

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE & POPULAIRE  
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR & DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ DJILLALI LIABES  
FACULTÉ DES SCIENCES  
SIDI BEL-ABBÈS

BP 89 SBA 22000 –ALGERIE–

TEL/FAX 048-54-43-44

# ***THESE***

*Présentée par*

**KAAROUR Abdelkrim**

*Pour obtenir le Diplôme de Doctorat*

*Spécialité : Sciences Physiques.*

*Option : Spectroscopie Moléculaire.*

*Intitulé*

**Analyse globale des intensités rovibrationnelles de  
la Pentade et de l'Octade de la molécule  $^{12}\text{CD}_4$**

*Thèse soutenue le 19 Février 2015*

*Devant le jury composé de :*

**Président :**

**KADOUN Abd-Ed-Daïm**

**Prof**

**UDL de Sidi Bel-Abbès.**

**Directeur de thèse :**

**OUARDI Okkacha**

**Prof**

**Univ. Dr. T.Moulay de Saida.**

**Examineurs :**

**BASSOU Ghaouti**

**Prof**

**UDL de Sidi Bel-Abbès.**

**ABID Hamza**

**Prof**

**UDL de Sidi Bel-Abbès.**

**BOUDALI Abdelkader**

**MCA**

**Univ. Dr. T.Moulay de Saida.**

**ELKEURTI Mohamed**

**MCA**

**Univ. Dr. T.Moulay de Saida.**

# Sommaire

INTRODUCTION.....	4
-------------------	---

## CHAPITRE I

### THEORIE

I Hamiltonien de vibration –rotation d’une molécule .....	8
I.1 Hamiltonien d’une molécule isolé .....	8
I.1.1 Approximation de Born-Oppenheimer.....	8
I.1.2 Propriété générale de L'Hamiltonien.....	10
I.1.3 L'énergie à l'approximation zéro.....	10
I.1.3.1 Hamiltonien vibrationnel.....	11
I.1.3.2 Hamiltonien rotationnel.....	12
I.1.4 Énergie de rotation vibration aux ordres supérieurs.....	12
I.2 L’Hamiltonien rovibrationnel des molécules XY <sub>4</sub> .....	14
I.2.1 Opérateurs rotationnels.....	17
I.2.2 Opérateurs vibrationnels.....	17
I.2.3 Fonctions de bases.....	21
I.2.4 Éléments matriciels .....	22
II Moment dipolaire des molécules XY <sub>4</sub> .....	22
II.1 Moment dipolaire dans le repère moléculaire.....	23
II.2 Moment dipolaire dans le repère du laboratoire .....	23
II.3 Moment dipolaire effectif.....	24

## CHAPITRE II

### METHODES D’ANALYSES ET PROGRAMMES UTILISES

I Méthodes numériques utilisées dans les analyses des données expérimentales.....	27
I.1 Ajustement des paramètres par la méthode	
des moindres carrées itératives.....	27
I.2 Détermination des paramètres du moment dipolaire.....	30
I.2.1 Linéarisation du problème.....	30
I.2.2 Estimation des erreurs.....	32
I.2.3 Transmission des erreurs.....	34
II Programmes utilisés.....	35
II.1 Installation de XTDS et explication des instructions .....	35
II.2 Programmes utilisés .....	40
II.2.1 Programme de codage des opérateurs rovibrationnel de	
L'Hamiltonien effectif.....	40
II.2.2 Programme de codage des fonctions de base.....	41
II.2.3 Programme de calcul et stockage des éléments matriciels	
non nuls de l'Hamiltonien rovibrationnel effectif .....	42
II.2.4 Programmes calculant les valeurs propres et	
les vecteurs propres de l'Hamiltonien effectif.....	43
II.2.5 Programme de calcul et stockage des éléments matriciels	
non nuls du tenseur moment dipolaire.....	43
II.2.6 Programme de calcul des éléments matriciels du moment	
de transition dans la base propre.....	44
II.2.7 Programme de calcul du spectre (fréquences	
et moment de transition) .....	45
II.2.8 Programme calculant le spectre de transition.....	46
II.3 Programme d'attribution .....	46

### **CHAPITRE III**

### **ANALYSE DES RAIES DES TRANSITIONS: DIADE ( $\nu_2, \nu_4$ ) –GS**

I Introduction.....	50
---------------------	----

II Données expérimentales.....	51
III Analyse de $(\nu_2, \nu_4)$ -GS.....	53

**CHAPITRE IV                      ANALYSE DES RAIES DES TRANSITIONS DE LA PENTADE**

I Introduction.....	68
II Données expérimentales.....	68
III Théorie.....	70
IV Analyse des positions de raies .....	72
V Analyse des intensités de la Pentade .....	83

**CHAPITRE V                      PREDICTION DE L'OCTADE**

I Introduction.....	121
II Modèle tensoriel de l'Hamiltonien propre à l'Octade.....	121

<b>CONCLUSION.....</b>	<b>129</b>
------------------------	------------

<b>BIBLIOGRAPHIE.....</b>	<b>131</b>
---------------------------	------------

# Introduction

Pour comprendre les propriétés d'un système physique il est essentiel de connaître ses états propres. De ce point de vue, la spectroscopie constitue un instrument expérimental irremplaçable, car elle fournit :

- Les énergies associées aux transitions entre les différents états quantiques du système.
- L'information sur la possibilité d'absorption d'une radiation électromagnétique, et la transition entre différents niveaux rovibrationnels du système physique.
- Les intensités associées à ces transitions.

En effet, la spectroscopie moléculaire trouve ses applications dans plusieurs domaines (Spectroscopie moléculaire, Physique des atmosphères terrestres et planétaires, Problèmes *physico-chimiques*, etc.....).

Parmi les systèmes moléculaires qui occupent une place importante dans le domaine de la recherche, les molécules tétraédriques  $XY_4$ , et dans ce travail on s'est intéressé à la molécule  $^{12}CD_4$  et plus précisément à son spectre d'absorption infrarouge dans la région  $900-3500\text{ cm}^{-1}$ .

À cause de l'existence des vibrations triplement dégénérées pour ce type de molécules, on utilise des méthodes particulières et spéciales, notamment des méthodes tensorielles.

Les travaux les plus importants marquant les étapes de calcul des niveaux d'énergie et des intensités de transitions pour ce type de molécules sont :

- H.A.Jahn et W.H.Childs [1] ont résolu le problème de couplage des moments angulaires vibrationnels et rotationnels, et ont ainsi déterminés jusqu'à la valeur  $R=10$  du nombre quantique lié au moment angulaire total, les fonctions de base nécessaires au calcul du spectre, et ont fait une première étude sur la bande  $\nu_4$  du méthane  $CH_4$ .
- W.H.Saffer, H.H.Neilsen et L.H.Thomas [2] ont donné une expression complète de l'Hamiltonien, sans négliger dans leurs calculs les termes que H.A.Jahn et W.H.Childs n'ont pas pris en considération. Malheureusement ce formalisme conduit à des équations séculaires très difficiles à résoudre.

-Les progrès effectués dans l'utilisation de la théorie du groupe en spectroscopie atomique et en physique nucléaire, ont conduit J.D.Louck à utiliser des tenseurs irréductibles du groupe de rotations pour écrire l'Hamiltonien sous une forme facilitant le calcul des éléments matriciels.

- En utilisant ces résultats, K.T.Hecht [3] a calculé la matrice Hamiltonienne dans le cas où une vibration triplement dégénérée est excitée. Après avoir poursuivi, et jusqu'à  $R=13$ , le calcul des fonctions d'ondes déjà entamé par H.A.Jahn, il a résolu les équations séculaires pour la bande  $\nu_3$  du méthane, et a énoncé les règles de sélection en infrarouge.

- Moret Bailly [4], et grâce à sa théorie des tenseurs sphériques adaptée à la symétrie cubique, développe un Hamiltonien transformé formel et quasi diagonal au  $4^{ième}$  ordre du développement et donne l'expression des fréquences de transitions des bandes fondamentales  $\nu_1$ ,  $\nu_3$ , et  $\nu_4$ . Cette formulation, très efficace lorsque les interactions entre niveaux

vibrationnels ne sont pas importantes, elle s'avère mal adaptée dans le cas où les interactions ne doivent pas être négligées. Or, à quelques exceptions près, les formalismes précédents, et spécialement ceux qui dérivent de la théorie de Moret Bailly, excluent a priori la possibilité d'introduire dans l'Hamiltonien des termes d'interactions entre niveaux vibrationnels. Ces interactions sont prises en compte par l'utilisation de transformations de contact, remettant ainsi en cause la convergence du développement de l'Hamiltonien transformé. Ainsi, et dans ce sens, plusieurs travaux ont été développés :

- l'Hamiltonien effectif pour le niveau de base a été considéré par Dorney et Watson [5], Ozier [6], Michelot, Moret Bailly, Fox [7] et finalement Hilico, Champion et Pierre [8] développant des formalismes s'appliquant aux états excités.

- Plusieurs travaux ont été consacrés aux fondamentaux triplements dégénérés. Pascaud [9] a précisé les conditions que doivent satisfaire les opérateurs tensoriels de l'Hamiltonien de Moret Bailly. Les bandes  $v_3$  et  $v_4$  ont été étudiés successivement par Husson et Dang Nhu [10], Susskind, Michelot, Moret Bailly et Fox [7] et Robiette, Gray et Briss [11].

- Ainsi, et sur la base de tout ce qui a été fait avant, J.P.Champion [12] propose un formalisme (formalisme tensoriel tétraédrique) permettant d'effectuer un développement complet, et à tout ordre de l'Hamiltonien non transformé et incluant toutes les interactions possibles. Ce développement comprend tous les opérateurs satisfaisants à la condition d'invariance dans le renversement du temps : c'est ce modèle, qui sera utilisé dans notre travail.

- Ainsi, et en s'inspirant du modèle de l'Hamiltonien développé par Champion, Loëte [13] propose un développement formel du moment dipolaire et de la polarisabilité des molécules tétraédrique. C'est le modèle qui sera utilisé au cours de notre travail pour l'analyse et le calcul des intensités rovibrationnelles.

Dans ce travail, on se propose d'étudier les raies de transitions rovibrationnelles de la molécule  $^{12}\text{CD}_4$  entre :

La Diade ( $v_2, v_4$ ) et le niveau de base GS

La Pentade ( $2v_4, v_2+v_4, v_1, 2v_2, v_3$ ). et le niveau de base GS

L'Octade ( $3v_4, v_2+2v_4, v_1+v_4, v_3+v_4, 2v_2+v_4, v_1+v_2, v_2+v_3, 3v_2$ ) et le niveau de base GS

Dans le premier chapitre de ce travail nous allons expliciter toutes les formules permettant de construire l'Hamiltonien ainsi que l'opérateur moment dipolaire des molécules  $\text{XY}_4$ .

Dans le deuxième chapitre, nous donnons les méthodes d'analyses utilisés par les logiciels XTds pour déterminer les paramètres, qu'ils soient de l'Hamiltonien ou du Moment dipolaire. Nous donnons aussi dans ce chapitre, la façon dont XTds et Spview fonctionnent.

Les trois derniers chapitres seront consacrés aux différentes analyses que nous avons faites à savoir :

-L'analyse des positions de raie de la molécule  $^{12}\text{CD}_4$  dans la fenêtre 900–1220  $\text{cm}^{-1}$ , notons que cette fenêtre du spectre contient essentiellement des raies de transitions entre la Diade ( $\nu_2, \nu_4$ ) et le niveau de base GS.

- L'analyse des positions de raie et des intensités de la molécule  $^{12}\text{CD}_4$  dans la fenêtre 1850–2400  $\text{cm}^{-1}$ . Cette fenêtre du spectre contient essentiellement des raies de transitions entre la Pentade ( $2\nu_4, \nu_2+\nu_4, \nu_1, 2\nu_2, \nu_3$ ) et le niveau de base GS.

-n'ayant pas de spectre expérimental sur l'Octade ( $3\nu_4, \nu_2+2\nu_4, \nu_1+\nu_4, \nu_3+\nu_4, 2\nu_2+\nu_4, \nu_1+\nu_2, \nu_2+\nu_3, 3\nu_2$ ) qui s'étend de 3000  $\text{cm}^{-1}$  à 3500  $\text{cm}^{-1}$ , nous allons montrer dans cette partie, comment il est possible de prédire le spectre dans cette région en se basant sur les résultats obtenus sur la Pentade.

Comme nous allons le voir, l'étude détaillée des intensités dépend, via les vecteurs propres, de celle des niveaux d'énergie et, en pratique lui succède. De ce fait, l'analyse raie par raie des intensités suppose une analyse préalable très fine des positions de raies. La qualité des résultats obtenus dans une analyse des intensités dépend en grande partie de l'analyse des positions de raies. C'est pour cela, et puisque aucun travail antérieur sur la molécule  $^{12}\text{CD}_4$  dans les régions qu'on s'est proposé d'étudier, n'a été fait, nous avons analysé finement les positions, avant de faire tout calcul sur les intensités.

# *CHAPITRE I*

## *THEORIE*



# I Hamiltonien de vibration –rotation d'une molécule

## I.1 Hamiltonien d'une molécule isolé

L'Hamiltonien d'une molécule isolé constituée de N noyaux et n électrons s'écrit

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{nn} + V_{en} \quad (I.1)$$

où les différents termes représentent respectivement :

$T_e$  : L'énergie cinétique des électrons

$T_n$  : L'énergie cinétique des noyaux

$V_{ee}$  : L'énergie coulombienne d'interaction électron-électron

$V_{nn}$  : L'énergie coulombienne d'interaction noyaux-noyaux

$V_{en}$  : L'énergie coulombienne d'interaction électron-noyaux

Les niveaux d'énergies E (de rotation-vibration) d'une molécule sont solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$H\Psi = E\Psi \quad (I.2)$$

Comme le nombre des particules entrant en interaction est très grand, on ne pourra jamais résoudre l'équation (I.2) et donc pour surmonter ce problème on fait appel à des méthodes d'approximations.

### I.1.1 Approximation de Born-Oppenheimer

Cette approximation nous autorise à traiter indépendamment les mouvements des électrons et ceux des noyaux.

L'approximation de Born Oppenheimer [14], se base sur le fait que les électrons sont beaucoup plus légers et se déplacent plus rapidement que les noyaux.

L'Hamiltonien relatif au mouvement des noyaux se limite aux termes suivants:

$$H_n = T_n + V_n \quad (I.3)$$

L'énergie correspondante s'écrit :

$$E_n = E_t + E_s + E_{rv} + E_i \quad (I.4)$$

dont les différents termes représentent respectivement

$E_t$  : l'énergie translationnelle qui n'est pas prise en considération, car elle introduit simplement un terme additif pris comme origine des énergies.

$E_s$  : l'énergie due au spin nucléaire

$E_r$  : l'énergie de rotation -vibration

$E_i$  : L'énergie d'interaction entre les termes précédents.

Les contributions énergétiques dues au spin ( $E_s$ ) et aux interactions ( $E_i$ ) sont généralement négligeables devant l'énergie de rotation –vibration

Pour calculer les niveaux d'énergies de rotation vibration on résout l'équation de Schrödinger

$$H_{rv}\Psi = E_{rv} \Psi \quad (I.5)$$

où Les fonctions d'ondes s'écrivent comme le produit de trois fonctions

$$\Psi = \Psi_t \Psi_s \Psi_{rv} \quad (I.6)$$

où  $\Psi_t$ ,  $\Psi_s$  et  $\Psi_{rv}$  se rapportent respectivement à la translation, au spin nucléaire et à la rotation -vibration.

Dans l'approximation de Born -Oppenheimer la fonction  $\Psi_t$  est totalement découplée et la fonction  $\Psi_s$  intervient seulement dans la dégénérescence de la fonction d'onde totale.

Après avoir éliminé l'énergie de translation de la molécule, L'Hamiltonien de vibration–rotation  $H_{rv}$  de Darling–Denison [15] simplifié par Watson [16] s'écrit :

$$H_{rv} = \sum_{\alpha\beta} (J_\alpha - P_\alpha)\mu_{\alpha\beta}(J_\beta - P_\beta) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} P_k^2 - \frac{h^2}{8} \sum_{\alpha} \mu_{\alpha\alpha} + V \quad (I.7)$$

Avec

$J_\alpha$  : Les composantes du moment angulaire total (selon les axes moléculaires)

$\mu_{\alpha\beta}$ : Les composantes de l'inverse du tenseur d'inertie effectif

$P_\alpha$  sont les composantes du moment angulaire vibrationnel (selon les axes moléculaires) et qui

s'écrivent :

$$P_\alpha = \sum_{k,l} \zeta_{k,l}^\alpha Q_k P_l \quad (I.8)$$

$\alpha$  et  $\beta$  désignent les axes moléculaires :  $\alpha = x, y$  ou  $z$

$k$  et  $l$  désignent les  $3N-6$  coordonnées de vibrations de la molécule

$Q_k$  : Coordonnées normales

$P_k$  : Moment conjugué de la coordonnée normale  $Q_k$

$$P_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_k} \quad (I.9)$$

$\zeta_{kl}^\alpha$  : Constante de Coriolis

$V$  : L'énergie potentielle ne dépendant que des coordonnées normales des noyaux.

En se plaçant dans l'approximation des petites oscillations, nous pouvons développer l'Hamiltonien de rotation- vibration  $H_{rv}$  en une forme convergente en fonction des coordonnées normales, des moments conjugués et des composantes du moment angulaire total.

$$H_{rv} = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \dots \quad (I.10)$$

où le terme  $H_0$  est la somme de l'Hamiltonien associé au rotateur rigide et à la somme des Hamiltoniens relatifs aux oscillateurs harmoniques indépendants. Les termes  $H_1, H_2 \dots$  sont considérés comme des termes de perturbations traduisant l'interaction entre la rotation et la vibration et l'anharmonicité du potentiel.

### I.1.2 Propriété générale de L'Hamiltonien

L'Hamiltonien de vibration – rotation doit être

Hermétique

Invariant dans un renversement du temps

Totalement symétrique dans le groupe de recouvrement de la molécule

### I.1.3 L'énergie à l'approximation zéro

À l'approximation zéro le mouvement de rotation est indépendant à celui de la vibration, on peut donc écrire L'Hamiltonien de rotation vibration de la manière suivante :

$$H_0 = H_v + H_r \quad (I. 11)$$

$H_v$  : l' Hamiltonien de vibration

$H_r$  : L' Hamiltonien de rotation

### I.1.3.1 Hamiltonien vibrationnel

L' Hamiltonien de vibration est une somme d' Hamiltonien relatifs à des oscillateurs harmoniques indépendants

$$H_v = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\lambda_s} \left( \frac{P_{s\sigma}^2}{\hbar^2} + q_{s\sigma}^2 \right) \quad (I. 12)$$

où :

$q_{s\sigma}$  et  $P_{s\sigma}$  sont respectivement la coordonnée normale et son moment conjugué.  
 $s$  : désigne le mode normal de vibration.

$\sigma$  : différencie les composantes de cette vibration dans le cas où elle est dégénérée.

$\lambda_s$  : Coefficient lié aux fréquences propres de vibration des oscillateurs.

L'énergie de vibration d'une telle molécule s'écrit donc :

$$E_v = \sum_s \omega \left( v_s + \frac{g_s}{2} \right) \quad (I. 13)$$

avec :

$\omega_s$  : Le nombre d'onde de l'oscillateur  $s$

$v_s$  : Le nombre quantique principal de vibration un entier  $\geq 0$

$g_s$  : Les dimensions (dégénérescence) de l'oscillateur  $s$

La fonction d'onde vibrationnelle  $\Psi_v$  est le produit des fonctions propres des différents oscillateurs harmoniques  $\Psi_{v_s}, \Psi_{v_s, l_s}, \Psi_{v_s, l_s, m_s}$

où,

$\Psi_{v_s}$  : sont les fonctions d'onde de l'oscillateur non dégénérée ne dépendent que de  $v_s$

$\Psi_{v_s, l_s}$  : sont les fonctions d'onde de l'oscillateur doublement dégénéré

$\Psi_{v_s, l_s, m_s}$  : sont les fonctions d'onde de l'oscillateur triplement dégénérée

### I.1.3.2 Hamiltonien rotationnel

L'Hamiltonien de rotation  $H_r$  est celui du rotateur rigide et il s'écrit donc :

$$H_r = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \frac{J_{\alpha\alpha}^2}{I_{\alpha\alpha}^e} \quad (\text{I. 14})$$

$J_{\alpha}$  : représente les composantes du moment angulaire de rotation (totale)

$I_{\alpha\alpha}^e$  : Les moments principaux d'inertie de la molécule à l'équilibre

L'énergie rotationnelle pour une molécule toupie sphérique

$$E_r = B_e J(J + 1) \quad (\text{I. 15})$$

où  $B_e = \frac{h}{8\pi^2 c I_{\alpha\alpha}^e}$  est la constante d'inertie de la molécule à l'équilibre et  $J$  désigne le nombre quantique principal de rotation associé à la longueur du moment angulaire total.

Les états quantiques de rotation sont décrits par les fonctions propres d'un rotateur rigide qui sont obtenues à partir des harmoniques sphériques de Wigner [14].

$$\Psi_{k,m}^J = \left| \frac{2J + 1}{8\pi} \right| D_{k,m}^J(\omega) \quad (\text{I. 16})$$

$\omega$ : désigne l'ensemble des angles de l'Euler

$D_{k,m}^J$  sont les fonctions harmoniques de Wigner

Notons que dans cette approximation les fonctions propres de rotation – vibration s'écrivent en fonction des fonctions relatives à chacun des oscillateurs  $\Psi_v$  et des fonctions du rotateur rigide  $\Psi_r$  comme suit :

$$\Psi_0 = \Psi_r \Psi_v \quad (\text{I. 17})$$

### I.1.4 Énergie de rotation vibration aux ordres supérieurs

Aux ordres supérieurs l'Hamiltonien représentant l'énergie de rotation vibration s'écrit :

$$H_{vr} = H_0 + \hat{H}_{vr} \quad (\text{I. 18})$$

Où le terme  $\hat{H}_{vr}$  est un terme de perturbation. En identifiant (I. 18) avec l'équation (I. 10) on trouve :

$$\hat{H}_{vr} = \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \dots \quad (\text{I. 19})$$

et pour simplifier le problème, on effectue une série de transformations de contact qui rendent l'Hamiltonien diagonal par rapport aux nombres quantiques vibrationnels principaux  $v_s$ , et ceci en utilisant la méthode de Van Vleck [17]

Cette série de transformations de contact est faite de la façon décrite ci-dessous.

L'Hamiltonien transformé  $\tilde{H}$  est obtenu en faisant subir à  $H$  une première transformation de contact  $T_1$  :

$$\tilde{H} = T_1 H T_1^{-1} \quad (\text{I. 20})$$

$T_1$  : est un opérateur unitaire choisi tel que :

$$T_1 = \exp(i\lambda S_1) \quad (\text{I. 21})$$

où  $S_1$  est un opérateur hermétique

Les opérateurs  $H$ ,  $\tilde{H}$ ,  $T_1$  et  $T_1^{-1}$  sont développés sous la forme :

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \dots \\ \tilde{H} &= \tilde{H}_0 + \lambda \tilde{H}_1 + \lambda^2 \tilde{H}_2 + \dots \\ T_1 &= 1 + i\lambda S_1 - \frac{1}{2}\lambda^2 S_1^2 + \dots \\ T_1^{-1} &= 1 - i\lambda S_1 + \frac{1}{2}\lambda^2 S_1^2 - \dots \end{aligned} \quad (\text{I. 22})$$

En remplaçant dans (I.20)  $H$ ,  $\tilde{H}$ ,  $T_1$  et  $T_1^{-1}$  par leurs développements respectifs et en identifiant les termes de même ordre de grandeur, il vient :

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 &= H_0 \\ \tilde{H}_1 &= H_1 + i[S_1, H_0] \\ \tilde{H}_2 &= H_2 + i[S_1, H_1] - \frac{1}{2}[S_1, [S_1, H_0]] \end{aligned} \quad (\text{I. 23})$$

Dans le cas où les interactions vibrationnelles sont faibles (**bandes isolées**),  $S_1$  est choisie de manière à ce que  $\tilde{H}_1$  soit complètement diagonal vis à vis des nombres vibrationnelle  $v_s$ .

$\tilde{H}_2, \tilde{H}_3, \dots$  étant non diagonaux, on est généralement conduit à appliquer une seconde transformation de contact  $T_2$  qui obéit au même critère que  $T_1$

$$T_2 = \exp(i\lambda^2 S_2) \quad (I.24)$$

$S_2$  est choisie suivant les mêmes critères que  $S_1$ .

On peut continuer jusqu'à l'ordre souhaité, et avec cette technique, le calcul de l'élément matriciel  $\langle \psi | \tilde{H} | \psi' \rangle$  de  $\tilde{H}$  revient au calcul de l'élément matriciel de l'Hamiltonien d'origine  $H$  entre les états transformés puisque  $\tilde{\Psi} = T^{-1}\Psi$ . En effet :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \tilde{H} | \Psi' \rangle &= \langle \Psi | THT^{-1} | \Psi' \rangle \\ &= \langle (T^{-1}\Psi) | H | (T^{-1}\Psi') \rangle \\ &= \langle \tilde{\Psi} | H | \tilde{\Psi}' \rangle \end{aligned} \quad (I.25)$$

Suite à ces transformations  $H$  reste non diagonal vis-à-vis des nombres quantiques secondaires  $k, l_v, l_s, m_s$ , pour simplifier le processus de diagonalisation, des **méthodes tensorielles** ont été développées.

## I.2. L'Hamiltonien rovibrationnel des molécules $XY_4$

Pour déterminer la symétrie des vibrations fondamentales et ultérieurement leurs activités en **Infrarouge** il faut d'abord chercher le caractère de la représentation réductible vibrationnelle  $\Gamma_{\text{vib}}$  établie sur la base des  $3n-6$  coordonnées décrivant tous les mouvements de vibrations de la molécule.

Comme toutes les molécules tétraédriques  $XY_4$ ,  $^{12}\text{CD}_4$  possède quatre modes normaux de vibration qui sont déterminés de la façon suivante :

Une molécule  $XY_4$  possède 5 noyaux, donc  $3n-6=9$  coordonnées normales de vibrations. La molécule  $^{12}\text{CD}_4$  a 24 éléments de symétrie groupés en 5 classes conjuguées.

Toutes les symétries de  $T_d$  laissent le noyau de carbone invariant mais déplacent un nombre  $n_R$  variable de noyaux D de leur position d'équilibre.

Les 5 classes de  $T_d$  sont : E, pour lequel  $n_R = 5$  (tous les noyaux restent invariants). Les rotations  $C_3$  autour des liaisons C-D qui ne laissent qu'un noyau D en sa position initiale (sans compter le noyau du carbone C) et pour lesquelles  $n_R = 2$ . Les rotations  $C_2$  autour des axes d'ordre 2 qui déplacent tous les noyaux D et pour lesquelles  $n_R = 1$ . Les rotations impropres  $S_4$  autour des mêmes axes pour lesquelles  $n_R = 1$ . Les symétries  $\sigma_d$  par rapport aux plans contenant deux liaisons C-D qui laissent deux noyaux D invariants et pour lesquelles  $n_R = 3$ .

Les caractères  $\chi_{\text{vib}}$  pour les différentes symétries du groupe  $T_d$  sont donnés dans le **tableau I.1** suivant :

**Tableau I.1** Caractères  $\chi_{\text{vib}}$  pour les symétries du groupe  $T_d$

	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$
$n_R$ : nombres d'atomes non déplacées par l'opération $R$	5	2	1	1	3
$\chi_R$ : caractère de la symétrie $R$	3	3	-1	-1	1
$\chi_{\text{vib}}$ : caractères de la représentation $\Gamma_{\text{vib}}$ de $T_d$	9	0	0	-1	3

À l'aide de la table de caractères du groupe  $T_d$  on décompose la représentation  $\Gamma_{\text{vib}}$  en quatre représentations irréductibles [18]

$$\Gamma_{\text{vib}} = A_1 \oplus E \oplus 2F_2 \quad (I.26)$$

Les neuf coordonnés de vibrations correspondent à quatre fréquences fondamentales différentes : une fréquence non dégénéré de type  $A_1$ , une fréquence doublement dégénérée de type E et deux fréquences trois fois dégénérée avec le même type de symétrie  $F_2$ . Ces quatre fréquences sont :

$\nu_1 (A_1)$  (modes d'étirement, oscillateur non dégénéré)

$\nu_2 (E)$  (modes de flexion, oscillateur doublement dégénéré)

$\nu_3 (F_2)$  (modes d'étirement, oscillateur triplement dégénéré)

$\nu_4 (F_2)$  (modes de flexion, oscillateur triplement dégénéré)

Les fréquences fondamentales sont approximativement liées entre elles par :

$$\nu_1(A_1) \approx \nu_3(F_2) \approx 2\nu_2(A_1) \approx 2\nu_4(F_2) \quad (I.27)$$

Ce qui conduit à une structure de poliades bien définie, avec chaque poliade  $P_n$  défini par le nombre entier n en tant que :

$$n = 2(\nu_1 + \nu_3) + \nu_2 + \nu_4 \quad (I.28)$$

Où le  $\nu_i = 0, 1, 2, \dots$  ( $i = 1$  à  $4$ ) sont les nombres quantiques vibrationnels.  $P_0$  est l'état fondamental (GS). Chaque ensemble  $(\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4)$  définit un niveau de vibration. En raison de la dégénérescence de trois des vibrations normales, chaque niveau vibrationnel contient un



certain nombre de sous-niveaux vibrationnels, dont les symétries sont calculées au moyen des méthodes de la théorie des groupes [18].

Ainsi :

Le niveau de base où tous les  $v_i$  sont nuls, est noté GS (Ground State) ou  $P_0$

La Diade ( $v_2, v_4$ ) sera notée  $P_1$

La Pentade ( $2v_4, v_2+v_4, v_1, 2v_2, v_3$ ) sera notée  $P_2$

L'Octade ( $3v_4, v_2+2v_4, v_1+v_4, v_3+v_4, 2v_2+v_4, v_1+v_2, v_2+v_3, 3v_2$ ) sera notée  $P_3$

Pour construire l'Hamiltonien rovibrationnel des molécules tétraédriques, on fait intervenir le groupe complet des rotations  $O(3)$  et les coefficients de couplages de la chaîne de groupe  $O(3) \supset T_d$  [12].

La manière dont ces opérateurs sont construits est indiquée dans les deux paragraphes suivants. :

L'Hamiltonien rovibrationnel complet s'exprime comme une combinaison linéaire des opérateurs rovibrationnels [19].

$$H = \sum_{\text{tous les indices}} t_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(k,n\Gamma)\Gamma_1\Gamma_2} \otimes T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(k,n\Gamma)\Gamma_1\Gamma_2} \quad (I. 29)$$

Cet opérateur  $T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(k,n\Gamma)\Gamma_1\Gamma_2}$ , obtenu par couplage d'opérateurs rotationnels  $R$  et d'opérateurs vibrationnels  $V$ , s'écrit:

$$T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(k,n\Gamma)\Gamma_1\Gamma_2} = \left( R^{\Omega(k,n\Gamma)} \otimes \varepsilon V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Gamma_1\Gamma_2(\Gamma)} \right)^{A_1} \quad (I \cdot 30)$$

où : les  $t_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(k,n\Gamma)\Gamma_1\Gamma_2}$  sont des paramètres rovibrationnels de l'Hamiltonien dépendant des constantes moléculaire (masses, distance, angles, moment d'inerte....) et  $T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(k,n\Gamma)\Gamma_1\Gamma_2}$  sont les opérateurs rovibrationnels.

Ces opérations sont totalement symétriques dans le groupe  $T_d$ , donc de symétrie  $A_1$ . Ils sont aussi hermétique, et invariant dans un renversement du temps. Le degré de ces opérateurs par rapport aux variables  $Q_{sr}, p_{sr}, p_\alpha$  et

$$d = \Omega + \sum(n_s + m_s) \quad (I \cdot 31)$$

La manière dont ces opérateurs sont construits est indiquée dans les deux paragraphes suivants

## I.2.1 Opérateurs Rotationnels

Les opérateurs rotationnels [4] sont construits à partir de l'opérateur tensoriel élémentaire  $A^{(1g)}$  de composantes  $\frac{2P_\alpha}{\hbar}$  ( $\alpha = x, y, z$ ). Ils s'expriment, sous forme tensorielle dans le groupe des rotations  $\mathbf{O}(3)$  (où les  $P_\alpha$  désignent les composantes du moment angulaire de la molécule), de la façon suivante :

$$R^{\Omega(K_g, n\Gamma)} = \left[ \underbrace{A^{(1)} \otimes A^{(1)} \otimes A^{(1)} \otimes \dots \otimes A^{(1)}}_{\Omega \text{ opérateurs}} \right]^{(K_g, n\Gamma)} \quad (\text{I. 32})$$

$g$  qui indique la parité des opérateurs rotationnels dans le groupe  $\mathbf{O}(3)$ , sera omis par la suite.

$R^{\Omega(K, n\Gamma)}$  est un polynôme homogène de degré  $\Omega$  par rapport aux composantes  $P_\alpha$ , (il représente un tenseur sphérique irréductible de rang  $K$ ).

Le rang tensoriel dans  $O(3)$  prend ainsi les valeurs :  $K = \Omega, \Omega - 2, \dots \dots 1$  ou  $0$

$\Gamma$  désigne la symétrie des représentations.

$n$  distingue les représentations de même symétrie.

## I.2.2 Opérateurs Vibrationnels

Les opérateurs vibrationnels sont construits en utilisant un schéma de couplage non symétrisé d'opérateurs d'annihilation et de création élémentaires associées à chaque mode normal de vibration de la molécule :

$$a_{s,\sigma}^{(C)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (q_{s,\sigma} + ip_{s,\sigma})^{(C)} \quad (\text{I. 33})$$

$$a_{s,\sigma}^{+(C)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (q_{s,\sigma} - ip_{s,\sigma})^{(C)} \quad (\text{I. 34})$$

(C): désigne la symétrie dans le groupe  $T_d$  de l'oscillateur  $s$ .

$\sigma$  : désigne les composantes des représentations associées (C), soit :

$C=A_1$  pour  $s=1$  et  $\sigma=1$

$C=E$  pour  $s=2$  et  $\sigma=1,2$

$C=F_2$  pour  $s =3$  ou  $4$  et  $\sigma= 1, 2,3$

En couplant les  $n_s$  opérateurs  $a_s^{+(c)}$ , on obtient un opérateur de création de symétrie  $\Gamma_1$  noté  $a_{\{n_s\}}^{+(\alpha_1, \Gamma_1)}$

$$a_{\{n_s\}}^{+(\alpha_1, \Gamma_1)} = \left[ \underbrace{a_s^{+(c)} \otimes a_s^{+(c)} \otimes \dots \otimes a_s^{+(c)}}_{n_s \text{ opérateurs}} \right]^{(\alpha_1, \Gamma_1)} \quad (I. 35)$$

En couplant les  $m_s$  opérateurs  $a_s^{(c)}$ , on obtient un opérateur d'annihilation de symétrie  $\Gamma_2$  noté  $a_{\{m_s\}}^{(\alpha_2, \Gamma_2)}$

$$a_{\{m_s\}}^{(\alpha_2, \Gamma_2)} = \left[ \underbrace{a_s^{(c)} \otimes a_s^{(c)} \otimes \dots \otimes a_s^{(c)}}_{m_s \text{ opérateurs}} \right]^{(\alpha_2, \Gamma_2)} \quad (I. 36)$$

Les indices  $s$  peuvent être les mêmes ou différents.

Les  $\{n_s\}$  ou  $\{m_s\}$  est la suite des nombres  $s$  désignant les différents modes.

Les  $\alpha_1, \alpha_2$  distinguent respectivement les tenseurs de même symétrie  $\Gamma_1$  et  $\Gamma_2$  et précisent les couplages intermédiaires.

À partir des opérateurs précédents, on construit deux opérateurs vibrationnels A et B de symétrie  $\Gamma$  :

$$A_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1 \Gamma_1, \alpha_2 \Gamma_2 (\Gamma)} = \left( a_{\{n_s\}}^{+(\alpha_1, \Gamma_1)} \otimes a_{\{m_s\}}^{(\alpha_2, \Gamma_2)} \right)^{(\Gamma)} \quad (I. 37)$$

$$B_{\{m_s\}\{n_s\}}^{\alpha_2 \Gamma_2, \alpha_1 \Gamma_1 (\Gamma)} = \left( a_{\{m_s\}}^{(\alpha_2, \Gamma_2)} \otimes a_{\{n_s\}}^{+(\alpha_1, \Gamma_1)} \right)^{(\Gamma)} \quad (I. 38)$$

$\Gamma$  satisfait à la relation triangulaire  $\Delta(\Gamma_1 \Gamma_2 \Gamma_3) = 0$  et avec ces deux opérateurs on construit un opérateur vibrationnel de la façon suivante :

$$\varepsilon V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1, \Gamma_1 \alpha_2, \Gamma_2} = \frac{1}{N} e^{i\Phi} \left( A_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1 \Gamma_1, \alpha_2 \Gamma_2 (\Gamma)} \otimes \varepsilon(-1)^{\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma} B_{\{m_s\}\{n_s\}}^{\alpha_2 \Gamma_2, \alpha_1 \Gamma_1 (\Gamma)} \right) \quad (I. 39)$$

$\varepsilon = +1$  (respectivement  $-1$ ) si cet opérateur est un polynôme pair (respectivement impair) par rapport aux  $p_{s, \sigma}$ .

$N$  est un facteur de normalisation

$e^{(i\Phi)}=1$ (respectivement  $-i$ ) pour  $\varepsilon=+1$ (respectivement  $-1$ ) pour que V soit hermétique

$$(-1)^\Gamma = \begin{cases} +1 & \text{pour } \Gamma = A1, E \text{ ou } F2 \\ -1 & \text{pour } \Gamma = A2 \text{ ou } F1 \end{cases} \quad (I.40)$$

En ce qui concerne le calcul des éléments matriciels réduits dans  $T_d$  de l'opérateur rotationnel on rappelle les principales propriétés de la chaîne du groupe  $SO(3) \supset O$ .

Dans les bases cubiques normales introduites par Moret Bailly [20], le produit tensoriel de deux tenseurs sphériques  $A^{(J_1)}$  et  $B^{(J_2)}$  dont les composantes de chacun d'eux forment une base des représentations irréductible.  $J_1$  de  $SO(3)$  [21] s'exprime par :

$$(A^{(J_1)} \otimes B^{(J_2)})_{p_3}^{J_3} = (-1)^{J_3} \sqrt{2J_3 + 1} \sum_{p_1 p_2} F_{p_1 p_2 p_3}^{(J_1 J_2 J_3)} A_{p_1}^{(J_1)} B_{p_2}^{(J_2)} \quad (I.41)$$

où :

F : est un symbole 3j cubique de Moret- Bailly.

P : (n c,  $\sigma$ ) est un triplet d'indices caractérisant les composantes cubiques.

C: distingue la symétrie des représentations du groupe O.

n : différencie les représentation de même symétrie.

$\sigma$ : distingue les différentes composantes de la représentation C

Pour J, n, C fixés l'ensemble des composantes  $A_{nC\sigma}^{(J)}$  forme un tenseur cubique (groupe O)

noté :  $A_\sigma^{(J,nC)}$

$$A_\sigma^{(J,nC)} \equiv A_{nC\sigma}^{(J)} \quad (I.42)$$

Grâce à l'identification (I.42) il est possible d'effectuer le produit tensoriel de deux tenseurs sphériques, soit dans le groupe  $SO(3)$ , soit dans le groupe O. Le produit tensoriel dans le sous-groupe O des tenseurs  $A^{(J_1, n_1 c_1)}$  et  $B^{(J_2, n_2 c_2)}$  s'écrit :

$$(A^{(J_1, n_1 c_1)} \otimes B^{(J_2, n_2 c_2)})_{\sigma_3}^{(C_3)} = \sqrt{2C_3 + 1} \sum_{p_1 p_2} F_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3}^{(c_1 c_2 c_3)} A_{\sigma_1}^{(J_1, n_1 c_1)} B_{\sigma_2}^{(J_2, n_2 c_2)} \quad (I.43)$$

où:  $[C_3]$  désigne la dimension de la représentation  $C_3$  et F est un symbole de couplage du groupe O [23,12].

D'autre part le produit tensoriel dans  $SO(3)$ , s'exprime par [12] :

$$(A^{(J_1)} \otimes B^{(J_2)})_{p_3}^{J_3} = (-1)^{J_3} \sqrt{2J_3 + 1} \sum_{p_1 p_2} \left( \frac{F_{p_1 p_2 p_3}^{(J_1 J_2 J_3)}}{F_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3}^{(c_1 c_2 c_3)}} \right) F_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3}^{(c_1 c_2 c_3)} A_{p_1}^{(J_1)} B_{p_2}^{(J_2)} \quad (I.44)$$

Dans cette dernière expression, apparaît le rapport (indépendant des composantes  $\sigma_i$ ) de deux symboles de couplage relatifs respectivement à  $SO_3$  et  $O$  [22], et qui représente en fait le facteur isoscalaire [12] :

$$K_{(n_1 c_1, n_2 c_2, n_3 c_3)}^{(J_1 J_2 J_3)} = \frac{F_{p_1 p_2 p_3}^{(J_1 J_2 J_3)}}{F_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3}^{(c_1 c_2 c_3)}} \quad (I.45)$$

À partir des relations (I.41), (I.43) et (I.44) on obtient la formule de passage du couplage dans  $O$  au couplage dans  $SO_3$  :

$$(A^{(J_1)} \otimes B^{(J_2)})_{p_3}^{J_3, n_3 c_3} = (-1)^{J_3} \times \left( \frac{\sqrt{2J_3 + 1}}{\sqrt{2c_3 + 1}} \sum_{n_1 c_1, n_2 c_2} K_{(n_1 c_1, n_2 c_2, n_3 c_3)}^{(J_1 J_2 J_3)} \right) (A^{(J_1, n_1 c_1)} \otimes B^{(J_2, n_2 c_2)})^{(c_3)} \quad (I.46)$$

Réciproquement, et à partir des propriétés d'unitarité des coefficients (dédites directement des symboles  $F$ ), on montre la relation inverse [12] :

$$(A^{(J_1, n_1 c_1)} \otimes B^{(J_2, n_2 c_2)})^{(c_3)} = \frac{1}{\sqrt{2c_3 + 1}} \sum_{J_3, n_3} (-1)^{J_3} \sqrt{2J_3 + 1} \times K_{(n_1 c_1, n_2 c_2, n_3 c_3)}^{(J_1 J_2 J_3)} (A^{(J_1)} \otimes B^{(J_2)})_{p_3}^{J_3, n_3 c_3} \quad (I.47)$$

Par itération on peut établir des relations analogues pour le couplage d'un nombre quelconque de tenseurs.

Les coefficients  $K$  interviennent également dans le calcul des éléments matriciels réduits dans  $O$ . En effet, en appliquant le théorème de Wigner-Eckart dans  $O$  et dans  $SO(3)$ , on montre la relation :

$$\langle J', n' c' \| T^{(L, nC)} \| J'', n'' c'' \rangle = (-1)^{J'} K_{(nC, n' c', n'' c'')}^{(I J'' J')} \langle J' \| T^{(I)} \| J'' \rangle \quad (I.48)$$

Où  $T^{(1)}$  est un opérateur tensoriel irréductible du groupe  $SO(3)$ . Nous désignons par le même symbole les éléments matriciels réduits dans  $SO(3)$  et dans  $O$ , et les indices quantiques suffisent pour distinguer les deux cas.

Le calcul des coefficients  $K$  se ramène au calcul des symboles  $F$  d'après la relation (I-47). Les symboles  $F$  de  $SO(3)$  se déduisent eux même des symboles  $3j$  de Wigner par le changement de base défini par Moret Bailly [20].

Des tables de symboles d'un type particulier ont été publiées par divers auteurs pour des besoins précis (Moret Bailly et al. [20], Hillico [22] Champion et al [23] complètent le calcul de la matrice de changement de base et donnent les valeurs des symboles  $F$  du sous-groupe  $O$  correspondant aux mêmes représentations que celles choisies pour le calcul des symboles  $F$  de  $SO(3)$ .

### I.2.3 Fonctions de bases

Les fonctions de base de vibration -rotation sont construites suivant le même schéma de couplage que les opérateurs.

Il est nécessaire de faire deux couplages successifs dans  $T_d$  :

-le premier couplage permet de définir les fonctions vibrationnelles d'un niveau d'énergie considéré :

$$\Psi_v^{(C_v)} = \left( \Psi_{v_1}^{(C_1)} \otimes \Psi_{v_2, l_2}^{(C_2)} \otimes \Psi_{v_3, l_3}^{(C_3)} \otimes \Psi_{v_4, l_4}^{(C_4)} \right)^{(C_v)} \quad (I.49)$$

Les fonctions rotationnelles sont obtenues par réduction dans  $T_d$  du tenseur sphérique  $\Psi^{(J_g)}$ .

$$\Psi^{(J_g)} = \sum_{nC_r} \Psi^{(J_g, nC_r)} \quad (I.50)$$

avec  $C_r = A_1, A_2, E, F_1$  ou  $F_2$ .

Par convention, nous avons choisi la parité  $g$  pour toutes les fonctions rotationnelles.

-le deuxième couplage consiste à faire le produit tensoriel des deux fonctions précédentes dans  $T_d$  pour donner les fonctions de base rovibrationnelles.

$$\Psi_\sigma^{(C)} = \left( \Psi^{(J_g, nC_r)} \otimes \Psi_v^{(C_v)} \right)_\sigma^{(C)} \quad (I.51)$$

Les représentations irréductibles  $C_r$ ,  $C_v$  et  $C$  doivent satisfaire à la relation triangulaire  $\Delta(C_r, C_v, C) \neq 0$

### I.2.4 Éléments Matriciels

Les éléments matriciels d'un opérateur rovibrationnel  $T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(k, n\Gamma)\Gamma_1\Gamma_2}$  s'obtiennent par le théorème de Wigner-Eckart

$$\langle (\Psi_{(J_g, nC_r)} \otimes \Psi_v^{(C_v)})_{\sigma}^{(C)} \parallel T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(k, n\Gamma)\Gamma_1\Gamma_2} \parallel (\Psi_{(J_g, n'C_r')} \otimes \Psi_v^{(C'_v)})_{\sigma}^{(C)} \rangle = (-1)^{J+\Gamma+C+C'_r+C'_v} [\Gamma]^{-1/2} K_{(n\Gamma, n'C'_r, nC_r)}^{(k, J_g, J_g)} \begin{pmatrix} C'_v & C'_r & C \\ C_r & C_v & \Gamma \end{pmatrix} \langle J_g \parallel R^{\Omega(K)} \parallel J_g \rangle \langle \Psi_v^{(C_v)} \parallel V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Gamma_1\Gamma_2(\Gamma)} \parallel \Psi_v^{C'_v} \rangle \quad (I. 52)$$

où  $\begin{pmatrix} C'_v & C'_r & C \\ C_r & C_v & \Gamma \end{pmatrix}$  est un symbole 6C dont les valeurs sont données.

Les coefficients  $K$  sont les facteurs isoscalaires de la chaîne de groupe  $O(3) \supset T_d$  et  $\langle J_g \parallel R^{\Omega(K)} \parallel J_g \rangle$  est l'élément matriciel réduit dans  $O(3)$  l'opérateur  $R^{\Omega(K)}$  :

$$\langle J_g \parallel R^{\Omega(K)} \parallel J_g \rangle = \left[ -\frac{4J(J+1)}{\sqrt{3}} \right]^{\frac{(\Omega-K)}{2}} \left[ \frac{K!(2J+K+1)!}{(2K-1)!!(2J-K)!} \right]^{1/2} \quad (I. 53)$$

ou  $(2K-1)!! = (2K-1)(2K-3) \dots (2 \text{ ou } 1)$

$\langle \Psi_v^{(C_v)} \parallel V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Gamma_1\Gamma_2(\Gamma)} \parallel \Psi_v^{C'_v} \rangle$  est l'élément matriciel réduit dans  $T_d$  de l'opérateur  $V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Gamma_1\Gamma_2(\Gamma)}$ .

## II Moment dipolaire des molécules $XY_4$

M. Loëte [13] a donné un développement complet du moment dipolaire des molécules  $XY_4$  et ceci en utilisant un modèle tensoriel dont la manière de construction concorde avec la manière de construction de l'Hamiltonien

## II.1 Moment dipolaire dans le repère moléculaire

Dans le groupe  $T_d$  les 3 composantes du moment dipolaire non transformé forment un tenseur de symétrie  $F_2$ , que l'on peut écrire sous une forme analogue à celle de l'Hamiltonien

$$\mu_{\alpha}^{(F_2)} = \sum_{\text{tous les indices}} \mu_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1 \Gamma_1 \alpha_2 \Gamma_2} \otimes V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1 \Gamma_1 \alpha_2 \Gamma_2 (F_2)}_{\alpha} \quad (I. 54)$$

Les paramètres  $\mu_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1 \Gamma_1 \alpha_2 \Gamma_2}$  s'expriment en fonction des dérivés partielles du moment dipolaire par rapport aux coordonnées normales [13]

Après une série de transformation de contact les composantes  $\tilde{\mu}_{\alpha}^{F_2}$  du moment dipolaire transformé s'écrivent

$$\tilde{\mu}_{\alpha}^{(F_2)} = \sum_{\text{tous les indices}} \mu_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(k,n\Gamma) \alpha_1 \Gamma_1 \alpha_2 \Gamma_2 (\Gamma_v)} \otimes \left( R^{\Omega(k,n\Gamma)} \otimes (-1)^{\varepsilon} V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\alpha_1 \Gamma_1 \alpha_2 \Gamma_2 (\Gamma_v)} \right)_{\alpha}^{F_2} \quad (I. 55)$$

où sous forme simplifié

$$\tilde{\mu}_{\alpha}^{(F_2)} = \sum_{(i)} \mu^{(i)} \otimes M_{\alpha}^{(i)(F_2)} \quad (I. 56)$$

où  $M_{\alpha}^{(i)(F_2)}$  représente un opérateur rovibrationnel du moment dipolaire.

Les coefficients  $\mu^{(i)}$  s'expriment en fonction des dérivées partielles du moment dipolaire et des paramètres de l'Hamiltonien par l'intermédiaire des transformations de contact

## II.2 Moment dipolaire dans le repère du laboratoire

Les trois cosinus directeurs  $\lambda_{z\alpha}$  de la direction OZ sont les composantes d'un tenseur  $C^{(1u)}$  du groupe (O3) orienté suivant la représentation  $F_2$  dans  $T_d$ .

$$C^{(1u,F_2)} = \lambda_{z\alpha} \quad (I. 57)$$

On peut écrire alors, en utilisant les formules de couplage, l'expression suivante :



$$\tilde{\mu}_z = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left( C_{\alpha}^{(1u,F_2)} \tilde{\mu}_{\alpha}^{F_2} + \tilde{\mu}_{\alpha}^{F_2} C_{\alpha}^{(1u,F_2)} \right) \quad (I. 58)$$

D'après les formules de couplage, on obtient

$$\tilde{\mu}_z = \frac{\sqrt{3}}{2} \left( \left( C_{\alpha}^{(1u,F_2)} \tilde{\mu}_{\alpha}^{F_2} \right)^{A_1} + \left( \tilde{\mu}_{\alpha}^{F_2} C_{\alpha}^{(1u,F_2)} \right)^{A_1} \right) \quad (I. 59)$$

que nous écrivons sous forme condensée :

$$\tilde{\mu}_z = \sqrt{3} \left[ C^{(1u,F_2)} \otimes \tilde{\mu}^{F_2} \right]^{A_1} \quad (I. 60)$$

Les crochets indiquent qu'il s'agit d'un produit tensoriel symétrisé finalement l'équation précédente devient :

$$\tilde{\mu}_z = \sqrt{3} \sum_i \mu^{(i)} \left[ C^{(1u,F_2)} \otimes M^{\{i\}\{F_2\}} \right]^{A_1} \quad (I. 61)$$

## II.3 Moment dipolaire effectif

Afin de calculer les intensités de transition rovibrationnelles (dans le cas de la spectroscopie d'absorption infrarouge), les opérateurs moment dipolaire électrique effectifs sont développés en utilisant les mêmes principes de calculs tensoriels que pour l'Hamiltonien. Ainsi les composantes du moment dipolaire dans le repère fixe du Laboratoire sont exprimées par [24,25]:

$$\tilde{\mu}_{\Theta}^{(A_2)} = \sqrt{3} \langle 1; m | \Theta \rangle \sum_{\{i\}} \sum_{\Gamma} \mu^{\{i\}} \left[ C^{(1,F_1)} \otimes M^{\{\{i\},F_2\}} \right]^{(A_2)} \quad (I. 62)$$

Les coefficients  $\langle 1; m | \Theta \rangle$  sont ceux de Stone [26], et  $C^{(1,F_1)}$  est le tenseur du cosinus directeur.  $\{i\}$  dénote tous les différents nombres quantiques et les différentes symétries.

Les  $\mu^{\{i\}}$  sont les paramètres à déterminer par l'analyse des intensités expérimentales.

Les opérateurs effectifs du moment dipolaire sont reliés entre eux par la même transformation qui mène à l'Hamiltonien effectif et cette transformation est nécessairement une somme d'opérateurs rovibrationnels [27]. Ainsi  $\tilde{\mu}$  est développé en termes d'opérateurs rovibrationnels par :

$$M_y^{\{i\},F_2} = \left( R^{\Omega(k,n\Gamma_r)} \otimes \varepsilon V_{\{s\}\{s'\}}^{\Gamma_v \Gamma_{v'}(C_v)} \right)_y^{(F_2)} \quad (I. 63)$$

où  $\gamma = x, y, z$  sont les composantes dans le repère lié à la molécule  
puisque :

$$\varepsilon = (-1)^\Omega \quad (I.64)$$

L'ordre du développement du moment dipolaire est défini comme

$$O_\mu = \Omega + \Omega_v - 1 \quad (I.65)$$

L'extrapolation vibrationnelle présentée ci-dessus joue également un rôle important pour le développement du moment dipolaire.

L'intensité  $S_{fi}$  de transition dipolaire entre les états moléculaires rovibrationnel  $\tilde{\Phi}_i$  (avec une énergie  $E_i$ ) et  $\tilde{\Phi}_f$  (avec une énergie  $E_j$ ) est calculé par

$$S_{fi} = K_{fi} g_i e^{-\frac{hcE_i}{kT}} \sum_{M_i M_f} |\tilde{\Phi}_i \langle \tilde{\mu}_z | \tilde{\Phi}_f \rangle|^2 \quad (I.66)$$

Où  $K_{fi}$  est un coefficient numérique dépendant de la fréquence de transition  $\tilde{\nu}_{fi}$  et de la température  $T$  par le biais de la fonction de partition rovibrationnelle  $Q(T)$ ; il s'écrit exactement :

$$K_{fi} = \frac{8\pi^3}{hc} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\tilde{\nu}_{fi}}{Q(T)} \left(1 - e^{-\frac{hc\nu_{fi}}{kT}}\right) \quad (I.67)$$

$g_i$  est le poids statistique de spin de l'état  $\tilde{\Phi}_i$  .

## *Chapitre II*

### *Méthodes d'analyses et Programmes utilisés*

# I. Méthodes numériques utilisées dans les analyses des données expérimentales

Dans ce chapitre, nous allons décrire les méthodes d'analyses utilisées dans la détermination des paramètres de l'Hamiltonien et ceux du moment dipolaire. Et c'est ces paramètres qui seront utilisés dans notre travail, pour toute prédiction de spectres.

## I.1 Ajustement des paramètres de l'Hamiltonien par la méthode des moindres carrés itératives

Concernant la détermination des paramètres de l'Hamiltonien à partir d'un ensemble de fréquences observées, on utilise une méthode des moindres carrés itérative. Cette méthode est décrite dans ce paragraphe.

Soit une grandeur  $Y$  mesurée  $n$  fois, et dont les valeurs calculées s'écrivent en fonction de  $p$  paramètres  $t_j$  ( $j=1, \dots, p$ ) de la façon suivante :

$$y_i^c = \sum_{j=1}^p t_j x_{ij} \quad (i = 1, \dots, n) \quad (\text{II. 1})$$

où  $x_{ij}$  sont des constantes théoriques connues et  $t_j$  sont les paramètres à déterminer. Si ces grandeurs physiques sont mesurées ( $y_1^0, \dots, y_n^0$ ), on peut toujours écrire

$$y_i^0 = y_i^c + \epsilon_i \quad i = 1, \dots, n \quad (\text{II. 2})$$

Où  $\epsilon_i$  représentent les différents résidus de différentes mesures :

Soient  $e_i$  et  $\beta_j$  les meilleurs estimateurs de  $\epsilon_i$  et  $t_j$  respectivement.

Ajuster les paramètres  $\beta_j$  par la technique des moindres carrés, c'est résoudre le système :

$$\left\{ \begin{array}{l} y_i^0 = \sum \beta_j x_{ij} + e_i \\ \sum_{i=1}^n e_i^2 \text{ minimum} \end{array} \right. \quad (\text{II. 3})$$

$\sum e_i^2$  dépend des p paramètres  $\beta_j$ , sa différentielle totale s'écrit :

$$d\left(\sum_{i=1}^n e_i^2\right) = \sum_{i=1}^p \frac{\partial(\sum_{i=1}^n e_i^2)}{\partial \beta_i} d\beta_i \quad (\text{II. 4})$$

$\sum e_i^2$  est extremum si sa différentielle totale est nulle, donc si

$$\frac{\partial(\sum e_i^2)}{\partial \beta_l} = 0 \quad \forall l = 1 \dots \dots \dots p \quad (\text{II. 5})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\sum e_i^2)}{\partial \beta_l} &= \frac{\partial}{\partial \beta_l} \sum_{i=1}^n \left( y_i^0 - \sum_{j=1}^p \beta_j x_{ij} \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (-2x_{ij}) \left( y_i^0 - \sum_{j=1}^p \beta_j x_{ij} \right) \\ &= -2 \left[ \sum_{i=1}^n x_{ij} y_i^0 - \sum_{i,j}^{n,p} x_{il} x_{ij} \beta_j \right] \end{aligned}$$

et l'équation (II. 5) devient :

$$\sum_{i=1}^n y_i^0 x_{il} = \sum_{i,j}^{n,p} x_{il} x_{ij} \beta_j \quad \forall l = 1 \dots \dots \dots p \quad (\text{II. 6})$$

Sous forme matricielle cette dernière équation peut s'écrire :

$$[x]^t(y^0) = [x]^t[x](\beta) \quad (\text{II. 7})$$

d'où on tire la matrice des paramètres :

$$(\beta) = ([x]^t[x])^{-1}[x]^t(y^0) \quad (\text{II. 8})$$

$[x]$  est la matrice des  $x_{ij}$  n lignes p colonnes.

$(y^0)$  est la matrice – colonne des observées (à n lignes).

$(\beta)$  est la matrice – colonne des paramètres (à p lignes).

La condition (II. 5) n'est qu'une condition d'extremum, mais on montre qu'elle donne uniquement des minimums de  $\sum e_i^2$ .

Si les mesures sont d'inégales précisions, il est préférable d'utiliser une méthode pondérée. Le même raisonnement donne :

$$(\beta) = ([x]^t[P][x])^{-1}[x]^t[P](y^0) \quad (\text{II. 9})$$

où  $[p]$  est la matrice (n ,n ) diagonale dont les termes sont les poids statistiques  $p_i$  .Si la précision de la  $k^{\text{ième}}$  mesure est plus grande que celles de la  $h^{\text{ième}}$  , le poids  $p_k$  sera plus grand que  $p_h$  .

On montre qu'un estimateur sans biais de la variance des écarts est :

$$\begin{cases} \sigma^2 = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^n (y_i^0 - y_i^c)^2 & \text{cas non ponderé} \\ \sigma^2 = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^n P_i (y_i^0 - y_i^c)^2 & \text{cas ponderé} \end{cases} \quad (\text{II. 10})$$

où  $n-p$  est le nombre de degrés de libertés du système (qui doit, bien sûr, être positif).

La matrice de variance des paramètres s'écrit :

$$\begin{cases} \text{var}(\beta) = [\theta] = \sigma^2 ([x]^t[x])^{-1} & \text{cas non ponderé} \\ \text{var}(\beta) = [\theta] = \sigma^2 ([x]^t[P][x])^{-1} & \text{cas ponderé} \end{cases} \quad (\text{II. 11})$$

L'écart- type  $\Delta\beta_j$  sur un paramètre  $\beta_j$  est estimé par :

$$\Delta\beta_j = \sqrt{\theta_{jj}} \quad (\text{II. 12})$$

## I.2 Détermination des paramètres du moment dipolaire

### I.2.1 Linéarisation du problème

L'intensité d'une transition entre deux niveaux d'énergie rovibrationnels  $n$  et  $m$  s'écrit

$$S_{mn} = A_{mn} \left| \sum_{(j)} \mu^j \ll n | M_z^j | m \gg \right|^2 \quad (\text{II. 13})$$

Les  $\mu^j$  sont les paramètres du moment dipolaire que l'on se propose de déterminer.

$A_{mn}$  ne dépend pas des paramètres  $\mu^j$ ,  $\ll n | M_z^j | m \gg$  sont les éléments matriciels du moment dipolaire dans la base propre et dans le repère moléculaire (sans  $\langle \| C^{(1g,F1)} \| \rangle$ ).

$S_{mn}$  dépend quadratiquement des paramètres  $\mu^j$ . Le problème est rendu linéaire en prenant la racine carrée :

$$\epsilon_{nm} \sqrt{S_{nm}} = \sqrt{A_{nm}} \sum_{(j)} \mu^j \ll n | M_z^j | m \gg \quad (\text{II. 14})$$

où

$$\epsilon_{nm} \sqrt{\frac{S_{nm}}{A_{nm}}} = \sum_{(j)} \mu^j M_{nm}^j \quad (\text{II. 15})$$

avec

$$M_{nm}^j = \ll n | M_z^j | m \gg \quad (\text{II. 16})$$

et

$$\epsilon_{nm} = \text{signe} \left( \sum_{(j)} \mu^j M_{nm}^j \right) \quad (\text{II. 17})$$

La détermination de  $\epsilon_{nm}$  ne pose pas de problème si l'un des termes du développement du moment dipolaire est prépondérant. En effet, si

$$|\mu^1 M_{nm}^1| > \left| \sum_{j \neq 1} \mu^j M_{nm}^j \right| \quad (\text{II. 18})$$

alors

$$\epsilon_{nm} = \text{signe} (\mu^1 M_{nm}^1) \quad (\text{II. 19})$$

Si de plus, on choisit  $\mu^1 > 0$ , alors :

$$\epsilon_{nm} = \text{signe} (M_{nm}^1) \quad (\text{II. 20})$$

Notons que cette hypothèse sur le signe de l'un des paramètres n'est restrictive dans la mesure où les paramètres sont définis à un signe global près.

Pour simplifier l'écriture, changeons l'indice de la transition n m en i, la formule (II. 15) devient :

$$\epsilon_i \sqrt{\frac{S_i}{A_i}} = \sum_j \mu_j M_{ij} \quad (\text{II. 21})$$

et si on pose  $y_i^c = \epsilon_i \sqrt{\frac{S_i}{A_i}}$  l'équation précédente devient :

$$y_i^c = \sum_j \mu_j M_{ij} \quad (\text{II. 22})$$

Ainsi, on s'est ramené au modèle linéaire. D'après le paragraphe précédent, les paramètres du moment dipolaire, coefficients de la matrice  $(\mu)$ , ajustés par la technique des moindres carrés pondérées sont donnés par :

$$(\mu) = ([M]^T [P] [M])^{-1} [M]^T [P] (y^0) \quad (\text{II. 23})$$

où  $[p]$  est la matrice (n, m) des poids statistiques  $p_i$  associées aux observées  $y_i^0$  avec



$$y_i^c = \epsilon_i \sqrt{\frac{S_i^0}{A_i}} \quad (\text{II. 24})$$

Dans toutes les études que nous avons faites, nous avons choisi de prendre comme poids statistique :

$$p_i = \frac{1}{\sigma_i^2} \quad (\text{II. 25})$$

où  $\sigma_i$  est la précision de l'observée  $y_i^0$  .  
 $[M]$  est la matrice des coefficients  $M_{ij}$   
 $y_i^0$  est la matrice -colonne des observées .

### I.2.2 Estimation des erreurs

La variance de la distribution des erreurs de mesures est estimée par l'expression

$$\sigma^2 = \frac{1}{\sum_i n_i} = \sum_i n_i \frac{(y_i^0 - y_i^c)^2}{\sigma_i^2} \quad (\text{II. 26})$$

et sous forme matricielle :

$$\sigma^2 = \frac{1}{\sum_i n_i} [(y^0) - (\mu)[M]]^T [P] [(y^0) - (\mu)[M]] \quad (\text{II. 27})$$

Dans l'hypothèse où les seules erreurs sont des erreurs de mesures, ce qui suppose que le modèle théorique est parfait,  $y_i^0 - y_i^c$  correspond à  $\sigma_i$  , et l'équation (II. 26) devient

$$\sigma^2 \simeq 1 \quad (\text{II. 28})$$

L'écart type  $\Delta\mu_j$  sur le paramètre  $\mu_j$  est estimé à partir de la matrice de variance – covariance définie par :

$$[\theta] = \sigma^2 ([M]^T [P] [M])^{-1} \quad (\text{II. 29})$$

et

$$\Delta\mu_j = \sqrt{\theta_{jj}} \quad (\text{II. 30})$$

Pour s'informer sur la structure des données et sur le modèle, on utilise la matrice de corrélation qui s'obtient en normalisant la matrice de variance – covariance :

$$C_{ij} = \frac{\theta_{ij}}{\theta_{ii}\theta_{jj}} \quad (\text{II. 31})$$

$C_{ij}$  donne la corrélation entre les paramètres  $\mu_i$  et  $\mu_j$ .  $\sigma_i$  est la précision absolue sur l'observée  $y_i^0$ , or ce dont nous disposons, en ce qui, concerne le problème de la détermination des paramètres du moment dipolaire, est la précision relative  $\sigma_i^0$  sur l'intensité  $S_i^0$  :

or  $y_i^0 = \sqrt{\frac{S_i^0}{A_i}}$  implique  $\frac{\Delta y_i^0}{y_i^0} = \frac{1}{2} \frac{\Delta S_i^0}{S_i^0}$

d'où  $\Delta y_i^0 = \frac{1}{2} \sigma_i^0 y_i^0$

La formule (II. 26) devient alors :

$$\sigma^2 = \frac{4}{\sum_i n_i} \sum_i n_i \left( \frac{\sqrt{S_i^0} - \sqrt{S_i^c}}{\sigma_i^0 \sqrt{S_i^0}} \right)^2 \quad (\text{II. 32})$$

Pour juger de la qualité des résultats, nous utilisons également :

-L'écart relatif sur les intensités (comparables à  $\sigma_i^0$ ).

$$\sigma'_i = \frac{S_i^0 - S_i^c}{S_i^c} \quad (\text{II. 33})$$

- L'écart quadratique moyen associé :

$$\text{E. Q. M} = \frac{1}{n} \left[ \sum_{i=1}^n (\sigma'_i)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II. 34})$$

-La moyenne des carrés des précisions individuelles  $\sigma_i^0$ :

$$\sigma_{\text{exp}}^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sigma_i^{02} \quad (\text{II. 35})$$

ce qui renseigne sur la précision globale.

### I.2.3 Transmission des erreurs

A l'issue d'une erreur ou un ensemble de  $p$  paramètres ont été ajustés à partir d'un ensemble de  $n$  données expérimentales généralement sélectionnées, on peut finalement utiliser ces paramètres pour calculer les intensités  $S_i^c$  de l'ensemble du spectre, comportant  $N$  transitions (pour  $J_{\text{max}}$  donné).

La précision absolue sur  $y_i^c$  est donnée par :

$$\sigma_{y_i^c} = \left[ \sum_{ik} M_{ij} M_{ik} e_{jk} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II. 36})$$

où les  $\mathbf{M}$  sont définies dans la formule (II.16) et les  $e$  sont les coefficients de la matrice de variance-covariance.

Et puisque  $S_i^c = A_i y_i^{c2}$ , la précision relative sur l'intensité calculée est donnée par :

$$\sigma_{S_i^c} = \frac{2\sigma_{y_i^c}}{y_i^c} \quad (\text{II. 37})$$

## II. Programmes utilisés

### II.1 Installation de XTds et explication des instructions

Nous avons téléchargé **XTds**, ensemble de logiciels développés au niveau du laboratoire de l'I.C.B (institut interdisciplinaire de Bourgogne. DIJON .FRANCE). Ce groupe de logiciels, qui utilise la programmation **Java** pour son exécution, permet de faire toute sorte d'études spectroscopiques concernant les molécules tétraédriques  $T_d$ .

Il permet entre autre de :

- analyser les fréquences d'un spectre **infrarouge** ou Raman
- analyser les intensités d'un spectre.
- faire, des prédictions de spectre et de dessiner ainsi :
  - le spectre (raies en traits).
  - la simulation du spectre (avec les formes de raies adéquates)
  - donner les diagrammes énergétiques.

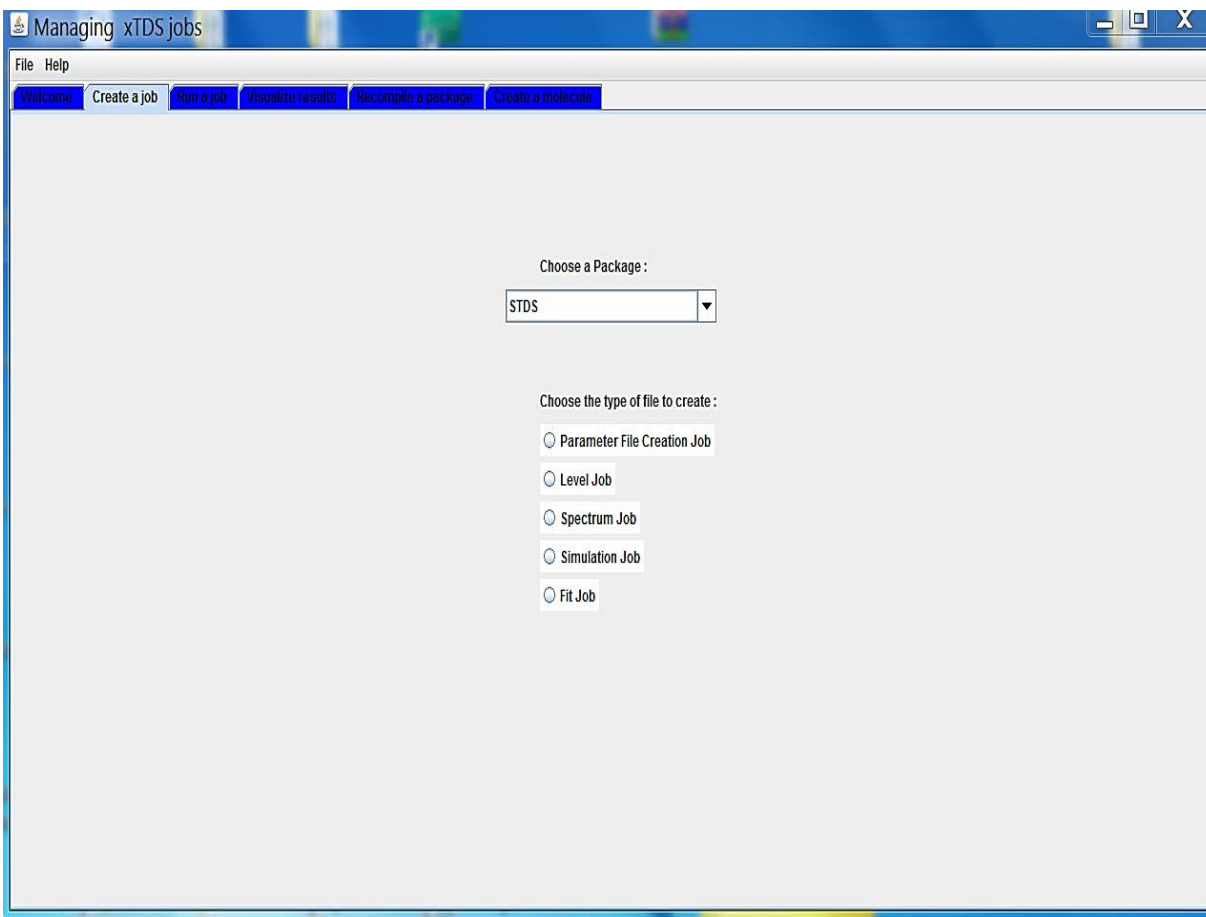
Après son téléchargement, et puisque cet ensemble de logiciels est à interface **Java**, il faut tout d'abord, et à partir du site :

<http://java.sun.com/j2se/1.4.2/download.html>

Télécharger et installer tous les logiciels concernant l'exécution des interfaces **Java**. L'installation de **XTds** sous Linux ou sous Windows doit être faite exactement comme s'est indiqué dans le fichier (Readme.txt).

Quand on exécute **XTds**, la première fenêtre qui apparaît est celle donnée en image 1, où il faut tout d'abord se positionner à "**Create a Jobs**", ce qui permet à l'utilisateur de choisir :

- quel package veut utiliser **STds**, **HTds**...
- quelle est la molécule à étudier.
- quel travail, on veut exécuter.



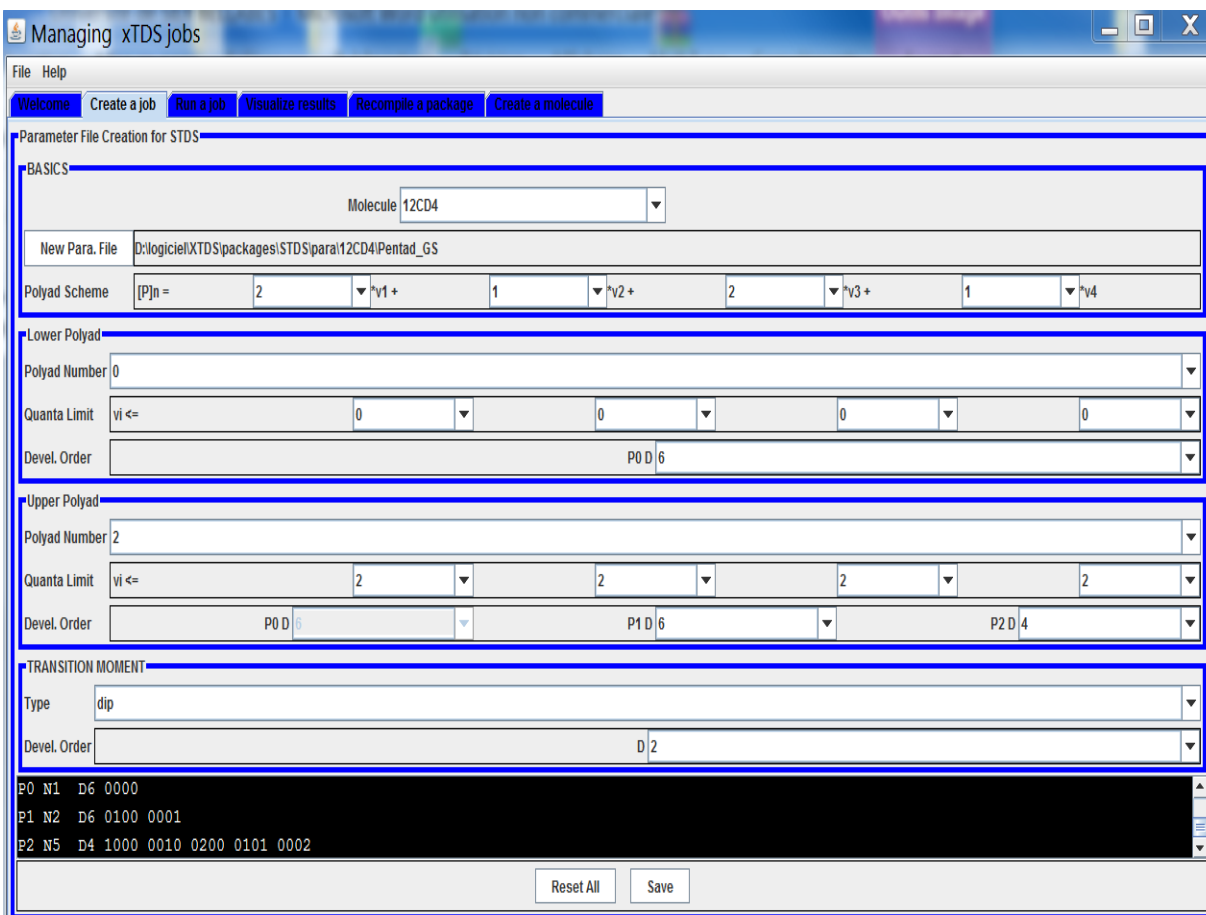
*image 1 : première fenêtre de l'exécution de XTds*

Notons que dans notre étude, et puisqu'il s'agit d'une molécule **XY<sub>4</sub>**, il faut choisir le package **STds** (Spherical Top Data Software) et par exemple pour simuler le spectre de la molécule on choisit (Spectrum job) (voir image 2).

Une fois on a remplis, tout qui est demandé dans "**Create à Jobs**" nous pouvons par exemple calculer une simulation de spectre (image 2) où l'utilisateur doit introduire les informations suivantes :

- 1- molécule à étudier.
- 2- J<sub>max</sub>.
- 3- caractéristiques du niveau inférieur et supérieur (codées)
- 4- l'ordre de développement de l'Hamiltonien.
- 5- le type de transition.
- 6- F<sub>max</sub> (fréquence maximale en cm<sup>-1</sup>).

- 7-  $F_{\min}$  (fréquence minimale en  $\text{cm}^{-1}$ ).
- 8- température de vibration.
- 9- température de rotation.
- 10- seuil d'intensité.
- 11- l'ordre du développement de tenseur du moment dipolaire.

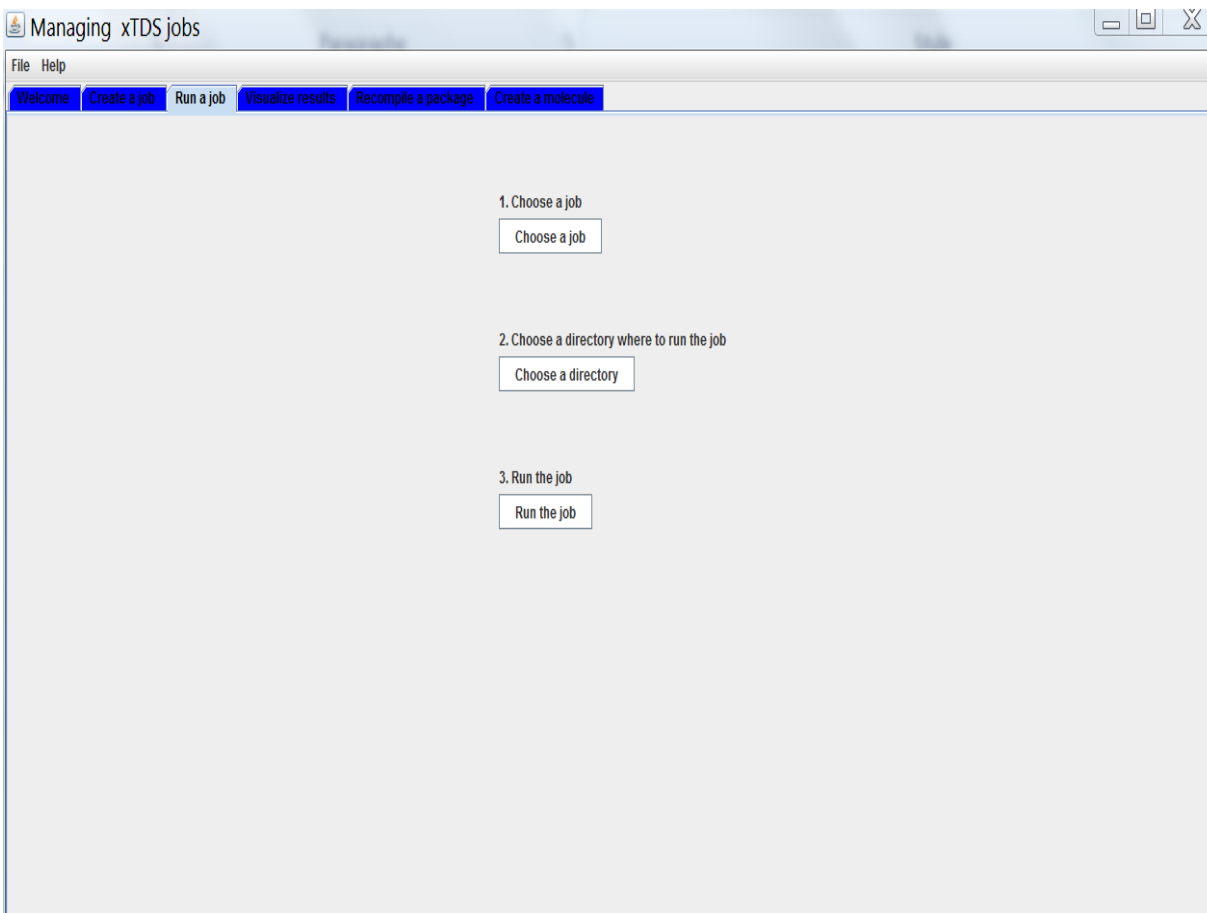


*image 2 :deuxième fenêtre de l'exécution de XTds*

Notons que, en ce qui concerne notre travail, et après avoir choisi la valeur du nombre quantique rotationnel  $J_{\max}$  on choisit :

- niveau inférieur où tous les  $v_s$  sont nuls ( $v_1 ; v_2 ; v_3 ; v_4$ ) = (0 ; 0 ; 0 ; 0).
- niveau supérieur
- l'ordre de développement de l'Hamiltonien
- le type de transition de notre molécule est de type **Infrarouge**
- la fréquence minimale

- la fréquence maximale
- la température de vibration
- la température de rotation.
- seuil d'intensité.
- l'ordre de développement de tenseur moment dipolaire



*image 3 : troisième fenêtre de l'exécution de XTds*

Notons que tous ce qu'on vient d'expliquer permettent seulement de créer le job voulu, et une fois ceci est fait on peut l'exécuter pour obtenir les résultats escompté.

Ainsi, et sur la base de l'exemple donné ci-dessus (job=Spectrum), et en lançant ce job par l'intermédiaire de "**Run a Jobs**"(image 3), on obtient les fichiers suivants :

- spectr.t
- spectr.xy
- énergie.

Une fois, les jobs construits et exécutés on peut visualiser les résultats obtenus sous formes de graphismes et de valeurs numériques et ceci en cliquant sur" **Visualize results** «

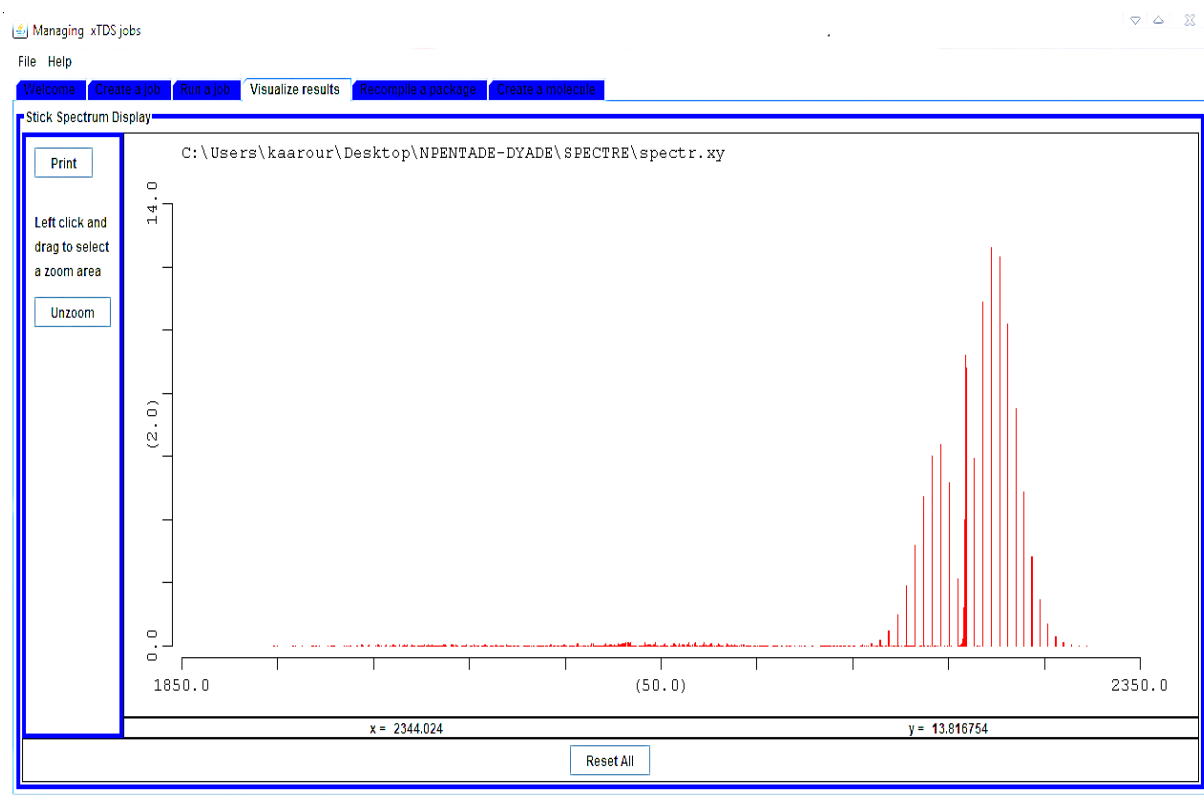
Ainsi on peut récapituler les deux dernières étapes en :

**Run a jobs** : (voir image 3) cette partie de logiciel permet de lancer les jobs après avoir créé le fichier de travail (fichier d'entrée) (job-spe-) son exécution permet d'obtenir :

**-spectr.t** : qui contient toutes les informations sur la molécule (l'intensité de la raie la plus intense, l'intensité de la raie la moins intense, la fréquence minimale du spectre, la fréquence maximale du spectre, l'intensité sommée sur toutes les raies, le nombre des transitions relatif à chaque valeur  $J_{max}$ ) ainsi que le spectre complet.

**-spectr.xy** : qui permet de tracer le graphe.

**Visualize results** : cette partie du logiciel permet de tracer le graphe à partir des fichiers de sorties (spectr.xy) (voir image 4).



*image (4) :quatrième fenêtre de l'exécution de XTds*



Pour expliquer brièvement, la façon de faire tourner ces jobs, on s'est basé sur le job (Spectrum.job), notons qu'il existe dans **XTds** d'autres jobs qui sont :

- **Simulation.jobs** : permet à partir d'un spectre (spectr.xy), déjà obtenu par l'exécution du précédent job, de dessiner le spectre complet avec les formes de raies. Donc ce qui sous-entend qu'on doit entrer dans ce job les données suivantes :

- Jmax.
- le type de transition.
- fréquence maximale.
- fréquence minimale
- température.
- seuil d'intensité.
- pression.
- la résolution

- **Fit.jobs** : ce job permet de déterminer les paramètres de l'analyse en question, à partir d'un fichier contenant les attributions.

Le fichier des attribués doit être construit, par **SPVIEW** qui sera expliqué en détail par la suite.

L'ensemble de ces jobs sont basés sur les modèles de Champion [12] et Loëte [13] et utilisent des programmes qui peuvent être résumé comme l'indique le paragraphe suivant.

## **II.2 Programmes utilisés**

### **II.2.1 Programme de codage des opérateurs rovibrationnels de l'Hamiltonien effectif**

Ce programme permet de coder les opérateurs rovibrationnels de l'Hamiltonien effectif pour une restriction donnée d'une polyade vibrationnelle de type **XY<sub>4</sub>**.Après la lecture des symboles G (les symboles 6C et les facteurs isoscalaires)

Ce programme calcule tous les symboles qui entrent dans la formule donnant les éléments matriciels d'un opérateur rovibrationnel de l'Hamiltonien donné par la formule (I. 52) .

Où :

Les symboles G sont les éléments matriciels qui permettent le passage de la base sphérique à la base cubique.

Après ce calcul, ce programme fait les étapes suivantes :

- lecture des niveaux vibrationnels.
- codage des sous niveaux vibrationnels.
- détermination des opérateurs de création.
- détermination des opérateurs d'annihilation.
- couplage des opérateurs création, annihilation.
- détermination des opérateurs rotationnels possibles.
- calcul et codage des éléments matriciels rovibrationnels, ces éléments seront notés (EMRV).
- Codage des opérateurs rovibrationnels.
- Dimensionnement, détermination des parités et désignation des représentations de  $T_d$

Ce programme nommé **HMODEL** peut être schématisé par :



Où :

CTRL : fichier de control qui contient toutes les informations

Sur la restriction à étudier. (Fichier d'entrée).

MH\_P1\_D04: ce fichier contient le codage des opérateurs rovibrationnels. (Fichier de sortie de notre programme).

## II.2.2 Programme de codage des fonctions de base

Ce programme fait les étapes suivantes :

- Détermination des indices des fonctions d'ondes des sous espaces J, C.
- Détermination des indices des fonctions d'onde dans le bloc J, C représentant H.
- Placement et dimensionnement des sous espaces dans l'espace total des fonctions d'onde.

Ce programme, nommé **ROVBAS**, peut être schématisé par :



Avec :

MH\_P1\_D04 : Le fichier d'entrée de ce programme (fichier de sortie du programme précédent)

FN\_P1 : (Fichier de sortie de notre programme).

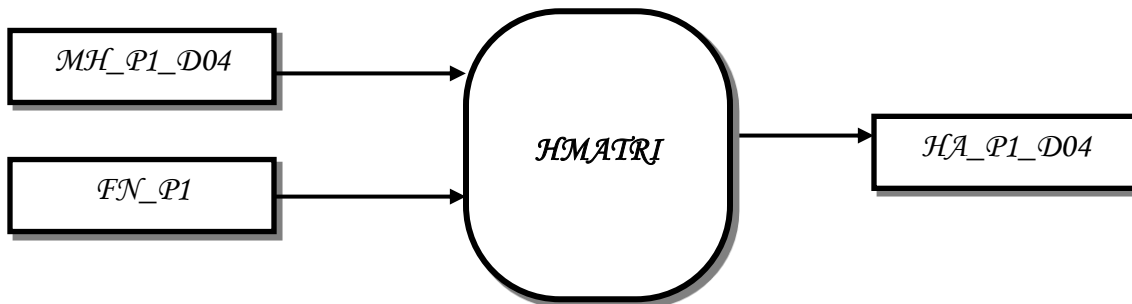
### II.2.3 Programme de calcul et stockage des éléments matriciels non nuls de L'Hamiltonien rovibrationnel effectif

Ce programme permet de calculer les éléments matriciels T de l'Hamiltonien à partir de la formule suivante (I. 52) :

$$\langle (\Psi_{(J_g, n_{C_r})} \otimes \Psi_v^{(C_v)})_{\sigma}^{(C)} \parallel T_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Omega(k, n\Gamma)\Gamma_1\Gamma_2} \parallel (\Psi_{(J_g, n'_{C_r})} \otimes \Psi_v^{(C'_v)})_{\sigma}^{(C)} \rangle = (-1)^{J+\Gamma+C+C'_r+C_v} [\Gamma]^{-1/2} K_{(n\Gamma, n'_{C_r}, n_{C_r})}^{(k, J_g, J_g)} \begin{pmatrix} C'_v & C'_r & C \\ C_r & C_v & \Gamma \end{pmatrix} \langle J_g \parallel R^{\Omega(K)} \parallel J_g \rangle \langle \Psi_v^{(C_v)} \parallel V_{\{n_s\}\{m_s\}}^{\Gamma_1\Gamma_2(\Gamma)} \parallel \Psi_v^{C'_v} \rangle$$

.Ce programme fait les étapes suivantes :

- Lecture des caractéristiques générales à partir des données issues de programme **HMODEL**.
  - Lecture des éléments matriciels réduits.
  - Calcul de tous les symboles entrant dans la formule de base
  - Stockage de tous les éléments matriciels non nuls de l'Hamiltonien rovibrationnel.
- Ce programme est nommé **HMATRI** et peut être schématisé par :



Où :

MH\_P2\_D664: fichier de sortie du programme HMODEL.

FN\_P2 : fichier contenant les éléments matriciels vibrationnels réduits.

HA\_P2\_D664 : fichier de sortie, contenant les éléments matriciels non nuls de l'Hamiltonien rovibrationnel.

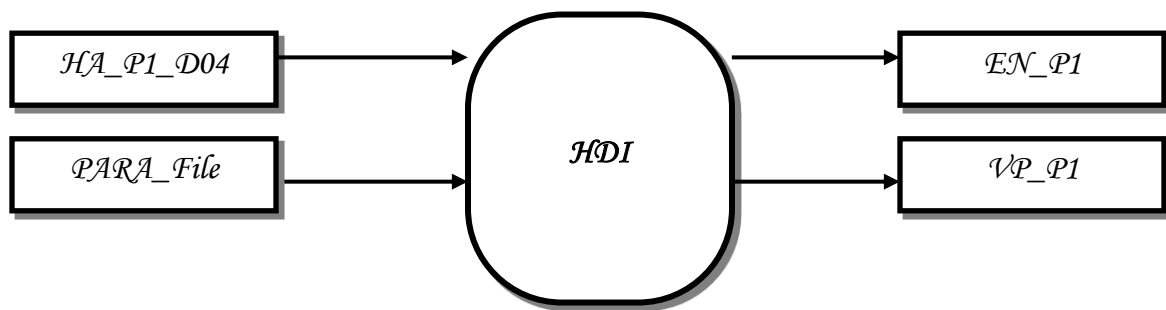
## II.2.4. Programme calculant les valeurs et les vecteurs propres de l'Hamiltonien effectif

Ce programme permet la diagonalisation de la matrice H et le calcul des valeurs propres et des vecteurs propres, en effectuant les étapes suivantes :

-Lecture des paramètres.

-par diagonalisation on détermine les valeurs et les vecteurs qui permettent cette diagonalisation.

Ce programme est nommé **HDI** et peut être schématisé par :



Où :

HA\_P1\_D04: le fichier de sortie du programme précédent.

PARA\_File: fichier d'entrée qui contient tous les paramètres de l'Hamiltonien.

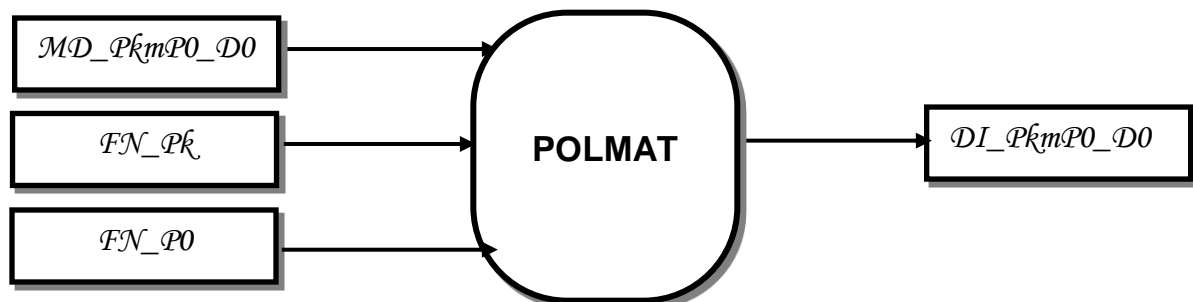
EN\_P1 : fichier de sortie qui contient les valeurs **propres**.

VP\_P1 : fichier de sortie qui contient les vecteurs propres de l'Hamiltonien.

## II.2.5 Programme de calcul et stockage des éléments matriciels non nuls du tenseur du moment dipolaire.

Ce programme, calcule les éléments matriciels du moment dipolaire entre les deux poliades  $P_0$  et  $P_k$ .

Ce programme est nommé **POLMAT** peut-être schématisé par :



Où :

MD\_PkmP0\_D0 : fichier des éléments matriciels codés du tenseur de la polarisabilité (fichier d'entrée).

FN\_P0 : fichier des valeurs propres de la poliade P0 (fichier d'entrée)

FN\_Pk: fichier des valeurs propres de la poliade Pk (fichier d'entrée)

DI\_PkmP0\_D0 : fichier des éléments matriciels non nuls du tenseur du moment dipolaire (fichier de sortie).

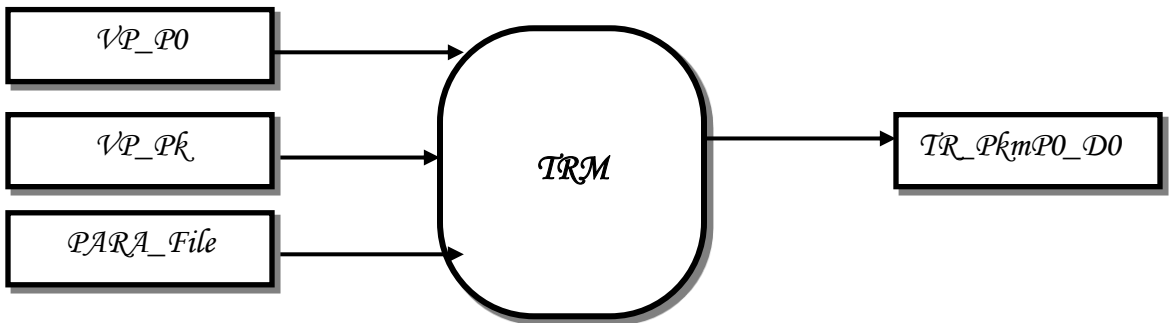
La formule de base de ce programme est :

$$\begin{aligned} & \left\langle \left( \Psi^{(J_g, nC_r)} \otimes \Psi_{v'}^{(c_v)} \right)^{(c)} \left[ \zeta^{(L_g, \Gamma)} \times M^{(i, \Gamma)} \right]^{A_1} \left( \Psi^{(J_g, nC_r)} \otimes \Psi_v^{(c_v)} \right)^{(c)} \right\rangle = \frac{1}{2} \\ & \left\langle \Psi_{v'}^{(c_v)} \right\| (-1)^{k_r} V_{\{n_s\} \{m_s\}}^{\Gamma_1 \Gamma_2 (\Gamma_v)} \left\| \Psi_v^{(c_v)} \right\rangle \left\langle J_{g'} \left\| \zeta^{(L_g)} \right\| J_g \right\rangle (-1)^{c_r + c_v + c} \begin{pmatrix} c_{v'} & c_{r'} & c \\ c_r & c_v & \Gamma_v \end{pmatrix} \\ & \left\{ \sum_{n''C_r'} \begin{pmatrix} \Gamma_v & \Gamma_r & \Gamma \\ c_r'' & c_r' & c_r \end{pmatrix} (-1)^{J+J'} K_{\left( \begin{smallmatrix} L_g & J_g & J_g' \\ \Gamma & n''C_r'' & n'C_r'' \end{smallmatrix} \right)} K_{\left( \begin{smallmatrix} K_r & j_g & j_g' \\ n_r \Gamma_r & nC_r & n'C_r' \end{smallmatrix} \right)} \times \left\langle J_g \left\| R^{\Omega(K_r)} \right\| J_g \right\rangle + \right. \\ & \left. \sum_{n''C_r'} \begin{pmatrix} \Gamma_v & \Gamma_r & \Gamma \\ c_r'' & c_r & c_r' \end{pmatrix} (-1)^{\Gamma_r + \Gamma_v} K_{\left( \begin{smallmatrix} L_g & J_g & J_g' \\ \Gamma & nC_r & n''C_r'' \end{smallmatrix} \right)} K_{\left( \begin{smallmatrix} K_r & J_g' & J_g' \\ n_r \Gamma_r & n''C_r'' & n'C_r' \end{smallmatrix} \right)} \times \left\langle J_g' \left\| R^{\Omega(K_r)} \right\| J_g' \right\rangle \right\} \end{aligned}$$

## II.2.6 Programme de calcul des éléments matriciels du moment de transition dans la base propre :

Ce programme permet de calculer les éléments matriciels du moment de transition dans la base propre et les éléments matriciels non nuls du tenseur du moment dipolaire effectif.

Ce programme est nommé **TRM** et peut être schématisé par :



Où :

VP\_Pk : fichier contient les vecteurs propres de la Polyade  $P_k$  (fichier d'entrée)

VP\_P0 : fichier contient les vecteurs propres de la polyade  $P_0$ . (Fichier d'entrée)

PARA\_File : fichier contenant les paramètres du tenseur du moment dipolaire et toutes leurs caractéristiques. (Fichier d'entrée).

TR\_P1mP0\_D0 : Le fichier de sortie contenant les éléments matriciels du moment de transition (fichier de sortie).

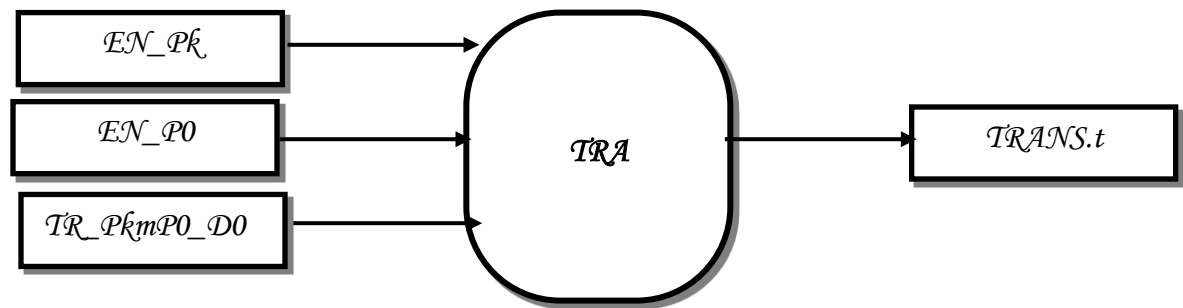
## II.2.7 Programme de calcul du spectre (fréquences et moment de transition)

Ce programme permet de calculer les fréquences et les éléments matriciels réduits du moment de transition.

En passant par les étapes suivantes :

- Lecture des paramètres de H.
- Lecture et stockage des paramètres du moment de transition.

Ce programme est nommé **TRA** peut être schématisé par :



Où :

EN\_P0 : fichier contenant les valeurs propres du niveau  $P_0$  (fichier d'entrée).

EN\_Pk : fichier contenant les valeurs propres du niveau  $P_1$  (fichier d'entrée).

TR\_PkmP0\_D0 : fichier contenant les éléments matriciels non nuls du moment de transition (fichier d'entrée)

TRANS.t : fichier contenant les fréquences et les éléments matriciels réduits du moment de transition (fichier de sortie).

## II.2.8. Programme calculant le spectre de transition

Ce programme est nommé **SPECT** permet de calculer les intensités de transitions rovibrationnelles.

Nous pouvons le schématiser par :



Où :

Trans.t : fichier de sortie du programme TRA.

PREDIC\_Spect : fichier contient la prédiction totale du spectre de la bande (P0\_Pk) (fichier de sortie).

## II.3 Programme d'attribution :

Un spectre expérimental non préattribué, ne contient en général, pour chaque raie, que la fréquence et l'intensité. La précision expérimentale sur chaque raie peut aussi être délivrée dans le spectre expérimental, où en général, elle sera utilisée dans l'expression du poids statistique.

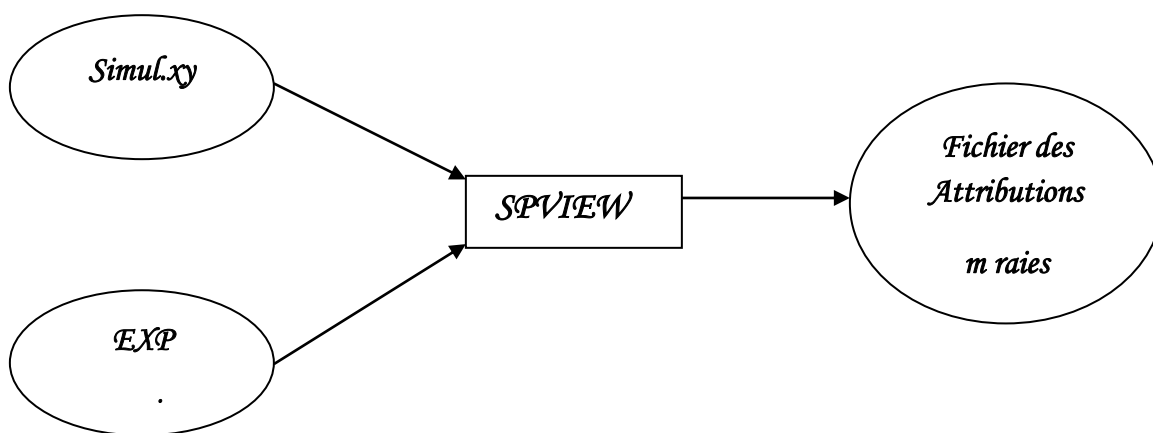
Ainsi, si on veut, analyser un spectre expérimental, il faut que nous sachions, avant l'analyse, quelle sont les caractéristiques rovibrationnelles de chaque raie  $i = (\Omega, k, n, \Gamma, \Gamma_r, \Gamma_v)$ . Ainsi, et dans toutes les expressions de l'analyse numérique du spectre, nous pourrons faire correspondre à chaque raie expérimentale, les caractéristiques d'une raie calculée donnée : c'est ce qu'on appelle l'attribution des raies.

Historiquement, l'attribution se faisait manuellement, c'est-à-dire, qu'on fait tout d'abord un calcul de spectre avec des paramètres plus au moins proches des vrais paramètres. Et en comparant le spectre expérimental au spectre calculé on attribue les raies expérimentales dont on ait sûr (sur la base de différence entre la fréquence calculé et expérimental) à des raies calculées et on commence à les analyser.

Les premiers paramètres déterminés permettent de faire un autre calcul plus proche et de faire ainsi une autre attribution. et ainsi de suite.

Actuellement, les membres du laboratoire de l'institut Carnot Bourgogne, ont mis au point un logiciel " **SPVIEW** " qui permet d'attribuer automatiquement les raies et de fabriquer ainsi un fichier des attribués, qui a son tour peut être utilisé dans l'analyse.

Ce programme **SPVIEW** peut être schématisé par :



Après avoir installé le logiciel **SPVIEW** sur notre machine, nous commençons, et pour chaque type d'étude ( $P_1$ - $P_0$ ,  $P_2$ - $P_0$  ou  $P_3$ - $P_0$ ) que nous sommes proposé, la fabrication, et grâce à **XTds**, d'une première simulation de notre spectre en choisissant :

- le niveau inférieur où tous le  $v_s$  sont nuls ( $v_1 ; v_2 ; v_3 ; v_4$ ) = (0 ; 0 ; 0 ; 0).
- niveau supérieur soit la Diade ( $P_1$ ), soit la Pentade ( $P_2$ ) ou l'Octade ( $P_3$ )
- l'ordre de développement de l'Hamiltonien.
- le type de transition de notre molécule est de type Infrarouge
- la fréquence minimale
- la fréquence maximale
- la température de vibration
- la température de rotation
- seuil d'intensité
- l'ordre de développement du tenseur moment dipolaire
- Résolution
- Pas du dessein
- Masse molaire
- Intensité
- Pression

En lançant, **SPVIEW**, et en chargeant le fichier Simul.xy (fabriqué avec **XTds**) et le fichier expérimental on peut facilement fabriquer le fichier des attribués



Ce fichier, contient les informations suivantes :

1<sup>ère</sup> colonne : numéro de l'attribué.

2<sup>ème</sup> colonne : fréquence observée.

3<sup>ème</sup> colonne : le " + " indique que la raie sera analysée.

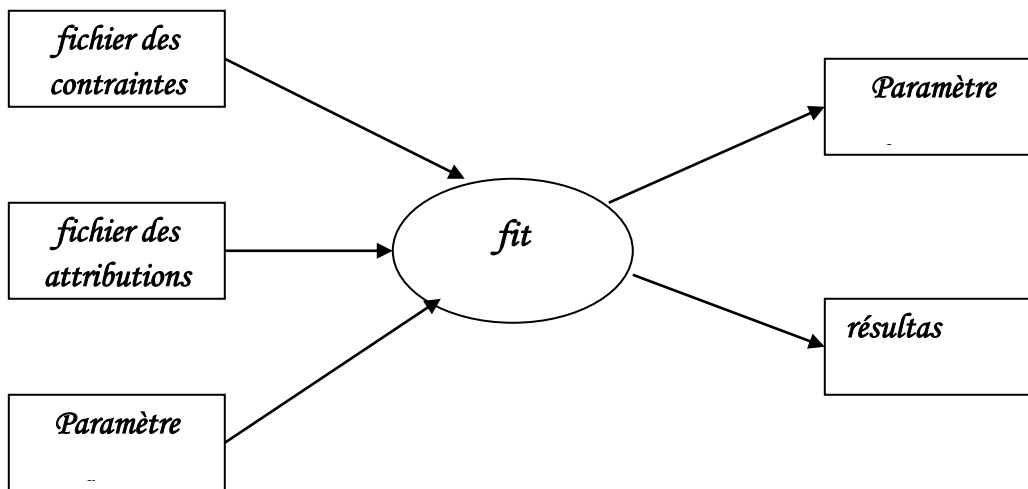
le " - " oblige le programme d'analyse à ne pas prendre en charge la raie.

4<sup>ème</sup> colonne : l'intensité observée.

Les 6 dernières colonnes : les caractéristiques rovibrationnelles, attribuées à la raie expérimentale.

La partie du "**job XTds**" nommé "**fit**", sert à analyser, soit les fréquences d'un spectre soit les intensités.

Ce programme peut être schématisé par :



Pour son exécution ce programme a besoin d'un fichier de contraintes, d'un fichier d'attribués (fabriqué à partir de **SPVIEW**) et du fichier des paramètres d'entrée.

## *CHAPITRE III*

*ANALYSE DES RAIES DE*

*TRANSITIONS :*

*DIADE ( $\nu_2, \nu_4$ ) - GS*

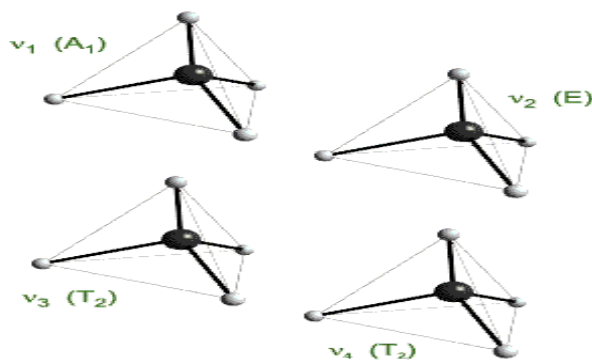
# I Introduction

L'utilisation des modèles tensoriels adaptés aux molécules tétraédriques telles  $\text{CH}_4$ ,  $\text{SiH}_4$ ,  $\text{GeH}_4, \dots$ , et qui font appel à des outils mathématiques (théorie des groupes, opérateurs tensoriels irréductibles et les caractéristiques symétriques des molécules), donne des bons résultats. En partant d'un spectre expérimental, nous pouvons calculer certains paramètres de l'Hamiltonien et par suite les niveaux d'énergies. Une fois les positions des raies sont déterminées, nous pouvons calculer les paramètres du moment dipolaire de ces molécules et par suite les intensités rovibrationnelles. Grâce aux deux logiciels STds et SPVIEW, nous pouvons déterminés d'une part, les paramètres de l'Hamiltonien et ceux du moment dipolaire. Comme nous l'avons déjà mentionné, les molécules  $\text{XY}_4$  possèdent quatre modes normaux de vibrations :

- $\nu_1$  (non dégénéré)
- $\nu_2$  (doublement dégénéré)
- $\nu_3$  et  $\nu_4$  (triplement dégénéré).

Et à chaque mode de vibration est associé une représentation irréductible du groupe  $T_d$ , de ce fait, on a :

- La vibration  $\nu_1$  de symétrie  $A_1$  de coordonnée normale ( $q_1$ )
- La vibration  $\nu_2$  de symétrie  $E$  de coordonnée normale ( $q_{21}, q_{22}$ )
- La vibration  $\nu_3$  de symétrie  $F_2$  de coordonnée normale : ( $q_{31}, q_{32}, q_{33}$ )
- La vibration  $\nu_4$  de symétrie  $F_2$  de coordonnée normale ( $q_{41}, q_{42}, q_{43}$ )



Les niveaux vibrationnels se regroupent dans certaines régions énergétiques en polyades (niveau de base exclu) :

La Diade :  $\nu_2, \nu_4$

la Pentade :  $\nu_1, \nu_3, 2\nu_2, \nu_2+\nu_4, 2\nu_4$

L'Octade :  $\nu_1+\nu_2, \nu_1+\nu_4, \nu_2+\nu_3, \nu_3+\nu_4, 3\nu_2, 2\nu_2+\nu_4, 2\nu_4+\nu_2, 3\nu_4$

Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats de l'étude faite sur les transitions rovibrationnelles entre la Diade ( $\nu_2, \nu_4$ ) et le niveau de base GS.

Et avant de présenter ces résultats, nous allons donner la source des données expérimentales que nous avons analysées dans cette étude.

## II Données expérimentales

Le spectre infrarouge relatif aux différentes bandes des molécules  $XY_4$  est généralement enregistré à l'aide du spectromètre à transformée de fourier. Après préparation de l'échantillon, il est soumis à une irradiation lumineuse polychromatique. Les échanges d'énergies entre les molécules de l'échantillon et le champ électromagnétique se feront en quanta si les deux phénomènes sont en résonance. Macroscopiquement chaque raie absorbée a une fréquence et une intensité, qui se traduit, microscopiquement par une transition entre un niveau d'énergie inférieur vers un niveau d'énergie supérieur. Cette transition n'est possible que si les règles de sélection rovibrationnelles sont satisfaites.

Lors d'un précédent travail, A. Valentin et al [28] ont enregistré et analysé les nombres d'ondes des raies de transitions entre la Diade et le niveau de base GS. dans cette étude et puisque A. Valentin et al [28] n'avaient pas en leurs possessions des données expérimentales sur les transitions GS-GS, il étaient obligés de fixer les paramètres relatifs au niveau de base et de déterminer que ceux relatifs à la Diade.

À partir de cette étude, et parce que SPVIEW permet de tracer (à partir d'un fichier expérimental contenant les nombres d'onde et les intensités) une ligne vertical " Pick " (représentant la raie expérimentale), nous comparons ces raies expérimentales aux raies calculées, ce qui nous permet d'attribuer 731 raies relatives aux transitions entre la Diade ( $\nu_2, \nu_4$ ) et GS de la molécule ( $^{12}\text{CD}_4$ ).

Ce fichier de **731** raies constitue notre première source « **source 1** » de données expérimentales.

Dans notre étude, nous nous sommes proposés de déterminer, non seulement les paramètres relatifs à la Diade, mais aussi ceux du niveau de base. Pour ceci, nous étions en l'obligation d'avoir des données sur GS-GS.

Kreiner et Robiette [29-32], ont analysés 19 raies relatives à GS-GS et ont pu déterminer des paramètres relatifs à ce niveau et en ce qui nous concerne nous avons formé un

fichier expérimental contenant ces 19 raies (ceci constitue notre deuxième source de données expérimentales « **source 2** »).

Ainsi dans notre étude de Diade-GS nous avons en notre possession deux sources de données que nous analysons simultanément, ce qui nous permettra de déterminer l'ensemble des paramètres de la Diade y compris ceux du niveau de base. Ces deux sources de données sont :

- « **source 1** » : 731 données de  $P_1-P_0$  source de ces données est le laboratoire de Spectrométrie Moléculaire Université Pierre et Marie Curie Paris France (A. Valentin 1983).

- « **source 2** » : 19 données  $P_0-P_0$  source de ces données sont Kreiner et Robiette [29-32].

Notons que les 731 données de  $P_1-P_0$  sont réparties suivant les bandes vibrationnelles de la façon indiquée dans le **tableau III.1** et suivant le nombre rotationnel  $J$  de la façon reportée dans le **tableau III. 2**.

**Tableau III.1** Répartition des 731 données par niveau vibrationnel.

731 paramètres de ( $P_1-P_0$ )
226 données de $\nu_2$
505 données de $\nu_4$

**Tableau III.2** Répartition du nombre de données par source et en fonction de  $J$   
 $J$  (de 1 à 10)

$J$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
226 données de $\nu_2$	0	0	3	5	11	15	19	20	30	25	35
505 données de $\nu_4$	1	3	6	12	14	18	29	39	45	61	49
tous les données	1	3	9	17	25	33	48	59	75	86	84

**Suite du tableau III.2** Répartition du Nombre de données par source et en fonction de J (de 10 à 20)

J	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	J≤20
226 données de $\nu_2$	27	21	12	3	0	0	0	0	0	0	226
505 données de $\nu_4$	60	58	44	32	21	11	2	0	0	0	505
tous les données	87	79	56	35	21	11	2	0	0	0	731

### III Analyse de $(\nu_2, \nu_4)$ -GS

l'analyse de 750 observées issues des deux sources « 1 » et « 2 » mentionnées auparavant, nous ont permis (en utilisant le job « fit » de STDS) de déterminer l'ensemble des paramètres de l'Hamiltonien relatif à la Diade  $(\nu_2, \nu_4)$ .

Rappelons que le développement de l'Hamiltonien relatif à la Diade  $(\nu_2, \nu_4)$  comporte 72 opérateurs à l'ordre 6, dont 10 sont spécifiques au niveau de base et 62 sont relatif à la Diade.

Dans le **tableau III.3**, nous avons reportés les valeurs des paramètres déterminés.

La 1<sup>ère</sup> colonne indique le numéro de l'opérateur et donc du paramètre.  
 les colonnes 2, 3, 4 et 5 indiquent les caractéristiques rovibrationnelles  $\Omega(K, n)$   $n_s$   $\Gamma_1$   $m_s$   $\Gamma_2$   $\Gamma$  des opérateurs et donc des paramètres.

La 6<sup>ème</sup> colonne contient l'ordre de l'Hamiltonien.

Les deux dernières colonnes contiennent respectivement la valeur du paramètre ainsi que son incertitude.

**Tableau III.3** : paramètres de l'Hamiltonien

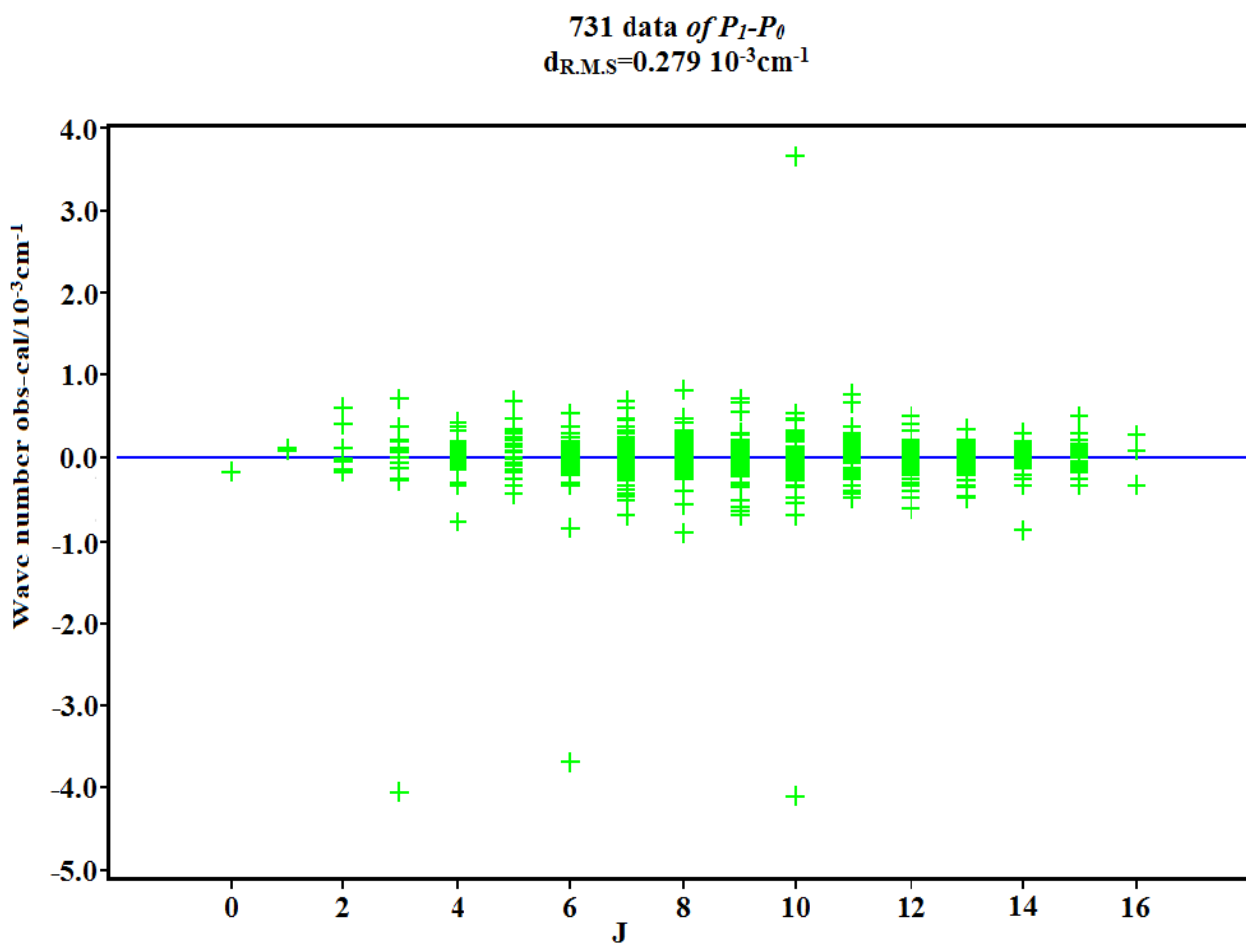
i	$\Omega(K, n\Gamma)$	$n_s$ $\Gamma_1$	$m_s$ $\Gamma_2$	$\Gamma$	$H_{mn}$	Value/cm <sup>-1</sup>	St.Dev./cm <sup>-1</sup>
1	2(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	2	0.26327286870E+01	0.4467299E-05
2	4(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	4	-0.27633704560E-04	0.1317399E-06
3	4(4,0A1)	0000A1	0000A1	A1	4	-0.74566666770E-06	0.7619349E-08
4	6(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	6	0.86663451680E-09	0.1313981E-08
5	6(4,0A1)	0000A1	0000A1	A1	6	-0.20055684290E-10	0.5063290E-10
6	6(6,0A1)	0000A1	0000A1	A1	6	-0.64303939420E-11	0.1366417E-10
7	8(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	8	0.00000000000E+00	0.3805549E-11
8	8(4,0A1)	0000A1	0000A1	A1	8	-0.51130443010E-15	0.6804939E-13
9	8(6,0A1)	0000A1	0000A1	A1	8	-0.34701352190E-15	0.0000000E+00
10	8(8,0A1)	0000A1	0000A1	A1	8	-0.28308687670E-16	0.0000000E+00
11	0(0,0A1)	0100E	0100E	A1	20	0.10916512870E+04	0.1042927E-03

12	2(0,0A1)	0100E	0100E	A1	22	0.31131104103E-02	0.5174302E-05
13	2(2,0E )	0100E	0100E	E	22	-0.70337167693E-02	0.4627758E-05
14	3(3,0A2)	0100E	0100E	A2	23	0.30909270623E-04	0.2633382E-06
15	4(0,0A1)	0100E	0100E	A1	24	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
16	4(2,0E )	0100E	0100E	E	24	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
17	4(4,0A1)	0100E	0100E	A1	24	-0.55958964902E-06	0.5470085E-07
18	4(4,0E )	0100E	0100E	E	24	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
19	5(3,0A2)	0100E	0100E	A2	25	-0.79601251809E-08	0.2381908E-08
20	6(0,0A1)	0100E	0100E	A1	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
21	6(2,0E )	0100E	0100E	E	26	-0.10630194242E-09	0.7208461E-10
22	6(4,0A1)	0100E	0100E	A1	26	0.32835635282E-09	0.4054097E-10
23	6(4,0E )	0100E	0100E	E	26	-0.93676236472E-09	0.1159393E-09
24	6(6,0A1)	0100E	0100E	A1	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
25	6(6,0E )	0100E	0100E	E	26	0.30353279534E-09	0.4006873E-10
26	1(1,0F1)	0100E	0001F2	F1	21	-0.51547647266E+01	0.1736742E-03
27	2(2,0F2)	0100E	0001F2	F2	22	-0.22641753827E-01	0.1498826E-04
28	3(1,0F1)	0100E	0001F2	F1	23	-0.12309896290E-03	0.5450299E-06
29	3(3,0F1)	0100E	0001F2	F1	23	-0.56920337059E-04	0.2417821E-05
30	3(3,0F2)	0100E	0001F2	F2	23	-0.16850937019E-04	0.1157766E-05
31	4(2,0F2)	0100E	0001F2	F2	24	-0.11080556058E-05	0.2205784E-06
32	4(4,0F1)	0100E	0001F2	F1	24	0.20983459410E-05	0.2506912E-06
33	4(4,0F2)	0100E	0001F2	F2	24	-0.24242495271E-05	0.4220846E-06
34	5(1,0F1)	0100E	0001F2	F1	25	-0.98383351540E-08	0.2232953E-08
35	5(3,0F1)	0100E	0001F2	F1	25	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
36	5(3,0F2)	0100E	0001F2	F2	25	-0.48645856458E-08	0.2595556E-08
37	5(5,0F1)	0100E	0001F2	F1	25	-0.29391516745E-07	0.3067519E-08
38	5(5,1F1)	0100E	0001F2	F1	25	-0.35920483850E-07	0.6553831E-08
39	5(5,0F2)	0100E	0001F2	F2	25	-0.26806969818E-07	0.2893564E-08
40	6(2,0F2)	0100E	0001F2	F2	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
41	6(4,0F1)	0100E	0001F2	F1	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
42	6(4,0F2)	0100E	0001F2	F2	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
43	6(6,0F1)	0100E	0001F2	F1	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
44	6(6,0F2)	0100E	0001F2	F2	26	-0.82749950650E-09	0.1151129E-09
45	6(6,1F2)	0100E	0001F2	F2	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
46	0(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	20	0.99787113407E+03	0.7589688E-04
47	1(1,0F1)	0001F2	0001F2	F1	21	0.38395327118E+01	0.3150933E-04
48	2(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	22	-0.22647094464E-02	0.3776173E-05
49	2(2,0E )	0001F2	0001F2	E	22	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
50	2(2,0F2)	0001F2	0001F2	F2	22	-0.13223472989E-01	0.2850002E-05
51	3(1,0F1)	0001F2	0001F2	F1	23	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
52	3(3,0F1)	0001F2	0001F2	F1	23	-0.51678558886E-04	0.4569700E-06
53	4(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	24	-0.55273261579E-06	0.1108947E-07
54	4(2,0E )	0001F2	0001F2	E	24	0.58865663147E-06	0.8925578E-07
55	4(2,0F2)	0001F2	0001F2	F2	24	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
56	4(4,0A1)	0001F2	0001F2	A1	24	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
57	4(4,0E )	0001F2	0001F2	E	24	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
58	4(4,0F2)	0001F2	0001F2	F2	24	-0.69915114428E-06	0.9155230E-07
59	5(1,0F1)	0001F2	0001F2	F1	25	-0.17007145702E-07	0.4511404E-08
60	5(3,0F1)	0001F2	0001F2	F1	25	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
61	5(5,0F1)	0001F2	0001F2	F1	25	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
62	5(5,1F1)	0001F2	0001F2	F1	25	-0.41858064612E-07	0.1086495E-07
63	6(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
64	6(2,0E )	0001F2	0001F2	E	26	-0.70783818920E-09	0.9912433E-10
65	6(2,0F2)	0001F2	0001F2	F2	26	-0.19586907622E-09	0.4638043E-10
66	6(4,0A1)	0001F2	0001F2	A1	26	-0.28496775599E-09	0.3274294E-10
67	6(4,0E )	0001F2	0001F2	E	26	0.35308050485E-09	0.9247041E-10
68	6(4,0F2)	0001F2	0001F2	F2	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
69	6(6,0A1)	0001F2	0001F2	A1	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
70	6(6,0E )	0001F2	0001F2	E	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
71	6(6,0F2)	0001F2	0001F2	F2	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00
72	6(6,1F2)	0001F2	0001F2	F2	26	0.00000000000E+00	0.0000000E+00

Ces paramètres déterminés dans notre analyse, permettent de faire un calcul du spectre relatif à la Diade et donc nous pouvons comparer ce spectre calculé au spectre expérimental.

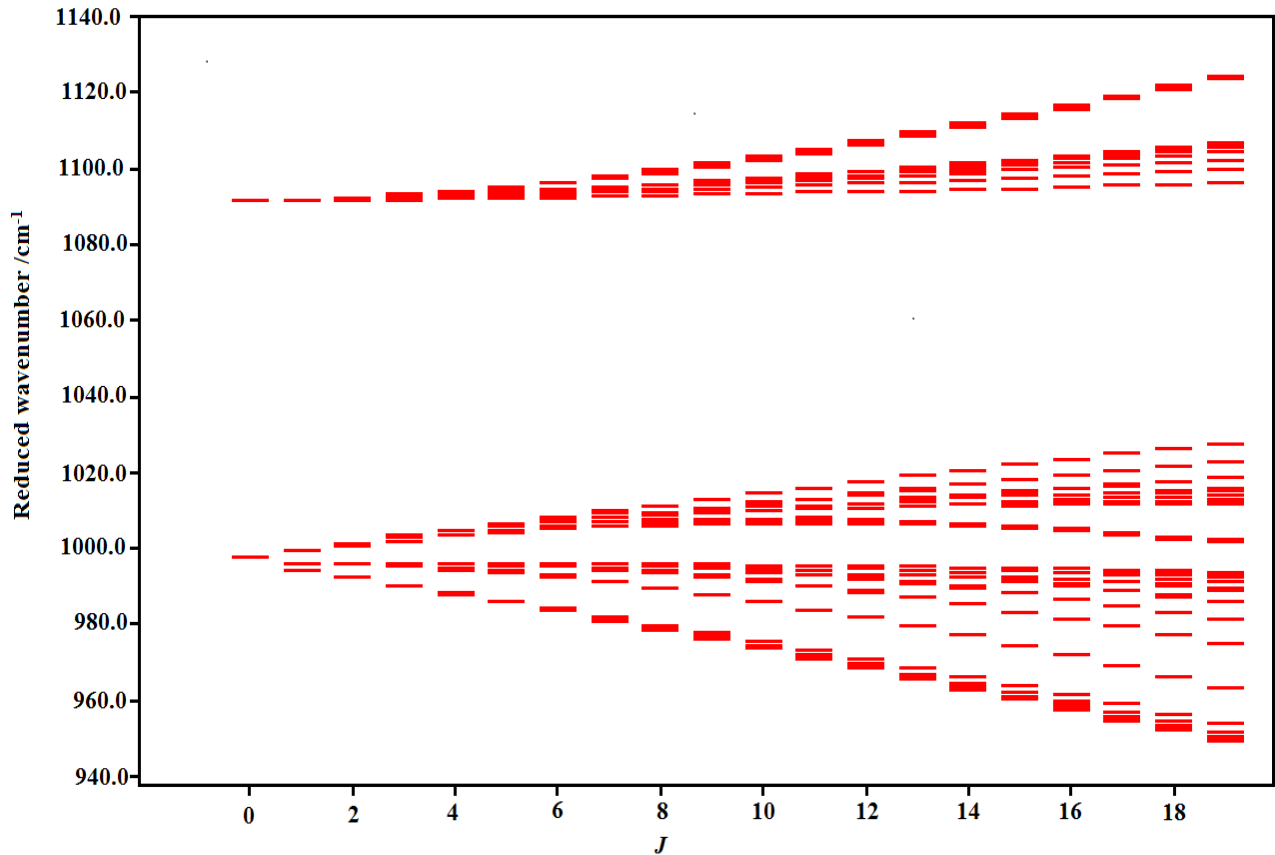
Dans la **figure III.1** nous avons reporté les écarts entre les nombres d'ondes observés et calculés des **731** données en fonction du nombre quantique rotationnel  $J$ . Dans la **figure III.2** nous avons représenté le diagramme énergétique de  $\nu_2$  et  $\nu_4$

**Fig III.1** : l'écart entre le nombre d'onde observé et calculé de la Diade





**Fig III.2:** Diagramme énergétique de  $\nu_2$  et  $\nu_4$



Dans le **tableau III.4**, nous reportons les attributions des 731 données et les comparés aux valeurs calculées avec nos paramètres.

Dans ce tableau les différentes colonnes représentent :

- 1<sup>ème</sup> colonne : nombre d'onde expérimental
- 2<sup>ème</sup> colonne : la différence entre le nombre d'onde calculé et le nombre d'onde observé.
- 3<sup>ème</sup> colonne : nombre d'onde calculé avec nos paramètres
- 4<sup>ème</sup> colonne : niveau d'énergie supérieur

Les colonnes 5, 6, 7, 8, 9,10 et 11 représentent les caractéristiques rovibrationnelles

**Tableau III.4** : 731 données attribuées de la Diade

$\sigma_{exp}$ Nombre d'onde exp./ $cm^{-1}$	$\sigma_{exp} - \sigma_{cal}$ / $10^{-3}cm^{-1}$	$\sigma_{cal}$ Nombre d'onde cal./ $cm^{-1}$	$E_{sup}$ Niveaux d'énergie sup. / $cm^{-1}$	Caractéristiques Rovibrationnelles des niveaux inférieurs			Caractéristiques Rovibrationnelles des niveaux supérieurs			branches
				$J_{inf}$	C	N	$J_{sup}$	C	N	
992.605900	0.113	992.605787	997.871134	1	F1	1	0	F2	1	P
999.494200	-0.169	999.494369	999.494369	0	A1	1	1	A2	1	R
989.155800	0.404	989.155396	1004.950734	2	E	1	1	E	1	P
988.944300	0.115	988.944185	1004.739588	2	F2	1	1	F1	1	P
984.836600	0.087	984.836513	1016.425672	3	A2	1	2	A1	1	P
1076.621800	0.054	1076.621746	1108.210904	3	A2	1	2	A1	2	P
995.712700	0.104	995.712596	1011.507935	2	E	1	2	E	1	Q
1092.031800	-0.014	1092.031814	1107.827153	2	E	1	2	E	2	Q
995.895000	-0.054	995.895054	1011.690457	2	F2	1	2	F1	1	Q
1001.078000	-0.139	1001.078139	1016.873543	2	F2	1	2	F1	2	Q
1076.431500	0.724	1076.430776	1108.019608	3	F2	1	2	F1	3	P
1002.818200	0.103	1002.818097	1008.083444	1	F1	1	2	F2	1	R
985.615400	-0.115	985.615515	1017.204086	3	F1	1	2	F2	2	P
996.167900	0.203	996.167697	1027.756856	3	A2	1	3	A1	1	Q
982.244300	-0.004	982.244304	1034.886917	4	A1	1	3	A2	1	P
1006.093000	-0.184	1006.093184	1021.888522	2	E	1	3	E	1	R
981.683600	-0.027	981.683627	1034.327024	4	E	1	3	E	2	P
1071.394400	-0.323	1071.394723	1124.038120	4	E	1	3	E	3	P
1006.045100	-0.051	1006.045151	1021.840554	2	F2	1	3	F1	1	R
1107.953400	0.607	1107.952793	1123.748196	2	F2	1	3	F1	4	R
990.252100	0.377	990.251723	1021.840554	3	F2	1	3	F1	1	Q
1002.078300	0.090	1002.078210	1033.667041	3	F2	1	3	F1	3	Q
1093.075400	-0.266	1093.075666	1124.664497	3	F2	1	3	F1	5	Q
974.569000	0.443	974.568557	1027.212933	4	F2	1	3	F1	2	P
981.022600	-0.066	981.022666	1033.667041	4	F2	1	3	F1	3	P
1072.020500	0.378	1072.020122	1124.664497	4	F2	1	3	F1	5	P
995.257900	0.117	995.257783	1026.846353	3	F1	1	3	F2	1	Q
1002.986000	-0.057	1002.986057	1034.574628	3	F1	1	3	F2	2	Q
1092.659500	0.016	1092.659484	1124.248055	3	F1	1	3	F2	4	Q
981.931400	-0.157	981.931557	1034.574628	4	F1	1	3	F2	2	P
1009.086000	-0.257	1009.086257	1040.675415	3	A2	1	4	A1	1	R
1113.465600	0.231	1113.465369	1145.054528	3	A2	1	4	A1	2	R
994.414400	0.158	994.414242	1047.056856	4	A1	1	4	A2	1	Q
1093.315100	0.197	1093.314903	1145.957516	4	A1	1	4	A2	2	Q
994.967500	-0.019	994.967519	1047.610916	4	E	1	4	E	1	Q
1003.540500	-0.127	1003.540627	1056.184023	4	E	1	4	E	2	Q
1093.967700	0.013	1093.967687	1146.611084	4	E	1	4	E	4	Q
968.652200	-0.333	968.652533	1047.610916	5	E	1	4	E	1	P
977.225500	-0.140	977.225640	1056.184023	5	E	1	4	E	2	P
1067.652800	0.099	1067.652701	1146.611084	5	E	1	4	E	4	P
1009.208000	-0.059	1009.208059	1040.796890	3	F2	1	4	F1	1	R
1113.851800	-4.057	1113.855857	1145.444689	3	F2	1	4	F1	5	R
996.013800	-0.069	996.013869	1048.658244	4	F2	1	4	F1	2	Q
1092.800200	-0.114	1092.800314	1145.444689	4	F2	1	4	F1	5	Q
978.126300	-0.105	978.126405	1057.082507	5	F2	1	4	F1	3	P
1066.488900	0.312	1066.488588	1145.444689	5	F2	1	4	F1	5	P
1009.314600	-0.072	1009.314672	1040.903242	3	F1	1	4	F2	1	R
1114.097100	0.099	1114.097001	1145.685571	3	F1	1	4	F2	5	R
1003.280800	0.090	1003.280710	1055.923780	4	F1	1	4	F2	3	Q
1004.871000	-0.037	1004.871037	1057.514107	4	F1	1	4	F2	4	Q
1093.042500	-0.001	1093.042501	1145.685571	4	F1	1	4	F2	5	Q
1093.921400	0.124	1093.921276	1146.564346	4	F1	1	4	F2	6	Q
976.964800	-0.173	976.964973	1055.923780	5	F1	2	4	F2	3	P
978.558800	-0.088	978.558888	1057.514107	5	F1	1	4	F2	4	P
1067.605600	0.061	1067.605539	1146.564346	5	F1	2	4	F2	6	P
974.379600	0.069	974.379531	1084.903306	6	A2	1	5	A1	1	P
1061.193800	0.088	1061.193712	1171.717488	6	A2	1	5	A1	2	P
1012.573300	0.147	1012.573153	1065.215767	4	A1	1	5	A2	1	R
1121.108500	0.076	1121.108424	1173.751037	4	A1	1	5	A2	3	R
972.482900	0.139	972.482761	1083.012790	6	A1	1	5	A2	2	P
1063.221200	0.193	1063.221007	1173.751037	6	A1	1	5	A2	3	P
1012.359600	-0.027	1012.359627	1065.003024	4	E	1	5	E	1	R
1119.788000	-0.069	1119.788069	1172.431466	4	E	1	5	E	4	R
995.669700	0.062	995.669638	1074.628021	5	E	1	5	E	2	Q
1093.473400	0.317	1093.473083	1172.431466	5	E	1	5	E	4	Q
974.938700	-0.078	974.938778	1085.460985	6	E	1	5	E	3	P
1061.909500	0.241	1061.909259	1172.431466	6	E	1	5	E	4	P
1012.136000	0.064	1012.135936	1064.780311	4	F2	1	5	F1	1	R
1118.664400	0.321	1118.664079	1171.308455	4	F2	1	5	F1	5	R

1119.551600	0.034	1119.551566	1172.195941	4	F2	1	5	F1	6	R
1004.882300	0.064	1004.882236	1083.838337	5	F2	1	5	F1	3	Q
1093.240000	0.160	1093.239840	1172.195941	5	F2	1	5	F1	6	Q
1095.068800	0.003	1095.068797	1174.024898	5	F2	1	5	F1	7	Q
962.437500	-0.047	962.437547	1072.965493	6	F2	2	5	F1	2	P
973.310400	0.008	973.310392	1083.838337	6	F2	2	5	F1	3	P
974.822200	0.025	974.822175	1085.344772	6	F2	1	5	F1	4	P
1061.672500	-0.845	1061.673345	1172.195941	6	F2	1	5	F1	6	P
1063.496900	-0.052	1063.496952	1174.024898	6	F2	2	5	F1	7	P
1012.446200	-0.100	1012.446300	1065.089370	4	F1	1	5	F2	1	R
1022.198600	-0.307	1022.198907	1074.841978	4	F1	1	5	F2	3	R
1030.764300	-0.781	1030.765081	1083.408151	4	F1	1	5	F2	4	R
993.675900	0.152	993.675748	1072.630968	5	F1	1	5	F2	2	Q
995.883100	-0.070	995.883170	1074.841978	5	F1	2	5	F2	3	Q
1093.761600	-0.259	1093.761859	1172.717079	5	F1	1	5	F2	6	Q
1094.977100	-0.054	1094.977154	1173.932374	5	F1	1	5	F2	7	Q
962.102300	0.384	962.101916	1072.965068	6	F1	1	5	F2	2	P
972.878800	-0.299	972.879099	1083.408151	6	F1	1	5	F2	4	P
1063.403500	0.178	1063.403322	1173.932374	6	F1	1	5	F2	7	P
992.932400	-0.118	992.932518	1103.456294	6	A2	1	6	A1	1	Q
1006.821800	0.044	1006.821756	1117.345532	6	A2	1	6	A1	2	Q
1096.410800	-0.188	1096.410988	1206.934763	6	A2	1	6	A1	3	Q
956.108900	-0.425	956.109325	1103.456294	7	A2	1	6	A1	1	P
969.998700	0.138	969.998562	1117.345532	7	A2	1	6	A1	2	P
996.059800	0.089	996.059711	1106.589740	6	A1	1	6	A2	1	Q
1092.421800	0.529	1092.421271	1202.951300	6	A1	1	6	A2	2	Q
1015.151900	-0.027	1015.151927	1094.110311	5	E	1	6	E	1	R
1037.175100	-0.428	1037.175528	1116.133911	5	E	1	6	E	3	R
1124.105800	0.702	1124.105098	1203.063481	5	E	1	6	E	4	R
1125.767600	0.242	1125.767358	1204.725741	5	E	1	6	E	5	R
1005.611500	-0.204	1005.611704	1116.133911	6	E	1	6	E	3	Q
1094.203700	0.166	1094.203534	1204.725741	6	E	1	6	E	5	Q
1096.283700	-0.008	1096.283708	1206.805916	6	E	1	6	E	6	Q
968.783000	-0.026	968.783026	1116.133911	7	E	1	6	E	3	P
1057.374400	-0.456	1057.374856	1204.725741	7	E	1	6	E	5	P
1059.454900	-0.130	1059.455030	1206.805916	7	E	1	6	E	6	P
1015.504400	0.472	1015.503928	1094.460030	5	F2	1	6	F1	1	R
1026.772500	0.083	1026.772417	1105.728519	5	F2	1	6	F1	3	R
1125.970900	0.096	1125.970804	1204.926905	5	F2	1	6	F1	7	R
983.932000	-0.084	983.932084	1094.460030	6	F2	2	6	F1	1	Q
992.683400	-0.133	992.683533	1103.206130	6	F2	1	6	F1	2	Q
995.200700	0.127	995.200573	1105.728519	6	F2	2	6	F1	3	Q
1006.021900	-0.092	1006.021992	1116.544588	6	F2	1	6	F1	4	Q
1096.337900	-0.162	1096.338062	1206.860658	6	F2	1	6	F1	8	Q
955.856700	0.086	955.856614	1103.206130	7	F2	2	6	F1	2	P
958.379100	0.097	958.379003	1105.728519	7	F2	2	6	F1	3	P
969.194700	-0.372	969.195072	1116.544588	7	F2	2	6	F1	4	P
971.109100	0.011	971.109089	1118.449230	7	F2	1	6	F1	5	P
1056.400800	0.474	1056.400326	1203.740467	7	F2	1	6	F1	6	P
1057.577100	-0.289	1057.577389	1204.926905	7	F2	2	6	F1	7	P
1059.511100	-0.043	1059.511143	1206.860658	7	F2	2	6	F1	8	P
1015.085800	0.087	1015.085713	1094.044521	5	F1	2	6	F2	1	R
1015.672600	-0.437	1015.673037	1094.628256	5	F1	1	6	F2	2	R
1036.615000	-0.055	1036.615055	1115.570275	5	F1	1	6	F2	4	R
1125.417800	0.344	1125.417456	1204.376263	5	F1	2	6	F2	7	R
1127.553200	0.212	1127.552988	1206.508207	5	F1	1	6	F2	8	R
984.099000	-0.204	984.099204	1094.628256	6	F1	1	6	F2	2	Q
1005.041300	0.077	1005.041223	1115.570275	6	F1	1	6	F2	4	Q
1008.121800	0.254	1008.121546	1118.650598	6	F1	1	6	F2	5	Q
1092.490500	0.079	1092.490421	1203.019472	6	F1	1	6	F2	6	Q
1093.847200	-0.011	1093.847211	1204.376263	6	F1	1	6	F2	7	Q
947.275600	0.337	947.275263	1094.628256	7	F1	2	6	F2	2	P
958.792400	-0.086	958.792486	1106.145479	7	F1	2	6	F2	3	P
968.217400	0.118	968.217282	1115.570275	7	F1	2	6	F2	4	P
971.311500	0.169	971.311331	1118.650598	7	F1	1	6	F2	5	P
1057.037000	0.004	1057.036996	1204.376263	7	F1	1	6	F2	7	P
1059.155200	-0.015	1059.155215	1206.508207	7	F1	2	6	F2	8	P
1018.558500	0.159	1018.558341	1129.082116	6	A2	1	7	A1	1	R
1031.053300	0.291	1031.053009	1141.576784	6	A2	1	7	A1	2	R
1132.045700	-0.173	1132.045873	1242.569648	6	A2	1	7	A1	3	R
981.735000	-0.147	981.735147	1129.082116	7	A2	1	7	A1	1	Q
994.229900	0.085	994.229815	1141.576784	7	A2	1	7	A1	2	Q
1095.222500	-0.179	1095.222679	1242.569648	7	A2	1	7	A1	3	Q
1017.888900	-0.052	1017.888952	1128.418981	6	A1	1	7	A2	1	R
1131.208600	0.156	1131.208444	1241.738473	6	A1	1	7	A2	3	R

967.754000	0.163	967.753837	1157.154620	8	A1	1	7	A2	2	P
1052.337500	-0.191	1052.337691	1241.738473	8	A1	1	7	A2	3	P
1018.776800	0.126	1018.776674	1129.298881	6	E	1	7	E	1	R
1031.884000	-3.681	1031.887681	1142.409888	6	E	1	7	E	2	R
1042.905100	0.119	1042.904981	1153.427189	6	E	1	7	E	3	R
1134.209600	-0.124	1134.209724	1244.731932	6	E	1	7	E	6	R
981.947800	-0.196	981.947996	1129.298881	7	E	1	7	E	1	Q
1006.076600	0.297	1006.076303	1153.427189	7	E	1	7	E	3	Q
1009.571800	0.616	1009.571184	1156.922070	7	E	1	7	E	4	Q
1093.644300	0.452	1093.643848	1240.994733	7	E	1	7	E	5	Q
952.986700	0.009	952.986691	1142.409888	8	E	2	7	E	2	P
964.004000	0.008	964.003992	1153.427189	8	E	2	7	E	3	P
967.520200	0.189	967.520011	1156.922070	8	E	1	7	E	4	P
1051.593500	0.826	1051.592674	1240.994733	8	E	1	7	E	5	P
1055.308800	0.065	1055.308735	1244.731932	8	E	2	7	E	6	P
1018.107200	-0.090	1018.107290	1128.635235	6	F2	2	7	F1	1	R
1018.723000	0.167	1018.722833	1129.245430	6	F2	1	7	F1	2	R
1031.557200	-0.090	1031.557290	1142.079886	6	F2	1	7	F1	4	R
1129.551200	0.208	1129.550992	1240.078938	6	F2	2	7	F1	7	R
1134.141500	-0.329	1134.141829	1244.664426	6	F2	1	7	F1	9	R
981.285700	-0.020	981.285720	1128.635235	7	F2	2	7	F1	1	Q
981.896600	0.686	981.895914	1129.245430	7	F2	2	7	F1	2	Q
991.395400	0.198	991.395202	1138.735343	7	F2	1	7	F1	3	Q
994.730600	0.230	994.730370	1142.079886	7	F2	2	7	F1	4	Q
1005.744800	-0.321	1005.745121	1153.094637	7	F2	2	7	F1	5	Q
1008.017600	0.167	1008.017433	1155.357574	7	F2	1	7	F1	6	Q
1008.008100	0.042	1008.008058	1155.357574	7	F2	2	7	F1	6	Q
1095.018400	-0.027	1095.018427	1242.358568	7	F2	1	7	F1	8	Q
1095.008800	-0.252	1095.009052	1242.358568	7	F2	2	7	F1	8	Q
1097.315300	0.390	1097.314910	1244.664426	7	F2	2	7	F1	9	Q
1097.868500	0.027	1097.868473	1245.208614	7	F2	1	7	F1	10	Q
939.209900	-0.912	939.210812	1128.635235	8	F2	2	7	F1	1	P
949.321000	0.134	949.320866	1138.735343	8	F2	1	7	F1	3	P
952.665400	-0.009	952.665409	1142.079886	8	F2	1	7	F1	4	P
952.655700	0.237	952.655463	1142.079886	8	F2	2	7	F1	4	P
963.670500	0.287	963.670213	1153.094637	8	F2	2	7	F1	5	P
965.943200	0.104	965.943096	1155.357574	8	F2	1	7	F1	5	P
1055.240200	0.198	1055.240002	1244.664426	8	F2	2	7	F1	9	P
1055.793900	-0.236	1055.794136	1245.208614	8	F2	1	7	F1	10	P
1017.988600	-0.135	1017.988735	1128.517787	6	F1	1	7	F2	1	R
1032.678000	0.386	1032.677614	1143.206666	6	F1	1	7	F2	3	R
1131.590900	0.033	1131.590867	1242.119919	6	F1	1	7	F2	8	R
991.259600	0.042	991.259558	1138.598825	7	F1	1	7	F2	2	Q
995.853800	0.127	995.853673	1143.206666	7	F1	2	7	F2	3	Q
1006.841200	0.027	1006.841173	1154.180440	7	F1	1	7	F2	4	Q
1092.670800	-0.178	1092.670978	1240.023970	7	F1	2	7	F2	6	Q
1097.791300	0.057	1097.791243	1245.130510	7	F1	1	7	F2	9	Q
949.180200	0.492	949.179708	1138.598825	8	F1	2	7	F2	2	P
964.761500	0.176	964.761324	1154.180440	8	F1	2	7	F2	4	P
967.610700	-0.070	967.610770	1157.012357	8	F1	1	7	F2	5	P
1055.711500	0.107	1055.711393	1245.130510	8	F1	2	7	F2	9	P
1021.188100	-0.061	1021.188161	1168.535130	7	A2	1	8	A1	1	R
1135.027900	0.487	1135.027413	1282.374382	7	A2	1	8	A1	3	R
1140.783700	0.249	1140.783451	1288.130420	7	A2	1	8	A1	4	R
958.714900	0.137	958.714763	1195.455281	9	A2	1	8	A1	2	P
1051.390100	0.198	1051.389902	1288.130420	9	A2	1	8	A1	4	P
989.684300	-0.113	989.684413	1179.085196	8	A1	1	8	A2	1	Q
1007.721400	0.035	1007.721365	1197.122148	8	A1	1	8	A2	2	Q
1094.730900	0.087	1094.730813	1284.131596	8	A1	1	8	A2	3	Q
1099.441300	0.030	1099.441270	1288.842052	8	A1	1	8	A2	4	Q
942.355100	0.039	942.355061	1179.085196	9	A1	1	8	A2	1	P
960.392000	-0.013	960.392013	1197.122148	9	A1	1	8	A2	2	P
1047.401400	-0.061	1047.401461	1284.131596	9	A1	1	8	A2	3	P
1052.111800	-0.118	1052.111918	1288.842052	9	A1	1	8	A2	4	P
1020.865100	-0.261	1020.865361	1168.216246	7	E	1	8	E	1	R
1037.511500	0.467	1037.511033	1184.861918	7	E	1	8	E	3	R
1137.715700	-0.116	1137.715816	1285.066702	7	E	1	8	E	6	R
989.806500	-0.054	989.806554	1179.208613	8	E	1	8	E	2	Q
995.438800	0.079	995.438721	1184.861918	8	E	2	8	E	3	Q
1009.284200	-0.264	1009.284464	1198.707661	8	E	2	8	E	4	Q
1095.664900	0.257	1095.664643	1285.066702	8	E	1	8	E	6	Q
1095.643100	-0.405	1095.643505	1285.066702	8	E	2	8	E	6	Q
1099.522100	-0.163	1099.522263	1288.924322	8	E	1	8	E	7	Q
948.139300	-0.326	948.139626	1184.861918	9	E	1	8	E	3	P
961.985200	-0.169	961.985369	1198.707661	9	E	1	8	E	4	P
1052.201900	-0.130	1052.202030	1288.924322	9	E	1	8	E	7	P
1020.972700	0.012	1020.972688	1168.322204	7	F2	2	8	F1	1	R
1021.760300	0.058	1021.760242	1169.100383	7	F2	1	8	F1	2	R
1035.661900	0.190	1035.661710	1183.001851	7	F2	1	8	F1	3	R

1048.511700	0.059	1048.511641	1195.851782	7	F2	1	8	F1	5	R
1048.502200	-0.066	1048.502266	1195.851782	7	F2	2	8	F1	5	R
1134.989700	-0.214	1134.989914	1282.339430	7	F2	2	8	F1	7	R
1136.165600	-0.705	1136.166305	1283.515821	7	F2	2	8	F1	8	R
1137.967300	-0.139	1137.967439	1285.307580	7	F2	1	8	F1	9	R
1137.958000	-0.064	1137.958064	1285.307580	7	F2	2	8	F1	9	R
1140.916700	0.020	1140.916680	1288.256821	7	F2	1	8	F1	10	R
1140.906800	-0.505	1140.907305	1288.256821	7	F2	2	8	F1	10	R
978.907500	-0.226	978.907726	1168.322204	8	F2	1	8	F1	1	Q
979.686100	0.194	979.685906	1169.100383	8	F2	1	8	F1	2	Q
993.587400	0.027	993.587373	1183.001851	8	F2	1	8	F1	3	Q
995.700900	0.159	995.700741	1185.125165	8	F2	2	8	F1	4	Q
1006.437600	0.295	1006.437305	1195.851782	8	F2	1	8	F1	5	Q
1094.091500	0.102	1094.091398	1283.515821	8	F2	2	8	F1	8	Q
1095.893000	-0.102	1095.893102	1285.307580	8	F2	1	8	F1	9	Q
1098.842400	0.057	1098.842343	1288.256821	8	F2	1	8	F1	10	Q
946.264000	0.726	946.263274	1183.001851	9	F2	2	8	F1	3	P
948.422500	0.157	948.422343	1185.125165	9	F2	1	8	F1	4	P
948.386400	-0.188	948.386588	1185.125165	9	F2	2	8	F1	4	P
959.113300	0.095	959.113205	1195.851782	9	F2	2	8	F1	5	P
963.927700	0.018	963.927682	1200.630503	9	F2	1	8	F1	6	P
1046.813100	0.101	1046.812999	1283.515821	9	F2	1	8	F1	6	P
1051.518300	0.056	1051.518244	1288.256821	9	F2	2	8	F1	10	P
1020.711600	-0.262	1020.711862	1168.064855	7	F1	2	8	F2	1	R
1021.851200	-0.056	1021.851256	1169.190523	7	F1	1	8	F2	2	R
1036.271000	0.039	1036.270961	1183.610228	7	F1	1	8	F2	4	R
1048.984700	-0.141	1048.984841	1196.324108	7	F1	1	8	F2	5	R
1051.136700	-0.196	1051.136896	1198.476163	7	F1	1	8	F2	5	R
1136.348100	-0.161	1136.348261	1283.701253	7	F1	2	8	F2	8	R
1137.493900	0.110	1137.493790	1284.846783	7	F1	2	8	F2	9	R
1141.034200	-0.006	1141.034206	1288.373473	7	F1	1	8	F2	10	R
979.771700	0.294	979.771406	1169.190523	8	F1	2	8	F2	2	Q
989.764100	-0.143	989.764243	1179.165830	8	F1	1	8	F2	3	Q
994.191300	0.189	994.191111	1183.610228	8	F1	2	8	F2	4	Q
1009.074700	0.124	1009.074576	1198.476163	8	F1	1	8	F2	6	Q
1009.057000	-0.047	1009.057047	1198.476163	8	F1	2	8	F2	6	Q
1098.954800	0.443	1098.954357	1288.373473	8	F1	2	8	F2	10	Q
1099.500400	-0.037	1099.500437	1288.902024	8	F1	1	8	F2	11	Q
942.441900	-0.087	942.441987	1179.165830	9	F1	2	8	F2	3	P
942.429800	0.065	942.429735	1179.165830	9	F1	3	8	F2	3	P
946.886600	0.215	946.886385	1183.610228	9	F1	2	8	F2	4	P
946.874300	0.167	946.874133	1183.610228	9	F1	3	8	F2	4	P
959.588300	0.287	959.588013	1196.324108	9	F1	3	8	F2	5	P
961.752200	-0.120	961.752320	1198.476163	9	F1	2	8	F2	6	P
964.053200	-0.167	964.053367	1200.755362	9	F1	1	8	F2	7	P
1051.637500	0.121	1051.637379	1288.373473	9	F1	3	8	F2	10	P
1052.178200	0.019	1052.178181	1288.902024	9	F1	2	8	F2	11	P
995.831100	0.007	995.831093	1232.571611	9	A2	1	9	A1	1	Q
1012.774500	-0.050	1012.774550	1249.515068	9	A2	1	9	A1	2	Q
1094.468200	0.221	1094.467979	1331.208497	9	A2	1	9	A1	3	Q
960.279000	0.068	960.278932	1249.515068	10	A2	1	9	A1	2	P
1024.932100	-0.003	1024.932103	1214.332886	8	A1	1	9	A2	1	R
1040.637600	0.008	1040.637592	1230.038374	8	A1	1	9	A2	2	R
1056.599500	0.001	1056.599499	1246.000281	8	A1	1	9	A2	3	R
1148.113200	0.207	1148.112993	1337.513776	8	A1	1	9	A2	4	R
977.602600	-0.151	977.602751	1214.332886	9	A1	1	9	A2	1	Q
993.308300	0.060	993.308240	1230.038374	9	A1	1	9	A2	2	Q
1009.270100	-0.047	1009.270147	1246.000281	9	A1	1	9	A2	3	Q
1100.783800	0.159	1100.783641	1337.513776	9	A1	1	9	A2	4	Q
940.760800	0.028	940.760772	1230.038374	10	A1	1	9	A2	2	P
956.722500	-0.179	956.722679	1246.000281	10	A1	1	9	A2	3	P
1048.236200	0.027	1048.236173	1337.513776	10	A1	1	9	A2	4	P
1023.514000	0.216	1023.513784	1212.936981	8	E	2	9	E	1	R
1024.828800	-0.048	1024.828848	1214.230907	8	E	1	9	E	2	R
1039.941300	0.252	1039.941048	1229.343107	8	E	1	9	E	3	R
1054.364500	-0.565	1054.365065	1243.767124	8	E	1	9	E	4	R
1054.343900	-0.027	1054.343927	1243.767124	8	E	2	9	E	4	R
1142.022900	0.145	1142.022755	1331.445952	8	E	2	9	E	6	R
1143.840400	-0.180	1143.840580	1333.263777	8	E	2	9	E	7	R
977.508600	-0.015	977.508615	1214.230907	9	E	1	9	E	7	Q
992.620900	0.085	992.620815	1229.343107	9	E	1	9	E	3	Q
1007.044900	0.068	1007.044832	1243.767124	9	E	1	9	E	4	Q
1096.541300	-0.185	1096.541485	1333.263777	9	E	1	9	E	4	Q
1100.573400	0.186	1100.573214	1337.295506	9	E	1	9	E	8	Q
954.477500	0.008	954.477492	1243.767124	10	E	2	9	E	4	P
960.411800	-0.001	960.411801	1249.646825	10	E	1	9	E	5	P
1023.446500	-0.252	1023.446752	1212.871175	8	F2	2	9	F1	1	R
1024.023300	0.111	1024.023189	1213.437666	8	F2	1	9	F1	2	R
1042.723400	0.339	1042.723061	1232.137539	8	F2	1	9	F1	4	R

1053.857600	0.305	1053.857295	1243.271773	8	F2	1	9	F1	5	R
1057.854900	-0.163	1057.855063	1247.279486	8	F2	2	9	F1	6	R
1140.477700	-0.116	1140.477816	1329.892293	8	F2	1	9	F1	8	R
1141.926500	-0.121	1141.926621	1331.351044	8	F2	2	9	F1	9	R
1143.546100	0.089	1143.546011	1332.970435	8	F2	2	9	F1	10	R
976.698500	-0.589	976.699089	1213.437666	9	F2	2	9	F1	2	Q
988.044700	-0.019	988.044719	1224.747540	9	F2	1	9	F1	3	Q
995.398900	-0.062	995.398962	1232.137539	9	F2	2	9	F1	4	Q
1010.576800	0.135	1010.576665	1247.279486	9	F2	1	9	F1	6	Q
1010.541200	0.291	1010.540909	1247.279486	9	F2	2	9	F1	6	Q
1094.612400	-0.067	1094.612467	1331.351044	9	F2	2	9	F1	9	Q
1096.267400	-0.213	1096.267613	1332.970435	9	F2	1	9	F1	10	Q
1101.331100	-0.025	1101.331125	1338.033947	9	F2	1	9	F1	12	Q
935.482700	-0.324	935.483024	1224.747540	10	F2	2	9	F1	3	P
942.873500	0.477	942.873023	1232.137539	10	F2	2	9	F1	4	P
942.845100	0.539	942.844561	1232.137539	10	F2	3	9	F1	4	P
953.978700	-0.095	953.978795	1243.271773	10	F2	3	9	F1	5	P
958.015100	0.130	958.014970	1247.279486	10	F2	2	9	F1	6	P
960.371300	-0.027	960.371327	1249.606730	10	F2	1	9	F1	7	P
1047.813600	0.061	1047.813539	1337.106517	10	F2	3	9	F1	11	P
1048.769400	-0.030	1048.769430	1338.033947	10	F2	2	9	F1	12	P
1023.737300	0.149	1023.737151	1213.156268	8	F1	2	9	F2	1	R
1024.867200	0.246	1024.866954	1214.268541	8	F1	1	9	F2	2	R
1040.114000	-0.044	1040.114044	1229.515631	8	F1	1	9	F2	4	R
1040.096100	-0.414	1040.096514	1229.515631	8	F1	2	9	F2	4	R
1042.245400	0.119	1042.245281	1231.664398	8	F1	2	9	F2	5	R
1140.454800	0.143	1140.454657	1329.873774	8	F1	2	9	F2	8	R
1143.998400	-0.028	1143.998428	1333.417544	8	F1	2	9	F2	10	R
1147.980200	0.112	1147.980088	1337.381675	8	F1	1	9	F2	11	R
976.432200	-0.225	976.432425	1213.156268	9	F1	2	9	F2	1	Q
976.420400	0.227	976.420173	1213.156268	9	F1	3	9	F2	1	Q
977.544900	0.202	977.544698	1214.268541	9	F1	2	9	F2	2	Q
987.997500	0.031	987.997469	1224.699465	9	F1	1	9	F2	3	Q
992.792100	0.312	992.791788	1229.515631	9	F1	2	9	F2	4	Q
992.779700	0.164	992.779536	1229.515631	9	F1	3	9	F2	4	Q
994.940200	-0.355	994.940555	1231.664398	9	F1	2	9	F2	5	Q
994.928200	-0.104	994.928304	1231.664398	9	F1	3	9	F2	5	Q
1007.532700	-0.059	1007.532759	1244.234755	9	F1	1	9	F2	6	Q
1007.510400	-0.512	1007.510912	1244.234755	9	F1	2	9	F2	6	Q
1007.498500	-0.160	1007.498660	1244.234755	9	F1	3	9	F2	6	Q
1010.156300	-0.096	1010.156396	1246.858391	9	F1	1	9	F2	7	Q
1010.134400	-0.148	1010.134548	1246.858391	9	F1	2	9	F2	7	Q
1010.122400	0.103	1010.122297	1246.858391	9	F1	3	9	F2	7	Q
1093.137800	0.121	1093.137679	1329.873774	9	F1	3	9	F2	8	Q
1096.693700	-0.001	1096.693701	1333.417544	9	F1	2	9	F2	10	Q
1096.681500	0.050	1096.681450	1333.417544	9	F1	3	9	F2	10	Q
1100.658000	0.168	1100.657832	1337.381675	9	F1	2	9	F2	11	Q
1101.302200	0.093	1101.302107	1338.004102	9	F1	1	9	F2	12	Q
935.431500	0.049	935.431451	1224.699465	10	F1	1	9	F2	3	P
940.229300	0.304	940.228996	1229.515631	10	F1	2	9	F2	4	P
954.948100	-0.020	954.948120	1244.234755	10	F1	2	9	F2	6	P
957.590400	0.022	957.590378	1246.858391	10	F1	1	9	F2	7	P
957.571800	0.044	957.571756	1246.858391	10	F1	2	9	F2	7	P
1048.736000	-0.089	1048.736089	1338.004102	10	F1	1	9	F2	12	P
1026.073500	0.022	1026.073478	1262.813996	9	A2	1	10	A1	1	R
1064.559000	0.109	1064.558891	1301.299409	9	A2	1	10	A1	3	R
1149.513900	-0.029	1149.513929	1386.254447	9	A2	1	10	A1	4	R
986.139500	0.112	986.139388	1275.375524	10	A2	1	10	A1	2	Q
1012.063300	0.027	1012.063273	1301.299409	10	A2	1	10	A1	3	Q
1103.285600	-0.123	1103.285723	1392.521858	10	A2	1	10	A1	5	Q
954.267500	0.021	954.267479	1301.299409	11	A2	1	10	A1	3	P
1045.489900	-0.028	1045.489928	1392.521858	11	A2	1	10	A1	5	P
1026.505200	0.171	1026.505029	1263.235164	9	A1	1	10	A2	1	R
1046.256800	-0.098	1046.256898	1282.987033	9	A1	1	10	A2	2	R
1150.163300	-0.087	1150.163387	1386.893522	9	A1	1	10	A2	4	R
973.957300	-0.261	973.957561	1263.235164	10	A1	1	10	A2	1	Q
1097.615800	-0.119	1097.615919	1386.893522	10	A1	1	10	A2	4	Q
1026.866000	-0.051	1026.866051	1263.588343	9	E	1	10	E	1	R
1047.418600	0.106	1047.418494	1284.140786	9	E	1	10	E	3	R
1059.648700	-0.092	1059.648792	1296.371084	9	E	1	10	E	4	R
1154.781500	0.563	1154.780937	1391.503229	9	E	1	10	E	8	R
974.298800	0.089	974.298711	1263.588343	10	E	2	10	E	1	Q
986.101100	-0.173	986.101273	1275.336337	10	E	1	10	E	2	Q
1007.081400	-0.053	1007.081453	1296.371084	10	E	2	10	E	4	Q
1096.104500	-0.704	1096.105204	1385.340268	10	E	1	10	E	7	Q
1102.209500	-4.097	1102.213597	1391.503229	10	E	2	10	E	8	Q
1103.261300	-0.054	1103.261354	1392.496418	10	E	1	10	E	9	Q
949.295500	0.155	949.295345	1296.371084	11	E	2	10	E	4	P
953.641300	0.198	953.641102	1300.678898	11	E	1	10	E	5	P

1044.427800	0.311	1044.427489	1391.503229	11	E	2	10	E	8	P
1045.458600	-0.021	1045.458621	1392.496418	11	E	1	10	E	9	P
1026.151800	-0.028	1026.151828	1262.890406	9	F2	2	10	F1	1	R
1027.869500	0.063	1027.869437	1264.572258	9	F2	1	10	F1	2	R
1044.025400	0.028	1044.025372	1280.728194	9	F2	1	10	F1	4	R
1064.192800	-0.294	1064.193094	1300.931671	9	F2	2	10	F1	7	R
1147.553200	0.211	1147.552989	1384.291566	9	F2	2	10	F1	9	R
1149.817800	-0.030	1149.817830	1386.556407	9	F2	2	10	F1	11	R
1155.050500	0.051	1155.050449	1391.753271	9	F2	1	10	F1	12	R
975.308000	0.258	975.307742	1264.572258	10	F2	2	10	F1	2	Q
986.113700	-0.158	986.113858	1275.349261	10	F2	1	10	F1	3	Q
991.463900	0.223	991.463677	1280.728194	10	F2	2	10	F1	4	Q
995.594500	0.112	995.594388	1284.858904	10	F2	2	10	F1	5	Q
995.565900	-0.026	995.565926	1284.858904	10	F2	3	10	F1	5	Q
1007.697800	-0.083	1007.697883	1296.962399	10	F2	2	10	F1	6	Q
1011.638600	-0.093	1011.638693	1300.931671	10	F2	3	10	F1	7	Q
1094.998800	0.212	1094.998588	1384.291566	10	F2	3	10	F1	9	Q
1096.206200	-0.046	1096.206246	1385.470763	10	F2	2	10	F1	10	Q
1097.291800	-0.091	1097.291891	1386.556407	10	F2	2	10	F1	11	Q
1097.267100	3.671	1097.263429	1386.556407	10	F2	3	10	F1	11	Q
1102.488800	0.046	1102.488754	1391.753271	10	F2	2	10	F1	12	Q
1103.270100	0.041	1103.270059	1392.505461	10	F2	1	10	F1	13	Q
933.657800	-0.158	933.657958	1280.728194	11	F2	3	10	F1	4	P
949.892100	-0.064	949.892164	1296.962399	11	F2	3	10	F1	6	P
953.896400	0.232	953.896168	1300.931671	11	F2	2	10	F1	7	P
956.712400	-0.108	956.712508	1303.706000	11	F2	1	10	F1	8	P
1044.683200	0.165	1044.683035	1391.753271	11	F2	3	10	F1	12	P
1045.469900	-0.059	1045.469959	1392.505461	11	F2	2	10	F1	13	P
1026.254000	0.136	1026.253864	1262.989958	9	F1	3	10	F2	1	R
1026.792600	-0.176	1026.792776	1263.516619	9	F1	2	10	F2	2	R
1027.921000	-0.069	1027.921069	1264.623064	9	F1	1	10	F2	3	R
1044.285200	0.003	1044.285197	1280.987193	9	F1	1	10	F2	4	R
1046.990000	0.658	1046.989342	1283.725437	9	F1	3	10	F2	5	R
1059.280300	0.169	1059.280131	1296.003974	9	F1	2	10	F2	6	R
1059.267900	0.021	1059.267879	1296.003974	9	F1	3	10	F2	6	R
1062.674000	-0.016	1062.674016	1299.376011	9	F1	1	10	F2	7	R
1145.949400	-0.705	1145.950105	1382.673948	9	F1	2	10	F2	9	R
1147.679600	-0.635	1147.680235	1384.416329	9	F1	3	10	F2	10	R
1150.018800	0.196	1150.018604	1386.742447	9	F1	2	10	F2	11	R
1150.006200	-0.152	1150.006352	1386.742447	9	F1	3	10	F2	11	R
1154.717500	0.070	1154.717430	1391.441273	9	F1	2	10	F2	12	R
1155.202900	0.092	1155.202808	1391.904803	9	F1	1	10	F2	13	R
975.355000	-0.051	975.355051	1264.623064	10	F1	1	10	F2	3	Q
991.719200	0.020	991.719180	1280.987193	10	F1	1	10	F2	4	Q
991.700200	-0.358	991.700558	1280.987193	10	F1	2	10	F2	4	Q
1006.735800	-0.161	1006.735961	1296.003974	10	F1	1	10	F2	6	Q
1010.108200	0.202	1010.107998	1299.376011	10	F1	1	10	F2	7	Q
1010.089700	0.324	1010.089376	1299.376011	10	F1	2	10	F2	7	Q
1097.474100	-0.334	1097.474434	1386.742447	10	F1	1	10	F2	11	Q
1097.456100	0.288	1097.455812	1386.742447	10	F1	2	10	F2	11	Q
1102.154500	-0.138	1102.154638	1391.441273	10	F1	2	10	F2	12	Q
1102.637000	0.210	1102.636790	1391.904803	10	F1	1	10	F2	13	Q
1102.617900	-0.268	1102.618168	1391.904803	10	F1	2	10	F2	13	Q
933.932000	0.154	933.931846	1280.987193	11	F1	2	10	F2	4	P
948.925800	-0.047	948.925847	1296.003974	11	F1	3	10	F2	6	P
952.320800	0.135	952.320665	1299.376011	11	F1	2	10	F2	7	P
956.768700	0.128	956.768572	1303.761494	11	F1	1	10	F2	8	P
1044.363200	0.054	1044.363146	1391.441273	11	F1	3	10	F2	12	P
1044.849500	0.043	1044.849457	1391.904803	11	F1	2	10	F2	13	P
1030.860900	0.097	1030.860803	1320.096939	10	A2	1	11	A1	1	R
1047.842600	0.102	1047.842498	1337.078634	10	A2	1	11	A1	2	R
1065.735100	-0.531	1065.735631	1354.971766	10	A2	1	11	A1	3	R
1162.300900	0.002	1162.300898	1451.537033	10	A2	1	11	A1	5	R
973.064800	-0.209	973.065009	1320.096939	11	A2	1	11	A1	1	Q
990.046800	0.096	990.046704	1337.078634	11	A2	1	11	A1	2	Q
1007.939800	-0.036	1007.939836	1354.971766	11	A2	1	11	A1	3	Q
1097.372100	-0.192	1097.372292	1444.404222	11	A2	1	11	A1	4	Q
1104.505200	0.097	1104.505103	1451.537033	11	A2	1	11	A1	5	Q
944.894600	-0.167	944.894767	1354.971766	12	A2	1	11	A1	3	P
1029.213000	0.104	1029.212896	1318.490498	10	A1	1	11	A2	1	R
1064.308600	-0.029	1064.308629	1353.586231	10	A1	1	11	A2	2	R
1153.390300	-0.244	1153.390544	1442.668147	10	A1	1	11	A2	4	R
1161.813600	0.471	1161.813129	1451.090731	10	A1	1	11	A2	5	R
943.495600	-0.008	943.495608	1353.586231	12	A1	2	11	A2	2	P
953.140400	0.066	953.140334	1363.107534	12	A1	1	11	A2	3	P
1028.827400	0.012	1028.827388	1318.117020	10	E	2	11	E	3	R
1030.911600	-0.200	1030.911800	1320.146864	10	E	1	11	E	2	R
1153.265500	0.543	1153.264957	1442.554589	10	E	2	11	E	7	R
1156.024100	-0.156	1156.024256	1445.313888	10	E	2	11	E	8	R

1162.458300	0.142	1162.458158	1451.693222	10	E	1	11	E	9	R
973.108900	-0.167	973.109067	1320.146864	11	E	1	11	E	2	Q
990.296400	0.218	990.296182	1337.333979	11	E	1	11	E	3	Q
995.069600	0.143	995.069457	1342.145197	11	E	2	11	E	4	Q
1011.067000	0.193	1011.066807	1358.104604	11	E	1	11	E	5	Q
1011.029000	0.136	1011.028864	1358.104604	11	E	2	11	E	5	Q
1098.276400	0.309	1098.276091	1445.313888	11	E	1	11	E	8	Q
1104.655600	0.174	1104.655426	1451.693222	11	E	1	11	E	9	Q
948.051100	0.033	948.051067	1358.104604	12	E	2	11	E	5	P
953.085800	-0.052	953.085852	1363.053734	12	E	1	11	E	6	P
1028.721700	-0.096	1028.721796	1318.014774	10	F2	3	11	F1	1	R
1029.679300	0.235	1029.679065	1318.943581	10	F2	2	11	F1	2	R
1030.895600	-0.008	1030.895608	1320.131010	10	F2	1	11	F1	3	R
1048.005700	0.037	1048.005663	1337.241065	10	F2	1	11	F1	5	R
1051.784100	-0.072	1051.784172	1341.048689	10	F2	2	11	F1	6	R
1065.136600	-0.233	1065.136833	1354.401350	10	F2	2	11	F1	7	R
1068.551600	0.261	1068.551339	1357.786741	10	F2	1	11	F1	8	R
1068.522100	-0.125	1068.522225	1357.786741	10	F2	2	11	F1	8	R
1070.886900	-0.492	1070.887392	1360.180370	10	F2	3	11	F1	9	R
1155.849400	-0.045	1155.849445	1445.142423	10	F2	3	11	F1	12	R
1161.998800	0.456	1161.998344	1451.262860	10	F2	2	11	F1	13	R
1162.422200	0.183	1162.422017	1451.657419	10	F2	1	11	F1	14	R
971.874000	0.655	971.873345	1318.943581	11	F2	3	11	F1	2	Q
973.095400	-0.108	973.095508	1320.131010	11	F2	2	11	F1	3	Q
984.067400	-0.013	984.067413	1331.060904	11	F2	1	11	F1	4	Q
990.205500	-0.063	990.205563	1337.241065	11	F2	2	11	F1	5	Q
990.170600	-0.229	990.170829	1337.241065	11	F2	3	11	F1	5	Q
993.978500	0.047	993.978453	1341.048689	11	F2	3	11	F1	6	Q
1007.366000	0.153	1007.365847	1354.401350	11	F2	2	11	F1	7	Q
1007.331300	0.186	1007.331114	1354.401350	11	F2	3	11	F1	7	Q
1010.751100	-0.139	1010.751239	1357.786741	11	F2	2	11	F1	8	Q
1010.716600	0.095	1010.716505	1357.786741	11	F2	3	11	F1	8	Q
1013.186900	0.021	1013.186879	1360.180370	11	F2	1	11	F1	9	Q
1096.970000	0.021	1096.969979	1444.005482	11	F2	2	11	F1	11	Q
1098.106700	-0.220	1098.106920	1445.142423	11	F2	2	11	F1	12	Q
1104.193000	0.375	1104.192625	1451.262860	11	F2	3	11	F1	13	Q
1104.622100	0.184	1104.621916	1451.657419	11	F2	2	11	F1	14	Q
1105.346200	0.075	1105.346125	1452.339616	11	F2	1	11	F1	15	Q
944.317700	0.087	944.317613	1354.401350	12	F2	3	11	F1	7	P
947.729700	0.171	947.729529	1357.786741	12	F2	2	11	F1	8	P
947.702900	-0.105	947.703005	1357.786741	12	F2	3	11	F1	8	P
950.158300	0.006	950.158294	1360.180370	12	F2	1	11	F1	9	P
1028.922400	-0.133	1028.922533	1318.209168	10	F1	2	11	F2	1	R
1050.857200	-0.067	1050.857267	1340.125280	10	F1	1	11	F2	4	R
1050.838500	-0.145	1050.838645	1340.125280	10	F1	2	11	F2	4	R
1064.696600	-0.082	1064.696682	1353.964695	10	F1	1	11	F2	6	R
1064.678000	-0.060	1064.678060	1353.964695	10	F1	2	11	F2	6	R
1151.434800	-0.355	1151.435155	1440.703168	10	F1	1	11	F2	9	R
1153.301900	0.034	1153.301866	1442.588501	10	F1	2	11	F2	10	R
1156.222900	-0.144	1156.223044	1445.491057	10	F1	1	11	F2	12	R
1156.204100	-0.322	1156.204422	1445.491057	10	F1	2	11	F2	12	R
1161.903000	0.141	1161.902859	1451.170872	10	F1	1	11	F2	13	R
971.153500	-0.322	971.153822	1318.209168	11	F1	2	11	F2	1	Q
971.766100	0.771	971.765329	1318.820676	11	F1	2	11	F2	2	Q
984.054600	0.049	984.054551	1331.047473	11	F1	1	11	F2	3	Q
993.069800	-0.134	993.069934	1340.125280	11	F1	2	11	F2	4	Q
995.374300	-0.240	995.374540	1342.452666	11	F1	3	11	F2	5	Q
1006.886500	-0.069	1006.886569	1353.964695	11	F1	3	11	F2	6	Q
1012.785200	0.058	1012.785142	1359.778064	11	F1	1	11	F2	7	Q
1012.699900	-0.037	1012.699937	1359.778064	11	F1	3	11	F2	7	Q
1096.794500	-0.166	1096.794666	1443.787588	11	F1	1	11	F2	11	Q
1096.709200	-0.261	1096.709461	1443.787588	11	F1	3	11	F2	11	Q
1098.435500	-0.211	1098.435711	1445.491057	11	F1	2	11	F2	12	Q
1105.338000	0.025	1105.337975	1452.330896	11	F1	1	11	F2	14	Q
943.877300	0.223	943.877077	1353.964695	12	F1	3	11	F2	6	P
949.751700	0.053	949.751647	1359.778064	12	F1	2	11	F2	7	P
953.104500	-0.123	953.104623	1363.072273	12	F1	1	11	F2	8	P
1032.522500	0.017	1032.522483	1379.554413	11	A2	1	12	A1	1	R
1056.200600	-0.182	1056.200782	1403.232712	11	A2	1	12	A1	2	R
1073.744100	-0.075	1073.744175	1420.776105	11	A2	1	12	A1	3	R
1169.454500	-0.062	1169.454562	1516.486492	11	A2	1	12	A1	5	R
993.155600	-0.114	993.155714	1403.232712	12	A2	1	12	A1	2	Q
1010.699200	0.094	1010.699106	1420.776105	12	A2	1	12	A1	3	Q
1106.409400	-0.093	1106.409493	1516.486492	12	A2	1	12	A1	5	Q
942.490800	-0.143	942.490943	1420.776105	13	A2	1	12	A1	3	P
995.452300	-0.301	995.452601	1405.543225	12	A2	2	12	A2	2	Q
1013.980400	-0.145	1013.980545	1423.947745	12	A1	1	12	A2	3	Q
1013.857100	-0.022	1013.857122	1423.947745	12	A1	2	12	A2	3	Q
945.720300	-0.005	945.720305	1423.947745	13	A1	1	12	A2	3	P



1031.357100	-0.170	1031.357270	1378.433010	11	E	2	12	E	1	R
1032.360600	-0.001	1032.360601	1379.398397	11	E	1	12	E	2	R
1055.123800	0.061	1055.123739	1402.161535	11	E	1	12	E	4	R
1069.977200	-0.124	1069.977324	1417.015120	11	E	1	12	E	5	R
1160.573100	-0.146	1160.573246	1507.648986	11	E	2	12	E	8	R
1162.249400	0.217	1162.249183	1509.286979	11	E	1	12	E	9	R
1162.211200	-0.039	1162.211239	1509.286979	11	E	2	12	E	9	R
1169.242800	-0.427	1169.243227	1516.281023	11	E	1	12	E	10	R
969.345000	0.139	969.344861	1379.398397	12	E	2	12	E	2	Q
992.108000	0.001	992.107999	1402.161535	12	E	2	12	E	4	Q
1006.961700	0.116	1006.961584	1417.015120	12	E	2	12	E	5	Q
1014.436300	-0.141	1014.436441	1424.404323	12	E	1	12	E	6	Q
1099.233200	-0.243	1099.233443	1509.286979	12	E	2	12	E	9	Q
938.700700	0.119	938.700581	1417.015120	13	E	2	12	E	5	P
946.183000	0.197	946.182803	1424.404323	13	E	1	12	E	6	P
1031.499200	0.143	1031.499057	1378.569293	11	F2	3	12	F1	1	R
1032.423200	0.279	1032.422921	1379.458423	11	F2	2	12	F1	2	R
1055.360500	0.037	1055.360463	1402.395966	11	F2	2	12	F1	5	R
1055.326100	0.370	1055.325730	1402.395966	11	F2	3	12	F1	5	R
1057.550200	-0.483	1057.550683	1404.586186	11	F2	2	12	F1	6	R
1057.515800	-0.150	1057.515950	1404.586186	11	F2	3	12	F1	6	R
1070.399800	0.123	1070.399677	1417.435180	11	F2	2	12	F1	7	R
1074.432100	0.678	1074.431422	1421.466925	11	F2	2	12	F1	8	R
1158.973400	0.116	1158.973284	1506.043520	11	F2	3	12	F1	11	R
1161.245400	-0.420	1161.245820	1508.281323	11	F2	2	12	F1	12	R
1162.329200	0.163	1162.329037	1509.399272	11	F2	3	12	F1	13	R
1169.316200	0.198	1169.316002	1516.351505	11	F2	2	12	F1	14	R
1169.785800	0.030	1169.785770	1516.779261	11	F2	1	12	F1	15	R
969.400900	-0.312	969.401212	1379.458423	12	F2	2	12	F1	2	Q
970.824800	-0.041	970.824841	1380.846916	12	F2	1	12	F1	3	Q
988.629700	-0.039	988.629739	1398.651815	12	F2	1	12	F1	4	Q
992.338700	-0.054	992.338754	1402.395966	12	F2	2	12	F1	5	Q
994.528800	-0.174	994.528974	1404.586186	12	F2	2	12	F1	6	Q
994.502300	-0.149	994.502449	1404.586186	12	F2	3	12	F1	6	Q
1007.378100	0.132	1007.377968	1417.435180	12	F2	2	12	F1	7	Q
1011.409800	0.087	1011.409713	1421.466925	12	F2	2	12	F1	8	Q
1011.383100	-0.089	1011.383189	1421.466925	12	F2	3	12	F1	8	Q
1098.259300	0.053	1098.259247	1508.281323	12	F2	1	12	F1	12	Q
1099.342100	0.039	1099.342061	1509.399272	12	F2	2	12	F1	13	Q
1106.757200	0.015	1106.757185	1516.779261	12	F2	1	12	F1	15	Q
939.125200	0.145	939.125055	1417.435180	13	F2	3	12	F1	7	P
943.193900	0.077	943.193823	1421.466925	13	F2	2	12	F1	8	P
949.449400	-0.130	949.449530	1427.599605	13	F2	1	12	F1	9	P
1031.299700	0.032	1031.299668	1378.377794	11	F1	3	12	F2	1	R
1031.856800	-0.059	1031.856859	1378.912205	11	F1	2	12	F2	2	R
1033.873600	-0.205	1033.873805	1380.866726	11	F1	1	12	F2	3	R
1051.766700	0.068	1051.766632	1398.759554	11	F1	1	12	F2	5	R
1069.544300	0.153	1069.544147	1416.599493	11	F1	2	12	F2	7	R
1074.943000	0.178	1074.942822	1422.020949	11	F1	3	12	F2	8	R
1077.204100	0.097	1077.204003	1424.282130	11	F1	3	12	F2	9	R
1159.026900	0.235	1159.026665	1506.082011	11	F1	2	12	F2	11	R
1161.987400	-0.120	1161.987520	1509.065647	11	F1	3	12	F2	13	R
1169.118900	0.134	1169.118766	1516.174113	11	F1	2	12	F2	14	R
1169.832700	0.244	1169.832456	1516.825378	11	F1	1	12	F2	15	R
970.840100	-0.210	970.840310	1380.866726	12	F1	2	12	F2	3	Q
988.733200	0.062	988.733138	1398.759554	12	F1	2	12	F2	5	Q
995.012700	-0.108	995.012808	1405.100426	12	F1	3	12	F2	6	Q
1006.512000	0.124	1006.511876	1416.599493	12	F1	3	12	F2	7	Q
1011.994400	-0.133	1011.994533	1422.020949	12	F1	2	12	F2	8	Q
1014.314400	-0.079	1014.314479	1424.282130	12	F1	1	12	F2	9	Q
1014.194100	-0.412	1014.194512	1424.282130	12	F1	3	12	F2	9	Q
1099.038600	-0.631	1099.039231	1509.065647	12	F1	2	12	F2	13	Q
1106.799100	0.138	1106.798962	1516.825378	12	F1	2	12	F2	15	Q
938.280600	-0.028	938.280628	1416.599493	13	F1	4	12	F2	7	P
943.755600	-0.151	943.755751	1422.020949	13	F1	3	12	F2	8	P
946.058800	-0.092	946.058892	1424.282130	13	F1	2	12	F2	9	P
949.472700	-0.078	949.472778	1427.622494	13	F1	1	12	F2	10	P
1034.084300	-0.192	1034.084492	1444.161490	12	A2	1	13	A1	1	R
1168.535800	0.159	1168.535641	1578.612640	12	A2	1	13	A1	5	R
992.985700	0.049	992.985651	1471.270813	13	A2	1	13	A1	2	Q
945.797100	-0.007	945.797107	1497.327759	14	A2	1	13	A1	3	P
1033.801300	0.148	1033.801152	1443.891775	12	A1	2	13	A2	1	R
1036.810800	-0.195	1036.810995	1446.778195	12	A1	1	13	A2	2	R
1055.344000	0.006	1055.343994	1465.311195	12	A1	1	13	A2	3	R
1168.041400	-0.474	1168.041874	1578.132498	12	A1	2	13	A2	5	R
968.550300	-0.455	968.550755	1446.778195	13	A1	1	13	A2	2	Q
987.084100	0.345	987.083755	1465.311195	13	A1	1	13	A2	3	Q
1109.060800	-0.320	1109.061120	1587.288560	13	A1	1	13	A2	6	Q
939.931300	0.109	939.931191	1491.605827	14	A1	1	13	A2	4	P

1034.511400	0.134	1034.511266	1444.564802	12	E	2	13	E	1	R
1055.253700	-0.066	1055.253766	1465.221648	12	E	1	13	E	3	R
1062.686400	0.521	1062.685879	1472.739415	12	E	2	13	E	4	R
1074.799500	0.183	1074.799317	1484.852853	12	E	2	13	E	5	R
1164.718100	0.147	1164.717953	1574.771489	12	E	2	13	E	8	R
987.000000	-0.128	987.000128	1465.221648	13	E	1	13	E	3	Q
994.424600	-0.276	994.424876	1472.739415	13	E	2	13	E	4	Q
1012.233800	0.205	1012.233595	1490.548134	13	E	2	13	E	6	Q
1109.035400	-0.091	1109.035491	1587.257011	13	E	1	13	E	11	Q
933.096900	-0.326	933.097226	1484.852853	14	E	3	13	E	5	P
938.857400	0.050	938.857350	1490.548134	14	E	2	13	E	6	P
1033.937400	-0.028	1033.937428	1444.021165	12	F2	3	13	F1	1	R
1034.437800	0.138	1034.437662	1444.494873	12	F2	2	13	F1	2	R
1035.240600	0.080	1035.240520	1445.262596	12	F2	1	13	F1	3	R
1062.209200	0.315	1062.208885	1472.266097	12	F2	2	13	F1	6	R
1074.446900	-0.110	1074.447010	1484.504222	12	F2	2	13	F1	7	R
1079.484700	-0.326	1079.485026	1489.507102	12	F2	1	13	F1	8	R
1164.704900	0.078	1164.704822	1574.762034	12	F2	2	13	F1	12	R
1166.424000	-0.031	1166.424031	1576.481243	12	F2	2	13	F1	13	R
1166.397900	0.393	1166.397507	1576.481243	12	F2	3	13	F1	13	R
1168.419600	-0.024	1168.419624	1578.503361	12	F2	3	13	F1	14	R
991.293800	-0.479	991.294279	1469.604404	13	F2	3	13	F1	5	Q
993.992800	-0.194	993.992994	1472.266097	13	F2	2	13	F1	6	Q
993.955900	-0.072	993.955972	1472.266097	13	F2	3	13	F1	6	Q
1015.692600	0.206	1015.692394	1493.842469	13	F2	1	13	F1	9	Q
1109.786000	-0.032	1109.786032	1587.936108	13	F2	1	13	F1	17	Q
932.745400	0.305	932.745095	1484.504222	14	F2	4	13	F1	7	P
937.794300	-0.263	937.794563	1489.507102	14	F2	3	13	F1	8	P
942.220300	0.057	942.220243	1493.842469	14	F2	2	13	F1	9	P
1035.153000	0.010	1035.152990	1445.179407	12	F1	2	13	F2	2	R
1055.283000	0.095	1055.282905	1465.250556	12	F1	1	13	F2	5	R
1059.209400	-0.135	1059.209535	1469.235951	12	F1	2	13	F2	6	R
1075.265900	0.141	1075.265759	1485.292175	12	F1	2	13	F2	8	R
1168.277000	-0.028	1168.277028	1578.364646	12	F1	3	13	F2	14	R
987.027300	-0.018	987.027318	1465.250556	13	F1	2	13	F2	5	Q
990.970900	0.146	990.970754	1469.235951	13	F1	3	13	F2	6	Q
995.109600	-0.359	995.109959	1473.428825	13	F1	4	13	F2	7	Q
1007.027000	0.022	1007.026978	1485.292175	13	F1	3	13	F2	8	Q
1012.734900	-0.149	1012.735049	1490.958287	13	F1	2	13	F2	9	Q
1012.639300	-0.121	1012.639421	1490.958287	13	F1	4	13	F2	9	Q
1109.045400	0.075	1109.045325	1587.268563	13	F1	2	13	F2	16	Q
933.542600	0.006	933.542594	1485.292175	14	F1	3	13	F2	8	P
939.273800	0.046	939.273754	1490.958287	14	F1	2	13	F2	9	P
942.033800	0.293	942.033507	1493.658825	14	F1	1	13	F2	10	P
1079.001200	-0.189	1079.001389	1557.286550	13	A2	1	14	A1	3	R
938.331500	-0.034	938.331534	1568.544390	15	A2	1	14	A1	4	P
1037.890600	-0.102	1037.890702	1516.118143	13	A1	1	14	A2	1	R
1062.988200	-0.006	1062.988206	1541.215646	13	A1	1	14	A2	2	R
989.540900	-0.109	989.541009	1541.215646	14	A1	1	14	A2	2	Q
1036.395400	-0.144	1036.395544	1514.710084	13	E	2	14	E	1	R
1037.976100	0.229	1037.975871	1516.197391	13	E	1	14	E	2	R
1063.383000	0.179	1063.382821	1541.604341	13	E	1	14	E	4	R
1174.504700	0.178	1174.504522	1652.819061	13	E	2	14	E	10	R
989.913600	0.043	989.913557	1541.604341	14	E	2	14	E	4	Q
994.509300	-0.880	994.510180	1546.265808	14	E	3	14	E	5	Q
933.260100	0.045	933.260055	1563.594938	15	E	2	14	E	6	P
938.138800	0.051	938.138749	1568.355535	15	E	1	14	E	7	P
1036.467800	-0.125	1036.467925	1514.778050	13	F2	3	14	F1	1	R
1037.015200	0.144	1037.015056	1515.288159	13	F2	2	14	F1	2	R
1058.725200	-0.049	1058.725249	1536.875324	13	F2	1	14	F1	5	R
1079.349700	-0.168	1079.349868	1557.622971	13	F2	2	14	F1	8	R
1174.642600	0.184	1174.642416	1652.952541	13	F2	3	14	F1	15	R
985.253300	0.202	985.253098	1536.875324	14	F2	2	14	F1	5	Q
992.311400	0.140	992.311260	1544.023799	14	F2	3	14	F1	6	Q
1013.342900	-0.105	1013.343005	1564.965231	14	F2	2	14	F1	9	Q
934.663700	-0.124	934.663824	1564.965231	15	F2	3	14	F1	9	P
938.208500	0.172	938.208328	1568.423727	15	F2	2	14	F1	10	P
942.150600	0.025	942.150575	1572.249525	15	F2	1	14	F1	11	P
1036.322600	0.056	1036.322544	1514.641409	13	F1	4	14	F2	1	R
1037.139000	0.113	1037.138887	1515.404084	13	F1	3	14	F2	1	R
1037.950200	0.057	1037.950143	1516.173381	13	F1	2	14	F2	3	R
1058.755800	0.017	1058.755783	1536.905499	13	F1	1	14	F2	5	R
1063.235000	-0.030	1063.235030	1541.458268	13	F1	2	14	F2	5	R
1066.977100	0.075	1066.977025	1545.242222	13	F1	3	14	F2	7	R
1174.370100	-0.028	1174.370128	1652.688993	13	F1	4	14	F2	15	R
993.492600	-0.040	993.492640	1545.242222	14	F1	3	14	F2	7	Q
1011.481100	-0.320	1011.481420	1563.231002	14	F1	3	14	F2	9	Q
935.468500	0.055	935.468445	1565.756226	15	F1	2	14	F2	10	P
942.158500	-0.148	942.158648	1572.257395	15	F1	1	14	F2	11	P

1062.085600	-0.063	1062.085663	1613.616315	14	A2	1	15	A1	2	R
983.403200	-0.260	983.403460	1613.616315	15	A2	1	15	A1	2	Q
930.245600	0.273	930.245327	1644.346429	16	A2	1	15	A1	4	P
1039.811100	0.120	1039.810980	1591.485616	14	A1	1	15	A2	1	R
1071.351300	0.204	1071.351096	1623.025732	14	A1	1	15	A2	2	R
1038.836800	0.032	1038.836768	1590.592396	14	E	3	15	E	1	R
1039.636600	-0.057	1039.636657	1591.327441	14	E	2	15	E	2	R
1062.107600	-0.024	1062.107624	1613.637866	14	E	1	15	E	4	R
991.309000	-0.058	991.309058	1621.643941	15	E	2	15	E	5	Q
1038.791700	0.124	1038.791576	1590.550703	14	F2	4	15	F1	1	R
1039.297700	-0.057	1039.297757	1591.010295	14	F2	3	15	F1	2	R
1040.689600	0.024	1040.689576	1592.311802	14	F2	2	15	F1	3	R
1062.100200	-0.050	1062.100250	1613.630628	14	F2	1	15	F1	6	R
1067.031500	0.165	1067.031335	1618.653561	14	F2	2	15	F1	7	R
988.352300	0.146	988.352154	1618.653561	15	F2	3	15	F1	7	Q
994.392800	0.515	994.392285	1624.792733	15	F2	4	15	F1	8	Q
1038.929800	-0.205	1038.930005	1590.679586	14	F1	3	15	F2	1	R
1040.658200	0.079	1040.658121	1592.283439	14	F1	1	15	F2	3	R
1066.856800	0.003	1066.856797	1618.482115	14	F1	1	15	F2	5	R
988.194300	-0.034	988.194334	1618.482115	15	F1	2	15	F2	5	Q
993.853000	0.131	993.852869	1624.248614	15	F1	4	15	F2	7	Q
1041.207700	0.118	1041.207582	1671.611851	15	A2	2	16	A1	1	R
1043.388800	0.306	1043.388494	1673.601349	15	A2	1	16	A1	2	R
1041.403800	-0.089	1041.403889	1671.793091	15	A1	1	16	A2	1	R
1041.813000	-0.170	1041.813170	1672.148053	15	E	2	16	E	1	R
1043.363400	0.015	1043.363385	1673.580171	15	E	1	16	E	2	R
1041.251700	0.225	1041.251475	1671.651922	15	F2	4	16	F1	1	R
1042.255900	-0.328	1042.256228	1672.557635	15	F2	3	16	F1	2	R
1043.372100	0.086	1043.372014	1673.587413	15	F2	2	16	F1	3	R
1041.308400	0.217	1041.308183	1671.703928	15	F1	4	16	F2	1	R
1041.749800	-0.073	1041.749873	1672.091533	15	F1	3	16	F2	2	R
1042.351700	0.017	1042.351683	1672.639463	15	F1	2	16	F2	3	R
1044.045600	-0.318	1044.045918	1758.219057	16	A1	2	17	A2	1	R
1046.046500	0.081	1046.046419	1760.032914	16	F2	1	17	F1	4	R

# *CHAPITRE IV*

## *ANALYSE DES RAIES DE TRANSITIONS : PENTADE -GS*

## I Introduction

Nous reportons dans ce chapitre l'analyse globale des positions et des intensités de transitions de raies "haute résolution" de la molécule  $^{12}\text{CD}_4$  dans la région  $900\text{--}2400\text{ cm}^{-1}$ . Cette région couvre deux polyades froides : la Diade ( $\nu_2, \nu_4$ ) ou  $P_1$  ( $900\text{--}1220\text{ cm}^{-1}$ , 2 niveaux vibrationnels, 2 sous niveaux) et la Pentade ( $2\nu_4, \nu_2+\nu_4, \nu_1, 2\nu_2, \nu_3$ ) ou  $P_2$  ( $1850\text{--}2400\text{ cm}^{-1}$ , 5 niveaux vibrationnels, 9 sous niveaux). Dans ces analyses, 2308 données, issues de trois sources différentes sont ajustées, et ceci en utilisant un Hamiltonien effectif développé jusqu'à l'ordre 4 (pour la Pentade). Pour l'attribution et l'analyse, nous utilisons les Logiciels SPview et XTds décrits dans le chapitre II. Les transitions expérimentales sont assignés jusqu'à  $J \leq 20$  pour la Diade et pour la Pentade. Parmi les 206 paramètres de l'Hamiltonien effectif de la Pentade (dont 10 sont relatifs au niveau de Base (GS ou  $P_0$ ) et 72 sont relatifs à la Diade), 125 sont déterminés (8 sont spécifiques à GS et 40 à la Diade). Les 48 paramètres de la Diade et les 125 paramètres pour la Pentade permettent de nous donner une très bonne simulation des spectres de la Diade et de la Pentade. Pour cette étude, le nombre total de 2308 positions de raies sont utilisés dans un ajustement de moindres carrés caractérisé par un écart quadratique moyen :  $6,2 \times 10^{-4}\text{ cm}^{-1}$  pour la Diade et  $3,8 \times 10^{-4}\text{ cm}^{-1}$  pour la Pentade.

Valentin et al. [28] ont enregistré et analysés les nombres d'ondes des transitions rovibrationnelles entre le niveau de base (GS ou  $P_0$ ) et la Diade ( $\nu_2, \nu_4$ ) ou  $P_1$  de la molécule  $^{12}\text{CD}_4$ .

Poussigue et al. [33] ont enregistré et analysés les nombres d'ondes des transitions rovibrationnelles entre GS et la Pentade ( $2\nu_4, \nu_2+\nu_4, \nu_1, 2\nu_2, \nu_3$ ) ou  $P_2$ .

Dans notre travail, nous nous sommes proposés de combiner les données expérimentales de la Diade-GS avec ceux de la Pentade -GS et de les analyser simultanément.

## II Données expérimentales

À partir de la référence [28], nous créons un fichier expérimental contenant les nombres d'ondes et les intensités des données expérimentales enregistrés par Valentin et al. et analysés par Loëte et Hilico [28]. Ainsi, et en utilisant SPVIEW nous détectons dans ce fichier les données expérimentales appropriées et donc choisies. Ces raies expérimentales, comparées aux raies calculées, nous ont permis d'attribuer 893 raies relatives à la Diade ( $\nu_2, \nu_4$ ) de la molécule  $^{12}\text{CD}_4$ .

Poussigue et al. [33] ont enregistré et analysés les positions des raies de la Pentade. (Les détails des conditions expérimentales sont donnés dans la référence [33]). Dans leur analyse, Poussigue et al. [33] ont fixés les paramètres propres à GS et à ( $\nu_2, \nu_4$ ) ce qui leurs a permis de déterminer les paramètres propres à la Pentade  $2\nu_4, \nu_2 + \nu_4, \nu_1, 2\nu_2, \nu_3$ .

En ce qui nous concerne, nous avons créé un fichier expérimental contenant les nombres d'ondes et les intensités des raies expérimentales de la Pentade à partir de Ref. [33].

En utilisant une approche similaire, que celle utilisée pour la Diade, SPVIEW est utilisé pour choisir des raies expérimentales appropriées, et qui, comparées aux raies calculées, nous ont permis de faire nos attributions : soit 1396 raies relatives à la Pentade  $2\nu_4, \nu_2+\nu_4, \nu_1, 2\nu_2, \nu_3$  de la molécule  $^{12}\text{CD}_4$ .

À partir des travaux [28] et [33], nous avons en notre possession deux sources de données expérimentales (source (a) et source (b)):

Source (a): 893 données pour les transitions de  $P_1-P_0$ . La source de ces données est le laboratoire de Spectrométrie Moléculaire Université Pierre et Marie Curie, Paris, France (A. Valentin 1983).

Source (b): 1396 données pour les transitions de  $P_2-P_0$ . La source de ces données est le laboratoire d'infrarouge, Université de Paris Sud, Orsay, France (G. Poussigue 1985). La distribution de ces 2289 données par poliades ( $P_1-P_0$  ou  $P_2-P_0$ ) et par niveaux vibrationnels ( $\nu_2, \nu_4$  pour la Diade, et  $2\nu_4, \nu_2+\nu_4, \nu_1, 2\nu_2, \nu_3$  pour la Pentade) est indiquée dans le **tableau IV.1**.

**Tableau IV.1** Répartition des 2289 données par poliade et par niveau Vibrationnel.

1396 données de ( $P_2-P_0$ )		893 données de ( $P_1-P_0$ )
112 données de	$\nu_3$	
236 données de	$2 \nu_2$	329 données de $\nu_2$
473 données de	$\nu_2 + \nu_4$	564 données de $\nu_4$
575 données de	$2 \nu_4$	

En plus de ces données expérimentales propres à la Diade et à la Pentade de  $^{12}\text{CD}_4$ , nous incluons dans notre travail, 19 données expérimentales issues du travail de Kreiner et Robiette [29-32] pour les transitions de GS-GS. Ces données représentent notre troisième source de données (Source (c)).

Ces données nous ont permis de déterminer la distribution des 2308 données suivant les poliades ( $P_0-P_0, P_1-P_0$  ou  $P_2-P_0$ ) et suivant le nombre quantique rotationnel J.

Dans le **tableau IV.2**, nous reportons la distribution des données expérimentales suivant les poliades et suivant les valeurs de J. Compte tenu de cette bonne distribution, on s'attendait d'avance que les résultats de nos analyses seront très bonnes.

**Tableau IV.2** Répartition du nombre de données par source et en fonction de J

J (de 1 à 10)

J	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$P_2-P_0$	3	11	31	51	83	111	143	161	164	173	142
$P_1-P_0$	1	3	9	17	25	33	48	59	78	92	90
$P_0-P_0$	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	1
Tous les données	4	14	40	68	108	144	191	222	242	265	233

**Suite du tableau IV.2** Répartition du nombre de données par source et en fonction de

J (10 à 20).

J	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	J≤20
$P_2-P_0$	152	102	57	11	1	0	0	0	0	0	1396
$P_1-P_0$	106	95	90	72	46	22	7	0	0	0	893
$P_0-P_0$	0	0	0	0	0	0	1	3	7	5	19
Tous les données	258	197	147	83	47	22	8	3	7	5	2308

### III Théorie

Comme nous l'avons mentionné auparavant, les molécules tétraédriques  $XY_4$  comme pour  $^{12}CD_4$ , possèdent quatre modes normaux de vibrations ( $\nu_1 (A_1)$ ,  $\nu_3 (F_2)$ ,  $\nu_2 (E)$  et  $\nu_4 (F_2)$ ). Le mode  $\nu_1 (A_1)$  est non dégénéré, tandis que le mode  $\nu_2 (E)$  est doublement dégénéré et les modes  $\nu_3 (F_2)$  et  $\nu_4 (F_2)$  sont triplement dégénérés. Les fréquences fondamentales obéissent à la simple relation donnée auparavant formule (I. 27).

Cette relation permet de classer les poliades  $P_n$  suivant le nombre entier donné par la formule. Soit  $P_0$  le niveau de base (GS),  $P_1$  est la Diade et  $P_2$  est la Pentade.

Comme nous l'avons mentionné avant, le modèle théorique utilisé dans cette analyse est basé sur le modèle tensoriel de l'écriture de l'Hamiltonien et du moment dipolaire. [12, 34], [24, 25],[27],[ 35,36].

Pour pouvoir comprendre l'écriture de l'Hamiltonien relative à la Pentade, rappelons quelques équations (déjà données auparavant) et essayons de les réécrire pour le cas particulier de la Pentade. Ainsi pour les molécules  $XY_4$  pour lesquels les niveaux vibrationnels sont

regroupés en une série de poliades  $P_k$  ( $k=0 \dots, n$ ). L'opérateur Hamiltonien effectif peut être construit de la façon suivante :

$$\tilde{\mathcal{H}} = \tilde{\mathcal{H}}_{\{p_0\}} + \tilde{\mathcal{H}}_{\{p_1\}} + \dots \dots \tilde{\mathcal{H}}_{\{p_k\}} \quad (\text{IV.1})$$

Ou chaque terme,  $\tilde{\mathcal{H}}_{\{p_k\}}$ , contient les opérateurs rovibrationnels déjà définis auparavant et chaque terme peut s'écrire:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \sum_{\text{tous les indices}} \tilde{t}_{\{s\}\{s'\}}^{\Omega(K,n\Gamma)\Gamma_v\Gamma_{v'}} \otimes T_{\{s\}\{s'\}}^{\Omega(K,n\Gamma)\Gamma_v\Gamma_{v'}} \quad (\text{IV.2})$$

Dans cette équation  $\tilde{t}_{\{s\}\{s'\}}^{\Omega(K,n\Gamma)\Gamma_v\Gamma_{v'}}$  sont les paramètres de l'Hamiltonien effectif déterminés par les analyses des positions de raies et les  $T_{\{s\}\{s'\}}^{\Omega(K,n\Gamma)\Gamma_v\Gamma_{v'}}$  sont les opérateurs rovibrationnels [4, 20, 37, 23,38].

L'ordre de chaque terme dans (IV.2) est défini par :

$$O_H = \Omega + \Omega_v - 2 \quad (\text{IV.3})$$

où  $\Omega_v$  est le degré dans les opérateurs  $a$  ou  $a^+$ .

Puisque ce chapitre est relatif à l'analyse simultanée des poliades froides allant de  $P_0$  à  $P_2$  de  $^{12}\text{CD}_4$ , l'Hamiltonien effectif relative à la Pentade s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \tilde{H}^{\langle \text{Pentad} \rangle} &= \tilde{H}_{\{P_0\}}^{\langle P_2 \rangle} + \tilde{H}_{\{P_1\}}^{\langle P_2 \rangle} + \tilde{H}_{\{P_2\}}^{\langle P_2 \rangle} \\ &= \tilde{H}_{\{Gs\}}^{\langle \text{Pentade} \rangle} + \tilde{H}_{\{Diade\}}^{\langle \text{Pentade} \rangle} + \tilde{H}_{\{Pentade\}}^{\langle \text{Pentade} \rangle} \end{aligned} \quad (\text{IV.4})$$

Et les fonctions vibrationnelles de base, qui contiennent celles relevant des 4 modes normaux de vibrations, s'expriment donc de la façon suivante :



$$|\Psi_{\nu\sigma\nu}^{\{\{S\}c_\nu}\rangle} = \left| \left( \left( \Psi_{\nu_1}^{(A_1)} \otimes \Psi_{\nu_2}^{(I_2, C_2)} \otimes \Psi_{\nu_3}^{(I_3, n_3 C_3)} \right)^{C_{23}} \otimes \Psi_{\nu_3}^{(I_4, n_4 C_4)} \right)^{C_\nu} \right|_{\sigma\nu} \quad (\text{IV.5})$$

Rappelons que pour le calcul des intensités de transition, un schéma similaire est utilisé dans le développement de l'opérateur moment dipolaire [24-27].

## IV Analyse des positions de raies

$\tilde{H}_{\{GS\}}^{\langle Pentade \rangle}$ ,  $\tilde{H}_{\{Diade\}}^{\langle Pentade \rangle}$  et  $\tilde{H}_{\{Pentade\}}^{\langle Pentade \rangle}$  sont développés dans notre travail respectivement aux ordres 6, 6 et 4.

Comme mentionné auparavant, notre étude, consacrée à l'analyse simultanée de la Diade et la Pentade, nous a permis de déterminer les paramètres de l'Hamiltonien effectif relatif aux deux poliades (et ceci en utilisant les deux sources de données (Source a et Source b) et à GS-GS (on utilise la source de donnée (Source c).

Le développement de l'Hamiltonien effectif  $H^{\langle Pentade \rangle}$  comporte 206 paramètres  $\tilde{t}_{\{s\}\{s'\}}^{\Omega(K, n\Gamma)\Gamma_\nu\Gamma_{\nu'}}$ , dont 10 sont relatifs à GS et 72 sont relatifs à la Diade.

Ces paramètres sont déterminés par l'analyse des données expérimentales et puisque nous avons des données expérimentales sur les trois poliades, on s'attend normalement à ajuster tous les paramètres.

Dans notre travail, nous utilisons SPVIEW (pour les attributions) et XTds (pour les analyses).

Ainsi, les raies attribuées à partir des trois sources de données (1396 données pour P<sub>2</sub>-P<sub>0</sub>, 893 données pour P<sub>1</sub>-P<sub>0</sub> et 19 pour P<sub>0</sub>-P<sub>0</sub>) ont été analysées avec le logiciel XTds.

Avec les programmes inclus dans XTds, nous avons analysé 2308 données expérimentales, et parmi les 206 paramètres du type  $\tilde{t}_{\{s\}\{s'\}}^{\Omega(K, n\Gamma)\Gamma_\nu\Gamma_{\nu'}}$  utilisés dans le développement de l'Hamiltonien effectif  $H^{\langle Pentade \rangle}$ , 125 paramètres sont déterminés.

Le total de N = 2308 données expérimentales sont utilisées. La méthode des moindres carrés non linéaire, décrite dans le **chapitre II paragraphe I**, minimise la déviation standard :

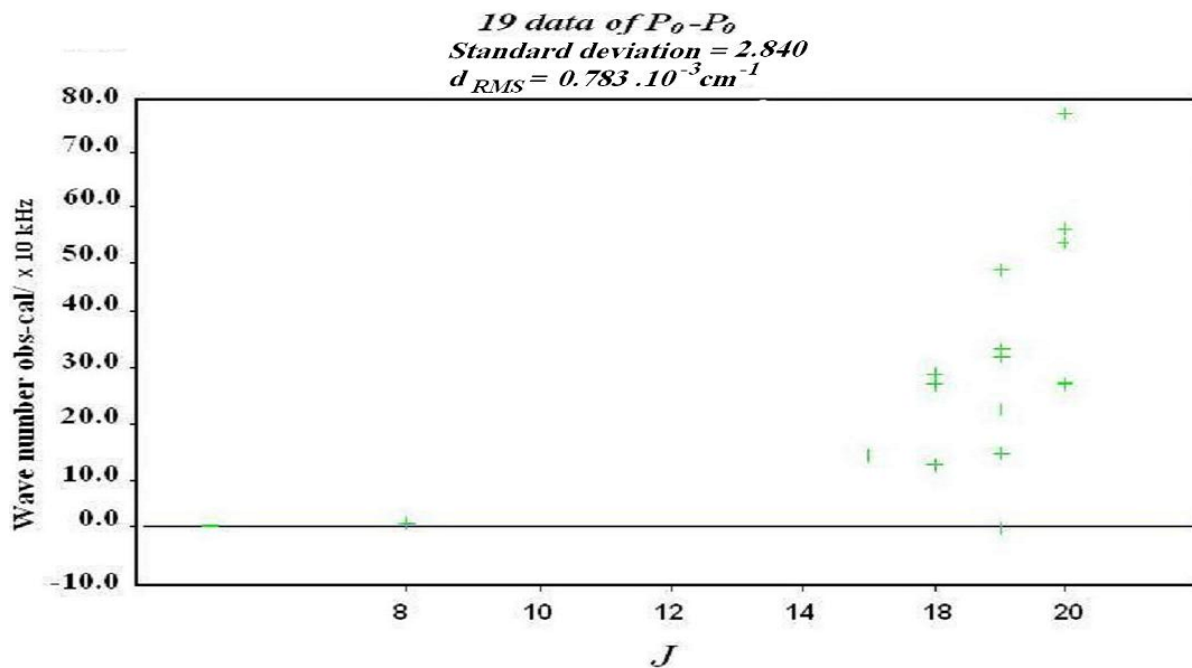
$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\tilde{v}_i^e - \tilde{v}_i^c}{\Delta \tilde{v}_i^e} \right)^2} \quad (\text{IV.6})$$

Où  $\tilde{\nu}_i^c$  est le nombre d'onde calculé, et  $\Delta\tilde{\nu}_i^e$  est l'incertitude expérimentale.

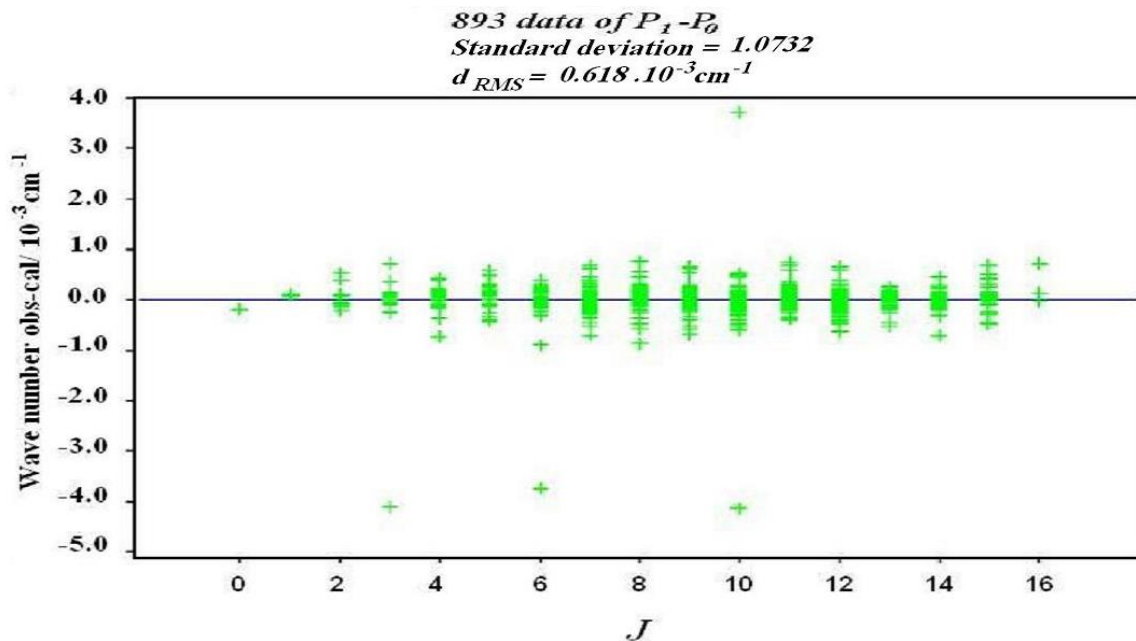
Chaque nombre d'onde expérimental  $\tilde{\nu}_i^e$  a un poids  $1/\Delta\tilde{\nu}_i^e$ .

Dans les figures IV. 1- a, IV. 1- b, et IV. 1- c, nous montrons les écarts entre les nombres d'onde observés et calculés, et tous les résultants statistiques de notre analyse pour les transitions respectives  $P_0-P_0$ ,  $P_1-P_0$  et  $P_2-P_0$ .

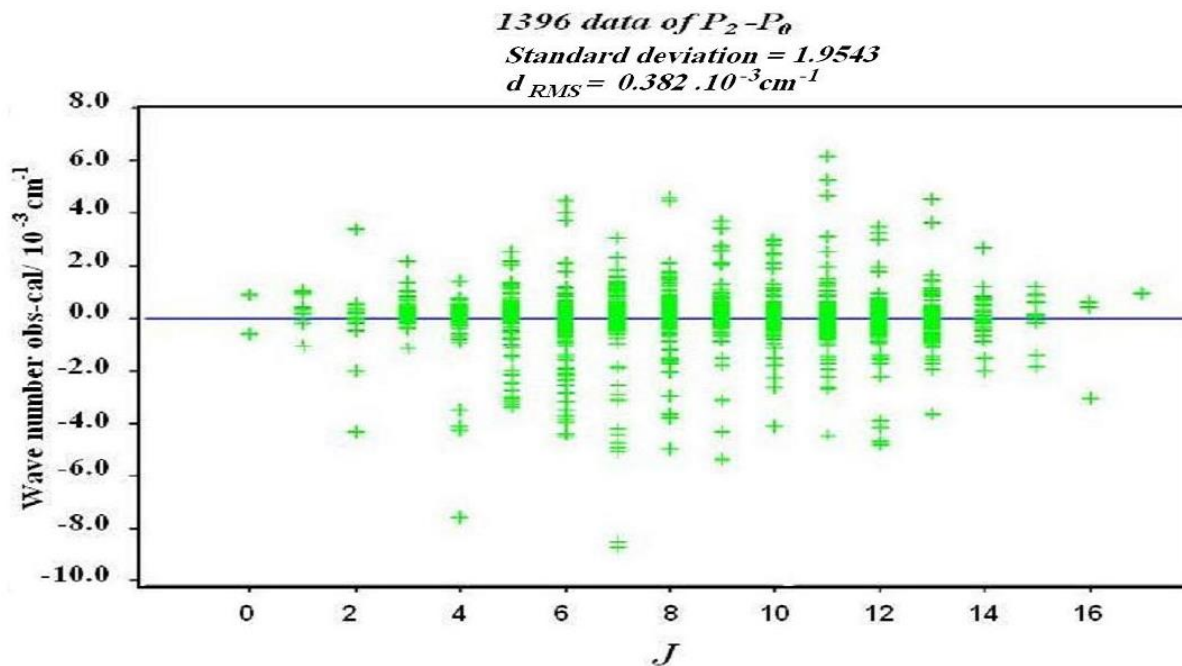
**Fig IV. 1-a.** L'écart entre le nombre d'onde observé et calculé pour les transitions  $P_0-P_0$



**Fig IV. 1-b** L'écart entre le nombre d'onde observé et calculé pour les transitions  $P_1-P_0$



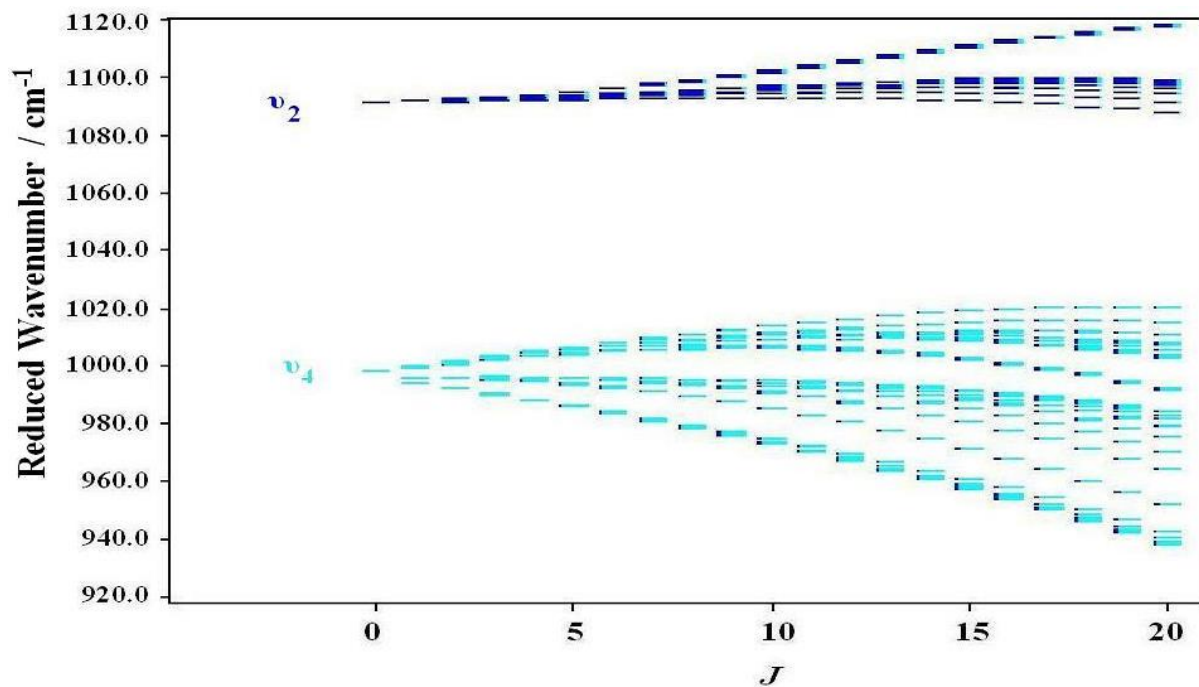
**Fig IV. 1- c** L'écart entre le nombre d'onde observé et calculé pour les transitions  $P_2 - P_0$



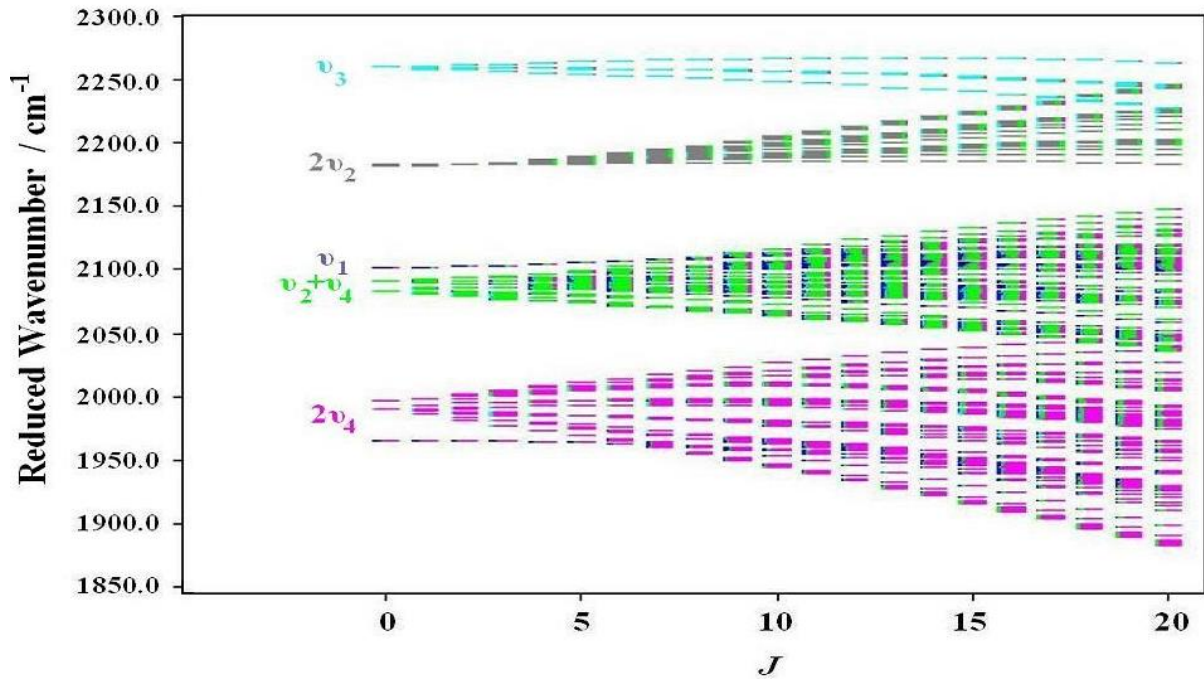
Dans les **figures IV.2**, et **IV.3** nous donnons les niveaux d'énergie calculés et réduits pour la Diade et pour la Pentade définis par :

$$\begin{aligned} \tilde{\nu}_{\text{red}}^c &= \tilde{\nu}^c - \sum_{\Omega} t_{\{\text{GS}\}\{\text{GS}\}}^{\Omega(0,0A_1)A_1A_1} (J(J+1))^{\Omega/2} \\ &= E/hc - B_0 J(J+1) + D_0 J^2(J+1)^2 - \dots \end{aligned} \quad (\text{IV.7})$$

**Fig IV.2.** Diagramme énergétique de la Diade



**Fig IV.3.** Diagramme énergétique de la Pentade



Les valeurs des paramètres déterminés par nos analyses sont reportées dans le **Tableau IV.3** ou les différentes colonnes représentent :

- Dans la première colonne nous indiquons le numéro du paramètre.
- De la colonne 2 à 5, nous donnons les caractéristiques rovibrationnels de  $T_{\{s\}\{s'\}}^{\Omega(K,n\Gamma)\Gamma_v\Gamma_{v'}}$  et donc des paramètres  $\tilde{t}_{\{s\}\{s'\}}^{\Omega(K,n\Gamma)\Gamma_v\Gamma_{v'}}$ .
- la 6<sup>ème</sup> colonne représente l'ordre du développement de l'Hamiltonien.
- Dans la 7<sup>ème</sup> colonne, nous donnons la valeur du paramètre déterminé (l'incertitude sur le paramètre).

Notons que, si la valeur du paramètre et l'incertitude ne sont pas indiquées dans le tableau, cela veut dire que le paramètre est fixé à zéro, c'est-à-dire éliminé du développement de l'Hamiltonien.

**Tableau IV.3** paramètres effectif de l'Hamiltonien  $^{12}\text{CD}_4$ .

i	$\Omega(K,n\Gamma)$	$n_s \Gamma_1$	$m_s \Gamma_2$	$\Gamma$	$O_H$	Value/cm $^{-1}$
1	2(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	0	2.6326572(45)
2	4(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	2	-2.645(13) 10 $^{-5}$
3	4(4,0A1)	0000A1	0000A1	A1	2	-7.316(76) 10 $^{-7}$
4	6(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	4	-7.3(1.3) 10 $^{-9}$
5	6(4,0A1)	0000A1	0000A1	A1	4	6.5(5.1) 10 $^{-11}$
6	6(6,0A1)	0000A1	0000A1	A1	4	-2.3(1.4) 10 $^{-11}$
7	8(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	6	1.94(38) 10 $^{-11}$
8	8(4,0A1)	0000A1	0000A1	A1	6	9.9(6.8) 10 $^{-14}$
9	8(6,0A1)	0000A1	0000A1	A1	6	
10	8(8,0A1)	0000A1	0000A1	A1	6	
11	0(0,0A1)	0100E	0100E	A1	0	1091.651935(34)
12	2(0,0A1)	0100E	0100E	A1	2	1.11439(50) 10 $^{-2}$
13	2(2,0E )	0100E	0100E	E	2	
14	3(3,0A2)	0100E	0100E	A2	3	-6.62(32) 10 $^{-6}$
15	4(0,0A1)	0100E	0100E	A1	4	
16	4(2,0E )	0100E	0100E	E	4	-1.297(55) 10 $^{-6}$
17	4(4,0A1)	0100E	0100E	A1	4	4.51(16) 10 $^{-7}$
18	4(4,0E )	0100E	0100E	E	4	
19	5(3,0A2)	0100E	0100E	A2	5	
20	6(0,0A1)	0100E	0100E	A1	6	3.05(98) 10 $^{-9}$
21	6(2,0E )	0100E	0100E	E	6	
22	6(4,0A1)	0100E	0100E	A1	6	
23	6(4,0E )	0100E	0100E	E	6	
24	6(6,0A1)	0100E	0100E	A1	6	
25	6(6,0E )	0100E	0100E	E	6	
26	1(1,0F1)	0100E	0001F2	F1	1	-4.81786(18)
27	2(2,0F2)	0100E	0001F2	F2	2	-2.5714(24) 10 $^{-2}$
28	3(1,0F1)	0100E	0001F2	F1	3	-1.434(13) 10 $^{-4}$
29	3(3,0F1)	0100E	0001F2	F1	3	
30	3(3,0F2)	0100E	0001F2	F2	3	-3.08(18) 10 $^{-5}$
31	4(2,0F2)	0100E	0001F2	F2	4	
32	4(4,0F1)	0100E	0001F2	F1	4	
33	4(4,0F2)	0100E	0001F2	F2	4	
34	5(1,0F1)	0100E	0001F2	F1	5	4.00(87) 10 $^{-8}$
35	5(3,0F1)	0100E	0001F2	F1	5	
36	5(3,0F2)	0100E	0001F2	F2	5	7.8(1.2) 10 $^{-8}$
37	5(5,0F1)	0100E	0001F2	F1	5	2.01(42) 10 $^{-8}$
38	5(5,1F1)	0100E	0001F2	F1	5	
39	5(5,0F2)	0100E	0001F2	F2	5	3.7(1.3) 10 $^{-8}$
40	6(2,0F2)	0100E	0001F2	F2	6	-1.41(21) 10 $^{-9}$
41	6(4,0F1)	0100E	0001F2	F1	6	-5.70(74) 10 $^{-9}$
42	6(4,0F2)	0100E	0001F2	F2	6	-1.14(39) 10 $^{-9}$
43	6(6,0F1)	0100E	0001F2	F1	6	8.7(4.5) 10 $^{-10}$
44	6(6,0F2)	0100E	0001F2	F2	6	-8.2(5.4) 10 $^{-10}$
45	6(6,1F2)	0100E	0001F2	F2	6	-4.3(2.6) 10 $^{-10}$
46	0(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	0	997.871623(38)
47	1(1,0F1)	0001F2	0001F2	F1	1	3.831068(18)
48	2(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	2	-7.6256(38) 10 $^{-3}$
49	2(2,0E )	0001F2	0001F2	E	2	8.0208(46) 10 $^{-3}$
50	2(2,0F2)	0001F2	0001F2	F2	2	-1.93738(38)10 $^{-2}$
51	3(1,0F1)	0001F2	0001F2	F1	3	5.409(55) 10 $^{-5}$
52	3(3,0F1)	0001F2	0001F2	F1	3	
53	4(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	4	-3.69(64) 10 $^{-7}$
54	4(2,0E )	0001F2	0001F2	E	4	-8.66(53) 10 $^{-7}$
55	4(2,0F2)	0001F2	0001F2	F2	4	
56	4(4,0A1)	0001F2	0001F2	A1	4	-2.52(23) 10 $^{-7}$
57	4(4,0E )	0001F2	0001F2	E	4	
58	4(4,0F2)	0001F2	0001F2	F2	4	5.59(67) 10 $^{-7}$
59	5(1,0F1)	0001F2	0001F2	F1	5	
60	5(3,0F1)	0001F2	0001F2	F1	5	2.38(44) 10 $^{-8}$
61	5(5,0F1)	0001F2	0001F2	F1	5	1.98(48) 10 $^{-8}$
62	5(5,1F1)	0001F2	0001F2	F1	5	
63	6(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	6	-2.64(65) 10 $^{-9}$
64	6(2,0E )	0001F2	0001F2	E	6	5.6(2.4) 10 $^{-10}$

65	6(2,0F2)	0001F2	0001F2	F2	6	-2.06(21) 10-9
66	6(4,0A1)	0001F2	0001F2	A1	6	4.84(88) 10-10
67	6(4,0E )	0001F2	0001F2	E	6	
68	6(4,0F2)	0001F2	0001F2	F2	6	-2.14(38) 10-9
69	6(6,0A1)	0001F2	0001F2	A1	6	
70	6(6,0E )	0001F2	0001F2	E	6	3.1(1.6) 10-10
71	6(6,0F2)	0001F2	0001F2	F2	6	-6.1(3.2) 10-10
72	6(6,1F2)	0001F2	0001F2	F2	6	-7.2(2.7) 10-10
73	0(0,0A1)	1000A1	1000A1	A1	0	2071.301(59)
74	2(0,0A1)	1000A1	1000A1	A1	2	-1.11(11) 10-2
75	4(0,0A1)	1000A1	1000A1	A1	4	
76	4(4,0A1)	1000A1	1000A1	A1	4	-5.00(96) 10-7
77	2(2,0F2)	1000A1	0010F2	F2	2	-1.81(11) 10-2
78	3(3,0F2)	1000A1	0010F2	F2	3	1.79(25) 10-4
79	4(2,0F2)	1000A1	0010F2	F2	4	-6.0(1.0) 10-6
80	4(4,0F2)	1000A1	0010F2	F2	4	-4.4(1.1) 10-6
81	0(0,0A1)	1000A1	0200A1	A1	1	-3.10(92)
82	2(0,0A1)	1000A1	0200A1	A1	3	
83	2(2,0E )	1000A1	0200E	E	3	4.76(31) 10-3
84	1(1,0F1)	1000A1	0101F1	F1	2	6.98(38) 10-1
85	3(1,0F1)	1000A1	0101F1	F1	4	7.5(2.1) 10-5
86	3(3,0F1)	1000A1	0101F1	F1	4	
87	2(2,0F2)	1000A1	0101F2	F2	3	-4.46(31) 10-3
88	3(3,0F2)	1000A1	0101F2	F2	4	
89	0(0,0A1)	1000A1	0002A1	A1	1	56.367(46)
90	2(0,0A1)	1000A1	0002A1	A1	3	-4.79(84) 10-3
91	2(2,0E )	1000A1	0002E	E	3	1.29(29) 10-3
92	2(2,0F2)	1000A1	0002F2	F2	3	
93	3(3,0F2)	1000A1	0002F2	F2	4	
94	0(0,0A1)	0010F2	0010F2	A1	0	2252.36(25)
95	1(1,0F1)	0010F2	0010F2	F1	1	1.264(15)
96	2(0,0A1)	0010F2	0010F2	A1	2	-1.459(18) 10-2
97	2(2,0E )	0010F2	0010F2	E	2	6.425(43) 10-3
98	2(2,0F2)	0010F2	0010F2	F2	2	
99	3(1,0F1)	0010F2	0010F2	F1	3	1.71(19) 10-5
100	3(3,0F1)	0010F2	0010F2	F1	3	
101	4(0,0A1)	0010F2	0010F2	A1	4	-6.3(1.1) 10-7
102	4(2,0E )	0010F2	0010F2	E	4	
103	4(2,0F2)	0010F2	0010F2	F2	4	-3.3(1.0) 10-7
104	4(4,0A1)	0010F2	0010F2	A1	4	
105	4(4,0E )	0010F2	0010F2	E	4	-4.7(1.1) 10-7
106	4(4,0F2)	0010F2	0010F2	F2	4	
107	2(2,0F2)	0010F2	0200A1	F2	3	
108	3(3,0F2)	0010F2	0200A1	F2	4	
109	1(1,0F1)	0010F2	0200E	F1	2	
110	2(2,0F2)	0010F2	0200E	F2	3	2.93(40) 10-3
111	3(1,0F1)	0010F2	0200E	F1	4	
112	3(3,0F1)	0010F2	0200E	F1	4	
113	3(3,0F2)	0010F2	0200E	F2	4	-5.3(1.7) 10-5
114	1(1,0F1)	0010F2	0101F1	F1	2	5.23(58) 10-1
115	2(2,0E )	0010F2	0101F1	E	3	-7.55(85) 10-3
116	2(2,0F2)	0010F2	0101F1	F2	3	-3.35(78) 10-3
117	3(1,0F1)	0010F2	0101F1	F1	4	
118	3(3,0A2)	0010F2	0101F1	A2	4	-2.90(60) 10-5
119	3(3,0F1)	0010F2	0101F1	F1	4	-1.20(20) 10-4
120	3(3,0F2)	0010F2	0101F1	F2	4	
121	0(0,0A1)	0010F2	0101F2	A1	1	-32.679(24)
122	1(1,0F1)	0010F2	0101F2	F1	2	-1.507(61)
123	2(0,0A1)	0010F2	0101F2	A1	3	6.48(39) 10-3
124	2(2,0E )	0010F2	0101F2	E	3	3.01(22) 10-3
125	2(2,0F2)	0010F2	0101F2	F2	3	5.63(74) 10-3
126	3(1,0F1)	0010F2	0101F2	F1	4	7.8(1.1) 10-5
127	3(3,0F1)	0010F2	0101F2	F1	4	
128	3(3,0F2)	0010F2	0101F2	F2	4	9.8(3.6) 10-5
129	2(2,0F2)	0010F2	0002A1	F2	3	
130	3(3,0F2)	0010F2	0002A1	F2	4	
131	1(1,0F1)	0010F2	0002E	F1	2	7.05(30) 10-1
132	2(2,0F2)	0010F2	0002E	F2	3	
133	3(1,0F1)	0010F2	0002E	F1	4	
134	3(3,0F1)	0010F2	0002E	F1	4	-3.8(1.0) 10-5

135	3(3,0F2)	0010F2	0002E	F2	4	
136	0(0,0A1)	0010F2	0002F2	A1	1	-19.8(1.6)
137	1(1,0F1)	0010F2	0002F2	F1	2	
138	2(0,0A1)	0010F2	0002F2	A1	3	
139	2(2,0E )	0010F2	0002F2	E	3	
140	2(2,0F2)	0010F2	0002F2	F2	3	7.2(1.1) 10-3
141	3(1,0F1)	0010F2	0002F2	F1	4	
142	3(3,0F1)	0010F2	0002F2	F1	4	
143	3(3,0F2)	0010F2	0002F2	F2	4	
144	0(0,0A1)	0200A1	0200A1	A1	2	-1.254(59)
145	2(0,0A1)	0200A1	0200A1	A1	4	
146	2(2,0E )	0200A1	0200E	E	4	
147	0(0,0A1)	0200E	0200E	A1	2	-1.389(91)
148	2(0,0A1)	0200E	0200E	A1	4	
149	2(2,0E )	0200E	0200E	E	4	1.548(66) 10-3
150	1(1,0F1)	0200A1	0101F1	F1	3	
151	2(2,0F2)	0200A1	0101F2	F2	4	
152	1(1,0F1)	0200E	0101F1	F1	3	4.03(20) 10 -1
153	2(2,0F2)	0200E	0101F1	F2	4	-1.01(15) 10-3
154	1(1,0F1)	0200E	0101F2	F1	3	
155	2(2,0F2)	0200E	0101F2	F2	4	8.9(2.9) 10-4
156	0(0,0A1)	0200A1	0002A1	A1	2	4.47(67)
157	2(0,0A1)	0200A1	0002A1	A1	4	
158	2(2,0E )	0200A1	0002E	E	4	
159	2(2,0F2)	0200A1	0002F2	F2	4	
160	2(2,0E )	0200E	0002A1	E	4	
161	0(0,0A1)	0200E	0002E	A1	2	-11.12(75)
162	2(0,0A1)	0200E	0002E	A1	4	-2.36(25) 10-3
163	2(2,0E )	0200E	0002E	E	4	1.20(33) 10-3
164	1(1,0F1)	0200E	0002F2	F1	3	3.36(24) 10-1
165	2(2,0F2)	0200E	0002F2	F2	4	1.22(30) 10-3
166	0(0,0A1)	0101F1	0101F1	A1	2	1.35384(21)
167	1(1,0F1)	0101F1	0101F1	F1	3	-2.6664(83) 10-2
168	2(0,0A1)	0101F1	0101F1	A1	4	
169	2(2,0E )	0101F1	0101F1	E	4	
170	2(2,0F2)	0101F1	0101F1	F2	4	
171	1(1,0F1)	0101F1	0101F2	F1	3	-1.30(12) 10-1
172	2(2,0E )	0101F1	0101F2	E	4	-1.26(17) 10-3
173	2(2,0F2)	0101F1	0101F2	F2	4	
174	0(0,0A1)	0101F2	0101F2	A1	2	
175	1(1,0F1)	0101F2	0101F2	F1	3	
176	2(0,0A1)	0101F2	0101F2	A1	4	-1.47(17) 10-3
177	2(2,0E )	0101F2	0101F2	E	4	
178	2(2,0F2)	0101F2	0101F2	F2	4	
179	1(1,0F1)	0101F1	0002A1	F1	3	8.9(1.3) 10-2
180	1(1,0F1)	0101F1	0002E	F1	3	3.09(23) 10-1
181	2(2,0F2)	0101F1	0002E	F2	4	-2.33(20) 10-3
182	1(1,0F1)	0101F1	0002F2	F1	3	-1.291(87) 10-1
183	2(2,0E )	0101F1	0002F2	E	4	
184	2(2,0F2)	0101F1	0002F2	F2	4	
185	2(2,0F2)	0101F2	0002A1	F2	4	1.07(15) 10-3
186	1(1,0F1)	0101F2	0002E	F1	3	1.11(21) 10-1
187	2(2,0F2)	0101F2	0002E	F2	4	-2.66(26) 10-3
188	0(0,0A1)	0101F2	0002F2	A1	2	-4.3(1.8) 10-1
189	1(1,0F1)	0101F2	0002F2	F1	3	1.633(74) 10-1
190	2(0,0A1)	0101F2	0002F2	A1	4	1.95(13) 10-3
191	2(2,0E )	0101F2	0002F2	E	4	
192	2(2,0F2)	0101F2	0002F2	F2	4	9.3(2.9) 10-4
193	0(0,0A1)	0002A1	0002A1	A1	2	
194	2(0,0A1)	0002A1	0002A1	A1	4	-2.0(1.1) 10-3
195	2(2,0E )	0002A1	0002E	E	4	
196	2(2,0F2)	0002A1	0002F2	F2	4	
197	0(0,0A1)	0002E	0002E	A1	2	1.753(91)
198	2(0,0A1)	0002E	0002E	A1	4	1.359(87) 10-3
199	2(2,0E )	0002E	0002E	E	4	
200	1(1,0F1)	0002E	0002F2	F1	3	
201	2(2,0F2)	0002E	0002F2	F2	4	-1.14(15) 10-3
202	0(0,0A1)	0002F2	0002F2	A1	2	-3.68(25)
203	1(1,0F1)	0002F2	0002F2	F1	3	3.15(15) 10-1
204	2(0,0A1)	0002F2	0002F2	A1	4	



205	2(2,0E )	0002F2	0002F2	E	4	1.365(92) 10-3
206	2(2,0F2)	0002F2	0002F2	F2	4	-1.800(63) 10-3

Dans le **tableau IV 4**, nous donnons le nombre de paramètres total (le nombre de paramètres déterminés) pour chaque ordre du développement de l'Hamiltonien.

Dans l'analyse des 2308 données expérimentales, 125 paramètres sont déterminés avec une très grande précision (voir **tableau IV.3**). Et notons qu'en plus des paramètres purement vibrationnels d'ordre 0 (dont le nombre est 5, et parmi lesquels 2 sont relatifs à la Diade et 2 sont spécifiques à la Pentade et 1 est relatif au niveau de base GS), les paramètres d'ordre 1 (dont le nombre est 7, et parmi lesquels 2 sont relatifs à la Diade et 5 à la Pentade ) sont aussi déterminés

Dans le **tableau IV.4**, nous reportons la distribution du nombre de paramètres pour les trois poliades et les différents ordres du développement de l'Hamiltonien, le nombre entre parenthèses indique le nombre des paramètres déterminés. Les paramètres non analysés sont fixés à zéro. Le nombre donné avant chaque parenthèse est le nombre total des paramètres entrant dans le développement de l'Hamiltonien.

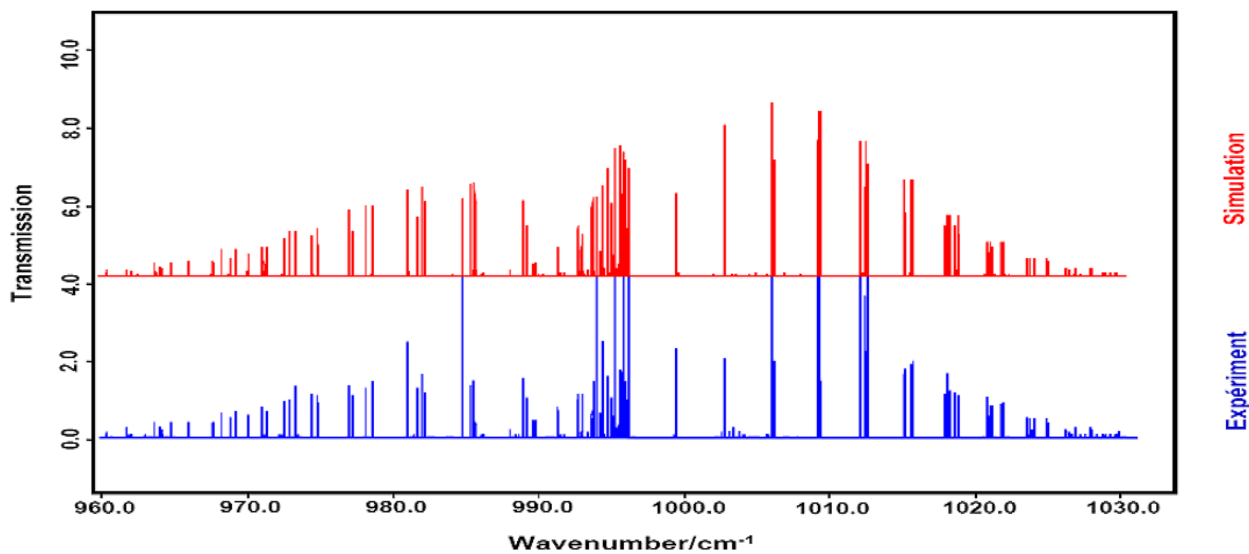
**Tableau IV. 4** le nombre de paramètres effectif de l'Hamiltonien pour les différents ordres.

Ordre	$\tilde{H}_{\{GS\}}^{(Pentade)}$	$\tilde{H}_{\{Diade\}}^{(Pentade)}$	$\tilde{H}_{\{Pentade\}}^{(Pentade)}$	$\tilde{H}^{(Pentad)}$
0	1 (1)	2 (2)	2 (2)	5 (5)
1	0 (0)	2 (2)	5 (5)	7 (7)
2	2 (2)	6 (5)	21 (16)	29 (23)
3	0 (0)	6 (4)	35 (23)	41 (27)
4	3 (3)	13 (6)	71 (31)	87 (40)
5	0 (0)	11 (6)	0 (0)	11 (6)
6	4 (2)	22 (15)	0 (0)	26 (17)
Total	10 (8)	62 (40)	134 (77)	206 (125)

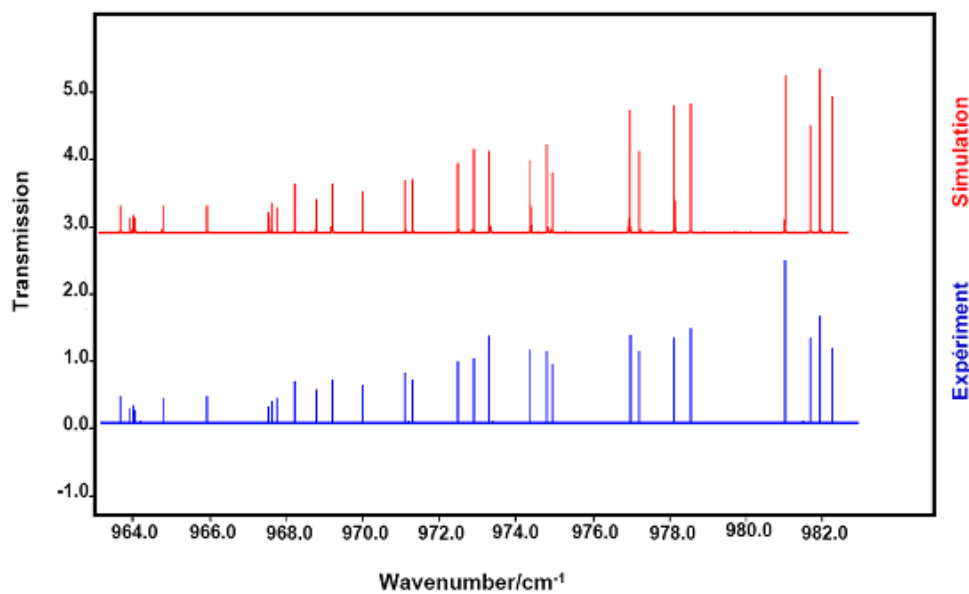
Avec ces paramètres que nous avons déterminés dans nos analyses avec une déviation standard de 1.818, nous avons fait un calcul du spectre complet de la molécule  $^{12}\text{CD}_4$  jusqu'à  $J \leq 20$  pour la Diade (en utilisant seulement les 48 des 72 premiers paramètres de l'Hamiltonien) et pour la Pentade (en utilisant les 125 des 206 paramètres du développement de l'Hamiltonien). XTds et SPVIEW, qui permet de simuler les spectres, nous ont permis de vérifier et comparer les spectres expérimentaux et simulés pour la Diade et pour la Pentade .

Les figures **IV.3-a**, **IV.3-b** et **IV.3-c** illustrent des comparaisons entre spectres simulés et spectres expérimentaux dans trois régions différentes de la Diade.

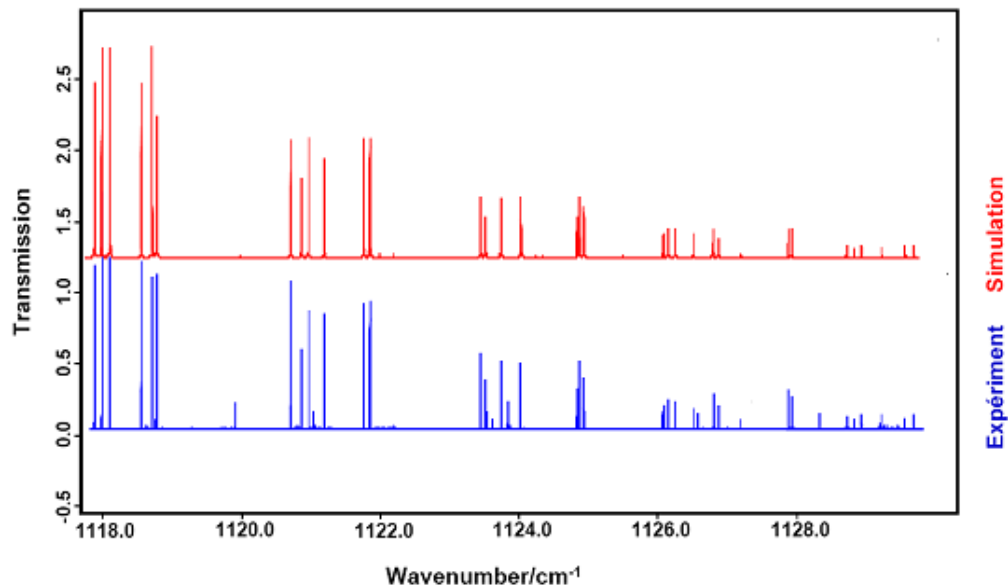
**Fig IV.3-a** Comparaison du spectre simulé et expérimental entre 960.0-1030.0  $\text{cm}^{-1}$  de la région Diade de  $^{12}\text{CD}_4$ .



**Fig IV.3-b** Comparaison du spectre simulé et expérimental entre 964.0-982.0  $\text{cm}^{-1}$  de la région Diade de  $^{12}\text{CD}_4$ .



**Fig IV.3-c** Comparaison du spectre simulé et expérimental entre 1118.0-1128.0  $\text{cm}^{-1}$  de la région Diade de  $^{12}\text{CD}_4$ .



Dans le **tableau IV. 5**, Nous donnons les positions des niveaux vibrationnels pour la Diade et la Pentade de  $^{12}\text{CD}_4$ . Elles sont obtenues par le calcul des niveaux pour  $J = 0$  en utilisant les paramètres effectifs de l'Hamiltonien déterminés dans cette étude .

Dans chaque case, les niveaux sont identifiés par leurs projections dans le mode normal initial défini par l'équation (IV. 5) .

Les quantités  $v_i$ ,  $l_i$ ,  $n_i$  et  $C_i$  ( $i = 1- 4$ ) sont respectivement :

- le nombre quantique vibrationnel
- le nombre quantique vibrationnel du moment angulaire
- l'indice de multiplicité
- la symetrie vibrationnelle

**Tableau IV.5** Positions des niveaux vibrationnels de la Diade et la Pentade de  $^{12}\text{CD}_4$ .

Le pourcentage correspond à la projection maximale dans le mode normal.

niveaux	nos résultats	
$ P_n, i\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ \nu_1(0, A_1) \otimes \nu_2(l_2, 0C_2) \otimes \nu_3(l_3, n_3 C_3) \right] C_{23} \otimes \nu_4(l_2, n_4 C_4) C_V \right] \right] \right $	$\tilde{\nu} / \text{cm}^{-1}$	%
$ P_{1,1}\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ 0(0, 0A_1) \otimes 1(1, 0E) \otimes 0(0, 0A_1) \right] E \otimes 0(0, 0A_1) \right] E \right] \right $	1091.651935	100
$ P_{1,2}\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ 0(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \right] A_1 \otimes 1(1, 0F_2) \right] F_2 \right] \right $	997.871623	100
$ P_{2,1}\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ 1(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \right] A_1 \otimes 0(0, 0A_1) \right] A_1 \right] \right $	2101.373410	78
$ P_{2,2}\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ 0(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \otimes 1(1, 0F_2) \right] F_2 \otimes 0(0, 0A_1) \right] F_2 \right] \right $	2260.077482	96
$ P_{2,3}\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ 0(0, 0A_1) \otimes 2(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \right] A_1 \otimes 0(0, 0A_1) \right] A_1 \right] \right $	2182.189221	100
$ P_{2,4}\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ 0(0, 0A_1) \otimes 2(1, 0E) \otimes 0(0, 0A_1) \right] E \otimes 0(0, 0A_1) \right] E \right] \right $	2182.583819	100
$ P_{2,5}\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ 0(0, 0A_1) \otimes 1(1, 0E) \otimes 0(0, 0A_1) \right] E \otimes 0(0, 0A_1) \right] F_1 \right] \right $	2090.877402	100
$ P_{2,6}\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ 0(0, 0A_1) \otimes 1(1, 0E) \otimes 0(0, 0A_1) \right] E \otimes 0(0, 0A_1) \right] F_2 \right] \right $	2083.397622	96
$ P_{2,7}\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ 0(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \right] A_1 \otimes 2(0, 0A_1) \right] A_1 \right] \right $	1965.530723	78
$ P_{2,8}\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ 0(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \right] A_1 \otimes 2(0, 0E) \right] E \right] \right $	1996.828135	100
$ P_{2,9}\rangle = \left  \left[ \left[ \left[ 0(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \otimes 0(0, 0A_1) \right] E \otimes 2(0, 0F_2) \right] F_2 \right] \right $	1990.471432	99

Les 2289 données expérimentales (1396 pour  $P_2$ - $P_0$  et 893 pour  $P_1$ - $P_0$ ) comparées aux raies calculées avec nos 125 paramètres) sont reportées dans les **tableaux IV.6 et IV.7**

## V Analyse des intensités de la Pentade

Dans ce paragraphe, nous nous sommes proposé d'analyser les intensités des raies d'absorption entre la Pentade et le niveau de base.

L'opérateur moment dipolaire effectif est développé suivant le même schéma décrit dans le chapitre I.

Comme nous l'avons mentionné auparavant, l'opérateur moment dipolaire effectif est développé dans le repère du laboratoire fixe (LFF) suivant les composantes ( $\Theta = X, Y$  ou  $Z$ ) du moment dipolaire effectif  $\mu$  de la façon suivante [24,25] :

$$\tilde{\mu}_{\Theta}^{(A_2)} = \sqrt{3} \sum \langle 1; m | \Theta \rangle \sum_{\{i\}} \sum_{\Gamma} \mu^{\{i\}} [C^{(1,F_1)} \otimes M^{\{\{i\},F_2\}}]^{(A_2)} \quad (IV.8)$$

Où les  $\langle 1; m | \Theta \rangle$  sont les coefficients de Stone [26], et  $C^{(1,F_1)}$  sont des tenseurs de cosinus directeurs, et  $\{i\}$  dénote tous les nombres quantiques intermédiaires et les différentes symétries. Les  $\mu^{\{i\}}$  sont les paramètres à ajuster en utilisant les données expérimentales sur les intensités.

L'opérateur  $\tilde{\mu}$ , qui est de symétrie  $A_2$  dépend via la formule (IV.8) des opérateurs  $M^{\{\{i\},F_2\}}$  de symétrie  $F_2$  et qui sont développés en fonction des opérateurs rovibrationnels de la façon suivante :

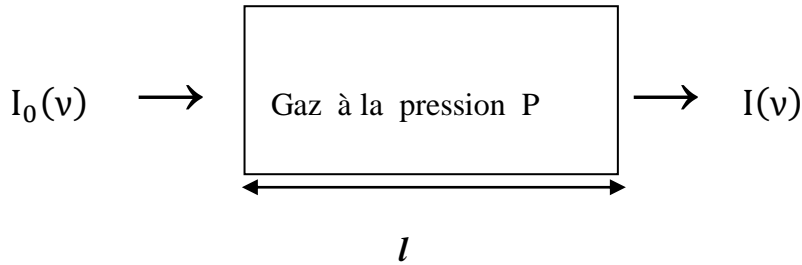
$$M_{\gamma}^{\{\{i\},F_2\}} = \left( R^{\Omega(k,n\Gamma_r)} \otimes \varepsilon_{\{s\}\{s'\}}^{\Gamma_1\Gamma_2(\Gamma)} \right)_{\gamma}^{F_2} \quad (IV.9)$$

ou  $\gamma = x, y, z$  sont les composantes dans le repère moléculaire (MFF)

l'ordre du développement du moment dipolaire est défini par :

$$O_{\mu} = \Omega + \Omega_{\nu} - 1 \quad (IV.10)$$

Une expression d'absorption peut être schématisée de la manière suivante.



L'énergie transmise par unité de temps et par unité de surface à la fréquence  $\nu$  s'écrit :

$$I(\nu) = I_0(\nu) e^{-K(\nu,p)} \quad (IV.11)$$

$I_0(\nu)$  L'intensité du rayonnement incident.

$K(\nu, p)$  Coefficient d'absorption ( $\text{cm}^{-1}$ ).

On définit le coefficient d'absorption intégré d'une raie de fréquence  $\nu_{if}$  par :

$$S_{if}(p) = \int_0^\infty K(\nu, p) d\nu \quad \text{en } \text{cm}^{-2} \quad (\text{IV. 12})$$

Lorsque la pression est inférieure à quelques atmosphères on peut écrire :

$$S_{if}(p) = S_{if}^p \times p \quad (\text{IV. 13})$$

Où  $S_{if}^p$  coefficient d'absorption par unité de pression (en  $\text{cm}^{-2} \cdot \text{atm}^{-1}$ ).

Pour un système en équilibre thermodynamique obéissent à la statistique de Maxwell-Boltzmann.

On montre que :

$$S_{if} = \frac{8\pi^3}{hcQ_{rv}(T)} L \frac{T_0}{T} \nu_{if} e^{-\frac{hcE_i}{kT}} \left(1 - e^{-\frac{hc\nu_{if}}{kT}}\right) \sum_{\alpha_i \alpha_f} |\langle i, \alpha_i | \mu_z | f, \alpha_f \rangle|^2 \quad (\text{IV. 14})$$

Où les différents termes représentent :

$L$  : le nombre de Loschmidt =  $2.666754 \cdot 10^{19}$  mol/cm<sup>3</sup> atm

$C$ 'est le nombre de molécules par cm<sup>3</sup>

$T_0$ : la température absolue de référence = 273.15 °K

$Q_{rv}$ : la fonction de partition rovibrationnelle

$K$ : la constante de Boltzmann =  $1.38066 \cdot 10^{-16}$  erg/°K

$h$  : la constante de Planck =  $6.626175 \cdot 10^{-27}$  erg.s

$c$  : la vitesse de la lumière =  $2.99792458 \cdot 10^{10}$  cm/s

$\alpha_i$  et  $\alpha_f$  représentent l'ensemble des nombres quantiques secondaires des niveau initial (GS) et final (Pentade )

Ces nombres quantiques secondaires, dont ne dépend pas l'énergie de vibration - rotation, sont

- le nombre quantique  $M$  de projection du moment cinétique sur l'axe fixe.
- Le nombre quantique  $\sigma$  repérant la composante d'une représentation irréductible  $C$  et prenant les valeurs 1, 2 ou 3 selon que  $C = A, E$  ou  $F$

- Les nombres quantiques du Spin nucléaire

Par ailleurs, les éléments matriciels de l'Opérateur  $M_z$  de symétrie  $A_2$ , qui est indépendant du Spin, ne dépendent pas non plus de  $\sigma$  de sorte que la dégénérescence correspondante ne dépend que de la symétrie C et peut être exprimée par un poids statistique commun aux deux niveaux considérés (GS et Pentade) . Pour notre molécule  $^{12}\text{CD}_4$  :

$$g(A_1) = g(A_2) = 15 \quad , \quad g(E) = 12 \quad , \quad g(F_1) = g(F_2) = 18$$

L'intensité de la transition entre deux niveaux d'énergie rovibrationnels i et f s'écrit

$$S_{if} = \frac{8\pi^3}{hcQ_{Rv}(T)} L \frac{T_0}{T} \nu_{if} e^{-\frac{hcE_i}{kT}} g(c_i) \left(1 - e^{-\frac{hc\nu_{if}}{kT}}\right) \sum_{M_i M_f} |\langle \tilde{i} | \mu_z | \tilde{f} \rangle|^2 \quad (\text{IV. 15})$$

Et sous forme simplifiée

$$S_{if} = R_{if} \sum_{M_i M_f} |\langle \tilde{i} | \mu_z | \tilde{f} \rangle|^2 \quad (\text{IV. 16})$$

D'après ,tout ce qui a été dit ,nous voyons que les intensités des raies dépendent beaucoup des niveaux d'énergies supérieurs et inférieur, donc dépendent de l'analyse des positions des raies et de leurs qualités .c'est pour cela qu'avant d'analyser les intensités, on s'est intéressé aux positions de raies donc à la détermination des paramètres de l'Hamiltonien: la qualité des résultats d'analyse des niveau compte en grande partie dans l'analyse des intensités. Ainsi pour analyser les intensités de transitions infrarouges entre la Pentade  $2\nu_4$ ,  $\nu_2+\nu_4$ ,  $\nu_1$ ,  $2\nu_2$ ,  $\nu_3$

Nous avons développé  $\tilde{H}_{\{GS\}}^{(Pentade)}$ ,  $\tilde{H}_{\{Diade\}}^{(Pentade)}$  et  $\tilde{H}_{\{Pentade\}}^{(Pentade)}$  aux ordres 6, 6 et 4, respectivement. Nous avons utilisé 2308 données expérimentales sur les 3 poliades et nous avons ainsi déterminé 125 paramètres  $\tilde{t}_{\{s\}\{s'\}}^{\Omega(K,n\Gamma)\Gamma_v\Gamma_{v'}}$  propres  $H^{(Pentade)}$  .

Le développement du moment dipolaire contient 13 opérateurs dont les caractéristiques rovibrationnels sont reportés dans la tableau **IV. 6**.

L'analyse des intensités des 1396 données sur P<sub>2</sub>-P<sub>0</sub>, nous a permis de déterminer 10 paramètres  $\mu^{\{i\}}$ , dont les valeurs sont reportés dans la table .

Notons que, quand on fait une simulation du spectre, les positions des raies (nombres d'ondes) sont calculées sur la base des paramètres  $\tilde{t}_{\{s\}\{s'\}}^{\Omega(K,n\Gamma)\Gamma_v\Gamma_{v'}}$  de l'Hamiltonien, les intensités des raies sont calculées sur la base des valeurs des paramètres du moment dipolaire.

Ainsi, avec les paramètres du Tableau **IV.3** pour les  $\tilde{t}_{\{s\}\{s'\}}^{\Omega(K,n\Gamma)\Gamma_v\Gamma_{v'}}$  et les paramètres  $\mu^{\{i\}}$  du Tableau **IV. 6**. Nous avons fait une simulation du spectre complet de la Pentade et puis on a comparé au spectre expérimental, il nous a permis de vérifier toutes les raies.

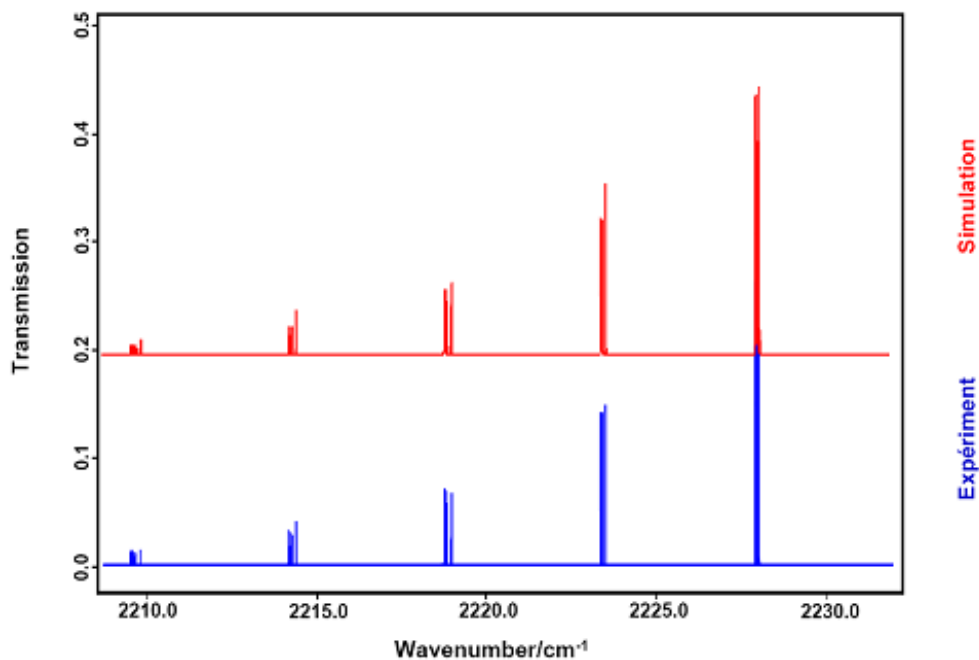
Une illustration de cette comparaison est donnée dans les figures **IV. 4 .a, IV. 4 .b et IV. 4 .c**

**Tableau IV. 6. Paramètres du moment dipolaire.**

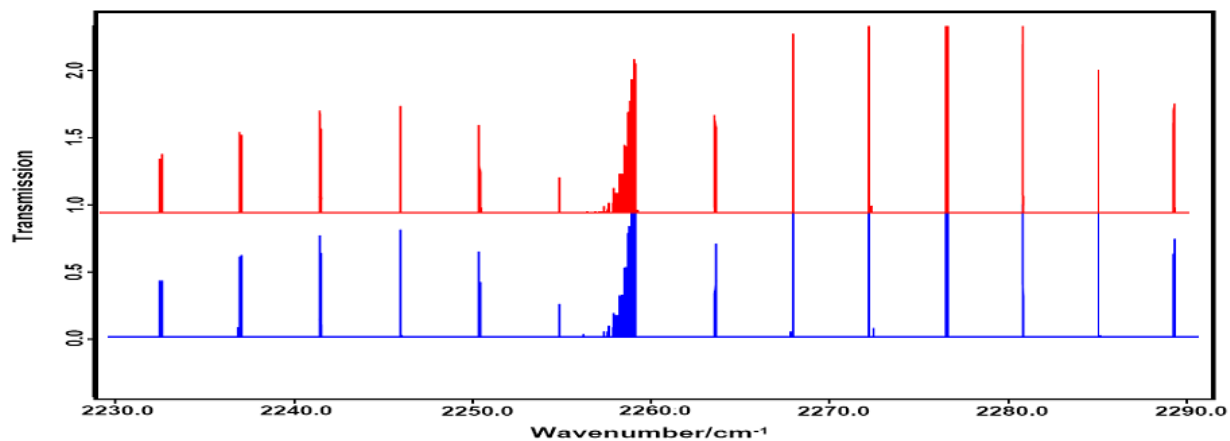
i	$\Omega(K, n\Gamma_r)$	$n_s \Gamma_v$	$m_s \Gamma_{v'} (C_{v'})$	$\mu^{\{i\}}$ (en cm <sup>-2</sup> atm <sup>-1</sup> )
1	2(2,0F2)	0000A1	1000A1 ( A1 )	/
2	0(0,0A1)	0000A1	0010F2 ( F2 )	2.910(47) 10 <sup>-2</sup>
3	1(1,0F1)	0000A1	0010F2 ( F2 )	7.91(41) 10 <sup>-4</sup>
4	2(0,0A1)	0000A1	0010F2 ( F2 )	-3.034(58) 10 <sup>-4</sup>
5	2(2,0E )	0000A1	0010F2 ( F2 )	2.56(66) 10 <sup>-5</sup>
6	2(2,0F2)	0000A1	0010F2 ( F2 )	3.630(75) 10 <sup>-5</sup>
7	1(1,0F1)	0000A1	0200E ( E )	-8.023(80) 10 <sup>-4</sup>
8	1(1,0F1)	0000A1	0101F1 ( F1 )	6.57(19) 10 <sup>-4</sup>
9	0(0,0A1)	0000A1	0101F2 ( F2 )	-2.566(18) 10 <sup>-2</sup>
10	1(1,0F1)	0000A1	0101F2 ( F2 )	-3.450(25) 10 <sup>-4</sup>
11	1(1,0F1)	0000A1	0002E ( E )	/
12	0(0,0A1)	0000A1	0002F2 ( F2 )	7.39(20) 10 <sup>-3</sup>
13	1(1,0F1)	0000A1	0002F2 ( F2 )	/



**Fig IV.4.a** Comparaison du spectre simulé et expérimental entre 2210.0-2230.0  $\text{cm}^{-1}$  de la région Pentade de  $^{12}\text{CD}_4$ .



**Fig IV.4.b** Comparaison du spectre simulé et expérimental entre 2230.0-2290.0  $\text{cm}^{-1}$  de la région Pentade de  $^{12}\text{CD}_4$ .



**Fig IV.4.c** Comparaison du spectre simulé et expérimental entre 2280.0-2305.0  $\text{cm}^{-1}$  de la région Pentade de  $^{12}\text{CD}_4$ .

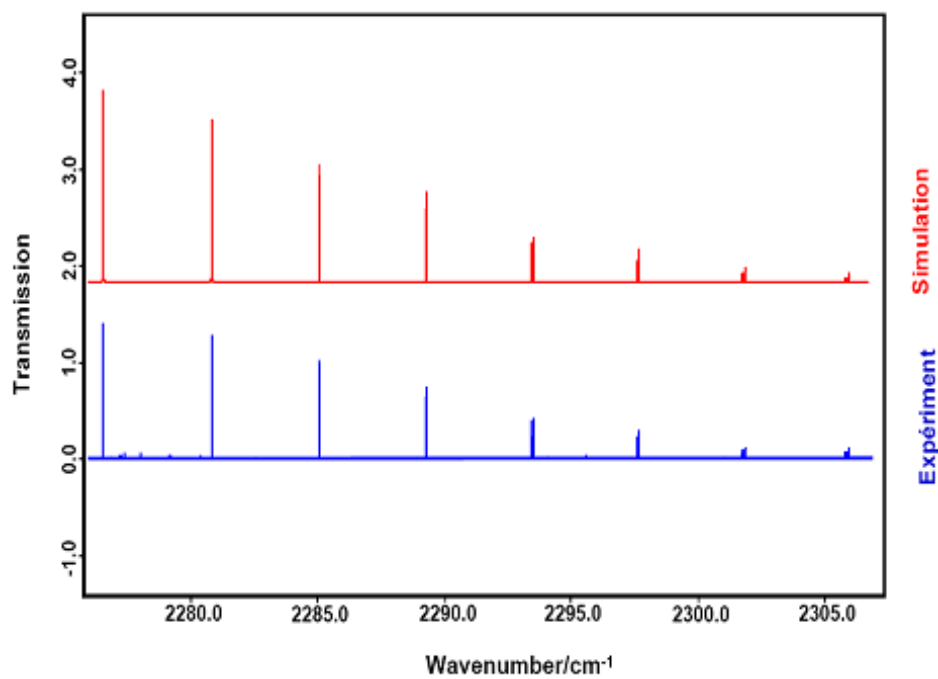


Tableau IV.7 attributions de 893 données pour Diade-GS

$\sigma_{exp}$ Nombre d'onde exp. /cm <sup>-1</sup>	$\sigma_{exp} - \sigma_{cal}$ /10 <sup>-3</sup> cm <sup>-1</sup>	$\sigma_{cal}$ Nombre d'onde cal. /cm <sup>-1</sup>	$E_{sup}$ Niveaux d'énergie sup. /cm <sup>-1</sup>	Caractéristiques Rovibrationnelles des niveaux inférieures			Caractéristiques Rovibrationnelles des niveaux supérieures			branches
				J <sub>inf</sub>	C	N	J <sub>sup</sub>	C	N	
992.605900	-0.515	992.606415	997.871623	1	F1	1	0	F2	1	P
999.494200	-0.517	999.494717	999.494717	0	A1	1	1	A2	1	R
989.155800	-0.309	989.156109	1004.951060	2	E	1	1	E	1	P
988.944300	-0.606	988.944906	1004.739921	2	F2	1	1	F1	1	P
984.836600	-0.671	984.837271	1016.425721	3	A2	1	2	A1	1	P
1076.621800	-0.575	1076.622375	1108.210826	3	A2	1	2	A1	2	P
995.712700	-0.451	995.713151	1011.508102	2	E	1	2	E	1	Q
1092.031800	-0.623	1092.032423	1107.827373	2	E	1	2	E	2	Q
995.895000	-0.591	995.895591	1011.690606	2	F2	1	2	F1	1	Q
1001.078000	-0.571	1001.078571	1016.873586	2	F2	1	2	F1	2	Q
1076.431500	-0.040	1076.431540	1108.019669	3	F2	1	2	F1	3	P
1002.818200	-0.116	1002.818316	1008.083525	1	F1	1	2	F2	1	R
985.615400	-0.869	985.616269	1017.204141	3	F1	1	2	F2	2	P
996.167900	-0.323	996.168223	1027.756673	3	A2	1	3	A1	1	Q
982.244300	-0.791	982.245091	1034.886697	4	A1	1	3	A2	1	P
1006.093000	-0.316	1006.093316	1021.888267	2	E	1	3	E	1	R
981.683600	-0.725	981.684325	1034.326705	4	E	1	3	E	2	P
1071.394400	-1.192	1071.395592	1124.037972	4	E	1	3	E	3	P
1006.045100	-0.195	1006.045295	1021.840310	2	F2	1	3	F1	1	R
1107.953400	0.129	1107.953271	1123.748286	2	F2	1	3	F1	4	R
990.252100	-0.081	990.252181	1021.840310	3	F2	1	3	F1	1	Q
1002.078300	-0.293	1002.078593	1033.666722	3	F2	1	3	F1	3	Q
1093.075400	-0.432	1093.075832	1124.663961	3	F2	1	3	F1	5	Q
974.569000	-0.452	974.569452	1027.212796	4	F2	1	3	F1	2	P
981.022600	-0.778	981.023378	1033.666722	4	F2	1	3	F1	3	P
1072.020500	-0.117	1072.020617	1124.663961	4	F2	1	3	F1	5	P
995.257900	-0.457	995.258357	1026.846229	3	F1	1	3	F2	1	Q
1002.986000	-0.479	1002.986479	1034.574352	3	F1	1	3	F2	2	Q
1092.659500	-0.357	1092.659857	1124.247729	3	F1	1	3	F2	4	Q
981.931400	-0.894	981.932294	1034.574352	4	F1	1	3	F2	2	P
1009.086000	-0.428	1009.086428	1040.674879	3	A2	1	4	A1	1	R
1113.465600	-0.398	1113.465998	1145.054448	3	A2	1	4	A1	2	R
994.414400	-0.350	994.414750	1047.056356	4	A1	1	4	A2	1	Q
1093.315100	-0.022	1093.315122	1145.956728	4	A1	1	4	A2	2	Q
994.967500	-0.615	994.968115	1047.610494	4	E	1	4	E	1	Q
1003.540500	-0.493	1003.540993	1056.183373	4	E	1	4	E	2	Q
1093.967700	-0.069	1093.967769	1146.610149	4	E	1	4	E	4	Q
968.652200	-1.214	968.653414	1047.610494	5	E	1	4	E	1	P
977.225500	-0.792	977.226292	1056.183373	5	E	1	4	E	2	P
1067.652800	-0.269	1067.653069	1146.610149	5	E	1	4	E	4	P
1009.208000	-0.194	1009.208194	1040.796324	3	F2	1	4	F1	1	R
1113.851800	-4.344	1113.856144	1145.444274	3	F2	1	4	F1	5	R
996.013800	-0.601	996.014401	1048.657745	4	F2	1	4	F1	2	Q
1092.800200	-0.730	1092.800930	1145.444274	4	F2	1	4	F1	5	Q
978.126300	-0.721	978.127021	1057.081848	5	F2	1	4	F1	3	P
1066.488900	-0.546	1066.489446	1145.444274	5	F2	1	4	F1	5	P
1009.314600	-0.183	1009.314783	1040.902655	3	F1	1	4	F2	1	R
1114.097100	-0.011	1114.097111	1145.684983	3	F1	1	4	F2	5	R
1003.280800	-0.226	1003.281026	1055.923083	4	F1	1	4	F2	3	Q
1004.871000	-0.550	1004.871550	1057.513607	4	F1	1	4	F2	4	Q
1093.042500	-0.425	1093.042925	1145.684983	4	F1	1	4	F2	5	Q
1093.921400	0.029	1093.921371	1146.563429	4	F1	1	4	F2	6	Q
976.964800	-0.783	976.965583	1055.923083	5	F1	2	4	F2	3	P
978.558800	-0.854	978.559654	1057.513607	5	F1	1	4	F2	4	P
1067.605600	-0.329	1067.605929	1146.563429	5	F1	2	4	F2	6	P
974.379600	-0.356	974.379956	1084.902296	6	A2	1	5	A1	1	P
1061.193800	-0.838	1061.194638	1171.716979	6	A2	1	5	A1	2	P
1012.573300	-0.024	1012.573324	1065.214930	4	A1	1	5	A2	1	R
1121.108500	0.148	1121.108352	1173.749958	4	A1	1	5	A2	3	R
972.482900	-0.362	972.483262	1083.011792	6	A1	1	5	A2	2	P
1063.221200	-0.228	1063.221428	1173.749958	6	A1	1	5	A2	3	P
1012.359600	-0.202	1012.359802	1065.002182	4	E	1	5	E	1	R
1119.788000	-0.302	1119.788302	1172.430681	4	E	1	5	E	4	R
995.669700	-0.420	995.670120	1074.627200	5	E	1	5	E	2	Q

1093.473400	-0.201	1093.473601	1172.430681	5	E	1	5	E	4	Q
974.938700	-0.818	974.939518	1085.460294	6	E	1	5	E	3	P
1061.909500	-0.405	1061.909905	1172.430681	6	E	1	5	E	4	P
1012.136000	-0.187	1012.136187	1064.779531	4	F2	1	5	F1	1	R
1118.664400	-0.644	1118.665044	1171.308388	4	F2	1	5	F1	5	R
1119.551600	-0.348	1119.551948	1172.195292	4	F2	1	5	F1	6	R
1004.882300	-0.285	1004.882585	1083.837413	5	F2	1	5	F1	3	Q
1093.240000	-0.464	1093.240464	1172.195292	5	F2	1	5	F1	6	Q
1095.068800	-0.137	1095.068937	1174.023765	5	F2	1	5	F1	7	Q
962.437500	-0.825	962.438325	1072.964787	6	F2	2	5	F1	2	P
973.310400	-0.550	973.310950	1083.837413	6	F2	2	5	F1	3	P
974.822200	-0.672	974.822872	1085.344036	6	F2	1	5	F1	4	P
1061.672500	-1.628	1061.674128	1172.195292	6	F2	1	5	F1	6	P
1063.496900	-0.403	1063.497303	1174.023765	6	F2	2	5	F1	7	P
1012.446200	-0.271	1012.446471	1065.088529	4	F1	1	5	F2	1	R
1022.198600	-0.543	1022.199143	1074.841200	4	F1	1	5	F2	3	R
1030.764300	-0.814	1030.765114	1083.407171	4	F1	1	5	F2	4	R
993.675900	-0.257	993.676157	1072.630110	5	F1	1	5	F2	2	Q
995.883100	-0.600	995.883700	1074.841200	5	F1	2	5	F2	3	Q
1093.761600	-0.543	1093.762143	1172.716097	5	F1	1	5	F2	6	Q
1094.977100	-0.188	1094.977288	1173.931241	5	F1	1	5	F2	7	Q
962.102300	-0.250	962.102550	1072.630110	6	F1	1	5	F2	2	P
972.878800	-0.810	972.879610	1083.407171	6	F1	1	5	F2	4	P
1063.403500	-0.180	1063.403680	1173.931241	6	F1	1	5	F2	7	P
992.932400	-0.701	992.933101	1103.455442	6	A2	1	6	A1	1	Q
1006.821800	-0.695	1006.822495	1117.344835	6	A2	1	6	A1	2	Q
1096.410800	-0.612	1096.411412	1206.933752	6	A2	1	6	A1	3	Q
956.108900	-1.137	956.110037	1103.455442	7	A2	1	6	A1	1	P
969.998700	-0.731	969.999431	1117.344835	7	A2	1	6	A1	2	P
996.059800	-0.450	996.060250	1106.588780	6	A1	1	6	A2	1	Q
1092.421800	-0.889	1092.422689	1202.951219	6	A1	1	6	A2	2	Q
1015.151900	-0.416	1015.152316	1094.109397	5	E	1	6	E	1	R
1037.175100	-0.544	1037.175644	1116.132724	5	E	1	6	E	3	R
1124.105800	-0.507	1124.106307	1203.063387	5	E	1	6	E	4	R
1125.767600	0.043	1125.767557	1204.724637	5	E	1	6	E	5	R
1005.611500	-0.448	1005.611948	1116.132724	6	E	1	6	E	3	Q
1094.203700	-0.161	1094.203861	1204.724637	6	E	1	6	E	5	Q
1096.283700	-0.345	1096.284045	1206.804821	6	E	1	6	E	6	Q
968.783000	-0.406	968.783406	1116.132724	7	E	1	6	E	3	P
1057.374400	-0.918	1057.375318	1204.724637	7	E	1	6	E	5	P
1059.454900	-0.602	1059.455502	1206.804821	7	E	1	6	E	6	P
1015.504400	0.218	1015.504182	1094.459009	5	F2	1	6	F1	1	R
1026.772500	-0.095	1026.772595	1105.727423	5	F2	1	6	F1	3	R
1125.970900	-0.006	1125.970906	1204.925734	5	F2	1	6	F1	7	R
983.932000	-0.547	983.932547	1094.459009	6	F2	2	6	F1	1	Q
992.683400	-0.477	992.683877	1103.205040	6	F2	1	6	F1	2	Q
995.200700	-0.260	995.200960	1105.727423	6	F2	2	6	F1	3	Q
1006.021900	-0.413	1006.022313	1116.543477	6	F2	1	6	F1	4	Q
1096.337900	-0.536	1096.338436	1206.859600	6	F2	1	6	F1	8	Q
955.856700	-0.387	955.857087	1103.205040	7	F2	2	6	F1	2	P
958.379100	-0.370	958.379470	1105.727423	7	F2	2	6	F1	3	P
969.194700	-0.824	969.195524	1116.543477	7	F2	2	6	F1	4	P
971.109100	-0.596	971.109696	1118.448340	7	F2	1	6	F1	5	P
1056.400800	-0.152	1056.400952	1203.739596	7	F2	1	6	F1	6	P
1057.577100	-0.681	1057.577781	1204.925734	7	F2	2	6	F1	7	P
1059.511100	-0.547	1059.511647	1206.859600	7	F2	2	6	F1	8	P
1015.085800	-0.302	1015.086102	1094.043602	5	F1	2	6	F2	1	R
1015.672600	-0.757	1015.673357	1094.627310	5	F1	1	6	F2	2	R
1036.615000	-0.202	1036.615202	1115.569156	5	F1	1	6	F2	4	R
1125.417800	-0.152	1125.417952	1204.375452	5	F1	2	6	F2	7	R
1127.553200	0.041	1127.553159	1206.507112	5	F1	1	6	F2	8	R
984.099000	-0.750	984.099750	1094.627310	6	F1	1	6	F2	2	Q
1005.041300	-0.295	1005.041595	1115.569156	6	F1	1	6	F2	4	Q
1008.121800	-0.467	1008.122267	1118.649827	6	F1	1	6	F2	5	Q
1092.490500	-1.318	1092.491818	1203.019379	6	F1	1	6	F2	6	Q
1093.847200	-0.691	1093.847891	1204.375452	6	F1	1	6	F2	7	Q
947.275600	-0.300	947.275900	1094.627310	7	F1	2	6	F2	2	P
958.792400	-0.675	958.793075	1106.144485	7	F1	2	6	F2	3	P
968.217400	-0.346	968.217746	1115.569156	7	F1	2	6	F2	4	P
971.311500	-0.558	971.312058	1118.649827	7	F1	1	6	F2	5	P
1057.037000	-0.683	1057.037683	1204.375452	7	F1	1	6	F2	7	P
1059.155200	-0.502	1059.155702	1206.507112	7	F1	2	6	F2	8	P
1018.558500	-0.144	1018.558644	1129.080984	6	A2	1	7	A1	1	R
1031.053300	0.414	1031.052886	1141.575226	6	A2	1	7	A1	2	R
1132.045700	-0.293	1132.045993	1242.568333	6	A2	1	7	A1	3	R
981.735000	-0.580	981.735580	1129.080984	7	A2	1	7	A1	1	Q
994.229900	0.078	994.229822	1141.575226	7	A2	1	7	A1	2	Q
1095.222500	-0.429	1095.222929	1242.568333	7	A2	1	7	A1	3	Q
1017.888900	-0.614	1017.889514	1128.418043	6	A1	1	7	A2	1	R

1131.208600	-0.597	1131.209197	1241.737727	6	A1	1	7	A2	3	R
967.754000	-0.652	967.754652	1157.153929	8	A1	1	7	A2	2	P
1052.337500	-0.951	1052.338451	1241.737727	8	A1	1	7	A2	3	P
1018.776800	-0.390	1018.777190	1129.297966	6	E	1	7	E	1	R
1031.884000	-4.042	1031.888042	1142.408818	6	E	1	7	E	2	R
1042.905100	-0.224	1042.905324	1153.426100	6	E	1	7	E	3	R
1134.209600	-0.694	1134.210294	1244.731070	6	E	1	7	E	6	R
981.947800	-0.848	981.948648	1129.297966	7	E	1	7	E	1	Q
1006.076600	-0.181	1006.076781	1153.426100	7	E	1	7	E	3	Q
1009.571800	-0.056	1009.571856	1156.921175	7	E	1	7	E	4	Q
1093.644300	0.018	1093.644282	1240.993600	7	E	1	7	E	5	Q
952.986700	-0.503	952.987203	1142.408818	8	E	2	7	E	2	P
964.004000	-0.485	964.004485	1153.426100	8	E	2	7	E	3	P
967.520200	-0.409	967.520609	1156.921175	8	E	1	7	E	4	P
1051.593500	0.465	1051.593035	1240.993600	8	E	1	7	E	5	P
1055.308800	-0.655	1055.309455	1244.731070	8	E	2	7	E	6	P
1018.107200	-0.635	1018.107835	1128.634298	6	F2	2	7	F1	1	R
1018.723000	-0.310	1018.723310	1129.244474	6	F2	1	7	F1	2	R
1031.557200	-0.291	1031.557491	1142.078654	6	F2	1	7	F1	4	R
1129.551200	-1.267	1129.552467	1240.078930	6	F2	2	7	F1	7	R
1134.141500	-0.842	1134.142342	1244.663506	6	F2	1	7	F1	9	R
981.285700	-0.645	981.286345	1128.634298	7	F2	2	7	F1	1	Q
981.896600	0.079	981.896521	1129.244474	7	F2	2	7	F1	2	Q
991.395400	-0.112	991.395512	1138.734157	7	F2	1	7	F1	3	Q
994.730600	-0.102	994.730702	1142.078654	7	F2	2	7	F1	4	Q
1005.744800	-0.779	1005.745579	1153.093532	7	F2	2	7	F1	5	Q
1008.017600	-0.715	1008.018315	1155.356959	7	F2	1	7	F1	6	Q
1008.008100	-0.906	1008.009006	1155.356959	7	F2	2	7	F1	6	Q
1095.018400	-0.277	1095.018677	1242.357322	7	F2	1	7	F1	8	Q
1095.008800	-0.569	1095.009369	1242.357322	7	F2	2	7	F1	8	Q
1097.315300	-0.253	1097.315553	1244.663506	7	F2	2	7	F1	9	Q
1097.868500	-0.837	1097.869337	1245.207981	7	F2	1	7	F1	10	Q
939.209900	-1.556	939.211456	1128.634298	8	F2	2	7	F1	1	P
949.321000	-0.266	949.321266	1138.734157	8	F2	1	7	F1	3	P
952.665400	-0.364	952.665764	1142.078654	8	F2	1	7	F1	4	P
952.655700	-0.113	952.655813	1142.078654	8	F2	2	7	F1	4	P
963.670500	-0.191	963.670691	1153.093532	8	F2	2	7	F1	5	P
965.943200	-0.869	965.944069	1155.356959	8	F2	1	7	F1	6	P
1055.240200	-0.465	1055.240665	1244.663506	8	F2	2	7	F1	9	P
1055.793900	-1.191	1055.795091	1245.207981	8	F2	1	7	F1	10	P
1017.988600	-0.677	1017.989277	1128.516837	6	F1	1	7	F2	1	R
1032.678000	0.009	1032.677991	1143.205551	6	F1	1	7	F2	3	R
1131.590900	-0.307	1131.591207	1242.118768	6	F1	1	7	F2	8	R
991.259600	-0.068	991.259668	1138.597437	7	F1	1	7	F2	2	Q
995.853800	-0.341	995.854141	1143.205551	7	F1	2	7	F2	3	Q
1006.841200	-0.141	1006.841341	1154.179110	7	F1	1	7	F2	4	Q
1092.670800	-1.734	1092.672534	1240.023944	7	F1	2	7	F2	6	Q
1097.791300	-0.692	1097.791992	1245.129761	7	F1	1	7	F2	9	Q
949.180200	0.324	949.179876	1138.597437	8	F1	2	7	F2	2	P
964.761500	-0.048	964.761548	1154.179110	8	F1	2	7	F2	4	P
967.610700	-0.760	967.611460	1157.011548	8	F1	1	7	F2	5	P
1055.711500	-0.700	1055.712200	1245.129761	8	F1	2	7	F2	9	P
1021.188100	-0.958	1021.189058	1168.534462	7	A2	1	8	A1	1	R
1135.027900	-1.345	1135.029245	1282.374649	7	A2	1	8	A1	3	R
1140.783700	-0.588	1140.784288	1288.129693	7	A2	1	8	A1	4	R
958.714900	-0.553	958.715453	1195.454427	9	A2	1	8	A1	2	P
1051.390100	-0.620	1051.390720	1288.129693	9	A2	1	8	A1	4	P
989.684300	-0.060	989.684360	1179.083636	8	A1	1	8	A2	1	Q
1007.721400	0.096	1007.721304	1197.120580	8	A1	1	8	A2	2	Q
1094.730900	0.516	1094.730384	1284.129660	8	A1	1	8	A2	3	Q
1099.441300	-1.217	1099.442517	1288.841793	8	A1	1	8	A2	4	Q
942.355100	0.100	942.355000	1179.083636	9	A1	1	8	A2	1	P
960.392000	0.057	960.391943	1197.120580	9	A1	1	8	A2	2	P
1047.401400	0.377	1047.401023	1284.129660	9	A1	1	8	A2	3	P
1052.111800	-1.356	1052.113156	1288.841793	9	A1	1	8	A2	4	P
1020.865100	-0.888	1020.865988	1168.215307	7	E	1	8	E	1	R
1037.511500	0.141	1037.511359	1184.860678	7	E	1	8	E	3	R
1137.715700	-0.462	1137.716162	1285.065481	7	E	1	8	E	6	R
989.806500	-0.269	989.806769	1179.207335	8	E	1	8	E	2	Q
995.438800	-0.263	995.439063	1184.860678	8	E	2	8	E	3	Q
1009.284200	-1.374	1009.285574	1198.707189	8	E	2	8	E	4	Q
1095.664900	-0.016	1095.664916	1285.065481	8	E	1	8	E	6	Q
1095.643100	-0.766	1095.643866	1285.065481	8	E	2	8	E	6	Q
1099.522100	-1.590	1099.523690	1288.924256	8	E	1	8	E	7	Q
948.139300	-0.691	948.139991	1184.860678	9	E	1	8	E	3	P
961.985200	-1.302	961.986502	1198.707189	9	E	1	8	E	4	P
1048.344700	-0.094	1048.344794	1285.065481	9	E	1	8	E	6	P
1052.201900	-1.669	1052.203569	1288.924256	9	E	1	8	E	7	P
1020.972700	-0.655	1020.973355	1168.321308	7	F2	2	8	F1	1	R

1021.760300	-0.539	1021.760839	1169.099484	7	F2	1	8	F1	2	R
1035.661900	0.316	1035.661584	1183.000228	7	F2	1	8	F1	3	R
1048.511700	-0.466	1048.512166	1195.850811	7	F2	1	8	F1	5	R
1048.502200	-0.658	1048.502858	1195.850811	7	F2	2	8	F1	5	R
1134.989700	-2.036	1134.991736	1282.339689	7	F2	2	8	F1	7	R
1136.165600	-0.990	1136.166590	1283.514543	7	F2	2	8	F1	8	R
1137.967300	-0.300	1137.967600	1285.306244	7	F2	1	8	F1	9	R
1137.958000	-0.292	1137.958292	1285.306244	7	F2	2	8	F1	9	R
1140.916700	-0.876	1140.917576	1288.256220	7	F2	1	8	F1	10	R
1140.906800	-1.468	1140.908268	1288.256220	7	F2	2	8	F1	10	R
978.907500	-0.918	978.908418	1168.321308	8	F2	1	8	F1	1	Q
979.686100	-0.493	979.686593	1169.099484	8	F2	1	8	F1	2	Q
993.587400	0.062	993.587338	1183.000228	8	F2	1	8	F1	3	Q
995.700900	-0.270	995.701170	1185.124011	8	F2	2	8	F1	4	Q
1006.437600	-0.321	1006.437921	1195.850811	8	F2	1	8	F1	5	Q
1094.091500	-0.201	1094.091701	1283.514543	8	F2	2	8	F1	8	Q
1095.893000	-0.354	1095.893354	1285.306244	8	F2	1	8	F1	9	Q
1098.842400	-0.930	1098.843330	1288.256220	8	F2	1	8	F1	10	Q
946.264000	0.805	946.263195	1183.000228	9	F2	2	8	F1	3	P
948.422500	-0.187	948.422687	1185.124011	9	F2	1	8	F1	4	P
948.386400	-0.578	948.386978	1185.124011	9	F2	2	8	F1	4	P
959.113300	-0.478	959.113778	1195.850811	9	F2	2	8	F1	5	P
963.927700	-0.629	963.928329	1200.629653	9	F2	1	8	F1	6	P
1046.813100	-0.119	1046.813219	1283.514543	9	F2	1	8	F1	8	P
1051.518300	-0.887	1051.519187	1288.256220	9	F2	2	8	F1	10	P
1020.725800	-0.393	1020.726193	1168.063962	7	F1	1	8	F2	1	R
1020.711600	-0.952	1020.712552	1168.063962	7	F1	2	8	F2	1	R
1021.851200	-0.782	1021.851982	1169.189751	7	F1	1	8	F2	2	R
1036.271000	-0.441	1036.271441	1183.609210	7	F1	1	8	F2	4	R
1048.984700	-0.546	1048.985246	1196.323014	7	F1	1	8	F2	5	R
1051.136700	-1.163	1051.137863	1198.475632	7	F1	1	8	F2	6	R
1136.348100	-0.421	1136.348521	1283.699931	7	F1	2	8	F2	8	R
1137.493900	-0.276	1137.494176	1284.845586	7	F1	2	8	F2	9	R
1141.034200	-1.053	1141.035253	1288.373021	7	F1	1	8	F2	10	R
979.771700	-0.489	979.772189	1169.189751	8	F1	2	8	F2	2	Q
989.764100	-0.263	989.764363	1179.164452	8	F1	1	8	F2	3	Q
994.191300	-0.348	994.191648	1183.609210	8	F1	2	8	F2	4	Q
1009.074700	-0.844	1009.075544	1198.475632	8	F1	1	8	F2	6	Q
1009.057000	-1.071	1009.058071	1198.475632	8	F1	2	8	F2	6	Q
1098.954800	-0.660	1098.955460	1288.373021	8	F1	2	8	F2	10	Q
1099.500400	-1.424	1099.501824	1288.901913	8	F1	1	8	F2	11	Q
942.441900	-0.301	942.442201	1179.164452	9	F1	2	8	F2	3	P
942.429800	-0.102	942.429902	1179.164452	9	F1	3	8	F2	3	P
946.886600	-0.360	946.886960	1183.609210	9	F1	2	8	F2	4	P
946.874300	-0.361	946.874661	1183.609210	9	F1	3	8	F2	4	P
959.588300	-0.165	959.588465	1196.323014	9	F1	3	8	F2	5	P
961.752200	-1.182	961.753382	1198.475632	9	F1	2	8	F2	6	P
964.053200	-0.984	964.054184	1200.754664	9	F1	1	8	F2	7	P
1048.122000	-1.336	1048.123336	1284.845586	9	F1	2	8	F2	9	P
1051.637500	-0.972	1051.638472	1288.373021	9	F1	3	8	F2	10	P
1052.178200	-1.462	1052.179662	1288.901913	9	F1	2	8	F2	11	P
995.831100	-0.347	995.831447	1232.570420	9	A2	1	9	A1	1	Q
1012.774500	-0.658	1012.775158	1249.514131	9	A2	1	9	A1	2	Q
1094.468200	-0.090	1094.468290	1331.207263	9	A2	1	9	A1	3	Q
960.279000	-0.573	960.279573	1249.514131	10	A2	1	9	A1	2	P
1041.972400	-0.305	1041.972705	1331.207263	10	A2	1	9	A1	3	P
1024.932100	-1.005	1024.933105	1214.332381	8	A1	1	9	A2	1	R
1040.637600	-0.889	1040.638489	1230.037765	8	A1	1	9	A2	2	R
1056.599500	-1.477	1056.600977	1246.000253	8	A1	1	9	A2	3	R
1148.113200	-1.533	1148.114733	1337.514009	8	A1	1	9	A2	4	R
977.602600	-1.145	977.603745	1214.332381	9	A1	1	9	A2	1	Q
993.308300	-0.828	993.309128	1230.037765	9	A1	1	9	A2	2	Q
1009.270100	-1.516	1009.271616	1246.000253	9	A1	1	9	A2	3	Q
1100.783800	-1.572	1100.785372	1337.514009	9	A1	1	9	A2	4	Q
940.760800	-1.068	940.761868	1230.037765	10	A1	1	9	A2	2	P
956.722500	-1.857	956.724357	1246.000253	10	A1	1	9	A2	3	P
1048.236200	-1.913	1048.238113	1337.514009	10	A1	1	9	A2	4	P
1023.514000	-0.528	1023.514528	1212.936143	8	E	2	9	E	1	R
1024.828800	-0.811	1024.829611	1214.230177	8	E	1	9	E	2	R
1039.941300	0.291	1039.941009	1229.341574	8	E	1	9	E	3	R
1054.364500	-1.113	1054.365613	1243.766179	8	E	1	9	E	4	R
1054.343900	-0.664	1054.344564	1243.766179	8	E	2	9	E	4	R
1142.022900	-0.119	1142.023019	1331.444634	8	E	2	9	E	6	R
1143.840400	-0.328	1143.840728	1333.262343	8	E	2	9	E	7	R
977.508600	-0.890	977.509490	1214.230177	9	E	1	9	E	2	Q
992.620900	0.013	992.620887	1229.341574	9	E	1	9	E	3	Q
1007.044900	-0.592	1007.045492	1243.766179	9	E	1	9	E	4	Q
1096.541300	-0.356	1096.541656	1333.262343	9	E	1	9	E	7	Q
1100.573400	-1.183	1100.574583	1337.295270	9	E	1	9	E	8	Q

954.477500	-0.564	954.478064	1243.766179	10	E	2	9	E	4	P
960.411800	-0.865	960.412665	1249.646115	10	E	1	9	E	5	P
1042.210500	-0.683	1042.211183	1331.444634	10	E	1	9	E	6	P
1043.974400	0.172	1043.974228	1333.262343	10	E	2	9	E	7	P
1023.446500	-0.972	1023.447472	1212.870313	8	F2	2	9	F1	1	R
1024.023300	-0.937	1024.024237	1213.437128	8	F2	1	9	F1	2	R
1042.723400	-0.092	1042.723492	1232.136382	8	F2	1	9	F1	4	R
1053.857600	-0.635	1053.858235	1243.271126	8	F2	1	9	F1	5	R
1057.854900	-1.334	1057.856234	1247.279075	8	F2	2	9	F1	6	R
1140.477700	-2.562	1140.480262	1329.893153	8	F2	1	9	F1	8	R
1141.926500	-0.402	1141.926902	1331.349744	8	F2	2	9	F1	9	R
1143.546100	-0.210	1143.546310	1332.969151	8	F2	2	9	F1	10	R
976.698500	-1.595	976.700095	1213.437128	9	F2	2	9	F1	2	Q
988.044700	-0.259	988.044959	1224.746283	9	F2	1	9	F1	3	Q
995.398900	-0.449	995.399349	1232.136382	9	F2	2	9	F1	4	Q
1010.576800	-0.951	1010.577751	1247.279075	9	F2	1	9	F1	6	Q
1010.541200	-0.842	1010.542042	1247.279075	9	F2	2	9	F1	6	Q
1094.612400	-0.310	1094.612710	1331.349744	9	F2	2	9	F1	9	Q
1096.267400	-0.427	1096.267827	1332.969151	9	F2	1	9	F1	10	Q
1101.331100	-1.952	1101.333052	1338.034377	9	F2	1	9	F1	12	Q
935.482700	-0.763	935.483463	1224.746283	10	F2	2	9	F1	3	P
942.873500	-0.062	942.873562	1232.136382	10	F2	2	9	F1	4	P
942.845100	0.171	942.844929	1232.136382	10	F2	3	9	F1	4	P
953.978700	-0.972	953.979672	1243.271126	10	F2	3	9	F1	5	P
958.015100	-1.155	958.016255	1247.279075	10	F2	2	9	F1	6	P
960.371300	-0.828	960.372128	1249.605928	10	F2	1	9	F1	7	P
1042.115700	-0.244	1042.115944	1331.349744	10	F2	1	9	F1	9	P
1043.705800	-0.531	1043.706331	1332.969151	10	F2	2	9	F1	10	P
1047.813600	-0.989	1047.814589	1337.106043	10	F2	3	9	F1	11	P
1048.769400	-2.157	1048.771557	1338.034377	10	F2	2	9	F1	12	P
1023.737300	-0.471	1023.737771	1213.155333	8	F1	2	9	F2	1	R
1024.867200	-0.611	1024.867811	1214.267899	8	F1	1	9	F2	2	R
1040.114000	-0.194	1040.114194	1229.514282	8	F1	1	9	F2	4	R
1040.096100	-0.621	1040.096721	1229.514282	8	F1	2	9	F2	4	R
1042.245400	-0.194	1042.245594	1231.663156	8	F1	2	9	F2	5	R
1140.454800	-2.303	1140.457103	1329.874665	8	F1	2	9	F2	8	R
1143.998400	-0.246	1143.998646	1333.416208	8	F1	2	9	F2	10	R
1147.980200	-1.324	1147.981524	1337.381612	8	F1	1	9	F2	11	R
976.432200	-0.883	976.433083	1213.155333	9	F1	2	9	F2	1	Q
976.420400	-0.384	976.420784	1213.155333	9	F1	3	9	F2	1	Q
977.544900	-0.749	977.545649	1214.267899	9	F1	2	9	F2	2	Q
987.997500	-0.078	987.997578	1224.698058	9	F1	1	9	F2	3	Q
992.792100	0.068	992.792032	1229.514282	9	F1	2	9	F2	4	Q
992.779700	-0.033	992.779733	1229.514282	9	F1	3	9	F2	4	Q
994.940200	-0.706	994.940906	1231.663156	9	F1	2	9	F2	5	Q
994.928200	-0.407	994.928607	1231.663156	9	F1	3	9	F2	5	Q
1007.532700	-0.455	1007.533155	1244.233635	9	F1	1	9	F2	6	Q
1007.510400	-0.985	1007.511385	1244.233635	9	F1	2	9	F2	6	Q
1007.498500	-0.586	1007.499086	1244.233635	9	F1	3	9	F2	6	Q
1010.156300	-1.091	1010.157391	1246.857871	9	F1	1	9	F2	7	Q
1010.134400	-1.221	1010.135621	1246.857871	9	F1	2	9	F2	7	Q
1010.122400	-0.922	1010.123322	1246.857871	9	F1	3	9	F2	7	Q
1093.137800	-2.315	1093.140115	1329.874665	9	F1	3	9	F2	8	Q
1096.693700	-0.258	1096.693958	1333.416208	9	F1	2	9	F2	10	Q
1096.681500	-0.159	1096.681659	1333.416208	9	F1	3	9	F2	10	Q
1100.658000	-1.362	1100.659362	1337.381612	9	F1	2	9	F2	11	Q
1101.302200	-1.774	1101.303974	1338.004454	9	F1	1	9	F2	12	Q
935.431500	-0.193	935.431693	1224.698058	10	F1	1	9	F2	3	P
940.229300	0.125	940.229175	1229.514282	10	F1	2	9	F2	4	P
954.948100	-0.428	954.948528	1244.233635	10	F1	2	9	F2	6	P
957.590400	-1.106	957.591506	1246.857871	10	F1	1	9	F2	7	P
957.571800	-0.963	957.572763	1246.857871	10	F1	2	9	F2	7	P
1042.871900	0.344	1042.871556	1332.137921	10	F1	1	9	F2	9	P
1048.736000	-2.089	1048.738089	1338.004454	10	F1	1	9	F2	12	P
1026.073500	-0.621	1026.074121	1262.813094	9	A2	1	10	A1	1	R
1064.559000	-1.047	1064.560047	1301.299021	9	A2	1	10	A1	3	R
1149.513900	0.162	1149.513738	1386.252711	9	A2	1	10	A1	4	R
986.139500	-0.393	986.139893	1275.374451	10	A2	1	10	A1	2	Q
1012.063300	-1.163	1012.064463	1301.299021	10	A2	1	10	A1	3	Q
1103.285600	-2.192	1103.287792	1392.522349	10	A2	1	10	A1	5	Q
954.267500	-1.560	954.269060	1301.299021	11	A2	1	10	A1	3	P
1039.222600	-0.151	1039.222751	1386.252711	11	A2	1	10	A1	4	P
1045.489900	-2.489	1045.492389	1392.522349	11	A2	1	10	A1	5	P
1026.505200	-0.293	1026.505493	1263.234129	9	A1	1	10	A2	1	R
1046.256800	0.101	1046.256699	1282.985336	9	A1	1	10	A2	2	R
1150.163300	-0.255	1150.163555	1386.892192	9	A1	1	10	A2	4	R
973.957300	-0.933	973.958233	1263.234129	10	A1	1	10	A2	1	Q
1093.387200	-3.201	1093.390401	1382.666298	10	A1	1	10	A2	3	Q
1097.615800	-0.496	1097.616296	1386.892192	10	A1	1	10	A2	4	Q

1026.866000	-1.143	1026.867143	1263.587830	9	E	1	10	E	1	R
1047.418600	-0.477	1047.419077	1284.139764	9	E	1	10	E	3	R
1059.648700	-1.005	1059.649705	1296.370393	9	E	1	10	E	4	R
1154.781500	-0.744	1154.782244	1391.502931	9	E	1	10	E	8	R
974.298800	-0.915	974.299715	1263.587830	10	E	2	10	E	1	Q
986.101100	-0.581	986.101681	1275.335132	10	E	1	10	E	2	Q
1007.081400	-0.877	1007.082277	1296.370393	10	E	2	10	E	4	Q
1096.104500	-0.063	1096.104563	1385.338013	10	E	1	10	E	7	Q
1102.209500	-5.316	1102.214816	1391.502931	10	E	2	10	E	8	Q
1103.261300	-2.115	1103.263415	1392.496866	10	E	1	10	E	9	Q
949.295500	-0.707	949.296207	1296.370393	11	E	2	10	E	4	P
953.641300	-0.908	953.642208	1300.678191	11	E	1	10	E	5	P
1044.427800	-0.945	1044.428745	1391.502931	11	E	2	10	E	8	P
1045.458600	-2.283	1045.460883	1392.496866	11	E	1	10	E	9	P
1026.151800	-0.670	1026.152470	1262.889504	9	F2	2	10	F1	1	R
1027.869500	-0.900	1027.870400	1264.571724	9	F2	1	10	F1	2	R
1044.025400	-0.230	1044.025630	1280.726954	9	F2	1	10	F1	4	R
1064.192800	-1.264	1064.194064	1300.931097	9	F2	2	10	F1	7	R
1147.553200	-0.361	1147.553561	1384.290594	9	F2	2	10	F1	9	R
1149.817800	0.100	1149.817700	1386.554733	9	F2	2	10	F1	11	R
1155.050500	-1.521	1155.052021	1391.753345	9	F2	1	10	F1	12	R
975.308000	-0.904	975.308904	1264.571724	10	F2	2	10	F1	2	Q
986.113700	-0.599	986.114299	1275.348099	10	F2	1	10	F1	3	Q
991.463900	-0.234	991.464134	1280.726954	10	F2	2	10	F1	4	Q
995.594500	-0.336	995.594836	1284.857656	10	F2	2	10	F1	5	Q
995.565900	-0.303	995.566203	1284.857656	10	F2	3	10	F1	5	Q
1007.697800	-0.620	1007.698420	1296.961240	10	F2	2	10	F1	6	Q
1011.638600	-1.044	1011.639644	1300.931097	10	F2	3	10	F1	7	Q
1094.998800	-0.341	1094.999141	1384.290594	10	F2	3	10	F1	9	Q
1096.206200	0.600	1096.205600	1385.468419	10	F2	2	10	F1	10	Q
1097.291800	-0.114	1097.291914	1386.554733	10	F2	2	10	F1	11	Q
1097.267100	3.820	1097.263280	1386.554733	10	F2	3	10	F1	11	Q
1102.488800	-1.725	1102.490525	1391.753345	10	F2	2	10	F1	12	Q
1103.270100	-2.026	1103.272126	1392.505926	10	F2	1	10	F1	13	Q
933.657800	-0.437	933.658237	1280.726954	11	F2	3	10	F1	4	P
949.892100	-0.423	949.892523	1296.961240	11	F2	3	10	F1	6	P
953.896400	-1.072	953.897472	1300.931097	11	F2	2	10	F1	7	P
956.712400	-0.852	956.713252	1303.704928	11	F2	1	10	F1	8	P
956.667900	-3.403	956.671303	1303.704928	11	F2	2	10	F1	8	P
1037.297900	-1.018	1037.298918	1384.290594	11	F2	1	10	F1	9	P
1038.435200	0.405	1038.434795	1385.468419	11	F2	2	10	F1	10	P
1038.400600	0.898	1038.399702	1385.468419	11	F2	3	10	F1	10	P
1044.683200	-1.427	1044.684627	1391.753345	11	F2	3	10	F1	12	P
1045.469900	-2.401	1045.472301	1392.505926	11	F2	2	10	F1	13	P
1026.254000	-0.519	1026.254519	1262.989068	9	F1	3	10	F2	1	R
1026.792600	-1.180	1026.793780	1263.516030	9	F1	2	10	F2	2	R
1027.921000	-1.188	1027.922188	1264.622668	9	F1	1	10	F2	3	R
1044.285200	-0.601	1044.285801	1280.986281	9	F1	1	10	F2	4	R
1046.990000	0.262	1046.989738	1283.724288	9	F1	3	10	F2	5	R
1059.280300	-0.887	1059.281187	1296.003437	9	F1	2	10	F2	6	R
1059.267900	-0.988	1059.268888	1296.003437	9	F1	3	10	F2	6	R
1062.674000	-1.535	1062.675535	1299.376015	9	F1	1	10	F2	7	R
1147.679600	-0.892	1147.680492	1384.415041	9	F1	3	10	F2	10	R
1150.018800	0.107	1150.018693	1386.740943	9	F1	2	10	F2	11	R
1150.006200	-0.194	1150.006394	1386.740943	9	F1	3	10	F2	11	R
1154.717500	-1.063	1154.718563	1391.440813	9	F1	2	10	F2	12	R
1155.202900	-1.882	1155.204782	1391.905262	9	F1	1	10	F2	13	R
975.355000	-1.303	975.356303	1264.622668	10	F1	1	10	F2	3	Q
991.719200	-0.716	991.719916	1280.986281	10	F1	1	10	F2	4	Q
991.700200	-0.974	991.701174	1280.986281	10	F1	2	10	F2	4	Q
1006.735800	-1.272	1006.737072	1296.003437	10	F1	1	10	F2	6	Q
1010.108200	-1.450	1010.109650	1299.376015	10	F1	1	10	F2	7	Q
1010.089700	-1.208	1010.090908	1299.376015	10	F1	2	10	F2	7	Q
1097.474100	-0.478	1097.474578	1386.740943	10	F1	1	10	F2	11	Q
1097.456100	0.264	1097.455836	1386.740943	10	F1	2	10	F2	11	Q
1102.154500	-1.205	1102.155705	1391.440813	10	F1	2	10	F2	12	Q
1102.637000	-1.897	1102.638897	1391.905262	10	F1	1	10	F2	13	Q
1102.617900	-2.254	1102.620154	1391.905262	10	F1	2	10	F2	13	Q
933.932000	-0.827	933.932827	1280.986281	11	F1	2	10	F2	4	P
948.925800	-1.048	948.926848	1296.003437	11	F1	3	10	F2	6	P
952.320800	-1.761	952.322561	1299.376015	11	F1	2	10	F2	7	P
956.768700	-0.713	956.769413	1303.760494	11	F1	1	10	F2	8	P
1037.423500	-0.460	1037.423960	1384.415041	11	F1	1	10	F2	10	P
1044.363200	-1.024	1044.364224	1391.440813	11	F1	3	10	F2	12	P
1044.849500	-2.308	1044.851808	1391.905262	11	F1	2	10	F2	13	P
1030.860900	-1.092	1030.861992	1320.096550	10	A2	1	11	A1	1	R
1047.842600	-0.571	1047.843171	1337.077729	10	A2	1	11	A1	2	R
1065.735100	-0.797	1065.735897	1354.970454	10	A2	1	11	A1	3	R
1162.300900	-1.671	1162.302571	1451.537128	10	A2	1	11	A1	5	R



973.064800	-1.790	973.066590	1320.096550	11	A2	1	11	A1	1	Q
990.046800	-0.969	990.047769	1337.077729	11	A2	1	11	A1	2	Q
1007.939800	-0.694	1007.940494	1354.970454	11	A2	1	11	A1	3	Q
1097.372100	0.149	1097.371951	1444.401911	11	A2	1	11	A1	4	Q
1104.505200	-1.968	1104.507168	1451.537128	11	A2	1	11	A1	5	Q
944.894600	-0.285	944.894885	1354.970454	12	A2	1	11	A1	3	P
1034.326500	0.159	1034.326341	1444.401911	12	A2	1	11	A1	4	P
1041.460200	-1.359	1041.461559	1451.537128	12	A2	1	11	A1	5	P
1029.213000	-0.752	1029.213752	1318.489648	10	A1	1	11	A2	1	R
1064.308600	-1.134	1064.309734	1353.585630	10	A1	1	11	A2	2	R
1153.390300	-0.517	1153.390817	1442.666714	10	A1	1	11	A2	4	R
1161.813600	-0.322	1161.813922	1451.089818	10	A1	1	11	A2	5	R
943.495600	-0.919	943.496519	1353.585630	12	A1	2	11	A2	2	P
953.140400	-0.566	953.140966	1363.106035	12	A1	1	11	A2	3	P
1032.700400	-1.245	1032.701645	1442.666714	12	A1	1	11	A2	4	P
1041.000400	-0.307	1041.000707	1451.089818	12	A1	2	11	A2	5	P
1028.827400	-0.447	1028.827847	1318.115962	10	E	2	11	E	1	R
1030.911600	-1.518	1030.913118	1320.146569	10	E	1	11	E	2	R
1153.265500	-0.642	1153.266142	1442.554257	10	E	2	11	E	7	R
1156.024100	0.340	1156.023760	1445.311875	10	E	2	11	E	8	R
1162.458300	-1.739	1162.460039	1451.693490	10	E	1	11	E	9	R
973.108900	-1.686	973.110586	1320.146569	11	E	1	11	E	2	Q
990.296400	-0.900	990.297300	1337.333282	11	E	1	11	E	3	Q
995.069600	-0.125	995.069725	1342.143911	11	E	2	11	E	4	Q
1011.067000	-1.318	1011.068318	1358.104301	11	E	1	11	E	5	Q
1011.029000	-1.115	1011.030115	1358.104301	11	E	2	11	E	5	Q
1095.479000	-1.071	1095.480071	1442.554257	11	E	2	11	E	7	Q
1098.276400	0.508	1098.275892	1445.311875	11	E	1	11	E	8	Q
1104.655600	-1.907	1104.657507	1451.693490	11	E	1	11	E	9	Q
948.051100	-1.813	948.052913	1358.104301	12	E	2	11	E	5	P
953.085800	-0.611	953.086411	1363.052203	12	E	1	11	E	6	P
1032.586700	-1.766	1032.588466	1442.554257	12	E	1	11	E	7	P
1041.639700	-2.402	1041.642102	1451.693490	12	E	2	11	E	9	P
1028.721700	-0.559	1028.722259	1318.013713	10	F2	3	11	F1	1	R
1029.679300	-0.746	1029.680046	1318.942865	10	F2	2	11	F1	2	R
1030.895600	-1.286	1030.896886	1320.130686	10	F2	1	11	F1	3	R
1048.005700	-0.788	1048.006488	1337.240288	10	F2	1	11	F1	5	R
1051.784100	-0.802	1051.784902	1341.047722	10	F2	2	11	F1	6	R
1065.136600	-0.978	1065.137578	1354.400398	10	F2	2	11	F1	7	R
1068.551600	-1.063	1068.552663	1357.786463	10	F2	1	11	F1	8	R
1068.522100	-1.543	1068.523643	1357.786463	10	F2	2	11	F1	8	R
1070.886900	-1.212	1070.888112	1360.179565	10	F2	3	11	F1	9	R
1155.849400	0.834	1155.848566	1445.140019	10	F2	3	11	F1	12	R
1161.998800	-0.841	1161.999641	1451.262460	10	F2	2	11	F1	13	R
1162.422200	-1.664	1162.423864	1451.657664	10	F2	1	11	F1	14	R
971.874000	-0.148	971.874148	1318.942865	11	F2	3	11	F1	2	Q
973.095400	-1.662	973.097062	1320.130686	11	F2	2	11	F1	3	Q
984.067400	-0.980	984.068380	1331.060056	11	F2	1	11	F1	4	Q
990.205500	-1.164	990.206664	1337.240288	11	F2	2	11	F1	5	Q
990.170600	-0.971	990.171571	1337.240288	11	F2	3	11	F1	5	Q
993.978500	-0.504	993.979004	1341.047722	11	F2	3	11	F1	6	Q
1007.366000	-0.774	1007.366774	1354.400398	11	F2	2	11	F1	7	Q
1007.331300	-0.381	1007.331681	1354.400398	11	F2	3	11	F1	7	Q
1010.751100	-1.739	1010.752839	1357.786463	11	F2	2	11	F1	8	Q
1010.716600	-1.146	1010.717746	1357.786463	11	F2	3	11	F1	8	Q
1013.186900	-0.989	1013.187889	1360.179565	11	F2	1	11	F1	9	Q
1096.970000	0.603	1096.969397	1444.003021	11	F2	2	11	F1	11	Q
1096.935100	0.796	1096.934304	1444.003021	11	F2	3	11	F1	11	Q
1098.106700	0.305	1098.106395	1445.140019	11	F2	2	11	F1	12	Q
1104.193000	-0.743	1104.193743	1451.262460	11	F2	3	11	F1	13	Q
1104.622100	-1.939	1104.624039	1451.657664	11	F2	2	11	F1	14	Q
1105.346200	-1.337	1105.347537	1452.339213	11	F2	1	11	F1	15	Q
944.317700	-0.479	944.318179	1354.400398	12	F2	3	11	F1	7	P
947.729700	-1.635	947.731335	1357.786463	12	F2	2	11	F1	8	P
947.702900	-1.344	947.704244	1357.786463	12	F2	3	11	F1	8	P
950.158300	-1.418	950.159718	1360.179565	12	F2	1	11	F1	9	P
1033.983200	0.026	1033.983174	1444.003021	12	F2	1	11	F1	11	P
1033.922800	1.998	1033.920802	1444.003021	12	F2	3	11	F1	11	P
1035.085800	0.909	1035.084891	1445.140019	12	F2	2	11	F1	12	P
1041.179300	-0.941	1041.180241	1451.262460	12	F2	3	11	F1	13	P
1041.600200	-2.336	1041.602536	1451.657664	12	F2	2	11	F1	14	P
1042.317300	-2.066	1042.319366	1452.339213	12	F2	1	11	F1	15	P
1028.922400	-0.622	1028.923022	1318.208129	10	F1	2	11	F2	1	R
1050.857200	-0.355	1050.857555	1340.123920	10	F1	1	11	F2	4	R
1050.838500	-0.313	1050.838813	1340.123920	10	F1	2	11	F2	4	R
1064.696600	-0.975	1064.697575	1353.963940	10	F1	1	11	F2	6	R
1064.678000	-0.832	1064.678832	1353.963940	10	F1	2	11	F2	6	R
1153.301900	-0.848	1153.302748	1442.587856	10	F1	2	11	F2	10	R
1156.222900	-0.224	1156.223124	1445.489489	10	F1	1	11	F2	12	R

1156.204100	-0.282	1156.204382	1445.489489	10	F1	2	11	F2	12	R
1161.903000	-0.846	1161.903846	1451.170212	10	F1	1	11	F2	13	R
971.153500	-1.175	971.154675	1318.208129	11	F1	2	11	F2	1	Q
971.766100	-0.312	971.766412	1318.819866	11	F1	2	11	F2	2	Q
984.054600	-0.917	984.055517	1331.046598	11	F1	1	11	F2	3	Q
993.069800	-0.666	993.070466	1340.123920	11	F1	2	11	F2	4	Q
995.374300	-0.501	995.374801	1342.451389	11	F1	3	11	F2	5	Q
1006.886500	-0.851	1006.887351	1353.963940	11	F1	3	11	F2	6	Q
1012.785200	-0.816	1012.786016	1359.777097	11	F1	1	11	F2	7	Q
1012.699900	-0.608	1012.700508	1359.777097	11	F1	3	11	F2	7	Q
1015.996500	2.336	1015.994164	1363.070753	11	F1	3	11	F2	8	Q
1095.510600	-0.667	1095.511267	1442.587856	11	F1	3	11	F2	10	Q
1096.794500	0.016	1096.794484	1443.785565	11	F1	1	11	F2	11	Q
1096.709200	0.224	1096.708976	1443.785565	11	F1	3	11	F2	11	Q
1098.435500	-0.535	1098.436035	1445.489489	11	F1	2	11	F2	12	Q
1105.338000	-1.452	1105.339452	1452.330533	11	F1	1	11	F2	14	Q
943.877300	-0.539	943.877839	1353.963940	12	F1	3	11	F2	6	P
949.751700	-1.028	949.752728	1359.777097	12	F1	2	11	F2	7	P
953.104500	-0.708	953.105208	1363.070753	12	F1	1	11	F2	8	P
1032.620600	-1.710	1032.622310	1442.587856	12	F1	1	11	F2	10	P
1033.760900	-0.296	1033.761196	1443.785565	12	F1	2	11	F2	11	P
1041.083500	-0.611	1041.084111	1451.170212	12	F1	3	11	F2	13	P
1042.304300	-1.864	1042.306164	1452.330533	12	F1	2	11	F2	14	P
1032.522500	-0.729	1032.523229	1379.553189	11	A2	1	12	A1	1	R
1056.200600	-0.657	1056.201257	1403.231217	11	A2	1	12	A1	2	R
1169.454500	-1.257	1169.455757	1516.485717	11	A2	1	12	A1	5	R
993.155600	-0.047	993.155647	1403.231217	12	A2	1	12	A1	2	Q
1010.699200	-0.587	1010.699787	1420.775357	12	A2	1	12	A1	3	Q
1106.409400	-0.747	1106.410147	1516.485717	12	A2	1	12	A1	5	Q
1038.201400	-1.266	1038.202666	1516.485717	13	A2	1	12	A1	5	P
995.452300	-0.533	995.452833	1405.541944	12	A1	2	12	A2	2	Q
1013.980400	-1.220	1013.981620	1423.946689	12	A1	1	12	A2	3	Q
1013.857100	-0.478	1013.857578	1423.946689	12	A1	2	12	A2	3	Q
1097.390800	-1.960	1097.392760	1507.357829	12	A1	1	12	A2	4	Q
945.720300	-0.905	945.721205	1423.946689	13	A1	1	12	A2	3	P
1029.130500	-1.844	1029.132344	1507.357829	13	A1	1	12	A2	4	P
1039.255600	0.736	1039.254864	1517.480349	13	A1	1	12	A2	5	P
1031.357100	-0.463	1031.357563	1378.431749	11	E	2	12	E	1	R
1032.360600	-0.765	1032.361365	1379.397347	11	E	1	12	E	2	R
1055.123800	-0.966	1055.124766	1402.160749	11	E	1	12	E	4	R
1069.977200	-0.728	1069.977928	1417.013911	11	E	1	12	E	5	R
1077.367200	0.134	1077.367066	1424.403049	11	E	1	12	E	6	R
1160.573100	1.253	1160.571847	1507.646032	11	E	2	12	E	8	R
1162.249400	0.688	1162.248712	1509.284694	11	E	1	12	E	9	R
1162.211200	0.692	1162.210508	1509.284694	11	E	2	12	E	9	R
1169.242800	-1.313	1169.244113	1516.280096	11	E	1	12	E	10	R
969.345000	-0.960	969.345960	1379.397347	12	E	2	12	E	2	Q
992.108000	-1.361	992.109361	1402.160749	12	E	2	12	E	4	Q
1006.961700	-0.823	1006.962523	1417.013911	12	E	2	12	E	5	Q
1014.436300	-0.957	1014.437257	1424.403049	12	E	1	12	E	6	Q
1099.233200	-0.107	1099.233307	1509.284694	12	E	2	12	E	9	Q
1106.227000	-1.708	1106.228708	1516.280096	12	E	2	12	E	10	Q
938.700700	0.182	938.700518	1417.013911	13	E	2	12	E	5	P
946.183000	-0.812	946.183812	1424.403049	13	E	1	12	E	6	P
1037.966300	-0.404	1037.966704	1516.280096	13	E	2	12	E	10	P
1031.499200	-0.264	1031.499464	1378.568182	11	F2	3	12	F1	1	R
1032.423200	-0.475	1032.423675	1379.457300	11	F2	2	12	F1	2	R
1055.360500	-0.927	1055.361427	1402.395052	11	F2	2	12	F1	5	R
1055.326100	-0.235	1055.326335	1402.395052	11	F2	3	12	F1	5	R
1057.550200	-1.095	1057.551295	1404.584919	11	F2	2	12	F1	6	R
1057.515800	-0.402	1057.516202	1404.584919	11	F2	3	12	F1	6	R
1070.399800	-0.610	1070.400410	1417.434035	11	F2	2	12	F1	7	R
1074.432100	-0.409	1074.432509	1421.466134	11	F2	2	12	F1	8	R
1158.973400	-2.248	1158.975648	1506.044366	11	F2	3	12	F1	11	R
1161.287300	-0.920	1161.288220	1508.279896	11	F2	1	12	F1	12	R
1161.245400	-0.872	1161.246272	1508.279896	11	F2	2	12	F1	12	R
1162.329200	0.425	1162.328775	1509.397492	11	F2	3	12	F1	13	R
1169.316200	-0.922	1169.317122	1516.350747	11	F2	2	12	F1	14	R
1169.785800	-1.484	1169.787284	1516.778960	11	F2	1	12	F1	15	R
968.511800	-1.254	968.513054	1378.568182	12	F2	2	12	F1	1	Q
969.400900	-1.272	969.402172	1379.457300	12	F2	2	12	F1	2	Q
970.824800	-2.128	970.826928	1380.846775	12	F2	1	12	F1	3	Q
988.629700	-1.775	988.631475	1398.651322	12	F2	1	12	F1	4	Q
992.338700	-1.224	992.339924	1402.395052	12	F2	2	12	F1	5	Q
994.528800	-0.992	994.529792	1404.584919	12	F2	2	12	F1	6	Q
994.502300	-0.400	994.502700	1404.584919	12	F2	3	12	F1	6	Q
1007.378100	-0.807	1007.378907	1417.434035	12	F2	2	12	F1	7	Q
1011.409800	-1.206	1011.411006	1421.466134	12	F2	2	12	F1	8	Q
1095.959500	-2.647	1095.962147	1506.044366	12	F2	3	12	F1	11	Q

1098.259300	-0.749	1098.260049	1508.279896	12	F2	1	12	F1	12	Q
1098.197600	-0.077	1098.197677	1508.279896	12	F2	3	12	F1	12	Q
1099.342100	-0.264	1099.342364	1509.397492	12	F2	2	12	F1	13	Q
1106.294300	-1.319	1106.295619	1516.350747	12	F2	2	12	F1	14	Q
1106.757200	-1.913	1106.759113	1516.778960	12	F2	1	12	F1	15	Q
939.125200	0.157	939.125043	1417.434035	13	F2	3	12	F1	7	P
943.193900	-1.164	943.195064	1421.466134	13	F2	2	12	F1	8	P
949.449400	-0.079	949.449479	1427.597464	13	F2	1	12	F1	9	P
1027.893600	-2.781	1027.896381	1506.044366	13	F2	1	12	F1	11	P
1038.078600	-1.077	1038.079677	1516.350747	13	F2	2	12	F1	14	P
1038.041500	-0.255	1038.041755	1516.350747	13	F2	3	12	F1	14	P
1038.506200	-1.691	1038.507891	1516.778960	13	F2	2	12	F1	15	P
1031.299700	-0.241	1031.299941	1378.376529	11	F1	3	12	F2	1	R
1031.856800	-0.442	1031.857242	1378.910696	11	F1	2	12	F2	2	R
1033.873600	-1.869	1033.875469	1380.866550	11	F1	1	12	F2	3	R
1051.766700	-1.107	1051.767807	1398.758888	11	F1	1	12	F2	5	R
1069.544300	-0.462	1069.544762	1416.598216	11	F1	2	12	F2	7	R
1074.943000	-0.507	1074.943507	1422.020096	11	F1	3	12	F2	8	R
1159.026900	-1.435	1159.028335	1506.081789	11	F1	2	12	F2	11	R
1161.987400	2.013	1161.985387	1509.061976	11	F1	3	12	F2	13	R
1169.118900	-0.363	1169.119263	1516.172717	11	F1	2	12	F2	14	R
1169.832700	-1.027	1169.833727	1516.824808	11	F1	1	12	F2	15	R
970.840100	-2.081	970.842181	1380.866550	12	F1	2	12	F2	3	Q
988.733200	-1.319	988.734519	1398.758888	12	F1	2	12	F2	5	Q
995.012700	-0.329	995.013029	1405.099130	12	F1	3	12	F2	6	Q
1006.512000	-0.115	1006.512115	1416.598216	12	F1	3	12	F2	7	Q
1011.994400	-1.327	1011.995727	1422.020096	12	F1	2	12	F2	8	Q
1014.314400	-0.967	1014.315367	1424.280913	12	F1	1	12	F2	9	Q
1014.194100	-0.712	1014.194812	1424.280913	12	F1	3	12	F2	9	Q
1099.038600	0.993	1099.037607	1509.061976	12	F1	2	12	F2	13	Q
1106.799100	-1.339	1106.800439	1516.824808	12	F1	2	12	F2	15	Q
938.280600	0.072	938.280528	1416.598216	13	F1	4	12	F2	7	P
943.755600	-1.484	943.757084	1422.020096	13	F1	3	12	F2	8	P
946.058800	-1.074	946.059874	1424.280913	13	F1	2	12	F2	9	P
949.472700	-0.022	949.472722	1427.620320	13	F1	1	12	F2	10	P
1029.310300	-0.708	1029.311008	1507.532047	13	F1	2	12	F2	12	P
1029.272200	3.165	1029.269035	1507.532047	13	F1	3	12	F2	12	P
1037.855500	0.471	1037.855029	1516.172717	13	F1	4	12	F2	14	P
1038.560100	-1.696	1038.561796	1516.824808	13	F1	3	12	F2	15	P
1034.084300	-1.185	1034.085485	1444.161055	12	A2	1	13	A1	1	R
1164.667600	-4.352	1164.671952	1574.747522	12	A2	1	13	A1	4	R
1168.535800	-0.133	1168.535933	1578.611503	12	A2	1	13	A1	5	R
965.876500	-1.504	965.878004	1444.161055	13	A2	1	13	A1	1	Q
992.985700	-2.739	992.988439	1471.271490	13	A2	1	13	A1	2	Q
1100.327700	-0.752	1100.328452	1578.611503	13	A2	1	13	A1	5	Q
1033.801300	-0.112	1033.801412	1443.890523	12	A1	2	13	A2	1	R
1036.810800	-2.513	1036.813313	1446.778382	12	A1	1	13	A2	2	R
1055.344000	-0.932	1055.344932	1465.310001	12	A1	1	13	A2	3	R
968.550300	-2.597	968.552897	1446.778382	13	A1	1	13	A2	2	Q
987.084100	-0.416	987.084516	1465.310001	13	A1	1	13	A2	3	Q
1109.060800	0.160	1109.060640	1587.286124	13	A1	1	13	A2	6	Q
939.931300	0.112	939.931188	1491.604119	14	A1	1	13	A2	4	P
1035.613300	0.107	1035.613193	1587.286124	14	A1	1	13	A2	6	P
1034.511400	0.432	1034.510968	1444.562355	12	E	2	13	E	1	R
1055.253700	-1.712	1055.255412	1465.221204	12	E	1	13	E	3	R
1062.686400	-0.064	1062.686464	1472.737852	12	E	2	13	E	4	R
1074.799500	-0.141	1074.799641	1484.851029	12	E	2	13	E	5	R
1080.495000	-0.901	1080.495901	1490.547289	12	E	2	13	E	6	R
1164.718100	-3.577	1164.721677	1574.773065	12	E	2	13	E	8	R
987.000000	-1.967	987.001967	1465.221204	13	E	1	13	E	3	Q
994.424600	0.140	994.424460	1472.737852	13	E	2	13	E	4	Q
1006.631200	-0.592	1006.631792	1484.851029	13	E	1	13	E	5	Q
1012.233800	-0.096	1012.233896	1490.547289	13	E	2	13	E	6	Q
1099.100600	-2.679	1099.103279	1577.322516	13	E	1	13	E	9	Q
1099.007600	-1.523	1099.009123	1577.322516	13	E	2	13	E	9	Q
1108.306100	0.647	1108.305453	1586.618845	13	E	2	13	E	10	Q
1109.035400	-1.157	1109.036557	1587.255794	13	E	1	13	E	11	Q
933.096900	1.617	933.095283	1484.851029	14	E	3	13	E	5	P
938.857400	-0.171	938.857571	1490.547289	14	E	2	13	E	6	P
1023.241200	-2.709	1023.243909	1574.773065	14	E	1	13	E	8	P
1034.864800	1.700	1034.863100	1586.618845	14	E	3	13	E	10	P
1035.565600	-0.476	1035.566076	1587.255794	14	E	2	13	E	11	P
1033.937400	-0.468	1033.937868	1444.020087	12	F2	3	13	F1	1	R
1034.437800	0.324	1034.437476	1444.492604	12	F2	2	13	F1	2	R
1035.240600	-0.364	1035.240964	1445.260812	12	F2	1	13	F1	3	R
1062.244400	-0.457	1062.244857	1472.264705	12	F2	1	13	F1	6	R
1062.209200	-0.377	1062.209577	1472.264705	12	F2	2	13	F1	6	R
1074.446900	0.164	1074.446736	1484.501864	12	F2	2	13	F1	7	R
1079.484700	-0.867	1079.485567	1489.505415	12	F2	1	13	F1	8	R

1083.758700	-0.292	1083.758992	1493.841211	12	F2	3	13	F1	9	R
1164.704900	-4.318	1164.709218	1574.764346	12	F2	2	13	F1	12	R
1166.424000	1.311	1166.422689	1576.477817	12	F2	2	13	F1	13	R
1166.397900	2.302	1166.395598	1576.477817	12	F2	3	13	F1	13	R
1168.419600	0.628	1168.418972	1578.501191	12	F2	3	13	F1	14	R
966.990200	0.458	966.989742	1445.260812	13	F2	2	13	F1	3	Q
991.293800	-0.482	991.294282	1469.603273	13	F2	3	13	F1	5	Q
993.992800	-0.835	993.993635	1472.264705	13	F2	2	13	F1	6	Q
993.955900	0.186	993.955714	1472.264705	13	F2	3	13	F1	6	Q
1015.692600	-0.626	1015.693226	1493.841211	13	F2	1	13	F1	9	Q
1100.230400	0.278	1100.230122	1578.501191	13	F2	2	13	F1	14	Q
1108.615400	-0.286	1108.615686	1586.886756	13	F2	2	13	F1	16	Q
1108.578100	0.335	1108.577765	1586.886756	13	F2	3	13	F1	16	Q
1109.786000	4.806	1109.781194	1587.929179	13	F2	1	13	F1	17	Q
932.745400	2.777	932.742623	1484.501864	14	F2	4	13	F1	7	P
937.794300	0.135	937.794165	1489.505415	14	F2	3	13	F1	8	P
942.220300	-0.115	942.220415	1493.841211	14	F2	2	13	F1	9	P
1026.737100	-4.851	1026.741951	1578.501191	14	F2	4	13	F1	14	P
1034.821500	1.747	1034.819753	1586.578994	14	F2	4	13	F1	15	P
1035.175900	0.394	1035.175506	1586.886756	14	F2	3	13	F1	16	P
1035.153000	-0.895	1035.153895	1445.178264	12	F1	2	13	F2	2	R
1055.283000	-1.329	1055.284329	1465.249875	12	F1	1	13	F2	5	R
1059.209400	-2.128	1059.211528	1469.235897	12	F1	2	13	F2	6	R
1075.265900	-0.844	1075.266744	1485.291113	12	F1	2	13	F2	8	R
1166.248500	-1.715	1166.250215	1576.336316	12	F1	3	13	F2	12	R
1167.418200	-1.561	1167.419761	1577.444130	12	F1	2	13	F2	13	R
1167.357100	-0.929	1167.358029	1577.444130	12	F1	3	13	F2	13	R
1168.277000	1.960	1168.275040	1578.361141	12	F1	3	13	F2	14	R
966.914500	-0.752	966.915252	1445.178264	13	F1	3	13	F2	2	Q
987.027300	-1.536	987.028836	1465.249875	13	F1	2	13	F2	5	Q
991.012800	-2.059	991.014859	1469.235897	13	F1	2	13	F2	6	Q
990.970900	-1.985	990.972885	1469.235897	13	F1	3	13	F2	6	Q
995.109600	-0.647	995.110247	1473.427935	13	F1	4	13	F2	7	Q
1007.027000	-1.101	1007.028101	1485.291113	13	F1	3	13	F2	8	Q
1012.734900	-1.293	1012.736193	1490.957231	13	F1	2	13	F2	9	Q
1012.639300	-0.243	1012.639543	1490.957231	13	F1	4	13	F2	9	Q
1098.185600	-3.118	1098.188718	1576.336316	13	F1	1	13	F2	12	Q
1098.016900	-1.728	1098.018628	1576.336316	13	F1	4	13	F2	12	Q
1099.221600	-1.492	1099.223092	1577.444130	13	F1	2	13	F2	13	Q
1099.179500	-1.618	1099.181118	1577.444130	13	F1	3	13	F2	13	Q
1100.099800	1.671	1100.098129	1578.361141	13	F1	3	13	F2	14	Q
1108.493300	-1.503	1108.494803	1586.757815	13	F1	3	13	F2	15	Q
1109.045400	-0.450	1109.045850	1587.266888	13	F1	2	13	F2	16	Q
933.542600	1.311	933.541289	1485.291113	14	F1	3	13	F2	8	P
939.273800	-0.193	939.273993	1490.957231	14	F1	2	13	F2	9	P
942.033800	-0.130	942.033930	1493.658016	14	F1	1	13	F2	10	P
1024.710200	-2.030	1024.712230	1576.336316	14	F1	1	13	F2	12	P
1025.695100	0.794	1025.694306	1577.444130	14	F1	3	13	F2	13	P
1035.008900	0.909	1035.007991	1586.757815	14	F1	3	13	F2	15	P
1035.583600	-0.050	1035.583650	1587.266888	14	F1	2	13	F2	16	P
1079.001200	2.136	1078.999064	1557.282115	13	A2	1	14	A1	3	R
1017.013800	-0.960	1017.014760	1568.544366	14	A2	1	14	A1	4	Q
938.331500	1.525	938.329975	1568.544366	15	A2	1	14	A1	4	P
1037.890600	-2.026	1037.892626	1516.118111	13	A1	1	14	A2	1	R
1062.988200	-3.964	1062.992164	1541.217649	13	A1	1	14	A2	2	R
964.443300	-1.879	964.445179	1516.118111	14	A1	1	14	A2	1	Q
989.540900	-3.817	989.544717	1541.217649	14	A1	1	14	A2	2	Q
1006.717600	-2.283	1006.719883	1558.392814	14	A1	1	14	A2	3	Q
1036.395400	-1.405	1036.396805	1514.710197	13	E	2	14	E	1	R
1037.976100	-0.202	1037.976302	1516.195540	13	E	1	14	E	2	R
1063.383000	-0.134	1063.383134	1541.602371	13	E	1	14	E	4	R
1090.041300	-2.156	1090.043456	1568.356848	13	E	2	14	E	7	R
1174.504700	2.016	1174.502684	1652.816076	13	E	2	14	E	10	R
964.506900	1.078	964.505822	1516.195540	14	E	2	14	E	2	Q
989.913600	0.947	989.912653	1541.602371	14	E	2	14	E	4	Q
989.849200	2.575	989.846625	1541.602371	14	E	3	14	E	4	Q
994.574900	-1.372	994.576272	1546.265990	14	E	2	14	E	5	Q
994.509300	-0.945	994.510245	1546.265990	14	E	3	14	E	5	Q
1011.904000	0.725	1011.903275	1563.592993	14	E	2	14	E	6	Q
1016.825300	-2.392	1016.827692	1568.356848	14	E	1	14	E	7	Q
1098.923100	-4.738	1098.927838	1650.456994	14	E	1	14	E	9	Q
1110.934600	0.340	1110.934260	1662.623978	14	E	2	14	E	11	Q
933.260100	3.485	933.256615	1563.592993	15	E	2	14	E	6	P
938.138800	0.592	938.138208	1568.356848	15	E	1	14	E	7	P
1020.236700	-1.654	1020.238354	1650.456994	15	E	1	14	E	9	P
1032.290800	3.200	1032.287600	1662.623978	15	E	2	14	E	11	P
1036.467800	-1.565	1036.469365	1514.778357	13	F2	3	14	F1	1	R
1037.015200	0.506	1037.014694	1515.285764	13	F2	2	14	F1	2	R
1058.725200	-1.281	1058.726481	1536.874466	13	F2	1	14	F1	5	R

1065.750900	-5.108	1065.756008	1544.027078	13	F2	2	14	F1	6	R
1065.713800	-4.287	1065.718087	1544.027078	13	F2	3	14	F1	6	R
1079.349700	0.774	1079.348926	1557.619996	13	F2	2	14	F1	8	R
1079.312400	1.395	1079.311005	1557.619996	13	F2	3	14	F1	8	R
1170.403400	-8.844	1170.412244	1648.683314	13	F2	2	14	F1	12	R
1174.642600	-0.683	1174.643283	1652.952274	13	F2	3	14	F1	15	R
985.253300	-0.369	985.253669	1536.874466	14	F2	2	14	F1	5	Q
992.311400	-4.428	992.315828	1544.027078	14	F2	3	14	F1	6	Q
1005.910000	1.254	1005.908746	1557.619996	14	F2	3	14	F1	8	Q
1013.342900	-2.633	1013.345533	1564.966329	14	F2	2	14	F1	9	Q
1013.206000	-1.089	1013.207089	1564.966329	14	F2	4	14	F1	9	Q
1099.961300	-5.007	1099.966307	1651.587103	14	F2	2	14	F1	14	Q
1111.403300	0.390	1111.402910	1663.023706	14	F2	2	14	F1	17	Q
934.663700	0.737	934.662963	1564.966329	15	F2	3	14	F1	9	P
938.208500	1.100	938.207400	1568.424535	15	F2	2	14	F1	10	P
1020.272500	1.085	1020.271415	1650.488549	15	F2	2	14	F1	13	P
1032.724400	4.060	1032.720340	1663.023706	15	F2	3	14	F1	17	P
1036.322600	-0.826	1036.323426	1514.641114	13	F1	4	14	F2	1	R
1037.139000	1.164	1037.137836	1515.400848	13	F1	3	14	F2	2	R
1037.950200	-0.798	1037.950998	1516.172036	13	F1	2	14	F2	3	R
1058.755800	-0.522	1058.756322	1536.903921	13	F1	1	14	F2	5	R
1063.235000	-1.831	1063.236831	1541.457870	13	F1	2	14	F2	6	R
1066.977100	0.947	1066.976153	1545.239165	13	F1	3	14	F2	7	R
1079.720300	-1.033	1079.721333	1557.984345	13	F1	3	14	F2	8	R
1085.083900	2.621	1085.081279	1563.228877	13	F1	1	14	F2	9	R
1170.419000	-6.869	1170.425869	1648.688881	13	F1	3	14	F2	13	R
1173.454900	-2.150	1173.457050	1651.774738	13	F1	4	14	F2	14	R
1174.370100	3.769	1174.366331	1652.684020	13	F1	4	14	F2	15	R
964.489400	0.602	964.488798	1516.172036	14	F1	2	14	F2	3	Q
993.557700	1.774	993.555926	1545.239165	14	F1	2	14	F2	7	Q
993.492600	3.260	993.489340	1545.239165	14	F1	3	14	F2	7	Q
1006.300900	-0.207	1006.301107	1557.984345	14	F1	2	14	F2	8	Q
1011.481100	2.047	1011.479053	1563.228877	14	F1	3	14	F2	9	Q
1100.148900	-1.752	1100.150652	1651.774738	14	F1	1	14	F2	14	Q
1100.089700	-1.800	1100.091500	1651.774738	14	F1	2	14	F2	14	Q
1110.920700	-0.091	1110.920791	1662.604029	14	F1	2	14	F2	17	Q
1111.403300	2.070	1111.401230	1663.025316	14	F1	1	14	F2	18	Q
935.468500	2.563	935.465937	1565.754878	15	F1	2	14	F2	10	P
1032.038800	1.984	1032.036816	1662.380102	15	F1	3	14	F2	16	P
1031.984900	4.155	1031.980745	1662.380102	15	F1	4	14	F2	16	P
1032.263400	2.656	1032.260744	1662.604029	15	F1	3	14	F2	17	P
1032.208900	4.227	1032.204673	1662.604029	15	F1	4	14	F2	17	P
1032.740400	4.025	1032.736375	1663.025316	15	F1	2	14	F2	18	P
1062.085600	0.126	1062.085474	1613.615080	14	A2	1	15	A1	2	R
983.403200	2.510	983.400690	1613.615080	15	A2	1	15	A1	2	Q
1039.811100	3.513	1039.807587	1591.480518	14	A1	1	15	A2	1	Q
961.096200	8.723	961.087477	1591.480518	15	A1	1	15	A2	1	Q
1011.274800	5.660	1011.269140	1641.662181	15	A1	1	15	A2	3	Q
1113.081300	4.293	1113.077007	1743.470048	15	A1	1	15	A2	6	Q
1038.836800	-2.790	1038.839590	1590.595335	14	E	3	15	E	1	R
1039.636600	-0.688	1039.637288	1591.327005	14	E	2	15	E	2	R
1062.107600	1.386	1062.106214	1613.635370	14	E	1	15	E	4	R
991.309000	-6.038	991.315038	1621.651416	15	E	2	15	E	5	Q
1005.459500	2.761	1005.456739	1635.793117	15	E	2	15	E	6	Q
1015.054300	-0.318	1015.054618	1645.273258	15	E	1	15	E	7	Q
931.188800	5.540	931.183260	1645.273258	16	E	2	15	E	7	P
1029.168500	7.505	1029.160995	1743.407194	16	E	3	15	E	12	P
1038.791700	-2.636	1038.794336	1590.553577	14	F2	4	15	F1	1	R
1039.297700	2.504	1039.295196	1591.006446	14	F2	3	15	F1	2	R
1040.689600	-1.111	1040.690711	1592.311507	14	F2	2	15	F1	3	R
1062.100200	0.948	1062.099252	1613.628557	14	F2	1	15	F1	6	R
1067.031500	1.902	1067.029598	1618.650394	14	F2	2	15	F1	7	R
1083.745400	3.391	1083.742009	1635.453259	14	F2	3	15	F1	9	R
1091.197600	-2.862	1091.200462	1642.821258	14	F2	2	15	F1	10	R
962.010800	2.659	962.008141	1592.311507	15	F2	3	15	F1	3	Q
988.352300	5.272	988.347028	1618.650394	15	F2	3	15	F1	7	Q
994.392800	1.542	994.391258	1624.795230	15	F2	4	15	F1	8	Q
1012.518400	0.508	1012.517892	1642.821258	15	F2	3	15	F1	10	Q
1012.419400	2.114	1012.417286	1642.821258	15	F2	4	15	F1	10	Q
1018.216000	-3.359	1018.219359	1648.320733	15	F2	1	15	F1	12	Q
1100.700900	-2.117	1100.703017	1731.106989	15	F2	4	15	F1	15	Q
1113.351800	2.210	1113.349590	1743.652956	15	F2	3	15	F1	18	Q
930.973400	5.121	930.968279	1645.063468	16	F2	2	15	F1	11	P
934.328600	3.514	934.325086	1648.320733	16	F2	1	15	F1	12	P
1029.107500	8.301	1029.099199	1743.349982	16	F2	4	15	F1	17	P
1038.929800	-4.454	1038.934254	1590.684078	14	F1	3	15	F2	1	R
1040.658200	-2.406	1040.660606	1592.284692	14	F1	1	15	F2	3	R
1066.856800	-2.780	1066.859580	1618.483666	14	F1	1	15	F2	5	R
1070.236600	-6.219	1070.242819	1621.926058	14	F1	2	15	F2	6	R

1072.499800	-0.334	1072.500134	1624.249958	14	F1	3	15	F2	7	R
1090.608100	-1.319	1090.609419	1642.233505	14	F1	1	15	F2	9	R
988.194300	-0.425	988.194725	1618.483666	15	F1	2	15	F2	5	Q
993.907200	0.527	993.906673	1624.249958	15	F1	3	15	F2	7	Q
993.853000	2.398	993.850602	1624.249958	15	F1	4	15	F2	7	Q
1011.891100	0.880	1011.890220	1642.233505	15	F1	3	15	F2	9	Q
1018.130700	-4.795	1018.135495	1648.236642	15	F1	1	15	F2	10	Q
934.241300	2.772	934.238528	1648.236642	16	F1	2	15	F2	10	P
1029.200800	8.899	1029.191901	1743.433274	16	F1	4	15	F2	17	P
1029.494600	4.841	1029.489759	1743.656874	16	F1	3	15	F2	18	P
1041.207700	-6.269	1041.213969	1671.621713	15	A2	2	16	A1	1	R
1043.388800	-1.995	1043.390795	1673.605186	15	A2	1	16	A1	2	R
1013.908500	5.825	1013.902675	1728.013294	16	A2	1	16	A1	4	Q
1041.813000	3.430	1041.809570	1672.145948	15	E	2	16	E	1	R
1043.363400	-4.788	1043.368188	1673.586828	15	E	1	16	E	2	R
1070.471700	0.654	1070.471046	1700.689686	15	E	1	16	E	4	R
1012.477500	-2.250	1012.479750	1726.569748	16	E	2	16	E	7	Q
1019.472800	-7.700	1019.480500	1733.335715	16	E	1	16	E	8	Q
1041.251700	-6.596	1041.258296	1671.662268	15	F2	4	16	F1	1	R
1042.255900	-2.929	1042.258829	1672.562195	15	F2	3	16	F1	2	R
1043.372100	-3.854	1043.375954	1673.593089	15	F2	2	16	F1	3	R
990.139100	-4.291	990.143391	1704.296873	16	F2	3	16	F1	7	Q
1012.963200	-1.746	1012.964946	1727.060135	16	F2	2	16	F1	10	Q
1012.810200	0.848	1012.809352	1727.060135	16	F2	4	16	F1	10	Q
1041.308400	-7.304	1041.315704	1671.715061	15	F1	4	16	F2	1	R
1041.749800	2.126	1041.747674	1672.090960	15	F1	3	16	F2	2	R
1042.351700	3.167	1042.348533	1672.637474	15	F1	2	16	F2	3	R
990.561500	4.635	990.556865	1704.723979	16	F1	3	16	F2	7	Q
993.271100	3.246	993.267854	1707.434968	16	F1	3	16	F2	8	Q
1011.518700	8.226	1011.510474	1725.751847	16	F1	4	16	F2	10	Q
1015.826900	-3.857	1015.830757	1729.997871	16	F1	3	16	F2	11	Q
1019.448100	-8.342	1019.456442	1733.311571	16	F1	1	16	F2	12	Q
1044.914800	1.935	1044.912865	1759.002864	16	E	2	17	E	2	R
993.758700	2.079	993.756621	1796.929134	17	E	2	17	E	6	Q
993.650500	4.841	993.645659	1796.929134	17	E	3	17	E	6	Q
1044.305600	3.626	1044.301974	1758.455456	16	F2	3	17	F1	2	R
1044.889900	-1.578	1044.891478	1758.986667	16	F2	2	17	F1	3	R
1044.204500	-1.561	1044.206061	1758.373175	16	F1	3	17	F2	2	R
1044.133300	1.498	1044.131802	1758.373175	16	F1	4	17	F2	2	R

**Tableau IV.8** attributions de 1396 données pour la Pentade -GS

$\sigma_{exp}$ Nombre d'onde exp. /cm <sup>-1</sup>	$\sigma_{exp} - \sigma_{cal}$ /10 <sup>-3</sup> cm <sup>-1</sup>	$\sigma_{cal}$ Nombre d'onde cal. /cm <sup>-1</sup>	$E_{sup}$ Niveaux d'énergie sup. /cm <sup>-1</sup>	Caractéristiques Rovibrationnelles des niveaux inférieures			Caractéristiques Rovibrationnelles des niveaux supérieures			branches
				J <sub>inf</sub>	C	N	J <sub>sup</sub>	C	N	
1985.206300	0.077	1985.206223	1990.471432	1	F1	1	0	F2	1	P
2078.132200	-0.214	2078.132414	2083.397622	1	F1	1	0	F2	2	P
2254.814300	2.026	2254.812274	2260.077482	1	F1	1	0	F2	3	P
1998.276400	-0.012	1998.276412	1998.276412	0	A1	1	1	A2	1	R
2263.585400	2.363	2263.583037	2263.583037	0	A1	1	1	A2	3	R
1978.292700	-0.055	1978.292755	1994.087706	2	E	1	1	E	1	P
2070.648500	-0.013	2070.648513	2086.443464	2	E	1	1	E	2	P
2250.393100	-3.322	2250.396422	2266.191372	2	E	1	1	E	4	P
1976.333700	-0.254	1976.333954	1992.128969	2	F2	1	1	F1	2	P
1988.193800	-0.159	1988.193959	2003.988973	2	F2	1	1	F1	3	P
2071.198200	0.046	2071.198154	2086.993169	2	F2	1	1	F1	4	P
1990.767200	0.203	1990.766997	1996.032206	1	F1	1	1	F2	1	Q
2084.301800	0.063	2084.301737	2089.566945	1	F1	1	1	F2	3	Q
2259.180500	2.164	2259.178336	2264.443545	1	F1	1	1	F2	6	Q
1965.914400	-0.030	1965.914430	1997.502880	3	A2	1	2	A1	1	P
1986.356700	-0.138	1986.356838	2017.945288	3	A2	1	2	A1	2	P
2064.667900	-0.746	2064.668646	2096.257097	3	A2	1	2	A1	3	P
2245.929100	1.750	2245.927350	2277.515801	3	A2	1	2	A1	5	P
1987.561200	0.052	1987.561148	2003.356099	2	E	1	2	E	2	Q
2000.500900	0.111	2000.500789	2016.295739	2	E	1	2	E	3	Q
2083.491200	0.008	2083.491192	2099.286143	2	E	1	2	E	4	Q
2091.079000	-0.200	2091.079200	2106.874151	2	E	1	2	E	5	Q
1983.351100	0.121	1983.350979	1999.145994	2	F2	1	2	F1	1	Q
1990.627800	0.355	1990.627445	2006.422460	2	F2	1	2	F1	2	Q
2001.301600	0.247	2001.301353	2017.096368	2	F2	1	2	F1	3	Q
2082.857600	-0.124	2082.857724	2098.652739	2	F2	1	2	F1	5	Q
2091.895500	0.124	2091.895376	2107.690391	2	F2	1	2	F1	6	Q
2259.118200	-0.744	2259.118944	2274.913959	2	F2	1	2	F1	9	Q
1967.557800	-0.065	1967.557865	1999.145994	3	F2	1	2	F1	1	P
1974.834300	-0.030	1974.834330	2006.422460	3	F2	1	2	F1	2	P
1985.508100	-0.139	1985.508239	2017.096368	3	F2	1	2	F1	3	P
2063.810200	-0.183	2063.810383	2095.398512	3	F2	1	2	F1	4	P
2067.064800	0.191	2067.064609	2098.652739	3	F2	1	2	F1	5	P
2076.102300	0.038	2076.102262	2107.690391	3	F2	1	2	F1	6	P
2245.946400	2.117	2245.944283	2277.532412	3	F2	1	2	F1	10	P
2002.599200	0.454	2002.598746	2007.863955	1	F1	1	2	F2	3	R
2009.339700	-1.139	2009.340839	2014.606047	1	F1	1	2	F2	4	R
2101.575700	0.484	2101.575216	2106.840425	1	F1	1	2	F2	7	R
2102.207900	0.215	2102.207685	2107.472893	1	F1	1	2	F2	8	R
2267.934500	2.699	2267.931801	2273.197010	1	F1	1	2	F2	12	R
1970.224300	-0.309	1970.224609	2001.812481	3	F1	1	2	F2	2	P
1976.275700	-0.383	1976.276083	2007.863955	3	F1	1	2	F2	3	P
1983.018100	-0.075	1983.018175	2014.606047	3	F1	1	2	F2	4	P
2075.884200	-0.821	2075.885021	2107.472893	3	F1	1	2	F2	8	P
2245.959900	2.133	2245.957767	2277.545639	3	F1	1	2	F2	13	P
1991.591300	0.361	1991.590939	2023.179389	3	A2	1	3	A1	1	Q
2079.573400	0.070	2079.573330	2111.161780	3	A2	1	3	A1	2	Q
2093.698000	0.291	2093.697709	2125.286159	3	A2	1	3	A1	3	Q
2259.049200	2.626	2259.046574	2290.635024	3	A2	1	3	A1	4	Q
1963.715700	-0.102	1963.715802	2016.357408	4	A1	1	3	A2	2	P
2056.214800	0.181	2056.214619	2108.856225	4	A1	1	3	A2	3	P
2070.355600	-1.420	2070.357020	2122.998626	4	A1	1	3	A2	4	P
2017.791100	0.445	2017.790655	2033.585605	2	E	1	3	E	3	R
2102.015200	0.586	2102.014614	2117.809565	2	E	1	3	E	5	R
2272.258500	1.667	2272.256833	2288.051783	2	E	1	3	E	9	R
1959.829700	0.472	1959.829228	2012.471607	4	E	1	3	E	1	P
1980.943200	-0.026	1980.943226	2033.585605	4	E	1	3	E	3	P
2056.589400	-0.017	2056.589417	2109.231797	4	E	1	3	E	4	P
2074.491600	-0.464	2074.492064	2127.134444	4	E	1	3	E	7	P
2002.981200	0.209	2002.980991	2018.776006	2	F2	1	3	F1	3	R
2007.873800	0.381	2007.873419	2023.668434	2	F2	1	3	F1	4	R
2016.924000	0.437	2016.923563	2032.718578	2	F2	1	3	F1	5	R
2101.962100	0.375	2101.961725	2117.756740	2	F2	1	3	F1	9	R
2107.306900	0.322	2107.306578	2123.101593	2	F2	1	3	F1	10	R
2109.575300	0.414	2109.574886	2125.369901	2	F2	1	3	F1	11	R

2200.895800	2.974	2200.892826	2216.687841	2	F2	1	3	F1	15	R
1977.863600	2.371	1977.861229	2009.449358	3	F2	1	3	F1	2	Q
1987.187900	0.023	1987.187877	2018.776006	3	F2	1	3	F1	3	Q
1992.080200	-0.105	1992.080305	2023.668434	3	F2	1	3	F1	4	Q
2001.130300	-0.149	2001.130449	2032.718578	3	F2	1	3	F1	5	Q
2005.001700	0.070	2005.001630	2036.589759	3	F2	1	3	F1	6	Q
2077.946700	-0.113	2077.946813	2109.534942	3	F2	1	3	F1	7	Q
2081.500200	0.012	2081.500188	2113.088318	3	F2	1	3	F1	8	Q
2091.513400	-0.064	2091.513464	2123.101593	3	F2	1	3	F1	10	Q
2093.782100	0.329	2093.781771	2125.369901	3	F2	1	3	F1	11	Q
2259.027800	1.977	2259.025823	2290.613953	3	F2	1	3	F1	17	Q
1956.806000	-0.014	1956.806014	2009.449358	4	F2	1	3	F1	2	P
1966.132300	-0.362	1966.132662	2018.776006	4	F2	1	3	F1	3	P
1971.024800	-0.290	1971.025090	2023.668434	4	F2	1	3	F1	4	P
1983.946300	-0.115	1983.946415	2036.589759	4	F2	1	3	F1	6	P
2056.891400	-0.198	2056.891598	2109.534942	4	F2	1	3	F1	7	P
2060.444600	-0.374	2060.444974	2113.088318	4	F2	1	3	F1	8	P
2072.726300	-0.257	2072.726557	2125.369901	4	F2	1	3	F1	11	P
2241.460000	1.867	2241.458133	2294.101477	4	F2	1	3	F1	18	P
1981.385400	-0.126	1981.385526	2012.973398	3	F1	1	3	F2	2	Q
1986.235800	0.033	1986.235767	2017.823640	3	F1	1	3	F2	3	Q
2003.885300	0.236	2003.885064	2035.472937	3	F1	1	3	F2	5	Q
2082.650300	0.051	2082.650249	2114.238121	3	F1	1	3	F2	7	Q
2091.715700	-0.138	2091.715838	2123.303710	3	F1	1	3	F2	9	Q
2259.011200	1.829	2259.009371	2290.597243	3	F1	1	3	F2	15	Q
1960.331300	-0.041	1960.331341	2012.973398	4	F1	1	3	F2	2	P
1974.970200	-0.328	1974.970528	2027.612585	4	F1	1	3	F2	4	P
1982.830700	-0.179	1982.830879	2035.472937	4	F1	1	3	F2	5	P
2056.389600	0.094	2056.389506	2109.031563	4	F1	1	3	F2	6	P
2070.653400	-8.253	2070.661653	2123.303710	4	F1	1	3	F2	9	P
2074.410100	-0.382	2074.410482	2127.052539	4	F1	1	3	F2	10	P
2007.943200	-0.075	2007.943275	2039.531725	3	A2	1	4	A1	2	R
2023.636600	0.567	2023.636033	2055.224484	3	A2	1	4	A1	3	R
2106.378800	0.194	2106.378606	2137.967057	3	A2	1	4	A1	4	R
2204.190300	-0.018	2204.190318	2235.778769	3	A2	1	4	A1	7	R
1980.444400	0.261	1980.444139	2033.085745	4	A1	1	4	A2	1	Q
2082.345600	0.105	2082.345495	2134.987101	4	A1	1	4	A2	3	Q
2096.791700	-0.161	2096.791861	2149.433467	4	A1	1	4	A2	4	Q
2185.293800	-4.833	2185.298633	2237.940239	4	A1	1	4	A2	5	Q
2258.863300	1.054	2258.862246	2311.503852	4	A1	1	4	A2	6	Q
1973.915800	-0.099	1973.915899	2026.558278	4	E	1	4	E	2	Q
1986.112900	0.143	1986.112757	2038.755137	4	E	1	4	E	3	Q
2008.127100	-4.155	2008.131255	2060.773635	4	E	1	4	E	5	Q
2075.795000	0.106	2075.794894	2128.437273	4	E	1	4	E	6	Q
2080.726400	0.021	2080.726379	2133.368759	4	E	1	4	E	7	Q
2258.892900	1.347	2258.891553	2311.533933	4	E	1	4	E	14	Q
1947.601200	0.002	1947.601198	2026.558278	5	E	1	4	E	2	P
1959.799000	0.943	1959.798057	2038.755137	5	E	1	4	E	3	P
1969.894200	-0.232	1969.894432	2048.851512	5	E	1	4	E	4	P
1981.816200	-0.355	1981.816555	2060.773635	5	E	1	4	E	5	P
2049.480100	-0.093	2049.480193	2128.437273	5	E	1	4	E	6	P
2054.411700	0.022	2054.411678	2133.368759	5	E	1	4	E	7	P
2066.559900	-0.276	2066.560176	2145.517257	5	E	1	4	E	9	P
2158.540000	-0.145	2158.540145	2237.497225	5	E	1	4	E	12	P
2236.968100	-2.577	2236.970677	2315.927757	5	E	1	4	E	15	P
1999.351000	0.576	1999.350424	2030.938553	3	F2	1	4	F1	2	R
2013.768400	0.364	2013.768036	2045.356165	3	F2	1	4	F1	4	R
2017.514000	-1.383	2017.515383	2049.103512	3	F2	1	4	F1	5	R
2024.726300	0.258	2024.726042	2056.314171	3	F2	1	4	F1	6	R
2106.697700	0.503	2106.697197	2138.285326	3	F2	1	4	F1	9	R
2109.719800	0.353	2109.719447	2141.307577	3	F2	1	4	F1	10	R
2114.112200	0.246	2114.111954	2145.700083	3	F2	1	4	F1	11	R
2117.388900	0.405	2117.388495	2148.976624	3	F2	1	4	F1	12	R
2204.381400	-1.173	2204.382573	2235.970702	3	F2	1	4	F1	15	R
1986.470400	0.235	1986.470165	2039.113509	4	F2	1	4	F1	3	Q
1992.712700	-0.121	1992.712821	2045.356165	4	F2	1	4	F1	4	Q
1996.459800	-0.368	1996.460168	2049.103512	4	F2	1	4	F1	5	Q
2003.670500	-0.327	2003.670827	2056.314171	4	F2	1	4	F1	6	Q
2093.056800	0.061	2093.056739	2145.700083	4	F2	1	4	F1	11	Q
2096.333500	0.220	2096.333280	2148.976624	4	F2	1	4	F1	12	Q
2258.931500	2.480	2258.929020	2311.572364	4	F2	1	4	F1	19	Q
1951.983700	-0.026	1951.983726	2030.938553	5	F2	1	4	F1	2	P
1960.158400	-0.281	1960.158681	2039.113509	5	F2	1	4	F1	3	P
1970.148400	-0.285	1970.148685	2049.103512	5	F2	1	4	F1	5	P
1977.359300	-0.044	1977.359344	2056.314171	5	F2	1	4	F1	6	P
2049.512500	0.241	2049.512259	2128.467086	5	F2	1	4	F1	7	P
2059.330200	-0.298	2059.330498	2138.285326	5	F2	1	4	F1	9	P
2062.352700	-0.049	2062.352749	2141.307577	5	F2	1	4	F1	10	P
2066.747200	1.944	2066.745256	2145.700083	5	F2	1	4	F1	11	P



2070.800600	-0.485	2070.801085	2149.755912	5	F2	1	4	F1	13	P
2158.811900	0.279	2158.811621	2237.766449	5	F2	1	4	F1	16	P
2237.012300	2.353	2237.009947	2315.964775	5	F2	1	4	F1	20	P
2000.158200	0.327	2000.157873	2031.745745	3	F1	1	4	F2	3	R
2006.138800	0.861	2006.137939	2037.725811	3	F1	1	4	F2	4	R
2013.818700	0.028	2013.818672	2045.406544	3	F1	1	4	F2	5	R
2025.788800	0.242	2025.788558	2057.376430	3	F1	1	4	F2	6	R
2106.897600	0.985	2106.896615	2138.484487	3	F1	1	4	F2	11	R
2112.511400	0.187	2112.511213	2144.099085	3	F1	1	4	F2	12	R
2206.867300	-0.444	2206.867744	2238.455616	3	F1	1	4	F2	18	R
1973.771500	0.069	1973.771431	2026.413488	4	F1	1	4	F2	2	Q
1979.103800	0.112	1979.103688	2031.745745	4	F1	1	4	F2	3	Q
1985.083800	0.046	1985.083754	2037.725811	4	F1	1	4	F2	4	Q
2004.734500	0.127	2004.734373	2057.376430	4	F1	1	4	F2	6	Q
2007.890100	-0.020	2007.890120	2060.532177	4	F1	1	4	F2	7	Q
2075.999500	0.072	2075.999428	2128.641485	4	F1	1	4	F2	9	Q
2081.239300	-0.136	2081.239436	2133.881494	4	F1	1	4	F2	10	Q
2085.843500	1.070	2085.842430	2138.484487	4	F1	1	4	F2	11	Q
2096.634200	0.057	2096.634143	2149.276200	4	F1	1	4	F2	13	Q
2184.306900	-0.775	2184.307675	2236.949732	4	F1	1	4	F2	16	Q
2185.812000	-1.558	2185.813558	2238.455616	4	F1	1	4	F2	18	Q
2258.880900	1.546	2258.879354	2311.521412	4	F1	1	4	F2	20	Q
1947.456000	0.012	1947.455988	2026.413488	5	F1	2	4	F2	2	P
1952.791500	-0.292	1952.791792	2031.745745	5	F1	1	4	F2	3	P
1958.771600	-0.258	1958.771858	2037.725811	5	F1	1	4	F2	4	P
1978.419600	-2.877	1978.422477	2057.376430	5	F1	1	4	F2	6	P
1981.574600	-0.077	1981.574677	2060.532177	5	F1	2	4	F2	7	P
2049.279600	0.129	2049.279471	2128.233424	5	F1	1	4	F2	8	P
2049.683800	-3.732	2049.687532	2128.641485	5	F1	1	4	F2	9	P
2054.924300	-3.240	2054.927540	2133.881494	5	F1	1	4	F2	10	P
2059.527800	-2.734	2059.530534	2138.484487	5	F1	1	4	F2	11	P
2065.144600	-0.532	2065.145132	2144.099085	5	F1	1	4	F2	12	P
2158.567700	0.121	2158.567579	2237.752079	5	F1	2	4	F2	17	P
2159.501300	-0.363	2159.501663	2238.455616	5	F1	1	4	F2	18	P
2237.028000	2.367	2237.025633	2315.979586	5	F1	1	4	F2	22	P
1943.600800	0.090	1943.600710	2054.123050	6	A2	1	5	A1	1	P
1965.849300	-0.300	1965.849600	2076.371940	6	A2	1	5	A1	2	P
2042.738800	0.311	2042.738489	2153.260829	6	A2	1	5	A1	3	P
2058.335000	-0.107	2058.335107	2168.857447	6	A2	1	5	A1	4	P
2067.276000	-0.103	2067.276103	2177.798443	6	A2	1	5	A1	5	P
2154.684200	0.415	2154.683785	2265.206125	6	A2	1	5	A1	6	P
1995.590300	0.217	1995.590083	2048.231689	4	A1	1	5	A2	1	R
2019.421500	-0.039	2019.421539	2072.063145	4	A1	1	5	A2	2	R
2100.389000	-0.170	2100.389170	2153.030776	4	A1	1	5	A2	4	R
2111.078300	-0.022	2111.078322	2163.719927	4	A1	1	5	A2	5	R
1937.703000	-0.159	1937.703159	2048.231689	6	A1	1	5	A2	1	P
1961.534700	0.085	1961.534615	2072.063145	6	A1	1	5	A2	2	P
1977.271400	-0.234	1977.271634	2087.800164	6	A1	1	5	A2	3	P
2042.502200	-0.046	2042.502246	2153.030776	6	A1	1	5	A2	4	P
2053.191000	-0.398	2053.191398	2163.719927	6	A1	1	5	A2	5	P
2154.397400	-0.595	2154.397995	2264.926524	6	A1	1	5	A2	7	P
2002.562900	-0.332	2002.563232	2055.205612	4	E	1	5	E	2	R
2011.169400	0.118	2011.169282	2063.811662	4	E	1	5	E	3	R
2019.638900	0.183	2019.638717	2072.281097	4	E	1	5	E	4	R
2032.474700	-0.016	2032.474716	2085.117095	4	E	1	5	E	5	R
2102.141400	0.300	2102.141100	2154.783480	4	E	1	5	E	7	R
2112.061600	0.307	2112.061293	2164.703673	4	E	1	5	E	8	R
2118.635700	0.216	2118.635484	2171.277863	4	E	1	5	E	9	R
2125.680000	0.299	2125.679701	2178.322080	4	E	1	5	E	11	R
1976.248300	-0.231	1976.248531	2055.205612	5	E	1	5	E	2	Q
1984.854500	-0.081	1984.854581	2063.811662	5	E	1	5	E	3	Q
1993.324100	0.083	1993.324017	2072.281097	5	E	1	5	E	4	Q
2006.160100	0.085	2006.160015	2085.117095	5	E	1	5	E	5	Q
2075.826500	0.100	2075.826400	2154.783480	5	E	1	5	E	7	Q
2085.745900	-0.693	2085.746593	2164.703673	5	E	1	5	E	8	Q
2092.320700	-0.083	2092.320783	2171.277863	5	E	1	5	E	9	Q
2098.550900	-0.118	2098.551018	2177.508099	5	E	1	5	E	10	Q
2099.365000	0.000	2099.365000	2178.322080	5	E	1	5	E	11	Q
1944.684900	0.064	1944.684836	2055.205612	6	E	1	5	E	2	P
1953.290800	-0.086	1953.290886	2063.811662	6	E	1	5	E	3	P
1974.596300	-0.019	1974.596319	2085.117095	6	E	1	5	E	5	P
2042.469400	0.480	2042.468920	2152.989696	6	E	1	5	E	6	P
2054.182800	-0.097	2054.182897	2164.703673	6	E	1	5	E	8	P
2060.760600	3.513	2060.757087	2171.277863	6	E	1	5	E	9	P
2066.987200	-0.123	2066.987323	2177.508099	6	E	1	5	E	10	P
2232.529900	-0.592	2232.530492	2343.051268	6	E	1	5	E	17	P
2002.152500	0.666	2002.151834	2054.795178	4	F2	1	5	F1	4	R
2011.016100	-0.237	2011.016337	2063.659681	4	F2	1	5	F1	5	R
2012.110200	-0.070	2012.110270	2064.753615	4	F2	1	5	F1	6	R

2023.074500	0.003	2023.074497	2075.717842	4	F2	1	5	F1	7	R
2031.172100	0.298	2031.171802	2083.815146	4	F2	1	5	F1	8	R
2110.854200	0.271	2110.853929	2163.497273	4	F2	1	5	F1	13	R
2114.891100	-0.063	2114.891163	2167.534507	4	F2	1	5	F1	14	R
2118.266600	-3.479	2118.270079	2170.913423	4	F2	1	5	F1	15	R
2122.270600	0.363	2122.270237	2174.913581	4	F2	1	5	F1	16	R
2124.992500	0.053	2124.992447	2177.635791	4	F2	1	5	F1	17	R
2212.326400	-0.877	2212.327277	2264.970621	4	F2	1	5	F1	22	R
2215.601700	0.109	2215.601591	2268.244935	4	F2	1	5	F1	24	R
1969.879800	0.147	1969.879653	2048.834481	5	F2	1	5	F1	3	Q
1975.840200	-0.150	1975.840350	2054.795178	5	F2	1	5	F1	4	Q
1985.798500	-0.287	1985.798787	2064.753615	5	F2	1	5	F1	6	Q
1996.763100	0.086	1996.763014	2075.717842	5	F2	1	5	F1	7	Q
2011.312300	-0.030	2011.312330	2090.267157	5	F2	1	5	F1	9	Q
2073.812200	0.207	2073.811993	2152.766821	5	F2	1	5	F1	10	Q
2079.923500	-0.193	2079.923693	2158.878520	5	F2	1	5	F1	12	Q
2091.958600	0.004	2091.958596	2170.913423	5	F2	1	5	F1	15	Q
2186.015900	0.107	2186.015793	2264.970621	5	F2	1	5	F1	22	Q
2187.497500	-0.218	2187.497718	2266.452546	5	F2	1	5	F1	23	Q
2258.718600	1.196	2258.717404	2337.672231	5	F2	1	5	F1	26	Q
1938.308000	-0.018	1938.308018	2048.834481	6	F2	2	5	F1	3	P
1944.273700	-0.314	1944.274014	2054.795178	6	F2	1	5	F1	4	P
1953.136700	-1.817	1953.138517	2063.659681	6	F2	1	5	F1	5	P
1965.187100	-4.279	1965.191379	2075.717842	6	F2	2	5	F1	7	P
1979.740900	0.205	1979.740695	2090.267157	6	F2	2	5	F1	9	P
2042.241400	1.042	2042.240358	2152.766821	6	F2	2	5	F1	10	P
2042.633400	-0.657	2042.634057	2153.155221	6	F2	1	5	F1	11	P
2048.352500	0.442	2048.352058	2158.878520	6	F2	2	5	F1	12	P
2052.980400	4.291	2052.976109	2163.497273	6	F2	1	5	F1	13	P
2057.012700	-0.643	2057.013343	2167.534507	6	F2	1	5	F1	14	P
2060.388600	1.639	2060.386961	2170.913423	6	F2	2	5	F1	15	P
2067.113300	-1.327	2067.114627	2177.635791	6	F2	1	5	F1	17	P
2153.518400	-3.149	2153.521549	2264.042713	6	F2	1	5	F1	21	P
2154.444100	-0.058	2154.444158	2264.970621	6	F2	2	5	F1	22	P
2011.986200	0.235	2011.985965	2064.628022	4	F1	1	5	F2	4	R
2019.566300	0.250	2019.566050	2072.208107	4	F1	1	5	F2	5	R
2033.406200	0.315	2033.405885	2086.047942	4	F1	1	5	F2	7	R
2101.902600	0.752	2101.901848	2154.543905	4	F1	1	5	F2	10	R
2120.933100	0.130	2120.932970	2173.575028	4	F1	1	5	F2	14	R
2212.255500	-0.612	2212.256112	2264.898169	4	F1	1	5	F2	19	R
1969.571100	-0.397	1969.571497	2048.525451	5	F1	1	5	F2	2	Q
1978.144000	-0.035	1978.144035	2057.097988	5	F1	1	5	F2	3	Q
1985.670700	-3.369	1985.674069	2064.628022	5	F1	1	5	F2	4	Q
1993.253100	-1.054	1993.254154	2072.208107	5	F1	1	5	F2	5	Q
1996.426000	0.264	1996.425736	2075.383236	5	F1	2	5	F2	6	Q
2007.093100	-0.889	2007.093989	2086.047942	5	F1	1	5	F2	7	Q
2010.914200	0.014	2010.914186	2089.868139	5	F1	1	5	F2	8	Q
2085.260600	-0.206	2085.260806	2164.214759	5	F1	1	5	F2	12	Q
2087.249100	-2.296	2087.251396	2166.205349	5	F1	1	5	F2	13	Q
2098.299600	1.512	2098.298088	2177.252041	5	F1	1	5	F2	15	Q
2099.542300	1.079	2099.541221	2178.498721	5	F1	2	5	F2	16	Q
2185.945300	1.084	2185.944216	2264.898169	5	F1	1	5	F2	19	Q
2186.718900	-0.258	2186.719158	2265.673111	5	F1	1	5	F2	20	Q
2258.696400	0.756	2258.695644	2337.649598	5	F1	1	5	F2	23	Q
2264.021600	-0.724	2264.022324	2342.976277	5	F1	1	5	F2	25	Q
1937.997700	-0.190	1937.997890	2048.525451	6	F1	1	5	F2	2	P
1946.570400	-0.028	1946.570428	2057.097988	6	F1	1	5	F2	3	P
1954.095800	-4.661	1954.100461	2064.628022	6	F1	1	5	F2	4	P
1961.680300	-0.246	1961.680546	2072.208107	6	F1	1	5	F2	5	P
1964.855400	-0.275	1964.855675	2075.383236	6	F1	1	5	F2	6	P
1975.520400	0.018	1975.520382	2086.047942	6	F1	1	5	F2	7	P
1979.340500	-0.078	1979.340578	2089.868139	6	F1	1	5	F2	8	P
2042.425600	-0.019	2042.425619	2152.953179	6	F1	1	5	F2	9	P
2049.152400	0.477	2049.152877	2159.680438	6	F1	1	5	F2	11	P
2053.686900	-0.298	2053.687198	2164.214759	6	F1	1	5	F2	12	P
2055.677800	0.012	2055.677788	2166.205349	6	F1	1	5	F2	13	P
2154.370500	-0.109	2154.370609	2264.898169	6	F1	1	5	F2	19	P
1966.356400	-0.044	1966.356444	2076.878784	6	A2	1	6	A1	2	Q
1984.175900	-0.077	1984.175977	2094.698318	6	A2	1	6	A1	3	Q
2014.651600	-0.142	2014.651742	2125.174082	6	A2	1	6	A1	4	Q
2071.977000	-0.068	2071.977068	2182.499408	6	A2	1	6	A1	5	Q
2078.698800	0.127	2078.698673	2189.221013	6	A2	1	6	A1	6	Q
2258.515900	0.930	2258.514970	2369.037310	6	A2	1	6	A1	11	Q
1929.533300	-0.080	1929.533380	2076.878784	7	A2	1	6	A1	2	P
1947.352900	-0.013	1947.352913	2094.698318	7	A2	1	6	A1	3	P
1977.828400	-0.278	1977.828678	2125.174082	7	A2	1	6	A1	4	P
2035.154700	0.696	2035.154004	2182.499408	7	A2	1	6	A1	5	P
2041.875600	-0.009	2041.875609	2189.221013	7	A2	1	6	A1	6	P
2054.649100	0.179	2054.648921	2201.994326	7	A2	1	6	A1	7	P

2149.397900	-0.033	2149.397933	2296.743337	7	A2	1	6	A1	9	P
2152.058900	-0.513	2152.059413	2299.404817	7	A2	1	6	A1	10	P
2227.955800	2.010	2227.953790	2375.299194	7	A2	1	6	A1	12	P
1984.798600	0.106	1984.798494	2095.327024	6	A1	1	6	A2	2	Q
1996.620200	0.211	1996.619989	2107.148519	6	A1	1	6	A2	3	Q
2191.321900	0.230	2191.321670	2301.850200	6	A1	1	6	A2	9	Q
2258.630500	2.436	2258.628064	2369.156593	6	A1	1	6	A2	10	Q
1996.984200	2.620	1996.981580	2075.938660	5	E	1	6	E	2	R
2007.177900	-0.024	2007.177924	2086.135004	5	E	1	6	E	3	R
2016.225500	0.060	2016.225440	2095.182521	5	E	1	6	E	4	R
2028.227100	-0.003	2028.227103	2107.184183	5	E	1	6	E	5	R
2038.788100	0.062	2038.788038	2117.745119	5	E	1	6	E	6	R
2115.137000	0.107	2115.136893	2194.093973	5	E	1	6	E	10	R
2120.485600	-0.145	2120.485745	2199.442825	5	E	1	6	E	11	R
2130.184100	0.087	2130.184013	2209.141093	5	E	1	6	E	12	R
2131.457900	0.130	2131.457770	2210.414851	5	E	1	6	E	13	R
2285.059500	0.964	2285.058536	2364.015616	5	E	1	6	E	19	R
1965.418000	0.116	1965.417884	2075.938660	6	E	1	6	E	2	Q
1975.614200	-0.028	1975.614228	2086.135004	6	E	1	6	E	3	Q
1984.661800	0.055	1984.661745	2095.182521	6	E	1	6	E	4	Q
1996.662600	-0.807	1996.663407	2107.184183	6	E	1	6	E	5	Q
2007.224700	0.357	2007.224343	2117.745119	6	E	1	6	E	6	Q
2014.217600	0.234	2014.217366	2124.738142	6	E	1	6	E	7	Q
2079.590000	0.055	2079.589945	2190.110721	6	E	1	6	E	9	Q
2083.573200	0.003	2083.573197	2194.093973	6	E	1	6	E	10	Q
2088.921700	-0.349	2088.922049	2199.442825	6	E	1	6	E	11	Q
2098.620200	-0.117	2098.620317	2209.141093	6	E	1	6	E	12	Q
2099.894000	-0.075	2099.894075	2210.414851	6	E	1	6	E	13	Q
2187.167700	-0.058	2187.167758	2297.688534	6	E	1	6	E	16	Q
2188.317900	-1.911	2188.319811	2298.840587	6	E	1	6	E	17	Q
1928.589400	0.058	1928.589342	2075.938660	7	E	1	6	E	2	P
1938.785200	-0.485	1938.785685	2086.135004	7	E	1	6	E	3	P
1947.833200	-0.002	1947.833202	2095.182521	7	E	1	6	E	4	P
1970.395600	-0.200	1970.395800	2117.745119	7	E	1	6	E	6	P
1977.388600	-0.224	1977.388824	2124.738142	7	E	1	6	E	7	P
2035.377200	-0.016	2035.377216	2182.726534	7	E	1	6	E	8	P
2042.761200	-0.203	2042.761403	2190.110721	7	E	1	6	E	9	P
2052.093300	-0.207	2052.093507	2199.442825	7	E	1	6	E	11	P
2061.791900	0.126	2061.791774	2209.141093	7	E	1	6	E	12	P
2150.339400	0.184	2150.339216	2297.688534	7	E	1	6	E	16	P
2227.919600	1.763	2227.917837	2375.267155	7	E	1	6	E	21	P
2007.433800	0.087	2007.433713	2086.388541	5	F2	1	6	F1	4	R
2025.249500	-0.119	2025.249619	2104.204447	5	F2	1	6	F1	6	R
2040.405400	0.547	2040.404853	2119.359680	5	F2	1	6	F1	8	R
2105.530800	0.690	2105.530110	2184.484938	5	F2	1	6	F1	12	R
2117.480100	0.275	2117.479825	2196.434652	5	F2	1	6	F1	14	R
2121.238400	-0.031	2121.238431	2200.193259	5	F2	1	6	F1	15	R
2124.553100	0.227	2124.552873	2203.507701	5	F2	1	6	F1	16	R
2217.536700	0.487	2217.536213	2296.491040	5	F2	1	6	F1	21	R
1965.780900	-0.621	1965.781521	2076.302684	6	F2	1	6	F1	2	Q
1972.574300	-2.165	1972.576465	2083.097629	6	F2	1	6	F1	3	Q
1975.866800	-0.577	1975.867377	2086.388541	6	F2	1	6	F1	4	Q
1984.219900	0.652	1984.219248	2094.745711	6	F2	2	6	F1	5	Q
1993.677800	-0.184	1993.677984	2104.204447	6	F2	2	6	F1	6	Q
1997.757200	1.435	1997.755765	2108.282228	6	F2	2	6	F1	7	Q
2008.834500	-4.016	2008.838516	2119.359680	6	F2	1	6	F1	8	Q
2014.386000	-0.362	2014.386362	2124.907525	6	F2	1	6	F1	9	Q
2072.052900	-0.190	2072.053090	2182.579553	6	F2	2	6	F1	10	Q
2079.297800	0.174	2079.297626	2189.818790	6	F2	1	6	F1	13	Q
2085.911400	-2.089	2085.913489	2196.434652	6	F2	1	6	F1	14	Q
2089.666700	-0.097	2089.666797	2200.193259	6	F2	2	6	F1	15	Q
2092.981900	-4.637	2092.986537	2203.507701	6	F2	1	6	F1	16	Q
2099.765400	-2.691	2099.768091	2210.289255	6	F2	1	6	F1	17	Q
2102.650000	0.128	2102.649872	2213.176335	6	F2	2	6	F1	19	Q
2185.967500	-2.377	2185.969877	2296.491040	6	F2	1	6	F1	21	Q
2187.248500	-1.628	2187.250128	2297.771292	6	F2	1	6	F1	22	Q
2188.352500	0.118	2188.352382	2298.873546	6	F2	1	6	F1	23	Q
2189.762100	-1.175	2189.763275	2300.289738	6	F2	2	6	F1	24	Q
2258.492000	-2.341	2258.494341	2369.015504	6	F2	1	6	F1	26	Q
2258.592800	1.988	2258.590812	2369.117274	6	F2	2	6	F1	27	Q
1928.954800	0.068	1928.954732	2076.302684	7	F2	2	6	F1	2	P
1935.759700	0.716	1935.758984	2083.097629	7	F2	1	6	F1	3	P
1939.040700	0.112	1939.040588	2086.388541	7	F2	2	6	F1	4	P
1960.938400	-5.183	1960.943583	2108.282228	7	F2	1	6	F1	7	P
1960.935000	0.725	1960.934275	2108.282228	7	F2	2	6	F1	7	P
1972.011900	0.173	1972.011727	2119.359680	7	F2	2	6	F1	8	P
1977.560100	0.528	1977.559572	2124.907525	7	F2	2	6	F1	9	P
2035.982800	0.088	2035.982712	2183.321357	7	F2	1	6	F1	11	P
2049.091400	-4.608	2049.096008	2196.434652	7	F2	1	6	F1	14	P

2052.854400	-0.214	2052.854614	2200.193259	7	F2	1	6	F1	15	P
2056.159900	0.152	2056.159748	2203.507701	7	F2	2	6	F1	16	P
2063.632700	-0.082	2063.632782	2210.971426	7	F2	1	6	F1	18	P
2149.148100	-4.296	2149.152396	2296.491040	7	F2	1	6	F1	21	P
2150.423500	0.161	2150.423339	2297.771292	7	F2	2	6	F1	22	P
2227.931700	-7.873	2227.939573	2375.278217	7	F2	1	6	F1	28	P
2004.850000	0.124	2004.849876	2083.807376	5	F1	2	6	F2	4	R
2015.779200	0.269	2015.778931	2094.736431	5	F1	2	6	F2	5	R
2016.280900	1.000	2016.279900	2095.237400	5	F1	2	6	F2	6	R
2025.050500	-0.039	2025.050539	2104.004492	5	F1	1	6	F2	7	R
2028.210800	0.634	2028.210166	2107.167666	5	F1	2	6	F2	8	R
2038.005100	0.348	2038.004752	2116.962252	5	F1	2	6	F2	9	R
2042.786900	-0.545	2042.787445	2121.741398	5	F1	1	6	F2	10	R
2103.621100	0.017	2103.621083	2182.575036	5	F1	1	6	F2	11	R
2105.174600	-0.330	2105.174930	2184.128883	5	F1	1	6	F2	13	R
2115.052100	-1.128	2115.053228	2194.007181	5	F1	1	6	F2	14	R
2116.221600	-0.392	2116.221992	2195.175945	5	F1	1	6	F2	15	R
2118.736400	-3.196	2118.739596	2197.693549	5	F1	1	6	F2	16	R
2125.525100	0.524	2125.524576	2204.482076	5	F1	2	6	F2	17	R
2129.668600	-3.318	2129.671918	2208.625871	5	F1	1	6	F2	18	R
2131.839500	0.028	2131.839472	2210.796972	5	F1	2	6	F2	19	R
2215.616800	0.812	2215.615988	2294.573488	5	F1	2	6	F2	23	R
2221.927600	0.940	2221.926660	2300.884160	5	F1	2	6	F2	26	R
1984.705900	-3.939	1984.709839	2095.237400	6	F1	1	6	F2	6	Q
1993.476500	-0.431	1993.476931	2104.004492	6	F1	1	6	F2	7	Q
1996.640200	0.095	1996.640105	2107.167666	6	F1	1	6	F2	8	Q
2006.434700	0.008	2006.434692	2116.962252	6	F1	1	6	F2	9	Q
2011.213600	-0.238	2011.213838	2121.741398	6	F1	1	6	F2	10	Q
2072.610700	-0.246	2072.610946	2183.138507	6	F1	1	6	F2	12	Q
2084.649300	0.915	2084.648385	2195.175945	6	F1	1	6	F2	15	Q
2093.954600	0.085	2093.954515	2204.482076	6	F1	1	6	F2	17	Q
2098.098300	-0.011	2098.098311	2208.625871	6	F1	1	6	F2	18	Q
2102.928800	-0.297	2102.929097	2213.456657	6	F1	1	6	F2	20	Q
2190.356800	0.200	2190.356600	2300.884160	6	F1	1	6	F2	26	Q
2258.612800	2.259	2258.610541	2369.138102	6	F1	1	6	F2	30	Q
1928.134900	0.340	1928.134560	2075.485970	7	F1	2	6	F2	3	P
1936.469400	-0.207	1936.469607	2083.807376	7	F1	1	6	F2	4	P
1947.398700	0.037	1947.398663	2094.736431	7	F1	1	6	F2	5	P
1947.886000	0.010	1947.885990	2095.237400	7	F1	2	6	F2	6	P
1956.652900	-0.182	1956.653082	2104.004492	7	F1	2	6	F2	7	P
1969.624400	-0.084	1969.624484	2116.962252	7	F1	1	6	F2	9	P
1974.389700	-0.288	1974.389988	2121.741398	7	F1	2	6	F2	10	P
2035.224400	0.774	2035.223626	2182.575036	7	F1	2	6	F2	11	P
2035.800800	0.062	2035.800738	2183.138507	7	F1	1	6	F2	12	P
2036.791000	-0.114	2036.791114	2184.128883	7	F1	1	6	F2	13	P
2046.655700	-0.071	2046.655771	2194.007181	7	F1	2	6	F2	14	P
2047.838000	-0.177	2047.838177	2195.175945	7	F1	1	6	F2	15	P
2047.824700	0.165	2047.824535	2195.175945	7	F1	2	6	F2	15	P
2050.355300	-0.480	2050.355780	2197.693549	7	F1	1	6	F2	16	P
2150.389700	-0.150	2150.389850	2297.741260	7	F1	2	6	F2	25	P
2227.900800	1.575	2227.899225	2375.250635	7	F1	2	6	F2	31	P
2228.016800	-2.174	2228.018974	2375.356743	7	F1	1	6	F2	32	P
2010.615000	-0.215	2010.615215	2121.137555	6	A2	1	7	A1	1	R
2030.706500	0.053	2030.706447	2141.228787	6	A2	1	7	A1	2	R
2109.121400	-0.148	2109.121548	2219.643889	6	A2	1	7	A1	4	R
2123.521900	0.063	2123.521837	2234.044178	6	A2	1	7	A1	5	R
2227.509600	-0.107	2227.509707	2338.032047	6	A2	1	7	A1	8	R
2295.171300	1.161	2295.170139	2405.692480	6	A2	1	7	A1	10	R
1973.791900	-0.251	1973.792151	2121.137555	7	A2	1	7	A1	1	Q
1993.883400	0.017	1993.883383	2141.228787	7	A2	1	7	A1	2	Q
2010.820300	0.285	2010.820015	2158.165419	7	A2	1	7	A1	3	Q
2086.698500	-0.273	2086.698773	2234.044178	7	A2	1	7	A1	5	Q
2101.128200	0.032	2101.128168	2248.473572	7	A2	1	7	A1	6	Q
2190.688500	1.857	2190.686643	2338.032047	7	A2	1	7	A1	8	Q
2258.348100	1.025	2258.347075	2405.692480	7	A2	1	7	A1	10	Q
2134.763400	0.131	2134.763269	2245.291799	6	A1	1	7	A2	7	R
2138.876800	0.221	2138.876579	2249.405109	6	A1	1	7	A2	8	R
2230.823800	-0.478	2230.824278	2341.352808	6	A1	1	7	A2	11	R
1919.827600	0.104	1919.827496	2109.226772	8	A1	1	7	A2	1	P
1941.052200	0.231	1941.051969	2130.451245	8	A1	1	7	A2	3	P
1965.070500	-0.784	1965.071284	2154.470560	8	A1	1	7	A2	4	P
2029.275200	-0.329	2029.275529	2218.674805	8	A1	1	7	A2	5	P
2042.344000	0.394	2042.343606	2231.742882	8	A1	1	7	A2	6	P
2055.892400	-0.123	2055.892523	2245.291799	8	A1	1	7	A2	7	P
2060.003600	-2.233	2060.005833	2249.405109	8	A1	1	7	A2	8	P
2020.374100	-0.100	2020.374200	2130.894976	6	E	1	7	E	4	R
2030.463700	-0.140	2030.463840	2140.984616	6	E	1	7	E	5	R
2108.750600	4.153	2108.746447	2219.267223	6	E	1	7	E	10	R
2120.549900	-0.034	2120.549934	2231.070710	6	E	1	7	E	11	R

2125.750700	-0.078	2125.750778	2236.271554	6	E	1	7	E	12	R
2143.123400	-0.399	2143.123799	2253.644575	6	E	1	7	E	15	R
2223.651800	1.698	2223.650102	2334.170878	6	E	1	7	E	17	R
1969.688400	-0.964	1969.689364	2117.038682	7	E	1	7	E	3	Q
1983.545400	-0.258	1983.545658	2130.894976	7	E	1	7	E	4	Q
1993.635100	-0.197	1993.635297	2140.984616	7	E	1	7	E	5	Q
1997.934100	-0.157	1997.934257	2145.283575	7	E	1	7	E	6	Q
2013.783400	-0.722	2013.784122	2161.133440	7	E	1	7	E	7	Q
2070.128400	-0.497	2070.128897	2217.478216	7	E	1	7	E	8	Q
2071.236900	-0.007	2071.236907	2218.586225	7	E	1	7	E	9	Q
2083.721300	-0.092	2083.721392	2231.070710	7	E	1	7	E	11	Q
2094.616900	2.001	2094.614899	2241.964218	7	E	1	7	E	13	Q
2106.294800	-0.457	2106.295257	2253.644575	7	E	1	7	E	15	Q
2258.400600	1.725	2258.398875	2405.748194	7	E	1	7	E	21	Q
1917.977300	0.035	1917.977265	2107.398880	8	E	2	7	E	1	P
1941.494800	0.389	1941.494411	2130.894976	8	E	1	7	E	4	P
1941.473300	-0.062	1941.473362	2130.894976	8	E	2	7	E	4	P
1951.562800	-0.201	1951.563001	2140.984616	8	E	2	7	E	5	P
1955.883100	0.090	1955.883010	2145.283575	8	E	1	7	E	6	P
1955.861900	-0.060	1955.861960	2145.283575	8	E	2	7	E	6	P
1971.711500	-0.325	1971.711825	2161.133440	8	E	2	7	E	7	P
2029.185700	0.040	2029.185660	2218.586225	8	E	1	7	E	9	P
2029.164600	-0.011	2029.164611	2218.586225	8	E	2	7	E	9	P
2029.866500	-0.158	2029.866658	2219.267223	8	E	1	7	E	10	P
2041.649200	0.104	2041.649096	2231.070710	8	E	2	7	E	11	P
2046.871100	0.112	2046.870988	2236.271554	8	E	1	7	E	12	P
2046.850200	0.261	2046.849939	2236.271554	8	E	2	7	E	12	P
2052.542800	0.197	2052.542603	2241.964218	8	E	2	7	E	13	P
2060.054600	0.677	2060.053923	2249.454488	8	E	1	7	E	14	P
2144.770700	0.388	2144.770312	2334.170878	8	E	1	7	E	17	P
2146.526300	0.437	2146.525863	2335.947478	8	E	2	7	E	18	P
2010.266000	0.933	2010.265067	2120.791529	6	F2	2	7	F1	5	R
2020.132800	0.506	2020.132294	2130.658757	6	F2	2	7	F1	6	R
2020.488900	-0.347	2020.489247	2131.010411	6	F2	1	7	F1	7	R
2030.533300	-0.107	2030.533407	2141.054571	6	F2	1	7	F1	8	R
2033.219500	0.112	2033.219388	2143.745851	6	F2	2	7	F1	9	R
2045.926700	-0.023	2045.926723	2156.453186	6	F2	2	7	F1	10	R
2118.876200	-3.306	2118.879506	2229.400670	6	F2	1	7	F1	17	R
2121.777900	-0.233	2121.778133	2232.299297	6	F2	1	7	F1	18	R
2125.179300	0.239	2125.179061	2235.705524	6	F2	2	7	F1	19	R
2129.187100	-3.599	2129.190699	2239.711863	6	F2	1	7	F1	20	R
2138.356700	0.300	2138.356400	2248.882863	6	F2	2	7	F1	22	R
2143.026000	-0.498	2143.026498	2253.547662	6	F2	1	7	F1	23	R
2224.126800	-0.622	2224.127422	2334.648586	6	F2	1	7	F1	27	R
2225.410400	-1.774	2225.412174	2335.933337	6	F2	1	7	F1	28	R
2226.814800	0.183	2226.814617	2337.341080	6	F2	2	7	F1	29	R
2228.478900	-2.435	2228.481335	2339.002499	6	F2	1	7	F1	30	R
2231.797500	-1.004	2231.798504	2342.324966	6	F2	2	7	F1	31	R
1960.437200	-0.162	1960.437362	2107.776007	7	F2	1	7	F1	2	Q
1963.668000	-0.147	1963.668147	2111.006792	7	F2	1	7	F1	4	Q
1973.452300	-0.585	1973.452885	2120.791529	7	F2	1	7	F1	5	Q
1983.320500	0.388	1983.320112	2130.658757	7	F2	1	7	F1	6	Q
1996.398000	0.102	1996.397898	2143.745851	7	F2	2	7	F1	9	Q
2009.105600	-8.941	2009.114541	2156.453186	7	F2	1	7	F1	10	Q
2013.344600	-0.146	2013.344746	2160.692699	7	F2	2	7	F1	11	Q
2017.733400	-0.276	2017.733676	2165.072321	7	F2	1	7	F1	12	Q
2070.143600	0.073	2070.143527	2217.491480	7	F2	2	7	F1	13	Q
2071.924200	-0.521	2071.924721	2219.272673	7	F2	2	7	F1	15	Q
2077.905300	0.368	2077.904932	2225.243577	7	F2	1	7	F1	16	Q
2084.955400	-5.252	2084.960652	2232.299297	7	F2	1	7	F1	18	Q
2088.366800	-0.079	2088.366879	2235.705524	7	F2	1	7	F1	19	Q
2100.992000	-0.018	2100.992018	2248.339971	7	F2	2	7	F1	21	Q
2106.199200	-0.509	2106.199709	2253.547662	7	F2	2	7	F1	23	Q
2191.654400	-0.146	2191.654546	2339.002499	7	F2	2	7	F1	30	Q
2258.382400	1.725	2258.380675	2405.728628	7	F2	2	7	F1	35	Q
1918.363300	0.184	1918.363116	2107.776007	8	F2	1	7	F1	2	P
1920.426100	-3.888	1920.429988	2109.852830	8	F2	2	7	F1	3	P
1931.378600	-0.039	1931.378639	2120.791529	8	F2	1	7	F1	5	P
1941.235700	-0.215	1941.235915	2130.658757	8	F2	2	7	F1	6	P
1941.597400	-0.121	1941.597521	2131.010411	8	F2	1	7	F1	7	P
1951.631500	-0.230	1951.631730	2141.054571	8	F2	2	7	F1	8	P
1954.323100	0.091	1954.323009	2143.745851	8	F2	2	7	F1	9	P
1971.271100	1.242	1971.269858	2160.692699	8	F2	2	7	F1	11	P
1975.659600	0.170	1975.659430	2165.072321	8	F2	1	7	F1	12	P
2028.068400	-0.238	2028.068638	2217.491480	8	F2	2	7	F1	13	P
2028.276900	0.191	2028.276709	2217.689600	8	F2	1	7	F1	14	P
2035.829900	-0.786	2035.830686	2225.243577	8	F2	1	7	F1	16	P
2039.978000	0.172	2039.977828	2229.400670	8	F2	2	7	F1	17	P
2042.877000	0.544	2042.876456	2232.299297	8	F2	2	7	F1	18	P

2046.278800	-3.883	2046.282683	2235.705524	8	F2	2	7	F1	19	P
2145.235800	0.104	2145.235696	2334.648586	8	F2	1	7	F1	27	P
2146.510600	0.104	2146.510496	2335.933337	8	F2	2	7	F1	28	P
2147.927400	-0.789	2147.928189	2337.341080	8	F2	1	7	F1	29	P
2149.591000	1.392	2149.589608	2339.002499	8	F2	1	7	F1	30	P
2223.342200	4.757	2223.337443	2412.760285	8	F2	2	7	F1	36	P
2223.408100	1.745	2223.406355	2412.819245	8	F2	1	7	F1	37	P
2020.044300	0.251	2020.044049	2130.571610	6	F1	1	7	F2	6	R
2119.763900	-0.116	2119.764016	2230.291576	6	F1	1	7	F2	16	R
2122.980100	0.006	2122.980094	2233.507655	6	F1	1	7	F2	17	R
2127.775400	-0.118	2127.775518	2238.303079	6	F1	1	7	F2	18	R
2132.245200	0.011	2132.245189	2242.772750	6	F1	1	7	F2	19	R
2138.975100	4.446	2138.970654	2249.498214	6	F1	1	7	F2	22	R
2226.853000	-3.184	2226.856184	2337.383745	6	F1	1	7	F2	28	R
2229.777400	-0.708	2229.778108	2340.305668	6	F1	1	7	F2	29	R
2231.611500	0.033	2231.611467	2342.139028	6	F1	1	7	F2	30	R
1960.716200	0.030	1960.716170	2108.053939	7	F1	1	7	F2	1	Q
1969.968600	-1.306	1969.969906	2117.321316	7	F1	2	7	F2	4	Q
1973.030200	0.327	1973.029873	2120.367642	7	F1	1	7	F2	5	Q
1983.234300	0.459	1983.233841	2130.571610	7	F1	1	7	F2	6	Q
1983.594000	-0.014	1983.594014	2130.945424	7	F1	2	7	F2	7	Q
1996.745900	-0.128	1996.746028	2144.097438	7	F1	2	7	F2	8	Q
1998.046500	-0.339	1998.046839	2145.384608	7	F1	1	7	F2	9	Q
2008.056300	0.044	2008.056256	2155.407666	7	F1	2	7	F2	10	Q
2071.583100	-0.273	2071.583373	2218.934783	7	F1	2	7	F2	14	Q
2078.386400	0.219	2078.386181	2225.723949	7	F1	1	7	F2	15	Q
2090.964900	-0.410	2090.965310	2238.303079	7	F1	1	7	F2	18	Q
2095.421300	-0.040	2095.421340	2242.772750	7	F1	2	7	F2	19	Q
2100.216900	-0.113	2100.217013	2247.568423	7	F1	2	7	F2	20	Q
2101.552800	0.101	2101.552699	2248.890468	7	F1	1	7	F2	21	Q
2188.534500	2.750	2188.531750	2335.869519	7	F1	1	7	F2	27	Q
2190.046500	0.524	2190.045976	2337.383745	7	F1	1	7	F2	28	Q
2258.429300	2.118	2258.427182	2405.778592	7	F1	2	7	F2	33	Q
1920.357700	0.100	1920.357600	2109.757688	8	F1	1	7	F2	3	P
1930.967400	-0.154	1930.967554	2120.367642	8	F1	1	7	F2	5	P
1930.950200	0.119	1930.950081	2120.367642	8	F1	2	7	F2	5	P
1941.172300	0.779	1941.171521	2130.571610	8	F1	1	7	F2	6	P
1941.154400	0.352	1941.154048	2130.571610	8	F1	2	7	F2	6	P
1941.545600	0.264	1941.545336	2130.945424	8	F1	1	7	F2	7	P
1955.984200	-0.319	1955.984519	2145.384608	8	F1	1	7	F2	9	P
1955.967100	0.054	1955.967046	2145.384608	8	F1	2	7	F2	9	P
1966.007400	-0.178	1966.007578	2155.407666	8	F1	1	7	F2	10	P
1965.990100	-0.005	1965.990105	2155.407666	8	F1	2	7	F2	10	P
1975.434200	-0.091	1975.434291	2164.851853	8	F1	2	7	F2	11	P
2028.417100	0.159	2028.416941	2217.834502	8	F1	2	7	F2	12	P
2028.940500	0.605	2028.939895	2218.339984	8	F1	1	7	F2	13	P
2028.925000	2.578	2028.922422	2218.339984	8	F1	2	7	F2	13	P
2029.534900	0.205	2029.534695	2218.934783	8	F1	1	7	F2	14	P
2036.305100	-1.288	2036.306388	2225.723949	8	F1	2	7	F2	15	P
2044.107700	0.133	2044.107567	2233.507655	8	F1	1	7	F2	17	P
2048.885500	-0.017	2048.885517	2238.303079	8	F1	2	7	F2	18	P
2060.098400	0.274	2060.098126	2249.498214	8	F1	1	7	F2	22	P
2146.451900	-0.057	2146.451957	2335.869519	8	F1	2	7	F2	27	P
2150.904400	-1.180	2150.905580	2340.305668	8	F1	1	7	F2	29	P
2223.374100	0.962	2223.373138	2412.790699	8	F1	2	7	F2	34	P
2023.838300	0.407	2023.837893	2171.183297	7	A2	1	8	A1	3	R
2037.787500	0.040	2037.787460	2185.132864	7	A2	1	8	A1	4	R
2055.836200	-0.703	2055.836903	2203.182307	7	A2	1	8	A1	5	R
2110.283600	-0.103	2110.283703	2257.629107	7	A2	1	8	A1	6	R
2122.661000	-0.001	2122.661001	2270.006405	7	A2	1	8	A1	7	R
2129.940300	0.744	2129.939556	2277.284960	7	A2	1	8	A1	8	R
2226.917800	0.670	2226.917130	2374.262534	7	A2	1	8	A1	11	R
2232.169600	-0.529	2232.170129	2379.515533	7	A2	1	8	A1	12	R
2240.491400	0.323	2240.491077	2387.836481	7	A2	1	8	A1	13	R
1948.394100	0.209	1948.393891	2185.132864	9	A2	1	8	A1	4	P
1966.445000	1.666	1966.443334	2203.182307	9	A2	1	8	A1	5	P
2020.890300	0.166	2020.890134	2257.629107	9	A2	1	8	A1	6	P
2033.267800	0.368	2033.267432	2270.006405	9	A2	1	8	A1	7	P
2040.545900	-0.087	2040.545987	2277.284960	9	A2	1	8	A1	8	P
1956.580700	0.365	1956.580335	2145.979611	8	A1	1	8	A2	1	Q
1969.780000	0.151	1969.779849	2159.179125	8	A1	1	8	A2	2	Q
2020.705300	-0.214	2020.705514	2210.104790	8	A1	1	8	A2	4	Q
2077.243000	0.244	2077.242756	2266.642032	8	A1	1	8	A2	6	Q
2092.745100	0.195	2092.744905	2282.144181	8	A1	1	8	A2	7	Q
2103.301800	0.381	2103.301419	2292.700695	8	A1	1	8	A2	8	Q
2189.947400	-0.440	2189.947840	2379.347116	8	A1	1	8	A2	9	Q
2191.899900	0.312	2191.899588	2381.298864	8	A1	1	8	A2	10	Q
1922.450800	0.312	1922.450488	2159.179125	9	A1	1	8	A2	2	P
1951.139100	-0.006	1951.139106	2187.867743	9	A1	1	8	A2	3	P

1973.376100	-0.053	1973.376153	2210.104790	9	A1	1	8	A2	4	P
2021.766800	0.332	2021.766468	2258.495104	9	A1	1	8	A2	5	P
2055.972300	0.242	2055.972058	2292.700695	9	A1	1	8	A2	8	P
2142.618500	0.021	2142.618479	2379.347116	9	A1	1	8	A2	9	P
2218.802300	-0.446	2218.802746	2455.531383	9	A1	1	8	A2	12	P
2013.013700	-0.230	2013.013930	2160.363248	7	E	1	8	E	4	R
2023.914600	0.403	2023.914197	2171.263516	7	E	1	8	E	5	R
2024.987500	1.010	2024.986490	2172.335808	7	E	1	8	E	6	R
2051.633100	0.008	2051.633092	2198.982410	7	E	1	8	E	8	R
2129.243700	-0.040	2129.243740	2276.593059	7	E	1	8	E	14	R
2226.991600	1.556	2226.990044	2374.339363	7	E	1	8	E	20	R
2230.472700	0.354	2230.472346	2377.821664	7	E	1	8	E	21	R
2236.885700	0.876	2236.884824	2384.234143	7	E	1	8	E	23	R
2240.280400	0.263	2240.280137	2387.629455	7	E	1	8	E	24	R
1956.456100	-0.197	1956.456297	2145.856863	8	E	1	8	E	1	Q
1970.962600	-0.083	1970.962683	2160.363248	8	E	1	8	E	4	Q
1970.941500	-0.133	1970.941633	2160.363248	8	E	2	8	E	4	Q
1982.935000	-0.243	1982.935243	2172.335808	8	E	1	8	E	6	Q
1982.914000	-0.194	1982.914194	2172.335808	8	E	2	8	E	6	Q
2009.582300	0.455	2009.581845	2198.982410	8	E	1	8	E	8	Q
2009.560800	0.005	2009.560795	2198.982410	8	E	2	8	E	8	Q
2020.923600	0.019	2020.923581	2210.324147	8	E	1	8	E	9	Q
2076.674200	0.515	2076.673685	2266.074250	8	E	1	8	E	12	Q
2081.707300	-0.196	2081.707496	2271.129111	8	E	2	8	E	13	Q
2087.192600	0.107	2087.192493	2276.593059	8	E	1	8	E	14	Q
2102.316200	-0.340	2102.316540	2291.717105	8	E	1	8	E	16	Q
2188.421800	0.701	2188.421099	2377.821664	8	E	1	8	E	21	Q
2191.733100	0.180	2191.732920	2381.133485	8	E	1	8	E	22	Q
2258.192500	1.710	2258.190790	2447.612405	8	E	2	8	E	27	Q
1909.136200	0.025	1909.136175	2145.856863	9	E	1	8	E	1	P
1935.614900	-0.221	1935.615121	2172.335808	9	E	1	8	E	6	P
1973.603500	0.040	1973.603460	2210.324147	9	E	1	8	E	9	P
2021.358300	-0.173	2021.358473	2258.079161	9	E	1	8	E	10	P
2022.014900	0.473	2022.014427	2258.735115	9	E	1	8	E	11	P
2029.354100	0.537	2029.353563	2266.074250	9	E	1	8	E	12	P
2039.872500	0.128	2039.872372	2276.593059	9	E	1	8	E	14	P
2141.102200	1.223	2141.100977	2377.821664	9	E	1	8	E	21	P
2147.513100	-0.355	2147.513455	2384.234143	9	E	1	8	E	23	P
2218.843600	-4.110	2218.847710	2455.568398	9	E	1	8	E	28	P
2013.380500	1.686	2013.378814	2160.726767	7	F2	2	8	F1	5	R
2023.873700	0.562	2023.873138	2171.221090	7	F2	2	8	F1	6	R
2035.777200	-0.133	2035.777333	2183.115978	7	F2	1	8	F1	8	R
2038.375000	-0.182	2038.375182	2185.723135	7	F2	2	8	F1	9	R
2052.637200	0.173	2052.637027	2199.984980	7	F2	2	8	F1	11	R
2057.625200	-0.181	2057.625381	2204.964026	7	F2	1	8	F1	12	R
2112.281900	-0.285	2112.282185	2259.620829	7	F2	1	8	F1	15	R
2123.179000	0.890	2123.178110	2270.526063	7	F2	2	8	F1	17	R
2126.757400	0.024	2126.757376	2274.096021	7	F2	1	8	F1	18	R
2129.033800	-5.581	2129.039381	2276.378026	7	F2	1	8	F1	19	R
2132.133100	0.400	2132.132700	2279.480653	7	F2	2	8	F1	20	R
2138.561200	-1.026	2138.562226	2285.910179	7	F2	2	8	F1	21	R
2144.514700	-3.108	2144.517808	2291.865761	7	F2	2	8	F1	22	R
2235.029000	-3.062	2235.032062	2382.370707	7	F2	1	8	F1	31	R
2240.364900	0.329	2240.364571	2387.712524	7	F2	2	8	F1	33	R
1967.035400	-2.301	1967.037701	2156.460542	8	F2	2	8	F1	4	Q
1971.313600	-0.276	1971.313876	2160.726767	8	F2	1	8	F1	5	Q
1982.569200	-0.430	1982.569630	2171.992471	8	F2	2	8	F1	7	Q
1993.703900	0.812	1993.703088	2183.115978	8	F2	1	8	F1	8	Q
1996.304700	4.407	1996.300293	2185.723135	8	F2	2	8	F1	9	Q
1998.083700	-0.165	1998.083865	2187.506707	8	F2	2	8	F1	10	Q
2015.550900	-0.235	2015.551135	2204.964026	8	F2	1	8	F1	12	Q
2070.532500	-0.945	2070.533445	2259.946336	8	F2	1	8	F1	16	Q
2090.067400	-0.362	2090.067762	2279.480653	8	F2	1	8	F1	20	Q
2102.452900	0.029	2102.452871	2291.865761	8	F2	1	8	F1	22	Q
2187.626600	1.206	2187.625394	2377.048235	8	F2	2	8	F1	29	Q
2192.957500	-0.316	2192.957816	2382.370707	8	F2	1	8	F1	31	Q
2195.487800	0.674	2195.487126	2384.909968	8	F2	2	8	F1	32	Q
2258.101500	0.605	2258.100895	2447.513785	8	F2	1	8	F1	36	Q
1935.292900	1.753	1935.291147	2171.992471	9	F2	1	8	F1	7	P
1948.986200	0.098	1948.986102	2185.723135	9	F2	2	8	F1	9	P
1950.805500	0.117	1950.805383	2187.506707	9	F2	1	8	F1	10	P
1963.248100	0.153	1963.247947	2199.984980	9	F2	2	8	F1	11	P
1968.226800	-0.192	1968.226992	2204.964026	9	F2	2	8	F1	12	P
2020.989000	0.037	2020.988963	2257.725996	9	F2	2	8	F1	13	P
2022.919200	-0.305	2022.919505	2259.620829	9	F2	1	8	F1	15	P
2023.244500	-0.512	2023.245012	2259.946336	9	F2	1	8	F1	16	P
2033.786700	-2.330	2033.789030	2270.526063	9	F2	2	8	F1	17	P
2037.394900	0.203	2037.394697	2274.096021	9	F2	1	8	F1	18	P
2037.359100	0.112	2037.358988	2274.096021	9	F2	2	8	F1	18	P

2039.677000	0.298	2039.676702	2276.378026	9	F2	1	8	F1	19	P
2218.946700	1.135	2218.945565	2455.646890	9	F2	1	8	F1	39	P
2012.666300	-0.522	2012.666822	2160.018232	7	F1	2	8	F2	6	R
2023.987800	0.387	2023.987413	2171.338823	7	F1	2	8	F2	7	R
2035.715000	-0.293	2035.715293	2183.053062	7	F1	1	8	F2	9	R
2050.470000	-0.296	2050.470296	2197.821705	7	F1	2	8	F2	11	R
2058.409500	-0.348	2058.409848	2205.747617	7	F1	1	8	F2	12	R
2111.849500	-0.109	2111.849609	2259.187377	7	F1	1	8	F2	16	R
2126.415000	-2.022	2126.417022	2273.768432	7	F1	2	8	F2	20	R
2132.717300	-0.353	2132.717653	2280.055421	7	F1	1	8	F2	21	R
2132.704000	-0.011	2132.704011	2280.055421	7	F1	2	8	F2	21	R
2135.641200	-2.094	2135.643294	2282.981063	7	F1	1	8	F2	22	R
2145.161500	0.216	2145.161284	2292.512694	7	F1	2	8	F2	24	R
2236.175200	0.004	2236.175196	2383.512965	7	F1	1	8	F2	33	R
2239.198300	-0.514	2239.198814	2386.550224	7	F1	2	8	F2	34	R
1955.510900	1.818	1955.509082	2144.926643	8	F1	2	8	F2	1	Q
1956.491600	-0.137	1956.491737	2145.891825	8	F1	1	8	F2	2	Q
1970.618100	-0.044	1970.618144	2160.018232	8	F1	1	8	F2	6	Q
1981.939500	0.765	1981.938735	2171.338823	8	F1	1	8	F2	7	Q
1983.082900	-0.392	1983.083292	2172.483380	8	F1	1	8	F2	8	Q
1983.065800	-0.018	1983.065818	2172.483380	8	F1	2	8	F2	8	Q
1998.066200	-0.171	1998.066371	2187.483933	8	F1	2	8	F2	10	Q
2016.329800	-0.255	2016.330055	2205.747617	8	F1	2	8	F2	12	Q
2020.856400	-0.189	2020.856589	2210.256677	8	F1	1	8	F2	13	Q
2068.351400	-0.369	2068.351769	2257.769330	8	F1	2	8	F2	14	Q
2070.314900	0.318	2070.314582	2259.732144	8	F1	2	8	F2	17	Q
2076.864200	0.468	2076.863732	2266.263820	8	F1	1	8	F2	18	Q
2083.144800	0.398	2083.144402	2272.561963	8	F1	2	8	F2	19	Q
2090.655600	0.267	2090.655333	2280.055421	8	F1	1	8	F2	21	Q
2090.637800	-0.060	2090.637860	2280.055421	8	F1	2	8	F2	21	Q
2093.563600	0.098	2093.563502	2282.981063	8	F1	2	8	F2	22	Q
2103.113600	0.994	2103.112606	2292.512694	8	F1	1	8	F2	24	Q
2103.095200	0.068	2103.095132	2292.512694	8	F1	2	8	F2	24	Q
2188.583700	-1.405	2188.585105	2377.985194	8	F1	1	8	F2	30	Q
2188.568600	0.968	2188.567632	2377.985194	8	F1	2	8	F2	30	Q
2191.795700	0.110	2191.795590	2381.195679	8	F1	1	8	F2	32	Q
2194.097300	1.897	2194.095403	2383.512965	8	F1	2	8	F2	33	Q
2258.149900	1.478	2258.148422	2447.565984	8	F1	2	8	F2	38	Q
1909.169600	0.025	1909.169575	2145.891825	9	F1	2	8	F2	2	P
1923.317600	-0.152	1923.317752	2160.018232	9	F1	1	8	F2	6	P
1923.296500	0.518	1923.295982	2160.018232	9	F1	2	8	F2	6	P
1934.638900	0.557	1934.638343	2171.338823	9	F1	1	8	F2	7	P
1934.617200	0.627	1934.616573	2171.338823	9	F1	2	8	F2	7	P
1946.318400	-0.113	1946.318513	2183.053062	9	F1	3	8	F2	9	P
1950.783300	-0.152	1950.783452	2187.483933	9	F1	1	8	F2	10	P
1950.749500	0.116	1950.749384	2187.483933	9	F1	3	8	F2	10	P
1969.012900	-0.168	1969.013068	2205.747617	9	F1	3	8	F2	12	P
1973.534200	-0.227	1973.534427	2210.256677	9	F1	2	8	F2	13	P
2021.554900	-0.053	2021.554953	2258.277203	9	F1	2	8	F2	15	P
2022.487100	0.203	2022.486897	2259.187377	9	F1	1	8	F2	16	P
2022.465100	-0.027	2022.465127	2259.187377	9	F1	2	8	F2	16	P
2023.031100	-0.564	2023.031664	2259.732144	9	F1	1	8	F2	17	P
2037.070600	2.649	2037.067951	2273.768432	9	F1	1	8	F2	20	P
2037.046200	0.018	2037.046182	2273.768432	9	F1	2	8	F2	20	P
2043.333000	-0.171	2043.333171	2280.055421	9	F1	2	8	F2	21	P
2046.246400	-0.114	2046.246514	2282.981063	9	F1	3	8	F2	22	P
2052.476800	-0.079	2052.476879	2289.177360	9	F1	1	8	F2	23	P
2139.928200	2.703	2139.925497	2376.625977	9	F1	1	8	F2	29	P
2141.262900	-0.044	2141.262944	2377.985194	9	F1	2	8	F2	30	P
2142.699200	0.154	2142.699046	2379.433596	9	F1	3	8	F2	31	P
2146.790400	-0.314	2146.790714	2383.512965	9	F1	2	8	F2	33	P
1981.411700	-0.967	1981.412667	2218.151640	9	A2	1	9	A1	3	Q
1998.326800	-0.458	1998.327258	2235.066231	9	A2	1	9	A1	4	Q
2086.848100	-1.171	2086.849271	2323.588245	9	A2	1	9	A1	7	Q
2097.841400	-0.511	2097.841911	2334.580885	9	A2	1	9	A1	8	Q
2198.468100	0.805	2198.467295	2435.206268	9	A2	1	9	A1	12	Q
1928.916100	-0.982	1928.917082	2218.151640	10	A2	1	9	A1	3	P
1945.831100	-0.573	1945.831673	2235.066231	10	A2	1	9	A1	4	P
2017.009900	-0.134	2017.010034	2306.244591	10	A2	1	9	A1	6	P
2029.914900	-1.837	2029.916737	2219.316013	8	A1	1	9	A2	3	R
2129.650300	0.326	2129.649974	2319.049250	8	A1	1	9	A2	8	R
2160.994800	-0.134	2160.994934	2350.394210	8	A1	1	9	A2	11	R
2237.480800	-0.117	2237.480917	2426.880193	8	A1	1	9	A2	12	R
1982.587300	-0.076	1982.587376	2219.316013	9	A1	1	9	A2	3	Q
2019.243800	-0.198	2019.243998	2255.972635	9	A1	1	9	A2	5	Q
2067.730500	0.278	2067.730222	2304.458859	9	A1	1	9	A2	7	Q
2113.665300	-0.274	2113.665574	2350.394210	9	A1	1	9	A2	11	Q
2190.151900	0.344	2190.151556	2426.880193	9	A1	1	9	A2	12	Q
2196.290200	0.266	2196.289934	2433.018571	9	A1	1	9	A2	13	Q



2257.879600	1.319	2257.878281	2494.606918	9	A1	1	9	A2	15	Q
1930.039900	-0.217	1930.040117	2219.316013	10	A1	1	9	A2	3	P
1966.696500	-0.239	1966.696739	2255.972635	10	A1	1	9	A2	5	P
2014.159000	-0.966	2014.159966	2303.435862	10	A1	1	9	A2	6	P
2015.183000	0.037	2015.182963	2304.458859	10	A1	1	9	A2	7	P
2029.773400	0.047	2029.773353	2319.049250	10	A1	1	9	A2	8	P
2137.603000	-1.297	2137.604297	2426.880193	10	A1	1	9	A2	12	P
2143.743000	0.325	2143.742675	2433.018571	10	A1	1	9	A2	13	P
2214.220200	0.929	2214.219271	2503.495168	10	A1	1	9	A2	16	P
2027.813300	0.576	2027.812724	2217.234339	8	E	2	9	E	5	R
2057.147600	-1.246	2057.148846	2246.570461	8	E	2	9	E	8	R
2065.490500	0.188	2065.490312	2254.890877	8	E	1	9	E	9	R
2132.493200	-0.466	2132.493666	2321.894232	8	E	1	9	E	14	R
2132.472000	-0.617	2132.472617	2321.894232	8	E	2	9	E	14	R
2139.810600	0.369	2139.810231	2329.231845	8	E	2	9	E	15	R
2151.592300	0.612	2151.591688	2341.013303	8	E	2	9	E	17	R
2238.942800	-0.932	2238.943732	2428.344297	8	E	1	9	E	22	R
2238.921600	-1.082	2238.922682	2428.344297	8	E	2	9	E	22	R
2242.629800	-0.553	2242.630353	2432.030919	8	E	1	9	E	23	R
2247.990700	1.035	2247.989665	2437.411280	8	E	2	9	E	24	R
2297.606300	-0.644	2297.606944	2487.028559	8	E	2	9	E	25	R
1968.787100	-0.066	1968.787166	2205.507853	9	E	1	9	E	4	Q
1980.514500	0.848	1980.513652	2217.234339	9	E	1	9	E	5	Q
1993.452700	0.306	1993.452394	2230.173081	9	E	1	9	E	6	Q
1997.632900	3.748	1997.629152	2234.349839	9	E	1	9	E	7	Q
2009.848500	-1.274	2009.849774	2246.570461	9	E	1	9	E	8	Q
2018.170800	0.610	2018.170190	2254.890877	9	E	1	9	E	9	Q
2085.173200	-0.345	2085.173545	2321.894232	9	E	1	9	E	14	Q
2092.511400	0.242	2092.511158	2329.231845	9	E	1	9	E	15	Q
2104.293100	0.484	2104.292616	2341.013303	9	E	1	9	E	17	Q
2195.310400	0.169	2195.310231	2432.030919	9	E	1	9	E	23	Q
2257.814600	0.587	2257.814013	2494.534700	9	E	1	9	E	27	Q
1898.065100	0.073	1898.065027	2187.353142	10	E	2	9	E	1	P
1928.001600	0.712	1928.000888	2217.234339	10	E	1	9	E	5	P
1945.061900	0.177	1945.061723	2234.349839	10	E	2	9	E	7	P
1957.282300	-0.046	1957.282346	2246.570461	10	E	2	9	E	8	P
1965.603200	0.438	1965.602762	2254.890877	10	E	2	9	E	9	P
2014.052900	0.245	2014.052655	2303.340770	10	E	2	9	E	10	P
2016.765500	-0.485	2016.765985	2305.999436	10	E	1	9	E	12	P
2030.054500	-0.062	2030.054562	2319.342678	10	E	2	9	E	13	P
2032.660200	-0.581	2032.660781	2321.894232	10	E	1	9	E	14	P
2039.944300	0.570	2039.943730	2329.231845	10	E	2	9	E	15	P
2139.055700	-0.482	2139.056182	2428.344297	10	E	2	9	E	22	P
2214.162300	-0.757	2214.163057	2503.451173	10	E	2	9	E	28	P
2027.450000	0.626	2027.449374	2216.862265	8	F2	1	9	F1	8	R
2027.948600	0.583	2027.948017	2217.370858	8	F2	2	9	F1	9	R
2056.321600	-0.979	2056.322579	2245.745420	8	F2	2	9	F1	13	R
2062.735400	-4.087	2062.739487	2252.152377	8	F2	1	9	F1	14	R
2143.415700	-0.709	2143.416409	2332.839250	8	F2	2	9	F1	25	R
2247.817100	-0.492	2247.817592	2437.240434	8	F2	2	9	F1	39	R
2297.645300	2.941	2297.642359	2487.055250	8	F2	1	9	F1	42	R
1968.629000	0.424	1968.628576	2205.329900	9	F2	1	9	F1	7	Q
1980.670900	1.366	1980.669534	2217.370858	9	F2	1	9	F1	9	Q
1980.634300	0.475	1980.633825	2217.370858	9	F2	2	9	F1	9	Q
1982.032900	-0.505	1982.033405	2218.734730	9	F2	1	9	F1	10	Q
1981.997300	-0.396	1981.997696	2218.734730	9	F2	2	9	F1	10	Q
1995.479000	0.003	1995.478997	2232.216030	9	F2	2	9	F1	11	Q
2009.008300	-0.087	2009.008387	2245.745420	9	F2	2	9	F1	13	Q
2015.415000	-0.344	2015.415344	2252.152377	9	F2	2	9	F1	14	Q
2067.612300	0.445	2067.611855	2304.313179	9	F2	1	9	F1	18	Q
2067.576200	0.054	2067.576146	2304.313179	9	F2	2	9	F1	18	Q
2075.321300	0.428	2075.320872	2312.022196	9	F2	1	9	F1	20	Q
2096.101800	-0.417	2096.102217	2332.839250	9	F2	2	9	F1	25	Q
2101.195300	-0.340	2101.195640	2337.896964	9	F2	1	9	F1	26	Q
2104.656300	0.545	2104.655755	2341.357079	9	F2	1	9	F1	27	Q
2189.624800	0.993	2189.623807	2426.325131	9	F2	1	9	F1	35	Q
2193.648200	0.373	2193.647827	2430.349151	9	F2	1	9	F1	37	Q
1916.096200	0.099	1916.096101	2205.329900	10	F2	1	9	F1	7	P
1928.111100	3.062	1928.108038	2217.370858	10	F2	2	9	F1	9	P
1929.500400	-0.530	1929.500930	2218.734730	10	F2	1	9	F1	10	P
1929.471400	-0.510	1929.471910	2218.734730	10	F2	2	9	F1	10	P
1942.924700	0.123	1942.924577	2232.216030	10	F2	3	9	F1	11	P
1945.530800	-0.501	1945.531301	2234.765101	10	F2	1	9	F1	12	P
1945.502100	-0.181	1945.502281	2234.765101	10	F2	2	9	F1	12	P
1945.473700	0.052	1945.473648	2234.765101	10	F2	3	9	F1	12	P
1962.860800	-0.124	1962.860924	2252.152377	10	F2	3	9	F1	14	P
1971.538900	-0.245	1971.539145	2260.801965	10	F2	2	9	F1	15	P
2013.805300	0.164	2013.805136	2303.096590	10	F2	3	9	F1	16	P
2015.050000	-0.359	2015.050359	2304.313179	10	F2	2	9	F1	18	P

2022.759700	0.323	2022.759377	2312.022196	10	F2	2	9	F1	20	P
2031.336900	-0.173	2031.337073	2320.628527	10	F2	3	9	F1	22	P
2037.303100	0.247	2037.302853	2326.594306	10	F2	3	9	F1	24	P
2053.603000	-3.521	2053.606521	2342.840321	10	F2	1	9	F1	29	P
2135.732400	1.877	2135.730523	2424.964323	10	F2	1	9	F1	34	P
2145.288000	0.102	2145.287898	2434.550718	10	F2	2	9	F1	38	P
2214.148700	-0.038	2214.148738	2503.440192	10	F2	3	9	F1	45	P
2214.274000	-0.403	2214.274403	2503.537222	10	F2	2	9	F1	46	P
2214.388000	-4.652	2214.392652	2503.626452	10	F2	1	9	F1	47	P
2029.656000	-0.438	2029.656438	2219.056527	8	F1	1	9	F2	8	R
2058.562800	0.130	2058.562670	2247.980231	8	F1	2	9	F2	12	R
2065.928400	-0.314	2065.928714	2255.328802	8	F1	1	9	F2	13	R
2115.563000	0.180	2115.562820	2304.962908	8	F1	1	9	F2	18	R
2130.681900	-0.024	2130.681924	2320.082012	8	F1	1	9	F2	21	R
2139.699300	0.447	2139.698853	2329.116414	8	F1	2	9	F2	23	R
2142.457200	1.496	2142.455704	2331.873266	8	F1	2	9	F2	24	R
2160.863500	-0.040	2160.863540	2350.263628	8	F1	1	9	F2	30	R
2238.863000	0.174	2238.862826	2428.262914	8	F1	1	9	F2	33	R
2242.736500	-1.404	2242.737904	2432.137993	8	F1	1	9	F2	35	R
2242.715500	-4.931	2242.720431	2432.137993	8	F1	2	9	F2	35	R
2244.517900	0.450	2244.517450	2433.935012	8	F1	2	9	F2	36	R
2297.625400	2.292	2297.623108	2487.040670	8	F1	2	9	F2	38	R
1952.168800	0.138	1952.168662	2188.869142	9	F1	1	9	F2	2	Q
1967.234600	0.061	1967.234539	2203.935019	9	F1	1	9	F2	5	Q
1967.212700	-0.069	1967.212769	2203.935019	9	F1	2	9	F2	5	Q
1968.909500	-0.259	1968.909759	2205.632009	9	F1	2	9	F2	6	Q
1980.180500	0.499	1980.180001	2216.914551	9	F1	3	9	F2	7	Q
1982.355800	-0.246	1982.356046	2219.056527	9	F1	1	9	F2	8	Q
1982.321800	-0.177	1982.321977	2219.056527	9	F1	3	9	F2	8	Q
1996.300400	-0.368	1996.300768	2233.035317	9	F1	3	9	F2	10	Q
1998.495200	0.143	1998.495057	2235.229606	9	F1	3	9	F2	11	Q
2011.258800	0.819	2011.257981	2247.980231	9	F1	2	9	F2	12	Q
2018.606600	0.048	2018.606552	2255.328802	9	F1	2	9	F2	13	Q
2067.708100	-0.260	2067.708360	2304.430610	9	F1	2	9	F2	17	Q
2075.582400	3.950	2075.578450	2312.278930	9	F1	1	9	F2	19	Q
2083.381500	-0.032	2083.381532	2320.082012	9	F1	1	9	F2	21	Q
2083.359600	-0.162	2083.359762	2320.082012	9	F1	2	9	F2	21	Q
2088.427900	-0.152	2088.428052	2325.150302	9	F1	2	9	F2	22	Q
2092.416200	0.266	2092.415934	2329.116414	9	F1	1	9	F2	23	Q
2095.139600	0.884	2095.138716	2331.873266	9	F1	3	9	F2	24	Q
2113.541300	-0.078	2113.541378	2350.263628	9	F1	2	9	F2	30	Q
2189.911700	0.557	2189.911143	2426.611623	9	F1	1	9	F2	32	Q
2189.878400	1.326	2189.877074	2426.611623	9	F1	3	9	F2	32	Q
2191.561900	-0.534	2191.562434	2428.262914	9	F1	1	9	F2	33	Q
2191.538500	-2.164	2191.540664	2428.262914	9	F1	2	9	F2	33	Q
2193.746300	-0.201	2193.746501	2430.446982	9	F1	1	9	F2	34	Q
2195.416100	0.357	2195.415743	2432.137993	9	F1	2	9	F2	35	Q
2197.200600	0.138	2197.200462	2433.935012	9	F1	3	9	F2	36	Q
2257.826900	0.153	2257.826747	2494.548997	9	F1	2	9	F2	41	Q
2257.928100	0.858	2257.927242	2494.661791	9	F1	3	9	F2	42	Q
1899.603000	0.223	1899.602777	2188.869142	10	F1	1	9	F2	2	P
1914.668600	-0.054	1914.668654	2203.935019	10	F1	1	9	F2	5	P
1914.650200	0.288	1914.649912	2203.935019	10	F1	2	9	F2	5	P
1929.789800	-0.361	1929.790161	2219.056527	10	F1	1	9	F2	8	P
1929.771500	0.081	1929.771419	2219.056527	10	F1	2	9	F2	8	P
1945.963200	-0.041	1945.963241	2235.229606	10	F1	1	9	F2	11	P
1945.944700	0.201	1945.944499	2235.229606	10	F1	2	9	F2	11	P
1966.044000	0.305	1966.043695	2255.328802	10	F1	2	9	F2	13	P
1971.447600	-0.009	1971.447609	2260.713974	10	F1	1	9	F2	14	P
2014.102100	-0.479	2014.102579	2303.368944	10	F1	1	9	F2	15	P
2014.083600	-0.237	2014.083837	2303.368944	10	F1	2	9	F2	15	P
2014.457600	0.662	2014.456938	2303.742045	10	F1	2	9	F2	16	P
2015.164500	0.255	2015.164245	2304.430610	10	F1	1	9	F2	17	P
2015.146200	0.697	2015.145503	2304.430610	10	F1	2	9	F2	17	P
2015.696900	0.357	2015.696543	2304.962908	10	F1	1	9	F2	18	P
2023.013200	0.635	2023.012565	2312.278930	10	F1	1	9	F2	19	P
2030.815500	-0.147	2030.815647	2320.082012	10	F1	1	9	F2	21	P
2030.796900	-0.005	2030.796905	2320.082012	10	F1	2	9	F2	21	P
2035.883900	-0.037	2035.883937	2325.150302	10	F1	1	9	F2	22	P
2039.831400	0.093	2039.831307	2329.116414	10	F1	2	9	F2	23	P
2042.588200	0.042	2042.588158	2331.873266	10	F1	2	9	F2	24	P
2137.347000	1.742	2137.345258	2426.611623	10	F1	1	9	F2	32	P
2141.182100	1.484	2141.180616	2430.446982	10	F1	1	9	F2	34	P
2144.669100	0.454	2144.668646	2433.935012	10	F1	1	9	F2	36	P
2214.175400	-0.835	2214.176235	2503.461342	10	F1	2	9	F2	43	P
2214.258100	-0.518	2214.258618	2503.524983	10	F1	1	9	F2	44	P
2061.308000	-0.690	2061.308690	2298.047664	9	A2	1	10	A1	5	R
1979.931400	1.171	1979.930229	2269.164786	10	A2	1	10	A1	4	Q
2027.283000	0.400	2027.282600	2316.517158	10	A2	1	10	A1	6	Q

2073.738000	-0.508	2073.738508	2362.973065	10	A2	1	10	A1	8	Q
2190.540700	0.500	2190.540200	2479.774757	10	A2	1	10	A1	13	Q
2195.683200	-0.379	2195.683579	2484.918137	10	A2	1	10	A1	14	Q
2257.304000	-0.209	2257.304209	2546.538767	10	A2	1	10	A1	17	Q
1922.135700	0.874	1922.134826	2269.164786	11	A2	1	10	A1	4	P
1969.486700	-0.498	1969.487198	2316.517158	11	A2	1	10	A1	6	P
2008.406800	-0.576	2008.407376	2355.437336	11	A2	1	10	A1	7	P
2015.942400	-0.705	2015.943105	2362.973065	11	A2	1	10	A1	8	P
2132.745000	0.203	2132.744797	2479.774757	11	A2	1	10	A1	13	P
2137.886900	-1.276	2137.888176	2484.918137	11	A2	1	10	A1	14	P
2209.693900	-1.641	2209.695541	2556.725501	11	A2	1	10	A1	18	P
2064.717700	0.765	2064.716935	2301.445572	9	A1	1	10	A2	5	R
2251.272000	1.019	2251.270981	2487.999618	9	A1	1	10	A2	13	R
1966.473100	0.028	1966.473072	2255.748969	10	A1	1	10	A2	2	Q
1995.975900	-1.212	1995.977112	2285.253008	10	A1	1	10	A2	4	Q
2012.170300	0.625	2012.169675	2301.445572	10	A1	1	10	A2	5	Q
2090.363800	-0.272	2090.364072	2379.639969	10	A1	1	10	A2	8	Q
2198.724400	0.679	2198.723721	2487.999618	10	A1	1	10	A2	13	Q
2257.579300	-1.074	2257.580374	2546.856270	10	A1	1	10	A2	16	Q
2069.881400	-0.054	2069.881454	2306.602141	9	E	1	10	E	10	R
2144.183400	0.480	2144.182920	2380.903607	9	E	1	10	E	18	R
2301.782700	-0.748	2301.783448	2538.504135	9	E	1	10	E	30	R
1981.452800	-0.452	1981.453252	2270.686703	10	E	1	10	E	7	Q
1981.398200	-0.387	1981.398587	2270.686703	10	E	2	10	E	7	Q
1995.053500	-0.053	1995.053553	2284.341669	10	E	2	10	E	8	Q
2017.314500	0.474	2017.314026	2306.602141	10	E	2	10	E	10	Q
2027.203600	0.489	2027.203111	2316.436562	10	E	1	10	E	11	Q
2073.994900	-0.526	2073.995426	2363.228876	10	E	1	10	E	15	Q
2096.990500	-0.313	2096.990813	2386.278929	10	E	2	10	E	19	Q
2195.774400	2.721	2195.771679	2485.005130	10	E	1	10	E	27	Q
1887.612500	0.052	1887.612448	2234.686633	11	E	2	10	E	1	P
1923.649100	-1.620	1923.650720	2270.686703	11	E	1	10	E	7	P
1937.267300	-0.183	1937.267483	2284.341669	11	E	2	10	E	8	P
1940.783600	3.092	1940.780508	2287.816490	11	E	1	10	E	9	P
1940.748700	6.396	1940.742304	2287.816490	11	E	2	10	E	9	P
1959.528300	0.345	1959.527955	2306.602141	11	E	2	10	E	10	P
1969.401100	0.521	1969.400579	2316.436562	11	E	1	10	E	11	P
2006.853100	1.807	2006.851293	2353.925479	11	E	2	10	E	12	P
2008.741500	0.891	2008.740609	2355.776592	11	E	1	10	E	14	P
2028.327900	1.760	2028.326140	2375.400326	11	E	2	10	E	17	P
2133.417100	0.220	2133.416880	2480.452863	11	E	1	10	E	25	P
2135.452400	-0.699	2135.453099	2482.527285	11	E	2	10	E	26	P
2137.968200	-0.947	2137.969147	2485.005130	11	E	1	10	E	27	P
2209.675700	3.054	2209.672646	2556.708628	11	E	1	10	E	34	P
2062.243400	-0.311	2062.243711	2298.980745	9	F2	2	10	F1	13	R
2073.431400	2.269	2073.429131	2310.130456	9	F2	1	10	F1	14	R
2119.166800	0.496	2119.166304	2355.867628	9	F2	1	10	F1	19	R
2135.076800	-0.757	2135.077557	2371.814590	9	F2	2	10	F1	22	R
2150.132700	-1.401	2150.134101	2386.871134	9	F2	2	10	F1	26	R
2241.759500	-1.271	2241.760771	2478.497805	9	F2	2	10	F1	34	R
2250.311000	-5.052	2250.316052	2487.017376	9	F2	1	10	F1	38	R
1964.871900	0.312	1964.872212	2254.106012	10	F2	1	10	F1	6	Q
1979.142800	0.243	1979.142557	2268.405377	10	F2	2	10	F1	8	Q
1981.060700	-0.112	1981.060812	2270.294611	10	F2	1	10	F1	9	Q
1981.034200	2.408	1981.031792	2270.294611	10	F2	2	10	F1	9	Q
1981.002600	-0.558	1981.003158	2270.294611	10	F2	3	10	F1	9	Q
1993.061200	0.273	1993.060927	2282.323747	10	F2	2	10	F1	10	Q
1997.915500	-0.324	1997.915824	2287.178644	10	F2	2	10	F1	11	Q
1997.887000	-0.191	1997.887191	2287.178644	10	F2	3	10	F1	11	Q
1998.585700	-2.560	1998.588260	2287.822060	10	F2	1	10	F1	12	Q
1998.529600	-1.007	1998.530607	2287.822060	10	F2	3	10	F1	12	Q
2009.691800	2.509	2009.689291	2298.980745	10	F2	3	10	F1	13	Q
2027.230800	0.446	2027.230354	2316.464154	10	F2	1	10	F1	15	Q
2066.167900	-0.116	2066.168016	2355.430836	10	F2	2	10	F1	18	Q
2066.605200	0.392	2066.604808	2355.867628	10	F2	2	10	F1	19	Q
2073.911800	-0.480	2073.912280	2363.146080	10	F2	1	10	F1	21	Q
2082.551000	-0.770	2082.551770	2371.814590	10	F2	2	10	F1	22	Q
2084.508900	-0.625	2084.509525	2373.800978	10	F2	3	10	F1	23	Q
2097.578900	-0.780	2097.579680	2386.871134	10	F2	3	10	F1	26	Q
2117.243700	0.362	2117.243338	2406.506158	10	F2	2	10	F1	33	Q
2193.190600	-0.771	2193.191371	2482.454190	10	F2	2	10	F1	36	Q
2197.754600	0.044	2197.754556	2487.017376	10	F2	2	10	F1	38	Q
2200.946900	-4.179	2200.951079	2490.242533	10	F2	3	10	F1	39	Q
2257.493500	0.030	2257.493470	2546.756290	10	F2	2	10	F1	44	Q
2257.682300	-0.469	2257.682769	2546.974222	10	F2	3	10	F1	45	Q
1888.099200	-0.150	1888.099350	2235.132974	11	F2	2	10	F1	1	P
1921.414000	0.299	1921.413701	2268.405377	11	F2	1	10	F1	8	P
1921.371900	0.148	1921.371752	2268.405377	11	F2	2	10	F1	8	P
1923.260200	-0.787	1923.260987	2270.294611	11	F2	2	10	F1	9	P

1940.109700	-0.227	1940.109927	2287.178644	11	F2	3	10	F1	11	P
1940.752800	-0.543	1940.753343	2287.822060	11	F2	3	10	F1	12	P
1963.063600	1.862	1963.061738	2310.130456	11	F2	3	10	F1	14	P
1969.430800	0.271	1969.430529	2316.464154	11	F2	2	10	F1	15	P
2007.245200	1.079	2007.244121	2354.312839	11	F2	3	10	F1	17	P
2010.762200	0.702	2010.761498	2357.753174	11	F2	1	10	F1	20	P
2016.111300	-1.155	2016.112455	2363.146080	11	F2	2	10	F1	21	P
2024.822000	-0.914	2024.822914	2371.814590	11	F2	1	10	F1	22	P
2024.780100	-0.865	2024.780965	2371.814590	11	F2	2	10	F1	22	P
2026.765900	-1.454	2026.767354	2373.800978	11	F2	2	10	F1	23	P
2131.503200	-2.929	2131.506129	2478.497805	11	F2	1	10	F1	34	P
2133.179700	0.433	2133.179267	2480.212892	11	F2	2	10	F1	35	P
2135.385000	-0.473	2135.385473	2482.454190	11	F2	3	10	F1	36	P
2209.551500	-2.485	2209.553985	2556.622702	11	F2	3	10	F1	46	P
2209.679000	-2.673	2209.681673	2556.715297	11	F2	2	10	F1	47	P
2209.816100	-6.329	2209.822429	2556.814105	11	F2	1	10	F1	48	P
2063.287100	0.007	2063.287093	2300.021642	9	F1	3	10	F2	14	R
2069.264900	0.151	2069.264749	2305.986999	9	F1	2	10	F2	15	R
2074.084800	1.198	2074.083602	2310.784082	9	F1	1	10	F2	16	R
2134.405900	-0.254	2134.406154	2371.106634	9	F1	1	10	F2	23	R
2134.372100	0.015	2134.372085	2371.106634	9	F1	3	10	F2	23	R
2140.599300	0.932	2140.598368	2377.320618	9	F1	2	10	F2	25	R
2301.851500	1.461	2301.850039	2538.550519	9	F1	1	10	F2	46	R
1978.888900	1.742	1978.887158	2268.153523	10	F1	1	10	F2	9	Q
1978.869100	0.684	1978.868416	2268.153523	10	F1	2	10	F2	9	Q
1981.839200	1.369	1981.837831	2271.122939	10	F1	2	10	F2	10	Q
1993.159100	0.237	1993.158863	2282.425228	10	F1	1	10	F2	11	Q
1993.140900	0.780	1993.140120	2282.425228	10	F1	2	10	F2	11	Q
1995.172100	0.050	1995.172050	2284.457157	10	F1	2	10	F2	12	Q
1997.200400	-0.574	1997.200974	2286.467339	10	F1	1	10	F2	13	Q
1997.182000	-0.232	1997.182232	2286.467339	10	F1	2	10	F2	13	Q
2010.736700	0.165	2010.736535	2300.021642	10	F1	2	10	F2	14	Q
2016.702600	0.708	2016.701892	2305.986999	10	F1	2	10	F2	15	Q
2021.518000	0.283	2021.517717	2310.784082	10	F1	1	10	F2	16	Q
2021.499800	0.826	2021.498974	2310.784082	10	F1	2	10	F2	16	Q
2065.391400	0.384	2065.391016	2354.657381	10	F1	1	10	F2	19	Q
2065.373200	0.926	2065.372274	2354.657381	10	F1	2	10	F2	19	Q
2081.839900	-0.369	2081.840269	2371.106634	10	F1	1	10	F2	23	Q
2088.054500	0.247	2088.054253	2377.320618	10	F1	1	10	F2	25	Q
2191.635500	-0.746	2191.636246	2480.902611	10	F1	1	10	F2	38	Q
2191.618000	0.496	2191.617504	2480.902611	10	F1	2	10	F2	38	Q
2197.882600	0.850	2197.881750	2487.148115	10	F1	1	10	F2	40	Q
2257.516300	-0.572	2257.516872	2546.783237	10	F1	1	10	F2	47	Q
1921.163100	0.658	1921.162442	2268.153523	11	F1	1	10	F2	9	P
1924.069300	-0.185	1924.069485	2271.122939	11	F1	2	10	F2	10	P
1937.380700	0.131	1937.380569	2284.457157	11	F1	3	10	F2	12	P
1939.390500	-0.250	1939.390750	2286.467339	11	F1	3	10	F2	13	P
1958.910900	0.490	1958.910410	2305.986999	11	F1	3	10	F2	15	P
1963.730900	0.272	1963.730628	2310.784082	11	F1	2	10	F2	16	P
2006.738900	0.957	2006.737943	2353.814532	11	F1	3	10	F2	17	P
2007.604500	0.573	2007.603927	2354.657381	11	F1	2	10	F2	19	P
2010.582700	0.730	2010.581970	2357.573051	11	F1	1	10	F2	21	P
2024.052500	-0.680	2024.053180	2371.106634	11	F1	2	10	F2	23	P
2025.321100	-0.723	2025.321823	2372.375277	11	F1	2	10	F2	24	P
2030.267500	0.335	2030.267165	2377.320618	11	F1	2	10	F2	25	P
2133.849500	0.343	2133.849157	2480.902611	11	F1	2	10	F2	38	P
2135.519900	-0.824	2135.520724	2482.597313	11	F1	3	10	F2	39	P
2140.095200	0.538	2140.094662	2487.148115	11	F1	2	10	F2	40	P
2209.528000	1.616	2209.526384	2556.602973	11	F1	3	10	F2	49	P
2209.613700	0.408	2209.613292	2556.666746	11	F1	2	10	F2	50	P
2050.283400	1.695	2050.281705	2339.516263	10	A2	1	11	A1	3	R
2258.059400	0.473	2258.058927	2547.293485	10	A2	1	11	A1	13	R
1962.307900	-0.899	1962.308799	2309.338759	11	A2	1	11	A1	2	Q
1992.489000	2.697	1992.486303	2339.516263	11	A2	1	11	A1	3	Q
2023.321700	1.979	2023.319721	2370.349681	11	A2	1	11	A1	5	Q
2082.588800	-2.198	2082.590998	2429.620958	11	A2	1	11	A1	8	Q
2097.180200	2.775	2097.177425	2444.207385	11	A2	1	11	A1	9	Q
2200.261500	-2.025	2200.263525	2547.293485	11	A2	1	11	A1	13	Q
2257.128400	-0.063	2257.128463	2604.158423	11	A2	1	11	A1	15	Q
1877.932300	-0.135	1877.932435	2288.008005	12	A2	1	11	A1	1	P
1960.276800	2.689	1960.274111	2370.349681	12	A2	1	11	A1	5	P
2000.355100	2.651	2000.352449	2410.428019	12	A2	1	11	A1	6	P
2034.135500	3.685	2034.131815	2444.207385	12	A2	1	11	A1	9	P
2204.914100	-4.792	2204.918892	2614.994462	12	A2	1	11	A1	16	P
2074.268600	1.225	2074.267375	2363.543272	10	A1	1	11	A2	6	R
2150.282200	3.664	2150.278536	2439.554433	10	A1	1	11	A2	10	R
2247.727800	2.828	2247.724972	2537.000869	10	A1	1	11	A2	14	R
2266.574500	2.388	2266.572112	2555.848008	10	A1	1	11	A2	16	R
1914.023300	0.922	1914.022378	2323.987446	12	A1	1	11	A2	4	P

1932.302600	1.846	1932.300754	2342.389865	12	A1	2	11	A2	5	P
1953.455800	1.640	1953.454160	2363.543272	12	A1	2	11	A2	6	P
1999.606200	2.527	1999.603673	2409.692785	12	A1	2	11	A2	7	P
2004.439000	3.584	2004.435416	2414.400485	12	A1	1	11	A2	8	P
2029.469100	3.779	2029.465321	2439.554433	12	A1	2	11	A2	10	P
2127.036000	0.200	2127.035800	2537.000869	12	A1	1	11	A2	14	P
2050.484000	1.188	2050.482812	2339.716263	10	E	1	11	E	8	R
2068.013400	0.498	2068.012902	2357.301017	10	E	2	11	E	10	R
2138.909600	-0.965	2138.910565	2428.144016	10	E	1	11	E	16	R
2154.325800	-2.095	2154.327895	2443.616011	10	E	2	11	E	19	R
2261.280600	-2.408	2261.283008	2550.571123	10	E	2	11	E	29	R
2266.162100	1.615	2266.160485	2555.448600	10	E	2	11	E	30	R
2305.978200	-0.546	2305.978746	2595.212196	10	E	1	11	E	32	R
1977.221900	-0.110	1977.222010	2324.296196	11	E	2	11	E	6	Q
1980.867700	0.301	1980.867399	2327.903381	11	E	1	11	E	7	Q
1992.681000	0.720	1992.680280	2339.716263	11	E	1	11	E	8	Q
1997.636300	-2.508	1997.638808	2344.712994	11	E	2	11	E	9	Q
2010.227300	0.469	2010.226831	2357.301017	11	E	2	11	E	10	Q
2024.014400	-0.979	2024.015379	2371.051362	11	E	1	11	E	11	Q
2081.106400	-1.633	2081.108033	2428.144016	11	E	1	11	E	16	Q
2096.540200	-1.625	2096.541825	2443.616011	11	E	2	11	E	19	Q
2121.158700	2.978	2121.155722	2468.191704	11	E	1	11	E	25	Q
2193.068200	-1.845	2193.070045	2540.144231	11	E	2	11	E	27	Q
2257.161500	0.237	2257.161263	2604.197245	11	E	1	11	E	33	Q
1914.330000	-0.404	1914.330404	2324.296196	12	E	1	11	E	6	P
1961.000600	0.626	1960.999974	2371.051362	12	E	2	11	E	11	P
2000.866400	2.141	2000.864259	2410.915647	12	E	2	11	E	13	P
2004.689400	3.777	2004.685623	2414.651414	12	E	1	11	E	15	P
2026.243900	-0.778	2026.244678	2436.296066	12	E	2	11	E	18	P
2127.197400	0.973	2127.196427	2537.162219	12	E	1	11	E	26	P
2130.090700	-2.143	2130.092843	2540.144231	12	E	2	11	E	27	P
2140.519200	-0.536	2140.519736	2550.571123	12	E	2	11	E	29	P
2204.997800	-0.719	2204.998519	2615.049907	12	E	2	11	E	35	P
2050.408800	1.248	2050.407552	2339.641352	10	F2	1	11	F1	12	R
2066.896500	0.188	2066.896312	2356.187766	10	F2	3	11	F1	15	R
2076.966800	1.014	2076.965786	2366.228606	10	F2	2	11	F1	16	R
2081.622300	1.156	2081.621144	2370.854944	10	F2	1	11	F1	17	R
2121.597400	0.359	2121.597041	2410.830840	10	F2	1	11	F1	21	R
2122.932600	4.432	2122.928168	2412.219621	10	F2	3	11	F1	23	R
2139.453400	-0.771	2139.454171	2428.687971	10	F2	1	11	F1	26	R
2144.415100	1.458	2144.413642	2433.676462	10	F2	2	11	F1	28	R
2144.386200	1.192	2144.385008	2433.676462	10	F2	3	11	F1	28	R
2154.727300	1.464	2154.725836	2444.017290	10	F2	3	11	F1	30	R
2249.663900	1.327	2249.662573	2538.954026	10	F2	3	11	F1	40	R
2260.573600	1.454	2260.572146	2549.834966	10	F2	2	11	F1	45	R
2265.551200	0.536	2265.550664	2554.842118	10	F2	3	11	F1	46	R
1978.588500	1.011	1978.587489	2325.621114	11	F2	2	11	F1	10	Q
1981.187100	0.543	1981.186557	2328.220181	11	F2	2	11	F1	11	Q
1992.608600	0.873	1992.607727	2339.641352	11	F2	2	11	F1	12	Q
1994.576500	-0.059	1994.576559	2341.645276	11	F2	3	11	F1	13	Q
1998.141500	0.723	1998.140777	2345.174402	11	F2	2	11	F1	14	Q
1998.106700	1.016	1998.105684	2345.174402	11	F2	3	11	F1	14	Q
2019.161100	1.211	2019.159889	2366.228606	11	F2	3	11	F1	16	Q
2023.822500	1.180	2023.821320	2370.854944	11	F2	2	11	F1	17	Q
2030.386000	1.186	2030.384814	2377.376490	11	F2	1	11	F1	18	Q
2063.035300	0.288	2063.035012	2410.103729	11	F2	3	11	F1	20	Q
2065.189300	3.304	2065.185996	2412.219621	11	F2	2	11	F1	23	Q
2072.194100	-2.210	2072.196310	2419.187986	11	F2	1	11	F1	24	Q
2081.653500	-0.846	2081.654346	2428.687971	11	F2	2	11	F1	26	Q
2096.950500	1.927	2096.948573	2444.017290	11	F2	3	11	F1	30	Q
2191.966000	3.650	2191.962350	2538.954026	11	F2	1	11	F1	40	Q
2193.282300	-1.619	2193.283919	2540.317543	11	F2	2	11	F1	41	Q
2193.246400	-2.426	2193.248826	2540.317543	11	F2	3	11	F1	41	Q
2194.942300	-1.089	2194.943389	2541.977013	11	F2	2	11	F1	42	Q
2194.907700	-0.596	2194.908296	2541.977013	11	F2	3	11	F1	42	Q
2197.902000	0.839	2197.901161	2544.892837	11	F2	1	11	F1	43	Q
2202.766200	-0.049	2202.766249	2549.834966	11	F2	3	11	F1	45	Q
2256.923100	4.760	2256.918340	2603.910016	11	F2	1	11	F1	51	Q
2257.148700	0.274	2257.148426	2604.182051	11	F2	2	11	F1	52	Q
2257.338000	-0.979	2257.338979	2604.407696	11	F2	3	11	F1	53	Q
2268.117200	-1.242	2268.118442	2615.110118	11	F2	1	11	F1	56	Q
1877.398800	-0.323	1877.399123	2287.454251	12	F2	2	11	F1	1	P
1915.601900	0.634	1915.601266	2325.621114	12	F2	1	11	F1	10	P
1935.119800	0.526	1935.119274	2345.174402	12	F2	2	11	F1	14	P
1935.093200	1.017	1935.092183	2345.174402	12	F2	3	11	F1	14	P
1956.147700	1.313	1956.146387	2366.228606	12	F2	3	11	F1	16	P
1960.799700	-0.117	1960.799817	2370.854944	12	F2	2	11	F1	17	P
1967.357500	0.858	1967.356642	2377.376490	12	F2	1	11	F1	18	P
2000.022000	0.490	2000.021510	2410.103729	12	F2	3	11	F1	20	P

2000.777900	2.187	2000.775713	2410.830840	12	F2	2	11	F1	21	P
2002.202000	2.227	2002.199773	2412.219621	12	F2	1	11	F1	23	P
2018.631600	-1.243	2018.632843	2428.687971	12	F2	2	11	F1	26	P
2021.609200	-0.491	2021.609691	2431.691910	12	F2	3	11	F1	27	P
2023.596100	1.857	2023.594243	2433.676462	12	F2	3	11	F1	28	P
2033.935200	0.129	2033.935071	2444.017290	12	F2	3	11	F1	30	P
2128.932800	-1.379	2128.934179	2538.954026	12	F2	1	11	F1	40	P
2130.258800	-3.615	2130.262415	2540.317543	12	F2	2	11	F1	41	P
2134.873500	0.511	2134.872989	2544.892837	12	F2	1	11	F1	43	P
2139.776800	-3.038	2139.779838	2549.834966	12	F2	2	11	F1	45	P
2204.986800	-0.127	2204.986927	2615.042054	12	F2	2	11	F1	55	P
2205.086700	-3.570	2205.090270	2615.110118	12	F2	1	11	F1	56	P
2052.382400	0.182	2052.382218	2341.648584	10	F1	1	11	F2	12	R
2069.028300	0.926	2069.027374	2358.312481	10	F1	2	11	F2	15	R
2147.686600	0.520	2147.686080	2436.971187	10	F1	2	11	F2	27	R
2152.020600	2.080	2152.018520	2441.303628	10	F1	2	11	F2	28	R
2259.469000	3.120	2259.465880	2548.732246	10	F1	1	11	F2	43	R
2259.447600	0.462	2259.447138	2548.732246	10	F1	2	11	F2	43	R
2266.331200	1.782	2266.329418	2555.614525	10	F1	2	11	F2	45	R
1977.119100	0.349	1977.118751	2324.172205	11	F1	2	11	F2	10	Q
1977.096000	0.384	1977.095616	2324.172205	11	F1	3	11	F2	10	Q
1980.216400	-0.848	1980.217248	2327.208329	11	F1	1	11	F2	11	Q
1980.131200	-0.540	1980.131740	2327.208329	11	F1	3	11	F2	11	Q
1994.595000	-0.130	1994.595130	2341.648584	11	F1	2	11	F2	12	Q
1996.800400	-0.920	1996.801320	2343.854774	11	F1	2	11	F2	13	Q
1998.663100	-0.935	1998.664035	2345.740624	11	F1	3	11	F2	14	Q
2018.093000	-1.374	2018.094374	2365.147828	11	F1	2	11	F2	16	Q
2030.354300	1.097	2030.353203	2377.344284	11	F1	1	11	F2	17	Q
2062.784500	1.577	2062.782923	2409.859512	11	F1	3	11	F2	19	Q
2072.311300	-2.647	2072.313947	2419.305028	11	F1	1	11	F2	23	Q
2087.698900	1.493	2087.697407	2434.773996	11	F1	3	11	F2	26	Q
2094.227500	0.461	2094.227039	2441.303628	11	F1	3	11	F2	28	Q
2192.465200	0.128	2192.465072	2539.456153	11	F1	1	11	F2	40	Q
2192.381000	1.436	2192.379564	2539.456153	11	F1	3	11	F2	40	Q
2197.928900	0.865	2197.928035	2544.919116	11	F1	1	11	F2	42	Q
2201.679000	0.208	2201.678792	2548.732246	11	F1	2	11	F2	43	Q
2257.254000	-2.333	2257.256333	2604.309786	11	F1	2	11	F2	50	Q
2257.379200	-2.377	2257.381577	2604.458165	11	F1	3	11	F2	51	Q
1914.206700	0.041	1914.206659	2324.172205	12	F1	1	11	F2	10	P
1917.183100	-0.860	1917.183960	2327.208329	12	F1	2	11	F2	11	P
1931.563100	0.617	1931.562483	2341.648584	12	F1	3	11	F2	12	P
1933.768600	-0.073	1933.768673	2343.854774	12	F1	3	11	F2	13	P
1935.714800	-1.455	1935.716255	2345.740624	12	F1	2	11	F2	14	P
1955.063400	1.673	1955.061727	2365.147828	12	F1	3	11	F2	16	P
1967.320900	0.985	1967.319915	2377.344284	12	F1	2	11	F2	17	P
1999.774600	1.189	1999.773411	2409.859512	12	F1	3	11	F2	19	P
2002.358300	3.150	2002.355150	2412.379519	12	F1	2	11	F2	21	P
2004.607800	3.611	2004.604189	2414.569734	12	F1	1	11	F2	22	P
2024.748400	-1.227	2024.749627	2434.773996	12	F1	2	11	F2	26	P
2031.219600	2.073	2031.217527	2441.303628	12	F1	3	11	F2	28	P
2127.139700	1.393	2127.138307	2537.103852	12	F1	1	11	F2	39	P
2129.431100	-0.684	2129.431784	2539.456153	12	F1	2	11	F2	40	P
2134.895500	0.753	2134.894747	2544.919116	12	F1	2	11	F2	42	P
2205.070400	-4.789	2205.075189	2615.099558	12	F1	2	11	F2	53	P
2021.737000	1.074	2021.735926	2431.811496	12	A2	1	12	A1	7	Q
2195.160900	-5.267	2195.166167	2605.241737	12	A2	1	12	A1	17	Q
2257.001100	-2.057	2257.003157	2667.078727	12	A2	1	12	A1	21	Q
1953.529900	1.455	1953.528445	2431.811496	13	A2	1	12	A1	7	P
1998.805600	-2.564	1998.808164	2408.897276	12	A1	2	12	A2	5	Q
2193.846700	0.836	2193.845864	2603.810933	12	A1	1	12	A2	14	Q
2193.723600	1.779	2193.721821	2603.810933	12	A1	2	12	A2	14	Q
2257.058600	-4.910	2257.063510	2667.152621	12	A1	2	12	A2	18	Q
1930.668700	-3.092	1930.671792	2408.897276	13	A1	1	12	A2	5	P
2125.586800	1.352	2125.585448	2603.810933	13	A1	1	12	A2	14	P
2131.946600	-2.211	2131.948811	2610.174295	13	A1	1	12	A2	15	P
2200.451400	-7.986	2200.459386	2678.684871	13	A1	1	12	A2	19	P
2072.693700	2.051	2072.691649	2419.765835	11	E	2	12	E	11	R
2151.973400	2.475	2151.970925	2499.006908	11	E	1	12	E	20	R
2160.322400	5.369	2160.317031	2507.391217	11	E	2	12	E	21	R
2267.640900	0.049	2267.640851	2614.676834	11	E	1	12	E	32	R
2275.076400	0.559	2275.075841	2622.150027	11	E	2	12	E	33	R
1977.001800	0.363	1977.001437	2386.967228	12	E	1	12	E	8	Q
1997.295000	1.387	1997.293613	2407.345001	12	E	2	12	E	10	Q
2019.923500	-2.111	2019.925611	2429.976998	12	E	2	12	E	12	Q
2033.476300	-3.192	2033.479492	2443.445283	12	E	1	12	E	13	Q
2070.447600	-5.616	2070.453216	2480.419007	12	E	1	12	E	17	Q
2088.958000	2.480	2088.955520	2499.006908	12	E	2	12	E	20	Q
2193.312400	-4.461	2193.316861	2603.282652	12	E	1	12	E	29	Q
2204.624700	-0.746	2204.625446	2614.676834	12	E	2	12	E	32	Q

2256.890000	-3.731	2256.893731	2666.945118	12	E	2	12	E	38	Q
1908.748200	0.209	1908.747991	2386.967228	13	E	1	12	E	8	P
1929.033900	2.291	1929.031609	2407.345001	13	E	2	12	E	10	P
1951.667300	3.694	1951.663606	2429.976998	13	E	2	12	E	12	P
1995.902300	7.833	1995.894467	2474.113704	13	E	1	12	E	16	P
2125.059200	-4.215	2125.063415	2603.282652	13	E	1	12	E	29	P
2054.947500	2.598	2054.944902	2401.936578	11	F2	1	12	F1	12	R
2056.937700	-0.351	2056.938051	2403.971675	11	F2	2	12	F1	13	R
2083.674500	2.223	2083.672277	2430.705902	11	F2	2	12	F1	17	R
2145.831500	-2.789	2145.834289	2492.903007	11	F2	3	12	F1	27	R
2259.658800	-0.904	2259.659704	2606.693329	11	F2	2	12	F1	44	R
2265.892700	2.286	2265.890414	2612.882090	11	F2	1	12	F1	45	R
2267.790000	1.461	2267.788539	2614.822164	11	F2	2	12	F1	46	R
2267.753800	0.353	2267.753447	2614.822164	11	F2	3	12	F1	46	R
1975.119200	0.506	1975.118694	2385.200913	12	F2	3	12	F1	9	Q
1980.345500	1.544	1980.343956	2390.363804	12	F2	1	12	F1	11	Q
1991.918500	1.770	1991.916730	2401.936578	12	F2	1	12	F1	12	Q
1998.206300	2.183	1998.204117	2408.286336	12	F2	3	12	F1	15	Q
2020.653000	2.226	2020.650774	2430.705902	12	F2	2	12	F1	17	Q
2020.627900	4.217	2020.623683	2430.705902	12	F2	3	12	F1	17	Q
2061.184800	1.232	2061.183568	2471.238696	12	F2	2	12	F1	20	Q
2061.158100	1.623	2061.156477	2471.238696	12	F2	3	12	F1	20	Q
2202.864000	1.758	2202.862242	2612.882090	12	F2	1	12	F1	45	Q
2204.766800	-0.236	2204.767036	2614.822164	12	F2	2	12	F1	46	Q
2206.381000	1.047	2206.379953	2616.462172	12	F2	3	12	F1	47	Q
2256.751900	0.524	2256.751376	2666.771223	12	F2	1	12	F1	53	Q
2257.029200	-3.543	2257.032743	2667.114962	12	F2	3	12	F1	55	Q
1867.056200	0.184	1867.056016	2345.327085	13	F2	2	12	F1	1	P
1907.052800	-0.128	1907.052928	2385.200913	13	F2	1	12	F1	9	P
1929.980000	2.655	1929.977345	2408.286336	13	F2	3	12	F1	15	P
1952.399900	2.989	1952.396911	2430.705902	13	F2	3	12	F1	17	P
1957.993200	2.227	1957.990973	2436.262042	13	F2	2	12	F1	18	P
1992.931800	2.096	1992.929704	2471.238696	13	F2	3	12	F1	20	P
1998.690000	10.212	1998.679788	2476.827773	13	F2	1	12	F1	24	P
2030.863100	3.362	2030.859738	2509.168729	13	F2	3	12	F1	31	P
2126.691400	-4.511	2126.695911	2604.966981	13	F2	2	12	F1	43	P
2138.191600	0.498	2138.191102	2616.462172	13	F2	2	12	F1	47	P
2200.348200	-0.609	2200.348809	2678.619879	13	F2	2	12	F1	57	P
2055.082700	1.713	2055.080987	2402.072068	11	F1	1	12	F2	13	R
2057.718500	3.368	2057.715132	2404.768586	11	F1	2	12	F2	14	R
2071.808700	1.740	2071.806960	2418.883549	11	F1	3	12	F2	16	R
2157.165800	4.021	2157.161779	2504.215232	11	F1	2	12	F2	31	R
2162.031800	1.773	2162.030027	2509.106615	11	F1	3	12	F2	32	R
2265.871100	2.884	2265.868216	2612.859297	11	F1	1	12	F2	47	R
2269.856400	-0.316	2269.856716	2616.910170	11	F1	2	12	F2	48	R
2269.833800	0.219	2269.833581	2616.910170	11	F1	3	12	F2	48	R
1977.303200	0.344	1977.302856	2387.268401	12	F1	1	12	F2	11	Q
1977.244400	0.368	1977.244032	2387.268401	12	F1	2	12	F2	11	Q
1979.858400	0.692	1979.857708	2389.882077	12	F1	2	12	F2	12	Q
1992.049600	1.901	1992.047699	2402.072068	12	F1	2	12	F2	13	Q
1998.299300	-1.596	1998.300896	2408.386997	12	F1	3	12	F2	15	Q
2026.516800	0.886	2026.515914	2436.540283	12	F1	2	12	F2	18	Q
2060.971900	2.096	2060.969804	2471.055905	12	F1	3	12	F2	21	Q
2062.690400	2.732	2062.687668	2472.712037	12	F1	2	12	F2	23	Q
2070.486500	-6.408	2070.492908	2480.458454	12	F1	1	12	F2	26	Q
2099.019800	-0.715	2099.020515	2509.106615	12	F1	3	12	F2	32	Q
2193.441100	-3.350	2193.444450	2603.409995	12	F1	1	12	F2	43	Q
2194.649200	-4.402	2194.653602	2604.677971	12	F1	2	12	F2	44	Q
2194.587700	-4.170	2194.591870	2604.677971	12	F1	3	12	F2	44	Q
2202.841200	6.272	2202.834928	2612.859297	12	F1	2	12	F2	47	Q
2256.773400	1.300	2256.772100	2666.796469	12	F1	2	12	F2	55	Q
2257.045900	-4.172	2257.050072	2667.136173	12	F1	3	12	F2	56	Q
1906.924600	0.491	1906.924109	2385.071707	13	F1	1	12	F2	10	P
1909.047600	0.237	1909.047363	2387.268401	13	F1	2	12	F2	11	P
1911.662300	1.261	1911.661039	2389.882077	13	F1	2	12	F2	12	P
1926.455100	4.202	1926.450898	2404.768586	13	F1	4	12	F2	14	P
1949.175000	4.060	1949.170940	2427.488628	13	F1	4	12	F2	17	P
1958.278200	0.930	1958.277270	2436.540283	13	F1	3	12	F2	18	P
1992.740400	2.183	1992.738217	2471.055905	13	F1	4	12	F2	21	P
1993.930600	-0.919	1993.931519	2472.194531	13	F1	3	12	F2	22	P
1994.451700	2.675	1994.449025	2472.712037	13	F1	3	12	F2	23	P
1996.013500	8.017	1996.005483	2474.226521	13	F1	2	12	F2	24	P
1998.554400	10.274	1998.544126	2476.691725	13	F1	1	12	F2	25	P
2025.902700	5.156	2025.897544	2504.215232	13	F1	4	12	F2	31	P
2134.598600	2.315	2134.596285	2612.859297	13	F1	3	12	F2	47	P
2200.410600	-1.372	2200.411972	2678.633011	13	F1	2	12	F2	58	P
2200.468800	-3.897	2200.472697	2678.693735	13	F1	2	12	F2	59	P
2059.581000	3.352	2059.577648	2469.542717	12	A1	1	13	A2	5	R
2075.867900	5.450	2075.862450	2485.951561	12	A1	2	13	A2	6	R

2314.154300	-8.790	2314.163090	2724.128159	12	A1	1	13	A2	20	R
1991.321000	3.768	1991.317232	2469.542717	13	A1	1	13	A2	5	Q
2256.364300	2.901	2256.361399	2734.586883	13	A1	1	13	A2	21	Q
1955.648900	0.368	1955.648532	2507.321464	14	A1	1	13	A2	7	P
2059.453900	4.207	2059.449693	2469.415485	12	E	1	13	E	9	R
2264.807000	-6.967	2264.813967	2674.779758	12	E	1	13	E	31	R
2061.690500	6.336	2061.684164	2539.903401	13	E	1	13	E	17	Q
2196.462500	-3.866	2196.466366	2674.779758	13	E	2	13	E	31	Q
2205.536500	3.923	2205.532577	2683.751814	13	E	1	13	E	33	Q
2256.685900	-6.566	2256.692466	2735.005858	13	E	2	13	E	39	Q
1945.215500	7.029	1945.208471	2496.964217	14	E	3	13	E	12	P
2123.084600	-5.440	2123.090040	2674.779758	14	E	2	13	E	31	P
2166.530500	5.738	2166.524762	2576.606981	12	F2	3	13	F1	35	R
2262.772600	-8.366	2262.780966	2672.836094	12	F2	2	13	F1	48	R
2262.745900	-7.975	2262.753875	2672.836094	12	F2	3	13	F1	48	R
2265.196400	-11.128	2265.207528	2675.227375	12	F2	1	13	F1	49	R
2276.062200	4.106	2276.058094	2686.077941	12	F2	1	13	F1	52	R
2277.726600	-0.485	2277.727085	2687.782213	12	F2	2	13	F1	53	R
2277.700000	0.006	2277.699994	2687.782213	12	F2	3	13	F1	53	R
2285.781800	7.787	2285.774013	2695.829141	12	F2	2	13	F1	55	R
2285.755200	8.278	2285.746922	2695.829141	12	F2	3	13	F1	55	R
2313.994900	-0.778	2313.995678	2724.050806	12	F2	2	13	F1	58	R
2314.050800	-8.079	2314.058879	2724.078727	12	F2	1	13	F1	59	R
2059.039900	5.340	2059.034560	2537.305630	13	F2	2	13	F1	23	Q
2194.679800	-8.309	2194.688109	2672.836094	13	F2	1	13	F1	48	Q
2207.811800	4.929	2207.806871	2686.077941	13	F2	2	13	F1	52	Q
2256.670500	-5.680	2256.676180	2734.985171	13	F2	3	13	F1	62	Q
1901.684800	-0.044	1901.684844	2453.305640	14	F2	2	13	F1	13	P
1944.453200	8.258	1944.444942	2496.204182	14	F2	4	13	F1	19	P
1949.788100	1.057	1949.787043	2501.498293	14	F2	3	13	F1	20	P
1989.745700	17.297	1989.728403	2541.349199	14	F2	2	13	F1	26	P
2129.111400	4.544	2129.106856	2680.727653	14	F2	2	13	F1	51	P
2136.071600	0.637	2136.070963	2687.782213	14	F2	3	13	F1	53	P
2059.488600	3.936	2059.484664	2469.450209	12	F1	1	13	F2	13	R
2156.211700	7.914	2156.203786	2566.289887	12	F1	3	13	F2	31	R
2264.576400	-7.761	2264.584161	2674.549706	12	F1	1	13	F2	46	R
2264.456800	-6.805	2264.463605	2674.549706	12	F1	3	13	F2	46	R
2273.775600	4.448	2273.771152	2683.736697	12	F1	1	13	F2	49	R
1957.196700	0.134	1957.196566	2435.417605	13	F1	2	13	F2	7	Q
1978.854400	3.777	1978.850623	2457.071661	13	F1	2	13	F2	12	Q
1991.233200	4.029	1991.229171	2469.450209	13	F1	2	13	F2	13	Q
1998.455900	-2.508	1998.458408	2476.776096	13	F1	4	13	F2	16	Q
2060.485000	-0.492	2060.485492	2538.706531	13	F1	2	13	F2	24	Q
2061.605800	7.693	2061.598107	2539.819145	13	F1	2	13	F2	25	Q
2099.640400	4.539	2099.635861	2577.953549	13	F1	4	13	F2	33	Q
2202.585400	3.198	2202.582202	2680.729801	13	F1	1	13	F2	48	Q
2205.520300	4.641	2205.515659	2683.736697	13	F1	2	13	F2	49	Q
2207.630400	-1.930	2207.632330	2685.895342	13	F1	3	13	F2	50	Q
2256.344100	0.154	2256.343946	2734.564985	13	F1	2	13	F2	58	Q
2256.700900	-7.410	2256.708310	2735.025999	13	F1	4	13	F2	60	Q
1902.235400	0.734	1902.234666	2453.858753	14	F1	1	13	F2	11	P
1923.927600	6.400	1923.921200	2475.671024	14	F1	3	13	F2	15	P
1948.497900	5.537	1948.492363	2500.242188	14	F1	3	13	F2	18	P
1955.465200	1.312	1955.463888	2507.147127	14	F1	2	13	F2	19	P
2121.384200	-3.340	2121.387540	2673.011627	14	F1	1	13	F2	45	P
2160.834100	13.815	2160.820285	2639.045769	13	A1	1	14	A2	11	R
2087.387700	14.862	2087.372838	2639.045769	14	A1	1	14	A2	11	Q
2100.152700	1.305	2100.151395	2651.907140	14	E	3	14	E	25	Q
2213.395800	-7.705	2213.403505	2765.159250	14	E	3	14	E	38	Q
2063.859300	4.899	2063.854401	2542.002386	13	F2	1	14	F1	14	R
2167.917300	10.776	2167.906524	2646.177593	13	F2	2	14	F1	34	R
2295.700000	11.292	2295.688708	2773.997699	13	F2	3	14	F1	56	R
2099.302900	10.792	2099.292108	2651.051349	14	F2	4	14	F1	35	Q
2160.448400	8.930	2160.439470	2638.757158	13	F1	4	14	F2	34	R
2284.173400	-1.645	2284.175045	2762.396084	13	F1	2	14	F2	55	R
2210.712400	-0.445	2210.712845	2762.396084	14	F1	2	14	F2	55	Q
2255.443400	3.425	2255.439975	2885.658615	15	E	1	15	E	44	Q



# *CHAPITRE V*

## *PREDICTION DE L'OCTAÈDE*

## I Introduction

Valentin et al. [28] ont enregistré et analysés les nombres d'ondes des transitions rovibrationnelles entre le niveau de base (GS ou  $P_0$ ) et la Diade ( $\nu_2, \nu_4$ ) ou  $P_1$  de la molécule  $^{12}\text{CD}_4$ , et Poussigue et al. [33] ont fait le même travail, mais pour les transitions entre GS et la Pentade ( $2\nu_4, \nu_2+\nu_4, \nu_1, 2\nu_2, \nu_3$ ) ou  $P_2$ .

Ces données expérimentales, ajoutées à celles de GS-GS, nous ont permis d'analyser simultanément les

Trois poliades et de déterminer 125 paramètres propres à la Pentade. Les résultats de ces analyses ont été exposés dans le chapitre précédent.

Le spectre de l'Octade ( $3\nu_4, \nu_2+2\nu_4, \nu_1+\nu_4, \nu_3+\nu_4, 2\nu_2+\nu_4, \nu_1+\nu_2, \nu_2+\nu_3, 3\nu_2$ ) s'étend de  $3000 \text{ cm}^{-1}$  à  $3500 \text{ cm}^{-1}$ . Puisque on a pas en notre possession un spectre expérimental sur cette région, nous avons voulu montrer dans ce chapitre comment et à partir des paramètres de l'Hamiltonien propre à la Pentade, prédire le spectre de l'Octade.

En effet dans la prédiction de l'Octade, ou 459 paramètres relatifs au développement de l'Hamiltonien propre à l'Octade, 72 paramètres sont exactement ceux relatifs à la Diade et 206 de la Pentade.

Dans ce chapitre, nous allons montrer comment la prédiction de l'Octade peut être faite sur la base de la connaissance des paramètres de la Diade et Pentade.

## II Modèle tensoriel de l'Hamiltonien propre à l'Octade

Pour pouvoir comprendre l'écriture de l'Hamiltonien relative à l'Octade, rappelons quelques équations (déjà données auparavant) et essayons de les réécrire pour le cas particulier de l'Octade. Ainsi pour les molécules  $\text{XY}_4$  pour lesquels les niveaux vibrationnels sont regroupés en une série de poliades  $P_k$  ( $k = 0 \dots, n$ ). L'opérateur Hamiltonien effectif est construit de la façon donnée par l'équation (III-3) dans laquelle chaque terme,  $\tilde{\mathcal{H}}_{\{p_k\}}$ , contient les opérateurs rovibrationnels déjà définis auparavant et chaque terme est écrit comme une combinaison linéaire des opérateurs rovibrationnels  $T_{\{s\}\{\acute{s}\}}^{\Omega(K,n\Gamma)\Gamma_v\Gamma_v}$ .

Puisque ce chapitre est relatif à la prédiction du spectre de l'Octade ou  $P_3$  ( $3\nu_4, \nu_2+2\nu_4, \nu_1+\nu_4, \nu_3+\nu_4, 2\nu_2+\nu_4, \nu_1+\nu_2, \nu_2+\nu_3, 3\nu_2$ ), l'Hamiltonien effectif relative à cette Poliade s'écrit:

$$\begin{aligned}\tilde{H}^{\langle \text{Octad} \rangle} &= \tilde{H}_{\{P_0\}}^{\langle P_3 \rangle} + \tilde{H}_{\{P_1\}}^{\langle P_3 \rangle} + \tilde{H}_{\{P_2\}}^{\langle P_3 \rangle} + \tilde{H}_{\{P_3\}}^{\langle P_3 \rangle} \\ &= \tilde{H}_{\{Gs\}}^{\langle \text{Octad} \rangle} + \tilde{H}_{\{Dyad\}}^{\langle \text{Octad} \rangle} + \tilde{H}_{\{Pentad\}}^{\langle \text{Octad} \rangle} + \tilde{H}_{\{\text{Octad}\}}^{\langle \text{Octad} \rangle}\end{aligned}\quad (\text{V.1})$$

Ou

$$\tilde{H}_{\{P_3\}} = \sum_{i=1} \tilde{t}_i \otimes T_i \quad (\text{V.2})$$

Ou l'indice  $i$  représente l'ensemble des caractéristiques rovibrationnels des opérateurs et donc des paramètres.

Le développement de l'Hamiltonien propres à l'Octade  $P_3$ , et développé jusqu'à l'ordre 4, contient 456 opérateurs dont les caractéristiques rovibrationnels sont reportés dans le **tableau (V.1)**

**Tableau V.1** .Caractéristique des opérateurs de l'Hamiltonien pour l'Octade

$i$	$\Omega$ (K, n $\Gamma$ )	$n_s$ $\Gamma_1$	$m_s$ $\Gamma_2$	$\Gamma$	$i$	$\Omega$ (K, n $\Gamma$ )	$n_s$ $\Gamma_1$	$m_s$ $\Gamma_2$	$\Gamma$	$i$	$\Omega$ (K, n $\Gamma$ )	$n_s$ $\Gamma_1$	$m_s$ $\Gamma_2$	$\Gamma$
1	2(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	154	1(1,0F1)	0200E	0101F2	F1	307	0(0,0A1)	0110F2	0011F2	A1
2	4(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	155	2(2,0F2)	0200E	0101F2	F2	308	1(1,0F1)	0110F2	0011F2	F1
3	4(4,0A1)	0000A1	0000A1	A1	156	0(0,0A1)	0200A1	0002A1	A1	309	2(0,0A1)	0110F2	0011F2	A1
4	6(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	157	2(0,0A1)	0200A1	0002A1	A1	310	2(2,0E)	0110F2	0011F2	E
5	6(4,0A1)	0000A1	0000A1	A1	158	2(2,0E)	0200A1	0002E	E	311	2(2,0F2)	0110F2	0011F2	F2
6	6(6,0A1)	0000A1	0000A1	A1	159	2(2,0F2)	0200A1	0002F2	F2	312	1(1,0F1)	0110F1	0300E	F1
7	8(0,0A1)	0000A1	0000A1	A1	160	2(2,0E)	0200E	0002A1	E	313	1(1,0F1)	0110F1	0300A1	F1
8	8(4,0A1)	0000A1	0000A1	A1	161	0(0,0A1)	0200E	0002E	A1	314	1(1,0F1)	0110F2	0300E	F1
9	8(6,0A1)	0000A1	0000A1	A1	162	2(0,0A1)	0200E	0002E	A1	315	1(1,0F1)	0110F2	0300A2	F1
10	8(8,0A1)	0000A1	0000A1	A1	163	2(2,0E)	0200E	0002E	E	316	1(1,0F1)	0110F1	0201F2	F1
11	0(0,0A1)	0100E	0100E	A1	164	1(1,0F1)	0200E	0002F2	F1	317	0(0,0A1)	0110F1	0201F1	A1
12	2(0,0A1)	0100E	0100E	A1	165	2(2,0F2)	0200E	0002F2	F2	318	1(1,0F1)	0110F1	0201F1	F1
13	2(2,0E)	0100E	0100E	E	166	0(0,0A1)	0101F1	0101F1	A1	319	1(1,0F1)	0110F1	0201F2	F1
14	3(3,0A2)	0100E	0100E	A2	167	1(1,0F1)	0101F1	0101F1	F1	320	0(0,0A1)	0110F2	0201F2	A1
15	4(0,0A1)	0100E	0100E	A1	168	2(0,0A1)	0101F1	0101F1	A1	321	1(1,0F1)	0110F2	0201F1	F1
16	4(2,0E)	0100E	0100E	E	169	2(2,0E)	0101F1	0101F1	E	322	1(1,0F1)	0110F2	0201F1	F1
17	4(4,0A1)	0100E	0100E	A1	170	2(2,0F2)	0101F1	0101F1	F2	323	0(0,0A1)	0110F2	0201F2	A1
18	4(4,0E)	0100E	0100E	E	171	1(1,0F1)	0101F1	0101F2	F1	324	1(1,0F1)	0110F2	0201F2	F1
19	5(3,0A2)	0100E	0100E	A2	172	2(2,0E)	0101F1	0101F2	E	325	1(1,0F1)	0110F1	0102E	F1
20	6(0,0A1)	0100E	0100E	A1	173	2(2,0F2)	0101F1	0101F2	F2	326	1(1,0F1)	0110F1	0102A1	F1
21	6(2,0E)	0100E	0100E	E	174	0(0,0A1)	0101F2	0101F2	A1	327	1(1,0F1)	0110F1	0102E	F1
22	6(4,0A1)	0100E	0100E	A1	175	1(1,0F1)	0101F2	0101F2	F1	328	0(0,0A1)	0110F1	0102F1	A1
23	6(4,0E)	0100E	0100E	E	176	2(0,0A1)	0101F2	0101F2	A1	329	1(1,0F1)	0110F1	0102F1	F1
24	6(6,0A1)	0100E	0100E	A1	177	2(2,0E)	0101F2	0101F2	E	330	1(1,0F1)	0110F1	0102F2	F1
25	6(6,0E)	0100E	0100E	E	178	2(2,0F2)	0101F2	0101F2	F2	331	1(1,0F1)	0110F2	0102E	F1
26	1(1,0F1)	0100E	0001F2	F1	179	1(1,0F1)	0101F1	0002A1	F1	332	1(1,0F1)	0110F2	0102A1	F1
27	2(2,0F2)	0100E	0001F2	F2	180	1(1,0F1)	0101F1	0002E	F1	333	1(1,0F1)	0110F2	0102E	F1
28	3(1,0F1)	0100E	0001F2	F1	181	2(2,0F2)	0101F1	0002E	F2	334	1(1,0F1)	0110F2	0102F1	F1
29	3(3,0F1)	0100E	0001F2	F1	182	1(1,0F1)	0101F1	0002F2	F1	335	0(0,0A1)	0110F2	0102F2	A1
30	3(3,0F2)	0100E	0001F2	F2	183	2(2,0E)	0101F1	0002F2	E	336	1(1,0F1)	0110F2	0102F2	F1
31	4(2,0F2)	0100E	0001F2	F2	184	2(2,0F2)	0101F1	0002F2	F2	337	1(1,0F1)	0110F1	0003F2	F1
32	4(4,0F1)	0100E	0001F2	F1	185	2(2,0F2)	0101F2	0002A1	F2	338	1(1,0F1)	0110F1	0003A1	F1
33	4(4,0F2)	0100E	0001F2	F2	186	1(1,0F1)	0101F2	0002E	F1	339	0(0,0A1)	0110F1	0003F1	A1
34	5(1,0F1)	0100E	0001F2	F1	187	2(2,0F2)	0101F2	0002E	F2	340	1(1,0F1)	0110F1	0003F1	F1
35	5(3,0F1)	0100E	0001F2	F1	188	0(0,0A1)	0101F2	0002F2	A1	341	1(1,0F1)	0110F1	0003F2	F1
36	5(3,0F2)	0100E	0001F2	F2	189	1(1,0F1)	0101F2	0002F2	F1	342	0(0,0A1)	0110F2	0003F2	A1
37	5(5,0F1)	0100E	0001F2	F1	190	2(0,0A1)	0101F2	0002F2	A1	343	1(1,0F1)	0110F2	0003F2	F1
38	5(5,1F1)	0100E	0001F2	F1	191	2(2,0E)	0101F2	0002F2	E	344	1(1,0F1)	0110F2	0003F1	F1
39	5(5,0F2)	0100E	0001F2	F2	192	2(2,0F2)	0101F2	0002F2	F2	345	0(0,0A1)	0110F2	0003F2	A1
40	6(2,0F2)	0100E	0001F2	F2	193	0(0,0A1)	0002A1	0002A1	A1	346	1(1,0F1)	0110F2	0003F2	F1
41	6(4,0F1)	0100E	0001F2	F1	194	2(0,0A1)	0002A1	0002A1	A1	347	0(0,0A1)	0011A1	0011A1	A1
42	6(4,0F2)	0100E	0001F2	F2	195	2(2,0E)	0002A1	0002E	E	348	2(0,0A1)	0011A1	0011A1	A1
43	6(6,0F1)	0100E	0001F2	F1	196	2(2,0F2)	0002A1	0002F2	F2	349	2(2,0E)	0011A1	0011E	E
44	6(6,0F2)	0100E	0001F2	F2	197	0(0,0A1)	0002E	0002E	A1	350	1(1,0F1)	0011A1	0011F1	F1
45	6(6,1F2)	0100E	0001F2	F2	198	2(0,0A1)	0002E	0002E	A1	351	2(2,0F2)	0011A1	0011F2	F2
46	0(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	199	2(2,0E)	0002E	0002E	E	352	0(0,0A1)	0011E	0011E	A1
47	1(1,0F1)	0001F2	0001F2	F1	200	1(1,0F1)	0002E	0002F2	F1	353	2(0,0A1)	0011E	0011E	A1
48	2(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	201	2(2,0F2)	0002E	0002F2	F2	354	2(2,0E)	0011E	0011E	E
49	2(2,0E)	0001F2	0001F2	E	202	0(0,0A1)	0002F2	0002F2	A1	355	1(1,0F1)	0011E	0011F1	F1
50	2(2,0F2)	0001F2	0001F2	F2	203	1(1,0F1)	0002F2	0002F2	F1	356	2(2,0F2)	0011E	0011F1	F2
51	3(1,0F1)	0001F2	0001F2	F1	204	2(0,0A1)	0002F2	0002F2	A1	357	1(1,0F1)	0011E	0011F2	F1
52	3(3,0F1)	0001F2	0001F2	F1	205	2(2,0E)	0002F2	0002F2	E	358	2(2,0F2)	0011E	0011F2	F2
53	4(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	206	2(2,0F2)	0002F2	0002F2	F2	359	0(0,0A1)	0011F1	0011F1	A1
54	4(2,0E)	0001F2	0001F2	E	207	0(0,0A1)	1100E	1100E	A1	360	1(1,0F1)	0011F1	0011F1	F1
55	4(2,0F2)	0001F2	0001F2	F2	208	2(0,0A1)	1100E	1100E	A1	361	2(0,0A1)	0011F1	0011F1	A1
56	4(4,0A1)	0001F2	0001F2	A1	209	2(2,0E)	1100E	1100E	E	362	2(2,0E)	0011F1	0011F1	E
57	4(4,0E)	0001F2	0001F2	E	210	1(1,0F1)	1100E	1001F2	F1	363	2(2,0F2)	0011F1	0011F1	F2
58	4(4,0F2)	0001F2	0001F2	F2	211	2(2,0F2)	1100E	1001F2	F2	364	1(1,0F1)	0011F1	0011F2	F1
59	5(1,0F1)	0001F2	0001F2	F1	212	1(1,0F1)	1100E	0110F1	F1	365	2(2,0E)	0011F1	0011F2	E
60	5(3,0F1)	0001F2	0001F2	F1	213	2(2,0F2)	1100E	0110F1	F2	366	2(2,0F2)	0011F1	0011F2	F2
61	5(5,0F1)	0001F2	0001F2	F1	214	1(1,0F1)	1100E	0110F2	F1	367	0(0,0A1)	0011F2	0011F2	A1
62	5(5,1F1)	0001F2	0001F2	F1	215	2(2,0F2)	1100E	0110F2	F2	368	1(1,0F1)	0011F2	0011F2	F1
63	6(0,0A1)	0001F2	0001F2	A1	216	2(2,0E)	1100E	0011A1	E	369	2(0,0A1)	0011F2	0011F2	A1
64	6(2,0E)	0001F2	0001F2	E	217	0(0,0A1)	1100E	0011E	A1	370	2(2,0E)	0011F2	0011F2	E
65	6(2,0F2)	0001F2	0001F2	F2	218	2(0,0A1)	1100E	0011E	A1	371	2(2,0F2)	0011F2	0011F2	F2
66	6(4,0A1)	0001F2	0001F2	A1	219	2(2,0E)	1100E	0011E	E	372	0(0,0A1)	0011A1	0300A1	A1
67	6(4,0E)	0001F2	0001F2	E	220	1(1,0F1)	1100E	0011F1	F1	373	0(0,0A1)	0011E	0300E	A1
68	6(4,0F2)	0001F2	0001F2	F2	221	2(2,0F2)	1100E	0011F1	F2	374	1(1,0F1)	0011F1	0300E	F1
69	6(6,0A1)	0001F2	0001F2	A1	222	1(1,0F1)	1100E	0011F2	F1	375	1(1,0F1)	0011F1	0300A1	F1
70	6(6,0E)	0001F2	0001F2	E	223	2(2,0F2)	1100E	0011F2	F2	376	1(1,0F1)	0011F2	0300E	F1
71	6(6,0F2)	0001F2	0001F2	F2	224	0(0,0A1)	1100E	0300E	A1	377	1(1,0F1)	0011F2	0300A2	F1
72	6(6,1F2)	0001F2	0001F2	F2	225	1(1,0F1)	1100E	0201F2	F1	378	1(1,0F1)	0011A1	0201F1	F1
73	0(0,0A1)	1000A1	1000A1	A1	226	1(1,0F1)	1100E	0201F1	F1	379	1(1,0F1)	0011E	0201F2	F1
74	2(0,0A1)	1000A1	1000A1	A1	227	1(1,0F1)	1100E	0201F2	F1	380	1(1,0F1)	0011E	0201F1	F1
75	4(0,0A1)	1000A1	1000A1	A1	228	0(0,0A1)	1100E	0102E	A1	381	1(1,0F1)	0011E	0201F2	F1
76	4(4,0A1)	1000A1	1000A1	A1	229	0(0,0A1)	1100E	0102E	A1	382	1(1,0F1)	0011F1	0201F2	F1

77	2(2,0F2)	1000A1	0010F2	F2	230	1(1,0F1)	1100E	0102F1	F1	383	0(0,0A1)	0011F1	0201F1	A1
78	3(3,0F2)	1000A1	0010F2	F2	231	1(1,0F1)	1100E	0102F2	F1	384	1(1,0F1)	0011F1	0201F1	F1
79	4(2,0F2)	1000A1	0010F2	F2	232	1(1,0F1)	1100E	0003F2	F1	385	1(1,0F1)	0011F1	0201F2	F1
80	4(4,0F2)	1000A1	0010F2	F2	233	1(1,0F1)	1100E	0003F1	F1	386	0(0,0A1)	0011F2	0201F2	A1
81	0(0,0A1)	1000A1	0200A1	A1	234	1(1,0F1)	1100E	0003F2	F1	387	1(1,0F1)	0011F2	0201F2	F1
82	2(0,0A1)	1000A1	0200A1	A1	235	0(0,0A1)	1001F2	1001F2	A1	388	1(1,0F1)	0011F2	0201F1	F1
83	2(2,0E)	1000A1	0200E	E	236	1(1,0F1)	1001F2	1001F2	F1	389	0(0,0A1)	0011F2	0201F2	A1
84	1(1,0F1)	1000A1	0101F1	F1	237	2(0,0A1)	1001F2	1001F2	A1	390	1(1,0F1)	0011F2	0201F2	F1
85	3(1,0F1)	1000A1	0101F1	F1	238	2(2,0E)	1001F2	1001F2	E	391	0(0,0A1)	0011A1	0102A1	A1
86	3(3,0F1)	1000A1	0101F1	F1	239	2(2,0F2)	1001F2	1001F2	F2	392	1(1,0F1)	0011A1	0102F1	F1
87	2(2,0F2)	1000A1	0101F2	F2	240	1(1,0F1)	1001F2	0110F1	F1	393	0(0,0A1)	0011E	0102E	A1
88	3(3,0F2)	1000A1	0101F2	F2	241	2(2,0E)	1001F2	0110F1	E	394	0(0,0A1)	0011E	0102E	A1
89	0(0,0A1)	1000A1	0002A1	A1	242	2(2,0F2)	1001F2	0110F1	F2	395	1(1,0F1)	0011E	0102F1	F1
90	2(0,0A1)	1000A1	0002A1	A1	243	0(0,0A1)	1001F2	0110F2	A1	396	1(1,0F1)	0011E	0102F2	F1
91	2(2,0E)	1000A1	0002E	E	244	1(1,0F1)	1001F2	0110F2	F1	397	1(1,0F1)	0011F1	0102E	F1
92	2(2,0F2)	1000A1	0002F2	F2	245	2(0,0A1)	1001F2	0110F2	A1	398	1(1,0F1)	0011F1	0102A1	F1
93	3(3,0F2)	1000A1	0002F2	F2	246	2(2,0E)	1001F2	0110F2	E	399	1(1,0F1)	0011F1	0102E	F1
94	0(0,0A1)	0010F2	0010F2	A1	247	2(2,0F2)	1001F2	0110F2	F2	400	0(0,0A1)	0011F1	0102F1	A1
95	1(1,0F1)	0010F2	0010F2	F1	248	2(2,0F2)	1001F2	0011A1	F2	401	1(1,0F1)	0011F1	0102F1	F1
96	2(0,0A1)	0010F2	0010F2	A1	249	1(1,0F1)	1001F2	0011E	F1	402	1(1,0F1)	0011F1	0102F2	F1
97	2(2,0E)	0010F2	0010F2	E	250	2(2,0F2)	1001F2	0011E	F2	403	1(1,0F1)	0011F2	0102E	F1
98	2(2,0F2)	0010F2	0010F2	F2	251	1(1,0F1)	1001F2	0011F1	F1	404	1(1,0F1)	0011F2	0102A2	F1
99	3(1,0F1)	0010F2	0010F2	F1	252	2(2,0E)	1001F2	0011F1	E	405	1(1,0F1)	0011F2	0102E	F1
100	3(3,0F1)	0010F2	0010F2	F1	253	2(2,0F2)	1001F2	0011F1	F2	406	1(1,0F1)	0011F2	0102F1	F1
101	4(0,0A1)	0010F2	0010F2	A1	254	0(0,0A1)	1001F2	0011F2	A1	407	0(0,0A1)	0011F2	0102F2	A1
102	4(2,0E)	0010F2	0010F2	E	255	1(1,0F1)	1001F2	0011F2	F1	408	1(1,0F1)	0011F2	0102F2	F1
103	4(2,0F2)	0010F2	0010F2	F2	256	2(0,0A1)	1001F2	0011F2	A1	409	0(0,0A1)	0011A1	0003A1	A1
104	4(4,0A1)	0010F2	0010F2	A1	257	2(2,0E)	1001F2	0011F2	E	410	1(1,0F1)	0011A1	0003F1	F1
105	4(4,0E)	0010F2	0010F2	E	258	2(2,0F2)	1001F2	0011F2	F2	411	1(1,0F1)	0011E	0003F2	F1
106	4(4,0F2)	0010F2	0010F2	F2	259	1(1,0F1)	1001F2	0300E	F1	412	1(1,0F1)	0011E	0003F1	F1
107	2(2,0F2)	0010F2	0200A1	F2	260	1(1,0F1)	1001F2	0300A2	F1	413	1(1,0F1)	0011E	0003F2	F1
108	3(3,0F2)	0010F2	0200A1	F2	261	0(0,0A1)	1001F2	0201F2	A1	414	1(1,0F1)	0011F1	0003F2	F1
109	1(1,0F1)	0010F2	0200E	F1	262	1(1,0F1)	1001F2	0201F2	F1	415	1(1,0F1)	0011F1	0003A1	F1
110	2(2,0F2)	0010F2	0200E	F2	263	1(1,0F1)	1001F2	0102E	F1	416	0(0,0A1)	0011F1	0003F1	A1
111	3(1,0F1)	0010F2	0200E	F1	264	0(0,0A1)	1001F2	0201F2	A1	417	1(1,0F1)	0011F1	0003F1	F1
112	3(3,0F1)	0010F2	0200E	F1	265	1(1,0F1)	1001F2	0201F2	F1	418	1(1,0F1)	0011F1	0003F2	F1
113	3(3,0F2)	0010F2	0200E	F2	266	1(1,0F1)	1001F2	0102E	F1	419	0(0,0A1)	0011F2	0003F2	A1
114	1(1,0F1)	0010F2	0101F1	F1	267	1(1,0F1)	1001F2	0102A2	F1	420	1(1,0F1)	0011F2	0003F2	F1
115	2(2,0E)	0010F2	0101F1	E	268	1(1,0F1)	1001F2	0102E	F1	421	1(1,0F1)	0011F2	0003F1	F1
116	2(2,0F2)	0010F2	0101F1	F2	269	1(1,0F1)	1001F2	0102F1	F1	422	0(0,0A1)	0011F2	0003F2	A1
117	3(1,0F1)	0010F2	0101F1	F1	270	0(0,0A1)	1001F2	0102F2	A1	423	1(1,0F1)	0011F2	0003F2	F1
118	3(3,0A2)	0010F2	0101F1	A2	271	1(1,0F1)	1001F2	0102F2	F1	424	0(0,0A1)	0300E	0300E	A1
119	3(3,0F1)	0010F2	0101F1	F1	272	0(0,0A1)	1001F2	0003F2	A1	425	0(0,0A1)	0300A1	0300A1	A1
120	3(3,0F2)	0010F2	0101F1	F2	273	1(1,0F1)	1001F2	0003F2	F1	426	0(0,0A1)	0300A2	0300A2	A1
121	0(0,0A1)	0010F2	0101F2	A1	274	1(1,0F1)	1001F2	0003F1	F1	427	0(0,0A1)	0300E	0102E	A1
122	1(1,0F1)	0010F2	0101F2	F1	275	0(0,0A1)	1001F2	0003F2	A1	428	0(0,0A1)	0300E	0102E	A1
123	2(0,0A1)	0010F2	0101F2	A1	276	1(1,0F1)	1001F2	0003F2	F1	429	0(0,0A1)	0300A1	0102A1	A1
124	2(2,0E)	0010F2	0101F2	E	277	0(0,0A1)	0110F1	0110F1	A1	430	0(0,0A1)	0300A2	0102A2	A1
125	2(2,0F2)	0010F2	0101F2	F2	278	1(1,0F1)	0110F1	0110F1	F1	431	0(0,0A1)	0300A1	0003A1	A1
126	3(1,0F1)	0010F2	0101F2	F1	279	2(0,0A1)	0110F1	0110F1	A1	432	0(0,0A1)	0201F2	0201F2	A1
127	3(3,0F1)	0010F2	0101F2	F1	280	2(2,0E)	0110F1	0110F1	E	433	0(0,0A1)	0201F2	0201F2	A1
128	3(3,0F2)	0010F2	0101F2	F2	281	2(2,0F2)	0110F1	0110F1	F2	434	0(0,0A1)	0201F1	0201F1	A1
129	2(2,0F2)	0010F2	0002A1	F2	282	1(1,0F1)	0110F1	0110F2	F1	435	0(0,0A1)	0201F2	0201F2	A1
130	3(3,0F2)	0010F2	0002A1	F2	283	2(2,0E)	0110F1	0110F2	E	436	0(0,0A1)	0201F2	0102F2	A1
131	1(1,0F1)	0010F2	0002E	F1	284	2(2,0F2)	0110F1	0110F2	F2	437	0(0,0A1)	0201F1	0102F1	A1
132	2(2,0F2)	0010F2	0002E	F2	285	0(0,0A1)	0110F2	0110F2	A1	438	0(0,0A1)	0201F2	0102F2	A1
133	3(1,0F1)	0010F2	0002E	F1	286	1(1,0F1)	0110F2	0110F2	F1	439	0(0,0A1)	0201F2	0003F2	A1
134	3(3,0F1)	0010F2	0002E	F1	287	2(0,0A1)	0110F2	0110F2	A1	440	0(0,0A1)	0201F2	0003F2	A1
135	3(3,0F2)	0010F2	0002E	F2	288	2(2,0E)	0110F2	0110F2	E	441	0(0,0A1)	0201F1	0003F1	A1
136	0(0,0A1)	0010F2	0002F2	A1	289	2(2,0F2)	0110F2	0110F2	F2	442	0(0,0A1)	0201F2	0003F2	A1
137	1(1,0F1)	0010F2	0002F2	F1	290	1(1,0F1)	0110F1	0011A1	F1	443	0(0,0A1)	0201F2	0003F2	A1
138	2(0,0A1)	0010F2	0002F2	A1	291	1(1,0F1)	0110F1	0011E	F1	444	0(0,0A1)	0102E	0102E	A1
139	2(2,0E)	0010F2	0002F2	E	292	2(2,0F2)	0110F1	0011E	F2	445	0(0,0A1)	0102E	0102E	A1
140	2(2,0F2)	0010F2	0002F2	F2	293	0(0,0A1)	0110F1	0011F1	A1	446	0(0,0A1)	0102A1	0102A1	A1
141	3(1,0F1)	0010F2	0002F2	F1	294	1(1,0F1)	0110F1	0011F1	F1	447	0(0,0A1)	0102A2	0102A2	A1
142	3(3,0F1)	0010F2	0002F2	F1	295	2(0,0A1)	0110F1	0011F1	A1	448	0(0,0A1)	0102E	0102E	A1
143	3(3,0F2)	0010F2	0002F2	F2	296	2(2,0E)	0110F1	0011F1	E	449	0(0,0A1)	0102F1	0102F1	A1
144	0(0,0A1)	0200A1	0200A1	A1	297	2(2,0F2)	0110F1	0011F1	F2	450	0(0,0A1)	0102F2	0102F2	A1
145	2(0,0A1)	0200A1	0200A1	A1	298	1(1,0F1)	0110F1	0011F2	F1	451	0(0,0A1)	0102A1	0003A1	A1
146	2(2,0E)	0200A1	0200E	E	299	2(2,0E)	0110F1	0011F2	E	452	0(0,0A1)	0102F1	0003F1	A1
147	0(0,0A1)	0200E	0200E	A1	300	2(2,0F2)	0110F1	0011F2	F2	453	0(0,0A1)	0102F2	0003F2	A1
148	2(0,0A1)	0200E	0200E	A1	301	2(2,0F2)	0110F2	0011A1	F2	454	0(0,0A1)	0102F2	0003F2	A1
149	2(2,0E)	0200E	0200E	E	302	1(1,0F1)	0110F2	0011E	F1	455	0(0,0A1)	0003F2	0003F2	A1
150	1(1,0F1)	0200A1	0101F1	F1	303	2(2,0F2)	0110F2	0011E	F2	456	0(0,0A1)	0003F2	0003F2	A1
151	2(2,0F2)	0200A1	0101F2	F2	304	1(1,0F1)	0110F2	0011F1	F1	457	0(0,0A1)	0003A1	0003A1	A1
152	1(1,0F1)	0200E	0101F1	F1	305	2(2,0E)	0110F2	0011F1	E	458	0(0,0A1)	0003F1	0003F1	A1
153	2(2,0F2)	0200E	0101F1	F2	306	2(2,0F2)	0110F2	0011F1	F2	459	0(0,0A1)	0003F2	0003F2	A1

Après la construction des opérateurs, propres à l'Octade (voir tableau V.1), nous voyons que les 10 premiers paramètres sont exactement ceux du niveau de base, les 72 premiers paramètres sont exactement ceux de la Diade, et les 206 premiers paramètres sont ceux relatifs à la Pentade . D'autres part, et vu cette façon d'apparition des paramètres dans le développement des Hamiltoniens pour les différentes Poliades Notons quelques remarques importantes qui vont être la base de notre prédiction du spectre relatifs à l'Octade :

-1- on peut analyser les spectres moléculaires en grim pant les échelles des poliades, une poliade après l'autre (comme dans notre cas GS, puis Diade, puis Pentade et enfin on remonte à l'Octade et ainsi de suite).

Chaque fois qu'une nouvelle Poliade est à étudier, les termes qui sont ajoutés à l'Hamiltonien effectif de la poliade précédente sont en principe de petites contributions et corrections vibrationnelles pour le niveau supérieur

-2- En outre, cette approche est bien adaptée à des analyses globales d'une série de poliades, conduisant à un jeu de paramètres unique pour l'ensemble des niveaux moléculaires. Pour donner un exemple simple pour illustrer ce concept, lors de l'analyse simultanée d'une série de poliades  $P_0, P_1, P_2, P_3, \dots$ , la constante de rotation  $B_0$  de la formule (I.15) peut être déterminée par les données de tous les poliades : C'est le paramètre  $J^2$  de l'expression de  $\tilde{H}_{\{p_0\}}$ . Tous les autres paramètres associés aux termes de  $J^2$  de  $\tilde{H}_{\{p_{k>0}\}}$  correspondent aux variations de la constante de rotation  $B_0$  pour les sous-niveaux vibrationnels considérés (c'est-à-dire aux quantités comme  $B_v - B_0$ ).

-3- En effectuant une analyse globale et de la façon indiquée dans les deux premières remarques, nous pouvons ajouter cette remarque sur la détermination des paramètres :

les paramètres relatifs à l'une des poliades les plus basses ne sont pas seulement déterminés par l'ensemble des données expérimentales sur cette poliade  $P_k$ , mais aussi par toutes les données expérimentales des poliades  $P_{k'>k}$  (mais pas par les données expérimentales relatifs à  $P_{k'<k}$ ).

Par exemple, comme nous l'avons vu dans l'analyse de la Pentade, l'analyse globale de la poliade  $P_0$  à  $P_2$ , les paramètres relatifs à la Diade  $P_1$  sont déterminés non seulement par les données de  $P_1$  mais aussi par ceux de  $P_2$  (mais pas par les données de  $P_0$  (GS)). Donc, chaque fois qu'une nouvelle poliade est considérée, il n'est pas sage de l'étudier seul., mais plutôt de l'inscrire dans une nouvelle analyse globale avec des paramètres raffinés.

Ainsi et suivant toutes ces remarques nous concluons que pour la prédiction de la poliade Octade de  $^{12}\text{CD}_4$  :

L'Hamiltonien effectif, développé au quatrième ordre, comporte 459 opérateurs rovibrationnels, donc 459 paramètres, dont les caractéristiques  $i = \Omega, K, n\Gamma, n_s, \Gamma_1, m_s, \Gamma_2, \Gamma$  sont reportés dans le tableau V.1.

En voyant les caractéristiques de ces opérateurs nous avons :

Les paramètres de  $i=1$  à  $i=10$  sont spécifiques au niveau de base GS ou  $P_0$   
 En plus des 10 premiers paramètres, les paramètres de  $i=11$  à  $i=72$  sont spécifiques à la Diade dont :

$i=11$  à  $i=25$  sont spécifiques à  $v_2$   
 $i=26$  à  $i=45$  sont spécifiques aux interactions entre  $v_2$  et  $v_4$  et  
 $i=46$  à  $i=72$  sont des paramètres relatifs à  $v_4$ )

En plus des 72 premiers paramètres, les paramètres de  $i=73$  à  $i=206$  sont spécifiques à la Pentade dont:

$i=73$  à  $i=76$  sont spécifiques à  $v_1$   
 $i=77$  à  $i=80$  sont spécifiques aux interactions entre  $v_1$  et  $v_3$   
 $i=81$  à  $i=83$  sont spécifiques aux interactions entre  $v_1$  et  $2v_2$   
 $i=84$  à  $i=88$  sont spécifiques aux interactions entre  $v_1$  et  $v_2+v_4$   
 $i=89$  à  $i=93$  sont spécifiques aux interactions entre  $v_1$  et  $2v_4$   
 $i=94$  à  $i=106$  sont spécifiques à  $v_3$   
 $i=107$  à  $i=113$  sont spécifiques aux interactions entre  $v_3$  et  $2v_2$   
 $i=114$  à  $i=128$  sont spécifiques aux interactions entre  $v_3$  et  $v_2+v_4$   
 $i=129$  à  $i=143$  sont spécifiques aux interactions entre  $v_3$  et  $2v_4$   
 $i=144$  à  $i=149$  sont spécifiques à  $2v_2$   
 $i=150$  à  $i=155$  sont spécifiques aux interactions entre  $2v_2$  et  $v_2+v_4$   
 $i=156$  à  $i=165$  sont spécifiques aux interactions entre  $2v_2$  et  $2v_4$   
 $i=166$  à  $i=178$  sont spécifiques  $v_2+v_4$   
 $i=179$  à  $i=192$  sont spécifiques aux interactions entre  $v_2+v_4$  et  $2v_4$   
 $i=193$  à  $i=206$  sont spécifiques à  $2v_4$

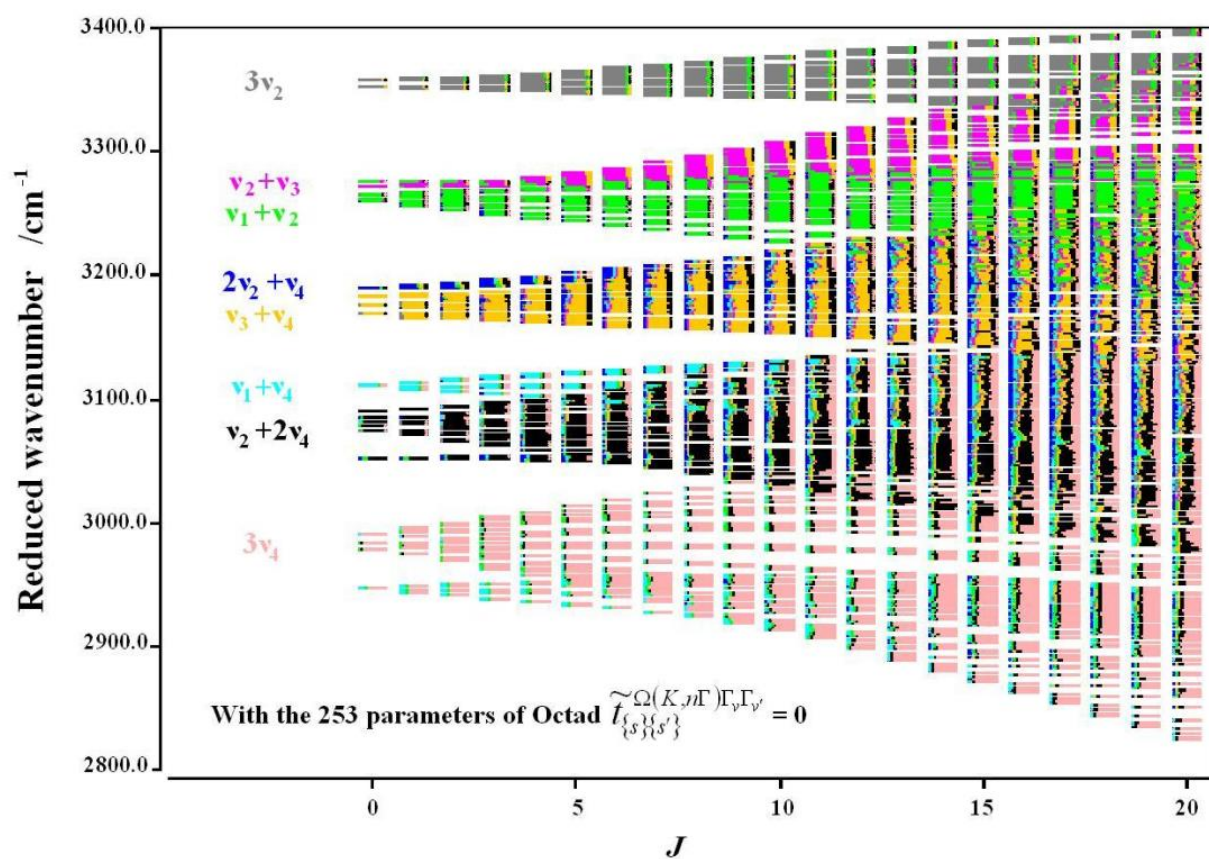
et en plus des 206 paramètres, les paramètres de  $i=207$  à  $i=459$  sont des paramètres spécifiques à l'Octade ou  $P_3$  ( $3v_4, v_2+2v_4, v_1+v_4, v_3+v_4, 2v_2+v_4, v_1+v_2, v_2+v_3, 3v_2$ )

Parmi les 206 paramètres  $i=1$  à  $i=206$ , 125 paramètres sont déterminés [39] et les autres paramètres relatifs à l'Octade ( $459-206 = 253$  paramètres) sont fixés à zéro, puisque aucune analyse de spectre expérimental sur l'Octade n'a été faite.

La fixation à zéro vient du fait des remarques données précédemment. ( termes correctives)

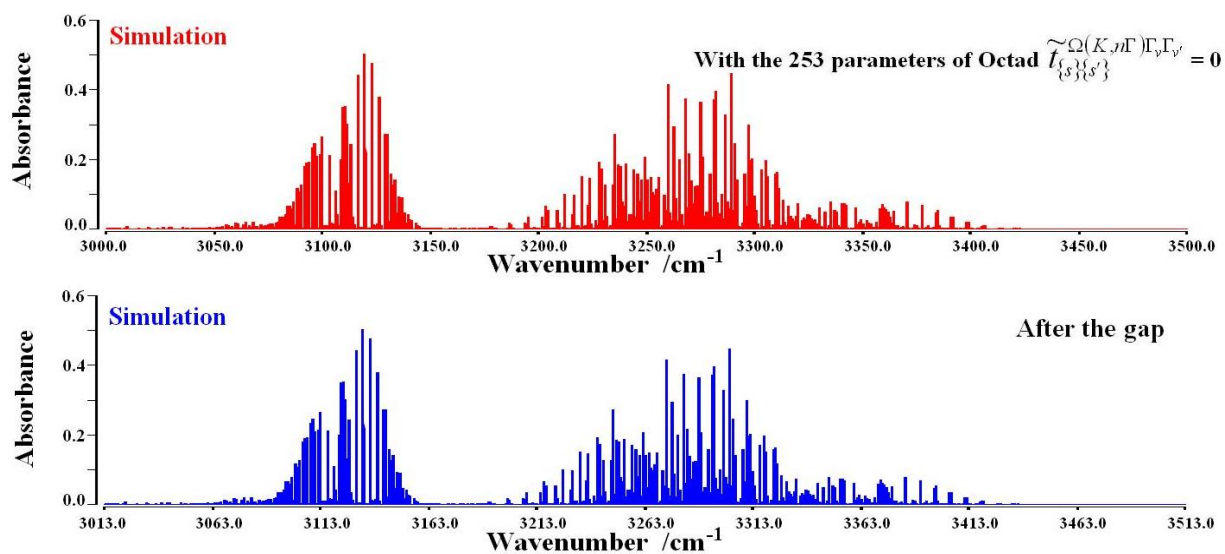
Avec ces paramètres, nous faisons un calcul de spectres et en faisant un écart plus ou moins de  $13 \text{ cm}^{-1}$ , on obtient le spectre de la simulation de la région d'Octade de  $^{12}\text{CD}_4$  et la Figure V.1 montrent cette simulation.

**FIGURE V.1.** Diagramme énergétique de l'Octade





**FIGURE V. 2.** Spectre simulé de la région de l' Octade de  $^{12}\text{CD}_4$



En conclusion de tous ce qui a été dit dans ce chapitre, et après que nous ayons présenter au chapitres précédents les analyses « la spectroscopie à haute résolution) de 2308 données sur la molécule  $^{12}\text{CD}_4$  dans la région  $900\text{--}2400\text{ cm}^{-1}$  ; faisant intervenir les poliades Diade ou  $P_1$  ( $900\text{--}1220\text{ cm}^{-1}$ ), et Pentade ou  $P_2$  ( $1850\text{--}2400\text{ cm}^{-1}$ ), et après avoir déterminer 125 paramètres propres à la Pentade . Nous avons montré comment on peut prédire le spectre de l'Octade sur la base de la détermination de ces 125 paramètres.

Cette simulation est très importante dans les prochaines études sur cette molécule, et surtout une fois qu'un spectre expérimental est enregistré dans la région de l' Octade, notre prédiction apportera une grande aide (même elle est nécessaire) pour l'attribution des données sur les positions et donc sur les intensités.

## Conclusion

Après avoir exposé toutes les formules permettant de construire les opérateurs Hamiltonien et moment dipolaire des molécules  $XY_4$ , nous avons calculé les positions des raies et les intensités rovibrationnelles de n'importe quel spectre de la molécule  $^{12}CD_4$ . Nous avons ensuite donné les détails concernant les méthodes d'analyses et les programmes utilisés au cours de notre étude sur la molécule  $^{12}CD_4$ .

Ainsi, et en utilisant XTDS et SPVIEW (ensembles de logiciels permettant de faire tous types de calculs, d'analyse et d'attributions pour les molécules  $XY_4$ ) nous avons fait les différentes analyses de notre étude.

La première analyse faite dans ce travail, est l'analyse des positions de raie de la molécule  $^{12}CD_4$  dans la fenêtre  $900-1220\text{ cm}^{-1}$ . (fenêtre du spectre contient essentiellement des raies de transitions entre la Diade  $P_1(\nu_2, \nu_4)$  et le niveau de base GS).

Dans cette étude de  $(\nu_2, \nu_4)$ -GS nous avons suivi les étapes suivantes :

- nous avons tout d'abord développé les opérateurs rovibrationnels et déterminer ainsi les caractéristiques rovibrationnelles de ces opérateurs et donc des paramètres qu'on veut déterminer. Le développement de L'Hamiltonien relatif à la Diade  $(\nu_2, \nu_4)$  comporte 72 opérateurs à l'ordre 6, dont 10 sont spécifiques au niveau de base et 62 sont relatif à la Diade.

-L'analyse de 731 données expérimentales sur la Diade nous a permis de déterminer un jeu de paramètres avec une très bonne précision. Cette étude sur la Diade, nous a permis d'entamer une étude plus étendue, qui contient, non seulement cette étude, mais aussi celle de 5 autres bandes froides (le tout étudiés en interaction) :c'est l'étude simultanée de  $(\nu_2, \nu_4)$ -GS et  $(2\nu_4, \nu_2+\nu_4, \nu_1, 2\nu_2, \nu_3)$ -GS.

Les résultats de cette étude sur la Pentade ou  $P_2$ , nous a conduit à déterminer un jeu de paramètres très précis et utile pour les prochaines études. En effet, dans cette étude de  $P_2$ -GS :

-Nous avons présenté une investigation détaillée de données sur la molécule  $^{12}CD_4$  dans la région  $900-2400\text{ cm}^{-1}$ . Puis, nous avons fait une analyse globale des raies de positions de cette région qui couvre deux poliades froides à savoir : La Diade ou  $P_1$  ( $900-1220\text{ cm}^{-1}$ , 2 niveaux vibrationnels, 2 sous niveaux) et la Pentade ou  $P_2$  ( $1850-2400\text{ cm}^{-1}$ , 5 niveaux vibrationnels, 9 sous niveaux).

-Dans cette analyse, 2308 données expérimentales issues de trois sources de données ont été fittée et ceci en utilisant un Hamiltonien développé au quatrième ordre de la Pentade.

-Pour les attributions et les analyses nous avons utilisé XTDS et SPVIEW (Ensembles de logiciels utilisant les formalismes tensoriels développés à l'institut interdisciplinaire de Dijon-Bourgogne-France pour les molécules tétraédriques). Les transitions expérimentales sont assignés à un nombre quantique rotationnel maximum de 20 donc  $J \leq 20$  pour la Diade et pour la Pentade.

-Parmi les 206 paramètres de l'Hamiltonien effectif de la Pentade (dont 10 sont relatifs au niveau de base (GS) et 72 sont relatifs à la Diade), 125 sont déterminés (dont 48 sont spécifiques à la Diade et 8 à GS).

-Les 48 paramètres propres à la Diade et les 125 relatifs à la Pentade, nous ont permis de faire de très bonnes simulations des spectres de la Diade et de Pentade.

- Pour toutes ces études, un total de 2308 données a été utilisé dans un ajustement de moindres carrés caractérisé par un écart quadratique moyen  $d_{\text{RMS}} = 6,2 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$  pour la Diade et  $3,8 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$  pour la Pentade.

-Du fait que l'analyse sur les positions de raies a été faite et que les résultats sont d'une très grande précision, on s'est penchés sur l'analyse des intensités ou nous avons déterminés facilement les 10 paramètres entrant dans le développement du moment dipolaire et qui nous ont permis de calculer toutes les intensités des spectres simulés de la Pentade. Une comparaison des spectres simulés et expérimentaux montrent que les paramètres du moment dipolaire sont très bien déterminés.

-Notre prédiction, avec les 125 paramètres de l'Hamiltonien développé à l'ordre 4 et des 10 paramètres du moment dipolaire entrant dans le calcul de l'intensité rovibrationnelle des raies, permettra de monter dans les valeurs de J dans les prochaines études, et de commencer l'étude des poliades plus hautes : comme l'Octade et ensuite la Tétradecade.

Dans le dernier chapitre, on s'est penché sur l'étude de la poliade  $P_3$  ( $3\nu_4, \nu_2+2\nu_4, \nu_1+\nu_4, \nu_3+\nu_4, 2\nu_2+\nu_4, \nu_1+\nu_2, \nu_2+\nu_3, 3\nu_2$ ) qui s'étend de  $3000 \text{ cm}^{-1}$  à  $3500 \text{ cm}^{-1}$  et appelé l'Octade.

Le développement de l'Hamiltonien propre à l'Octade  $P_3$  est développé jusqu'à l'ordre 4, il contient 456 opérateurs rovibrationnels dont les caractéristiques des 206 premiers sont exactement ceux de la Pentade. les 125 premiers paramètres que nous avons déterminés dans l'analyse de la Pentade, sont exactement ceux qui entre dans le développement de l'opérateur de l'Octade.

La prédiction que nous avons faite sur le spectre de l'Octade, permettra et facilitera toute prochaine étude et attributions sur les positions des raies et sur les intensités de l'Octade de la molécule  $^{12}\text{CD}_4$ .

## Bibliographie

- [1] W.H.Childs et H.A.Jahn, Proc.Soc.A169 ,451( 1939).
- [2] W.H.Shaffer, H.H.Nielsen et L.H.Thomas, Phys.Rev.57.128 (1939)
- [3] K.T.Hecht, J.Mol.Spectrosc.5,355-390(1960)
- [4] J.Moret-Bailly, Cah.Phys.15, 237(1961)
- [5] A.J.Dorney, et J.K.G.Watson, J.Mol.Spectrosc.47,347 (1973)
- [6] I.Ozier, J.Mol.Spectrosc.53, 336(1974)
- [7] F.Michelot, J.Moret-Bailly et K.Fox, J.Chem.Phys.60, 2606(1974)
- [8] J.C.Hilico, J.P. Champion et G.Pierre, J.Mol.Spectrosc.60.422(1976)
- [9] E.Pascaud, J.Phys.30, 539 (1969)
- [10] Husson et M.Dang Nhu, J.Phys.32 ,627(1971)
- [11] A.G.Robiette, D.L.Gray et F.W.Birss, Mol Phys.6, 1591(1976)
- [12] J.-P Champion, Can.phys.55, 1802-1828(1977)
- [13] M.Loëte, Théorie des intensités absolues des transitions de vibration-rotation des molécules XY<sub>4</sub>, Thèse d'état, Dijon (1984)
- [14] P.BARCHEWITZ, Spectroscopie Atomique et Moléculaire (MASSON 71)
- [15] B.T.Darling et D.M.Dennison, Phys.Rev.57, 128 (1940).
- [16] J.K.G.Watson, Mol .Phys.15, 479 (1968).
- [17] J.H.Van Vleck, Phys.Rev.33,467(1929)
- [18] G. Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure: Infrared and Raman Spectra, vol. II, Van Nostrand, Toronto, 1945.
- [19] J.C.Hilico,Phys.19, 328(1965).
- [20] J.Moret-Bailly, Cah.Phys.15,334(1965).
- [21] E Elbaz, Mécanique Quantique,(Ellipse1985)
- [22] J.C.Hilico, J.Phys.31, 15(1970).
- [23] J.-P.Champion, G.Pierre, Michelot et J.Moret-Bailly, Can.J.Phys.55.512(1977).
- [24] A. Nikitin, J.-P.Champion, V.G. Tyuterev, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 82 (2003) 239
- [25] V. Boudon, J.-P. Champion, T. Gabard, M. Loëte, F. Michelot, G. Pierre, M. Rotger,C. Wenger,M. Rey, J. Mol. Spectrosc. 228.620(2004)
- [26] A.J. Stone, Mol. Phys. 29.1461(1975) .
- [27] J.-P. Champion, M. Loëte, G. Pierre, in: K.N. Rao, A.Weber (Eds.), Spectroscopy of the Earth's Atmosphere and Interstellar Medium, Academic Press, San Diego,1992, p.339.
- [28] A. Valentin, J. Chazelas, and L. Henry, J. Mol. Spectrosc. 99, 63-86 (1983).
- [29] S.Broersen, D.LGray, A.G.Robiette, Mol.Phys.34,617-628(1977).
- [30] W.A. Kreiner, A.G. Robiette, Canal.J. Chem. Phys. 57, 1969-1981 (1979).
- [31] W.A. Kreiner, A.G. Robiette,J.Chem. Phys. 74, 3713-3717 (1981).
- [32] J.K.G. Watson, M. Takami, T. Oka, J. Chem. Phys. 70.5376(1979) .
- [33] G. Poussigue, E. Pascaud, and G. Guelachvili, J. Mol. Spectrosc. 111, 235-274 (1985).
- [34] M. Loëte, Can. J. Phys. 61.1242(1983) .
- [35] N. Cheblal, M. Loëte, V. Boudon, J. Mol. Spectrosc. 197.222(1999) .
- [36] C. Wenger, J.-P. Champion, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 59 .71(1998) .

- [37] B.I. Z`hilinskiĭ, Opt. Spectrosc. 51.262(1981) .
- [38] M. Rey, V. Boudon, C. Wenger, G. Pierre, B. Sartakov, J. Mol. Spectrosc. 219.13(2003) .
- [39] O. Ouardi, A. Kaarour, M. Meskine, J. Mol. Spectrosc. 306, 26-32 (2014)

## **RESUME**

L'analyse de 2308 données sur la molécule  $^{12}\text{CD}_4$  dans la région  $900\text{ cm}^{-1} - 2400\text{ cm}^{-1}$  fait intervenir deux polyades froides :

- la Diade ( $\nu_2, \nu_4$ ) - niveau de base GS
- la Pentade ( $2\nu_4, \nu_2 + \nu_4, \nu_1, 2\nu_2, \nu_3$ ) - niveau de base GS

L'étude détaillée des intensités dépend, via les vecteurs propres, de celle des niveaux d'énergie et, en pratique lui succède. De ce fait, l'analyse raie par raie des intensités suppose une analyse préalable très fine des positions de raies. La qualité des résultats obtenus dans une analyse d'intensités dépend en grande partie de l'analyse des positions. C'est pour cela, et puisque aucun travail antérieur sur la molécule  $^{12}\text{CD}_4$  et dans les régions en questions, n'a été fait, nous avons analysé finement les positions, avant de faire tout calcul.

Ainsi l'analyse des 2308 données nous a permis de déterminer 125 paramètres de l'Hamiltonien effectif propres à la Pentade avec une très bonne précision. Ces 125 paramètres nous ont permis de faire un calcul complet des spectres de la Pentade et de la Diade.

À partir de ces paramètres, nous avons montré, et sans avoir en notre possession un spectre expérimental à analyser, comment prédire le spectre complet de l'Octade ( $3\nu_4, \nu_2 + 2\nu_4, \nu_1 + \nu_4, \nu_3 + \nu_4, 2\nu_2 + \nu_4, \nu_1 + \nu_2, \nu_2 + \nu_3, 3\nu_2$ ) - niveau de Base GS à partir des résultats obtenus dans l'étude de la Pentade.,

### **Mots clés :**

$^{12}\text{CD}_4$ , Hamiltonien, Moment dipolaire, spectre infrarouge, XTDS, SPVIEW

## **Abstract**

The analysis of 2308 data of the  $^{12}\text{CD}_4$  molecule, in the region  $900\text{ cm}^{-1}$  to  $2400\text{ cm}^{-1}$  involves the two cold polyads:

- The Dyad ( $\nu_2, \nu_4$ ) - basics GS
- The pentad ( $2\nu_4, \nu_2 + \nu_4, \nu_1, 2\nu_2, \nu_3$ ) - Basic level GS

The detailed study of intensities depends via the eigenvectors of the energy levels and, in practice succeeded him. So, the analysis of the intensities presupposes a very fine preliminary analysis of the line positions. And the quality of the results in an intensity analysis largely depends on the analysis of the positions. For this, and since no previous work on  $^{12}\text{CD}_4$  molecule and in the regions issues has been done, we closely analyze the positions before making any calculation. And Analysis of 2308 data allowed us to identify 125 effective Hamiltonian parameters specific to Pentad with very good accuracy. 125 These settings have allowed us to make a complete calculation of the spectra of Pentad and Dyad.

From these parameters, we have shown, without having in our possession an experimental spectrum analyze, how to predict the full spectrum of the Octad ( $3\nu_4, \nu_2 + 2\nu_4, \nu_1 + \nu_4, \nu_3 + \nu_4, 2\nu_2 + \nu_4, \nu_1 + \nu_2, \nu_2 + \nu_3, 3\nu_2$ ) - Level Base GS from the results obtained in the study of Pentad

### **Keywords:**

$^{12}\text{CD}_4$ , Hamiltonian, Dipole moment, Infrared spectrum, XTDS, SPVIEW

## ملخص

تحليل 2308 معطى للجزيء  $^{12}\text{CD}_4$  ، في المنطقة 900 سم<sup>-1</sup> - 2400 سم<sup>-1</sup> ويشمل اثنين من poliades الباردة:  
-الثنائية Diade ( $v_4, v_2$ ) - المستوى الأساسي GS  
- الخماسية Pentade ( $2v_4, v_2, v_4+v_2, v_1, 2v_2, v_3$ ) - المستوى الأساسي GS  
الدراسة التفصيلية للشدات تعتمد عبر الأشعة الذاتية على دراسة مستويات الطاقة التي تسبقها، التحليل للشدات اشعاع بإشعاع يفترض التحليل المسبق والجيد لموضعها.  
نوعية النتائج المتحصل عليها في تحليل الشدات يعتمد إلى حد كبير على تحليل مواضعها. لهذا، و بما أن لم يتم أي دراسة سابقة على جزيء  $^{12}\text{CD}_4$  في المنطقة المذكورة قمنا بتحليل دقيق لمواضع الاشعاعات قبل أي حساب .  
وبالتالي سمح لنا تحليل 2308 معطى بتحديد 125 معاملا لهاملتون خاص لخماسية (Pentade) بدقة جيدة . هذه ال 125 معاملا سمحت لنا بحساب الطيف الكامل الخاص بالخماسية (Pentade) و الثنائية (Diade).  
من هذه المعاملات ، قد بينا ،و بدون أن يكون بحوزتنا طيف تجريبي نحلله، كيف نتنبأ بالطيف الكامل لثمانية (Octade)( $3v_2, v_2+v_3, v_1+v_2, 2v_2+v_4, v_3+v_4, v_1+v_4, v_2+2v_4, 3v_4$ )- مستوى الأساسي GS من النتائج التي تم الحصول عليها في دراسة خماسية(Pentade)

## كلمات البحث

$^{12}\text{CD}_4$  ، هاملتون ، عزم ثنائي القطب ، الطيف تحت الحمراء ، SPVIEW ، XTDS