 E g 1 13 E u 1 12.188392 0.374635E-04 778.476697 1.05E-01 R 12 E g 1 13 E u 1 12.188392 0.374635E-04 778.476697 1.05E-01 R 12 E g 1 13 E u 1 12.188392 0.374635E-04 778.476697 1.06E-01 P 14 E g 1 13 E u 7 16.407451 0.40668E-04 778.476697 1.07E-01 P 14 E g 1 13 E u 7 16.407451 0.40668E-04 778.476697 1.07E-01 P 14 E g 1 13 E u 7 16.407451 0.40668E-04 778.476697 1.07E-01 P 14 E g 1 13 E u 7 16.407451 0.40668E-04 778.476697 1.07E-01 P 14 E g 1 13 E u 7 16.407451 0.40668E-04 778.489339 1.02E-01 P 14 E g 1 13 E u 7 16.407451 0.40668E-04 778.489339 1.02E-01 P 14 E g 1 13 F1u 1 12.188392 0.280976E-04 778.489339 7.77E-02 Q 13 F1g 2 13 F1u 1 12.188392 0.280976E-04 778.489330 7.77E-02 Q 13 F1g 2 13 F1u 1 12.188392 0.280976E-04 778.489331 7.67E-02 P 14 F1g 2 13 F1										
781. 326652					3					
780.011376										
780.014970										
778. 589559	780.014970	7.26E-02	Q 12	F2g	2	12	F2u	5	12.188392	0.280976E-04
778. 597672										
778. 600002										
781.434387								9		0.300512E-04
780.017801 2.59E-02 Q 13 A1G 1 13 A1U 3 14.219791 0.100171E-04 778.484936 2.56E-02 P 14 A1G 1 13 A1U 4 16.407451 0.106468E-04 781.433549 1.31E-01 R 12 A2G 1 13 A2U 1 12.188392 0.468294E-04 780.011200 1.29E-01 Q 13 A2G 1 13 A2U 2 14.219791 0.500854E-04 778.476697 1.28E-01 P 14 A2G 1 13 A2U 3 16.407451 0.532339E-04 781.427027 1.05E-01 R 12 E G 1 13 E U 1 12.188392 0.374635E-04 781.432159 1.05E-01 R 12 E G 2 13 E U 2 12.188392 0.374635E-04 780.007771 1.04E-01 Q 13 E G 1 13 E U 3 14.219791 0.400683E-04 780.018499 1.04E-01 Q 13 E G 1 13 E U 4 14.219791 0.400683E-04 778.476675 1.02E-01 P 14 E G 1 13 E U 5 16.407451 0.425871E-04 778.485808 1.02E-01 P 14 E G 2 13 E U 6 16.407451 0.425871E-04 778.489339 1.02E-01 P 14 E G 3 13 E U 7 16.407451 0.425871E-04 778.489339 1.02E-01 P 14 E G 3 13 E U 7 16.407451 0.425871E-04 781.427014 7.86E-02 R 12 F1G 1 13 F1U 1 12.188392 0.280976E-04 781.430516 7.86E-02 R 12 F1G 1 13 F1U 1 12.188392 0.280976E-04 781.430516 7.86E-02 R 12 F1G 3 13 F1U 1 12.188392 0.280976E-04 780.007776 7.77E-02 Q 13 F1G 3 13 F1U 3 12.188392 0.280976E-04 780.013492 7.77E-02 Q 13 F1G 3 13 F1U 4 14.219791 0.300512E-04 780.013492 7.77E-02 Q 13 F1G 3 13 F1U 4 14.219791 0.300512E-04 780.013492 7.77E-02 Q 13 F1G 3 13 F1U 5 14.219791 0.300512E-04 780.013492 7.77E-02 Q 13 F1G 3 13 F1U 5 14.219791 0.300512E-04 780.013492 7.77E-02 Q 13 F1G 3 13 F1U 6 14.219791 0.300512E-04 780.013492 7.77E-02 Q 13 F1G 3 13 F1U 6 14.219791 0.300512E-04 780.013492 7.77E-02 Q 13 F1G 3 13 F1U 7 14.219791 0.300512E-04 780.013492 7.77E-02 Q 13 F1G 3 13 F1U 8 16.407451 0.319404E-04 781.430266 7.67E-02 P 14 F1G 3 13 F1U 9 16.407451 0.319404E-04 781.430266 7.67E-02 P 14 F1G 3 13 F1U 9 16.407451 0.319404E-04 781.430266 7.67E-02 P 14 F1G 3 13 F2U 1 12.188392 0.280976E-04 781.430266 7.67E-02 P 14 F1G 3 13 F2U 1 12.188392 0.280976E-04 781.430266 7.67E-02 P 14 F1G 3 13 F2U 1 10 16.407451 0.319404E-04 781.430266 7.67E-02 P 14 F1G 3 13 F2U 1 16.407451 0.319404E-04 781.430266 7.67E-02 P 14 F2G 3 13 F2U 1 16.407451 0.319404E-04 781.430266 7.67E-02 P 14 F2										
778.484936										
781.433549			•							
778.476697										
781.427027				A2g						
781.432159	781.427027			E a					12.188392	0.332339E-04 0.374635E-04
780.007771	781.432159	1.05E-01	R 12	Εq	2	13	Εu	2	12.188392	0.374635E-04
778.476675				Εg						
778.485808 1.02E-01 P 14 E g 2 13 E u 6 16.407451 0.425871E-04 778.489339 1.02E-01 P 14 E g 3 13 E u 7 16.407451 0.425871E-04 781.427014 7.86E-02 R 12 F1g 1 13 F1u 1 12.188392 0.280976E-04 781.430516 7.86E-02 R 12 F1g 2 13 F1u 2 12.188392 0.280976E-04 781.434203 7.86E-02 R 12 F1g 3 13 F1u 3 12.188392 0.280976E-04 780.007276 7.77E-02 Q 13 F1g 1 13 F1u 4 14.219791 0.300512E-04 780.013492 7.77E-02 Q 13 F1g 2 13 F1u 5 14.219791 0.300512E-04 780.018297 7.77E-02 Q 13 F1g 3 13 F1u 5 14.219791 0.300512E-04 780.026702 7.77E-02 Q 13 F1g 4 13 F1u 6 14.219791 0.300512E-04 778.482138 7.67E-02 P 14 F1g 1 13 F1u 8 16.407451 0.319404E-04 778.485470 7.67E-02 P 14 F1g 2 13 F1u 9 16.407451 0.319404E-04 778.489002 7.67E-02 P 14 F1g 3 13 F1u 9 16.407451 0.319404E-04 781.430264 7.86E-02 R 12 F2g 1 13 F2u 1 12.188392 0.280976E-04 781.432378 7.86E-02 R 12 F2g 1 13 F2u 1 12.188392 0.280976E-04 781.432378 7.86E-02 R 12 F2g 1 13 F2u 1 12.188392 0.280976E-04 781.432378 7.86E-02 R 12 F2g 1 13 F2u 1 12.188392 0.280976E-04 780.008276 7.77E-02 Q 13 F2g 1 13 F2u 2 12.188392 0.280976E-04 780.008276 7.77E-02 Q 13 F2g 1 13 F2u 2 12.188392 0.280976E-04 780.008276 7.77E-02 Q 13 F2g 1 13 F2u 2 12.188392 0.280976E-04 780.008276 7.77E-02 Q 13 F2g 1 13 F2u 2 12.188392 0.280976E-04 780.008276 7.77E-02 Q 13 F2g 3 13 F2u 3 12.188392 0.280976E-04 780.008276 7.77E-02 Q 13 F2g 3 13 F2u 4 14.219791 0.300512E-04 778.476682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 4 14.219791 0.300512E-04 778.476682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 7 16.407451 0.319404E-04 778.476682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 7 16.407451 0.319404E-04 778.476682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 7 16.407451 0.319404E-04 778.476682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 7 16.407451 0.319404E-04 778.487027 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 9 16.407451 0.319404E-04 778.487027 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 1 16.407451 0.319404E-04 778.487027 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 1 16.407451 0.319404E-04 778.487027 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 1 16.407451 0.319404E-04 778.487027 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 1 16.407451 0.319404E-04 778.487027 7.67E-02 P 14 F2g 1				Fa						
778.489339				Εg						
781.430516 7.86E-02 R 12 F1g 2 13 F1u 2 12.188392 0.280976E-04 781.434203 7.86E-02 R 12 F1g 3 13 F1u 3 12.188392 0.280976E-04 780.007276 7.77E-02 Q 13 F1g 1 13 F1u 4 14.219791 0.300512E-04 780.013492 7.77E-02 Q 13 F1g 2 13 F1u 5 14.219791 0.300512E-04 780.018297 7.77E-02 Q 13 F1g 3 13 F1u 6 14.219791 0.300512E-04 780.026702 7.77E-02 Q 13 F1g 4 13 F1u 6 14.219791 0.300512E-04 781.482138 7.67E-02 P 14 F1g 1 13 F1u 7 14.219791 0.300512E-04 778.485400 7.67E-02 P 14 F1g 1 3 F1u 9 16.407451 0.319404E-04 781.489002 7.67E-02	778.489339									
781.434203 7.86E-02 R 12 F1g 3 13 F1u 3 12.188392 0.280976E-04 780.007276 7.77E-02 Q 13 F1g 1 13 F1u 4 14.219791 0.300512E-04 780.018492 7.77E-02 Q 13 F1g 2 13 F1u 5 14.219791 0.300512E-04 780.018297 7.77E-02 Q 13 F1g 3 13 F1u 5 14.219791 0.300512E-04 780.026702 7.77E-02 Q 13 F1g 4 13 F1u 7 14.219791 0.300512E-04 778.482138 7.67E-02 P 14 F1g 1 13 F1u 7 14.219791 0.300512E-04 778.485470 7.67E-02 P 14 F1g 1 13 F1u 8 16.407451 0.319404E-04 778.485900 7.67E-02 P 14 F1g 3 3 F1u 10 16.407451 0.319404E-04 781.430264 7.86E-02										
780.007276 7.77E-02 Q 13 F1g 1 13 F1u 4 14.219791 0.300512E-04 780.013492 7.77E-02 Q 13 F1g 2 13 F1u 5 14.219791 0.300512E-04 780.018297 7.77E-02 Q 13 F1g 3 13 F1u 6 14.219791 0.300512E-04 780.026702 7.77E-02 Q 13 F1g 4 13 F1u 6 14.219791 0.300512E-04 778.482138 7.67E-02 P 14 F1g 1 13 F1u 8 16.407451 0.319404E-04 778.485470 7.67E-02 P 14 F1g 2 13 F1u 9 16.407451 0.319404E-04 778.4859002 7.67E-02 P 14 F1g 3 13 F1u 10 16.407451 0.319404E-04 781.432378 7.86E-02 R 12 F2g 1 3 F2u 1 12.188392 0.280976E-04 781.432378 7.86E-02 <td></td>										
780.018297 7.77E-02 Q 13 F1g 3 13 F1u 6 14.219791 0.300512E-04 780.026702 7.77E-02 Q 13 F1g 4 13 F1u 7 14.219791 0.300512E-04 778.482138 7.67E-02 P 14 F1g 1 13 F1u 8 16.407451 0.319404E-04 778.485470 7.67E-02 P 14 F1g 2 13 F1u 9 16.407451 0.319404E-04 778.489002 7.67E-02 P 14 F1g 3 13 F1u 10 16.407451 0.319404E-04 781.430264 7.86E-02 R 12 F2g 1 13 F2u 1 12.188392 0.280976E-04 781.43278 7.86E-02 R 12 F2g 3 3 F2u 2 12.188392 0.280976E-04 781.433966 7.86E-02 R 12 F2g 3 3 F2u 3 12.188392 0.280976E-04 780.012577 7.77E-02		7.77E-02	Q 13	F1g				4		
780.026702 7.77E-02 Q 13 F1g 4 13 F1u 7 14.219791 0.300512E-04 778.482138 7.67E-02 P 14 F1g 1 13 F1u 8 16.407451 0.319404E-04 778.485400 7.67E-02 P 14 F1g 2 13 F1u 9 16.407451 0.319404E-04 778.485002 7.67E-02 P 14 F1g 3 13 F1u 10 16.407451 0.319404E-04 781.430264 7.86E-02 R 12 F2g 1 13 F2u 1 12.188392 0.280976E-04 781.432378 7.86E-02 R 12 F2g 2 13 F2u 2 12.188392 0.280976E-04 781.432378 7.86E-02 R 12 F2g 3 13 F2u 2 1.2188392 0.280976E-04 780.08276 7.77E-02 Q 13 F2g 1 3 F2u 3 12.188392 0.280976E-04 780.012577 7.77E-02										
778.482138 7.67E-02 P 14 F1g 1 13 F1u 8 16.407451 0.319404E-04 778.485470 7.67E-02 P 14 F1g 2 13 F1u 9 16.407451 0.319404E-04 778.489002 7.67E-02 P 14 F1g 3 13 F1u 10 16.407451 0.319404E-04 781.430264 7.86E-02 R 12 F2g 1 13 F2u 1 12.188392 0.280976E-04 781.432378 7.86E-02 R 12 F2g 2 13 F2u 2 12.188392 0.280976E-04 781.432378 7.86E-02 R 12 F2g 3 13 F2u 2 12.188392 0.280976E-04 781.433966 7.86E-02 R 12 F2g 3 13 F2u 3 12.188392 0.280976E-04 780.008276 7.77E-02 Q 13 F2g 1 13 F2u 4 14.219791 0.300512E-04 780.02659 7.77E-02		7.77E-02 7.77E-02								
778.489002 7.67E-02 P 14 F1g 3 13 F1u 10 16.407451 0.319404E-04 781.430264 7.86E-02 R 12 F2g 1 13 F2u 1 12.188392 0.280976E-04 781.432378 7.86E-02 R 12 F2g 2 13 F2u 2 12.188392 0.280976E-04 781.433966 7.86E-02 R 12 F2g 3 13 F2u 3 12.188392 0.280976E-04 780.008276 7.77E-02 Q 13 F2g 1 13 F2u 3 12.188392 0.280976E-04 780.002577 7.77E-02 Q 13 F2g 1 13 F2u 3 14.219791 0.300512E-04 780.026659 7.77E-02 Q 13 F2g 3 13 F2u 5 14.219791 0.300512E-04 778.476682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 6 14.219791 0.300512E-04 778.489172 7.67E-02 <td>778.482138</td> <td>7.67E-02</td> <td>P 14</td> <td></td> <td>1</td> <td>13</td> <td></td> <td>8</td> <td>16.407451</td> <td>0.319404E-04</td>	778.482138	7.67E-02	P 14		1	13		8	16.407451	0.319404E-04
781.430264 7.86E-02 R 12 F2g 1 13 F2u 1 12.188392 0.280976E-04 781.432378 7.86E-02 R 12 F2g 2 13 F2u 2 12.188392 0.280976E-04 781.433966 7.86E-02 R 12 F2g 3 13 F2u 3 12.188392 0.280976E-04 780.008276 7.77E-02 Q 13 F2g 1 13 F2u 3 12.188392 0.280976E-04 780.012577 7.77E-02 Q 13 F2g 1 13 F2u 4 14.219791 0.300512E-04 780.026659 7.77E-02 Q 13 F2g 3 13 F2u 5 14.219791 0.300512E-04 778.476682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 6 14.219791 0.300512E-04 778.489172 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 7 16.407451 0.319404E-04 778.489531 7.67E-02										
781.432378 7.86E-02 R 12 F2g 2 13 F2u 2 12.188392 0.280976E-04 781.433966 7.86E-02 R 12 F2g 3 13 F2u 3 12.188392 0.280976E-04 780.008276 7.77E-02 Q 13 F2g 1 13 F2u 4 14.219791 0.300512E-04 780.012577 7.77E-02 Q 13 F2g 2 13 F2u 5 14.219791 0.300512E-04 780.026659 7.77E-02 Q 13 F2g 3 13 F2u 6 14.219791 0.300512E-04 778.486682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 7 16.407451 0.319404E-04 778.487027 7.67E-02 P 14 F2g 3 13 F2u 9 16.407451 0.319404E-04 778.489531 7.67E-02 P 14 F2g 4 13 F2u 9 16.407451 0.319404E-04 781.536463 2.79E-02										
780.008276 7.77E-02 Q 13 F2g 1 13 F2u 4 14.219791 0.300512E-04 780.012577 7.77E-02 Q 13 F2g 2 13 F2u 5 14.219791 0.300512E-04 780.026659 7.77E-02 Q 13 F2g 3 13 F2u 6 14.219791 0.300512E-04 778.476682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 6 14.219791 0.300512E-04 778.481972 7.67E-02 P 14 F2g 1 3 F2u 7 16.407451 0.319404E-04 778.487027 7.67E-02 P 14 F2g 3 13 F2u 9 16.407451 0.319404E-04 778.489531 7.67E-02 P 14 F2g 4 13 F2u 10 16.407451 0.319404E-04 781.536463 2.79E-02 R 13 A1g 1 4 A1u 1 14.219791 0.100171E-04	781.432378								12.188392	
780.012577 7.77E-02 Q 13 F2g 2 13 F2u 5 14.219791 0.300512E-04 780.026659 7.77E-02 Q 13 F2g 3 13 F2u 6 14.219791 0.300512E-04 778.476682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 7 16.407451 0.319404E-04 778.481972 7.67E-02 P 14 F2g 2 13 F2u 8 16.407451 0.319404E-04 778.489531 7.67E-02 P 14 F2g 4 13 F2u 9 16.407451 0.319404E-04 781.536463 2.79E-02 R 13 A1g 1 14 A1u 1 14.219791 0.100171E-04		7.86E-02		F2g				3		
780.026659 7.77E-02 Q 13 F2g 3 13 F2u 6 14.219791 0.300512E-04 778.476682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 7 16.407451 0.319404E-04 778.481972 7.67E-02 P 14 F2g 2 13 F2u 8 16.407451 0.319404E-04 778.487027 7.67E-02 P 14 F2g 3 13 F2u 9 16.407451 0.319404E-04 778.489531 7.67E-02 P 14 F2g 4 13 F2u 10 16.407451 0.319404E-04 781.536463 2.79E-02 R 13 A1g 1 14 A1u 1 14.219791 0.100171E-04										
778.476682 7.67E-02 P 14 F2g 1 13 F2u 7 16.407451 0.319404E-04 778.481972 7.67E-02 P 14 F2g 2 13 F2u 8 16.407451 0.319404E-04 778.489531 7.67E-02 P 14 F2g 3 13 F2u 9 16.407451 0.319404E-04 778.489531 7.67E-02 P 14 F2g 4 13 F2u 10 16.407451 0.319404E-04 781.536463 2.79E-02 R 13 A1g 1 14 A1u 1 14.219791 0.100171E-04										
778.487027 7.67E-02 P 14 F2g 3 13 F2u 9 16.407451 0.319404E-04 778.489531 7.67E-02 P 14 F2g 4 13 F2u 10 16.407451 0.319404E-04 781.536463 2.79E-02 R 13 A1g 1 14 A1u 1 14.219791 0.100171E-04	778.476682	7.67E-02	P 14	F2g	1	13	F2u	7	16.407451	0.319404E-04
778.489531 7.67E-02 P 14 F2g 4 13 F2u 10 16.407451 0.319404E-04 781.536463 2.79E-02 R 13 A1g 1 14 A1u 1 14.219791 0.100171E-04										
781.536463 2.79E-02 R 13 A1ğ 1 14 A1u 1 14.219791 0.100171E-04								-		
La quita ast dans la maga quivanta	781.536463	2.79E-02	R 13					_		

Suite du tableau (III-3).

Fréquence	Intensité	J''	C''	n''	J	С	n	Energie inf	Population inf
780.012158	2.75E-02	Q 14	A1g	1	14	A1u	2	16.407451	0.106468E-04
778.377734	2.71E-02	P 15	A1g	1	14	A1u	3	18.751372	0.112538E-04
781.539492 780.026443	1.39E-01 1.38E-01	R 13 Q 14	A2g A2g	1 1	14 14	A2u A2u	1 2	14.219791 16.407451	0.500854E-04 0.532339E-04
778.369262	1.36E-01	P 15	A2g	2	14	A2u	3	18.751372	0.562691E-04
778.378464	1.36E-01	P 15	A2g	1	14	A2u	4	18.751372	0.562691E-04
781.536168	1.11E-01	R 13	Εg	2 1	14	Εu	1	14.219791	0.400683E-04
781.541007 780.004016	1.11E-01 1.10E-01	R 13 Q 14	E g E g	3	14 14	E u E u	2 3	14.219791 16.407451	0.400683E-04 0.425871E-04
780.010524	1.10E-01	Q 14	E g	2	14	Εü	4	16.407451	0.425871E-04
780.026486	1.10E-01	Q 14	Εğ	1	14	Εu	5	16.407451	0.425871E-04
778.369445 778.375216	1.09E-01 1.09E-01	P 15 P 15	E g E g	2 1	14 14	E u E u	6 7	18.751372 18.751372	0.450153E-04 0.450153E-04
781.532462	8.36E-02	R 13	F1q	4	14	F1u	1	14.219791	0.300512E-04
781.536254	8.36E-02	R 13	F1g	3	14	F1u	2	14.219791	0.300512E-04
781.538445 781.541238	8.36E-02 8.36E-02	R 13 R 13	F1g F1g	2 1	14 14	F1u F1u	3 4	14.219791 14.219791	0.300512E-04 0.300512E-04
780.004613	8.25E-02	Q 14	F1g	3	14	F1u	5	16.407451	0.319404E-04
780.011156	8.25E-02	Q 14	F1g	2	14	F1u	6	16.407451	0.319404E-04
780.017043	8.25E-02	Q 14	F1g	1	14	F1u	7	16.407451	0.319404E-04
778.363520 778.372949	8.14E-02 8.14E-02	P 15 P 15	F1g F1g	4 3	14 14	F1u F1u	8 9	18.751372 18.751372	0.337615E-04 0.337615E-04
778.375537	8.14E-02	P 15	F1g	ž	14	F1u	10	18.751372	0.337615E-04
778.378054	8.14E-02	P 15	F1g	1	14	F1u	11	18.751372	0.337615E-04
781.532480 781.538854	8.36E-02 8.36E-02	R 13 R 13	F2g F2g	3 2	14 14	F2u F2u	1 2	14.219791 14.219791	0.300512E-04 0.300512E-04
781.540772	8.36E-02	R 13	F2g	1	14	F2u	3	14.219791	0.300512E-04
780.003667	8.25E-02	Q 14	F2g	4	14	F2u	4	16.407451	0.319404E-04
780.008368	8.25E-02	Q 14	F2g	3	14	F2u	5	16.407451 16.407451	0.319404E-04
780.017359 780.026472	8.25E-02 8.25E-02	Q 14 Q 14	F2g F2g	2 1	14 14	F2u F2u	6 7	16.407451	0.319404E-04 0.319404E-04
778.363530	8.14E-02	P 15	F2g	4	14	F2u	8	18.751372	0.337615E-04
778.369381	8.14E-02	P 15	F2g	3	14	F2u	9	18.751372	0.337615E-04
778.373582 778.378281	8.14E-02 8.14E-02	P 15 P 15	F2g F2g	2 1	14 14	F2u F2u	10 11	18.751372 18.751372	0.337615E-04 0.337615E-04
781.644174	2.95E-02	R 14	A1q	ī	15	A1u	1	16.407451	0.106468E-04
780.000899	2.91E-02	Q 15	A1g	1	15	A1u	2	18.751372	0.112538E-04
778.250069 778.264370	2.87E-02 2.87E-02	P 16 P 16	Alg Alq	1 2	15 15	A1u A1u	3 4	21.251555 21.251555	0.118371E-04 0.118371E-04
781.637649	1.47E-01	R 14	A1g A2g	1	15	A2u	1	16.407451	0.532339E-04
779.999591	1.45E-01	Q 15	A2g	1	15	A2u	2	18.751372	0.562691E-04
780.016363 778.261289	1.45E-01	Q 15 P 16	A2g	2	15 15	A2u	3 4	18.751372 21.251555	0.562691E-04 0.591854E-04
781.637632	1.43E-01 1.18E-01	R 14	A2g E g	1 1	15	A2u E u	1	16.407451	0.425871E-04
781.644893	1.18E-01	R 14	Εğ	2	15	Εu	2	16.407451	0.425871E-04
781.647850	1.18E-01	R 14	Εğ	3	15	Εu	3	16.407451	0.425871E-04
780.005713 780.016011	1.16E-01 1.16E-01	Q 15 Q 15	E g E g	1 2	15 15	E u E u	4 5	18.751372 18.751372	0.450153E-04 0.450153E-04
778.250078	1.15E-01	P 16	Εğ	1	15	Εü	6	21.251555	0.473483E-04
778.260509	1.15E-01	P 16	Εg	2	15	Еu	7	21.251555	0.473483E-04
778.266881 781.641911	1.15E-01 8.84E-02	P 16 R 14	E g F1q	3 1	15 15	E u F1u	8 1	21.251555 16.407451	0.473483E-04 0.319404E-04
781.644614	8.84E-02	R 14	F1q	2	15	F1u	2	16.407451	0.319404E-04
781.647565	8.84E-02	R 14	F1g	3	15	F1u	3	16.407451	0.319404E-04
780.000333 780.005117	8.72E-02 8.72E-02	Q 15 Q 15	F1g	1 2	15 15	F1u F1u	4 5	18.751372 18.751372	0.337615E-04 0.337615E-04
780.003117	8.72E-02	Q 15 Q 15	F1g F1g	3	15	F1u	6	18.751372	0.337615E-04
780.026289	8.72E-02	Q 15	F1g	4	15	F1u	7	18.751372	0.337615E-04
778.250075	8.60E-02	P 16	F1g	1	15	F1u	8	21.251555	0.355112E-04
778.256465 778.263749	8.60E-02 8.60E-02	P 16 P 16	F1g F1g	2 3	15 15	F1u F1u	9 10	21.251555 21.251555	0.355112E-04 0.355112E-04
778.266669	8.60E-02	P 16	F1g	4	15	F1u	11	21.251555	0.355112E-04
781.637638	8.84E-02	R 14	F2g	1	15	F2u	1	16.407451	0.319404E-04
781.641777 781.645902	8.84E-02 8.84E-02	R 14 R 14	F2g F2g	2 3	15 15	F2u F2u	2 3	16.407451 16.407451	0.319404E-04 0.319404E-04
781.648013	8.84E-02	R 14	F2g	4	15	F2u F2u	4	16.407451	0.319404E-04 0.319404E-04
779.999924	8.73E-02	Q 15	F2g	1	15	F2u	5	18.751372	0.337615E-04
780.008623	8.72E-02 8.72E-02	Q 15 Q 15	F2g	2	15 15	F2u	6 7	18.751372 18.751372	0.337615E-04 0.337615E-04
780.016135 780.026270	8.72E-02 8.72E-02	Q 15 Q 15	F2g F2g	3 4	15 15	F2u F2u	8	18.751372 18.751372	0.337615E-04 0.337615E-04
778.256374	8.60E-02	P 16	F2g	1	15	F2u	9	21.251555	0.355112E-04
778.260711	8.60E-02	P 16	F2g	2	15	F2u	10	21.251555	0.355112E-04
778.263186 778.267083	8.60E-02 8.60E-02	P 16 P 16	F2g F2g	3 4	15 15	F2u F2u	11 12	21.251555 21.251555	0.355112E-04 0.355112E-04
781.754105	3.10E-02	R 15	A1g	1	16	A1u	1	18.751372	0.112538E-04
780.000764	3.06E-02	Q 16	A1g	2	16	A1u	2	21.251555	0.118371E-04
780.026116 778.143230	3.06E-02 3.01E-02	Q 16 P 17	Alg Alg	1 1	16 16	A1u A1u	3 4	21.251555 23.908000	0.118371E-04 0.123955E-04
781.747042	1.55E-01	R 15	A1g A2g	2	16	A2u	1	18.751372	0.562691E-04
781.754733	1.55E-01	R 15	A2g	1	16	A2u	2	18.751372	0.562691E-04
780.006310 778 150281	1.53E-01	Q 16	A2g	1	16 16	A2u	3	21.251555	0.591854E-04
778.150281	1.51E-01	P 17	A2g	1	16	A2u	4	23.908000	0.619777E-04

Suite du tableau (III-3).

Fréquence Intensité J" C" n" J C n Energie inf 781.747190 1.24E-01 R 15 E g 2 16 E u 1 18.751372	Population inf 0.4501535-04
	0 4501525 04
781.751953 1.24E-01 R 15 E g 1 16 E u 2 18.751372	0.450153E-04
779.995917 1.22E-01 Q 16 E g 3 16 E u 3 21.251555	0.473483E-04
780.007822	0.473483E-04 0.473483E-04
780.026098	0.495822E-04
778.151551 1.20E-01 P 17 E g 2 16 E u 7 23.908000	0.495822E-04
778.155487 1.21E-01 P 17 E g 1 16 E u 8 23.908000	0.495822E-04
781.742511 9.31E-02 R 15 F1g 4 16 F1u 1 18.751372	0.337615E-04
781.750056 9.31E-02 R 15 F1g 3 16 F1u 2 18.751372 781.752225 9.31E-02 R 15 F1g 2 16 F1u 3 18.751372	0.337615E-04 0.337615E-04
781.752225 9.31E-02 R 15 F1g 2 16 F1u 3 18.751372 781.754379 9.31E-02 R 15 F1g 1 16 F1u 4 18.751372	0.337615E-04 0.337615E-04
779.996300 9.18E-02 Q 16 F1Q 4 16 F1U 5 21.251555	0.355112E-04
780.001887 9.18E-02 Q 16 F1g 3 16 F1u 6 21.251555	0.355112E-04
780.014989 9.17E-02 Q 16 F1g 2 16 F1u 7 21.251555	0.355112E-04
780.026104 9.18E-02 Q 16 F1g 1 16 F1u 8 21.251555 778.136331 9.04E-02 P 17 F1g 5 16 F1u 9 23.908000	0.355112E-04 0.371866E-04
778.136331 9.04E-02 P 17 F1g 5 16 F1u 9 23.908000 778.143166 9.04E-02 P 17 F1g 4 16 F1u 10 23.908000	0.371866E-04
778.147772 9.04E-02 P 17 F1q 3 16 F1u 11 23.908000	0.371866E-04
778.152493 9.04E-02 P 17 F1g 2 16 F1u 12 23.908000	0.371866E-04
778.155641 9.04E-02 P 17 F1g 1 16 F1u 13 23.908000	0.371866E-04
781.742519 9.31E-02 R 15 F2g 4 16 F2u 1 18.751372 781.747138 9.31E-02 R 15 F2g 3 16 F2u 2 18.751372	0.337615E-04 0.337615E-04
781.747138 9.31E-02 R 15 F2g 3 16 F2u 2 18.751372 781.750584 9.31E-02 R 15 F2g 2 16 F2u 3 18.751372	0.337615E-04 0.337615E-04
781.754575 9.31E-02 R 15 F2q 1 16 F2u 4 18.751372	0.337615E-04
779.995553 9.18E-02 Q 16 F2g 4 16 F2u 5 21.251555	0.355112E-04
780.002932 9.18E-02 Q 16 F2g 3 16 F2u 6 21.251555	0.355112E-04
780.007437 9.17E-02 Q 16 F2g 2 16 F2u 7 21.251555 780.015166 9.17E-02 O 16 F2g 1 16 F2u 8 21.251555	0.355112E-04 0.355112E-04
780.015166 9.17E-02 Q 16 F2g 1 16 F2u 8 21.251555 778.136335 9.04E-02 P 17 F2g 4 16 F2u 9 23.908000	0.333112E-04 0.371866E-04
778.148110 9.04E-02 P 17 F29 3 16 F2u 10 23.908000	0.371866E-04
778.151102 9.04E-02 P 17 F2g 2 16 F2u 11 23.908000	0.371866E-04
778.155269 9.04E-02 P 17 F2g 1 16 F2u 12 23.908000	0.371866E-04
781.847097 3.25E-02 R 16 Alg 1 17 Alu 1 21.251555	0.118371E-04
781.858795 3.25E-02 R 16 A1g 2 17 A1u 2 21.251555 780.013913 3.20E-02 Q 17 A1g 1 17 A1u 3 23.908000	0.118371E-04 0.123955E-04
778.034600 3.15E-02 P 18 Alg 1 17 Alu 4 26.720706	0.129283E-04
778.044137 3.15E-02 P 18 A1g 2 17 A1u 5 26.720706	0.129283E-04
781.856174 1.63E-01 R 16 A2g 1 17 A2u 1 21.251555	0.591854E-04
780.001309	0.619777E-04 0.646414E-04
778.022300 1.58E-01 P 18 A2g 1 17 A2u 3 26.720706 778.043642 1.58E-01 P 18 A2g 2 17 A2u 4 26.720706	0.646414E-04
781.847104	0.473483E-04
781.855516 1.30E-01 R 16 E g 2 17 E u 2 21.251555	0.473483E-04
781.860982 1.30E-01 R 16 E g 3 17 E u 3 21.251555	0.473483E-04
779.991371	0.495822E-04 0.495822E-04
779.998872	0.495822E-04 0.495822E-04
778.022296 1.26E-01 P 18 E g 1 17 E u 7 26.720706	0.517131E-04
778.035011 1.26E-01 P 18 E g 2 17 E u 8 26.720706	0.517131E-04
778.040236 1.26E-01 P 18 E g 3 17 E u 9 26.720706	0.517131E-04
781.847102 9.76E-02 R 16 F1g 1 17 F1u 1 21.251555 781.852181 9.76E-02 R 16 F1g 2 17 F1u 2 21.251555	0.355112E-04 0.355112E-04
781.858262 9.76E-02 R 16 F1g 3 17 F1u 3 21.251555	0.355112E-04
781.860796 9.76E-02 R 16 F1g 4 17 F1u 4 21.251555	0.355112E-04
779.991091 9.61E-02 Q 17 F1g 1 17 F1u 5 23.908000	0.371866E-04
779.997170 9.61E-02 Q 17 F1g 2 17 F1u 6 23.908000	0.371866E-04
780.005835 9.61E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 7 23.908000 780.014040 9.61E-02 Q 17 F1g 4 17 F1u 8 23.908000	0.371866E-04 0.371866E-04
780.025948 9.61E-02 Q 17 F1g 5 17 F1u 9 23.908000	0.371866E-04
778.029644 9.45E-02 P 18 F1g 1 17 F1u 10 26.720706	0.387848E-04
778.034860 9.45E-02 P 18 F1g 2 17 F1u 11 26.720706	0.387848E-04
778.038963 9.45E-02 P 18 F1g 3 17 F1u 12 26.720706	0.387848E-04
778.043999 9.46E-02 P 18 F1g 4 17 F1u 13 26.720706 781.852107 9.76E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 1 21.251555	0.387848E-04 0.355112E-04
781.855686 9.76E-02 R 16 F2g 2 17 F2u 2 21.251555	0.355112E-04
781.857780 9.76E-02 R 16 F2g 3 17 F2u 3 21.251555	0.355112E-04
781.861158 9.76E-02 R 16 F2g 4 17 F2u 4 21.251555	0.355112E-04
779.991762 9.61E-02 Q 17 F2g 1 17 F2u 5 23.908000	0.371866E-04
779.999722 9.61E-02 Q 17 F2g 2 17 F2u 6 23.908000 780.005182 9.61E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 7 23.908000	0.371866E-04 0.371866E-04
780.025941 9.61E-02 Q 17 F2g 4 17 F2u 8 23.908000	0.371866E-04
778.022298 9.46E-02 P 18 F2g 1 17 F2u 9 26.720706	0.387848E-04
778.029601 9.45E-02 P 18 F2g 2 17 F2u 10 26.720706	0.387848E-04
778.037904 9.45E-02 P 18 F2g 3 17 F2u 11 26.720706	0.387848E-04
778.040587 9.45E-02 P 18 F2g 4 17 F2u 12 26.720706 778.043839 9.46E-02 P 18 F2g 5 17 F2u 13 26.720706	0.387848E-04 0.387848E-04
781.956911 3.40E-02 R 17 Alg 1 18 Alu 1 23.908000	0.123955E-04
779.986208 3.34E-02 Q 18 A1g 2 18 A1u 2 26.720706	0.129283E-04
780.004148 3.34E-02 Q 18 Alg 1 18 Alu 3 26.720706	0.129283E-04
777.926409 3.28E-02 P 19 A1g 1 18 A1u 4 29.689673 781.962816 1.70E-01 R 17 A2g 1 18 A2u 1 23.908000	0.134344E-04 0.619777E-04
781.962816	0.646414E-04

Les différentes colonnes de ce tableau représentent :

- ❖ lère colonne: La fréquence de transitions rovibrationnelles en cm⁻¹. Cette valeur est calculée par le programme inclus dans le logiciel XTDS, toute en respectant les règles de sélections rovibrationnelles
- ❖ 2ème colonne: L'intensité calculée pour chaque transition en atm⁻¹. cm⁻². l'intensité de la raie qui se calcule
- ❖ 3ème colonne: La branche de raie spécifique à chaque transition.
 - ightharpoonup Si $\Delta J = J_{Sup} J_{Inf} = -1$ la branche est P.
 - ightharpoonup Si $\Delta J = J_{Sup} J_{Inf} = 0$ la branche est Q.
 - ightharpoonup Si $\Delta J = J_{Sup} J_{Inf} = +1$ la branche est R.
- * 4ème colonne et 7ème colonne : la valeur du nombre quantique rotationnel du niveau inférieur J_{Inf} et du niveau supérieur J_{Sup} respectivement.
- * 5ème colonne et 8ème colonne: La symétrie de niveau vibrationnel inférieur et supérieur respectivement.
- * 6ème colonne et 9ème colonne: l'indice permettant la distinction entre deux niveaux de même symétrie.
- 10ème colonne: L'énergie de niveau inférieur.

III-5. Analyse des positions des raies de la bande v_4 de la molécule $^{80}SeF_6$:

Dans ce travail, nous avons proposé aussi de calculer et de prédire le spectre des transitions rovibrationnelles de la bande ν_4 de la molécule $^{80}SeF_6$.

La bande v_4 est l'ensemble des transitions rovibrationnelles entre les niveaux rovibrationnels ayant le nombre quantique $v_4 = 1$ et les niveaux de base GS.

La variation de nombre quantique rotationnel J peut nous donne l'ensemble des niveaux rovibrationnels possibles.

Le niveau vibrationnel ν_4 se décompose en sous niveaux vibrationnels caractérisés par des nombres quantiques secondaires ls et par leurs symétries dans le groupe O_h .

On peut obtenir des niveaux rovibrationnels appartenant au même niveau vibrationnel par la variation des nombres quantiques rotationnels J.

Dans le but de calculer le spectre des transitions rovibrationnelles de la bande ν_4 de la molécule $^{80}SeF_6$ en utilise :

États vibratoires supérieurs :

v1 v2 v3 v4 v5 v6 Cv

 $1 \mid [[[[0(0,0A1g)*\ 0(0,0A1g)*\ 0(0,0A1g)]\ A1g*\ 1(1,0F1u)]\ F1u*\ 0(0,0A1g)]\ F1u*\ 0(0,0A1g)]\ F1u > 0$

États vibrationnels inférieurs :

v1 v2 v3 v4 v5 v6 Cv

 $1 \mid [[[[0(0,0A1g)*0(0,0A1g)*0(0,0A1g)]]]] A1g*0(0,0A1g)] A1g*0(0,0A1g)] A1g*0(0,0A1g)] A1g*0(0,0A1g)]$

III-5-1. Résultats et discussion:

Le calcul du spectre des transitions rovibrationnelles de la bande v_4 de la molécule $^{80}SeF_6$, dans la région ($400-450~cm^{-1}$), nécessite l'utilisation de 14 paramètres (déterminé par M. Rotger et al [2]) relatifs à la bande v_4 de la molécule $^{80}SeF_6$, dont 1 est relatif au niveau de base GS et 13 sont relatifs au niveau v_4 .

Tableau (III-4) : Les paramètres de l'Hamiltonien relatif à la bande ν_4 de la molécule $^{80}SeF_6$.

i	$\Omega(\mathbf{k},\mathbf{n}\Gamma)$	n_s Γ_1	$\mathbf{m_s}$ $\mathbf{\Gamma_2}$	Γ	Hmn	Value/cm-1	St.Dev./cm-1
1	2(0,0A1g)	000000A1g	000000A1g	A1g	02	0.78130718020E-01	0.000000E+00
2	0(0,0A1g)	000100F1u	000100F1u	A1g	20	0.43512846152E+03	0.6475488E-04
3	1(1,0F1g)	000100F1u	000100F1u	F1g	21	0.62779819617E-01	0.2490059E-05
4	2(0,0A1g)	000100F1u	000100F1u	A1g	22	0.12648632627E-04	0.4423173E-07
5	2(2,0Eg)	000100F1u	000100F1u	Εğ	22	-0.22346353845E-04	0.2531141E-07
6	2(2,0F2g)	000100F1u	000100F1u	F2g	22	-0.6000000000E-04	0.000000E+00
7	3(1,0F1g)	000100F1u	000100F1u	F1g	23	-0.46471159771E-07	0.2319136E-09
8	3(3,0F1g)	000100F1u	000100F1u	F1g	23	0.13061089250E-07	0.1233511E-09
9	4(0,0A1q)	000100F1u	000100F1u	A1g	24	-0.15750503879E-10	0.6485780E-11
10	4(2,0E g)	000100F1u	000100F1u	Εğ	24	0.0000000000E+00	0.000000E+00
11	4(2,0F2q)	000100F1u	000100F1u	F2g	24	0.0000000000E+00	0.000000E+00
12	4(4,0A1g)	000100F1u	000100F1u	A1g	24	0.0000000000E+00	0.000000E+00
13	4(4,0Eg)	000100F1u	000100F1u	Εg	24	0.0000000000E+00	0.000000E+00
14	4(4,0F2g)	000100F1u	000100F1u	F2g	24	0.0000000000E+00	0.000000E+00

L'ensemble des paramètres reporté au tableau (III-4), nous a permis de calculer et de prédire le spectre complet de la bande v_4 de la molécule $^{80}SeF_6$ dans la fenêtre (400 – 450 cm^{-1}) (figure III-8), pour une valeur maximale de nombre quantique rotationnel Jmax = 94, avec un écart quadratique moyen de 0,295. 10^{-3} cm^{-1} très proche de la précision expérimentale.

Tableau (III-5) : Informations sur le spectre IR de la bande v_4 de la molécule 80 SeF₆.

Nombre de transitions calculées	11281
Premières Transitions	422.976883 9.21E-03 P 95 F1g
Les Transitions les plus fortes	439.763636 1.19E-01 R 36 A2g
Dernières Transitions	446.920238 1.14E-02 R 93 F1g
J_{max}	94
Intensité Sommet	$0.46.10^3 cm^{-2}$. atm^{-1} avec seuil = $0.10.10^{-2} cm^{-1}$

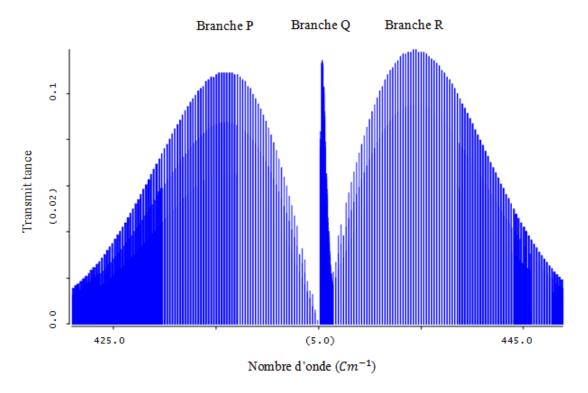


Figure (III-8): Spectre des transitions rovibrationnelles de la bande ν_4 de la molécule $^{80}SeF_6$.

III-5-2. Les niveaux d'énergies réduits :

La figure (III-9) montre la répartition des niveaux d'énergie réduits calculés en fonction de nombre quantique rotationnel J pour les différentes Transitions de la bande ν_4 . Ces niveaux sont calculés par la relation (III-6) :

On a:

$$B_0 = 0.78130718020 \text{E} \cdot 01 \text{ cm}^{-1}$$
 (III.12)

 \triangleright B_0 : Est la valeur du paramètre qui correspond à i=1 dans le tableau (III-4). [2]

$$t_{\{0\}\{0\}}^{2\ (\ 0,\ 0A_{1g})\ A_{1g}A_{1g}} = B_0 = 0.78130718020\text{E}-01cm^{-1}$$
 (III.13)

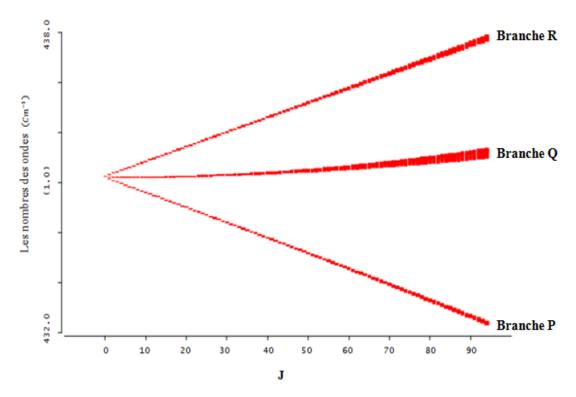


Figure (III-9): Répartitions des niveaux des énergies de niveau de v_4 de la molécule $^{80}SeF_6$.

III-5-3. Prédiction du spectre IR de la bande v_4 de la molécule $^{80}SeF_6$:

Dans le tableau (III-6), nous reportons un ensemble de transitions rovibrationnelles appartenant au spectre calculé de la bande ν_4 de la molécule en question.

Les différentes colonnes de ce tableau sont décrites dans le paragraphe III-4-3.

Tableau (III-6) : Prédiction du spectre IR de la bande ν_4 de la molécule $^{80} SeF_6.$

Fréquence	Intensité		J''	C''	n''	J	C	n	Energie inf	Population inf
434.972200	1.54E-03	Р	1	F1g	1	0	F1u	1	0.156261	0.357200E-05
435.225449	1.54E-03	R	0	A1g	1	1	A1u	1	0.000000	0.397187E-06
434.845569	6.15E-03	Р	2	E_g	1	1	E u	1	0.468784	0.792590E-05
435.098947 434.845534	4.62E-03 4.61E-03	Q P	7	F1g F2g	1 1	1 1	F1u F2u	1 1	0.156261 0.468784	0.357200E-05 0.594442E-05
434.718792	1.28E-02	P	1 2 3	A2g	i	2	A2u	1	0.937569	0.138392E-04
435.099152	1.03E-02	Q	2	E g	1	2	Eu	1	0.468784	0.792590E-05
435.352045	7.71E-03	R	1	F1g	1	2	F1u	1	0.156261	0.357200E-05
434.718920 435.099187	7.66E-03 7.69E-03	P Q	3	F1g F2g	1 1	2	F1u F2u	2 1	0.937569 0.468784	0.830350E-05 0.594442E-05
434.718863	7.66E-03	P	3 2 3	F2g	i	2	F2u	2	0.937569	0.830350E-05
434.592295	3.56E-03	Р	4	A1g	1	3	A1u	1	1.562614	0.354799E-05
435.099618	1.79E-02	Q	3 2	A2g	1	3	A2u	1	0.937569	0.138392E-04
435.478627 434.592204	1.44E-02 1.43E-02	R P	4	E g E g	1 1	3	E u E u	1 2	0.468784 1.562614	0.792590E-05 0.141920E-04
435.099459	1.43E-02 1.07E-02	Q	3	F1g	1	3	F1u	1	0.937569	0.830350E-05
434.592242	1.07E-02	P	4	F1g	1	3	F1u	2	1.562614	0.106440E-04
435.478617	1.08E-02	R	2	F2g	1	3	F2u	1	0.468784	0.594442E-05
435.099530 434.592090	1.07E-02 1.07E-02	Q P	3 4	F2g F2g	1 1	3	F2u F2u	2 3	0.937569 1.562614	0.830350E-05 0.106440E-04
435.099817	4.59E-03	Q	4	A1g	1	4	A1u	1	1.562614	0.354799E-05
435.605143	2.31E-02	Ř	3	A2g	ī	4	A2u	1	0.937569	0.138392E-04
435.099943	1.84E-02	Q	4	Εg	1	4	Еu	1	1.562614	0.141920E-04
434.465383 435.605195	1.83E-02 1.38E-02	P R	5	E g	1 1	4 4	E u F1u	2 1	2.343922 0.937569	0.172809E-04 0.830350E-05
435.099890	1.38E-02 1.38E-02	Q	3 4	F1g F1g	i	4	F1u F1u	2	1.562614	0.106440E-04
434.465353	1.37E-02	P	5	F1g	1	4	F1u	3	2.343922	0.129606E-04
434.465613	1.37E-02	Р	5	F1g	2	4	F1u	4	2.343922	0.129606E-04
435.605172 435.100101	1.38E-02 1.38E-02	R	3 4	F2g F2g	1 1	4 4	F2u F2u	1 2	0.937569 1.562614	0.830350E-05 0.106440E-04
434.465549	1.37E-02	Q P	5	F2g	i	4	F2u F2u	3	2.343922	0.100440E-04 0.129606E-04
435.731767	5.62E-03	R	4	A1g	1	5	A1u	1	1.562614	0.354799E-05
434.338555	5.55E-03	P	6	A1g	1	5	A1u	2	3.281490	0.508280E-05
434.338866 435.731722	2.78E-02 2.25E-02	P R	6 4	A2g E g	1 1	5 5	A2u E u	1 1	3.281490 1.562614	0.254140E-04 0.141920E-04
435.100677	2.24E-02	Q	5	Εg	ī	5	Εu	2	2.343922	0.172809E-04
434.338944	2.22E-02	Р	6	E g	1	5	E u	3	3.281490	0.203312E-04
435.731741 435.100336	1.69E-02 1.68E-02	R	4 5	F1g F1g	1 2	5 5	F1u F1u	1 2	1.562614 2.343922	0.106440E-04 0.129606E-04
435.100330	1.68E-02	Q Q	5	F1g	1	5	F1u F1u	3	2.343922	0.129606E-04
434.338604	1.67E-02	Р	6	F1g	1	5	F1u	4	3.281490	0.152484E-04
435.731665	1.69E-02	R	4	F2g	1	5	F2u	1	1.562614	0.106440E-04
435.100430 434.338659	1.68E-02 1.67E-02	Q P	5 6	F2g F2g	1 2	5 5	F2u F2u	2 3	2.343922 3.281490	0.129606E-04 0.152484E-04
434.338925	1.67E-02	Р	6	F2g	ī	5	F2u	4	3.281490	0.152484E-04
435.101524	6.57E-03	Q	6	A1g	1	6	A1u	1	3.281490	0.508280E-05
435.101041 434.211995	3.29E-02 3.26E-02	Q P	6 7	A2g A2g	1 1	6 6	A2u A2u	1 2	3.281490 4.375320	0.254140E-04 0.291704E-04
435.858175	2.65E-02	R	5	E g	i	6	E u	1	2.343922	0.172809E-04
435.100921	2.63E-02	Q	6	Εg	1	6	Εü	2	3.281490	0.203312E-04
434.211854	2.61E-02	P	7	E g	1	6	E u	3	4.375320	0.233363E-04
435.858157 435.858304	1.99E-02 1.99E-02	R R	5 5	F1g F1g	1 2	6 6	F1u F1u	1 2	2.343922 2.343922	0.129606E-04 0.129606E-04
435.101449	1.97E-02	Q		F1g	1	6	F1u	3	3.281490	0.152484E-04
434.211777	1.96E-02	Р	6 7	F1g	1	6	F1u	4	4.375320	0.175023E-04
434.212273 435.858268	1.96E-02 1.99E-02	P	7 5	F1g F2g	2 1	6 6	F1u F2u	5 1	4.375320 2.343922	0.175023E-04 0.129606E-04
435.100951	1.99E-02 1.97E-02	R Q	6	F2g F2g	i	6	F2u F2u	1 2	3.281490	0.152484E-04
435.101363	1.97E-02	Q	6	F2g	2	6	F2u	3	3.281490	0.152484E-04
434.211903	1.96E-02	Р	7	F2g	1	6	F2u	4	4.375320	0.175023E-04
434.212242 435.984602	1.96E-02 7.61E-03	P R	7 6	F2g A1g	2 1	6 7	F2u A1u	5 1	4.375320 3.281490	0.175023E-04 0.508280E-05
434.085613	7.48E-03	P	8	A1g	i	7	A1u	2	5.625412	0.657244E-05
435.984791	3.80E-02	R	6	A2g	1	7	A2u	1	3.281490	0.254140E-04
435.102039	3.77E-02	Q	7 6	A2g	1	7 7	A2u	2	4.375320 3.281490	0.291704E-04 0.203312E-04
435.984839 435.102264	3.04E-02 3.02E-02	R Q	7	E g E g	1 1	7	E u E u	1 2	4.375320	0.233363E-04
434.084997	2.99E-02	P	8	Εg	2	7	Εü	3	5.625412	0.262898E-04
434.085578	2.99E-02	P	8	E g	1	7	E u	4	5.625412	0.262898E-04
435.984631 435.101591	2.28E-02 2.26E-02	R Q	6 7	F1g F1g	1 2	7 7	F1u F1u	1 2	3.281490 4.375320	0.152484E-04 0.175023E-04
435.102386	2.26E-02	Q	7	F1g	1	7	F1u	3	4.375320	0.175023E-04
434.085109	2.24E-02	Р	8	F1g	2	7	F1u	4	5.625412	0.197173E-04
434.085591 435.984665	2.24E-02	P	8 6	F1g	1 2	7 7	F1u F2u	5 1	5.625412 3.281490	0.197173E-04 0.152484E-04
435.984827	2.28E-02 2.28E-02	R R	6	F2g F2g	1	7	F2u F2u	1 2	3.281490	0.152484E-04 0.152484E-04
435.101642	2.26E-02	Q	7	F2g	2	7	F2u	2	4.375320	0.175023E-04
435.102185	2.26E-02	Q	7	F2g	1	7	F2u	4	4.375320	0.175023E-04
434.084963 434.085237	2.24E-02 2.24E-02	P P	8 8	F2g F2g	2 1	7 7	F2u F2u	5 6	5.625412 5.625412	0.197173E-04 0.197173E-04
435.102328	8.50E-03	Q	8	A1g	1	8	A1u	1	5.625412	0.657244E-05
433.958322	8.42E-03	Р	9	A1g	1	8	A1u	2	7.031765	0.729629E-05

Suite du tableau (III-6).

Enégrapas	Intongitá	J"	C''	n''	т.	C	***	Enougie inf	Danulation inf
Fréquence 436.111185	Intensité 4.29E-02	R 7	A2g	1		A2u	<u>n</u> 1	Energie inf	Population inf
433.958097	4.21E-02	Р 9	A2g	1	8	A2u	2	7.031765	0.364814E-04
436.111093 435.102385	3.43E-02 3.40E-02	R 7	Εg	1 1	8	Εu	1	4.375320 5.625412	0.233363E-04 0.262898E-04
435.102383	3.40E-02 3.40E-02	Q 8 Q 8	E g E g	2	8 8	E u E u	2 3	5.625412	0.262898E-04
433.958492	3.37E-02	P 9	E g	1	8	Εu	4	7.031765	0.291852E-04
436.111044	2.57E-02	R 7	F1g	1	8	F1u	1	4.375320	0.175023E-04
436.111365 435.102364	2.57E-02 2.55E-02	R 7 Q 8	F1g F1g	2 1	8 8	F1u F1u	2 3	4.375320 5.625412	0.175023E-04 0.197173E-04
435.103154	2.55E-02	Q 8	F1g	2	8	F1u	4	5.625412	0.197173E-04
433.958193	2.52E-02	P 9	F1g	1	8	F1u	5	7.031765	0.218889E-04
433.958458 433.958930	2.52E-02 2.52E-02	P 9 P 9	F1g F1g	2 3	8 8	F1u F1u	6 7	7.031765 7.031765	0.218889E-04 0.218889E-04
436.111125	2.57E-02	R 7	F2g	ĭ	8	F2u	1	4.375320	0.175023E-04
436.111344	2.57E-02	R 7	F2g	2	8	F2u	2	4.375320	0.175023E-04
435.102947 435.103393	2.55E-02 2.55E-02	Q 8 Q 8	F2g F2g	1 2	8 8	F2u F2u	3 4	5.625412 5.625412	0.197173E-04 0.197173E-04
433.958139	2.52E-02	P 9	F2g	1	8	F2u	5	7.031765	0.218889E-04
433.958912	2.52E-02	P 9	F2g	2	8	F2u	6	7.031765	0.218889E-04
436.237890 435.104198	9.53E-03 9.44E-03	R 8 Q 9	A1g A1g	1 1	9 9	A1u A1u	1 2	5.625412 7.031765	0.657244E-05 0.729629E-05
433.831514	9.33E-03	P 10	A1g	ī	9	A1u	3	8.594379	0.800411E-05
435.104574	4.72E-02	Q 9	A2g	1	9	A2u	1	7.031765	0.364814E-04
433.832238 436.237475	4.67E-02 3.81E-02	P 10 R 8	A2g E g	1 2	9 9	A2u E u	2 1	8.594379 5.625412	0.400205E-04 0.262898E-04
436.237867	3.81E-02	R 8	Εğ	1	9	Εü	2	5.625412	0.262898E-04
435.103918	3.78E-02	Q 9	Εğ	1	9	Εu	3	7.031765	0.291852E-04
433.831303 433.832256	3.73E-02 3.73E-02	P 10 P 10	E g E g	2 1	9 9	E u E u	4 5	8.594379 8.594379	0.320164E-04 0.320164E-04
436.237550	2.86E-02	R 8	F1g	2	9	F1u	1	5.625412	0.197173E-04
436.237875	2.86E-02	R 8	F1g	1	9	F1u	2	5.625412	0.197173E-04
435.103183 435.103974	2.83E-02 2.83E-02	Q 9 Q 9	F1g F1g	3 2	9 9	F1u F1u	3 4	7.031765 7.031765	0.218889E-04 0.218889E-04
435.104414	2.83E-02	Q 9	F1g	1	9	F1u	5	7.031765	0.218889E-04
433.831356	2.80E-02	P 10	F1g	2	9	F1u	6	8.594379	0.240123E-04
433.831682 436.237452	2.80E-02 2.86E-02	P 10 R 8	F1g F2g	1 2	9 9	F1u F2u	7 1	8.594379 5.625412	0.240123E-04 0.197173E-04
436.237636	2.86E-02	R 8	F2g	1	9	F2u	2	5.625412	0.197173E-04
435.103213 435.104504	2.83E-02 2.83E-02	Q 9 0 9	F2g	2	9 9	F2u	3 4	7.031765 7.031765	0.218889E-04 0.218889E-04
433.831245	2.80E-02	Q 9 P 10	F2g F2g	1 3	9	F2u F2u	5	8.594379	0.240123E-04
433.831743	2.80E-02	P 10	F2g	2	9	F2u	6	8.594379	0.240123E-04
433.832250 436.363968	2.80E-02 1.05E-02	P 10 R 9	F2g A1g	1 1	9 10	F2u A1u	7 1	8.594379 7.031765	0.240123E-04 0.729629E-05
435.105368	1.03E-02 1.04E-02	Q 10	Alg Alg	1	10	Alu Alu	2	8.594379	0.800411E-05
436.363812	5.24E-02	R 9	A2g	1	10	A2u	1	7.031765	0.364814E-04
435.104137 433.705022	5.18E-02 5.11E-02	Q 10 P 11	A2g A2g	1 1	10 10	A2u A2u	2 3	8.594379 10.313255	0.400205E-04 0.434722E-04
436.364086	4.19E-02	R 9	E q	i	10	E u	1	7.031765	0.434722E-04 0.291852E-04
435.104106	4.14E-02	Q 10	Εğ	1	10	Еu	2	8.594379	0.320164E-04
435.105720 433.704389	4.14E-02 4.09E-02	Q 10 P 11	E g E g	2 1	10 10	E u E u	3 4	8.594379 10.313255	0.320164E-04 0.347777E-04
433.704937	4.09E-02	P 11	Eg	2	10	Eu	5	10.313255	0.347777E-04
436.363879	3.14E-02	R 9	F1g	1	10	F1u	1	7.031765	0.218889E-04
436.364063 436.364393	3.14E-02 3.14E-02	R 9 R 9	F1g F1g	2 3	10 10	F1u F1u	2 3	7.031765 7.031765	0.218889E-04 0.218889E-04
435.105083	3.11E-02	Q 10	F1g	1	10	F1u	4	8.594379	0.240123E-04
435.105631	3.11E-02	Q 10	F1g	2	10	F1u	5	8.594379	0.240123E-04
433.704355 433.704684	3.07E-02 3.07E-02	P 11 P 11	F1g F1g	1 2	10 10	F1u F1u	6 7	10.313255 10.313255	0.260833E-04 0.260833E-04
433.705583	3.07E-02	P 11	F1g	3	10	F1u	8	10.313255	0.260833E-04
436.363841	3.14E-02	R 9	F2g	1	10	F2u	1 2	7.031765	0.218889E-04
436.364380 435.104116	3.14E-02 3.11E-02	R 9 Q 10	F2g F2g	2 1	10 10	F2u F2u	3	7.031765 8.594379	0.218889E-04 0.240123E-04
435.104980	3.11E-02	Q 10	F2g	2	10	F2u	4	8.594379	0.240123E-04
435.105819	3.11E-02	Q 10	F2g	3	10	F2u	5	8.594379	0.240123E-04
433.704469 433.704970	3.07E-02 3.07E-02	P 11 P 11	F2g F2g	1 2	10 10	F2u F2u	6 7	10.313255 10.313255	0.260833E-04 0.260833E-04
433.705575	3.07E-02	P 11	F2g	3	10	F2u	8	10.313255	0.260833E-04
436.490361	1.14E-02	R 10	A1g	1	11	A1u	1	8.594379	0.800411E-05
433.577418 433.578913	1.11E-02 1.11E-02	P 12 P 12	A1g A1g	2 1	11 11	A1u A1u	2 3	12.188392 12.188392	0.936586E-05 0.936586E-05
436.490881	5.69E-02	R 10	A2g	1	11	A2u	1	8.594379	0.400205E-04
435.106080	5.62E-02	Q 11	A2g	1	11	A2u	2	10.313255	0.434722E-04
433.577584 436.490211	5.55E-02 4.55E-02	P 12 R 10	A2g E g	1 2	11 11	A2u E u	3 1	12.188392 8.594379	0.468293E-04 0.320164E-04
436.490894	4.55E-02	R 10	Εğ	1	11	Eu	2	8.594379	0.320164E-04
435.106223	4.50E-02	Q 11	Εğ	2	11	Εu	3	10.313255	0.347777E-04
435.107157 433.577868	4.50E-02 4.44E-02	Q 11 P 12	E g E g	1 2	11 11	E u E u	4 5	10.313255 12.188392	0.347777E-04 0.374634E-04
433.578905	4.44E-02	P 12	E g	1	11	Eu	6	12.188392	0.374634E-04
436.490249	3.42E-02	R 10	F1g	2	11	F1u	1	8.594379	0.240123E-04

Suite du tableau (III-6).

Fréquence	Intensité	J''	<u>C'''</u>	<u>n''</u>	<u>J</u>	C	n	Energie inf	Population inf
436.490481 435.105113	3.42E-02 R 3.37E-02 Q		F1g F1g	1 3	11 11	F1u F1u	2 3	8.594379 10.313255	0.240123E-04 0.260833E-04
435.106658	3.37E-02 Q	11	F1g	2	11	F1u	4	10.313255	0.260833E-04
435.107215 433.577455	3.37E-02 Q 3.33E-02 P		F1g F1g	1 3	11 11	F1u F1u	5 6	10.313255 12.188392	0.260833E-04 0.280976E-04
433.578197	3.33E-02 P		F1g	2	11	F1u	7	12.188392	0.280976E-04 0.280976E-04
433.578907	3.33E-02 P		F1ğ	1	11	F1u	8	12.188392	0.280976E-04
436.490170 436.490525	3.42E-02 R 3.42E-02 R		F2g F2g	3 2	11 11	F2u F2u	1 2	8.594379 8.594379	0.240123E-04 0.240123E-04
436.490890	3.42E-02 R		F2g	1	11	F2u	3	8.594379	0.240123E-04 0.240123E-04
435.105126	3.37E-02 Q		F2g	3	11	F2u	4	10.313255	0.260833E-04
435.106167 435.107020	3.37E-02 Q 3.37E-02 Q		F2g F2g	2 1	11 11	F2u F2u	5 6	10.313255 10.313255	0.260833E-04 0.260833E-04
433.577502	3.33E-02 P	12	F2g	3	11	F2u	7	12.188392	0.280976E-04
433.577823	3.33E-02 P		F2g	2 1	11	F2u	8	12.188392	0.280976E-04
433.578249 435.106198	3.33E-02 P 1.21E-02 Q		F2g A1g	1	11 12	F2u A1u	9 1	12.188392 12.188392	0.280976E-04 0.936586E-05
435.108780	1.21E-02 Q	12	A1g	2	12	A1u	2	12.188392	0.936586E-05
433.451437 436.616973	1.19E-02 P 6.14E-02 R		A1g A2g	1 1	12 12	A1u A2u	3 1	14.219791 10.313255	0.100171E-04 0.434722E-04
435.108493	6.06E-02 Q		A2g A2g	1	12	A2u	2	12.188392	0.468293E-04
433.450839	5.97E-02 P	13	A2g	1	12	A2u	3	14.219791	0.500853E-04
436.616513 436.616912	4.91E-02 R 4.91E-02 R		E g E g	1 2	12 12	E u E u	1 2	10.313255 10.313255	0.347777E-04 0.347777E-04
435.106212	4.85E-02 Q	12	Εq	1	12	Eu	3	12.188392	0.374634E-04
435.108010	4.85E-02 Q		Εğ	2	12	Εu	4	12.188392	0.374634E-04
433.450536 433.451498	4.78E-02 P 4.78E-02 P		E g E g	1 2	12 12	E u E u	5 6	14.219791 14.219791	0.400682E-04 0.400682E-04
436.616488	3.68E-02 R	11	F1g	1	12	F1u	1	10.313255	0.260833E-04
436.616727 436.617386	3.68E-02 R 3.68E-02 R		F1g F1g	2 3	12 12	F1u F1u	2	10.313255 10.313255	0.260833E-04 0.260833E-04
435.106207	3.63E-02 Q		F1g	1	12	F1u	4	12.188392	0.280976E-04
435.107440	3.63E-02 Q	12	F1g	2 3	12	F1u	5	12.188392	0.280976E-04
435.108717 433.450491	3.63E-02 Q 3.58E-02 P		F1g F1g	3 1	12 12	F1u F1u	6 7	12.188392 14.219791	0.280976E-04 0.300512E-04
433.451046	3.58E-02 P		F1g	2 3	12	F1u	8	14.219791	0.300512E-04
433.451480	3.58E-02 P		F1g	3	12	F1u	9	14.219791	0.300512E-04
433.452237 436.616571	3.58E-02 P 3.68E-02 R		F1g F2g	4 1	12 12	F1u F2u	10 1	14.219791 10.313255	0.300512E-04 0.260833E-04
436.616936	3.68E-02 R	11	F2g	2	12	F2u	2	10.313255	0.260833E-04
436.617380 435.107351	3.68E-02 R 3.63E-02 O		F2g F2g	3 1	12 12	F2u F2u	3 4	10.313255 12.188392	0.260833E-04 0.280976E-04
435.107331	3.63E-02 Q 3.63E-02 Q		F2g	2	12	F2u F2u	5	12.188392	0.280976E-04 0.280976E-04
435.108635	3.63E-02 Q		F2g	3	12	F2u	6	12.188392	0.280976E-04
433.450582 433.450964	3.58E-02 P 3.58E-02 P		F2g F2g	1 2	12 12	F2u F2u	7 8	14.219791 14.219791	0.300512E-04 0.300512E-04
433.452234	3.58E-02 P		F2g	3	12	F2u	9	14.219791	0.300512E-04
436.742761	1.31E-02 R		A1g	2	13	A1u	1	12.188392	0.936586E-05
436.743871 435.108776	1.31E-02 R 1.30E-02 Q		Alg Alg	1 1	13 13	A1u A1u	2 3	12.188392 14.219791	0.936586E-05 0.100171E-04
433.324279	1.28E-02 P	14	A1g	1	13	A1u	4	16.407451	0.106468E-04
436.742883 435.109817	6.57E-02 R 6.48E-02 Q		A2g A2g	1 1	13 13	A2u A2u	1 2	12.188392 14.219791	0.468293E-04 0.500853E-04
433.325562	6.38E-02 P		A2g	1	13	A2u	3	16.407451	0.532338E-04
436.743092	5.26E-02 R		E g	2	13	Εu	1	12.188392	0.374634E-04
436.743865 435.108673	5.26E-02 R 5.18E-02 Q		E g E g	1 2	13 13	E u E u	2 3	12.188392 14.219791	0.374634E-04 0.400682E-04
435.110336	5.18E-02 Q	13	Εg	1	13	Εu	4	14.219791	0.400682E-04
433.323558 433.324136	5.10E-02 P 5.10E-02 P		E g E g	3 2	13 13	E u E u	5 6	16.407451 16.407451	0.425871E-04 0.425871E-04
433.325565	5.10E-02 P		E g	1	13	Eu	7	16.407451	0.425871E-04 0.425871E-04
436.742788	3.94E-02 R		F1g	3	13	F1u	1	12.188392	0.280976E-04
436.743337 436.743867	3.94E-02 R 3.94E-02 R		F1g F1g	2 1	13 13	F1u F1u	2 3	12.188392 12.188392	0.280976E-04 0.280976E-04
435.107377	3.89E-02 Q		F1g	4	13	F1u	4	14.219791	0.300512E-04
435.108703	3.89E-02 Q		F1g	3	13	F1u	5	14.219791	0.300512E-04
435.109459 435.110414	3.89E-02 Q 3.89E-02 Q		F1g F1g	2 1	13 13	F1u F1u	6 7	14.219791 14.219791	0.300512E-04 0.300512E-04
433.323612	3.83E-02 P	14	F1g	3	13	F1u	8	16.407451	0.319403E-04
433.324192 433.324720	3.83E-02 P 3.83E-02 P		F1g	2	13 13	F1u F1u	9 10	16.407451 16.407451	0.319403E-04 0.319403E-04
433.324720	3.83E-02 P 3.94E-02 R		F1g F2g	1 3	13	F1u F2u	10 1	12.188392	0.319403E-04 0.280976E-04
436.743059	3.94E-02 R	12	F2g	2	13	F2u	2	12.188392	0.280976E-04
436.743375 435.107383	3.94E-02 R 3.89E-02 Q		F2g F2g	1 3	13 13	F2u F2u	3 4	12.188392 14.219791	0.280976E-04 0.300512E-04
435.107585	3.89E-02 Q		F2g	2	13	F2u F2u	5	14.219791	0.300512E-04 0.300512E-04
435.110256	3.89E-02 Q	13	F2g	1	13	F2u	6	14.219791	0.300512E-04
433.323526 433.323941	3.83E-02 P 3.83E-02 P		F2g F2g	4 3	13 13	F2u F2u	7 8	16.407451 16.407451	0.319403E-04 0.319403E-04
433.324748	3.83E-02 P	14	F2g	2	13	F2u	9	16.407451	0.319403E-04
433.325564	3.83E-02 P		F2g	1	13	F2u	10	16.407451	0.319403E-04
436.869736	1.40E-02 R	13	A1g	1	14	A1u	1	14.219791	0.100171E-04

Suite du tableau (III-6).

TD /	T / *//	T11	CIII	•••		<u> </u>			D 1
Fréquence 435,110899	Intensité 1.38E-02	J'' Q 14	C''	n''	J	C A1u	<u>n</u> 2	Energie inf 16.407451	Population inf 0.106468E-04
433.196638	1.35E-02 1.35E-02	P 15	Alg Alg	1	14	A1u A1u	3	18.751372	0.100408E-04 0.112538E-04
436.869287	7.00E-02	R 13	A2g	1	14	A2u	1	14.219791	0.500853E-04
435.108642 433.196519	6.89E-02 6.77E-02	Q 14 P 15	A2g A2g	1 1	14 14	A2u A2u	2 3	16.407451 18.751372	0.532338E-04 0.562690E-04
433.198009	6.77E-02	P 15	A2g A2g	2	14	A2u	4	18.751372	0.562690E-04
436.869061	5.60E-02	R 13	Εğ	1	14	Еu	1	14.219791	0.400682E-04
436.869782 435.108636	5.60E-02 5.51E-02	R 13 O 14	E g E g	2 1	14 14	E u E u	2 3	14.219791 16.407451	0.400682E-04 0.425871E-04
435.111146	5.51E-02 5.51E-02	Q 14 Q 14	E g E g	2	14	Eu	4	16.407451	0.425871E-04 0.425871E-04
435.112149	5.51E-02	Q 14	Εğ	3	14	Еu	5	16.407451	0.425871E-04
433.197058 433.197979	5.42E-02 5.42E-02	P 15 P 15	E g E g	1 2	14 14	E u E u	6 7	18.751372 18.751372	0.450152E-04 0.450152E-04
436.869028	4.20E-02	R 13	F1g	1	14	F1u	1	14.219791	0.300512E-04
436.869442	4.20E-02	R 13	F1g	2	14	F1u	2	14.219791	0.300512E-04
436.869768	4.20E-02 4.20E-02	R 13 R 13	F1g	3 4	14 14	F1u F1u	3 4	14.219791 14.219791	0.300512E-04 0.300512E-04
436.870343 435.110124	4.13E-02	R 13 Q 14	F1g F1g	1	14	F1u	5	16.407451	0.300312E-04 0.319403E-04
435.111050	4.13E-02	Q 14	F1ğ	2	14	F1u	6	16.407451	0.319403E-04
435.112053	4.13E-02	Q 14	F1g	3	14	F1u	7	16.407451	0.319403E-04
433.196587 433.197006	4.06E-02 4.06E-02	P 15 P 15	F1g F1g	1 2	14 14	F1u F1u	8 9	18.751372 18.751372	0.337614E-04 0.337614E-04
433.197425	4.06E-02	P 15	F1g	3	14	F1u	10	18.751372	0.337614E-04
433.198894	4.06E-02	P 15	F1g	4	14	F1u	11	18.751372	0.337614E-04
436.869096 436.869381	4.20E-02 4.20E-02	R 13 R 13	F2g F2g	1 2	14 14	F2u F2u	1 2	14.219791 14.219791	0.300512E-04 0.300512E-04
436.870340	4.20E-02	R 13	F2g	3	14	F2u	3	14.219791	0.300512E-04
435.108638	4.13E-02	Q 14	F2g	1	14	F2u	4	16.407451	0.319403E-04
435.110077 435.111488	4.13E-02 4.13E-02	Q 14 Q 14	F2g F2g	2 3	14 14	F2u F2u	5 6	16.407451 16.407451	0.319403E-04 0.319403E-04
435.112204	4.13E-02	Q 14	F2g	4	14	F2u	7	16.407451	0.319403E-04
433.196549	4.06E-02	P 15	F2g	1	14	F2u	8	18.751372	0.337614E-04
433.197321 433.197990	4.06E-02 4.06E-02	P 15 P 15	F2g F2g	2 3	14 14	F2u F2u	9 10	18.751372 18.751372	0.337614E-04 0.337614E-04
433.198893	4.06E-02	P 15	F2g	4	14	F2u	11	18.751372	0.337614E-04
436.995822	1.48E-02	R 14	A1g	1	15	A1u	1	16.407451	0.106468E-04
435.113944 433.069972	1.46E-02 1.43E-02	Q 15 P 16	A1g A1g	1 2	15 15	A1u A1u	2 3	18.751372 21.251555	0.112538E-04 0.118371E-04
433.072225	1.43E-02	P 16	A1g	1	15	A1u	4	21.251555	0.118371E-04
436.996803	7.40E-02	R 14	A2g	1 2	15 15	A2u	1	16.407451	0.532338E-04
435.111548 435.114154	7.28E-02 7.28E-02	Q 15 Q 15	A2g A2g	1	15	A2u A2u	2 3	18.751372 18.751372	0.562690E-04 0.562690E-04
433.070469	7.15E-02	P 16	A2g	1	15	A2u	4	21.251555	0.591853E-04
436.995277	5.92E-02	R 14	Εg	3	15	Εu	1	16.407451	0.425871E-04
436.995714 436.996806	5.92E-02 5.92E-02	R 14 R 14	E g E g	2 1	15 15	E u E u	2 3	16.407451 16.407451	0.425871E-04 0.425871E-04
435.111599	5.82E-02	Q 15	E g	2	15	Εu	4	18.751372	0.450152E-04
435.113219 433.069550	5.82E-02	Q 15 P 16	Εg	1	15 15	Εu	5	18.751372	0.450152E-04
433.070599	5.72E-02 5.72E-02	P 16 P 16	E g E g	3 2	15	E u E u	6 7	21.251555 21.251555	0.473482E-04 0.473482E-04
433.072223	5.72E-02	P 16	Εğ	1	15	Εu	8	21.251555	0.473482E-04
436.995318 436.995755	4.44E-02 4.44E-02	R 14 R 14	F1g F1g	3 2	15 15	F1u F1u	1 2	16.407451 16.407451	0.319403E-04 0.319403E-04
436.996158	4.44E-02	R 14	F1g	1	15	F1u	3	16.407451	0.319403E-04 0.319403E-04
435.109979	4.37E-02	Q 15	F1g	4	15	F1u	4	18.751372	0.337614E-04
435.112576 435.113311	4.37E-02 4.37E-02	Q 15 Q 15	F1g F1g	3 2	15 15	F1u F1u	5 6	18.751372 18.751372	0.337614E-04 0.337614E-04
435.114036	4.37E-02	Q 15 Q 15	F1g	1	15	F1u	7	18.751372	0.337614E-04
433.069585	4.29E-02	P 16	F1g	4	15	F1u	8	21.251555	0.355112E-04
433.070073 433.071238	4.29E-02 4.29E-02	P 16 P 16	F1g F1g	3 2	15 15	F1u F1u	9 10	21.251555 21.251555	0.355112E-04 0.355112E-04
433.072224	4.29E-02	P 16	F1g	1	15	F1u	11	21.251555	0.355112E-04 0.355112E-04
436.995253	4.44E-02	R 14	F2g	4	15	F2u	1	16.407451	0.319403E-04
436.995566 436.996178	4.44E-02 4.44E-02	R 14 R 14	F2g F2g	3 2	15 15	F2u F2u	2 3	16.407451 16.407451	0.319403E-04 0.319403E-04
436.996805	4.44E-02 4.44E-02	R 14	F2g F2g	1	15	F2u F2u	4	16.407451	0.319403E-04 0.319403E-04
435.109982	4.37E-02	Q 15	F2g	4	15	F2u	5	18.751372	0.337614E-04
435.111581 435.112757	4.37E-02 4.37E-02	Q 15 Q 15	F2g F2g	3 2	15 15	F2u F2u	6 7	18.751372 18.751372	0.337614E-04 0.337614E-04
435.114101	4.37E-02 4.37E-02	Q 15 Q 15	F2g F2g	1	15	F2u F2u	8	18.751372	0.337614E-04 0.337614E-04
433.069517	4.29E-02	P 16	F2g	4	15	F2u	9	21.251555	0.355112E-04
433.070165 433.070566	4.29E-02 4.29E-02	P 16 P 16	F2g F2g	3 2	15 15	F2u F2u	10 11	21.251555 21.251555	0.355112E-04 0.355112E-04
433.071253	4.29E-02 4.29E-02	P 16	F2g F2g	1	15	F2u F2u	12	21.251555	0.355112E-04 0.355112E-04
437.121525	1.56E-02	R 15	A1g	1	16	A1u	1	18.751372	0.112538E-04
435.111406 435.115395	1.53E-02 1.53E-02	Q 16 Q 16	Alg Alg	1 2	16 16	A1u A1u	2 3	21.251555 21.251555	0.118371E-04 0.118371E-04
432.944493	1.53E-02 1.50E-02	Q 16 P 17	Alg Alg	1	16	Alu Alu	3 4	23.908000	0.123955E-04
437.121434	7.79E-02	R 15	A2g	1	16	A2u	1	18.751372	0.562690E-04
437.122572 435.114517	7.79E-02 7.66E-02	R 15 Q 16	A2g	2 1	16 16	A2u A2u	2 3	18.751372 21.251555	0.562690E-04 0.591853E-04
432.943371	7.50E-02 7.51E-02	Q 16 P 17	A2g A2g	1	16	AZU AZU	4	23.908000	0.619776E-04

Suite du tableau (III-6).

437, 121844 6, 6, 244-02 R 15 E G 2 16 E U 1 18,751372 0, 450152E-04 437, 121550 6, 244-02 R 15 E G 2 16 E U 3 18,751372 0, 450152E-04 437, 121550 6, 121E-02 Q 16 E G 2 16 E U 3 18,751372 0, 450152E-04 438, 114293 6, 6, 121E-02 Q 16 E G G 3 16 E U 5 21,251555 0, 473482E-04 439, 14450 6, 6, 121E-02 Q 16 E G G 3 16 E U 5 21,251555 0, 473482E-04 431, 12160 6, 01E-02 P 17 E G G 3 16 E U 5 21,251555 0, 473482E-04 432, 94450 6, 6, 01E-02 P 17 E G G 3 16 E U 5 23,908000 0, 459821E-04 437, 12180 4, 681E-02 R 15 F 19 1 16 F 11 1 18,751372 0, 337614E-04 437, 12180 4, 681E-02 R 15 F 19 2 16 F 11 2 18,751372 0, 337614E-04 437, 12180 4, 681E-02 R 15 F 19 1 16 F 11 1 18,751372 0, 337614E-04 437, 12180 4, 681E-02 R 15 F 19 1 16 F 11 2 18,751372 0, 337614E-04 438, 13120 4, 681E-02 R 15 F 19 1 16 F 11 2 18,751372 0, 337614E-04 439, 13180 4, 4581E-02 Q 16 F 19 1 16 F 11 2 18,751372 0, 337614E-04 431, 131160 7, 4591E-02 Q 16 F 19 1 16 F 11 2 18,751372 0, 337614E-04 432, 94478 4, 511E-02 Q 1 16 F 19 1 16 F 11 2 1, 21, 21555 0, 355112E-04 433, 13120 7, 4591E-02 Q 16 F 19 1 16 F 11 2 1, 21, 21555 0, 355112E-04 432, 943773 4, 451E-02 P 17 F 19 1 16 F 11 2 1, 21, 21, 21, 21, 21, 21, 21, 21,										
437.122550 6.24E-02 Q 16 E 9 1 16 E 9 2 16 E 0 2 2 18.751372 O.45015ZE-04 435.1114039 6.12E-02 Q 16 E 9 1 16 E 9 1 16 E 0 4 3 1.251555 O.47348ZE-04 435.114039 6.01E-02 P 17 E 9 1 16 E 0 4 3 1.251555 O.47348ZE-04 432.942903 6.01E-02 P 17 E 9 1 16 E 0 4 3 1.251555 O.47348ZE-04 432.943160 6.01E-02 P 17 E 9 1 16 E 0 4 3 1.251555 O.47348ZE-04 432.943160 6.01E-02 P 17 E 9 1 16 E 0 4 3 1.251555 O.47348ZE-04 432.943160 6.01E-02 P 17 E 9 1 16 E 0 4 5 2.3908000 O.4958ZIE-04 432.943160 6.01E-02 P 17 E 9 2 16 E 0 7 23.908000 O.4958ZIE-04 437.121214 4.68E-02 R 15 F10 3 16 F10 2 18.751372 O.337614E-04 437.121214 4.68E-02 R 15 F10 3 16 F10 4 18.751372 O.337614E-04 437.121216 4.68E-02 R 15 F10 3 16 F10 4 18.751372 O.337614E-04 437.121216 4.58E-02 Q 16 F10 2 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11360 4.59E-02 Q 16 F10 2 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11360 4.59E-02 Q 16 F10 2 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11360 4.59E-02 Q 16 F10 2 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11360 4.59E-02 Q 16 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11360 4.59E-02 Q 16 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11360 4.59E-02 Q 16 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11360 4.59E-02 Q 16 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11360 4.59E-02 Q 16 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11360 4.59E-02 Q 16 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11360 4.59E-02 Q 16 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11360 4.59E-02 Q 16 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 435.11401 4.59E-02 Q 16 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 437.12254 4.68E-02 R 17 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 437.12264 4.68E-02 R 17 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 437.12355 4.58E-02 P 17 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 437.12355 4.58E-02 P 17 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 437.12355 4.58E-02 P 17 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 437.12355 4.68E-02 R 17 F10 4 16 F10 4 18.751375 O.337614E-04 437.12355 6.68E-02 R 18 F10	Fréquence	Intensité	J''	<u>C''</u>	<u>n''</u>	<u>J</u>	C		Energie inf	Population inf
435. 114.903										
432, 1416226 6.01E-02 P 17 E 9 1 16 E 0 5 21.251555 0.473482E-04 432, 942503 6.01E-02 P 17 E 9 1 16 E 0 6 E 0 7 823.908000 0.495821E-04 437, 121803 4.68E-02 R 15 F19 1 16 F10 1 18.751372 0.337614E-04 437, 121803 4.68E-02 R 15 F19 2 16 F10 1 18.751372 0.337614E-04 437, 121803 4.69E-02 R 15 F19 2 16 F10 1 18.751372 0.337614E-04 437, 121803 4.59E-02 Q 16 F19 2 16 F10 1 16 F10 1 1.751372 0.337614E-04 437, 121803 4.59E-02 Q 16 F19 2 16 F10 1 16 F10 1 2.18751572 0.337614E-04 437, 121803 4.59E-02 Q 16 F19 2 16 F10 1 16 F10 5 21.251555 0.355112E-04 435, 131307 4.59E-02 Q 16 F19 2 16 F10 7 21.251555 0.355112E-04 435, 131307 4.59E-02 Q 17 F19 2 16 F10 7 21.251555 0.355112E-04 432, 943775 4.51E-02 P 17 F19 2 16 F10 1 2 2.9595 0.355112E-04 432, 943775 4.51E-02 P 17 F19 2 16 F10 1 2.3908000 0.371865E-04 432, 943775 4.51E-02 P 17 F19 3 16 F10 1 2.3908000 0.371865E-04 437, 121257 4.68E-02 R 15 F29 2 16 F10 1 18.751372 0.337614E-04 437, 121257 4.68E-02 R 15 F29 2 16 F10 1 12.3908000 0.371865E-04 432, 943775 4.51E-02 P 17 F19 3 16 F10 1 12.3908000 0.371865E-04 437, 121257 4.68E-02 R 15 F29 2 16 F10 1 12.3908000 0.371865E-04 437, 121257 4.68E-02 R 15 F29 3 16 F10 1 12.3908000 0.371865E-04 437, 121257 4.68E-02 R 15 F29 3 16 F10 1 12.3908000 0.371865E-04 437, 121257 4.68E-02 R 15 F29 3 16 F10 1 12.3908000 0.371865E-04 437, 121258 4.68E-02 R 15 F29 3 16 F10 1 12.3908000 0.371865E-04 437, 121258 4.68E-02 R 15 F29 3 16 F20 1 3 18.751372 0.337614E-04 437, 121457 4.68E-02 R 15 F29 3 16 F20 1 3 18.751372 0.337614E-04 437, 121458 4.59E-02 Q 16 F29 3 16 F20 1 3 18.751372 0.337614E-04 437, 121459 6.68E-02 R 15 F29 3 16 F20 1 3 18.751372 0.337614E-04 437, 121459 6.68E-02 R 15 F29 3 16 F20 1 3 18.751372 0.337614E-04 437, 121450 6.68E-02 R 15 F29 3 16 F20 1 3 18.751372 0.337614E-04 437, 121459 6.68E-02 R 15 F29 3 16 F20 1 3 18.751372 0.337614E-04 437, 121450 6.68E-02 R 15 F29 3 16 F20 1 3 18.751372 0.337614E-04 437, 121450 6.68E-02 R 15 F29 3 16 F20 1 3 18.751372 0.337614E-04 437, 121450 6.68E-02 R 15 F29 3 16 F20 1 3 18.751372 0.337614E-04 4	435.111409	6.12E-02	Q 16	Εg	1	16	Εu	3	21.251555	0.473482E-04
432, 943503 6 6.01E-02 p 17 F 9 2 16 F 10 6 E u 7 6 23, 908000 0 .495821E-04 432, 943160 6 .01E-02 p 17 F 9 2 16 F 10 3 16 F 10 7 23, 908000 0 .495821E-04 437, 121214 4 .68E-02 R 15 F 10 3 16 F 10 3 18, 751372 0 .337614E-04 437, 1212154 4 .68E-02 R 15 F 10 3 16 F 10 3 18, 751372 0 .337614E-04 437, 1212154 4 .68E-02 R 15 F 10 3 16 F 10 3 18, 751372 0 .337614E-04 437, 1212154 4 .68E-02 R 15 F 10 3 16 F 10 3 18, 751372 0 .337614E-04 437, 1212156 4 .68E-02 R 15 F 10 3 16 F 10 3 18, 751372 0 .337614E-04 437, 121216 1 .69E-02 Q 16 F 10 3 16 F 10 3 12, 121555 0 .355112E-04 435, 113160 1 .69E-02 Q 16 F 10 3 16 F 10 8 21, 251555 0 .355112E-04 435, 113160 1 .69E-02 Q 16 F 10 3 16 F 10 8 21, 251555 0 .355112E-04 435, 1136063 4 .59E-02 Q 17 F 10 3 16 F 10 8 21, 251555 0 .355112E-04 435, 143217 4 .59E-02 Q 17 F 10 3 16 F 10 8 21, 251555 0 .355112E-04 435, 143217 5 .99E-02 Q 17 F 10 3 16 F 10 8 21, 251555 0 .355112E-04 435, 143217 5 .99E-02 Q 17 F 10 5 16 F 10 8 21, 251555 0 .355112E-04 432, 942787 4 .51E-02 P 17 F 10 2 16 F 10 8 21, 251555 0 .355112E-04 432, 943775 4 .58E-02 P 17 F 10 5 16 F 10 1 3 23, 908000 0 .371865E-04 432, 943556 4 .51E-02 P 17 F 10 5 16 F 10 1 3 23, 908000 0 .371865E-04 437, 122558 4 .68E-02 R 15 F 20 3 16 F 20 1 1 23, 908000 0 .371865E-04 437, 122557 4 .68E-02 R 15 F 20 3 16 F 20 1 1 23, 908000 0 .371865E-04 437, 122558 4 .58E-02 R 15 F 20 3 16 F 20 1 1 23, 908000 0 .371865E-04 437, 122558 4 .58E-02 R 15 F 20 3 16 F 20 1 1 23, 908000 0 .371865E-04 437, 124507 1 .68E-02 R 15 F 20 3 16 F 20 1 1 23, 908000 0 .371865E-04 437, 124507 1 .68E-02 R 15 F 20 3 16 F 20 1 1 23, 908000 0 .371865E-04 437, 124507 1 .68E-02 R 15 F 20 3 16 F 20 1 1 23, 908000 0 .371865E-04 437, 124507 1 .68E-02 R 16 F 20 1 1 16 F 20 1 23, 908000 0 .371865E-04 437, 124507 1 .68E-02 R 16 F 20 1 1 16 F 20 1 23, 908000 0 .371865E-04 437, 124507 1 .68E-02 R 16 F 20 1 1 16 F 20 1 23, 908000 0 .371865E-04 437, 124507 1 .68E-02 R 16 F 20 1 1 16 F 20 1 23, 908000 0 .371865E-04 437, 124507 1 .68E-02 R 16 F 20 1 1 1 7 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1			•							
432, 943160 6.01E-02 P 17 F 6 9 2 16 F 10 7 23, 908000 0.495821E-04 432, 94450 6.01E-02 P 17 F 6 9 3 16 F 10 1 13, 751372 0.337614E-04 437, 122124 4.68E-02 R 15 F 10 3 16 F 10 1 13, 751372 0.337614E-04 437, 122124 4.68E-02 R 15 F 10 3 16 F 10 1 18, 751372 0.337614E-04 437, 122124 4.68E-02 R 15 F 10 3 16 F 10 1 18, 751372 0.337614E-04 437, 122125 4.68E-02 R 15 F 10 3 16 F 10 4 16 F 10 5 12, 751555 0.355112E-04 437, 122126 4.68E-02 R 15 F 10 3 16 F 10 4 16 F 10 5 12, 751555 0.355112E-04 438, 113160 4.59E-02 0 16 F 10 7 16 F 10 7 12, 75155 0.355112E-04 439, 12416 4.59E-02 0 16 F 10 7 16 F 10 7 12, 75155 0.355112E-04 432, 942478 4.51E-02 P 17 F 10 1 16 F 10 9 23, 908000 0.371865E-04 432, 943670 4.51E-02 P 17 F 10 7 16 F 10 1 12 23, 908000 0.371865E-04 432, 943718 4.31E-02 P 17 F 10 5 16 F 10 1 12 23, 908000 0.371865E-04 437, 122159 4.68E-02 R 15 F 20 1 16 F 10 1 23, 908000 0.371865E-04 437, 122159 4.68E-02 R 15 F 20 1 16 F 10 1 23, 908000 0.371865E-04 437, 122154 4.68E-02 R 15 F 20 1 16 F 10 1 23, 908000 0.371865E-04 437, 122154 4.68E-02 R 15 F 20 2 1 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 122154 4.68E-02 R 15 F 20 2 1 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 122154 4.68E-02 R 15 F 20 2 1 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 122154 4.68E-02 R 15 F 20 2 1 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 122154 4.68E-02 R 15 F 20 2 1 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 122154 4.68E-02 R 15 F 20 2 1 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 12358 4.59E-02 0 16 F 20 2 1 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 12358 4.59E-02 0 16 F 20 2 1 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 12358 4.59E-02 0 16 F 20 2 1 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 12358 4.59E-02 0 16 F 20 2 1 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 12358 4.59E-02 0 16 F 20 2 1 17 F 20 3 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 12358 4.59E-02 0 16 F 20 2 1 17 F 20 3 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 12358 6.49E-02 0 16 F 20 2 1 17 F 20 3 16 F 20 2 3 18, 751372 0.337614E-04 437, 12358 6.49E-02 0 16 F 20 2 17 F 20 3 16 F 20 2 3 18, 751372 0.3376										
437. 121485	432.943160	6.01E-02	P 17	Εğ	2	16	Εu	7	23.908000	0.495821E-04
437.121803 4.68E-02 R 15 Fig 2 16 Filu 2 18.751372 0.337614E-04 437.122124 4.68E-02 R 15 Fig 3 16 Filu 3 18.751372 0.337614E-04 437.123258 4.68E-02 R 15 Filg 3 16 Filu 4 18.751372 0.337614E-04 437.123258 4.59E-02 Q 16 Filg 4 16 Filu 6 21.251555 0.355112E-04 435.113608 4.59E-02 Q 16 Filg 3 16 Filu 7 21.251555 0.355112E-04 435.113608 4.59E-02 Q 16 Filg 4 16 Filu 8 21.251555 0.355112E-04 435.113608 4.59E-02 Q 16 Filg 4 16 Filu 8 21.251555 0.355112E-04 435.113608 4.59E-02 Q 16 Filg 4 16 Filu 8 21.251555 0.355112E-04 435.113608 4.59E-02 Q 16 Filg 4 16 Filu 8 21.251555 0.355112E-04 432.942775 4.51E-02 P 17 Filg 3 16 Filu 11 22.3908000 0.371865E-04 432.945775 4.51E-02 P 17 Filg 3 16 Filu 11 22.3908000 0.371865E-04 432.94556 4.51E-02 P 17 Filg 5 16 Filu 11 22.3908000 0.371865E-04 437.122558 4.68E-02 R 15 Fill 16 Filu 11 22.3908000 0.371865E-04 437.122558 4.68E-02 R 15 Fill 16 Fill 18 12 23.908000 0.371865E-04 437.122558 4.68E-02 R 15 Fill 16 Fill 18 18 23.3908000 0.371865E-04 437.122558 4.68E-02 R 15 Fill 18 Fill 18 Fill 18 731372 0.337614E-04 435.113135 4.59E-02 Q 16 Fill 18 Fill 18 Fill 18 731372 0.337614E-04 435.113135 4.59E-02 Q 16 Fill 19 Fill 18 Fill										
437.123249 4.68E-02 R 15 F10 3 16 F1u 4 18.751372 0.337614E-04 437.123259 4.68E-02 R 15 F10 4 16 F1u 6 12.3372 0.337614E-04 437.123259 4.68E-02 R 15 F10 4 16 F1u 6 12.3372 0.337614E-04 435.1132167 4.59E-02 Q 16 F10 3 16 F1u 6 72.251555 0.355112E-04 435.115217 4.59E-02 Q 16 F10 3 16 F1u 7 22.251555 0.355112E-04 435.115217 4.59E-02 Q 16 F10 3 16 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 432.942748 4.51E-02 P 17 F10 1 16 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 432.942748 4.51E-02 P 17 F10 2 16 F1u 10 23.908000 0.371865E-04 432.94354 4.51E-02 P 17 F10 2 16 F1u 10 23.908000 0.371865E-04 432.94556 4.51E-02 P 17 F10 5 16 F1u 12 23.908000 0.371865E-04 437.121647 4.68E-02 R 15 F20 2 16 F20 2 18.751372 0.337614E-04 437.122644 4.51E-02 P 17 F10 5 16 F1u 11 13 23.908000 0.371865E-04 437.12264 4.58E-02 R 15 F20 2 16 F20 2 18.751372 0.337614E-04 437.122557 4.68E-02 R 15 F20 2 16 F20 2 18.751372 0.337614E-04 435.114351 4.59E-02 Q 16 F20 2 16 F20 3 16 F20 3 18.751372 0.337614E-04 435.114351 4.59E-02 Q 16 F20 2 16 F20 3 16 F20 3 18.751372 0.337614E-04 435.114351 4.59E-02 Q 16 F20 3 16 F20 8 21.251555 0.355112E-04 435.114351 4.59E-02 Q 16 F20 2 16 F20 8 21.251555 0.355112E-04 435.114351 4.59E-02 Q 16 F20 2 16 F20 2 1.05 F20 8 21.251555 0.355112E-04 435.114351 4.59E-02 Q 16 F20 3 16 F20 8 21.251555 0.355112E-04 435.114351 4.59E-02 Q 16 F20 3 16 F20 8 21.251555 0.355112E-04 435.114389 4.59E-02 R 15 F20 3 16 F20 8 21.251555 0.355112E-04 435.114389 4.59E-02 R 16 F20 8 17 F20 8 21.251555 0.355112E-04 437.247631 5.50E-04 8 18.65E-04 8 18.65										
435.111408									18.751372	
435.1132107										
432.942678			•		2			6	21.251555	0.355112E-04
432.942787			•							
432,943775										
432.944555					2					
437.122647 4.68E-02 R 15 F2g 1 16 F2u 1 18.751372 0.337614E-04 437.122588 4.68E-02 R 15 F2g 2 16 F2u 2 18.751372 0.337614E-04 437.122588 4.68E-02 R 15 F2g 3 16 F2u 3 18.751372 0.337614E-04 437.122588 4.68E-02 R 15 F2g 3 16 F2u 3 18.751372 0.337614E-04 437.122588 4.68E-02 R 16 F2g 3 16 F2u 3 18.751372 0.337614E-04 437.123575 4.68E-02 R 16 F2g 4 1 16 F2u 4 18.751372 0.337614E-04 437.123575 4.68E-02 R 16 F2g 4 1 16 F2u 5 18.751372 0.337614E-04 438.114351 4.59E-02 Q 16 F2g 3 16 F2u 7 21.251555 0.355112E-04 435.1161684 4.59E-02 Q 16 F2g 3 16 F2u 7 21.251555 0.355112E-04 435.116184 4.59E-02 Q 16 F2g 3 16 F2u 9 23.908000 0.371865E-04 432.942539 4.51E-02 P 17 F2g 1 16 F2u 9 23.908000 0.371865E-04 432.943254 4.51E-02 P 17 F2g 3 16 F2u 11 23.908000 0.371865E-04 432.943254 4.51E-02 P 17 F2g 3 16 F2u 11 23.908000 0.371865E-04 432.943555 4.51E-02 P 17 F2g 4 16 F2u 12 23.908000 0.371865E-04 432.943555 4.51E-02 P 17 F2g 3 16 F2u 11 23.908000 0.371865E-04 432.943555 4.51E-02 P 17 F2g 1 16 F2u 12 23.908000 0.371865E-04 432.943555 4.51E-02 P 17 F2g 1 16 F2u 12 23.908000 0.371865E-04 432.84355 4.51E-02 P 17 F2g 3 16 F2u 11 23.908000 0.371865E-04 432.84365 4.51E-02 R 16 F2u 12 23.908000 0.371865E-04 432.84365 4.51E-02 R 16 F2u 12 23.908000 0.371865E-04 432.84368 8.76E-02 R 18 F2g 1 17 F2g 1 16 F2u 12 23.908000 0.371865E-04 432.815402 1.57E-02 R 18 F2g 1 17 F2g 1 16 F2u 12 23.908000 0.371865E-04 432.815402 1.57E-02 R 18 F2g 1 17 F2										
437.122044	432.945556				5		F1u			
437.122558										
437.123257										
435.114551	437.123257	4.68E-02	R 15	F2g	4	16	F2u	4	18.751372	0.337614E-04
432.943239			•							
432.943239			•		3					
432.943234		4.59E-02	Q 16	F2g	4					
432.943719										
437, 247953	432.943719		P 17		3			11	23.908000	0.371865E-04
437. 249701										
435.114817								2		
432.816977	435.114817	1.60E-02	Q 17	A1g	1	17	A1u	3	23.908000	0.123955E-04
437. 248335 8.17E-02 R 16 AZG 1 17 AZU 1 21.251555 0.591853E-04 432. 815483 7.86E-02 P 18 AZG 2 17 AZU 3 26.720706 0.646412E-04 432. 815483 7.86E-02 P 18 AZG 2 17 AZU 3 26.720706 0.646412E-04 432. 815483 6.54E-02 R 16 E G 3 17 E U 1 21.251555 0.473482E-04 437. 247631 6.54E-02 R 16 E G 3 17 E U 1 21.251555 0.473482E-04 437. 249435 6.54E-02 R 16 E G 3 17 E U 2 21.251555 0.473482E-04 437. 249700 6.54E-02 R 16 E G 3 17 E U 3 21.251555 0.473482E-04 435. 11770 6.41E-02 Q 17 E G 3 17 E U 3 21.251555 0.473482E-04 435. 117176 6.41E-02 Q 17 E G 3 17 E U 5 23.908000 0.495821E-04 435. 118324 6.41E-02 Q 17 E G 1 17 E U 5 23.908000 0.495821E-04 432. 816059 6.28E-02 P 18 E G 2 17 E U 8 26.720706 0.517130E-04 432. 816909 6.28E-02 P 18 E G 2 17 E U 8 26.720706 0.517130E-04 437. 247657 4.90E-02 R 16 F1g 4 17 F1U 1 21.251555 0.355112E-04 437. 248930 4.90E-02 R 16 F1g 4 17 F1U 1 21.251555 0.355112E-04 437. 248930 4.90E-02 R 16 F1g 2 17 F1U 3 21.251555 0.355112E-04 435. 116093 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1U 3 21.251555 0.355112E-04 435. 116093 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1U 3 21.251555 0.355112E-04 437. 148930 4.90E-02 R 16 F1g 17 F1U 3 21.251555 0.355112E-04 437. 148930 4.90E-02 R 16 F1g 17 F1U 3 21.251555 0.355112E-04 435. 114798 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1U 3 21.251555 0.355112E-04 435. 114798 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1U 4 23.908000 0.371865E-04 435. 114798 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1U 7 23.908000 0.371865E-04 435. 116093 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1U 8 23.908000 0.371865E-04 435. 117406 4.81E-02 Q 17 F1g 1 17 F1U 1 26.720706 0.387847E-04 435. 116094 4.81E-02 Q 17 F1g 2 17 F1U 1 26.720706 0.387847E-04 435. 116094 4.81E-02 Q 17 F1g 2 17 F1U 1 26.720706 0.387847E-04 435. 116094 4.81E-02 Q 17 F1g 2 17 F1U 1 26.720706 0.387847E-04 435. 116094 4.81E-02 Q 17 F1g 2 17 F1U 1 26.720706 0.387847E-04 435. 116094 4.81E-02 Q 17 F1g 2 17 F1U 1 26.720706 0.387847E-04 435. 116094 4.81E-02 Q 17 F2g 2 17 F2U 1 22.55555 0.3555112E-04 435. 116094 4.81E-02 Q 17 F2g 2 17 F2U 1 22.55555 0.3555112E-04 435. 116094 4.81E-02 Q 17 F2g 2 17 F2U 1 26.720706 0.387847E-04 435										
432. 815483 7.86E-02 P 18 A2g 2 17 A2u 3 26.720706 0.646412E-04 437. 247631 6.54E-02 R 16 E g 3 17 E u 1 2.251555 0.473482E-04 437. 248435 6.54E-02 R 16 E g 2 17 E u 2 1.251555 0.473482E-04 437. 248435 6.54E-02 R 16 E g 1 T E u 2 1.251555 0.473482E-04 435. 114790 6.41E-02 Q 17 E g 1 T E u 2 2.3908000 0.495821E-04 435. 118324 6.41E-02 Q 17 E g 1 T E u 23.3988000 0.495821E-04 432. 816909 6.28E-02 P 18 E g 1 T E u 7 26.720706 0.517130E-04 437. 247657 4.90E-02 R 16								1		0.591853E-04
432.818889 7.86E-02 P 18 A29 1 17 A2u 4 26.720706 0.646412E-04 437.247631 6.54E-02 R 16 E 9 3 17 E u 1 2 12.51555 0.473482E-04 437.248435 6.54E-02 R 16 E 9 9 1 17 E u 2 21.251555 0.473482E-04 437.249700 6.54E-02 R 16 E 9 9 1 17 E u 3 21.251555 0.473482E-04 435.114790 6.54E-02 Q 17 E 9 3 17 E u 4 23.908000 0.495821E-04 435.117176 6.41E-02 Q 17 E 9 2 17 E u 5 23.908000 0.495821E-04 435.11824 6.41E-02 Q 17 E 9 1 17 E u 6 3.908000 0.495821E-04 435.11824 6.41E-02 Q 17 E 9 1 17 E u 7 26.720706 0.517130E-04 432.816909 6.28E-02 P 18 E 9 3 17 E u 7 26.720706 0.517130E-04 432.816909 6.28E-02 P 18 E 9 1 17 E u 9 26.720706 0.517130E-04 437.247657 4.90E-02 R 16 F19 4 17 F1u 1 2 12.51555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F19 3 17 F1u 2 21.251555 0.355112E-04 437.249300 4.90E-02 R 16 F19 3 17 F1u 2 21.251555 0.355112E-04 437.249700 4.90E-02 R 16 F19 1 17 F1u 4 21.251555 0.355112E-04 435.112919 4.81E-02 Q 17 F19 5 17 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435.114798 4.81E-02 Q 17 F19 5 17 F1u 7 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F19 2 17 F1u 7 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F19 2 17 F1u 7 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F19 2 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F19 2 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F19 2 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F19 2 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F19 1 17 F1u 12 6.720706 0.387847E-04 432.816266 4.71E-02 P 18 F19 3 17 F1u 12 6.720706 0.387847E-04 432.816266 4.71E-02 P 18 F19 3 17 F1u 12 6.720706 0.387847E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F29 3 17 F2u 2 2 1.251555 0.355112E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F29 3 17 F2u 3 29.808000 0.371865E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F29 3 17 F2u 3 29.808000 0.371865E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F29 3 17 F2u 3 29.808000 0.371865E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F29 3 17 F2u 3 29.808000 0.371865E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F29 3 17 F2u 3 29.808000 0.371865E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F29 3 17 F2u 3 29.808000 0.371865E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F										
437.247631 6.54E-02 R 16 E g 3 17 E u 1 21.251555 0.473482E-04 437.249700 6.54E-02 R 16 E g 1 17 E u 2 21.251555 0.473482E-04 437.249700 6.54E-02 R 16 E g 1 17 E u 3 21.251555 0.473482E-04 435.114790 6.41E-02 Q 17 E g 3 17 E u 4 23.908000 0.495821E-04 435.117176 6.41E-02 Q 17 E g 1 17 E u 5 23.908000 0.495821E-04 435.118324 6.41E-02 Q 17 E g 1 17 E u 6 23.908000 0.495821E-04 432.816059 6.28E-02 P 18 E g 3 17 E u 7 6.70706 0.517130E-04 432.816909 6.28E-02 P 18 E g 2 17 E u 8 26.720706 0.517130E-04 432.816909 6.28E-02 P 18 E g 1 17 E u 9 6 26.720706 0.517130E-04 437.247657 4.90E-02 R 16 F1g 3 17 F1u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 3 17 F1u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 3 17 F1u 2 21.251555 0.355112E-04 435.112919 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1u 4 21.251555 0.355112E-04 435.112919 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435.117498 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435.117497 4.81E-02 Q 17 F1g 4 17 F1u 6 23.908000 0.371865E-04 435.117447 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 7 S1.908000 0.371865E-04 435.117447 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 7 S1.908000 0.371865E-04 435.117447 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 7 S1.908000 0.371865E-04 435.117447 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 10 26.720706 0.387847E-04 437.248030 4.71E-02 P 18 F1g 2 17 F1u 10 26.720706 0.387847E-04 435.117447 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 10 26.720706 0.387847E-04 435.117407 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 10 26.720706 0.387847E-04 435.117407 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 435.117407 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 437.248030 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2u 12 21.251555 0.355112E-04 437.248030 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2u 12 22.251555 0.355112E-04 437.24809 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2u 12 26.720706 0.387847E-04 432.816934 4.71E-02 P 18 F1g 1 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 432.816934 4.71E-02 P 18 F1g 1 17 F2u 12 26.720706 0.387847E-04 435.117046 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 2 21.251555 0.355112E-04 435.117046 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 2 22.251555 0.355112E-04 435.117046 4.81E-02										
437.249700 6.54E-02 R 16 E g 1 17 E u 3 21.251555 0.495821E-04 435.1114796 6.41E-02 Q 17 E g 2 17 E u 23.908000 0.495821E-04 435.118324 6.41E-02 Q 17 E g 2 17 E u 5 23.908000 0.495821E-04 432.816059 6.28E-02 P 18 E g 2 17 E u 6.2720706 0.517130E-04 432.818890 6.28E-02 P 18 E g 1 T E u 8.26.720706 0.517130E-04 437.248030 4.90E-02 R 16 F1g 4 17 F1u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 2 17 F1u 3 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 2 17 F1u </td <td>437.247631</td> <td>6.54E-02</td> <td>R 16</td> <td>Εğ</td> <td>3</td> <td>17</td> <td>Εu</td> <td>1</td> <td>21.251555</td> <td>0.473482E-04</td>	437.247631	6.54E-02	R 16	Εğ	3	17	Εu	1	21.251555	0.473482E-04
435.114790 6.41E-02 Q 17 E g 3 17 E u 4 23.908000 0.495821E-04 435.118324 6.41E-02 Q 17 E g 1 17 E u 5 23.908000 0.495821E-04 435.118324 6.41E-02 Q 17 E g 1 17 E u 6 23.908000 0.495821E-04 432.816059 6.28E-02 P 18 E g 3 17 E u 7 26.720706 0.517130E-04 432.816899 6.28E-02 P 18 E g 1 17 E u 9 26.720706 0.517130E-04 432.818890 6.28E-02 P 18 E g 1 17 E u 9 26.720706 0.517130E-04 437.247657 4.90E-02 R 16 F1g 4 17 F1u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248030 4.90E-02 R 16 F1g 3 17 F1u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 1 17 F1u 3 21.251555 0.355112E-04 437.249700 4.90E-02 R 16 F1g 1 17 F1u 3 21.251555 0.355112E-04 435.112919 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435.114798 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 7 23.908000 0.371865E-04 435.11498 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 7 23.908000 0.371865E-04 435.11499 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 435.11498 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 435.11498 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 435.11499 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 435.115495 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 1 23.908000 0.371865E-04 435.117447 4.81E-02 Q 17 F1g 1 17 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 435.117447 4.81E-02 Q 17 F1g 1 17 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 432.815626 4.71E-02 P 18 F1g 3 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 432.815626 4.71E-02 P 18 F1g 3 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 432.815626 4.71E-02 P 18 F1g 1 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248501 4.90E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248609 4.90E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 2 17 F2u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 2 17 F2u 1 22.251555 0.355112E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 2 17 F2u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248501 4.90E-02 R 16 F2g 2 17 F2u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 2										
435.117176 6.41E-02 Q 17 E g 2 17 E u 5 23.908000 0.495821E-04 435.118324 6.41E-02 Q 17 E g 1 17 E u 6 23.908000 0.495821E-04 432.816059 6.28E-02 P 18 E g 3 17 E u 7 26.720706 0.517130E-04 432.816909 6.28E-02 P 18 E g 1 17 E u 8 26.720706 0.517130E-04 432.8188890 6.28E-02 P 18 E g 1 17 E u 9 26.720706 0.517130E-04 437.247657 4.90E-02 R 16 F1g 4 17 F1u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 3 17 F1u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 2 17 F1u 3 21.251555 0.355112E-04 437.249700 4.90E-02 R 16 F1g 1 17 F1u 4 21.251555 0.355112E-04 435.114798 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435.114798 4.81E-02 Q 17 F1g 4 17 F1u 6 23.908000 0.371865E-04 435.114798 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 7 23.908000 0.371865E-04 435.114794 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435.115003 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F1g 2 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F1g 2 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F1g 2 17 F1u 1 22.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F1g 2 17 F1u 1 23.908000 0.371865E-04 435.118369 4.81E-02 Q 17 F1g 1 17 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 432.816666 4.71E-02 P 18 F1g 3 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 432.816934 4.71E-02 P 18 F1g 3 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2u 1 21.251555 0.355112E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 2 21.251555 0.355112E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 3 29.80000 0.371865E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 1 22.251555 0.355112E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 5 23.908000 0.371865E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 6 23.908000 0.371865E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 6 23.908000 0.371865E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 1 26.720706 0.387847E-04 432.818690 4.71E-02 P 18 F2g								4		
432.816059 6.28E-02 P 18 E G 3 17 E U 7 26.720706 0.517130E-04 432.816909 6.28E-02 P 18 E G 2 17 E U 8 26.720706 0.517130E-04 432.818890 6.28E-02 P 18 E G 1 17 E U 9 26.720706 0.517130E-04 437.247657 4.90E-02 R 16 F1g 4 17 F1U 1 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 3 17 F1U 2 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 3 17 F1U 2 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 2 17 F1U 3 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 1 17 F1U 4 21.251555 0.355112E-04 435.114798 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1U 5 23.908000 0.371865E-04 435.114798 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1U 6 23.908000 0.371865E-04 435.114798 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1U 7 23.908000 0.371865E-04 435.114747 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1U 8 23.908000 0.371865E-04 435.118369 4.81E-02 Q 17 F1g 1 17 F1U 8 23.908000 0.371865E-04 432.815425 4.71E-02 P 18 F1g 1 17 F1U 9 23.908000 0.371865E-04 432.816934 4.71E-02 P 18 F1g 3 17 F1U 10 26.720706 0.387847E-04 432.816934 4.71E-02 P 18 F1g 2 17 F1U 12 26.720706 0.387847E-04 432.81760 4.71E-02 P 18 F1g 2 17 F1U 12 26.720706 0.387847E-04 437.248909 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2U 1 26.720706 0.387847E-04 437.248909 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2U 1 22.751555 0.355112E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2U 1 21.251555 0.355112E-04 437.248942 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2U 2 21.251555 0.355112E-04 437.248944 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2U 2 21.251555 0.355112E-04 437.248940 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2U 3 21.251555 0.355112E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2U 2 21.251555 0.355112E-04 437.248944 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2U 3 21.251555 0.355112E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2U 6 23.908000 0.371865E-04 435.116190 4.81E-02 Q 17 F2g 1 17 F2U 5 23.908000 0.371865E-04 435.116190 4.81E-02 Q 17 F2g 1 17 F2U 6 23.908000 0.371865E-04 435.116190 4.81E-02 Q 17 F2g 1 17 F2U 6 23.908000 0.371865E-04 435.116190 4.81E-02 Q 17 F2g 1 17 F2U 7 23.908000 0.371865E-04 435.116190 4.81E-02 Q 17 F2g 1 17 F2U 9 26.720706 0.387847E-04 432.816443 4.71E-02 P 18 F2g 1 17 F2U 10 26.720706 0.387847E-04 432.818690 1.71E-02 P 18 F2		6.41E-02	Q 17	Εğ	2					
432.816909 6.28E-02 P 18 E Ø 2 17 E U 8 26.720706 0.517130E-04 432.8188890 6.28E-02 P 18 E Ø 1 17 E U 9 26.720706 0.517130E-04 437.248030 4.90E-02 R 16 F1g 3 17 F1u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248930 4.90E-02 R 16 F1g 2 17 F1u 3 21.251555 0.355112E-04 437.249700 4.90E-02 R 16 F1g 2 17 F1u 3 21.251555 0.355112E-04 435.112919 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435.114798 4.81E-02 Q 17 F1g 4 17 F1u 6 23.908000 0.371865E-04 435.114794 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 6 23.908000 0.371865E-04 435.11693 4.81E-02										
437. 247657 4.90E-02 R 16 F1Ø 4 17 F1u 1 21.251555 0.355112E-04 437. 248030 4.90E-02 R 16 F1Ø 2 17 F1u 3 21.251555 0.355112E-04 437. 248900 4.90E-02 R 16 F1Ø 1 17 F1u 3 21.251555 0.355112E-04 435. 112919 4.81E-02 Q 17 F1Ø 5 17 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435. 114798 4.81E-02 Q 17 F1Ø 5 17 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435. 116093 4.81E-02 Q 17 F1Ø 3 17 F1u 7 23.908000 0.371865E-04 435. 118369 4.81E-02 Q 17 F1Ø 1 17 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 432. 816266 4.71E-02 P 18 F1Ø 1 17 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 432. 816266 4.71										
437.248030										
437. 248930 4.90E-02 R 16 F1g 2 17 F1u 3 21.251555 0.355112E-04 437. 249700 4.90E-02 R 16 F1g 1 17 F1u 4 21.251555 0.355112E-04 435. 112919 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435. 11498 4.81E-02 Q 17 F1g 3 17 F1u 6 23.908000 0.371865E-04 435. 116093 4.81E-02 Q 17 F1g 2 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435. 118369 4.81E-02 Q 17 F1g 1 17 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 432. 816266 4.71E-02 P 18 F1g 1 17 F1u 9 23.908000 0.387847E-04 432. 816266 4.71E-02 P 18 F1g 2 17 F1u 11 26.720706 0.387847E-04 432. 817760 4.71										
435.112919 4.81E-02 Q 17 F1g 5 17 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435.114798 4.81E-02 Q 17 F1g 4 17 F1u 6 23.908000 0.371865E-04 435.116093 4.81E-02 Q 17 F1g 2 17 F1u 8 23.908000 0.371865E-04 435.118369 4.81E-02 Q 17 F1g 1 17 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 432.816266 4.71E-02 P 18 F1g 3 17 F1u 10 26.720706 0.387847E-04 432.816934 4.71E-02 P 18 F1g 2 17 F1u 11 26.720706 0.387847E-04 432.817600 4.71E-02 P 18 F1g 2 17 F1u 11 26.720706 0.387847E-04 432.816934 4.71E-02 P 18 F1g 1 17 F1u 11 26.720706 0.387847E-04 432.816934 4.90E-02<	437.248930	4.90E-02		F1g	2		F1u		21.251555	0.355112E-04
435.114798										
435.116093			•		4			6		
435.118369 4.81E-02 Q 17 F1g 1 17 F1u 9 23.908000 0.371865E-04 432.815425 4.71E-02 P 18 F1g 3 17 F1u 10 26.720706 0.387847E-04 432.816934 4.71E-02 P 18 F1g 2 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 432.817760 4.71E-02 P 18 F1g 1 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 437.247605 4.90E-02 R 16 F2g 4 17 F2u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248942 4.90E-02 R 16 F2g 2 17 F2u 3 21.251555 0.355112E-04 435.116190 4.81E-02 Q 17 F2g 4 17 F2u 3 21.251555 0.355112E-04 435.118261 4.81E-02 </td <td></td> <td></td> <td>•</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>7</td> <td></td> <td></td>			•					7		
432.815425 4.71E-02 P 18 F1g 4 17 F1u 10 26.720706 0.387847E-04 432.816266 4.71E-02 P 18 F1g 3 17 F1u 11 26.720706 0.387847E-04 432.816934 4.71E-02 P 18 F1g 2 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 432.817760 4.71E-02 P 18 F1g 1 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 437.247605 4.90E-02 R 16 F2g 4 17 F2u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248401 4.90E-02 R 16 F2g 2 17 F2u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248942 4.90E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 3 21.251555 0.355112E-04 435.112920 4.81E-02 Q 17 F2g 4 17 F2u 3 21.251555 0.355112E-04 435.11690 4.81E-02 </td <td></td>										
432.816934 4.71E-02 P 18 F1g 2 17 F1u 12 26.720706 0.387847E-04 432.817760 4.71E-02 P 18 F1g 1 17 F1u 13 26.720706 0.387847E-04 437.247605 4.90E-02 R 16 F2g 4 17 F2u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F2g 2 17 F2u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248942 4.90E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 3 21.251555 0.355112E-04 435.112920 4.81E-02 Q 17 F2g 4 17 F2u 3 21.251555 0.355112E-04 435.116190 4.81E-02 Q 17 F2g 4 17 F2u 5 23.908000 0.371865E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 2 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 432.815451 4.71E-02 <td>432.815425</td> <td>4.71E-02</td> <td>P 18</td> <td>F1g</td> <td>4</td> <td>17</td> <td>F1u</td> <td>10</td> <td>26.720706</td> <td>0.387847E-04</td>	432.815425	4.71E-02	P 18	F1g	4	17	F1u	10	26.720706	0.387847E-04
432.817760 4.71E-02 P 18 F1g 1 17 F1u 13 26.720706 0.387847E-04 437.247605 4.90E-02 R 16 F2g 4 17 F2u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248942 4.90E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 3 21.251555 0.355112E-04 435.112920 4.81E-02 Q 17 F2g 4 17 F2u 4 21.251555 0.355112E-04 435.116190 4.81E-02 Q 17 F2g 4 17 F2u 5 23.908000 0.371865E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 2 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 432.815451 4.71E-02 P 18 F2g 5 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 432.816443 4.71E-02 <td></td>										
437.247605 4.90E-02 R 16 F2g 4 17 F2u 1 21.251555 0.355112E-04 437.248101 4.90E-02 R 16 F2g 3 17 F2u 2 21.251555 0.355112E-04 437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 2 17 F2u 3 21.251555 0.355112E-04 437.248942 4.90E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 4 21.251555 0.355112E-04 435.112920 4.81E-02 Q 17 F2g 4 17 F2u 5 23.908000 0.371865E-04 435.116190 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 6 23.908000 0.371865E-04 435.117046 4.81E-02 Q 17 F2g 2 17 F2u 7 23.908000 0.371865E-04 432.815451 4.71E-02 P 18 F2g 5 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 432.816443 4.71E-02										
437.248409 4.90E-02 R 16 F2g 2 17 F2u 3 21.251555 0.355112E-04 437.248942 4.90E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 4 21.251555 0.355112E-04 435.112920 4.81E-02 Q 17 F2g 4 17 F2u 5 23.908000 0.371865E-04 435.117046 4.81E-02 Q 17 F2g 2 17 F2u 7 23.908000 0.371865E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 1 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 432.815451 4.71E-02 P 18 F2g 5 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 432.816001 4.71E-02 P 18 F2g 5 17 F2u 9 26.720706 0.387847E-04 432.816443 4.71E-02 P 18 F2g 3 17 F2u 11 26.720706 0.387847E-04 432.818890 4.71E-02 <td>437.247605</td> <td>4.90E-02</td> <td>R 16</td> <td>F2g</td> <td>4</td> <td>17</td> <td>F2u</td> <td>1</td> <td>21.251555</td> <td>0.355112E-04</td>	437.247605	4.90E-02	R 16	F2g	4	17	F2u	1	21.251555	0.355112E-04
437.248942 4.90E-02 R 16 F2g 1 17 F2u 4 21.251555 0.355112E-04 435.112920 4.81E-02 Q 17 F2g 4 17 F2u 5 23.908000 0.371865E-04 435.116190 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 6 23.908000 0.371865E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 1 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 432.815451 4.71E-02 P 18 F2g 5 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 432.816001 4.71E-02 P 18 F2g 5 17 F2u 9 26.720706 0.387847E-04 432.816443 4.71E-02 P 18 F2g 3 17 F2u 11 26.720706 0.387847E-04 432.818890 4.71E-02 P 18 F2g 1 7 F2u 12 26.720706 0.387847E-04 432.818890 4.71E-02 <td></td>										
435.112920 4.81E-02 Q 17 F2g 4 17 F2u 5 23.908000 0.371865E-04 435.116190 4.81E-02 Q 17 F2g 3 17 F2u 6 23.908000 0.371865E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 1 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 1 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 432.815451 4.71E-02 P 18 F2g 5 17 F2u 9 26.720706 0.387847E-04 432.816403 4.71E-02 P 18 F2g 3 17 F2u 10 26.720706 0.387847E-04 432.816443 4.71E-02 P 18 F2g 3 17 F2u 11 26.720706 0.387847E-04 432.818890 4.71E-02 P 18 F2g 1 7 F2u 12 26.720706 0.387847E-04 437.375294 1.71E-02 <td>437.248942</td> <td>4.90E-02</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>17</td> <td></td> <td>4</td> <td>21.251555</td> <td>0.355112E-04</td>	437.248942	4.90E-02				17		4	21.251555	0.355112E-04
435.117046 4.81E-02 Q 17 F2g 2 17 F2u 7 23.908000 0.371865E-04 435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 1 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 432.815451 4.71E-02 P 18 F2g 5 17 F2u 9 26.720706 0.387847E-04 432.816001 4.71E-02 P 18 F2g 4 17 F2u 10 26.720706 0.387847E-04 432.816443 4.71E-02 P 18 F2g 3 17 F2u 11 26.720706 0.387847E-04 432.81767 4.71E-02 P 18 F2g 2 17 F2u 12 26.720706 0.387847E-04 432.818890 4.71E-02 P 18 F2g 1 17 F2u 13 26.720706 0.387847E-04 437.375294 1.71E-02 R 17 A1g 1 18 A1u 1 23.908000 0.123955E-04 435.117937 1.67E-02 </td <td></td> <td></td> <td>•</td> <td>F2g</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>5</td> <td></td> <td></td>			•	F2g				5		
435.118261 4.81E-02 Q 17 F2g 1 17 F2u 8 23.908000 0.371865E-04 432.815451 4.71E-02 P 18 F2g 5 17 F2u 9 26.720706 0.387847E-04 432.816001 4.71E-02 P 18 F2g 4 17 F2u 10 26.720706 0.387847E-04 432.816443 4.71E-02 P 18 F2g 3 17 F2u 11 26.720706 0.387847E-04 432.81767 4.71E-02 P 18 F2g 2 17 F2u 12 26.720706 0.387847E-04 432.818890 4.71E-02 P 18 F2g 1 17 F2u 13 26.720706 0.387847E-04 437.375294 1.71E-02 R 17 A1g 1 18 A1u 1 23.908000 0.123955E-04 435.117937 1.67E-02 Q 18 A1g 1 8 A1u 2 26.720706 0.129282E-04 435.120707 1.67E-02 <td></td>										
432.816001 4.71E-02 P 18 F2g 4 17 F2u 10 26.720706 0.387847E-04 432.816443 4.71E-02 P 18 F2g 3 17 F2u 11 26.720706 0.387847E-04 432.81767 4.71E-02 P 18 F2g 2 17 F2u 12 26.720706 0.387847E-04 432.818890 4.71E-02 P 18 F2g 1 17 F2u 13 26.720706 0.387847E-04 437.375294 1.71E-02 R 17 A1g 1 18 A1u 1 23.908000 0.123955E-04 435.117937 1.67E-02 Q 18 A1g 1 18 A1u 2 26.720706 0.129282E-04 435.120707 1.67E-02 Q 18 A1g 2 18 A1u 3 26.720706 0.129282E-04 432.689320 1.64E-02 P 19 A1g 1 18 A1u 4 29.689673 0.134344E-04	435.118261	4.81E-02	Q 17	F2g	1	17	F2u	8	23.908000	0.371865E-04
432.816443 4.71E-02 P 18 F2g 3 17 F2u 11 26.720706 0.387847E-04 432.817767 4.71E-02 P 18 F2g 2 17 F2u 12 26.720706 0.387847E-04 432.818890 4.71E-02 P 18 F2g 1 17 F2u 13 26.720706 0.387847E-04 437.375294 1.71E-02 R 17 A1g 1 18 A1u 1 23.908000 0.1239555E-04 435.117937 1.67E-02 Q 18 A1g 1 18 A1u 2 26.720706 0.129282E-04 435.120707 1.67E-02 Q 18 A1g 2 18 A1u 3 26.720706 0.129282E-04 432.689320 1.64E-02 P 19 A1g 1 18 A1u 4 29.689673 0.134344E-04		4.71E-02	P 18							
432.817767 4.71E-02 P 18 F2g 2 17 F2u 12 26.720706 0.387847E-04 432.818890 4.71E-02 P 18 F2g 1 17 F2u 13 26.720706 0.387847E-04 437.375294 1.71E-02 R 17 A1g 1 18 A1u 1 23.908000 0.123955E-04 435.117937 1.67E-02 Q 18 A1g 1 18 A1u 2 26.720706 0.129282E-04 435.120707 1.67E-02 Q 18 A1g 2 18 A1u 3 26.720706 0.129282E-04 432.689320 1.64E-02 P 19 A1g 1 18 A1u 4 29.689673 0.134344E-04										
437.375294 1.71E-02 R 17 Alg 1 18 Alu 1 23.908000 0.123955E-04 435.117937 1.67E-02 Q 18 Alg 1 18 Alu 2 26.720706 0.129282E-04 435.120707 1.67E-02 Q 18 Alg 2 18 Alu 3 26.720706 0.129282E-04 432.689320 1.64E-02 P 19 Alg 1 18 Alu 4 29.689673 0.134344E-04	432.817767	4.71E-02	P 18	F2g	2	17	F2u	12	26.720706	0.387847E-04
435.117937 1.67E-02 Q 18 Alg 1 18 Alu 2 26.720706 0.129282E-04 435.120707 1.67E-02 Q 18 Alg 2 18 Alu 3 26.720706 0.129282E-04 432.689320 1.64E-02 P 19 Alg 1 18 Alu 4 29.689673 0.134344E-04										
435.120707 1.67E-02 Q 18 A1g 2 18 A1u 3 26.720706 0.129282E-04 432.689320 1.64E-02 P 19 A1g 1 18 A1u 4 29.689673 0.134344E-04					1					
		1.67E-02	Q 18	A1g	2			3		
	432.689320 437.374421			Alg A2g	1	18 18	Alu Alu	4 1	29.6896/3 23.908000	0.134344E-04 0.619776E-04

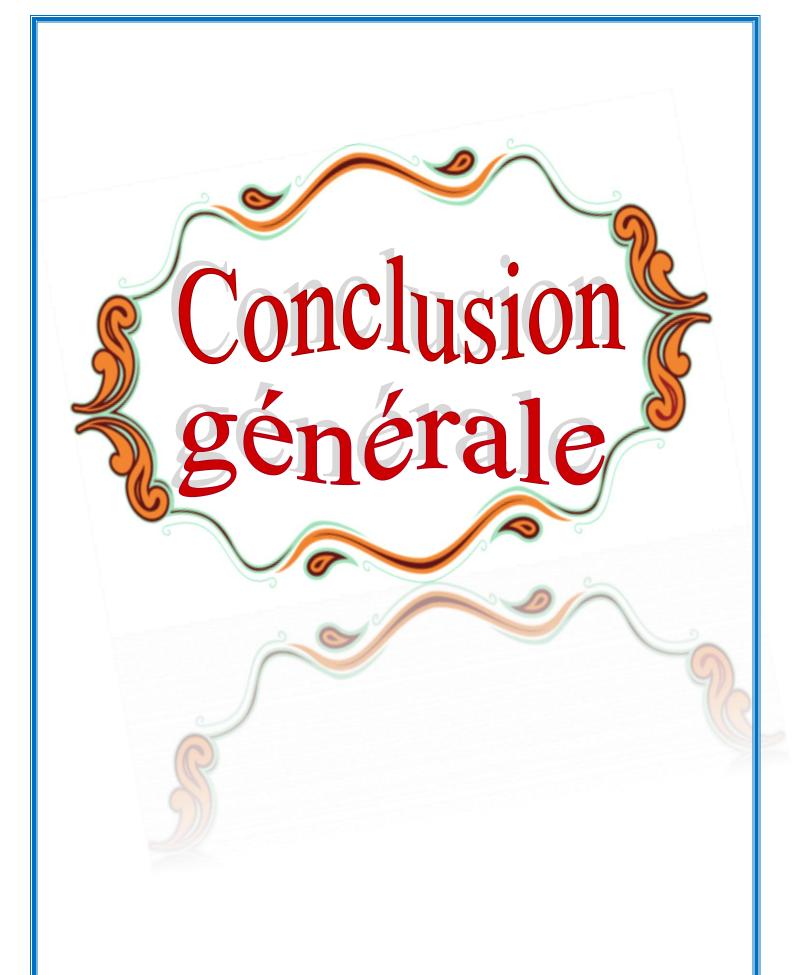
Suite du tableau (III-6).

435.114517 8 36E-02 Q 18 A2g 1 18 A2u 2 26.720706 0.646412E-04 435.120562 8 36E-02 Q 18 A2g 1 18 A2u 3 26.720706 0.646412E-04 435.120562 8 36E-02 Q 18 A2g 1 18 A2u 3 26.720706 0.646412E-04 432.68931 8 18E-02 P 19 A2g 1 18 A2u 4 29.689673 0.6671730E-04 437.373754 6.88E-02 R 17 E g 1 18 E u 2 23.908000 0.49582E-04 437.373754 6.88E-02 R 17 E g 1 18 E u 3 23.908000 0.49582E-04 437.3737307 6.68E-02 R 17 E g 1 18 E u 3 23.908000 0.49582E-04 435.115055 6.69E-02 Q 18 E g 1 18 E u 4 26.720706 0.517130E-04 435.115055 6.69E-02 Q 18 E g 2 18 E u 4 26.720706 0.517130E-04 432.689347 6.55E-02 P 19 E g 1 18 E u 4 26.720706 0.517130E-04 432.689347 6.55E-02 P 19 E g 1 18 E u 7 29.689673 0.53776E-04 432.69347 6.55E-02 P 19 E g 1 18 E u 8 29.689673 0.53776E-04 437.37434 5.12E-02 R 17 F 19 3 18 E 1 9 2.398000 0.371865E-04 437.37433 5.12E-02 R 17 F 19 3 18 E 1 9 2.398000 0.371865E-04 437.37433 5.12E-02 R 17 F 19 3 18 E 1 9 2.398000 0.371865E-04 437.37434 5.12E-02 R 17 F 19 3 18 E 1 9 2.398000 0.371865E-04 437.37433 5.12E-02 R 17 F 19 3 18 E 1 9 2.398000 0.371865E-04 437.37433 5.12E-02 R 17 F 19 3 18 E 1 9 2.398000 0.371865E-04 437.37434 5.12E-02 Q 18 F 19 5 18 F 11 5 26.90800 0.371865E-04 437.37434 5.12E-02 Q 18 F 19 5 18 F 11 5 26.90800 0.371865E-04 437.37434 5.12E-02 Q 18 F 19 5 18 F 11 5 26.90800 0.371865E-04 437.37434 5.12E-02 Q 18 F 19 5 18 F 11 5 26.90800 0.371865E-04 437.37434 5.12E-02 Q 18 F 19 5 19 5 18 F 11 5 26.90800 0.371865E-04 438.511869 5.02E-02 Q 18 F 19 5 19 5 19 5 19 5 19 5 10 5 10 5 10 5	Enéguence	Intensité	J''	C''	n''	T	C	n	Enorgie inf	Danulation inf
432. 120562 8. 366-02 9 19 429 18 A20 2 18 A20 3 26. 720706 0. 646412E-04 432. 689813 8. 18E-02 P 19 A20 1 18 A20 5 29. 689873 0. 6712720E-04 432. 6939130 8. 18E-02 P 19 A20 1 18 A20 5 29. 689873 0. 6712720E-04 432. 6939130 6. 83E-02 R 17 E 9 2 18 E 0 3 23. 908000 0. 498521E-04 437. 374259 6. 83E-02 R 17 E 9 2 18 E 0 3 23. 908000 0. 498521E-04 435. 114516 6. 69E-02 Q 18 E 9 1 18 E 0 4 26. 720706 0. 517130E-04 435. 114516 6. 69E-02 Q 18 E 9 9 1 18 E 0 4 26. 720706 0. 517130E-04 432. 689547 6. 55E-02 P 19 E 9 1 18 E 0 4 5 26. 720706 0. 517130E-04 432. 689547 6. 55E-02 P 19 E 9 1 18 E 0 4 5 26. 720706 0. 517130E-04 432. 689547 6. 55E-02 P 19 E 9 1 18 E 0 4 5 26. 720706 0. 517130E-04 432. 689547 6. 55E-02 P 19 E 9 1 18 E 0 4 5 26. 720706 0. 517130E-04 432. 689547 6. 55E-02 P 19 E 9 1 18 E 0 4 5 26. 720706 0. 517130E-04 432. 689547 6. 55E-02 P 19 E 9 1 18 E 0 4 5 26. 720706 0. 517130E-04 432. 689547 6. 55E-02 P 19 E 9 1 18 E 10 5 26. 720706 0. 517130E-04 432. 689547 6. 55E-02 P 19 E 9 1 18 E 10 5 26. 689673 0. 53776E-04 432. 689547 3. 512E-02 R 17 F 19 1 18 F 10 1 23. 908000 0. 371865E-04 437. 374744 5. 512E-02 R 17 F 19 2 18 F 10 1 23. 308000 0. 371865E-04 437. 374744 5. 512E-02 R 17 F 19 2 18 F 10 1 23. 308000 0. 371865E-04 437. 374314 5. 12E-02 R 17 F 19 2 18 F 10 2 2. 308000 0. 371865E-04 437. 374314 5. 12E-02 R 17 F 19 2 18 F 10 2 2. 308000 0. 371865E-04 437. 374316 5. 12E-02 R 17 F 19 2 1 18 F 10 2 2. 308000 0. 371865E-04 437. 374316 5. 12E-02 R 17 F 19 2 1 18 F 10 2 2. 308000 0. 371865E-04 437. 374316 5. 12E-02 R 17 F 19 2 5 18 F 10 2 2. 308000 0. 371865E-04 437. 374316 5. 12E-02 R 17 F 19 2 5 18 F 10 2 2. 308000 0. 371865E-04 437. 374316 5. 12E-02 R 17 F 19 2 5 18 F 10 2 2. 308000 0. 371865E-04 435. 116540 5. 02E-02 Q 18 F 19 2 5 18 F 10 2 2. 308000 0. 371865E-04 435. 116540 5. 02E-02 Q 18 F 19 2 5 18 F 10 2 2. 308000 0. 371865E-04 435. 116540 5. 02E-02 Q 18 F 19 2 5 18 F 10 2 2. 308000 0. 371865E-04 435. 116540 5. 02E-02 Q 18 F 19 2 2 2 2 3 8 8 8 8 0 0 0 0 371865E-04 435. 116540 5. 02E-02 Q 18 F 19 2 2 2 2	Fréquence			_		18	_	<u>n</u>	Energie inf	Population inf
432, 688913 8, 18E-02 P 19 AZg 1 18 AZu 4 29, 689673 0, 671720E-04 432, 679104 6, 818E-02 P 19 AZg 1 18 AZu 5 29, 689673 0, 671720E-04 433, 737754 6, 681E-02 R 17 E g 1 18 E u 1 23, 908000 0, 498521E-04 434, 3733307 6, 681E-02 R 17 E g 3 18 E u 3 23, 908000 0, 498521E-04 435, 114516 6, 69E-02 Q 18 E g 1 18 E u 4 26, 720706 0, 517130E-04 435, 114516 6, 69E-02 Q 18 E g 1 18 E u 5 26, 720706 0, 517130E-04 435, 114516 6, 69E-02 Q 18 E g 2 1 18 E u 5 26, 720706 0, 517130E-04 435, 114516 6, 69E-02 Q 18 E g 3 18 E u 6 7 26, 720706 0, 517130E-04 435, 114516 6, 69E-02 Q 18 E g 3 18 E u 6 7 26, 720706 0, 517130E-04 435, 114516 6, 69E-02 Q 18 E g 3 18 E u 6 7 26, 720706 0, 517130E-04 435, 114516 6, 69E-02 Q 18 E g 3 18 E u 6 7 26, 720706 0, 517130E-04 432, 6891047 6, 55E-02 P 19 E g 3 18 E u 9 69, 689673 0, 53775E-04 432, 6891047 6, 55E-02 P 19 E g 3 18 E u 9 29, 689673 0, 53775E-04 432, 6891047 5, 52E-02 R 17 F1g 1 18 F1u 1 23, 908000 0, 371865E-04 437, 377434 5, 12E-02 R 17 F1g 2 18 F1u 2 23, 908000 0, 371865E-04 437, 377434 5, 12E-02 R 17 F1g 5 18 F1u 2 23, 908000 0, 371865E-04 437, 377434 5, 12E-02 R 17 F1g 5 18 F1u 1 2 23, 908000 0, 371865E-04 435, 114516 5, 02E-02 Q 18 F1g 1 18 F1u 2 23, 908000 0, 371865E-04 435, 114519 5, 02E-02 Q 18 F1g 1 18 F1u 1 2 23, 908000 0, 371865E-04 435, 114519 5, 02E-02 Q 18 F1g 1 18 F1u 1 2 23, 908000 0, 371865E-04 435, 114519 5, 02E-02 Q 18 F1g 1 18 F1u 1 2 26, 699673 0, 403032E-04 435, 114519 5, 02E-02 Q 18 F1g 1 18 F1u 1 2 29, 699673 0, 403032E-04 435, 114519 5, 02E-02 Q 18 F1g 1 18 F1u 1 2 29, 699673 0, 403032E-04 432, 689947 4, 91E-02 P 19 F1g 3 18 F1u 1 2 29, 699673 0, 403032E-04 435, 114519 5, 02E-02 Q 18 F1g 3 18 F1u 1 2 29, 699673 0, 403032E-04 435, 114519 5, 02E-02 Q 18 F1g 3 18 F1u 1 2 29, 699673 0, 403032E-04 437, 37461 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F1u 1 2 29, 699673 0, 403032E-04 437, 37461 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F1u 1 2 29, 699673 0, 403032E-04 437, 43761 5, 02E-02 Q 18 F1g 5 19 F1g 3 18 F1u 1 2 29, 699673 0, 403032E-04 437, 43761 5, 02E-02 Q 18 F1g 5 19 F1g 5 18 F1u 1 2 29, 69										
437, 373754 6. 838-02 R 17 E 9 2 18 E U 1 23.908000 0. 495821E-04 437, 3743759 6. 838-02 R 17 E 9 2 18 E U 2 23.908000 0. 495821E-04 437, 3743759 6. 838-02 R 17 E 9 3 18 E U 3 23.908000 0. 495821E-04 435, 118055 6. 639-02 Q 18 E 9 3 18 E U 4 5 26. 720706 0. 1317130E-04 435, 118055 6. 639-02 Q 18 E 9 3 18 E U 5 26. 720706 0. 517130E-04 435, 118055 6. 639-02 Q 18 E 9 3 18 E U 5 26. 720706 0. 517130E-04 435, 118055 6. 639-02 Q 18 E 9 3 18 E U 6 26. 720706 0. 517130E-04 435, 118055 6. 639-02 P 19 E 9 18 E 9 3 18 E U 7 29. 689673 0. 537376E-04 432, 688347 6. 55E-02 P 19 E 9 18 E 9 18 E U 8 29. 689673 0. 537376E-04 432, 689547 6. 55E-02 P 19 E 9 18 E 9 18 E U 8 29. 689673 0. 537376E-04 437, 374141 5. 12E-02 R 17 F19 2 18 F1U 9 12. 689600 0. 371865E-04 437, 37434 5. 12E-02 R 17 F19 2 18 F1U 9 2. 720706 0. 387847E-04 435, 118012 5. 02E-02 Q 18 F19 2 18 F1U 9 2. 18 F1U 9 2. 689673 0. 403032E-04 435, 118012 5. 02E-02 Q 18 F19 2 18 F1U 9 2. 18 F1U 10 29. 689673 0. 403032E-04 435, 118012 5. 02E-02 Q 18 F19 1 F19 1 18 F1U 10 29. 689673 0. 403032E-04 435, 118012 5. 02E-02 Q 18 F19 1 F19 1 18 F1U 10 29. 689673 0. 403032E-04 435, 118012 5. 02E-02 Q 18 F19 1 F19 1 18 F1U 10 29. 689673 0. 403032E-04 437, 374345 5. 02E-02 Q 18 F19 1 F19 1 18 F1U 10 29. 689673 0. 403032E-04 438, 688322 4. 91E-02 P 19 F19 1 F19 1 18 F1U 10 29. 689673 0. 403032E-04 439, 689497 4. 91E-02 P 19 F19 1 F19 1 18 F1U 10 29. 689673 0. 403032E-04 431, 688324 5. 50E-02 Q 18 F19 5 F19 1 18 F1U 10 29. 689673 0. 403032E-04 432, 689497 4. 91E-02 P 19 F19 F19 5 F19 1 18 F1U 10 29. 689673 0. 403032E-04 433, 688322 4. 91E-02 P 19 F19 F19 5 F1										
437, 375307 6. 8.38-02 R 17 E 9 3 18 E U 2 2.3.908000 0. 495821E-04 437, 375307 6. 8.38-02 R 17 E 9 3 18 E U 3 2.3.908000 0. 495821E-04 438, 114516 6. 698-02 Q 18 E 9 9 1 18 E U 5 52, 720706 0. 517130E-04 432, 688347 6. 558-02 P 19 E 9 1 18 E U 5 52, 720706 0. 517130E-04 432, 688347 6. 558-02 P 19 E 9 2 1 18 E U 7 799, 689673 0. 537376E-04 432, 689347 6. 558-02 P 19 E 9 2 1 18 E U 7 799, 689673 0. 537376E-04 432, 689347 6. 558-02 R 17 F19 E 9 3 18 E U 9 29, 689673 0. 537376E-04 432, 689347 6. 558-02 R 17 F19 E 9 3 18 E U 9 29, 689673 0. 537376E-04 437, 375303 5. 12E-02 R 17 F19 2 18 F10 2 18 F10 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2										
437, 375307 6 6.69E-02 Q 18 E E G 2 18 E U 3 22.3 908000 0 .495821E-04 435.114516 6 6.69E-02 Q 18 E E G 2 18 E U 4 6 76.770706 0 .317130E-04 436.118055 6 6.69E-02 Q 18 E E G 2 18 E U 4 6 76.770706 0 .317130E-04 432.689547 6 .55E-02 P 19 E G 2 18 E U 4 6 72.9689673 0 .537376E-04 432.689547 6 .55E-02 P 19 E G 2 18 E U 4 72.9689673 0 .537376E-04 432.689547 6 .55E-02 P 19 E G 2 18 E U 8 29.689673 0 .537376E-04 432.689547 6 .55E-02 P 19 E G 2 18 E U 8 29.689673 0 .537376E-04 432.691022 6 .55E-02 P 19 E G 2 18 E U 9 29.689673 0 .537376E-04 437.373734 5 .12E-02 R 17 F1G 2 18 F1U 1 23.908000 0 .371865E-04 437.374141 5 .12E-02 R 17 F1G 2 18 F1U 1 23.908000 0 .371865E-04 437.375103 5 .12E-02 R 17 F1G 2 18 F1U 1 23.908000 0 .371865E-04 437.376131 5 .12E-02 R 17 F1G 2 18 F1U 5 23.908000 0 .371865E-04 435.118012 5 .02E-02 Q 18 F1G 1 18 F1U 5 23.908000 0 .371865E-04 435.118012 5 .02E-02 Q 18 F1G 1 18 F1U 5 23.908000 0 .371865E-04 435.118012 5 .02E-02 Q 18 F1G 1 18 F1U 6 2 .25908000 0 .371865E-04 435.118012 5 .02E-02 Q 18 F1G 1 18 F1U 6 .2690800 0 .371865E-04 435.118012 5 .02E-02 Q 18 F1G 1 18 F1U 6 .2690800 0 .371865E-04 432.689992 4 .91E-02 P 19 F1G 1 18 F1U 1 .29689673 0 .387847E-04 432.689992 4 .91E-02 P 19 F1G 2 18 F1U 1 .29689673 0 .403032E-04 432.689997 4 .91E-02 P 19 F1G 2 18 F1U 1 .29689673 0 .403032E-04 432.689997 4 .91E-02 P 19 F1G 2 18 F1U 1 .29689673 0 .403032E-04 433.68989				E g						
435. 114516 6.69E-02 Q 18 E g 1 18 E u 4 26.720706 0.517130E-04 435. 118055 6.69E-02 Q 18 E g 2 18 E u 5 7.67.70706 0.517130E-04 435. 118055 6.69E-02 Q 18 E g 2 3 18 E u 6 7.86.720706 0.517130E-04 435. 118055 6.69E-02 Q 18 E g 2 3 18 E u 6 7.86.720706 0.517130E-04 432. 689547 6.55E-02 P 19 E g 3 18 E u 9 7.29. 689673 0.517130E-04 432. 689547 6.55E-02 P 19 E g 3 18 E u 9 9.29. 689673 0.51776E-04 432. 689547 5.5E-02 R 17 F1g 1 18 F1u 1 23.908000 0.371865E-04 437. 37434 5.12E-02 R 17 F1g 2 18 F1u 2 23.908000 0.371865E-04 437. 37434 5.12E-02 R 17 F1g 2 18 F1u 3 23.908000 0.371865E-04 437. 37434 5.12E-02 R 17 F1g 4 18 F1u 3 23.908000 0.371865E-04 437. 37434 5.12E-02 R 17 F1g 4 18 F1u 3 23.908000 0.371865E-04 435. 118012 5.02E-02 Q 18 F1g 4 18 F1u 5 22.70706 0.387847E-04 435. 118012 5.02E-02 Q 18 F1g 2 18 F1u 5 26.720706 0.387847E-04 435. 118012 5.02E-02 Q 18 F1g 4 18 F1u 1 5 26.720706 0.387847E-04 435. 120667 5.02E-02 Q 18 F1g 4 18 F1u 1 29.689673 0.403032E-04 435. 689032 4.91E-02 P 19 F1g 1 18 F1u 1 12 29.689673 0.403032E-04 432. 689324 4.91E-02 P 19 F1g 1 18 F1u 1 12 29.689673 0.403032E-04 432. 689324 4.91E-02 P 19 F1g 1 18 F1u 1 12 29.689673 0.403032E-04 432. 689325 1.50E-02 R 17 F2g 2 18 F1u 1 1 29.689673 0.403032E-04 432. 689325 1.50E-02 R 17 F2g 2 18 F1u 1 1 29.689673 0.403032E-04 432. 689325 1.50E-02 R 17 F2g 2 18 F1u 1 1 29.689673 0.403032E-04 432. 689325 1.50E-02 R 17 F2g 2 18 F1u 1 1 29.689673 0.403032E-04 432. 689325 1.50E-02 R 17 F2g 2 18 F1u 1 1 29.689673 0.403032E-04 432. 689325 1.50E-02 R 17 F2g 2 18 F1u 1 1 29.689673 0.403032E-04 432. 68935 1.50E-02 R 17 F2g 2 18 F1u 1 1 29.689673 0.403032E-04 432. 68935 1.50E-02 R 17 F2g 2 18 F1u 1 1 29.689673 0.403032E-04 432. 68935 1.50E-02 R 17 F2g 2 18 F1u 1 1 29.689673 0.403032E-04 432. 68935 1.50E-02 R 17 F2g 2 18 F2u 1 29.689673 0.403032E-04 433. 11666 5.02E-02 R 18 F2g 2 18 F2u 1 29.689673 0.403032E-04 434. 11666 5.02E-02 R 18 F2g 2 18 F2u 1 29.689673 0.403032E-04 435. 11666 5.02E-02 R 18 F2g 2 18 F2u 1 29.689673 0.403032E-04 435. 11666 5.02E-02 R 18 F2g 2 1					3			3		
432.688447 6.55E-02 P 19 E 9 1 18 E u 6 26.720706 0.517130E-04 432.6885447 6.55E-02 P 19 E 9 1 18 E u 7 29.689673 0.537376E-04 432.6885447 6.55E-02 P 19 E 9 2 18 E u 8 29.689673 0.537376E-04 437.373734 5.12E-02 R 17 F19 1 18 F1U 1 23.98000 0.371865E-04 437.374141 5.12E-02 R 17 F19 2 18 F1U 2 23.98000 0.371865E-04 437.37434 5.12E-02 R 17 F19 4 18 F1U 2 23.98000 0.371865E-04 437.37434 5.12E-02 R 17 F19 4 18 F1U 3 23.98000 0.371865E-04 437.375303 5.12E-02 R 17 F19 5 18 F1U 3 23.908000 0.371865E-04 437.376130 5.12E-02 R 17 F19 5 18 F1U 4 23.908000 0.371865E-04 437.376131 5.12E-02 R 17 F19 5 18 F1U 6 22.780706 0.387847E-04 435.116541 5.02E-02 Q 18 F19 1 18 F1U 7 76.720706 0.387847E-04 435.11691 5.02E-02 Q 18 F19 1 18 F1U 8 26.720706 0.387847E-04 435.120667 5.02E-02 Q 18 F19 5 18 F1U 1 29.689673 0.403032E-04 432.688924 4.91E-02 P 19 F19 1 18 F1U 10 29.689673 0.403032E-04 432.688924 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 11 29.689673 0.403032E-04 432.689099 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 11 29.689673 0.403032E-04 432.689099 5 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.689099 5 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.688978 5 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.688978 5 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.688988 5 6.02E-02 Q 18 F19 5 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 437.374916 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.374915 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.374916 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.37691 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.37691 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.37691 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.37691 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.37691 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.37691 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.37691 5.12E-02 R 17 F			•	Εg	1			4		
432.688947 6.55E-02 P 19 E 9 C 1 18 E U 7 29.689673 0.537376E-04 432.689547 6.55E-02 P 19 E 9 C 18 E U 8 29.689673 0.537376E-04 432.689547 6.55E-02 P 19 E 9 C 18 E U 8 29.689673 0.537376E-04 432.689547 6.55E-02 R 17 F 19 C 18 F 11 1 23.08000 0.7371865E-04 437.373731 5.12E-02 R 17 F 19 C 18 F 11 1 23.08000 0.7371865E-04 437.373731 5.12E-02 R 17 F 19 C 18 F 11 1 23.08000 0.7371865E-04 437.37330 5.12E-02 R 17 F 19 C 18 F 11 1 2 3.18 F 11 1 2 3.08000 0.7371865E-04 437.37503 5.12E-02 R 17 F 19 C 18 F 11 1 2 3.18 F 11 1 2 3.08000 0.7371865E-04 437.37503 5.12E-02 R 17 F 19 C 18 F 11 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1					2					
432.689547 6.55E-02 P 19 E 9 C 2 18 E U 8 29.689673 0.537376E-04 432.691022 6.55E-02 P 19 E 9 C 3 18 E U 9 29.689673 0.537376E-04 437.373734 5.12E-02 R 17 F19 1 18 F1U 1 23.908000 0.7371865E-04 437.37414 5.12E-02 R 17 F19 1 18 F1U 1 23.908000 0.7371865E-04 437.37414 5.12E-02 R 17 F19 1 18 F1U 1 23.908000 0.7371865E-04 437.375303 5.12E-02 R 17 F19 4 18 F1U 4 23.908000 0.371865E-04 435.118012 5.02E-02 Q 18 F19 1 18 F1U 5 23.908000 0.371865E-04 435.118012 5.02E-02 Q 18 F19 1 18 F1U 6 26.720706 0.387847E-04 435.118012 5.02E-02 Q 18 F19 2 18 F1U 7 26.720706 0.387847E-04 435.119191 5.02E-02 Q 18 F19 3 18 F1U 7 26.720706 0.387847E-04 435.119191 5.02E-02 Q 18 F19 3 18 F1U 9 26.720706 0.387847E-04 435.120667 5.02E-02 Q 18 F19 3 18 F1U 9 26.720706 0.387847E-04 435.120667 5.02E-02 Q 18 F19 4 18 F1U 9 26.720706 0.387847E-04 432.688929 4.91E-02 P 19 F19 5 11 5 18 F1U 1 22.6889673 0.403032E-04 432.688929 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 1 22.6889673 0.403032E-04 432.689497 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 1 22.6889673 0.403032E-04 432.689226 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 1 22.9689673 0.403032E-04 432.689226 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 1 22.9689673 0.403032E-04 437.373781 5.12E-02 R 17 F29 1 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 1 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 1 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 1 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.374931 5.12E-02 R 17 F29 1 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.374931 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 2 2 3.908000 0.371865E-04 437.37491 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 2 2 2 3.908000 0.373864E-04 433.37491 5.12E-02 R										
432.691022 6 6.55e-02 P 19 E 9 3 18 E u 9 29.689673 0.537376E-04 437.373734 5.12E-02 R 17 F19 2 18 F1u 1 23.908000 0.571865E-04 437.37334 5.12E-02 R 17 F19 2 18 F1u 1 23.908000 0.571865E-04 437.375303 5.12E-02 R 17 F19 5 18 F1u 4 23.908000 0.571865E-04 437.375303 5.12E-02 R 17 F19 5 18 F1u 4 23.908000 0.371865E-04 437.375303 5.12E-02 R 17 F19 5 18 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435.118012 5.02E-02 Q 18 F19 2 18 F1u 6 26.720706 0.387847E-04 435.118012 5.02E-02 Q 18 F19 2 18 F1u 7 26.720706 0.387847E-04 435.118012 5.02E-02 Q 18 F19 3 18 F1u 8 76.720706 0.387847E-04 435.118012 5.02E-02 Q 18 F19 4 18 F1U 7 26.720706 0.387847E-04 435.60869 1 4.91E-02 P 19 F19 4 18 F1U 1 29.689673 0.403032E-04 432.69039 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 1 29.689673 0.403032E-04 432.69039 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 1 29.689673 0.403032E-04 432.690139 4.91E-02 P 19 F19 5 18 F1U 1 29.689673 0.403032E-04 432.690139 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F1U 1 29.689673 0.403032E-04 432.690139 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.571865E-04 437.373781 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.571865E-04 437.373781 5.12E-02 R 17 F29 3 18 F2U 2 23.908000 0.571865E-04 437.373781 5.12E-02 R 17 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.571865E-04 435.118583 5.02E-02 Q 18 F29 2 18 F2U 2 23.908000 0.571865E-04 435.118583 5.02E-02 Q 18 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.571865E-04 435.118658 5.02E-02 Q 18 F29 2 18 F2U 1 23.908000 0.571865E-04 435.118658 5.02E-02 Q 18 F29 2 1 18 F2U 1 23.908000 0.571865E-04 435.118658 5.02E-02 Q 18 F29 2 1 18 F2U 1 23.908000 0.571865E-04 435.118658 5.02E-02 Q 18 F29 2 1 18 F2U 1 23.908000 0.571865E-04 435.118658 5.02E-02 Q 18 F29 2 1 18 F2U 1 23.908000 0.571865E-04 435.118659 5.02E-02 Q 18 F29 2 1 18 F2U 1 23.908000 0.571865E-04 435.118659 5.02E-02 Q 18 F29 2 1 18 F2U 1 23.689673 0.403032E-04 435.118659 5.02E-02 Q 18 F29 2 1 18 F2U 1 23.689673 0.403032E-04 435.118659 5.02E-02 Q 18 F29 2 1 18 F2U 1 23.689673 0.403032E-04 435.11869 5.02E-02 Q 18 F29 2 1 18 F2U 1 23.689673 0.403032E-04 435.11869 5.02E-02 Q 1 18 F29 2 1 18 F2U 1 23.689673 0.403032E-04 435.11869				E q						
437. 374141 5.12E-02 R 17 F1g 2 18 F1u 2 23.908000 0.371865E-04 437. 374734 5.12E-02 R 17 F1g 3 18 F1u 3 23.908000 0.371865E-04 437. 375131 5.12E-02 R 17 F1g 4 18 F1u 4 23.908000 0.371865E-04 437. 376131 5.12E-02 R 17 F1g 5 18 F1u 5 23.908000 0.371865E-04 435. 116540 5.02E-02 Q 18 F1g 2 18 F1u 6 28.70706 0.387847E-04 435. 119101 5.02E-02 Q 18 F1g 2 18 F1u 10 29.689673 0.387847E-04 435. 119101 5.02E-02 Q 18 F1g 1 18 F1u 10 29.689673 0.403032E-04 432.688324 4.91E-02 P 19 F1g 1 18 F1u 10 29.689673 0.403032E-04 432.689092 4.91E-02 P 19 F1g 3 18 F1u 12 29.689673 0.403032E-04 432.689997 4.91E-02 P 19 F1g 3 18 F1u 12 29.689673 0.403032E-04 432.689093 4.91E-02 P 19 F1g 5 18 F1u 11 29.689673 0.403032E-04 432.690193 4.91E-02 P 19 F1g 5 18 F1u 11 29.689673 0.403032E-04 432.690193 5.12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 12 29.089673 0.403032E-04 432.690193 5.12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 12 29.089673 0.403032E-04 437.373781 5.12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 3 29.08000 0.371865E-04 437.37461 5.12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 3 29.08000 0.371865E-04 437.37461 5.12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 3 29.08000 0.371865E-04 437.37461 5.12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 3 29.08000 0.371865E-04 435.116528 5.02E-02 Q 18 F2g 1 18 F2u 4 23.908000 0.371865E-04 435.11652 5.02E-02 Q 18 F2g 1 18 F2u 5 29.08000 0.371865E-04 435.11652 5.02E-02 Q 18 F2g 1 18 F2u 5 29.08000 0.371865E-04 435.11652 5.02E-02 Q 18 F2g 1 18 F2u 5 29.08000 0.371865E-04 435.11652 5.02E-02 Q 18 F2g 1 18 F2u 5 29.08000 0.371865E-04 435.11652 6.0000 0.387847E-04 435.11652 6.0000 0.387847E-04 435.11653 6.0000 0.371865E-04 435.11653 6.0000 0.371865E-04 435.11654 6.0000 0.387847E-04 435.11654 6.0000 0.387847E-04 435.11658 6.00000 0.387847E-04 435.11658 6.0000 0.387847E-04 435.11669 0.00000 0.00000	432.691022			Εġ						
437, 373434 5, 12E-02 R 17 Flg 3 18 Flu 3 23, 908000 0, 371865E-04 437, 375033 5, 12E-02 R 17 Flg 5 18 Flu 5 23, 908000 0, 371865E-04 437, 3750131 5, 12E-02 R 17 Flg 5 18 Flu 6 28, 720706 0, 387847E-04 435, 116540 5, 02E-02 Q 18 Flg 1 18 Flu 6 26, 720706 0, 387847E-04 435, 116541 5, 02E-02 Q 18 Flg 1 18 Flu 7 26, 720706 0, 387847E-04 435, 11651 5, 02E-02 Q 18 Flg 3 18 Flu 7 26, 720706 0, 387847E-04 435, 11651 5, 02E-02 Q 18 Flg 3 18 Flu 9 26, 720706 0, 387847E-04 432, 688324 4, 91E-02 P 19 Flg 2 18 Flu 11 29, 689673 0, 403032E-04 432, 689902 4, 91E-02 P 19 Flg 3 18 Flu 11 29, 689673 0, 403032E-04 432, 6890139 4, 91E-02 P 19 Flg 3 18 Flu 11 29, 689673 0, 403032E-04 432, 689137 4, 91E-02 P 19 Flg 5 18 Flu 11 29, 689673 0, 403032E-04 437, 373781 5, 12E-02 R 17 F2g 1 18 F2u 1 29, 689673 0, 403032E-04 437, 373781 5, 12E-02 R 17 F2g 1 18 F2u 1 29, 689673 0, 403032E-04 437, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 1 18 F2u 1 29, 689673 0, 403032E-04 437, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 1 18 F2u 1 23, 908000 0, 371865E-04 437, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 1 18 F2u 1 23, 908000 0, 371865E-04 437, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 2 23, 908000 0, 371865E-04 437, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 3 23, 908000 0, 371865E-04 437, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 1 24, 37, 374316 5, 12E-02 R 17										
437, 375130					3			3		
437. 376131					4					
435.118012 5.02E-02 Q 18 F1G 2 18 F1U 7 26.720706 0.387847E-04 435.119191 5.02E-02 Q 18 F1G 3 18 F1U 8 26.720706 0.387847E-04 435.120667 5.02E-02 Q 18 F1G 4 18 F1U 9 26.720706 0.387847E-04 432.688324 4.91E-02 P 19 F1G 1 18 F1U 10 29.689673 0.403032E-04 432.688347 4.91E-02 P 19 F1G 3 18 F1U 11 29.689673 0.403032E-04 432.689497 4.91E-02 P 19 F1G 3 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.689497 4.91E-02 P 19 F1G 3 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690139 4.91E-02 P 19 F1G 5 18 F1U 13 29.689673 0.403032E-04 432.692736 4.91E-02 R 17 F1G 5 18 F1U 13 29.689673 0.403032E-04 432.692736 4.91E-02 R 17 F2G 2 18 F2U 1 23.809800 0.371865E-04 437.374316 5.12E-02 R 17 F2G 2 18 F2U 1 23.809800 0.371865E-04 437.374316 5.12E-02 R 17 F2G 3 18 F2U 32.908000 0.371865E-04 437.374316 5.12E-02 R 17 F2G 4 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.374315 5.02E-02 Q 18 F2G 4 18 F2U 4 23.908000 0.371865E-04 435.116528 5.02E-02 Q 18 F2G 3 18 F2U 7 26.720706 0.387847E-04 435.116528 5.02E-02 Q 18 F2G 3 18 F2U 7 26.720706 0.387847E-04 435.116528 5.02E-02 Q 18 F2G 3 18 F2U 7 26.720706 0.387847E-04 435.116528 5.02E-02 Q 18 F2G 3 18 F2U 7 26.720706 0.387847E-04 435.126620 5.02E-02 Q 18 F2G 3 18 F2U 7 26.720706 0.387847E-04 435.126620 5.02E-02 Q 18 F2G 3 18 F2U 7 26.720706 0.387847E-04 435.126620 5.02E-02 Q 18 F2G 3 18 F2U 7 26.720706 0.387847E-04 435.688371 4.91E-02 P 19 F2G 1 18 F2U 10 29.689673 0.403032E-04 437.690101 4.91E-02 P 19 F2G 1 18 F2U 10 29.689673 0.403032E-04 437.690101 4.91E-02 P 19 F2G 1 18 F2U 10 29.689673 0.403032E-04 437.690101 4.91E-02 P 19 F2G 1 18 F2U 10 29.689673 0.403032E-04 437.690101 4.91E-02 P 19 F2G 1 18 F2U 10 29.689673 0.403032E-04 437.690101 4.91E-02 P 19 F2G 1 18 F2U 10 29.689673 0.403032E-04 437.690401 1.78E-02 R 18 F2U 12 29.689673 0.403032E-04 437.690401 1.78E-02 R 18 F2U 19 F2U 10 29.689673 0.403032E-04 437.590880 4.91E-02 P 19 F2G 1 18 F2U 10 29.689673 0.403032E-04 437.590880 4.91E-02 P 19 F2G 1 18 F2U 10 29.689673 0.403032E-04 437.690401 4.91E-02 P 19 F2G 1 18 F2U 10 29.689673 0.403032E-04 437.690401 4.91E-02 P 19 F		5.12E-02		F1g						
435.119191 5.02E-02 Q 18 F1G 3 18 F1U 8 26.720706 0.387847E-04 435.120667 5.02E-02 Q 18 F1G 1 18 F1U 10 29.689673 0.403032E-04 432.6889092 4.91E-02 P 19 F1G 1 18 F1U 10 29.689673 0.403032E-04 432.689092 4.91E-02 P 19 F1G 2 18 F1U 11 29.689673 0.403032E-04 432.689019 4.91E-02 P 19 F1G 3 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690139 4.91E-02 P 19 F1G 3 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690139 4.91E-02 P 19 F1G 3 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690139 4.91E-02 P 19 F1G 5 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690139 4.91E-02 P 19 F1G 5 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690139 4.91E-02 P 19 F1G 5 18 F1U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690139 5.12E-02 R 17 F2G 1 18 F2U 1 23.908000 0.371865E-04 437.3734316 5.12E-02 R 17 F2G 2 18 F2U 2 23.908000 0.371865E-04 437.374691 5.12E-02 R 17 F2G 3 18 F2U 3 23.908000 0.371865E-04 437.374691 5.12E-02 R 17 F2G 3 18 F2U 3 23.908000 0.371865E-04 437.374691 5.12E-02 R 17 F2G 4 18 F2U 3 23.908000 0.371865E-04 437.374615 5.12E-02 R 17 F2G 4 18 F2U 6 26.770706 0.387847E-04 435.119662 5.02E-02 Q 18 F2G 3 18 F2U 6 26.770706 0.387847E-04 435.119662 5.02E-02 Q 18 F2G 3 18 F2U 7 76.70706 0.387847E-04 435.119662 5.02E-02 Q 18 F2G 3 18 F2U 9 26.720706 0.387847E-04 432.688981 4.91E-02 P 19 F2G 2 18 F2U 10 29.689673 0.403032E-04 432.688987 4.91E-02 P 19 F2G 2 18 F2U 11 29.689673 0.403032E-04 432.688987 4.91E-02 P 19 F2G 2 18 F2U 11 29.689673 0.403032E-04 432.688987 4.91E-02 P 19 F2G 2 18 F2U 11 29.689673 0.403032E-04 432.690101 4.91E-02 P 19 F2G 2 18 F2U 11 29.689673 0.403032E-04 432.690101 4.91E-02 P 19 F2G 2 18 F2U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690101 4.91E-02 P 19 F2G 3 18 F2U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690101 4.91E-02 P 19 F2G 3 18 F2U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690101 4.91E-02 P 19 F2G 3 18 F2U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690101 4.91E-02 P 19 F2G 3 18 F2U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690101 4.91E-02 P 19 F2G 3 18 F2U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690101 4.91E-02 P 19 F2G 3 18 F2U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690101 4.91E-02 P 19 F2G 3 18 F2U 12 29.689673 0.403032E-04 432.690										
432.688324			•							
432.6883092										
432.689497 4.91E-02 P 19 F1g 4 18 F1u 12 29.689673 0.403032E-04 432.699226 4.91E-02 P 19 F1g 5 18 F1u 14 29.689673 0.403032E-04 437.373781 5.12E-02 R 17 F2g 1 18 F2u 1 23.908000 0.371865E-04 437.373781 5.12E-02 R 17 F2g 1 18 F2u 1 23.908000 0.371865E-04 437.373781 5.12E-02 R 17 F2g 2 18 F2u 2 23.908000 0.371865E-04 437.374691 5.12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 3 23.908000 0.371865E-04 437.376691 5.12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 2 23.908000 0.371865E-04 437.376691 5.12E-02 R 17 F2g 3 18 F2u 5 25.727076 0.387847E-04 435.114516 5.02E-02 Q 18 F2g 1 18 F2u 5 26.720706 0.387847E-04 435.114516 5.02E-02 Q 18 F2g 1 18 F2u 5 26.720706 0.387847E-04 435.114506 5.02E-02 Q 18 F2g 3 18 F2u 7 26.720706 0.387847E-04 435.114506 5.02E-02 Q 18 F2g 3 18 F2u 7 26.720706 0.387847E-04 435.1145062 5.02E-02 Q 18 F2g 3 18 F2u 9 26.720706 0.387847E-04 435.126020 5.02E-02 Q 18 F2g 1 18 F2u 9 26.720706 0.387847E-04 432.688978 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 10 29.689673 0.403032E-04 432.68998 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 11 29.688673 0.403032E-04 432.690102 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 12 29.689673 0.403032E-04 432.691025 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 12 29.689673 0.403032E-04 432.691025 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 12 29.689673 0.403032E-04 432.691025 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 12 29.689673 0.403032E-04 432.691025 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 12 29.689673 0.403032E-04 432.691025 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 12 29.689673 0.403032E-04 432.691025 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 12 29.689673 0.403032E-04 432.691025 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 12 29.689673 0.403032E-04 432.691025 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 12 29.689673 0.403032E-04 432.691025 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 12 29.689673 0.403032E-04 432.691025 4.91E-02 P 19 F2g 1 18 F2u 12 29.689673 0.403032E-04 432.596564 1.70E-02 R 18 A1g 1 19 A1u 2 26.720706 0.129282E-04 433.5126110 8.69E-02 R 18 A1g 1 19 A1u 2 26.720706 0.129282E-04 433.5126104 8.89E-02 R 18 R 19 F2g 1 19 F			P 19	F1g						
432.690139					2					
432.692226					3 4					
437. 373781										
437. 374691 5. 12E-02 R 17 F29 4 18 F2u 4 23. 908000 0. 371865E-04 435. 114516 5. 02E-02 Q 18 F29 1 18 F2u 5 26. 720706 0. 387847E-04 435. 116528 5. 02E-02 Q 18 F29 3 18 F2u 7 26. 720706 0. 387847E-04 435. 116528 5. 02E-02 Q 18 F29 3 18 F2u 7 26. 720706 0. 387847E-04 435. 119662 5. 02E-02 Q 18 F29 3 18 F2u 7 26. 720706 0. 387847E-04 435. 119662 5. 02E-02 Q 18 F29 3 18 F2u 7 26. 720706 0. 387847E-04 435. 119662 5. 02E-02 Q 18 F29 3 18 F2u 7 26. 720706 0. 387847E-04 435. 119662 5. 02E-02 Q 18 F29 3 18 F2u 9 26. 720706 0. 387847E-04 432. 688978 4. 91E-02 P 19 F29 1 18 F2u 1 12 9, 689673 0. 403032E-04 432. 688978 4. 91E-02 P 19 F29 1 18 F2u 1 1 29. 689673 0. 403032E-04 432. 6991025 4. 91E-02 P 19 F29 3 18 F2u 1 1 29. 689673 0. 403032E-04 432. 6991025 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 1 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 2 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 2 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 2 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 2 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 2 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 2 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 2 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 3 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 3 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 3 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 3 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 3 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 3 29. 689673 0. 403032E-04 432. 699205 4. 91E-02 P 19 F29 5 18 F2u 1 2 2 2 6. 720706 0. 129282E-04 433. 10484 434. 10484 435. 11684 435. 11686 435. 11686 435. 11686 436. 11686 437. 10686 438. 11886	437.373781	5.12E-02			1			1	23.908000	0.371865E-04
437. 376130										
435.114516										
435.116528								5		
435. 119662			•		2			6		
435. 120620					3					
432.688371			•							
432.688998										
432.691025				F2g	2					
432.692225										
437.499821 1.78E-02 R 18 A1g 2 19 A1u 1 26.720706 0.129282E-04 437.501041 1.78E-02 R 18 A1g 1 19 A1u 2 26.720706 0.129282E-04 435.121386 1.70E-02 P 20 A1g 1 19 A1u 3 29.689673 0.139132E-04 432.565266 1.70E-02 P 20 A1g 1 19 A1u 4 32.814902 0.139132E-04 437.502549 8.88E-02 R 18 A2g 2 19 A2u 1 26.720706 0.646412E-04 435.118347 8.69E-02 Q 19 A2g 2 19 A2u 3 29.689673 0.671720E-04 435.122110 8.69E-02 Q 19 A2g 1 19 A2u 3 29.689673 0.671720E-04 437.500327 7.10E-02 R 18 E g 3 19 E u 22.6720706 0.517130E-04 437.502549 <td< td=""><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></td<>										
437.501041										
432.562296 1.70E-02 P 20 Alg 2 19 Alu 4 32.814902 0.139132E-04 432.565564 1.70E-02 P 20 Alg 1 19 Alu 5 32.814902 0.139132E-04 437.499884 8.88E-02 R 18 A2g 2 19 A2u 1 26.720706 0.646412E-04 437.502549 8.88E-02 R 18 A2g 1 19 A2u 2 26.720706 0.646412E-04 435.118347 8.69E-02 Q 19 A2g 1 19 A2u 3 29.689673 0.671720E-04 435.122110 8.69E-02 Q 19 A2g 1 19 A2u 4 29.689673 0.671720E-04 437.500327 7.10E-02 R 18 E g 3 19 E u 1 26.720706 0.517130E-04 437.500387 7.10E-02 R 18 E g 1 19 E u 26.720706 0.517130E-04	437.501041		R 18		1	19		2		0.129282E-04
432.565564 1.70E-02 P 20 A1g 1 19 Alu 5 32.814902 0.139132E-04 437.499884 8.88E-02 R 18 A2g 2 19 A2u 1 26.720706 0.646412E-04 437.502549 8.88E-02 R 18 A2g 1 19 A2u 2 26.720706 0.646412E-04 435.122110 8.69E-02 Q 19 A2g 1 19 A2u 3 29.689673 0.671720E-04 435.122110 8.69E-02 P 20 A2g 1 19 A2u 4 29.689673 0.671720E-04 437.500327 7.10E-02 R 18 E g 3 19 E u 2 6.720706 0.517130E-04 437.5002549 7.10E-02 R 18 E g 1 19 E u 2 6.720706 0.517130E-04 435.123097 6.95E-02 Q 19 E g 2 19 E u 5 29.689673 <										
437.499884 8.88E-02 R 18 A2g 2 19 A2u 1 26.720706 0.646412E-04 437.502549 8.88E-02 R 18 A2g 1 19 A2u 2 26.720706 0.646412E-04 435.118347 8.69E-02 Q 19 A2g 2 19 A2u 3 29.689673 0.671720E-04 435.122110 8.69E-02 Q 19 A2g 1 19 A2u 4 29.689673 0.671720E-04 432.563282 8.49E-02 P 20 A2g 1 19 A2u 5 32.814902 0.695662E-04 437.500327 7.10E-02 R 18 E g 3 19 E u 1 26.720706 0.517130E-04 437.500988 7.10E-02 R 18 E g 2 19 E u 2 26.720706 0.517130E-04 437.502549 7.10E-02 R 18 E g 1 19 E u 3 26.720706 0.517130E-04 435.12399 6.95E-02 Q 19 E g 3 19 E u 4 29.689673 0.537376E-04 435.120990 6.95E-02 Q 19 E g 1 19 E u 5 29.689673 0.537376E-04 435.123097 6.95E-02 Q 19 E g 1 19 E u 6 29.689673 0.537376E-04 432.561231 6.80E-02 P 20 E g 4 19 E u 7 32.814902 0.556529E-04 432.563324 6.80E-02 P 20 E g 3 19 E u 8 32.814902 0.556529E-04 432.565324 6.80E-02 P 20 E g 1 19 E u 9 32.814902 0.556529E-04 437.500488 5.33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.501007 5.33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.501007 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 437.501007 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 437.501007 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.121937 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.123138 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.562087 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 435.562565 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 435.562565 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 435.562565 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.566264 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1										
437.502549 8.88E-02 R 18 A2g 1 19 A2u 2 26.720706 0.646412E-04 435.118347 8.69E-02 Q 19 A2g 1 19 A2u 4 29.689673 0.671720E-04 435.122110 8.69E-02 Q 19 A2g 1 19 A2u 4 29.689673 0.671720E-04 432.563282 8.49E-02 P 20 A2g 1 19 A2u 5 32.814902 0.695662E-04 437.500327 7.10E-02 R 18 E g 3 19 E u 1 26.720706 0.517130E-04 437.500988 7.10E-02 R 18 E g 2 19 E u 2 26.720706 0.517130E-04 437.500988 7.10E-02 R 18 E g 1 19 E u 3 26.720706 0.517130E-04 437.502549 7.10E-02 R 18 E g 1 19 E u 3 26.720706 0.517130E-04 435.118359 6.95E-02 Q 19 E g 3 19 E u 4 29.689673 0.537376E-04 435.120990 6.95E-02 Q 19 E g 2 19 E u 5 29.689673 0.537376E-04 435.123097 6.95E-02 Q 19 E g 1 19 E u 6 29.689673 0.537376E-04 432.561231 6.80E-02 P 20 E g 4 19 E u 7 32.814902 0.556529E-04 432.562003 6.80E-02 P 20 E g 3 19 E u 8 32.814902 0.556529E-04 432.565564 6.80E-02 P 20 E g 3 19 E u 8 32.814902 0.556529E-04 437.500488 5.33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.501605 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 437.501605 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 437.501605 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 437.501605 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 1 22.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 1 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 435.562565 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.5662565 5.10E-02 P 20 F1g 3 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.5662565 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g										
435.122110 8.69E-02 Q 19 A2g 1 19 A2u 4 29.689673 0.671720E-04 432.563282 8.49E-02 P 20 A2g 1 19 A2u 5 32.814902 0.695662E-04 437.500327 7.10E-02 R 18 E g 3 19 E u 1 26.720706 0.517130E-04 437.500988 7.10E-02 R 18 E g 2 19 E u 2 26.720706 0.517130E-04 437.502549 7.10E-02 R 18 E g 1 19 E u 3 26.720706 0.517130E-04 437.502549 7.10E-02 R 18 E g 1 19 E u 3 26.720706 0.517130E-04 435.123090 6.95E-02 Q 19 E g 3 19 E u 4 29.689673 0.537376E-04 435.123097 6.95E-02 Q 19 E g 1 19 E u 5 29.689673 0.537376E-04 435.123097 6.95E-02 Q 19 E g 1 19 E u 6 29.689673 0.537376E-04 432.561231 6.80E-02 P 20 E g 4 19 E u 7 32.814902 0.556529E-04 432.562003 6.80E-02 P 20 E g 3 19 E u 8 32.814902 0.556529E-04 432.565324 6.80E-02 P 20 E g 2 19 E u 9 32.814902 0.556529E-04 432.565324 6.80E-02 P 20 E g 1 19 E u 10 32.814902 0.556529E-04 437.499839 5.33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.501685 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 437.501685 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 437.501685 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.116198 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.123038 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 6 29.689673 0.403032E-04 435.123138 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 1 32.814902 0.417397E-04 432.566287 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.566287 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04 432.566564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04 432.56656487 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04 432.56656487 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04 432.56656487 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04								2		
432.563282 8.49E-02 P 20 A2g 1 19 A2u 5 32.814902 0.695662E-04 437.500327 7.10E-02 R 18 E g 3 19 E u 1 26.720706 0.517130E-04 437.500988 7.10E-02 R 18 E g 2 19 E u 2 26.720706 0.517130E-04 437.5002549 7.10E-02 R 18 E g 1 19 E u 3 26.720706 0.517130E-04 435.118359 6.95E-02 Q 19 E g 3 19 E u 4 29.689673 0.537376E-04 435.120990 6.95E-02 Q 19 E g 2 19 E u 5 29.689673 0.537376E-04 435.123097 6.95E-02 Q 19 E g 1 19 E u 6 29.689673 0.537376E-04 432.561231 6.80E-02 P 20 E g 3 19 E u 7 32.814902 0.556529E-04 432.563324 6.80E-02 P 20 E g 3 19 E u 8 32.814902 0.556529E-04 432.565324 6.80E-02 P 20 E g 3 19 E u 9 32.814902 0.556529E-04 437.499839 5.33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.501655 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 437.501655 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 435.116198 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.123138 5.21E-02 Q 19 F1g 4 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.562087 5.10E-02 P 20 F1g 3 19 F1u 13 32.814902 0.556529E-04 435.562565 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.576529E-04 437.501655 5.36E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 6 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 3 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 3 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 10 32.814902 0.417397E-04 432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04										
437,500327 7.10E-02 R 18 E g 3 19 E u 1 26.720706 0.517130E-04 437,500988 7.10E-02 R 18 E g 2 19 E u 2 26.720706 0.517130E-04 437,500549 7.10E-02 R 18 E g 19 E u 3 26.720706 0.517130E-04 435,123097 6.95E-02 Q 19 E g 2 19 E u 4 29.689673 0.537376E-04 435,123097 6.95E-02 Q 19 E g 1 19 E u 5 29.689673 0.537376E-04 432,561231 6.80E-02 P 20 E g 4 19 E u 7 32.814902 0.556529E-04 432,562003 6.80E-02 P 20 E g 3 19 E u 8 32.814902 0.556529E-04 432,563524 6.80E-02 P 20 E g 2 19 E u 9 32.814902 0.556529E-04 437,500488 5.33E-02 R										
437.500988 7.10E-02 R 18 E g 2 19 E u 2 26.720706 0.517130E-04 437.502549 7.10E-02 R 18 E g 1 19 E u 3 26.720706 0.517130E-04 435.118359 6.95E-02 Q 19 E g 3 19 E u 4 29.689673 0.537376E-04 435.123097 6.95E-02 Q 19 E g 1 19 E u 5 29.689673 0.537376E-04 432.561231 6.80E-02 P 20 E g 4 19 E u 6 29.689673 0.537376E-04 432.563324 6.80E-02 P 20 E g 3 19 E u 8 32.814902 0.556529E-04 432.565564 6.80E-02 P 20 E g 1 19 E u 9 32.814902 0.556529E-04 437.500488 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.501655 5.33E-02										
435.118359 6.95E-02 Q 19 E g 3 19 E u 4 29.689673 0.537376E-04 435.120990 6.95E-02 Q 19 E g 2 19 E u 5 29.689673 0.537376E-04 435.123097 6.95E-02 Q 19 E g 1 19 E u 6 29.689673 0.537376E-04 432.561231 6.80E-02 P 20 E g 4 19 E u 7 32.814902 0.556529E-04 432.563324 6.80E-02 P 20 E g 2 19 E u 8 32.814902 0.556529E-04 432.565564 6.80E-02 P 20 E g 1 19 E u 9 32.814902 0.556529E-04 432.565564 6.80E-02 P 20 E g 1 19 E u 10 32.814902 0.556529E-04 437.501605 33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.501007 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 437.501605 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 3 26.720706 0.387847E-04 437.501605 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.116198 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 3 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 10 32.814902 0.417397E-04 432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 11 32.814902 0.417397E-04 432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04	437.500988	7.10E-02		Εğ				2	26.720706	0.517130E-04
435.120990 6.95E-02 Q 19 E g 2 19 E u 5 29.689673 0.537376E-04 435.123097 6.80E-02 P 20 E g 1 19 E u 6 29.689673 0.537376E-04 432.562003 6.80E-02 P 20 E g 4 19 E u 7 32.814902 0.556529E-04 432.563324 6.80E-02 P 20 E g 1 19 E u 9 32.814902 0.556529E-04 432.565564 6.80E-02 P 20 E g 1 19 E u 9 32.814902 0.556529E-04 437.499839 5.33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.501007 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 <	437.502549			E g						
435.123097 6.95E-02 Q 19 E g 1 19 E u 6 29.689673 0.537376E-04 432.561231 6.80E-02 P 20 E g 4 19 E u 7 32.814902 0.556529E-04 432.563324 6.80E-02 P 20 E g 3 19 E u 8 32.814902 0.556529E-04 432.565564 6.80E-02 P 20 E g 1 19 E u 9 32.814902 0.556529E-04 437.499839 5.33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.501007 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 437.501655 5.33E-02 R 18 F1g 2 19 F1u 3 26.720706 0.387847E-04 435.116198 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.121078 5.21E-02			•	E g						
432.561231 6.80E-02 P 20 E g 4 19 E u 7 32.814902 0.556529E-04 432.562003 6.80E-02 P 20 E g 3 19 E u 8 32.814902 0.556529E-04 432.565564 6.80E-02 P 20 E g 2 19 E u 9 32.814902 0.556529E-04 437.499839 5.33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.500488 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 437.501007 5.33E-02 R 18 F1g 2 19 F1u 3 26.720706 0.387847E-04 435.116198 5.21E-02 R 18 F1g 19 F1u 3 26.720706 0.387847E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.1221793 5.21E-02 Q <td></td> <td></td> <td></td> <td>Ea</td> <td>1</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>				Ea	1					
432.563324 6.80E-02 P 20 E g 2 19 E u 9 32.814902 0.556529E-04 432.565564 6.80E-02 P 20 E g 1 19 E u 10 32.814902 0.556529E-04 437.499839 5.33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.500488 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 437.501007 5.33E-02 R 18 F1g 2 19 F1u 3 26.720706 0.387847E-04 437.501655 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 3 26.720706 0.387847E-04 435.116198 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.121793 5.21E-02 <td>432.561231</td> <td>6.80E-02</td> <td>P 20</td> <td>Εġ</td> <td>4</td> <td></td> <td></td> <td>7</td> <td>32.814902</td> <td>0.556529E-04</td>	432.561231	6.80E-02	P 20	Εġ	4			7	32.814902	0.556529E-04
432.565564 6.80E-02 P 20 E g 1 19 E u 10 32.814902 0.556529E-04 437.499839 5.33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.501088 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 437.501075 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 3 26.720706 0.387847E-04 437.501655 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.116198 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.121793 5.21E-02 Q 19 F1g 3 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.123138 5.21E-02 <td></td> <td></td> <td></td> <td>E g</td> <td>3</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>				E g	3					
437.499839 5.33E-02 R 18 F1g 4 19 F1u 1 26.720706 0.387847E-04 437.500488 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 437.501655 5.33E-02 R 18 F1g 2 19 F1u 3 26.720706 0.387847E-04 435.116198 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.116198 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.119937 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 4 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.121793 5.21E-02 Q 19 F1g 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.123138 5.21E-02 Q				Eg						
437.500488 5.33E-02 R 18 F1g 3 19 F1u 2 26.720706 0.387847E-04 437.501007 5.33E-02 R 18 F1g 2 19 F1u 3 26.720706 0.387847E-04 437.501655 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.116198 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.119937 5.21E-02 Q 19 F1g 4 19 F1u 6 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 2 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.123138 5.21E-02 Q 19 F1g 2 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 432.561253 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 9 29.689673 0.403032E-04 432.562565 5.10E-02										
437.501655 5.33E-02 R 18 F1g 1 19 F1u 4 26.720706 0.387847E-04 435.116198 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.119937 5.21E-02 Q 19 F1g 4 19 F1u 6 29.689673 0.403032E-04 435.121793 5.21E-02 Q 19 F1g 2 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.123138 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 432.561253 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 9 29.689673 0.403032E-04 432.562087 5.10E-02 P 20 F1g 5 19 F1u 10 32.814902 0.417397E-04 432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 3 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 <td>437.500488</td> <td>5.33E-02</td> <td>R 18</td> <td>F1g</td> <td>3</td> <td>19</td> <td>F1u</td> <td>2</td> <td>26.720706</td> <td>0.387847E-04</td>	437.500488	5.33E-02	R 18	F1g	3	19	F1u	2	26.720706	0.387847E-04
435.116198 5.21E-02 Q 19 F1g 5 19 F1u 5 29.689673 0.403032E-04 435.119937 5.21E-02 Q 19 F1g 4 19 F1u 6 29.689673 0.403032E-04 435.121798 5.21E-02 Q 19 F1g 2 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.123138 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 9 29.689673 0.403032E-04 432.561253 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 9 29.689673 0.403032E-04 432.562087 5.10E-02 P 20 F1g 5 19 F1u 10 32.814902 0.417397E-04 432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 3 19 F1u 12 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 2 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 </td <td></td>										
435.119937 5.21E-02 Q 19 F1g 4 19 F1u 6 29.689673 0.403032E-04 435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 3 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.121793 5.21E-02 Q 19 F1g 2 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 435.123138 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 9 29.689673 0.403032E-04 432.561253 5.10E-02 P 20 F1g 5 19 F1u 10 32.814902 0.417397E-04 432.562087 5.10E-02 P 20 F1g 3 19 F1u 11 32.814902 0.417397E-04 432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 3 19 F1u 12 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04										
435.121078 5.21E-02 Q 19 F1g 3 19 F1u 7 29.689673 0.403032E-04 435.121793 5.21E-02 Q 19 F1g 2 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 435.123138 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 9 29.689673 0.403032E-04 432.561253 5.10E-02 P 20 F1g 5 19 F1u 10 32.814902 0.417397E-04 432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 3 19 F1u 12 32.814902 0.417397E-04 432.564287 5.10E-02 P 20 F1g 2 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04										
435.121793 5.21E-02 Q 19 F1g 2 19 F1u 8 29.689673 0.403032E-04 435.123138 5.21E-02 Q 19 F1g 1 19 F1u 9 29.689673 0.403032E-04 432.561253 5.10E-02 P 20 F1g 5 19 F1u 10 32.814902 0.417397E-04 432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 3 19 F1u 11 32.814902 0.417397E-04 432.564287 5.10E-02 P 20 F1g 2 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04					3			7	29.689673	0.403032E-04
432.561253 5.10E-02 P 20 F1g 5 19 F1u 10 32.814902 0.417397E-04 432.562087 5.10E-02 P 20 F1g 4 19 F1u 11 32.814902 0.417397E-04 432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 3 19 F1u 12 32.814902 0.417397E-04 432.564287 5.10E-02 P 20 F1g 1 9 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04			Q 19		2					
432.562087 5.10E-02 P 20 F1g 4 19 F1u 11 32.814902 0.417397E-04 432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 3 19 F1u 12 32.814902 0.417397E-04 432.564287 5.10E-02 P 20 F1g 2 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04										
432.562565 5.10E-02 P 20 F1g 3 19 F1u 12 32.814902 0.417397E-04 432.564287 5.10E-02 P 20 F1g 2 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04										
432.564287 5.10E-02 P 20 F1g 2 19 F1u 13 32.814902 0.417397E-04 432.565564 5.10E-02 P 20 F1g 1 19 F1u 14 32.814902 0.417397E-04	432.562565				3					
				F1g						
	432.565564 437.499859	5.10E-02 5.33E-02	P 20 R 18	F1g F2g	1 5	19 19	Flu F2u	14 1	32.814902 26.720706	0.417397E-04 0.387847E-04

Références Bibliographiques

Références bibliographiques:

- [1] M. Terki-Hassaine, G. Pierre, H. Burger et H. Willner. . J. Mol. Spectrosc, Volume 185, Issue 1,p: 93–97 (1997)
 - https://doi.org/10.1006/jmsp.1997.7364
- [2] M. Rotger, V. Boudon, H. Burger et H. Willner chemical physics letters. Volume 339, Issues 1–2. P: 83-88. (2001). https://doi.org/10.1016/S0009-2614(01)00299-8
- [3] Ch.Wenger, V. Boudon, M. Rotger, and M. Sanzharov. *J. Mol. Spectrosc*, Volume 251. Issue 01-02. p :102–113, (2008). https://doi.org/10.1016/j.jms.2008.01.011
- [4] Ch. Wenger and J.-P. Champion, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Volume 59, Issues 3–5, p: 471-480 (1998). https://doi.org/10.1016/S0022-4073(97)00106-4
- [5] Ch. Wenger, V. Boudon, J.-P. Champion and G. Pierre, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Volume 66, Issue 1, p: 1-16 (2000) https://doi.org/10.1016/S0022-4073(99)00161-2
- [6] Ch. Wenger, W. Raballand, M. Rotger and V. Boudon, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Volume 95, Issue 4, p: 521-538 (2005). https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2004.11.012
- [7] Ch. Wenger, M. Rotger and V. Boudon, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Volume 74, Issue 5, p : 621-636 (2002). https://doi.org/10.1016/S0022-4073(01)00275-8
- [8] Ch. Wenger, M. Rotger and V. Boudon, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, Volume 93, Issue 4, p: 429-446 (2005) https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2004.08.039
- [9] Ch. Wenger, A. El Hilali and V. Boudon, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. Volume 111, Issue 9, p: 1305-1315, (2010). https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2010.01.012



Conclusion Générale

Conclusion générale:

Dans ce travail on s'est proposé de faire une analyse des fréquences rovibrationnelles de deux bandes d'une molécule octaédriques, en utilisant une forme tensorielle permettant d'écrire l'Hamiltonien moléculaire comme une combinaison linéaire des opérateurs rovibrationnels.

Cette étude présente un guide pour les étudiants de la spectroscopie moléculaire surtout pour ceux qui veulent étudier les spectres infrarouges des molécules toupies sphériques.

Nous avons donné tout d'abord un aperçu général sur la notion de symétrie des molécules octaédriques, puis le modèle théorique utilisé dans le développement de l'Hamiltonien écrit sous la forme tensorielle. Cette forme dépend de la structure géométrique de la molécule, et qui nous indique que les opérateurs rovibrationnels sont les mêmes pour toutes les molécules apprêtement au même groupe ponctuel.

Le calcul des spectres des deux bandes v_3 et v_4 de la molécule $^{80}SeF_6$ a été fait en utilisant les deux logiciels SPVIEW et XTDS.

Un jeu de 19 paramètres de l' Hamiltonien développé à l'ordre 4, ont permet de calculer le spectre de la bande v_3 de la molécule $^{80}SeF_6$, dont 6 relatifs au niveau de base GS et 13 relatifs au niveau v_3 . Ce spectre contient 11520 raies dans la fenêtre de fréquence 750 – 800 cm^{-1} , pour une valeur de Jmax = 95 et avec une déviation standard de $0,643.10^{-3}$ cm^{-1} .

L'ensemble de 14 paramètres utilisé dans le développement de l'Hamiltonien de la bande v_4 (dont 1 relatif au niveau de base GS et 13 relatifs au niveau v_4), nous ont permet de calculer le spectre de cette bande dans la fenêtre de fréquences $400 - 450 \ cm^{-1}$. Ce spectre contient 11281 raies pour une valeur de Jmax = 94 et avec une déviation standard de $0.295.10^{-3} \ cm^{-1}$.

Lors de cette étude, et en plus de la prédiction du spectre infrarouge des bandes analysées, nous nous sommes habitués à l'application des différents jobs de XTDS, qui nous seront très utiles dans les prochaines études.

Comme perspectives, nous pouvons dans l'avenir faire une analyse des intensités des transitions rovibrationnelles des deux bandes.

Résumé. Nous nous sommes proposé de donner un guide aux étudiants pour étudier les spectres infrarouges des molécules a toupies sphériques. On a présenté un nouveau modèle théorique d'écriture de l'Hamiltonien moléculaire sous une forme tensorielle, en se basant sur la notion de symétrie moléculaire. Le calcul et l'analyse de ces spectres se fait par l'utilisation de deux logiciels XTDS et SPVIEW. Comme exemples, on a calculé les spectres infrarouges de deux bandes isolée v_3 et v_4 de la molécule 80 SeF₆. L'analyse complète du spectre infrarouge de la bande v_3 , dans la région (750 – 800 cm^{-1}), se fait par l'utilisation de 19 paramètres, dont 6 relatifs au niveau de base GS et 13 relatifs au niveau v_3 , pour Jmax = 95, avec un EQM = 0,643. 10^{-3} cm^{-1} . Le calcul du spectre infrarouge de la bande v_4 , dans la région (400 – 450 cm^{-1}), nécessite l'utilisation de 14 paramètres, dont 1 est relatif au niveau de base GS et 13 sont relatifs au niveau v_4 , pour Jmax = 94, avec un EQM = 0,295. 10^{-3} cm^{-1} .

Mots clé: ⁸⁰SeF₆, Spectre infrarouge à haute résolution, formalisme octaédrique tensoriel, Analyse des raies rovibrationnelles, XTDS et SPVIEW.

Abstract. We have proposed to give a guide to students to study the infrared spectra of spherical spinning top molecules. We presented a new theoretical model for writing the molecular Hamiltonian in a tensorial form, based on the notion of molecular symmetry. The calculation and analysis of these spectra is done by the use of two software XTDS and SPVIEW. As examples, we calculated the infrared spectra of two isolated bands v_3 and v_4 of the molecule 80 SeF₆. The complete analysis of the infrared spectrum of the v_3 band, in the region $(750 - 800 \ cm^{-1})$, is done by the use of 19 parameters, including 6 relating to the basic level GS and 13 relative at level v_3 , for Jmax = 95, with a EQM = $0.643.10^{-3} \ cm^{-1}$. The computation of the infrared spectrum of the v_4 band, in the region $(400 - 450 \ cm^{-1})$, requires the use of 14 parameters, of which 1 is relative to the basic level GS and 13 are relative at level v_4 , for Jmax = 94, with a EQM = $0.295.10^{-3} \ cm^{-1}$.

Keywords: ⁸⁰SeF₆, high-resolution infrared spectra, octahedral tensorial formalism, rovibrational line position analysis, XTDS and SPVIEW.

ملخص. لقد اقترحنا تقديم دليل للطلاب لدراسة أطياف الأشعة تحت الحمراء للجزيئات الكروية. قدمنا نموذجًا نظريًا جديدًا لكتابة معامل XTDS هاميلتون الجزيئي في شكل موتر ، بناءً على فكرة التناظر الجزيئي. يتم حساب وتحليل هذه الأطياف باستخدام برنامجين XTDS هاميلتون الجزيء v_3 في المنطقة v_3 على سبيل المثال ، قمنا بحساب أطياف الأشعة تحت الحمراء لشريطين معزولين v_3 و v_3 باستخدام 19 معامل هاميلتون ، بما في التحليل الكامل لمطيف الأشعة تحت الحمراء لنطاق v_3 و 13 معاملات عند المستوى v_3 ، لـ v_3 و 14 معاملات عند المستوى الأساسي v_3 و 15 معاملات عند المستوى v_3 ، لـ v_3 و 16 معاملات عند المستوى الأساسي v_3 و 18 معاملات عند المستوى v_3 ، لـ v_3 و 18 معاملات عند المستوى v_3 ، استخدام 19 ، استخدام 19 و 19 منها يتعلق بالمستوى الأساسي v_3 و 18 تتعلق بالمستوى الأساسي v_3 و 18 تتعلق بالمستوى الأساسي v_3 و 18 تتعلق بالمستوى الأساسي v_4 و 18 تتعلق بالمستوى v_4 المستوى الأساسي v_4 و 18 تتعلق بالمستوى الأساسي v_4 و 18 تتعلق بالمستوى الأساسي v_4 و 18 تتعلق بالمستوى v_4 المستوى الأساسي v_4 و 18 تتعلق بالمستوى v_4 المستوى الأساسي و 18 تتعلق بالمستوى v_4 و 18 تتعلق بالمستوى الأساسي و 18 تتعلق بالمستوى و 18 تت

الكلمات المفتاحية: 80SeF₆ ، الطيف بالأشعة تحت الحمراء عالي الدقة ، شكلية ثماني السطوح ، تحليل خط الاهتزازات ، XTDS و SPVIEW.