Analyse de la structure rotationnelle de la bande de vibration-rotation v_3 du dioxyde d'azote

V. Dana

► To cite this version:

V. Dana. Analyse de la structure rotationnelle de la bande de vibration-rotation v_3 du dioxyde d'azote. *Revue de Physique Appliquée*, 1974, 9 (4), pp.711-720. 10.1051/rphysap:0197400904071100 . jpa-00243838

HAL Id: jpa-00243838

<https://hal.science/jpa-00243838>

Submitted on 1 Jan 1974

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Classification
Physics Abstracts
5.444

ANALYSE DE LA STRUCTURE ROTATIONNELLE DE LA BANDE DE VIBRATION-ROTATION ν_3 DU DIOXYDE D'AZOTE

V. DANA

Laboratoire de Spectroscopie Moléculaire
Université de Paris VI, 4, place Jussieu, 75230 Paris Cedex 05, France

(Reçu le 2 janvier 1974, révisé le 29 janvier 1974)

Résumé. — Le travail présenté ici est une analyse de la structure rotationnelle de la bande de vibration ν_3 du dioxyde d'azote centrée vers $1\,616,844\text{ cm}^{-1}$. Le spectre d'absorption de cette bande, présenté dans une précédente publication [1], a été enregistré à l'aide d'un spectromètre à grilles dont la largeur de la fonction d'appareil est d'environ $0,06\text{ cm}^{-1}$.

L'ajustement des constantes relatives au niveau supérieur de la transition a été réalisé à l'aide d'un programme de moindres carrés itératif dans lequel le calcul des énergies des niveaux rotationnels est fondé sur le formalisme de Watson [2].

Les nombres d'ondes calculés à partir de ces constantes sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux.

Abstract. — The spectroscopic constants of the (001) level of nitrogen dioxide are computed from a high resolution absorption spectrum of the ν_3 band around $1\,616\text{ cm}^{-1}$ recorded on a « dual-grill spectrometer. The spectrum (described previously [1]) was obtained with a resolution of 0.06 cm^{-1} . The constants are computed by a least squares method. These constants enabled us to obtain theoretical wave numbers which are in good agreement with the experimental results.

1. Introduction. — L'analyse de la structure rotationnelle du spectre d'absorption du dioxyde d'azote a fait l'objet de nombreux travaux. Parmi les plus récents citons ceux effectués par Bird et coll. [3] sur le spectre de rotation pure et ceux de Blank, Olman et Hause [4-5-6] dans l'infrarouge proche.

La bande de vibration-rotation ν_3 a, d'autre part, été étudiée par E. T. Arakawa et A. H. Nielsen [7] et plus récemment par Hurlock [8]. Cabana [9] s'est intéressé à la structure rotationnelle de la bande ν_2 et a réalisé une synthèse des travaux relatifs à l'état vibrationnel fondamental, il a obtenu les constantes présentées dans le tableau I. Dans le cadre de l'étude spectroscopique des constituants minoritaires de l'atmosphère, réalisée en collaboration avec l'Office

National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales, nous avons entrepris l'analyse la plus complète possible de la structure rotationnelle de la bande ν_3 et déterminé les valeurs des constantes relatives au niveau vibrationnel 001.

2. Description du spectre d'absorption. — La molécule NO_2 est une toupie légèrement asymétrique ($\kappa \simeq -0,994$) plane, appartenant au groupe de symétrie C_{2v} . Cette molécule possède un électron libre, ce qui entraîne un dédoublement des niveaux rotationnels et par conséquent un dédoublement des raies de vibration-rotation.

La bande étudiée est du type A ; les règles de sélection qui régissent les transitions vibro-rotationnelles sont, avec une excellente approximation, celles des bandes parallèles des toupies symétriques

$$\Delta N = 0 \pm 1 \quad \text{si } K_{-1} \neq 0$$

$$\Delta N = \pm 1 \quad \text{si } K_{-1} = 0$$

$$\Delta K_{-1} = 0$$

N caractérise le moment angulaire de rotation pure contrairement à J qui tient compte de la rotation de la molécule et du moment angulaire de spin électronique.

Rappelons que dans le cas de NO_2 , dans un état vibrationnel donné, un niveau sur deux est peuplé. Ces niveaux sont définis par les relations suivantes :

$$K_{-1} + K_{+1} = \text{pair pour l'état vibrationnel } 000$$

$$K_{-1} + K_{+1} = \text{impair pour l'état vibrationnel } 001.$$

TABLEAU I

Constantes relatives à l'état vibrationnel (000),
proposées par Cabana (en cm^{-1}).

A	8,002 37
B	0,433 705 9
C	0,410 044 85
Δ_K	$2,690\,1 \times 10^{-3}$
Δ_{NK}	$-1,957\,9 \times 10^{-5}$
Δ_N	$3,112 \times 10^{-7}$
δ_K	$2,4 \times 10^{-8}$
δ_N	$3,022 \times 10^{-8}$
H_K	$2,157 \times 10^{-6}$

Le spectre d'absorption de la bande ν_3 , a été enregistré à l'ONERA par J. C. Fontanella à l'aide d'un spectromètre à grilles dans l'intervalle spectral compris entre 1 587,6 et 1 639 cm^{-1} . Ce spectre ainsi qu'une analyse sommaire de la structure rotationnelle ont été présentés dans une précédente publication [1].

Rappelons brièvement les conditions d'enregistrement :

Largeur de la fonction d'appareil : 0,06 cm^{-1} .
Rapport signal sur bruit : 50.
Pression de gaz : quelques millimètres de mercure.
Longueur de cuve : 10 cm.
Température du gaz : 296 K.

Notons que la résolution du spectromètre ne permet pas d'observer le dédoublement des raies de vibration-rotation.

Rappelons que N_2O_4 , qui est en équilibre chimique avec NO_2 , est inactif dans la région de 6,18 μ . Les bandes de vibration les plus proches étant centrées vers 1 260 et 1 750 cm^{-1} .

3. Méthode de calcul. Résultats. — La bande ν_3 possède une structure rotationnelle très serrée qui s'étend, si l'on considère les raies les plus intenses ($N'' \leq 30$), sur un domaine spectral large d'environ 60 cm^{-1} ; il en résulte que les raies isolées utilisables dans nos calculs sont peu nombreuses (160). Cela nous a conduit à limiter notre étude uniquement à la détermination des constantes relatives à l'état vibrationnel fondamental les constantes proposées par Cabana.

L'ajustement de ces constantes a été réalisé à l'aide d'un programme de moindres carrés itératif établi par C. Camy-Perret et J. M. Flaud, dans lequel le calcul des énergies des niveaux rotationnels est fondé sur le formalisme développé par Watson [2].

Les calculs ont été réalisés dans la représentation I' la plus adaptée au cas de NO_2 , l'hamiltonien d'interaction entre le spin électronique et le moment angulaire de rotation n'a pas été introduit dans notre programme. Les poids statistiques des 160 raies isolées prises en considération dans les calculs, sont tous égaux à 1.

Dans le tableau II figurent les valeurs des constantes relatives à l'état vibrationnel (001) ainsi que leur intervalle de confiance pour un seuil de 99 %.

Dans ce tableau n'apparaissent pas les valeurs de δ_K , δ_N et de H_K , la précision des données expérimentales (0,01 cm^{-1} environ) ne permettant pas une

TABLEAU II

Constantes relatives à l'état vibrationnel (001).
(Les intervalles de confiance sont donnés pour un seuil de 99 %) (en cm^{-1}).

ν_0	1 616,843 8	$\pm 5,0 \times 10^{-3}$
A	7,774 11	$\pm 4,5 \times 10^{-4}$
B	0,430 945	$\pm 3,2 \times 10^{-5}$
C	0,407 883	$\pm 3,4 \times 10^{-5}$
Δ_K	$2,563 4 \times 10^{-3}$	$\pm 6,9 \times 10^{-6}$
Δ_{NK}	$-2,523 \times 10^{-5}$	$\pm 6,8 \times 10^{-7}$
Δ_N	$3,21 \times 10^{-7}$	$\pm 3,3 \times 10^{-8}$

détermination correcte de ces constantes ; nous leur avons attribué les valeurs des constantes correspondantes relatives à l'état vibrationnel fondamental.

L'ensemble des constantes ainsi défini nous a permis de recalculer les nombres d'ondes des transitions qui apparaissent dans l'intervalle spectral enregistré en nous limitant à $N'' \leq 30$ et $R_{-1} \leq 8$.

Les nombres d'ondes calculés et observés des raies des branches P et R sont regroupés dans le tableau III. On peut constater dans le cas des raies isolées un bon accord entre les deux ensembles de valeurs, compte tenu des erreurs expérimentales ; l'écart quadratique moyen, pour les nombres d'ondes des raies isolées, valant 0,007 5 cm^{-1} .

Dans la dernière colonne du tableau III l'astérisque indique que la raie fait partie d'un ensemble de raies non résolu.

Nous avons dénombré une vingtaine de raies des branches Q isolées que nous avons introduites dans nos calculs ; nous ne les avons pas présentées dans le tableau III car elles sont peu intenses et ne présentent pas d'intérêt pour les études spectroscopiques de l'atmosphère.

4. Conclusion. — Les constantes de l'état vibrationnel (001) ont été déterminées avec une précision suffisante pour analyser les spectres atmosphériques dont nous disposons actuellement. Toutefois l'étude d'un spectre mieux résolu de la bande de vibration ν_3 permettra d'améliorer la précision de ces résultats.

Remerciements. — Je remercie J. C. Fontanella de l'O. N. E. R. A. pour sa collaboration sur le plan expérimental, C. Camy-Perret et J. M. Flaud pour les conseils fructueux qu'ils m'ont prodigués, N. Gasgnier des Tables Internationales de Constantes, pour sa contribution technique.

Bibliographie

- [1] DANA, V., FONTANELLA, J. C., *Nouv. Revue Opt.* **4** (1973) 237.
- [2] WATSON, J. K. G., *J. Chem. Phys.* **46** (1967) 1935.
- [3] BIRD, G. R., HUNT, G. R., GEBBIE, H. A. et STONE, N. W. B., *J. Mol. Spectrosc.* **33** (1970) 244.
- [4] OLMAN, M. D. et HAUSE, C. D., *J. Mol. Spectrosc.* **26** (1968) 241.
- [5] BLANK, R. E., OLMAN, M. D. et HAUSE, C. D., *J. Mol. Spectrosc.* **33** (1970) 109.
- [6] BLANK, R. E., HAUSE, C. D., *J. Mol. Spectrosc.* **34** (1970) 478.
- [7] ARAKAWA, E. T. et NIELSEN, A. H., *J. Mol. Spectrosc.* **2** (1958) 413.
- [8] HURLOCK, S. C., Thèse, Ohio State University, Columbus, 1970.
- [9] LAURIN, M., CABANA, A. et LAFFERTY, W. J., communication, Colloque de Spectroscopie moléculaire à haute résolution (Tours, sept. 1973).

TABLEAU III a.

NOMBRES QUANTIQUES						NOMBRE D'ONDES CALCULE	NOMBRE D'ONDES OBSERVE	OBS-CALC	ENERGIE DU NIVEAU DE BASE	
N"	K _A "	K _B "	N'	K _A '	K _B '					
2	0	2	1	0	1	1615.151	1615.157	.006	2.532	
2	1	1	1	1	0	1614.901	1614.911	.010	10.145	
3	1	3	2	1	2	1614.103	1614.103	.000	12.572	*
3	2	2	2	2	1	1613.391	1613.436	.045	35.344	*
4	0	4	3	0	3	1613.436	1613.436	.000	8.440	*
4	1	3	3	1	2	1613.163	1613.174	.011	16.135	
4	2	2	3	2	1	1612.534	1612.554	.020	38.722	*
4	3	1	3	3	0	1611.415	1611.415	.000	76.451	*
5	1	5	4	1	4	1612.403	1612.394	-.009	20.065	
5	2	4	4	2	3	1611.669	1611.685	.016	42.942	*
5	3	3	4	3	2	1610.550	1610.592	.042	80.673	*
5	4	2	4	4	1	1608.992	1609.038	.046	133.276	*
6	0	6	5	0	5	1611.701	1611.685	-.016	17.722	*
6	1	5	5	1	4	1611.403	1611.415	.012	25.548	*
6	2	4	5	2	3	1610.797	1610.802	.005	48.011	*
6	3	3	5	3	2	1609.678	1609.635	-.043	85.741	*
6	4	2	5	4	1	1608.121	1608.157	.036	138.345	*
6	5	1	5	5	0	1606.137	1606.140	.003	205.607	*
7	1	7	6	1	6	1610.681	1610.680	-.001	30.887	
7	2	6	6	2	5	1609.922	1609.930	.008	53.917	*
7	3	5	6	3	4	1608.802	1608.795	-.007	91.652	
7	4	4	6	4	3	1607.245	1607.248	.003	144.258	*
7	5	3	6	5	2	1605.262	1605.244	-.018	211.522	*
7	6	2	6	6	1	1602.866	1602.854	-.012	293.179	
8	0	8	7	0	7	1609.946	1609.930	-.016	30.376	*
8	1	7	7	1	6	1609.622	1609.635	.013	38.382	*
8	2	6	7	2	5	1609.037	1609.038	.001	60.681	
8	3	5	7	3	4	1607.921	1607.923	.002	98.408	
8	4	4	7	4	3	1606.364	1606.369	.005	151.016	*
8	5	3	7	5	2	1604.381	1604.350	-.031	218.283	*
8	6	2	7	6	1	1601.985	1601.972	-.013	299.944	
8	7	1	7	7	0	1599.193	1599.226	.033	395.686	*
9	1	9	8	1	8	1608.938	1608.937	-.001	45.036	
9	2	8	8	2	7	1608.155	1608.157	.002	68.267	*
9	3	7	8	3	6	1607.034	1607.033	-.001	106.009	
9	4	6	8	4	5	1605.478	1605.467	-.011	158.619	*
9	5	5	8	5	4	1603.495	1603.522	.027	225.889	*
9	6	4	8	6	3	1601.100	1601.177	.077	307.553	*
9	7	3	8	7	2	1598.309	1598.295	-.014	403.300	
9	8	2	8	8	1	1595.141	1595.205	.064	512.783	*
10	0	10	9	0	9	1608.170	1608.157	-.013	46.398	*
10	1	9	9	1	8	1607.819	1607.824	.005	54.637	
10	2	8	9	2	7	1607.255	1607.248	-.007	76.734	
10	3	7	9	3	6	1606.142	1606.140	-.002	114.454	
10	4	6	9	4	5	1604.586	1604.573	-.013	167.066	*
10	5	5	9	5	4	1602.605	1602.625	.020	234.339	
10	6	4	9	6	3	1600.210	1600.224	.014	316.008	
10	7	3	9	7	2	1597.419	1597.420	.001	411.760	*
10	8	2	9	8	1	1594.253	1594.255	.002	521.248	*
11	1	11	10	1	10	1607.174	1607.176	.002	62.513	
11	2	10	10	2	9	1606.367	1606.369	.002	85.991	*

TABLEAU III b.

NOMBRES QUANTIQUES						NOMBRE D'ONDES CALCULÉ	NOMBRE D'ONDES OBSERVÉ	OBS-CALC	ENERGIE DU NIVEAU DE BASE	
N"	K ₋₁ "	K ₊₁ "	N'	K ₋₁ '	K ₊₁ '					
11	3	9	10	3	8	1605.245	1605.244	-.001	123.743	
11	4	8	10	4	7	1603.690	1603.693	.003	176.358	
11	5	7	10	5	6	1601.709	1601.756	.047	243.635	*
11	6	6	10	6	5	1599.315	1599.324	.009	325.308	
11	7	5	10	7	4	1596.526	1596.578	.052	421.065	*
11	8	4	10	8	3	1593.360	1593.283	-.077	530.560	*
12	0	12	11	0	11	1606.376	1606.369	-.007	65.783	*
12	1	11	11	1	10	1605.996	1605.995	-.001	74.310	
12	2	10	11	2	9	1605.450	1605.467	.017	96.172	*
12	3	9	11	3	8	1604.343	1604.350	.007	133.877	
12	4	8	11	4	7	1602.788	1602.789	.001	186.494	
12	5	7	11	5	6	1600.808	1600.820	.012	253.775	
12	6	6	11	6	5	1598.415	1598.425	.010	335.453	
12	7	5	11	7	4	1595.627	1595.624	-.003	431.216	*
12	8	4	11	8	3	1592.463	1592.499	.036	540.718	*
13	1	13	12	1	12	1605.390	1605.385	-.005	83.314	
13	2	12	12	2	11	1604.557	1604.573	.016	107.089	*
13	3	11	12	3	10	1603.435	1603.435	.000	144.855	
13	4	10	12	4	9	1604.604	1604.573	-.031	194.752	*
13	5	9	12	5	8	1599.902	1599.900	-.002	264.760	*
13	6	8	12	6	7	1597.511	1597.520	.009	346.443	
13	7	7	12	7	6	1594.724	1594.764	.040	442.213	*
13	8	6	12	8	5	1591.560	1591.540	-.020	551.723	*
14	0	14	13	0	13	1604.563	1604.573	.010	88.525	*
14	1	13	13	1	12	1604.152	1604.154	.002	97.399	
14	2	12	13	2	11	1603.622	1603.609	-.013	118.999	*
14	3	11	13	3	10	1602.522	1602.519	-.003	156.679	
14	4	10	13	4	9	1600.970	1600.964	-.006	209.300	
14	5	9	13	5	8	1598.992	1599.003	.011	276.589	*
14	6	8	13	6	7	1596.601	1596.578	-.023	358.278	*
14	7	7	13	7	6	1593.816	1593.844	.028	454.055	*
14	8	6	13	8	5	1590.654	1590.682	.028	563.573	*
15	1	15	14	1	14	1603.585	1603.609	.024	107.439	*
15	2	14	14	2	13	1602.729	1602.738	.009	131.557	*
15	3	13	14	3	12	1601.604	1601.604	.000	169.345	
15	4	12	14	4	11	1600.052	1600.041	-.011	221.970	
15	5	11	14	5	10	1598.075	1598.064	-.011	289.264	*
15	6	10	14	6	9	1595.686	1595.685	-.001	370.959	
15	7	9	14	7	8	1592.902	1592.923	.021	466.743	*
15	8	8	14	8	7	1589.743	1589.792	.049	576.269	*
16	0	16	15	0	15	1602.731	1602.738	.007	114.619	*
16	1	15	15	1	14	1602.287	1602.283	-.004	123.902	
16	2	14	15	2	13	1601.772	1601.756	-.016	145.218	*
16	3	13	15	3	12	1600.679	1600.674	-.005	182.859	
16	4	12	15	4	11	1599.130	1599.126	-.004	235.484	
16	5	11	15	5	10	1597.155	1597.131	-.024	302.782	*
16	6	10	15	6	9	1594.767	1594.764	-.003	384.484	*
16	7	9	15	7	8	1591.985	1591.998	.013	480.276	*
16	8	8	15	8	7	1588.828	1588.872	.044	589.811	*
17	1	17	16	1	16	1601.760	1601.756	-.004	134.885	*
17	2	16	16	2	15	1600.878	1600.867	-.011	159.396	*

TABLEAU III c.

NOMBRES QUANTIQUES						NOMBRE	NOMBRE	OBS-CALC	ENERGIE	
N"	K ₁ "	K ₂ "	N'	K ₁ '	K ₂ '	D'ONDES CALCULE	D'ONDES OBSERVE		DU NIVEAU DE BASE	
17	3	15	16	3	14	1599.752	1599.742	-.010	197.212	
17	4	14	16	4	13	1598.203	1598.194	-.009	249.842	
17	5	13	16	5	12	1596.229	1596.238	.009	317.145	
17	6	12	16	6	11	1593.842	1593.844	.002	398.854	*
17	7	11	16	7	10	1591.062	1591.049	-.013	494.654	*
17	8	10	16	8	9	1587.907	1587.890	-.017	604.199	*
18	0	18	17	0	17	1600.881	1600.867	-.014	144.057	*
18	1	17	17	1	16	1600.402	1600.396	-.006	153.816	
18	2	16	17	2	15	1599.898	1599.900	.002	174.834	*
18	3	15	17	3	14	1598.817	1598.807	-.010	212.416	
18	4	14	17	4	13	1597.270	1597.264	-.006	265.044	
18	5	13	17	5	12	1595.297	1595.302	.005	332.353	
18	6	12	17	6	11	1592.913	1592.923	.010	414.068	*
18	7	11	17	7	10	1590.134	1590.164	.030	509.878	*
19	1	19	18	1	18	1599.916	1599.900	-.016	165.649	*
19	2	18	18	2	17	1599.008	1599.003	-.005	190.601	*
19	3	17	18	3	16	1597.878	1597.866	-.012	228.456	
19	4	16	18	4	15	1596.332	1596.323	-.009	281.091	
19	5	15	18	5	14	1594.361	1594.364	.003	348.405	
19	6	14	18	6	13	1591.979	1591.998	.019	430.127	*
19	7	13	18	7	12	1589.203	1589.213	.010	525.946	*
20	0	20	19	0	19	1599.013	1599.003	-.010	176.832	*
20	1	19	19	1	18	1598.496	1598.486	-.010	187.139	
20	2	18	19	2	17	1598.001	1598.006	.005	207.851	
20	3	17	19	3	16	1596.932	1596.923	-.009	245.352	
20	4	16	19	4	15	1595.390	1595.377	-.013	297.981	
20	5	15	19	5	14	1593.421	1593.444	.023	365.300	*
20	6	14	19	6	13	1591.040	1591.049	.009	447.031	*
20	7	13	19	7	12	1588.266	1588.272	.006	542.859	
21	1	21	20	1	20	1598.050	1598.064	.014	199.730	
21	2	20	20	2	19	1597.116	1597.131	.015	225.172	*
21	3	19	20	3	18	1595.984	1595.974	-.010	263.077	
21	4	18	20	4	17	1594.441	1594.431	-.010	315.716	
21	5	17	20	5	16	1592.474	1592.499	.025	383.040	*
21	6	16	20	6	15	1590.096	1590.086	-.010	464.779	*
22	0	22	21	0	21	1597.126	1597.131	.005	212.935	*
22	1	21	21	1	20	1596.571	1596.578	.007	223.865	*
22	2	20	21	2	19	1596.081	1596.075	-.006	244.273	
22	3	19	21	3	18	1595.027	1595.040	.013	281.666	
22	4	18	21	4	17	1593.488	1593.444	-.044	334.294	*
22	5	17	21	5	16	1591.523	1591.540	.017	401.624	*
22	6	16	21	6	15	1589.147	1589.159	.012	483.371	*
23	1	23	22	1	22	1596.166	1596.159	-.007	237.123	
23	2	22	22	2	21	1595.206	1595.205	-.001	263.104	*
23	3	21	22	3	20	1594.069	1594.052	-.017	301.073	
23	4	20	22	4	19	1592.530	1592.499	-.031	353.716	*
23	5	19	22	5	18	1590.566	1590.580	.014	421.052	*
24	0	24	23	0	23	1595.221	1595.205	-.016	252.358	*
24	1	23	23	1	22	1594.624	1594.619	-.005	263.992	
24	2	22	23	2	21	1594.136	1594.129	-.007	284.107	
24	3	21	23	3	20	1593.099	1593.091	-.008	321.360	

TABLEAU III d.

NOMBRES QUANTIQUES						NOMBRE D'ONDES CALCULÉ	NOMBRE D'ONDES OBSERVÉ	OBS-CALC	ENERGIE DU NIVEAU DE BASE	
N"	K ₋₁ "	K ₊₁ "	N'	K ₋₁ '	K ₊₁ '					
24	4	20	23	4	19	1591.566	1591.540	-.026	373.983	*
24	5	19	23	5	18	1589.606	1589.612	.006	441.323	*
25	1	25	24	1	24	1594.260	1594.255	-.005	277.827	
25	2	24	24	2	23	1593.274	1593.283	.009	304.396	*
25	3	23	24	3	22	1592.133	1592.146	.013	342.445	*
25	4	22	24	4	21	1590.598	1590.580	-.018	395.092	*
25	5	21	24	5	20	1588.639	1588.649	.010	462.438	
26	0	26	25	0	25	1593.299	1593.283	-.016	295.091	*
26	1	25	25	1	24	1592.659	1592.661	.002	307.513	
26	2	24	25	2	23	1592.169	1592.146	-.023	327.354	*
26	3	23	25	3	22	1591.151	1591.133	-.018	364.432	
26	4	22	25	4	21	1589.624	1589.612	-.012	417.045	*
26	5	21	25	5	20	1587.668	1587.662	-.006	484.396	*
27	1	27	26	1	26	1592.335	1592.334	-.001	321.838	
27	2	26	26	2	25	1591.322	1591.338	.016	349.045	*
27	3	25	26	3	24	1590.176	1590.164	-.012	387.191	*
27	4	24	26	4	23	1588.645	1588.640	-.005	439.841	*
28	0	28	27	0	27	1591.359	1591.338	-.021	341.126	*
28	1	27	27	1	26	1590.672	1590.682	.010	354.426	
28	2	26	27	2	25	1590.179	1590.164	-.015	374.020	*
28	3	25	27	3	24	1589.181	1589.213	.032	410.884	*
28	4	24	27	4	23	1587.661	1587.662	.001	463.481	*
29	1	29	28	1	28	1590.390	1590.383	-.007	369.152	
29	2	28	28	2	27	1589.351	1589.375	.024	397.046	*
29	3	27	28	3	26	1588.198	1588.178	-.020	435.310	*
30	0	30	29	0	29	1589.400	1589.375	-.025	390.455	*
30	1	29	29	1	28	1588.668	1588.649	-.019	404.722	*
30	2	28	29	2	27	1588.166	1588.178	.012	424.108	*
0	0	0	1	0	1	1617.683	1617.685	.002	.000	
1	1	1	2	1	2	1618.265	1618.251	-.014	8.410	*
2	0	2	3	0	3	1619.344	1619.336	-.008	2.532	
2	1	1	3	1	2	1619.153	1619.15	.006	10.145	
2	2	0	3	2	1	1618.445	1618.411	-.034	32.811	
3	1	3	4	1	4	1619.896	1619.889	-.007	12.572	
3	2	2	4	2	3	1619.267	1619.262	-.005	35.344	
3	3	1	4	3	2	1618.150	1618.113	-.037	73.073	*
4	0	4	5	0	5	1620.983	1620.998	.015	8.440	*
4	1	3	5	1	4	1620.816	1620.814	-.002	16.135	
4	2	2	5	2	3	1620.086	1620.093	.007	38.722	
4	3	1	5	3	2	1618.968	1618.942	-.026	76.451	*
4	4	0	5	4	1	1617.414	1617.421	.007	129.052	*
5	1	5	6	1	6	1621.503	1621.499	-.004	20.065	
5	2	4	6	2	5	1620.897	1620.902	.005	42.942	
5	3	3	6	3	4	1619.781	1619.785	.004	80.673	*
5	4	2	6	4	3	1618.227	1618.251	.024	133.276	*
5	5	1	6	5	2	1616.248	1616.225	-.023	200.536	*
6	0	6	7	0	7	1622.600	1622.595	-.005	17.722	*
6	1	5	7	1	6	1622.456	1622.491	.035	25.548	*
6	2	4	7	2	5	1621.707	1621.717	.010	48.011	*
6	3	3	7	3	4	1620.588	1620.618	.030	85.741	*
6	4	2	7	4	3	1619.035	1619.016	-.019	138.345	

TABLEAU III e.

NOMBRES QUANTIQUES						NOMBRE D'ONDES CALCULÉ	NOMBRE D'ONDES OBSERVÉ	OBS-CALC	ENERGIE DU NIVEAU DE BASE	
N"	K ₋₁ "	K ₊₁ "	N'	K ₋₁ '	K ₊₁ '					
6	5	1	7	5	2	1617.057	1617.037	-.020	205.607	*
6	6	0	7	6	1	1614.668	1614.656	-.012	287.261	*
7	1	7	8	1	8	1623.087	1623.093	.006	30.887	
7	2	6	8	2	7	1622.505	1622.491	-.014	53.917	*
7	3	5	8	3	6	1621.391	1621.408	.017	91.652	*
7	4	4	8	4	5	1619.839	1619.889	.050	144.258	*
7	5	3	8	5	4	1617.862	1617.836	-.026	211.522	*
7	6	2	8	6	3	1615.474	1615.443	-.031	293.179	*
7	7	1	8	7	2	1612.691	1612.722	.031	388.918	*
8	0	8	9	0	9	1624.192	1624.197	.005	30.376	*
8	1	7	9	1	8	1624.074	1624.093	.019	38.382	*
8	2	6	9	2	7	1623.308	1623.312	.004	60.681	*
8	3	5	9	3	6	1622.188	1622.202	.014	98.408	*
8	4	4	9	4	5	1620.636	1620.618	-.018	151.016	*
8	5	3	9	5	4	1618.661	1618.641	-.020	218.283	*
8	6	2	9	6	3	1616.274	1616.225	-.049	299.944	*
8	7	1	9	7	2	1613.493	1613.436	-.057	395.686	*
8	8	0	9	8	1	1610.338	1610.324	-.014	505.163	*
9	1	9	10	1	10	1624.651	1624.655	.004	45.036	
9	2	8	10	2	9	1624.091	1624.093	.002	68.267	*
9	3	7	10	3	8	1622.979	1622.991	.012	106.009	*
9	4	6	10	4	7	1621.429	1621.408	-.021	158.619	*
9	5	5	10	5	6	1619.455	1619.437	-.018	225.889	*
9	6	4	10	6	5	1617.070	1617.037	-.033	307.553	*
9	7	3	10	7	4	1614.291	1614.284	-.007	403.300	*
9	8	2	10	8	3	1611.137	1611.217	.080	512.783	*
10	0	10	11	0	11	1625.761	1625.764	.003	46.398	
10	1	9	11	1	10	1625.669	1625.649	-.020	54.637	*
10	2	8	11	2	9	1624.888	1624.890	.002	76.734	*
10	3	7	11	3	8	1623.766	1623.779	.013	114.454	*
10	4	6	11	4	7	1622.216	1622.202	-.014	167.066	*
10	5	5	11	5	6	1620.244	1620.236	-.008	234.339	*
10	6	4	11	6	5	1617.860	1617.836	-.024	316.008	*
10	7	3	11	7	4	1615.083	1615.066	-.017	411.760	*
10	8	2	11	8	3	1611.933	1611.942	.009	521.248	
11	1	11	12	1	12	1626.191	1626.201	.010	62.513	*
11	2	10	12	2	11	1625.655	1625.649	-.006	85.991	*
11	3	9	12	3	10	1624.547	1624.551	.004	123.743	
11	4	8	12	4	9	1622.998	1622.991	-.007	176.358	*
11	5	7	12	5	8	1621.027	1620.998	-.029	243.635	*
11	6	6	12	6	7	1618.646	1618.641	-.005	325.308	*
11	7	5	12	7	6	1615.872	1615.911	.039	421.065	*
11	8	4	12	8	5	1612.723	1612.722	-.001	530.560	*
12	0	12	13	0	13	1627.305	1627.303	-.002	65.783	
12	1	11	13	1	12	1627.241	1627.222	-.019	74.310	*
12	2	10	13	2	11	1626.449	1626.451	.002	96.172	
12	3	9	13	3	10	1625.324	1625.321	-.003	133.877	*
12	4	8	13	4	9	1623.776	1623.779	.003	186.494	*
12	5	7	13	5	8	1621.806	1621.822	.016	253.775	*
12	6	6	13	6	7	1619.426	1619.437	.011	335.453	*
12	7	5	13	7	6	1616.655	1616.643	-.012	431.216	

TABLEAU III f.

NOMBRES QUANTIQUES						NOMBRE	NOMBRE	OBS-CALC	ENERGIE	
N"	K ₋₁ "	K ₊₁ "	N'	K ₋₁ '	K ₊₁ '	D'ONDES CALCULE	D'ONDES OBSERVE		DU NIVEAU DE BASE	
12	8	4	13	8	5	1613.509	1613.436	-.073	540.718	*
13	1	13	14	1	14	1627.710	1627.708	-.002	83.314	
13	2	12	14	2	13	1627.197	1627.222	.025	107.089	*
13	3	11	14	3	12	1626.094	1626.089	-.005	144.855	*
13	4	10	14	4	11	1627.270	1627.303	.033	194.752	*
13	5	9	14	5	10	1622.579	1622.595	.016	264.760	*
13	6	8	14	6	9	1620.202	1620.236	.034	346.443	*
13	7	7	14	7	8	1617.432	1617.421	-.011	442.213	*
13	8	6	14	8	7	1614.289	1614.284	-.005	551.723	*
14	0	14	15	0	15	1628.825	1628.807	-.018	88.525	*
14	1	13	15	1	14	1628.790	1628.807	.017	97.399	*
14	2	12	15	2	13	1627.991	1627.991	.000	118.999	
14	3	11	15	3	12	1626.859	1626.842	-.017	156.679	*
14	4	10	15	4	11	1625.314	1625.321	.007	209.300	*
14	5	9	15	5	10	1623.348	1623.312	-.036	276.589	*
14	6	8	15	6	9	1620.973	1620.998	.025	358.278	*
14	7	7	15	7	8	1618.206	1618.251	.045	454.055	*
14	8	6	15	8	7	1615.066	1615.066	.000	563.573	*
15	1	15	16	1	16	1629.206	1629.202	-.004	107.439	*
15	2	14	16	2	15	1628.717	1628.717	.000	131.557	*
15	3	13	16	3	14	1627.619	1627.608	-.011	169.345	*
15	4	12	16	4	13	1626.075	1626.089	.014	221.970	*
15	5	11	16	5	12	1624.110	1624.093	-.017	289.264	*
15	6	10	16	6	11	1621.737	1621.717	-.020	370.959	*
15	7	9	16	7	10	1618.973	1618.942	-.031	466.743	*
15	8	8	16	8	9	1615.837	1615.911	.074	576.269	*
16	0	16	17	0	17	1630.319	1630.323	.004	114.619	*
16	1	15	17	1	16	1630.316	1630.323	.007	123.902	*
16	2	14	17	2	15	1629.514	1629.510	-.004	145.218	
16	3	13	17	3	14	1628.374	1628.348	-.026	182.859	*
16	4	12	17	4	13	1626.830	1626.842	.012	235.484	*
16	5	11	17	5	12	1624.868	1624.890	.022	302.782	*
16	6	10	17	6	11	1622.497	1622.491	-.006	384.484	*
16	7	9	17	7	10	1619.736	1619.785	.049	480.276	*
16	8	8	17	8	9	1616.604	1616.643	.039	589.811	*
17	1	17	18	1	18	1630.680	1630.685	.005	134.885	
17	2	16	18	2	17	1630.213	1630.218	.005	159.396	
17	3	15	18	3	16	1629.122	1629.087	-.035	197.212	*
17	4	14	18	4	15	1627.581	1627.608	.027	249.842	*
17	5	13	18	5	14	1625.621	1625.649	.028	317.145	*
17	6	12	18	6	13	1623.252	1623.312	.060	398.854	*
17	7	11	18	7	12	1620.495	1620.618	.123	494.654	*
17	8	10	18	8	11	1617.366	1617.421	.055	604.199	*
18	0	18	19	0	19	1631.788	1631.824	.036	144.057	*
18	1	17	19	1	18	1631.819	1631.824	.005	153.816	*
18	2	16	19	2	17	1631.018	1631.020	.002	174.834	
18	3	15	19	3	16	1629.868	1629.857	-.011	212.416	
18	4	14	19	4	15	1628.327	1628.348	.021	265.044	*
18	5	13	19	5	14	1626.368	1626.371	.003	332.353	*
18	6	12	19	6	13	1624.003	1623.995	-.008	414.068	
18	7	11	19	7	12	1621.247	1621.263	.016	509.878	

TABLEAU III g.

NOMBRES QUANTIQUES						NOMBRE	NOMBRE	OBS-CALC	ENERGIE DU NIVEAU DE BASE	
N"	K_{-1}''	K_{+1}''	N'	K_{-1}'	K_{+1}'	D'ONDES CALCULE	D'ONDES OBSERVE			
18	8	10	19	8	11	1618.122	1618.113	-.009	619.433	
19	1	19	20	1	20	1632.131	1632.153	.022	165.649	*
19	2	18	20	2	19	1631.687	1631.713	.026	190.601	
19	3	17	20	3	18	1630.605	1630.602	-.003	228.456	
19	4	16	20	4	17	1629.066	1629.087	.021	281.091	*
19	5	15	20	5	16	1627.109	1627.118	.009	348.405	*
19	6	14	20	6	15	1624.748	1624.744	-.004	430.127	
19	7	13	20	7	14	1621.996	1621.999	.003	525.946	
19	8	12	20	8	13	1618.875	1618.870	-.005	635.512	*
20	0	20	21	0	21	1633.229	1633.227	-.002	176.832	
20	1	19	21	1	20	1633.297	1633.303	.006	187.139	
20	2	18	21	2	19	1632.503	1632.521	.018	207.851	
20	3	17	21	3	18	1631.341	1631.337	-.004	245.352	
20	4	16	21	4	17	1629.801	1629.792	-.009	297.981	*
20	5	15	21	5	16	1627.847	1627.845	-.002	365.300	*
20	6	14	21	6	15	1625.487	1625.473	-.014	447.031	
20	7	13	21	7	14	1622.739	1622.737	-.002	542.859	*
20	8	12	21	8	13	1619.622	1619.633	.011	652.437	*
21	1	21	22	1	22	1633.559	1633.569	.010	199.730	*
21	2	20	22	2	21	1633.138	1633.141	.003	225.172	
21	3	19	22	3	20	1632.065	1632.065	-.000	263.077	
21	4	18	22	4	19	1630.530	1630.510	-.020	315.716	*
21	5	17	22	5	18	1628.578	1628.592	.014	383.040	
21	6	16	22	6	17	1626.221	1626.201	-.020	464.779	*
21	7	15	22	7	16	1623.477	1623.473	-.004	560.617	
21	8	14	22	8	15	1620.364	1620.403	.039	670.207	*
22	0	22	23	0	23	1634.644	1634.652	.008	212.935	
22	1	21	23	1	22	1634.751	1634.764	.013	223.865	*
22	2	20	23	2	21	1633.970	1633.972	.002	244.273	
22	3	19	23	3	20	1632.793	1632.790	-.003	281.666	
22	4	18	23	4	19	1631.255	1631.244	-.011	334.294	*
22	5	17	23	5	18	1629.305	1629.316	.011	401.624	
22	6	16	23	6	17	1626.951	1626.933	-.018	483.371	
22	7	15	23	7	16	1624.211	1624.197	-.014	579.219	*
22	8	14	23	8	15	1621.101	1620.998	-.103	688.822	*
23	1	23	24	1	24	1634.964	1634.945	-.019	237.123	*
23	2	22	24	2	23	1634.566	1634.565	-.001	263.104	
23	3	21	24	3	22	1633.505	1633.501	-.004	301.073	
23	4	20	24	4	21	1631.974	1631.964	-.010	353.716	*
23	5	19	24	5	20	1630.025	1630.044	.019	421.052	
23	6	18	24	6	19	1627.675	1627.608	-.067	502.807	*
23	7	17	24	7	18	1624.939	1624.890	-.049	598.666	*
23	8	16	24	8	17	1621.834	1621.822	-.012	708.282	*
24	0	24	25	0	25	1636.032	1636.039	.007	252.358	
24	1	23	25	1	24	1636.180	1636.165	-.015	263.992	
24	2	22	25	2	23	1635.416	1635.422	.006	284.107	
24	3	21	25	3	22	1634.223	1634.237	.014	321.360	*
24	4	20	25	4	21	1632.686	1632.673	-.013	373.983	
24	5	19	25	5	20	1630.741	1630.764	.023	441.323	
24	6	18	25	6	19	1628.394	1628.348	-.046	523.087	*
24	7	17	25	7	18	1625.661	1625.649	-.012	618.958	*

TABLEAU III *h*.

NOMBRES QUANTIQUES						NOMBRE	NOMBRE	OBS-CALC	ENERGIE	
N"	K ₋₁ "	K ₊₁ "	N'	K ₋₁ '	K ₊₁ '	D'ONDES CALCULE	D'ONDES OBSERVE		DU NIVEAU DE BASE	
24	8	16	25	8	17	1622.563	1622.595	.032	728.586	*
25	1	25	26	1	26	1636.346	1636.328	-.018	277.827	*
25	2	24	26	2	25	1635.971	1636.001	.030	304.396	*
25	3	23	26	3	24	1634.922	1634.945	.023	342.445	*
25	4	22	26	4	23	1633.394	1633.385	-.009	395.092	
25	5	21	26	5	22	1631.452	1631.465	.013	462.438	
25	6	20	26	6	21	1629.108	1629.087	-.021	544.211	*
25	7	19	26	7	20	1626.380	1626.371	-.009	640.093	*
25	8	18	26	8	19	1623.285	1623.312	.027	749.736	*
26	0	26	27	0	27	1637.394	1637.380	-.014	295.091	*
26	1	25	27	1	26	1637.585	1637.606	.021	307.513	*
26	2	24	27	2	25	1636.845	1636.840	-.005	327.354	
26	3	23	27	3	24	1635.633	1635.633	.000	364.432	
26	4	22	27	4	23	1634.097	1634.079	-.018	417.045	
26	5	21	27	5	22	1632.157	1632.153	-.004	484.396	*
26	6	20	27	6	21	1629.817	1629.792	-.025	566.178	*
26	7	19	27	7	20	1627.092	1627.118	.026	662.073	*
26	8	18	27	8	19	1624.003	1623.995	-.008	771.730	
27	1	27	28	1	28	1637.704	1637.687	-.017	321.838	*
27	2	26	28	2	27	1637.352	1637.380	.028	349.045	*
27	3	25	28	3	26	1636.317	1636.328	.011	387.191	*
27	4	24	28	4	25	1634.794	1634.764	-.030	439.841	*
27	5	23	28	5	24	1632.857	1632.874	.017	507.198	
27	6	22	28	6	23	1630.521	1630.510	-.011	588.989	*
27	7	21	28	7	22	1627.801	1627.845	.044	684.896	*
27	8	20	28	8	21	1624.727	1624.744	.017	794.568	
28	0	28	29	0	29	1638.729	1638.732	.003	341.126	*
28	1	27	29	1	28	1638.964	1638.967	.003	354.426	
28	2	26	29	2	27	1638.254	1638.269	.015	374.020	
28	3	25	29	3	26	1637.023	1637.013	-.010	410.884	
28	4	24	29	4	25	1635.487	1635.465	-.022	463.481	*
28	5	23	29	5	24	1633.551	1633.569	.018	530.843	*
28	6	22	29	6	23	1631.219	1631.244	.025	612.643	*
28	7	21	29	7	22	1628.504	1628.459	-.045	708.563	*
28	8	20	29	8	21	1625.425	1625.473	.048	818.251	*
29	1	29	30	1	30	1639.040	1639.042	.002	369.152	
29	2	28	30	2	29	1638.709	1638.732	.023	397.046	*
29	3	27	30	3	28	1637.691	1637.687	-.004	435.310	*
29	4	26	30	4	27	1636.173	1636.165	-.008	487.963	
29	5	25	30	5	26	1634.241	1634.237	-.004	555.330	*
29	6	24	30	6	25	1631.911	1631.824	-.087	637.141	*
29	7	23	30	7	24	1629.201	1629.202	.001	733.074	*
29	8	22	30	8	23	1626.128	1626.089	-.039	842.777	*