HAL
open science

Etude expérimentale et théorique des spectres d'émission et d'absorption VUV des molécules H2, D2 et HD

Mourad Roudjane

▶ To cite this version:

Mourad Roudjane. Etude expérimentale et théorique des spectres d'émission et d'absorption VUV des molécules H2, D2 et HD. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2007. Français. NNT : . tel-00208073v2

HAL Id: tel-00208073
https://theses.hal.science/tel-00208073v2

Submitted on 2 Feb 2008 (v2), last revised 10 Feb 2008 (v3)

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.

l'Observatoire de Paris — LERMA
Laboratoire d'Étude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique

UNIVERSITE PIERRE & MARIE CURIE
LA SCIENCE A PARIS

THESE

présentée pour obtenir le titre de :

Docteur de l'Université Pierre et Marie Curie- Paris 6

par

Mourad ROUDJANE

le 7 Décembre 2007

Etude expérimentale et théorique des spectres d'émission et d'absorption VUV des molécules H_2, D_2 et HD

---

composition du jury

Patrice CACCIANI	*Rapporteur*
Dolorès GAUYACQ	*Examinateur*
Michèle GLASS-MAUJEAN	*Examinateur*
Christian JUNGEN	*Rapporteur*
Ronald McCARROLL	*Examinateur*
Wan-Ü Lydia TCHANG-BRILLET	*Directrice*
Wim UBACHS	*Invité*

Table des matières

Résumé i

Abstract iii

Remerciements v

Introduction ix

I ETUDE THEORIQUE DE LA MOLECULE D'HYDROGENE ET DE SES ISOTOPES 1

1 Présentation générale d'une molécule diatomique 3
1.1 Hamiltonien . . . 3
1.2 Approximation adiabatique de Born-Oppenheimer . . . 4
1.3 Equations couplées dans la représentation adiabatique . . . 7
1.4 Représentation diabatique . . . 8

2 Niveaux d'énergie et probabilités de transition des molécules H_2, D_2 et HD 11
2.1 Méthode de calcul . . . 11
2.2 L'importance des couplages non adiabatiques et de la correction adiabatique . . . 14
2.2.1 Résultats des calculs dans l'approximation adiabatique de Born-Oppenheimer 14
2.2.2 L'effet du couplage radial . . . 15
2.2.3 L'effet du couplage rotationnel . . . 15
2.2.4 L'effet de la correction adiabatique . . . 16
2.2.5 Conclusion . . . 18
2.3 Calcul des probabilités de transition . . . 19
2.4 L'effet des couplages non adiabatiques sur les probabilités de transition de la molécule H_2. . . . 23

3 Brisure de symétrie dans la molécule HD 25
3.1 Position du problème . . . 25
3.2 Opérateurs couplage . . . 27
3.3 Limites asymptotiques des couplages non adiabatiques $g - u$ dans HD . . . 29
3.4 Résultats de calculs . . . 32

II SPECTROSCOPIE VUV EN EMISSION À HAUTE RÉSOLUTION 35

4 La spectroscopie à réseau 37
4.1 Le spectrographe/spectromètre de Meudon . . . 37
4.1.1 Techniques spectrographiques . . . 37
4.1.2 Source lumineuse . . . 38
4.1.3 Plaques photographiques . . . 39
4.1.4 Mesure de longueurs d'onde et dépouillement des spectres . . . 39
4.2 Nouveau système de détection . . . 41

4.2.1 Écrans phosphore photostimulable . . . 42
4.2.2 Détecteur BaFBr :Eu^{+2} . . . 42
4.2.3 Système de lecture . . . 43
4.2.4 Acquisition du signal . . . 44
4.2.5 Traitement des données numériques . . . 44
4.2.6 Système de mise à zéro . . . 45
4.2.7 Premières applications des écrans phosphore photostimulables dans l'ultraviolet 45
4.2.8 Comparaison entre les deux détecteurs . . . 45

5 Nouvelle méthode pour l'analyse des spectres d'émission 47
5.1 Démarche générale . . . 47
5.2 Le programme d'analyse des spectres moléculaires . . . 48

6 Résultats et discussions 53
6.1 La liste des raies spectrales identifiées dans la région $[780, 1242]$ Å . . . 53
6.2 Niveaux d'énergies et interactions entre les états électroniques . . . 55
6.2.1 L'état électronique excité $D'^1\Pi_u^-$ . . . 56
6.2.2 L'état électronique excité $D^1\Pi_u$ . . . 57
6.2.3 L'état électronique excité $B'^1\Sigma_u^+$ . . . 59
6.2.4 L'état électronique excité $C^1\Pi_u$ . . . 63
6.2.5 L'état électronique excité $B^1\Sigma_u^+$ . . . 66
6.2.6 Autres considérations sur les perturbations . . . 69
6.3 Mesures d'intensité . . . 75

III SPECTROSCOPIE LASER XUV À TRÈS HAUTE RÉSOLUTION 81

7 La spectroscopie laser 83
7.1 Introduction . . . 83
7.2 Principe de l'expérience . . . 83
7.3 Description du dispositif expérimental . . . 85
7.3.1 Le laser visible . . . 85
7.3.2 L'amplificateur à colorant pulsé (Pulsed Dye Amplifier) . . . 86
7.3.3 Génération d'harmoniques . . . 87
7.3.4 Interaction faisceau moléculaire-rayonnement et détection . . . 88
7.4 Calibration en fréquence . . . 90

8 Résultats et discussions 91
8.1 Traitement des données . . . 91
8.2 Résultats de D_2 . . . 92
8.3 Résultats de HD . . . 94

IV APPORT DE LA SPECTROSCOPIE MOLÉCULAIRE À L'ASTROPHYSIQUE : DEUX EXEMPLES 101

9 L'étude de la possible variation cosmologique du rapport de masse $\mu = m_p/m_e$. 103
9.1 Introduction . . . 103
9.2 Détermination des coefficients de sensibilités K_i des longueurs d'onde de H_2 et de HD 105
9.2.1 Démarche générale . . . 105
9.2.2 Variation du rapport de masse μ pour les molécules H_2 et HD . . . 107

9.2.3 Détermination de la dérivée $d\lambda_i/d\mu$ . . . 109
9.3 Résultats et discussions . . . 110
9.4 Observation de H_2 et de HD : détermination de la variation relative $\Delta\mu/\mu$ . . . 114

10 Etude du satellite quasi-moléculaire de la raie Lymanβ dû à la collision H-H 125
10.1 Introdution . . . 125
10.2 Formation d'un satellite . . . 126
10.3 Formalisme . . . 126
10.4 Détails de calcul et résultats . . . 129

11 Conclusions et perspectives 133
11.1 Conclusions . . . 133
11.2 Perspectives . . . 135

Bibliographie 137

A Echange de charge entre ions multichargés et atomes neutres dans le domaine des énergies thermiques : Validité du modèle de Langevin. 145
A.1 Introduction . . . 145
A.2 Méthodes . . . 147
A.2.1 Démarche générale . . . 147
A.3 Résultats et discussions . . . 148
A.4 Conclusion . . . 149

B Articles à comité de lecture 151
B.1 Article I : Spectroscopie en émission vuv à haute résolution de la molécule D_2 de 78 à 103 nm : Les systèmes de bandes $D'^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ et $D^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. . . . 151
B.2 Article II : Spectroscopie en émission vuv à haute résolution de la molécule D_2 : Le système de bande $B'^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. . . . 161
B.3 Article III : L'échange de charge aux énergies thermiques : Validité du modèle de Langevin. . . . 168

C Calcul des éléments diagonaux de la matrice énergie cinétique électronique T_e 181

D TABLES DES ÉNERGIES EXPÉRIMENTALES 183
D.1 Énergies ro-vibrationnelles de l'état électronique $C^1\Pi_u$ . . . 183
D.2 Énergies ro-vibrationnelles de l'état électronique $B^1\Sigma_u^+$ . . . 190

E Table des Raies 195
E.1 Le système $D^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. $v' = 0 - 3$. . . . 195
E.2 Le système $D^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. $v' = 4 - 19$. . . . 198
E.3 Le système $D'^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. . . . 205
E.4 Le système $B'^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. . . . 210
E.5 Le système $C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. . . . 219
E.6 Le système $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. . . . 240

Liste des Figures 262

Listes des Tableaux 268

Résumé

Les molécules H_2, HD et D_2 occupent une place fondamentale en physique moléculaire, en astrophysique et en physique des plasmas. H_2 est la molécule la plus abondante dans l'univers. Les récentes observations à haute résolution des transitions VUV de cette molécule et de son isotope HD ont été effectuées par le satellite FUSE dans le domaine 90.5 -118.7 nm. Ces observations permettent de déterminer le rapport d'intensités des raies HD/H_2, considéré comme un outil nouveau pour évaluer le rapport d'abondances D/H, qui est connu pour être un traceur efficace de l'évolution chimique de l'Univers. Par ailleurs, les molécules H_2, HD et D_2 sont formées dans le plasma de bord des tokamaks et contribuent aux pertes radiatives du milieu. Par conséquent, il est indispensable de disposer de données spectroscopiques de haute qualité obtenues en laboratoire pour une exploitation fiable des résultats d'observations ou pour une modélisation réaliste des plasmas de fusion.

L'objectif de cette thèse est d'effectuer une étude expérimentale à haute résolution des spectres d'émission et d'absorption des isotopes D_2 et HD de l'hydrogène moléculaire dans le VUV et de la compléter par une étude théorique des états électroniques excités en relation avec les transitions observées. Une telle étude avait été effectuée dans notre laboratoire et avait abouti à la réalisation d'un atlas VUV dans le domaine 70-170 nm.

Les spectres d'émission de HD et D_2 sont produits par une source à décharge Penning opérant sous faible pression, et sont enregistrés dans la région spectrale 78 -170 nm à l'aide du spectrographe sous vide de 10 mètres à haute résolution ($\approx$ 150 000) de l'Observatoire de Meudon, soit sur plaques photographiques, soit sur des écrans phosphore photostimulables pour mesure d'intensités. Les spectres enregistrés contiennent plus de 20 000 raies. Les longueurs d'onde sont mesurées avec une précision de $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-6}$.Les raies des molécules D_2 et H_2 étant inévitablement présentes dans le spectre de HD, nous avons d'abord cherché à réaliser l'analyse du spectre de D_2, qui consiste à identifier et à assigner les raies aux transitions électroniques entre des niveaux d'énergie de la molécule.

La présente analyse s'appuie sur nos calculs théoriques des niveaux d'énergie ro-vibrationnels des états électroniques excités et des probabilités de transition à partir de ces états vers les niveaux d'énergie de l'état fondamental. Les résultats théoriques sont obtenus par la résolution des équations couplées entre les états électroniques excités $B^1\Sigma_u^1$, $B'^1\Sigma_u^1$, $C^1\Pi_u^1$ et $D^1\Pi_u^1$, en tenant compte des couplages non-adiabatiques entre ces états. Ils sont obtenus dans l'approximation adiabatique pour les états électroniques excités $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+$, $D'^1\Pi_u^1$ et $D''^1\Pi_u^1$. La résolution de ces équations est effectuée par une méthode moderne basée sur la discrétisation des variables (DVR). Etant données les grandes constantes rotationnelles de la molécule, une des plus légères, les bandes se chevauchent et donnent un aspect de spectre de raies comme dans le cas d'un atome complexe. L'originalité de notre démarche est d'avoir utilisé un programme d'analyse spectrale, développé pour les atomes complexes, pour manipuler la grande quantité de données expérimentales et théoriques dans l'identification des raies et la détermination des niveaux d'énergie ro-vibrationnels.

Nous avons par ailleurs réalisé une étude en absorption des molécules HD et D_2 au Centre Laser LCVU d'Amsterdam. Nous avons mesuré par spectroscopie laser à deux photons 1XUV+1UV, de nouvelles longueurs d'onde avec une précision inégalée de $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-8}$ dans le domaine spectral 99.9-104 nm permis par l'accordabilité du laser XUV.

Ces nouvelles longueurs d'ondes constitueront une base de données de raies de référence pour la calibration des spectres moléculaires, mais leurs intérêts ne s'arrêtent pas au laboratoire. En effet, les nouvelles raies de HD mesurées par spectroscopie laser, ajoutées aux raies de H_2 déjà mesurées avec une précision similaire, seront utilisées comme référence pour mettre en évidence une possible variation cosmologique du rapport de masse proton-électron $\mu = m_p/m_e$, par comparaison avec des longueurs d'onde de raies de H_2 ou de HD observées dans les spectres d'absorption de quasars à grands déplacements vers le rouge. Cette étude nécessite la connaissance des coefficients de sensibilité des longueurs d'onde par rapport à la possible variation de μ, que nous avons calculés par la résolution d'un système d'équations couplées pour les états électroniques B, B', C et D de la molécule H_2 et HD pour diverses valeurs de μ.

Durant ce travail de thèse, nous nous sommes également intéressés à des transitions entre états libres-libres et états libres-liés de la molécule H_2. Ces transitions se produisent lors d'une collision H-H formant une quasi-molécule et sont responsables de l'apparition de satellites dans l'aile des raies de l'atome d'hydrogène. Nous avons effectué une étude quantique du satellite quasi-moléculaire de la raie Lyman β et calculé le profil d'absorption du satellite en fonction de la température. Cette variation est un outil important de diagnostic pour la détermination des caractéristiques des atmosphères des naines blanches.

Abstract

H_2, HD and D_2 molecules take a fundamental place in molecular physics, astrophysics and plasma physics. H_2 is the most abundant molecule in the universe. The recent observations with high resolution of VUV transitions of this molecule and its isotope HD were carried out by the FUSE satellite in the range 90.5-118.7 nm. These observations make it possible to determine the intensity ratio HD/H_2 of lines, considered as a new tool to evaluate the abundance ratio of D/H, which is known to be a tracer of the chemical evolution of the Universe. In addition, the H_2, HD and D_2 molecules are formed in the plasma of edge of the tokamaks and contribute to the radiative losses of the medium. Consequently, it is important to have spectroscopic data obtained in laboratory with high accuracy for a reliable exploitation of the results of observations or for a modeling of plasmas of fusion.

The aim of this thesis is to carry out an experimental study of the absorption and emission spectra of the D_2 and HD isotopes, with high resolution, in the VUV and to supplement it by a theoretical study of the excited electronic states involved in the observed transitions. Such a study had been carried out in our laboratory and had led to the realization of an atlas VUV in the range 70-170 nm for the H_2 molecule.

The emission spectra of HD and D_2 are produced by Penning discharge source operating under low pressure, and are recorded in the spectral range 78 -170 nm using the high resolution vacuum spectrograph of 10 m (150 000) of Meudon Observatory, either on photographic plates, or on image plates for measurement of intensities. The recorded spectra contain more than 20 000 lines. The wavelengths are measured with a precision of $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-6}$.

The lines of the D_2 molecules and H_2 being present in the spectrum of HD, we initially start to carry out the analysis of the spectrum of D_2, which consists to identify and to assign the lines to the electronic transitions between energy levels of the molecule. The present analysis is based on our theoretical calculations of the ro-vibrational energy levels of the excited electronic states and the transition probabilities from these states towards the energy levels of the fundamental state. The theoretical results are obtained by resolving the coupled equations between the excited electronic states $B^1\Sigma_u^1$, $B'^1\Sigma_u^1$, $C^1\Pi_u^1$ and $D^1\Pi_u^1$, taking into account the nonadiabatic couplings between these states, and they are obtained in the adiabatic approximation for the excited electronic states $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+$, $D'^1\Pi_u^1$ and $D''^1\Pi_u^1$. The equations are resolved using a modern method based on the discretization variables representation (DVR) method. The molecule has a large rotational constant, one of lightest ; the bands overlap and give an aspect of lines spectrum as in the case of a complex atom. The originality of our work is to have used a spectral program developed for the complex atoms, to handle the great amount of experimental and theoretical data for the identification of the lines and the determination of the ro-vibrational energy levels.

In addition, we carried out a study of the absorption spectra of the HD and D_2 molecules in the Laser Center LCVU of Amsterdam, using the two photons 1 XUV+1 UV laser spectroscopy. New wavelengths with a very high precision of $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-8}$ in the spectral range 99.9 -104 nm has been measured.

These new wavelengths will constitute a data base of reference lines for the calibration of the molecular spectra, but their importance goes beyond the laboratory uses. Indeed, the new lines of

HD measured by laser spectroscopy, added to the H_2 lines already measured with a similar precision, will be used as references to study a possible cosmological variation of the masses ratio proton-to-electron $\mu = m_p/m_e$, by comparison with wavelengths of lines of H_2 or HD observed in the absorption spectra of quasars at high red shift. This study requires the knowledge of the sensitivity coefficients of the wavelengths to the possible variation of μ, which we calculated by the resolution of coupled equations system for the electronic states B, B', C and D of the molecule H_2 and HD for various values of μ.

During my thesis, we were also interested in transitions between free-free and free-bound states of the H_2 molecule. These transitions occur during the H-H collision forming a quasi-molecule and leads to the formation of satellites in the wing of the lines of the hydrogen atom. We carried out a quantum study of the quasi-molecular satellite of the Lymanβ line and calculated the profile of absorption of the satellite according to the temperature. This variation is an important tool for diagnosis for the determination of the characteristics of the atmospheres of dwarf white.

Remerciements

J'attendais cette occasion avec une très grande impatience ! !

Je tiens à remercier Monsieur Jean-Michel Lamarre , Directeur du Laboratoire d'Etudes du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique (LERMA) qui m'a donné l'opportunité de faire cette thèse. De la même manière, je remercie N. Feautrier, de m'avoir accueillie au sein de son équipe Atomes et molécules en Astrophysique.

Cette thèse est le fruit de plusieurs années de travail dur, passionnant et épanouissant dans divers domaine de la recherche fondamentale. La réussite de ce travail de thèse est en grande partie due à ma directrice de thèse que je remercie sincèrement. Lydia Tchang-Brillet, je vous remercie de la confiance que vous m'avez accordée. Je vous remercie pour l'esprit critique avec lequel vous avez jugé mon travail et pour le temps que vous m'avez consacré. Aussi je vous suis reconnaissant pour les nombreuses pistes de recherche que vous avez su m'ouvrir dans la physique moléculaire. Il fut un grand honneur pour moi d'avoir travaillé, en parallèle de ma thèse, avec le professeur Ronald McCarroll, que je tiens à remercier énormément pour toutes les connaissances scientifiques qu'il m'avait transmis depuis mon stage de D.E.A. Je le remercie aussi pour sa patience envers moi ainsi que les conseils fructueux qu'il m'a données.

J'exprime ma profonde gratitude à tous les membres du jury qui m'ont fait l'honneur d'accepter d'évaluer le travail accompli : Patrice Cacciani et Christian Jungen, rapporteurs du manuscrit, ainsi que les professeurs Michèle Glass-Maujean et Dolorès Gauyacq, les examinateurs, et le professeur Wim Ubachs de l'Université libre d'Amsterdam comme invité. Enfin le professeur Ronald McCarroll, président du jury.

Merci Mesdames et Messieurs, votre présence fut un grand honneur pour moi et vous remarques ont permis de compléter ce mémoire.

Je tiens également à remercier très chaleureusement Françoise Launay et Norbert Champion qui ont toujours montré une grande disponibilité durant ces trois dernières années. J'ai pu bénéficier de leur soutien technique et de leur immense expérience en spectroscopie moléculaire et de leurs critiques constructives, conférant son aspect final à ce travail. Je tiens également à présenter mes sincères remerciements à Alexander Kramida du NIST pour sa collaboration fructueuse dans le développement du programme IDEN, qui rend maintenant l'analyse des spectres moléculaires plus pratique et surtout plus rapide.

C'etait un très grand honneur pour moi de faire une partie de cette thèse en collaboration avec le professeur Wim Ubachs au Centre Laser de l'Université d'Amsterdam. Je tiens à remercier, à cette occasion, tout les membres du LCVU pour leur hospitalité, leur gentillesse, et pour les grands moments que j'ai partagés avec eux durant mon séjour. Je cite en particulier : Wim Ubachs, Ofelia, Toncho, Edcel, Arijan, Sandro, Ruth, Lineke, Kjeld, Kees de Lange, Jacques, Petra.....

Je tiens particulièrement à remercier les membres du laboratoire LERMA qui m'ont apportés tout ce qu'un étudiant peut espérer avoir pour progresser dans les meilleurs conditions. Je citerai particulièrement : Nicole Feautrier, Sylvie Sahal-Bréchot, Veronique Bommier, Annie Spielfiedel, Christian Balança, Fabrice Dayou, François Rostas, Chantal Stehlé, Amaury De Kertanguy, Domi-

nique Lopes, Christian Jouan, Nicolas Moreau, Christophe Dybal. Je remercie aussi Hervé Abgrall pour les discutions scientifiques que nous avons eues. Je tiens aussi à présenter mes sincères remerciements à Raymond Vetter pour ses critiques très constructives de mon mémoire de thèse.

Il est important pour un doctorant de pouvoir bénéficier de moments de détente et de bonne humeur qui nous permettent d'oublier un instant les problèmes de la thèse. J'espère n'oublier aucun des étudiants de Meudon ou de Paris ayant participé à ces instants : Ahlem, Samir, Foudhile, Nacer, Ali, Leandre, Julien, Zakaria, Moncef, Fabien, François, Stéphane, Luc, Pierre, Nezibe, Clément..... Enfin, à mon inoubliable colocataire de bureau, Lucie Vincent, pour sa gentillesse et son amitiée.

Finalement, les êtres les plus chers ! !

Je ne saurais exprimer toute la gratitude que je ressens envers ma famille pour leur soutien inconditionnel apporté tout le long de mes études. Cette thèse sera dédiée spécialement à ma très chère mère pour son soutien indispensable durant les quatre années que j'ai passées ici en France. Malgré les moments difficiles que j'ai passés ici tout seul, la confiance qu'elle avait en moi, le courage et la patience qu'elle m'avait appris, ma détermination à lui faire plaisir et d'essayer de lui rendre un tout petit bout de ce qu'elle avait fait de bien pour moi, m'a énormément aidé à surmonter tout mes problèmes et atteindre mon but. Cette thèse est aussi dédiée à tous les membres de ma grande famille que je prends tout le plaisir de les citer sur ce manuscrit. Je commence par mes soeurs : Fatma, Louiza, Malika, Zahia, mon unique frère Ghiles, mes beau frères Hamid et Omar, mes petits neveus : Mouhamed Ali (Moukharbale ; Moh el cable ; Bouthchakarine), Abdelmalek Walid (Koukouch), Rayan (Badis), Amrane (Batata ; Boukarkar) et sa soeur Chaïma (Kahloucha), et finalement à ma grand-mère. Je voudrais, à cette occasion, remercier de tout mon coeur ma soeur Malika qui était, en grande partie, derrière ma réussite. Mais aussi un grand remerciement à Hamid, que je considère comme un grand frère, pour tout ce qu'il avait fait pour moi, il était mon soutien moral, il était toujours derrière moi, c'est la personne envers qui j'ai confiance et à qui j'ai confié une partie de ma responsabilité familiale, et, il faut que je le dise, c'est grâce à lui que je suis venu en France. Je tiens aussi à remercier Sahouane Saïd pour son amitié.

Merci à tous ceux dont j'apprécie l'esprit et que j'ai malencontreusement oubliés !

A mon cher papa Mouloud (1944-1989)

A mon cher frère Amrane (1965-1990)

"L'asile le plus sûr est le coeur d'une mère".

A ma très chère mère

Introduction

L'objet de la spectroscopie moléculaire est l'étude du rayonnement électromagnétique émis, absorbé ou diffusé par un milieu contenant des molécules. Cette étude permet en particulier de relier les fréquences lumineuses présentes dans le rayonnement ainsi que la variation des intensités aux propriétés des molécules. L'interprétation des raies spectrales des molécules est une discipline plus que centenaire. Elle a donné à d'autres branches de la physique (plasmas astrophysiques et de laboratoire,.... etc) des outils de diagnostics irremplaçables. Elle accompagne en particulier la recherche de nouvelles espèces moléculaires dans le milieu interstellaire par différents instruments d'observation (satellites ou télescopes).

La molécule H_2 et ses isotopes HD et D_2 occupent une place fondamentale en physique moléculaire, en physique des plasmas et en astrophysique. Le deutérium D dont le noyau contient un neutron en plus du proton est un isotope naturel de l'hydrogène atomique, de masse pratiquement deux fois plus grande. Sa présence dans les molécules HD et D_2 modifie la masse réduite du mouvement nucléaire de la molécule et entraîne le déplacement des niveaux de vibration et de rotation de ces molécules par rapport à H_2. Cependant, les propriétés électroniques de ces molécules sont identiques dans l'approximation de Born-Oppenheimer qui admet que le mouvement des électrons d'une molécule, étant plus rapide que celui des noyaux, peut être étudié en considérant les noyaux comme fixes.

Bien que l'hydrogène moléculaire (et ses isotopes) soit la molécule neutre la plus simple, son spectre d'émission contenant les transitions électroniques est de la plus grande complexité. D'une part, étant donnés les grands intervalles rotationnels dûs à la petite masse réduite du mouvement nucléaire, le spectre ne présente aucune structure de bandes évidente car les bandes se chevauchent et apparaissent comme un spectre de raies. D'autre part, l'approximation de Born-Oppenheimer est plus souvent mise en défaut à cause de la petite masse nucléaire. Ces deux raisons rendent l'interprétation du spectre très difficile.

Malgré sa structure électronique complexe, la molécule H_2 est considérée comme un système de référence exemplaire pour le développement des méthodes *ab initio*, et la validation des approximations théoriques utilisées dans le calcul des structures électroniques des molécules diatomiques. Depuis plus d'une cinquantaine d'années, la précision obtenue sur les courbes de potentiels de la molécule H_2, les moments de transitions électroniques, les corrections non adiabatiques, et les corrections adiabatiques a été considérablement améliorée notamment grâce au développement des moyens de calcul.

H_2 et D_2 sont deux molécules homonucléaires, c'est à dire qu'elles possèdent deux noyaux identiques. Pour des raisons de symétrie, le moment dipolaire de la molécule est nul, par conséquence les transitions dipolaires dans l'infrarouge n'existent pas entre les niveaux vibrationnels ou rotationnels à l'intérieur d'un état électronique donné. Seules les transitions quadripolaires (avec une très faible intensité) sont permises. Bien que la molécule HD possède la même structure électronique que H_2 et D_2, elle est caractérisée par ses deux noyaux de masses différentes. Dès lors, le centre de masse électronique et le centre de masse des noyaux ne coïncident pas, ce qui conduit à l'existence d'un très faible moment dipolaire. Par conséquent, les transitions dipolaires dans l'infrarouge deviennent permises. Une autre conséquence des masses nucléaires différentes est l'existence d'une brisure de la symétrie électronique (parité $g - u$) dans une inversion des coordonnées électroniques par rap-

port au centre géométrique des noyaux. Cette brisure engendre des interactions entre certains états électroniques de symétries différentes, rendant possibles des transitions interdites pour les molécules diatomique homonucléaires.

Loin de la gamme d'énergie étudiée par les méthodes de chimie, les isotopes deutérium D et tritium T de l'atome d'hydrogène H, sont de bons combustibles pour la production de l'énergie à partir de la fusion des atomes D et T dans les tokamaks (chambre de confinement magnétique destinée à contrôler un plasma pour la production d'énergie par fusion nucléaire). Le plasma d'un tokamak émet un rayonnement électromagnétique intense dans une large gamme de fréquence allant des micro-ondes jusqu'au rayons X. De multiples diagnostics du plasma sont obtenus à partir de l'analyse de l'émission des raies spectrales par les divers ions et atomes neutres présents dans le plasma. Des études expérimentales récentes (2) ont montré l'existence des raies des molécules H_2, HD et D_2 (voir Figure 1) à partir de la détection des transitions entre les deux états électroniques excités 3p $^3\Pi_u$ et 2s $^3\Sigma_g$ (bande de Fulcher). Ces molécules, observées pour la première fois à des températures élevées du plasma de bord ($\approx$ 1000 K), sont formées souvent dans des états excités à partir de l'association des atomes d'hydrogène et de deutérium sur les bords du tokamak. Ces molécules sont considérées comme des impuretés dans le plasma, et contribuent aux pertes radiatives du milieu. Ainsi la connaissance des longueurs d'onde des raies de ces molécules et les probabilités de transition entre les différents états électroniques est très importante pour la modélisation du plasma.

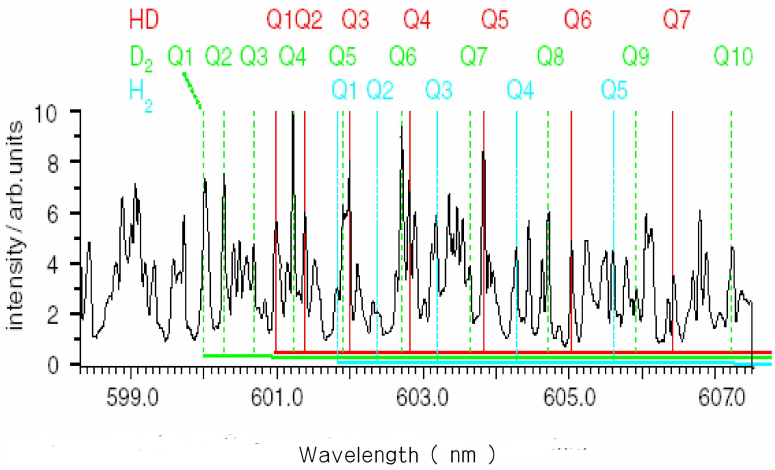


Figure 1 – *Détection des raies de la bande de Fulcher (3p $^3\Pi_u$ - 2s $^3\Sigma_g$) dans le visible des molécules H_2, HD et D_2 dans le plasma de bord (2).*

En astrophysique, la molécule d'hydrogène, particulièrement difficile à détecter dans le milieu interstellaire, est de loin la molécule la plus abondante dans l'Univers. Il est par conséquent pri-

mordial de parvenir à la détecter directement. Cette molécule se distingue de la plupart des autres molécules détectées dans le milieu interstellaire par le simple fait qu'elle est homonuclaire. Cette propriété a deux implications capitales :
- Pas de transitions rotationnelles pures dans le domaine millimétrique. Ceci implique qu'une telle molécule est inaccessible aux radio-télescopes,
- Les transitions dipolaires électriques entre les niveaux vibrationnels de l'état fondamental sont interdites.
Il y a donc deux manières de détecter H_2 :
- dans l'ultraviolet où sont situées les transitions électroniques des états excités vers l'état fondamental ;
- dans l'infra-rouge et le sub-millimetrique où on peut détecter les transitions vibrationnelles quadrupolaires de l'état fondamental.

La première observation de l'hydrogène moléculaire dans l'espace a été effectuée à l'aide d'un spectromètre monté dans une fusée, détectant dans l'ultraviolet du vide (VUV) les bandes $B - X$ de Lyman et $C - X$ de Werner en absorption dans l'étoile ζ_i (4). Depuis cette découverte plusieurs satellites équipés de spectromètres fonctionnant dans la gamme VUV ont été envoyés dans l'espace afin d'étudier cette molécule. Le télescope Copernicus a considérablement amélioré les possibilités d'enregistrement des spectres VUV de l'hydrogène moléculaire (5). Grâce à sa grande sensibilité et son grand pouvoir de résolution, le télescope spatial Hubble (HST) a permis pour la première fois l'enregistrement des spectres d'absorption de H_2 impliquant des transitions vers les énergies vibrationnelles élevées (6). La navette spatiale Galilée, équipée d'un spectromètre UV (113-432 nm) et d'un spectromètre opérant dans l'extrême-UV (54- 128 nm), a enregistré la bande de Lyman et d'autres bandes de H_2 dans les régions polaires, nord et sud, de Jupiter (7). Depuis 1999 le télescope FUSE (Far Ultraviolet Spectroscopique Explorer) a permis de détecter la molécule H_2 dans divers endroits de l'Univers. Ce télescope opérationnel dans la gamme des longueurs d'onde [905-1187 Å], gamme spectrale où une forte absorption des bandes de Lyman et de Werner est connue, est caractérisé par une grande résolution (8), une sensibilité 10^4 plus grande que celle associée au télescope Copernicus.

Outre les observations de H_2 et grâce à la grande résolution du télescope FUSE, les bandes de Werner et de Lyman de la molécule HD ont été aussi détectées avec une grande résolution. Cet isotope de l'hydrogène moléculaire avait auparavant été détecté par le satellite Copernicus en 1975 mais avec une résolution moins bonne(5). Le deutérium est un élément important en astrophysique. Il n'a été formé qu'au cours de la nucléosynthèse primordiale dans des proportions directement dépendantes de la densité baryonique de cette époque. Il est aussi un élément très fragile, détruit à des températures supérieures à 10^5 K. Par conséquent, tout atome de deutérium ayant été incorporé dans une étoile au cours de l'évolution des galaxies a été détruit. Ainsi, l'enregistrement à haute résolution de raies de la molécule HD, par FUSE, est très important, car le rapport d'intensité des raies HD/H_2 pourrait être un outil nouveau pour évaluer le rapport d'abondances D/H, connu pour être un traceur fiable de l'évolution chimique de l'Univers.

Face à ce développement technologique en matière de détection et de haute résolution des satellites et des télescopes, il est indispensable de disposer de données spectroscopiques de haute qualité, longueurs d'onde de haute précision et probabilités de transition correspondantes, obtenues en laboratoire, afin d'identifier l'ensemble des raies VUV de H_2 et de HD observées dans l'Univers.

Une étude détaillée du spectre d'émission VUV à haute résolution de la molécule H_2 a déjà été effectuée à Meudon conduisant à la réalisation d'un atlas VUV (9). Dans ce contexte nous nous

sommes intéressés au cours de ce travail de thèse à poursuivre l'étude des états électroniques excités des molécules D_2 et HD à partir des spectres d'émission et d'absorption à haute résolution.

Les spectres d'émission de D_2 et HD sont produits par une source à décharge Penning opérant sous faible pression, qui a pour avantage de réduire les réabsorptions. Ils sont enregistrés sur plaques photographiques dans le domaine spectral (780 -1700 Å) à l'aide du spectrographe de 10 mètres VUV à haute résolution ($\approx$ 150 000) de l'Observatoire de Meudon. Les raies spectrales des molécules D_2 et H_2 étant présentes dans le spectre de HD, l'analyse du spectre de D_2 constitue une première étape inévitable dans l'étude du spectre de HD.

La molécule D_2 a déjà été l'objet de diverses études à partir des spectres d'absorption et d'émission. Les premières études remontent à celles effectuées par Dieke en 1930 dans le domaine du visible. Ensuite Bredhol et Herzberg en 1973 ont étendu la gamme spectrale du spectre d'émission de D_2, précédemment limitée à 1250-1650 Å, jusqu'à 1000 Å. Un an après, Dabrowsky et Herzberg (1974) ont étudié le spectre d'absorption à haute résolution dans la gamme spectrale 840 à 1000 Å. Les récents travaux sur le spectre d'émission à haute résolution de cette molécule sont ceux de Larzillière (1980) dans la région spectrale proche de 800 Å. Les énergies des niveaux appartenant à différents états électroniques de la molécule D_2 ont été publiées par Freund en 1985 à partir d'une compilation de tous les résultats des nombres d'onde obtenus à partir de différentes études.

L'analyse de spectres consiste à attribuer chaque nombre d'onde de raie spectrale observée à une transition entre un niveau supérieur d'état électronique excité et un niveau inférieur de l'état électronique fondamental de la molécule. Pour cela nous avons été amenés à faire un travail préliminaire pour estimer les nombres d'onde des différentes transitions électroniques de la molécule, à partir d'un calcul théorique des niveaux d'énergie ro-vibrationnels des états excités et de l'état fondamental et les probabilités de transition entre ces niveaux d'énergie. Ce calcul fait appel aux récentes données *ab initio* des courbes de potentiels des états électroniques, des couplages non adiabatiques, des corrections adiabatiques et des moments de transitions électroniques. Il est basé sur la résolution des équations couplées pour plusieurs états électroniques excités. Actuellement, les meilleures données *ab initio* de la molécule H_2 et ses isotopes, sont celles obtenues par Wolniewics (1). Pour des états électroniques plus élevés, proches de la limite d'ionisation, il existe des méthodes plus adaptées basées sur la théorie du défaut quantique du type MQDT (Multichannel Quantum Defect Theory) que nous n'avons pas explorées dans ce travail car nous nous sommes intéressés aux premiers états électroniques excités.

Le spectre de la molécule étudiée (D_2) présente un aspect de spectre de raies semblable à un spectre atomique complexe. L'originalité de notre analyse est d'utiliser un programme informatique d'aide à l'analyse spectrale, IDEN, développé pour les spectres atomiques complexes et utilisé dans notre laboratoire. Ce programme nous permet de manipuler et de visualiser une énorme quantité de données pour identification des raies et détermination des niveaux d'énergie ro-vibrationnels correspondants.

Les valeurs quantitatives des intensités des raies sont importantes dans l'analyse spectrale. Elles permettent, si l'équilibre thermodynamique du milieu où se trouvent les molécules est satisfait, d'avoir une estimation de la température du milieu et de déterminer les rapports de branchement des niveaux d'énergie. Nous avons entrepris récemment la mise en place d'un nouveau système de détection, utilisé communément dans la détection des rayons X ou d'autres rayonnements ionisants, pour mesurer quantitativement les intensités des raies spectrales. Ce détecteur présente, contrairement au détecteur plaque photo, une réponse linéaire en fonction du signal détecté avec

une dynamique de 10^5. Les résultats obtenus sur les intensités seront utilisés pour la comparaison avec nos résultats théoriques des probabilités de transitions.

La calibration des spectres d'émission VUV enregistrés repose sur l'utilisation des longueurs d'onde relatives des raies de références, choisies parmi les raies atomiques d'un spectre de comparaison juxtaposé au spectre étudié, ou parmi les raies d'impuretés présentes dans le spectre moléculaire. Ces raies de références sont connues avec une précision de l'ordre de $\Delta\lambda/\lambda = 5 \times 10^{-7}$, ce qui limite la précision de nos mesures à $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-6}$. Afin d'améliorer cette précision et de corriger tout décalage systématique, nous avons mesuré, par spectroscopie laser XUV à très haute résolution, des longueurs d'onde absolues de raies d'absorption des molécules HD et D_2 avec une précision inégalée de $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-8}$ sur la gamme limitée de longueurs d'onde accessible par l'accordabilité du laser XUV. Ces mesures ont été effectuées au Centre Laser européen de l'université libre d'Amsterdam (LCVU) en collaboration avec le Professeur Wim Ubachs.

Les raies moléculaires mesurées par la spectroscopie laser XUV seront d'une grande utilité non seulement pour la calibration des spectres moléculaires enregistrés à Meudon, mais aussi pour des applications astrophysiques. En effet l'idée que les constantes physiques fondamentales puissent varier sur une échelle de temps cosmologique est actuellement activement étudiée en physique et en astronomie. Cette possible variation peut être mise en évidence à partir d'une comparaison précise des longueurs d'onde des raies des hydrogènes moléculaires (H_2 ou HD) observées dans les spectres d'absorption de plusieurs quasars situés à des distances différentes, c'est à dire formés durant des époques différentes, avec celles obtenues en laboratoire. Nous apportons avec ces nouvelles mesures des contraintes sur la mise en évidence d'une possible variation cosmologique du rapport des masses proton-électron $\mu = m_p/m_e$. Cette étude nécessite par ailleurs la connaissance des coefficients de sensibilité des longueurs d'onde par rapport à la variation de μ que nous avons calculés dans notre étude théorique.

La spectroscopie moléculaire dont nous avons discutée jusqu'à maintenant, met en jeu des transitions électroniques entres deux niveaux d'énergie liés appartenant à deux états électroniques différents. Cependant, des transitions liés-libres et libres-libres entre les états de la molécule sont aussi possibles. Celles-ci interviennent, par exemple, lors d'une collision entre deux atomes d'hydrogène ou lors de la collision d'un ion et d'un atome neutre en présence d'un champs électromagnétique (photon).

L'absorption des photons à partir du complexe collisionnel composé de deux atomes d'hydrogène H-H est responsable de l'apparition de satellites quasi-moléculaires, observés dans les spectres d'étoiles riches en hydrogène telle que les naines blanches DA ou les λ bootis (155). En effet, dans les spectres des naines blanches pris par IUE, HST et FUSE, des structures présentes au voisinage des raies d'hydrogène atomique ont été identifiées comme étant dues aux absorptions de quasi-molécules formées par collision d'un atome d'hydrogène dans son état fondamental et d'un autre atome dans un état excité. Ces raies "satellites" sont considérées comme une importante source d'opacité, et constituent un bon outil de diagnostic de température et de gravité des étoiles.
Ici nous avons effectué une nouvelle étude quantique du satellite quasi-moléculaire de la raie Lymanβ à 1150 Å dû aux collisions H-H, en calculant les contributions des transitions libres-libres et libres-liées au coefficient d'absorption de la raie.

Le présent manuscrit est scindé en quatre parties. La première partie est consacrée à l'étude théorique des niveaux d'énergie ro-vibrationnels des états électroniques excités et des probabilités de transition correspondantes vers les niveaux d'énergie de l'état fondamental pour les molécules

H_2, D_2 et HD, en utilisant les récentes courbes de potentiels et en tenant en compte des couplages non adiabatiques entre les différents états électroniques. Elle contient une présentation générale des molécules diatomiques (chapitre 1) et une description des calculs (chapitre 2). Une étude particulière de la brisure de symétrie $g - u$ dans la molécule HD est présentée dans le chapitre 3.

La deuxième partie est partagée en trois chapitres : le premier (chapitre 4) présente le dispositif expérimental utilisé pour la production et l'enregistrement des spectres d'émission à haute résolution de D_2 et de HD, ainsi que la calibration des spectres obtenus sur plaques photographiques. On donnera aussi dans ce chapitre une brève description du nouveau système de détection que nous avons utilisé pour mesurer les intensités des raies moléculaires. Dans le deuxième (chapitre 5) on décrira le programme utilisé pour l'analyse des spectres d'émission. Dans le troisième (chapitre 6) nous discuterons les résultats de l'analyse, et nous montrerons aussi les premiers résultats de mesure d'intensités de raies moléculaires ainsi que la détermination du rapport de branchement des niveaux d'énergie. Les résultats d'analyse concernant les raies identifiées et les niveaux d'énergie déterminés sont présentés sous formes d'articles et de tableaux dans les annexes.

Dans la troisième partie, nous présenterons dans le chapitre 7 les différentes parties du laser XUV utilisé pour faire des mesures de très haute précision sur des longueurs d'onde d'absorption des molécules HD et D_2 ainsi que la calibration de ces longueurs d'onde. Dans le deuxième chapitre de cette partie (chapitre 8) nous discuterons les résultats obtenus en les comparant à d'autres résultats expérimentaux et aux calculs théoriques.

Dans la quatrième partie, nous montrerons l'importance de la spectroscopie d'absorption et d'émission VUV des molécule H_2 et HD dans le domaine astrophysique. Cette partie comporte deux chapitres. Le premier (chapitre 9) concerne l'étude théorique de la possible variation du rapport des masses m_p/m_e pour les molécules H_2 et HD, et le deuxième (chapitre 10) concerne l'étude théorique du satellite quasi-moléculaire de la raie atomique Lymanβ formé lors de la collision H-H.

En parallèle avec ce travail de thèse et en prolongement avec mon stage de DEA, je me suis intéressé, avec le professeur McCarroll, à l'étude de l'échange de charge entre un ion fortement chargé et un atome neutre. Ce processus physique fait intervenir des transitions électroniques entre des états libres. Il est souvent rencontré dans les plasmas et dans le milieu astrophysique. Le calcul de la section efficace d'échange de charge entre l'ion N^{3+} et l'atome neutre H(D) à très faible énergie ($\leq$ 100 meV) nous a permis de comprendre la différence entre les résultats obtenus à partir de la théorie quantique et du modèle classique dans l'étude des effets isotopes sur la section efficace d'échange de charge. Ce travail est présenté dans l'Annexe A et l'article publié, dans l'Annexe B3.

Enfin, après deux articles présentés dans les annexes B, les résultats détaillés de l'analyse des spectres d'émission de D_2 sont présentés respectivement dans les annexes D pour les niveaux d'énergie, et dans les annexes E pour les listes de raies identifiées.

Première partie

ETUDE THEORIQUE DE LA MOLECULE D'HYDROGENE ET DE SES ISOTOPES

Chapitre 1

Présentation générale d'une molécule diatomique

Nous allons dans cette partie aborder les différentes étapes de calculs effectués pour déterminer les niveaux d'énergie appartenant aux états électroniques excités et à l'état fondamental de la molécule H_2 et de ses isotopes D_2 et HD, et les probabilités de transition à partir des niveaux d'énergie des états excités vers les niveaux de l'état fondamental. Pour les états électroniques, nous avons adopté les notations spectroscopiques utilisées par G. Herzberg (10).
Cette étude théorique est très importante et constitue une étape indispensable dans notre travail de thèse. En effet, les prédictions théoriques (niveaux d'énergie et probabilités de transition) seront un support pour l'analyse des spectres moléculaires enregistrés en laboratoire. Pour le calcul des niveaux d'énergie des molécules et des probabilités de transition, nous avons utilisé les récentes données *ab initio* calculées par Wolniewizc. Ces données *ab initio* sont : courbes de potentiel électroniques, couplages non adiabatiques, corrections adiabatiques et moments de transitions entre les états électroniques excités et l'état fondamental.

1.1 Hamiltonien

On considère une molécule isolée constituée de deux électrons et de deux noyaux. En première approximation on ne tient pas compte des effets relativistes. Après séparation du mouvement du centre de masses (11; 12), l'hamiltonien indépendant du temps du système s'écrit comme :

$$H_T = H_e + H_n + H_{gu} + H_c \tag{1.1}$$

où (en unités atomiques) :

$$H_e = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{2} \nabla_i^2 + V(\vec{r_i}, R). \tag{1.2}$$

$$H_n = \frac{1}{2\mu_n}\nabla_{\vec{R}}^2. \tag{1.3}$$

$$H_{gu} = -\frac{1}{2\mu_\alpha}\vec{\nabla}_{\vec{R}}.\sum_{i=1}^{2}\vec{\nabla}_i \tag{1.4}$$

$$H_c = -\frac{1}{8\mu_n}\sum_{ij}^{2}\vec{\nabla}_i\vec{\nabla}_j. \tag{1.5}$$

où $\mu_n = M_1M_2/(M_1 + M_2)$ est la masse réduite des noyaux 1 et 2 et μ_α est aussi une masse réduite donnée par $M_1M_2/(M_1 - M_2)$.

H_e est l'opérateur Hamiltonien électronique. Son premier terme représente l'énergie cinétique des électrons, et son deuxième terme $V(\vec{r_i}, R)$ représente le potentiel d'interaction entre les différentes particules chargées. Le potentiel d'interaction est composé du potentiel de répulsion électrostatique des électrons V_{ee}, du potentiel de répulsion électrostatique des noyaux V_{NN} et du potentiel d'attraction électrostatique des électrons et des noyaux V_{Ne}. Ces trois termes sont donnés par les formules suivantes :

$$V_{ee} = \sum_{i>j}^{2} \frac{1}{\vec{r_i} - \vec{r_j}}.$$

$$V_{NN} = \frac{1}{|\vec{R_1} - \vec{R_2}|}.$$

$$V_{Ne} = -\sum_{i=1}^{2} \frac{1}{|\vec{R_1} - \vec{r_i}|} - \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{|\vec{R_2} - \vec{r_i}|}.$$

$\vec{R} = \vec{R_1} - \vec{R_2}$ est la coordonnée nucléaire dans le référentiel du laboratoire, $\vec{r_i}$ est la coordonnée du i^{eme} électron. $R = |\vec{R}|$ est la distance internucléaire.
H_n est l'opérateur Hamiltonien énergie cinétique du mouvement relatif des noyaux. H_{gu} est l'opérateur donnant le couplage entre les mouvements électronique et nucléaire. L'origine de cet opérateur est liée au fait que le centre de masse et le centre de charge de la molécule ne coïncident pas. Pour le cas d'une molécule homonucléaire $M_1 = M_2$, l'opérateur H_{gu} est nul, alors que pour une molécule diatomique hétéronucléaire $M_1 \neq M_2$ ce terme n'est pas nul. H_c est l'opérateur polarisation de masse.

Une description complète du système moléculaire nécessite un traitement de l'ensemble des électrons et des noyaux. Cependant comme une résolution analytique de l'équation de Schrödinger avec l'hamiltonien H_T (eq. 1.1) est impossible, on est amené à utiliser un certain nombre d'approximations qui vont nous permettre de résoudre numériquement cette équation.

1.2 Approximation adiabatique de Born-Oppenheimer

L'approximation de Born-Oppenheimer (13) permet de traiter séparément les mouvements électroniques et nucléaires. Elle repose sur le fait que la masse d'un électron est beaucoup plus petite que la masse d'un noyau ($m_{proton}/m_e \approx 1836$), alors que les forces qui agissent sur ces particules sont du même ordre de grandeur. Il en découle que le mouvement des noyaux est plus lent que le mouvement des électrons. Ceci nous permet de traiter le mouvement électronique pour une position fixe des noyaux (clamped-nuclei).

Soit $\Psi_i^{el}(\vec{r}, R)$ la fonction d'onde électronique associée à l'état électronique i. Cette fonction d'onde ne dépend que paramétriquement de la distance internucléaire R. Elle est fonction d'onde propre de l'hamiltonien H_e :

$$H_e \Psi_i^{el}(\vec{r}, R) = U_i(R) \Psi_i^{el}(\vec{r}, R) \tag{1.6}$$

où $U_i(R)$ est l'énergie potentielle adiabatique qui dépend de la distance internucléaire. L'ensemble des fonctions d'onde électroniques Ψ_i^{el} forme une base complète appelée *base adiabatique*.

Les courbes de potentiels adiabatiques de la molécule sont obtenues à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger électronique 1.6. La notation spectroscopique d'un état électronique associé à une énergie potentielle $U(R)$ est donnée par ${}^{(2S+1)}\Lambda_{g/u}^{+/-}$. Λ est la valeur absolue de la projection L_z du moment cinétique électronique sur l'axe de quantification de la molécule (z), tel que si $\Lambda = 0, |\pm 1|, |\pm 2|, ...$ l'état électronique sera noté, respectivement, par $\Sigma, \Pi, \Delta.....$ Les énergies des états électroniques de $\Lambda \geq |\pm 1|$ sont dégérénées (10). S est le spin total des électrons. Pour une molécule linéaire, la parité $+/-$ est obtenue à partir de la reflexion des coordonnées électroniques par rapport au plan contenant l'axe de la molécule. Les molécules diatomiques homonucléaires présentent une symétrie supplémentaire, g ou u, obtenue à partir de l'inversion des coordonnées électroniques par rapport au centre géométrique de la molécule.

Sur la Figure 1.1 on montre un exemple des courbes de potentiels des états électroniques des molécules H_2^-, H_2 et H_2^+.

La fonction d'onde totale de la molécule $\Phi(\vec{r}, \vec{R})$ peut s'écrire comme un développement sur la base adiabatique :

$$\Phi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{i=1}^{\infty} \Psi_i^{el}(\vec{r}, R)\phi_i(\vec{R}) \tag{1.7}$$

où les coefficients $\phi_i(\vec{R})$ sont les fonctions d'onde nucléaires données par :

$$\phi_i(\vec{R}) = \varphi_i(R)\Upsilon_i(\Theta, \Xi) \tag{1.8}$$

où $\Upsilon_i(\Theta, \Xi)$ est la fonction d'onde rotationnelle de la molécule, où Θ et Ξ sont les angles qui définissent le vecteur $\vec{R}$ dans l'espace. $\varphi_i(R)$ est la fonction d'onde vibrationelle de la molécule. Pour un niveau d'énergie lié, de nombre quantique vibrationnel v, la fonction d'onde vibrationnelle correspondante est caractérisée par un nombre de noeuds égal à v. Elle s'annule à l'extérieur du puits de potentiel électronique. Par contre pour un niveau d'énergie libre de la molécule, qui se situe au-dessus de la limite de dissociation de l'état électronique considéré, la fonction d'onde vibrationnelle libre est caractérisée par des oscillations à l'infini sous forme d'une fonction sinusoïdale.

L'équation de Schrödinger obtenue à partir de l'application de l'hamiltonien total H_T sur la fonction d'onde $\Phi(\vec{r}, \vec{R})$ est compliquée à résoudre. Ceci est dû à des termes de couplage entre les différents états électroniques $\Psi_i^{el}(\vec{r}, R)$ (voir l'équation 1.11 ci-dessous). Pour résoudre ce problème une autre approximation est nécessaire.

Dans le cadre de l'approximation adiabatique, la fonction d'onde totale (eq. 1.7) s'écrit comme un seul produit de fonction d'onde nucléaire et de fonction d'onde électronique.

$$\Phi(\vec{r}, \vec{R}) = \Psi_i^{el}(\vec{r}, R)\phi_i(\vec{R}) \tag{1.9}$$

Cette approximation peut être validée dans le cas où les électrons suivent instantanément, adiabatiquement, le mouvement des noyaux. Ainsi les interactions entre les différents états électroniques sont négligées et l'équation de Schrödinger devient facile à résoudre. Ceci est applicable aussi pour

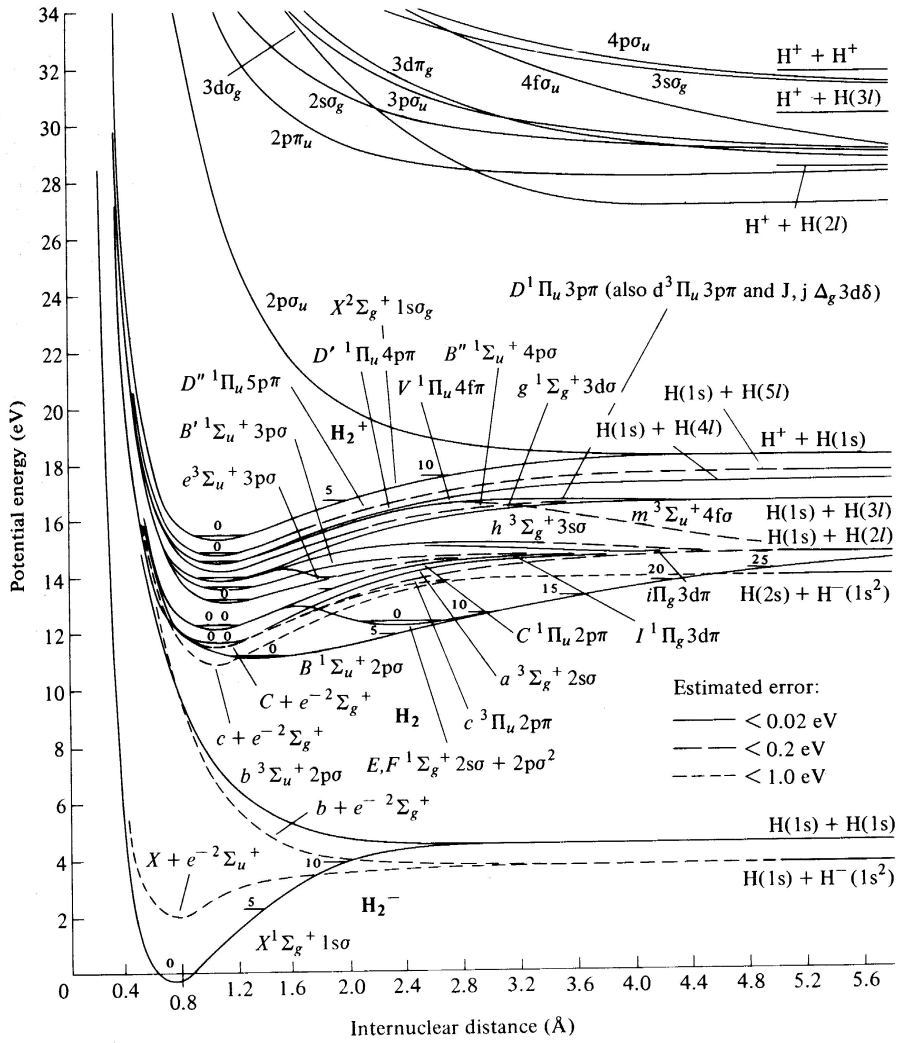


Figure 1.1 – *Les énergies potentielles adiabatiques des molécules H_2^- ,H_2 et H_2^+ (14).*

l'état fondamental qui est souvent isolé et loin des autres états excités.

Dans cette approximation, l'équation de Schrödinger pour un seul état électronique s'écrira comme :

$$\{-\frac{1}{2\mu_n}[\frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1)}{R^2}] + U(R) - E\}\,\varphi(R) = 0. \tag{1.10}$$

En revanche, pour les états excités, cette approximation peut ne pas suffir pour décrire beaucoup de phénomènes physiques tels que la photodissociation, l'échange de charge, la position des niveaux d'énergie dans les courbes de potentiel ... etc.

1.3 Equations couplées dans la représentation adiabatique

Bien que l'hamiltonien électronique H_e soit diagonal dans la base adiabatique, l'hamiltonien total H_T de l'équation 1.1 reste non séparable par rapport aux mouvements électronique et nucléaire. Le couplage entre les mouvements électroniques et nucléaires est assuré par des couplages dits non adiabatiques entre les différents états électronique de différentes symétries.

L'équation de Schrödinger décrivant une molécule diatomique homonucléaire est obtenue à partir de l'application de l'opérateur Hamiltonien total H_T sur la fonction d'onde totale (eq.1.7), et la multiplication par le conjugué de la fonction d'onde nucléaire $\phi_i^*(\vec{R})$. Elle s'écrira sous la forme matricielle comme (15) :

$$\{-\frac{1}{2\mu_n}[\mathbf{I}\frac{d^2}{dR^2} - \mathbf{I}\frac{J(J+1)}{R^2} + \mathbf{A}(R) + 2\mathbf{B}(R)\frac{d}{dR}] + \mathbf{U}(R) - E\}\,\varphi(R) = 0. \tag{1.11}$$

où : $U_i(R) = \langle\Psi_i^{el}|H_e|\Psi_i^{el}\rangle$ est l'élément diagonal de la matrice d'énergie potentielle adiabatique $\mathbf{U}(R)$, $\mathbf{A}(R)$ et $\mathbf{B}(R)$ sont les matrices des couplages non adiabatiques et $\varphi(R)$ est le vecteur propre contenant les différentes fonctions d'onde vibrationelles. Le terme rotationnel en $J(J+1)$ dans l'équation de Schrödinger (1.11) provient de la partie rotationelle de la fonction d'onde nucléaire. Par la suite nous désignerons le ket $|\Psi_i^{el}\rangle$ par $|i\rangle$.

$$A_{ij}^{\Lambda}(R) = \langle i|\frac{d^2}{dR^2} - \frac{L^+L^- - \Lambda(\Lambda+1)}{R^2} + \frac{1}{4}(\vec{\nabla}_1 + \vec{\nabla}_2)^2|j\rangle, \tag{1.12}$$

est l'élément de matrice du couplage non adiabatique $\mathbf{A}$(R). Il couple les états électroniques de même symétrie, à savoir les états $\Sigma-\Sigma, (\Lambda = 0)$ et $\Pi-\Pi(\Lambda = |\pm 1|)$. L'élément diagonal de matrice $A_{ii}^{\Lambda}(R)$ représente la correction adiabatique aux courbes d'énergie potentielle. Elle est donnée par les composantes suivantes (16) :

$$H_1 = -1/2\mu_n\langle i|\frac{d^2}{dR^2}|i\rangle. \tag{1.13}$$

$$H_2 = -1/8\mu_n\langle i|\vec{\nabla}_1{}^2 + \vec{\nabla}_2{}^2|i\rangle. \tag{1.14}$$

$$H_3 = -1/4\mu_n\langle i|\vec{\nabla}_1 \cdot \vec{\nabla}_2|i\rangle. \tag{1.15}$$

La correction adiabatique $A_{ii}^{\Lambda}(R) = H_1 + H_2 + H_3$, qui s'ajoute aux courbes de potentiels électroniques déterminées dans l'approximation de Born-Oppenheimer, est due au fait que les noyaux n'ont pas une masse infinie. Par analogie avec l'atome, cette correction est semblable à la correction apportée à l'énergie d'un atome lorsque le rapport m_e/m_{atome} est pris en compte. $L^{\pm}$ sont les opérateurs composantes du moment orbital électronique total de la molécule dans le repère lié à la molécule. Ils sont donnés par : $L^{\pm} = L_x \pm iL_y$.

L'élément de matrice non diagonal de $A(R)$ est le couplage rotationnel. Il couple les états électroniques de différentes symétries, par exemple entre l'état Π^+ et l'état Σ^+. Ce couplage est en fait dû au passage du repère laboratoire au repère tournant lié à la molécule, dans lequel les états électroniques sont décrits (Couplage de Coriolis). Il est donné par :

$$A_{ij}^{\Lambda+1,\Lambda}(R) = \langle i|L^+|j\rangle\frac{1}{R^2}\sqrt{J(J+1) - \Lambda(\Lambda+1)}. \tag{1.16}$$

Finalement, $B_{ij}^{\Lambda}(R)$, l'élément de matrice non diagonale de $B(R)$, est le couplage radial. Il est dû à la variation de la distance internucléaire (d/dR). Ce couplage présente souvent une variation plus importante en fonction de R que les couplages donnés par l'équation (1.12, 1.16). Ce couplage radial est donné par :

$$B_{ij}^{\Lambda}(R) = \langle i|\frac{d}{dR}|j\rangle \tag{1.17}$$

1.4 Représentation diabatique

Dans la représentation adiabatique, les états électroniques de même symétrie présentent des régions de croisement évité en fonction de la distance internucléaire R. Dans ces régions, le couplage radial $B^{\Lambda}(R)$ présente une variation brusque et de grande amplitude en fonction de R. Ce pic de variation introduira des difficultés dans la résolution du système d'équations couplées (eq.1.11).

On peut définir une nouvelle base de fonctions d'onde électroniques dite base diabatique qui amène à une représentation rigoureusement équivalente à la représentation adiabatique (17). Cette base diabatique est définie de manière à éliminer le couplage radial présent dans l'équation de Schrödinger 1.11 (18; 15). On peut passer de la représentation adiabatique à la représentation diabatique à l'aide d'une matrice de passage $\mathbf{C}$:

$$\chi(\vec{r}, R) = \Psi^{el}(\vec{r}, R) \cdot \mathbf{C}(R). \tag{1.18}$$

Dans le cas de deux états électroniques, la matrice $\mathbf{C}$(R) peut se mettre sous la forme :

$$\mathbf{C}(R) = \begin{pmatrix} \cos\omega(R) & \sin\omega(R) \\ -\sin\omega(R) & \cos\omega(R) \end{pmatrix} \tag{1.19}$$

où ω est appelé angle de mélange. A l'aide des relations 1.17, 1.18 et 1.19 on peut relier $\omega(R)$ au terme de couplage radial :

$$\partial\omega/\partial R = B_{12} = -B_{21} \quad \Longrightarrow \quad \omega(R) = \int_R^{\infty} B_{12}(R')\, dR' \tag{1.20}$$

D'une manière générale, si on a plusieurs états électroniques de même symétrie, la matrice $\mathbf{C}$(R) est définie par la relation (19) :

$$\frac{d\mathbf{C}}{dR} + \mathbf{B}(R) \cdot \mathbf{C}(R) = 0. \tag{1.21}$$

avec la condition aux limites :

$$\mathbf{C}(R) = \mathbf{I} \quad R \to \infty. \tag{1.22}$$

Les fonctions d'onde diabatiques et les fonctions d'onde adiabatiques coïncident loin du croisement évité. Dans la représentation diabatique, l'équation de Schrödinger s'écrira sous la forme matricielle comme :

$$\{-\frac{1}{2\mu_n}[\mathbf{I}\,\frac{d^2}{dR^2} - \mathbf{I}\,\frac{J(J+1)}{R^2}] + \mathbf{V}(R) - E\}\xi(R) = 0. \tag{1.23}$$

où $\varphi(R) = \mathbf{C}(R)\,\xi(R)$.

La nouvelle matrice du potentiel d'interaction entre les états électroniques $\mathbf{V}(R)$ s'écrit sous forme de deux matrices :

$$\mathbf{V}^{(+)} = \begin{pmatrix} \mathbf{V_\Sigma} & \mathbf{V_{\Sigma\Pi}} \\ \mathbf{V_{\Pi\Sigma}} & \mathbf{V_\Pi} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{V}^{(-)} = \mathbf{V_\Pi} \tag{1.24}$$

La première matrice $\mathbf{V}^{(+)}$ contient un bloc diagonal $\mathbf{V_\Sigma}$ et un bloc diagonal $\mathbf{V_\Pi}$, dont les éléments diagonaux sont les potentiels diabatiques respectivement des états Σ^+ et des états Π, et les éléments non-diagonaux de chacun des blocs représentent les couplages électroniques entre ces états. Les deux blocs hors diagonaux $\mathbf{V_{\Sigma-\Pi}}$ ont pour éléments de matrice les couplages rotationnels entre les états Π^+ et Σ^+. La deuxième matrice $\mathbf{V}^{(-)}$ concerne les états électroniques de symétrie Π^- qui ne sont pas affectés par le couplage rotationnel avec les états Σ^+ . Ses éléments diagonaux sont les potentiels diabatiques des états Π et les éléments non-diagonaux, les couplages électroniques entre ces états. Les potentiels diabatiques sont liés aux potentiels adiabatiques par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \mathbf{V_\Sigma} &= \mathbf{C_\Sigma^T}[\mathbf{U_\Sigma} - \frac{1}{2\mu_n}(\mathbf{A_\Sigma^+} - \mathbf{B_\Sigma^2})]\mathbf{C_\Sigma}, \\ \mathbf{V_\Pi} &= \mathbf{C_\Pi^T}[\mathbf{U_\Pi} - \frac{1}{2\mu_n}(\mathbf{A_\Pi^+} - \mathbf{B_\Pi^2})]\mathbf{C_\Pi}. \end{aligned} \tag{1.25}$$

où les deux matrices $\mathbf{C_\Sigma}$ et $\mathbf{C_\Pi}$ sont des solutions de l'équation 1.21, avec comme coefficients $\mathbf{B_\Sigma}$ et $\mathbf{B_\Pi}$ obtenus à partir de l'équation 1.17. La matrice $\mathbf{A_\Lambda^+}$ est donnée par (15) :

$$\mathbf{A_\Lambda^+} = 1/2(\mathbf{A_\Lambda} + \mathbf{A_\Lambda^T}) \tag{1.26}$$

Chapitre 2

Niveaux d'énergie et probabilités de transition des molécules H_2, D_2 et HD

Dans cette partie nous avons calculé les niveaux d'énergie rovibrationnels appartenant à chaque état électronique des molécules H_2, D_2 et HD. Les états électroniques aux quels nous nous sommes intéressés dans ce travail sont : l'état fondamental $X^1\Sigma_u^+$ et les états excités $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $D^1\Pi_u$, $D'^1\Pi_u$ et $D''^1\Pi_u$. Les états électroniques excités sont couplés par des couplages non adiabatiques. Lorsque la molécule est dans un niveau d'énergie de ces états électroniques, elle peut se désexciter vers plusieurs niveaux d'énergie de l'état fondamental. Ces transitions sont gouvernées par l'opérateur moment de transition électronique et obéissent à des règles de sélection que nous développerons dans les prochains paragraphes.
Les courbes d'énergie potentielle, les couplages non adiabatiques, la correction adiabatique et les moments de transition électroniques sont obtenus par des calculs de chimique quantique. Dans la Figure 2.1 sont montrées les formes des courbes d'énergie potentielle de H_2 et de ses isotopes.

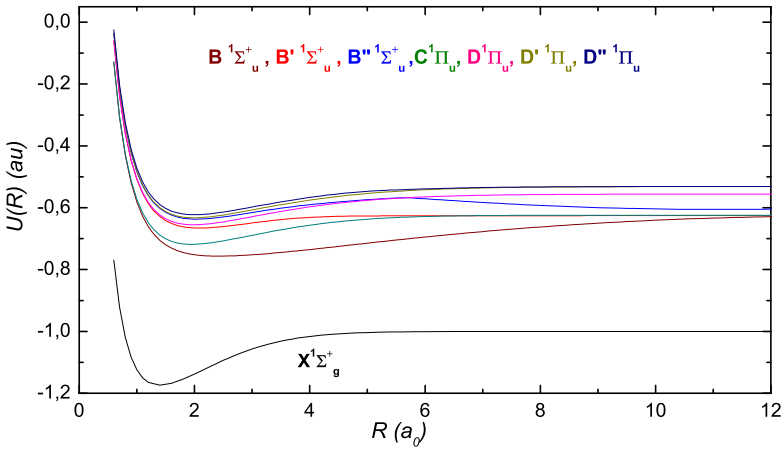


Figure 2.1 – *Différentes courbes de potentiel de H_2 et ses isotopes.*

2.1 Méthode de calcul

Dans un premier temps, nous avons fait un calcul qui nous a permis de mettre en évidence l'effet des couplages non adiabatiques, à savoir le couplage radial et le couplage rotationnel, et l'effet de la correction adiabatique sur les énergies des niveaux de l'état $B^1\Sigma_u^+$ de la molécule H_2. Cet effet est évalué en comparant les résultats de calculs avec les données expérimentales (26).

Il est connu maintenant que, au delà de l'approximation de Born-Oppenheimer, les états électroniques de même symétrie sont couplés par un couplage radial homogène (voir équations 1.12 et 1.17), et que les courbes de potentiel correspondantes présentent un croisement évité dans la représentation adiabatique. Cependant les états électroniques de différentes symétries, tels que les états $^1\Sigma_u^+$ et $^1\Pi_u$, peuvent être affectés par un couplage rotationnel dit hétérogène (voir équations 1.16). Ce couplage rotationnel sera responsable de la levée de dégénérescence présente dans l'état $^1\Pi_u$ (27). Sous l'effet de ce couplage, nous aurons deux états électroniques de symétries différentes : un état $^1\Pi_u^+$ couplé avec l'état $^1\Sigma_u^+$ et un autre état électronique $^1\Pi_u^-$ couplé à un autre état Π_u^- via le couplage radial.

Dans ce contexte, le calcul des niveaux d'énergie rovibrationnels liés de chaque état électronique se fait par la résolution du système d'équations couplées (équation 1.11). Le nombre d'équations couplées est égal au nombre d'états électroniques couplés. Dans un premier temps, nous avons pris en compte, pour les molécules H_2, HD et D_2, les quatre états électroniques $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ et $D^1\Pi_u$ fortement couplés par les couplages homogènes et hétérogènes. En effet les états électroniques $B^1\Sigma_u^+$ et $B'^1\Sigma_u^+$ sont couplés par le biais du couplage radial ainsi que les états $C^1\Pi_u$ et $D^1\Pi_u$, alors que le couplage rotationnel couple l'état $B^1\Sigma_u^+$ et l'état $B'^1\Sigma_u^+$ aux états électroniques $C^1\Pi_u^+$ et $D^1\Pi_u^+$. Les états électroniques de symétrie $C^1\Pi_u^-$ et $D^1\Pi_u^-$ sont couplés via le couplage radial (15).

Pour les états électroniques singulet de symétrie u, chaque état lié est caractérisé par un nombre quantique rotationnel J et une parité (+,-) spécifique à chaque état électronique de symétrie Λ^+ ou Λ^-. En plus du nombre quantique J et de la parité, les niveaux d'énergie liés sont aussi caractérisés par un indice i. Cet indice donne l'ordre de numérotation du niveau dans l'échelle des énergies croissantes. Chaque fonction d'onde non adiabatique $\Phi_i(\vec{r},\vec{R})$ peut s'écrire comme un développement sur une base des fonctions d'onde électroniques et rotationnelles $\Psi_{nJ}(r,R)$ (base adiabatique) sous la forme :

$$\Phi_i(\vec{r},\vec{R}) = \sum_n \Psi_{J,i}(\vec{r},R) f_{n,i}(R) \tag{2.1}$$

où n est l'indice de la fonction d'onde électronique appartenant à l'un des états électroniques $\{B, B', C, D\}$. Dans le cas présent, la fonction d'onde non adiabatique $f_i(R)$ est un vecteur à quatre composantes qui s'écrit comme :

$$f_i(R) = \{f_{n,i}(R), f_{n',i}(R), ..., \} \tag{2.2}$$

Ce vecteur satisfait les équations couplées données par 1.11, qui s'écrit comme une matrice 4×4. Dans la représentation adiabatique, les éléments diagonaux de la matrice de l'hamiltonien total sont donnés par les potentiels adiabatiques incluant la barrière centrifuge et la correction de masse (donnée par l'élément diagonal de l'équation 1.12), tandis que les éléments non diagonaux sont donnés par les couplages rotationnels et radiaux (voir équations 1.12, 1.16 et 1.17). Cette matrice peut s'écrire comme :

$$\mathbf{H_T} = \begin{pmatrix} U_B - \frac{1}{2\mu_n}[A_{B,B} + \frac{J(J+1)}{R^2}] & -\frac{1}{2\mu_n}[B_{B,B'} + A_{B,B'}] & -\frac{1}{2\mu_n}[A_{B,C^+}] & -\frac{1}{2\mu_n}[A_{B,D^+}] \\ -\frac{1}{2\mu_n}[B_{B',B} + A_{B',B}] & U_{B'} - \frac{1}{2\mu_n}[A_{B',B'} + \frac{J(J+1)}{R^2}] & -\frac{1}{2\mu_n}[A_{B',C}] & -\frac{1}{2\mu_n}[A_{B',D}] \\ -\frac{1}{2\mu_n}[A_{C^+,B}] & -\frac{1}{2\mu_n}[A_{C^+,B'}] & U_C - \frac{1}{2\mu_n}[A_{C^+,C^+} + \frac{J(J+1)}{R^2}] & -\frac{1}{2\mu_n}[B_{C^+,D^+} + A_{C^+,D^+}] \\ -\frac{1}{2\mu_n}[A_{D^+,B}] & -\frac{1}{2\mu_n}[A_{D^+,B'}] & -\frac{1}{2\mu_n}[B_{D^+,C^+} + A_{D^+,C^+}] & U_D - \frac{1}{2\mu_n}[A_{D^+,D^+} + \frac{J(J+1)}{R^2}] \end{pmatrix}$$

Étant donné que le couplage rotationnel affecte seulement les états électroniques de symétrie Σ_u^+ et Π_u^+, un autre système d'équations couplées sera résolu pour les états de symétrie Π_u^- sans couplage rotationnel. Les équations couplées seront ensuite résolues dans la représentation diabatique.

Il est possible, comme le font Abgrall et al (28) ou Senn et al (15), de résoudre des systèmes d'équations couplées en utilisant la méthode de Numerov renormalisée, développée par Johnson (29). Cependant de nombreuses méthodes indépendantes du temps, permettant de résoudre un certain nombre de ces problèmes de la dynamique, ont vu le jour ces dernières années, notamment grâce aux développement des méthodes DVR ("Discret Variable Representation"). Dans notre travail, nous avons utilisé la méthode FGH (Fourier Grid Hamiltonian)(30) pour résoudre les équations couplées. Le principe de la méthode FGH est basé sur la discrétisation de l'hamiltonien total H_T composé de l'opérateur énergie cinétique (lié à l'opérateur d'impulsion $\hat{P}$) et de l'opérateur d'interaction électrostatique (lié à l'opérateur position $\hat{X}$) et des fonctions d'onde sur une grille de points $\{x_\alpha\}$. L'avantage de cette méthode est la détermination de tous les niveaux d'énergie liés et des fonctions d'onde couplées dans une seule diagonalisation.

Après la résolution des équations couplées dans la représentation diabatique pour chaque valeur du moment cinétique J, bon nombre quantique, les fonctions d'onde non adiabatiques ainsi obtenues seront ensuite transformées vers la représentation adiabatique via la transformation donnée par l'équation 1.21. Le pourcentage du caractère d'un état électronique n est obtenu par :

$$\rho_i(n) = \int [f_{n,i}(R)]^2 \mathrm{d}R. \tag{2.3}$$

satisfaisant le relation de normalisation suivante : $\rho_i(B) + \rho_i(C) + \rho_i(B') + \rho_i(D) = 1$.

Il faut noter que la composante électronique $f_{n,i}(R)$ tient compte non seulement des états vibrationnels liés mais aussi des états du continuum. Le pourcentage correspondant à un état vibrationnel donné v_n de l'état électronique n peut être obtenu par un développement sur la base des fonctions d'onde vibrationnelles obtenues à partir de l'équation non couplée, dans l'approximation adiabatique, pour l'état n :

$$\rho_i(n, v) = \left| \int f_{n,v}(R) f_{n,i}(R) \mathrm{d}R \right|^2. \tag{2.4}$$

Dans un deuxième temps, nous nous somme intéressés aux états électroniques très excités $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+$, $D'^1\Pi_u$ et $D''^1\Pi_u$. Les données *ab initio* sur les couplages non adiabatiques entre ces états électroniques n'existent pas dans la littérature, sauf la correction adiabatique de masse qui était disponible pour les états $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+, D'^1\Pi_u$. Dans ce cas, nous avons calculé les niveaux d'énergie rovibrationnels liés pour ces états électroniques dans la représentation adiabatique. Pour chaque valeur de moment cinétique J, les valeurs propres et les fonctions d'onde vibrationnelles correspondantes sont obtenues par la résolution de l'équation de Schrödinger à une dimension (eq. 1.10) pour chaque état électronique, en utilisant la méthode FGH.

L'état fondamental $X^1\Sigma_g^+$ est un état isolé loin de l'ensemble des états excités. Il est corrélé dans la limite des atomes séparés à $H(1s) - H(1s)$. Les données *ab initio* sont connues avec une grande précision. Les fonctions d'onde vibrationnelles et les niveaux d'énergie correspondants sont calculés de la même manière que pour les états électroniques $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+$, $D'^1\Pi_u$ et $D''^1\Pi_u$, c.-à-d., pour chaque nombre quantique J dans l'approximation adiabatique et en ajoutant le terme centrifuge et la correction adiabatique à l'énergie potentielle (37). De plus, pour cet état électronique, nous avons tenu compte de l'effet des corrections relativistes et de la correction radiative (37). Ces deux corrections sont plus importantes pour l'état fondamental que pour les états excités. La résolution de l'équation de Schrödinger à une dimension est faite aussi par la méthode FGH.
Néanmoins, les calculs des niveaux d'énergie de l'état fondamental X, de H_2 et ses isotopes, montrent un désaccord de l'ordre de 0.5 cm^{-1} entre la valeur calculée du niveau fondamentale ($v'' = 0, J'' = 0$)

et la valeur expérimentale. Ce désaccord augmente pour les niveaux de grands v'' et J''. Schwartz et Le Roy (42), et Wolinewicz (41) attribuent cette différence résiduelle aux effets de perturbations provenant des états excités $\Sigma_{u/g}$ et $\Pi_{u/g}$ sur les niveaux d'énergie de l'état X. Dans notre calcul nous avons tenu compte de cette correction sur les niveaux d'énergie (41).

Pour commencer le calcul, il faut d'abord choisir une grille de points raisonnable de manière à assurer que les asymptotes des courbes de potentiel prises en compte, convergent vers les limites atomiques. L'hamiltonien est discrétisé sur une grille de points variant entre $[0.6 - 20]$ a.u. avec un pas de 0.02 a.u.. Le choix du pas de la grille repose sur la convergence des énergies de niveaux calculées. Les données *ab initio*, qui dépendent de la distance internucléaire, sont souvent données sur un nombre de points qui ne correspond généralement pas à la nouvelle grille de points. Pour cela il est nécessaire d'ajuster les données théoriques sur la grille choisie.

Nous avons choisi le niveau d'énergie $X(v'' = 0, J'' = 0)$ comme origine des énergies calculées. Pour les états électroniques B, C et B', la limite de dissociation est dérivée à partir de l'approximation adiabatique (15). Elle est donnée par :

$T_{H_2}(n = 2) = 118377.200 \quad \text{cm}^{-1}$;
$T_{HD}(n = 2) = 118676.087 \quad \text{cm}^{-1}$;
$T_{D_2}(n = 2) = 119029.841 \quad \text{cm}^{-1}$;

Les valeurs des limites de dissociation pour $n \geq 3$ sont obtenues à partir de la formule :

$\Delta T(m, n) = -1/2(1 - 1/2\mu_n)(1/m^2 - 1/n^2)$.

Pour la molécule HD et dans le cadre de l'approximation adiabatique, les limites asymptotiques des états électroniques B, C et B', H(1s)+D(2s) ou H(2s)+D(1s), ne sont pas distinguées, et la brisure de symétrie n'est pas prise en compte dans ce premier calcul.

Les masses réduites utilisées pour les molécules H_2, HD et D_2 sont respectivement $\mu_{H_2} = 918.0764$, $\mu_{HD} = 1223.8988$ et $\mu_{D_2} = 1835.2395$ (15). Les énergies de niveaux sont calculées en Hartree puis convertie en cm $^{-1}$. La constante de conversion des énergies est : 1 Hartree= 219474.631 cm^{-1}.

2.2 L'importance des couplages non adiabatiques et de la correction adiabatique

Afin de comprendre l'effet de chaque type de couplage non adiabatique et de la correction adiabatique des énergies potentielles sur les calculs de la structure rovibrationnelle des molécules H_2, HD et D_2, nous avons dans un premier temps, calculé les énergies des niveaux en utilisant uniquement les courbes de potentiel adiabatiques, ensuite en incluant à chaque fois une correction à ces calculs, afin de comparer les résultats obtenus aux valeurs expérimentales. Cette étude était faite pour les trois molécules. Ici nous présentons seulement les résultats de calculs de H_2.

2.2.1 Résultats des calculs dans l'approximation adiabatique de Born-Oppenheimer

Dans cette partie, nous présentons les niveaux d'énergie rovibrationnels de la molécule H_2 obtenus à partir du calcul théorique en utilisant seulement les courbes de potentiel, sans aucune correction. Dans la Table 2.1 et Table 2.2, on donne les énergies de niveaux calculées pour les nombres vibrationnels $v' = 0 - 7$ appartenant aux états électroniques $B^1\Sigma_u^+$ et $C^1\Pi_u$ pour, respectivement, les nombres quantiques $J = 0$ et $J = 1$. En l'absence de tout couplage, le pourcentage

de caractère de l'état électronique ρ donné dans ces tableaux est de 100%. La comparaison avec les valeurs expérimentales (26) montre que le désaccord est de l'ordre de 80 cm^{-1} pour les niveaux d'énergie de $B^1\Sigma_u^+$ et de l'ordre de 70 cm^{-1} pour les niveaux d'énergie de $C^1\Pi_u$. Ces premiers résultats montrent que les calculs effectués dans le cadre de l'approximation adiabatique sont loin de fournir de bonnes prédictions et que les valeurs des énergies prédites sont souvent au dessus des valeurs expérimentales.

v	E_{cal}	$c-o$	$\rho(B)$
0	90123.81	79.71	100
1	91443.77	78.08	100
2	92726.63	76.72	100
3	93974.56	75.47	100
4	95188.66	74.42	100
5	96369.65	73.42	100
6	97518.05	72.52	100
7	98634.35	71.73	100

Table 2.1 – *Comparaison des énergies ro-vibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $B^1\Sigma_u^+$ de la molécule H_2, obtenues dans l'approximation de Born-Oppenheimer, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=0.*

v	E_{cal}	$c-o$	$\rho(C)$
0	99082.28	69.78	100
1	101388.70	68.89	100
2	103560.99	67.71	100
3	105601.83	87.50	100
4	107512.85	68.16	100
5	109294.58	67.07	100
6	110946.18	66.32	100
7	112465.23	64.86	100

Table 2.2 – *Comparaison des énergies ro-vibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $C^1\Pi_u$ de la molécule H_2, obtenues dans l'approximation de Born-Oppenheimer, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=1.*

2.2.2 L'effet du couplage radial

Nous avons calculé les énergies des niveaux appartenant aux différents états électroniques Σ et Π en incluant seulement le couplage radial. On rappelle que dans ce cas, il est nécessaire de passer de la représentation adiabatique à la représentation diabatique pour résoudre les équations couplées. La Figure 2.2 montre la variation en fonction de la distance R de ces couplages qui découlent du calcul électronique effectué dans l'approximation de Born-Oppenheimer.

Les résultats de calculs, concernant les mêmes niveaux que la partie 2.2.1, sont présentés dans la Table 2.3 et la Table 2.4 pour les mêmes niveaux qu'au paragraphe précédent. À partir de ces résultats, nous constatons que, tenir compte seulement du couplage radial ne suffit pas pour améliorer les valeurs des énergies et que les différences avec les valeurs expérimentales restent toujours importantes. En revanche, ce couplage entraîne la présence de perturbations que l'on peut localiser parmi les niveaux ro-vibrationnels plus élevés appartenant aux différents états électroniques. Un tel cas est observé pour le niveau $E_{cal}(v' = 37, J' = 1) = 118310.72$ cm^{-1}, avec 59% de caractère B et 41% de caractère B', et pour le niveau $E_{cal}(v' = 10, J' = 1) = 118308.10$ cm^{-1}, avec 38% de caractère B et 62% de caractère B'. Ces pourcentages de mélange montrent l'effet du couplage radial entre les états B et B'. En l'absence de ce couplage, ces deux niveaux d'énergie seraient, respectivement, de caractère purement B et B' et se situeraient aux positions 118311.96 cm^{-1} et 118309.90 cm^{-1}, à environ 1 cm^{-1} des positions non perturbées.

2.2.3 L'effet du couplage rotationnel

Dans ce paragraphe, nous examinons l'effet du couplage rotationnel sur les niveaux d'énergie de la molécule H_2. La Figure 2.3 donne en fonction de la distance R la forme des opérateurs de couplage entre les différents états électroniques $\Sigma - \Pi$ étudiés. Ces opérateurs sont déterminés dans l'approximation de Born-Oppenheimer et sont identiques pour H_2 et ses isotopes. Ils entraînent la

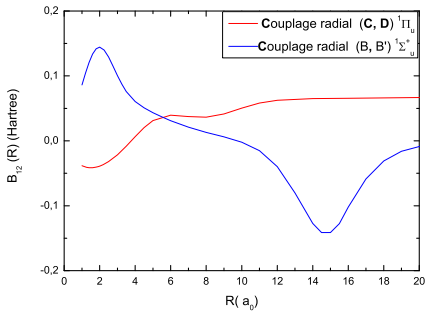


Figure 2.2 – *Le couplage radial $B_{12}(R)$ entre les états électroniques de même symétrie ($^1\Sigma_u^+ -^1 \Sigma_u^+$;$^1 \Pi_u^+ -^1 \Pi_u^+$) en fonction de la distance R (16).*

v	E_{cal}	$c-o$	$\rho(B)$
0	90123.67	79.85	99.99
1	91443.41	78.44	99.99
2	92726.10	77.25	99.99
3	93973.88	76.15	99.99
4	95187.85	75.23	99.99
5	96368.73	74.34	99.99
6	97517.04	73.53	99.99
7	98633.26	72.82	99.99

Table 2.3 – *Comparaison des énergies ro-vibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $B^1\Sigma_u^+$ de la molécule H_2, obtenus en tenant en compte du couplage radial, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=0.*

v	E_{cal}	$c-o$	$\rho(C)$
0	99082.25	69.81	99.99
1	101388.62	68.98	99.99
2	103560.87	67.83	99.99
3	105601.67	87.66	99.99
4	107512.68	68.33	99.99
5	109294.39	67.26	99.99
6	110945.99	66.51	99.99
7	112465.04	65.05	99.99

Table 2.4 – *Comparaison des énergies rovibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $C^1\Pi_u$ de la molécule H_2, obtenues en tenant compte du couplage radial, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=1.*

levée de dégénérescence pour les états électroniques Π. Les calculs sont faits de la même manière que pour le couplage radial. Les résultats sur les niveaux d'énergie étudiés des états $B^1\Sigma_u^+$ et $C^1\Pi_u^+$ sont donnés dans les Table 2.5 et Table 2.6 pour un nombre quantique $J = 1$. On remarque que les valeurs obtenues en incluant le couplage rotationnel entre les états $B^1\Sigma_u^+$ et $C^1\Pi_u^+$ sont toujours éloignées des données expérimentales. On remarque aussi que les valeurs calculées sont toutes au dessus des valeurs expérimentales pour l'état électronique C alors qu'elles se trouvent soit au dessus, soit en dessous, pour l'état B. Ceci peut être dû à l'utilisation d'un seul couplage non adiabatique dans ce calcul, et que l'effet de compensation du déplacement de ces niveaux peut se trouver dans la présence des autres couplages non adiabatiques.

2.2.4 L'effet de la correction adiabatique

Finalement dans cette partie, nous allons voir l'effet que peut induire la correction adiabatique sur les niveaux d'énergie rovibrationnels. Cette correction dépend de la masse réduite des noyaux (voir les formules 1.13, 1.14, 1.15). Wolniewicz et Dressler ont calculés les valeurs *ab initio* de cette correction pour les quatre états électroniques B, B', C et D de la molécule H_2 qui sont repésentées sur la Figure 2.4. Outre la molécule H_2, il faut déterminer cette correction pour les isotopes D_2 et HD. Elle est obtenue facilement en multipliant seulement les résultats existants pour H_2 par le rapport de masse $\mu_{H_2}/\ \mu_i$ où i correspond à l'espèce isotopique, HD ou D_2.

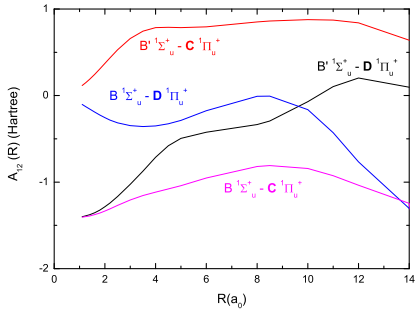


Figure 2.3 – *Le couplage rotationnel $A_{12}(R)$ entre les états électroniques $({}^1\Sigma_u^+ -^1 \Pi_u^+)$ en fonction de la distance R (16).*

v	E_{cal}	$c-o$	$\rho(B)$
0	90342.09	-99.78	99.94
1	91631.71	-72.95	99.83
2	92887.37	-48.79	99.73
3	94110.53	-26.71	99.64
4	95301.83	-6.29	99.55
5	96461.63	12.65	99.47
6	97590.23	30.41	99.40
7	98687.88	47.07	99.33

Table 2.5 – *Comparaison des énergies ro-vibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $B^1\Sigma_u^+$ de la molécule H_2, obtenues avec le couplage rotationel, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=1.*

v	E_{cal}	$c-o$	$\rho(C^+)$
0	99090.39	61.67	99.90
1	101395.01	62.58	99.83
2	103564.69	64.01	99.31
3	105607.26	82.07	95.63
4	107514.11	66.90	99.50
5	109293.41	68.65	99.54
6	110942.18	70.32	98.40
7	112464.26	65.83	94.86

Table 2.6 – *Comparaison des énergies rovibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $C^1\Pi_u^+$ de la molécule H_2, obtenues avec le couplage rotationnel, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=1.*

Nous avons fait les calculs des niveaux d'énergie en incluant cette correction dans les courbes de potentiels adiabatiques des états électroniques étudiés. Les résultats concernant les états B et C sont présentés, respectivement, sur les Table 2.7 et Table 2.8. Avec cette correction on remarque que le désaccord entre les valeurs des énergie calculées et celles obtenues par l'expérience est réduit à quelques cm^{-1}. Ce résultat montre l'importance de cette correction pour prévoir les bonnes valeurs théoriques des niveaux d'énergie.

Néanmoins, malgré son importance, cette correction ne permettra pas de localiser les perturbations entre les différents états électroniques. Par exemple, dans ce calcul nous avons trouvé que le niveau d'énergie $E_{cal}(v' = 37, J' = 1) = 118386.70$ cm^{-1} appartient totalement à l'état B et que le niveau $E_{cal}(v' = 10, J' = 1) = 118385.38$ cm^{-1} appartient purement à l'état B', alors qu'en réalité ces deux niveaux sont très couplés et ont un caractère mélangé de B et B'. Une telle perturbation ne peut pas être prévue si on ne tient pas compte des couplages radiaux et rotationnels. L'erreur d'attribution d'un niveau d'énergie à un état électronique peut correspondre à deux cas : lorsque ce niveau est déterminé dans l'approximation de Born-Oppenheimer ou lorsque les couplages non adiabatiques utilisés pour traiter les perturbations ne sont pas précis.

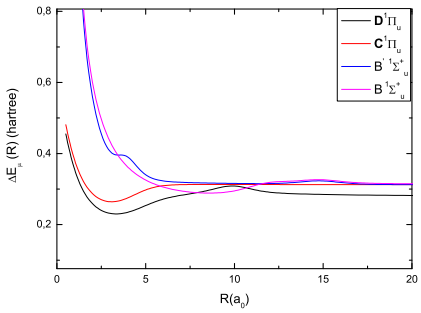


Figure 2.4 – *La variation des corrections adiabatiques des quatre états électroniques* $B^1\Sigma_u^+, B'^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u^+$ *et* $D^1\Pi_u$ *en fonction de la distance* R *(16).*

v	E_{cal}	$c-o$	$\rho(B)$
0	90204.19	-0.67	100
1	91522.97	-1.12	100
2	92804.85	-1.50	100
3	94051.91	-1.88	100
4	95265.24	-2.16	100
5	96445.53	-2.46	100
6	97593.30	-2.73	100
7	98709.01	-2.93	100

Table 2.7 – *Comparaison des énergies ro-vibrationnelles* E_{cal} *(cm*$^{-1}$*) de l'état* $B^1\Sigma_u^+$ *de la molécule* H_2*, obtenues en incluant les corrections adiabatiques, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=0.*

v	E_{cal}	$o-c$	$\rho(C)$
0	99151.16	0.9	100
1	101456.94	0.65	100
2	103628.72	-0.02	100
3	105669.19	20.23	100
4	107579.99	1.02	100
5	109361.65	0.00	100
6	111013.36	-0.86	100
7	112532.70	-2.61	100

Table 2.8 – *Comparaison des énergies rovibrationnelles* E_{cal} *(cm*$^{-1}$*) de l'état* $C^1\Pi_u^+$ *de la molécule* H_2*, obtenues en incluant les corrections adiabatiques, avec les valeurs expérimentales (26) pour* $J = 1$.

2.2.5 Conclusion

Nous avons vu maintenant l'importance des couplages non adiabatiques et des corrections adiabatiques dans le calcul des niveaux d'énergie appartenant aux états électroniques de la molécule H_2 (et pour ses isotopes). Dans la Table 2.9 et dans la Table 2.10 on montre, respectivement, les résultats des niveaux d'énergie rovibrationnels et les pourcentages des caractères des états électroniques de la molécule H_2 obtenus à partir de la diagonalisation de la matrice "complète" de l'hamiltonien H_T pour les états (B, B', C^+, D^+) et (C^-, D^-) . Nous avons choisi la même grille de points, et les mêmes étapes de calculs citées précédemment. Les niveaux d'énergie sont donnés pour une seule valeur du nombre quantique rotationnel, bon nombre quantique, $J = 1$ dans l'ordre croissant au sein des quatre puits de potentiel. À partir de ces résultats, on peut voir que la somme des pourcentages des caractères donne la valeur unité 1.00, et que l'on peut attribuer un niveau d'énergie à l'état électronique ayant le plus grand pourcentage. L'attribution des niveaux d'énergie n'est pas toujours facile dans le cas où la perturbation entre deux niveaux est très grande. Dans ce cas là, les pourcentages des caractères avoisinent 50%.

Un tel calcul d'équations couplées pour ces états électroniques a été déjà fait par plusieurs auteurs en utilisant les données *ab initio* valables à chaque époque. Nous citons parmi cela, Wolniewicz et al (43), Senn et al (15) et Abgrall et al (28). Contrairement aux autres auteurs, Abgrall avait

fait des calculs en utilisant des courbes de potentiels modifiées afin d'ajuster les niveaux d'énergie expérimentaux à l'ordre zéro en J. Il est tout à fait naturel que les résultats obtenus avec ces courbes de potentiel semi-empiriques, que ce soit pour les niveaux d'énergie ou pour les probabilités de transition, soient nettement plus proches des données expérimentales que les calculs qui utilisent les données *ab initio*.

2.3 Calcul des probabilités de transition

Les énergies ro-vibrationnelles et les fonctions d'onde non adiabatiques obtenues lors de la résolution des équations couplées (chapitre 2), sont utilisées ici pour le calcul des probabilités de transition. Pour cela on doit réarranger les niveaux d'énergie selon leurs appartenance à chaque puits de potentiel électronique. En effet, le calcul est effectué pour chaque nombre quantique J et les niveaux d'énergie ro-vibrationnels liés sont déterminés par ordre des énergies croissantes et indicés par le couple (J, i). Cependant les transitions entre les états électroniques sont souvent présentées par des bandes $n - X(v', v'')$, où v' et v'' sont respectivement les nombres quantiques vibrationnels de l'état supérieur et de l'état inférieur. De plus, chaque bande contient les branches P, R et Q correspondant, respectivement, aux règles de sélections $\Delta J = J' - J'' = -1, +1, 0$.
En général, pour un niveau lié (J, i) il n'y a qu'une seule composante (n, v) avec un pourcentage électronique $\rho_i(n)$ important. Ceci n'empêche pas l'existence de cas où un niveau lié ait le même pourcentage pour deux caractères électroniques différents. Dans de tels cas, il est difficile de définir l'état électronique auquel appartient le niveau d'énergie, et il faut, dans ce cas là, prendre en considération les données expérimentales.

Quand une fonction d'onde électronique a une symétrie Σ^+, la parité de la fonction d'onde totale, dans le repère de la molécule, est donnée par la parité du nombre quantique rotationnel J, et les niveaux d'énergie auront un parité dite "e", qui sera le label du niveau d'énergie. Pour le cas des états électroniques Π doublement dégénérés, la présence du couplage rotationnel entre les états $(\Sigma^+ - \Pi)$ lève la dégénérescence, donnant ainsi deux états électroniques de symétries différentes Π^+ et Π^-. Dans ce cas, les niveaux d'énergie appartenant à l'état électronique Π^+ auront une parité $(-1)^J$ et seront labelés par "e", tandis que les niveaux d'énergie appartenant à l'état électronique Π^- auront une parité $(-1)^{J+1}$ et seront labelés par "f".
Les transitions entre les différents états électroniques obéissent aux critères combinant le changement de parité et la règle de sélection $\Delta J = J' - J'' = -1, +1, 0$, où J' et J'' sont respectivement, le nombre quantique rotationnel du niveau supérieur et le nombre quantique du niveau inférieur. Elles seront arrangées dans deux branches spectroscopiques R et P pour les transitions $\Sigma^+ - \Sigma^+$ ou $\Sigma^+ - \Pi^+$ $(e \leftrightarrow e; f \leftrightarrow f)$, et une branche Q pour les transitions $\Sigma^+ - \Pi^-$ $(e \leftrightarrow f)$.

La probabilité d'émission par unité de temps (coefficient d'Einstein) d'un niveau lié supérieur $E_{nv'J'}$ vers un niveau lié inférieur $E_{Xv''J''}$ est donnée par l'expression suivante :

$$A_{nv'J';Xv''J''} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{4}{3c^3\hbar^4(2J'+1)}(E_{nv'J'} - E_{Xv''J''})^3|M^\alpha(R)|^2. \tag{2.5}$$

$|M^\alpha(R)|^2$ est l'élément de la matrice du moment de transition dipolaire électrique entre l'état électronique supérieur et l'état électronique inférieur. L'indice α indique la nature de la branche spectroscopique R, P et Q.
Dans le cas des états électroniques couplés, l'expression des éléments de matrice du moment de transition dipolaire est donnée par (48) :

N	E_{cal}	$\rho(B^1\Sigma_u^+)$	$\rho(B'^1\Sigma_u^+)$	$\rho(C^1\Pi_u^+)$	$\rho(D^1\Pi_u^+)$
0	90242.89	0.99996448	0.00000671	0.00002856	0.00000025
1	91559.52	0.99994401	0.00001667	0.00003908	0.00000024
2	92839.58	0.99992389	0.00002518	0.00005070	0.00000023
3	94085.04	0.99990316	0.00003254	0.00006408	0.00000022
4	95296.92	0.99988034	0.00003896	0.00008049	0.00000021
5	96475.88	0.99985202	0.00004457	0.00010321	0.00000020
6	97622.39	0.99980429	0.00004946	0.00014605	0.00000020
7	98736.84	0.99945541	0.00005368	0.00049072	0.00000020
8	99152.34	0.00069386	0.00000388	0.99930042	0.00000184
9	99820.02	0.99968456	0.00005749	0.00025776	0.00000018
10	100871.81	0.99939128	0.00006060	0.00054793	0.00000019
11	101458.09	0.00117364	0.00000397	0.99881636	0.00000603
12	101893.55	0.99931170	0.00006355	0.00062458	0.00000016
13	102884.55	0.99940351	0.00006573	0.00053058	0.00000018
14	103629.42	0.00351769	0.00000393	0.99646906	0.00000932
15	103847.06	0.99699746	0.00006798	0.00293441	0.00000015
16	104779.05	0.99941589	0.00006936	0.00051459	0.00000016
17	105662.26	0.27731084	0.00001906	0.72266121	0.00000889
18	105691.42	0.72325202	0.00005577	0.27668917	0.00000304
19	106559.45	0.99938438	0.00007170	0.00054378	0.00000015
20	107407.02	0.99316021	0.00007135	0.00676816	0.00000028
21	107582.06	0.00755789	0.00000515	0.99242361	0.00001335
22	108229.84	0.99923884	0.00007295	0.00068807	0.00000013
23	109024.29	0.99781493	0.00007268	0.00211221	0.00000018
24	109362.90	0.00339806	0.00000443	0.99658299	0.00001452
25	109794.13	0.99875688	0.00007326	0.00116974	0.00000012
26	110530.88	0.00002094	0.99915317	0.00000376	0.00082212
27	110536.84	0.99870283	0.00007716	0.00121986	0.00000015
28	111013.93	0.00450454	0.00000419	0.99547620	0.00001507
29	111255.79	0.99678105	0.00007271	0.00314612	0.00000013
30	111947.91	0.99899750	0.00007170	0.00093068	0.00000012
31	112409.32	0.00003626	0.99561458	0.00000411	0.00434505
32	112531.72	0.02401182	0.00000475	0.97596849	0.00001495
33	112618.12	0.97702268	0.00007075	0.02290619	0.00000037
34	112935.55	0.00000077	0.00486674	0.00000315	0.99512935
35	113259.41	0.99906645	0.00006987	0.00086356	0.00000011
36	113874.21	0.91803750	0.00006120	0.08189986	0.00000144
37	113919.70	0.08298419	0.00001216	0.91699001	0.00001364
38	114125.99	0.00004945	0.99793855	0.00000392	0.00200808
39	114471.22	0.99899640	0.00006711	0.00093640	0.00000010
40	115037.54	0.98968591	0.00006394	0.01024988	0.00000027
41	115155.63	0.01141823	0.00002170	0.98526640	0.00329367
42	115156.60	0.00003882	0.00437374	0.00326360	0.99232385
43	115579.50	0.99882074	0.00006361	0.00111556	0.00000009
44	115656.73	0.00005591	0.99681852	0.00000361	0.00312196
45	116090.94	0.99445581	0.00006011	0.00548391	0.00000017
46	116239.19	0.00683224	0.00000809	0.99314607	0.00001359
47	116573.08	0.99862124	0.00005889	0.00131979	0.00000008
48	116947.93	0.00005269	0.99024006	0.00000459	0.00970265
49	117018.68	0.99497475	0.00005908	0.00496601	0.00000016
50	117152.55	0.00634077	0.00001550	0.99363085	0.00001289

Table 2.9 – *Les énergies ro-vibrationelles et les pourcentages de caractères électroniques de la molécule H_2, obtenus par la résolution du système d'équations couplées pour les états $(B^1\Sigma_u^+, B'\Sigma_u^+, C^1\Pi_u^+, D^1\Pi_u^+)$ pour $J = 1$.*

N	E_{cal}	$\rho(C^1\Pi_u^-)$	$\rho(D^1\Pi_u^-)$
0	99151.13	0.99999815	0.00000185
1	101456.86	0.99999398	0.00000602
2	103628.60	0.99999070	0.00000930
3	105669.03	0.99998826	0.00001174
4	107579.81	0.99998656	0.00001344
5	109361.46	0.99998550	0.00001450
6	111013.16	0.99998497	0.00001503
7	112532.50	0.99998486	0.00001514
8	112931.74	0.00000339	0.99999661
9	113915.06	0.99998509	0.00001491
10	115153.75	0.99815044	0.00184956
11	115154.93	0.00184256	0.99815744
12	116237.90	0.99998640	0.00001360
13	117151.53	0.99998716	0.00001284
14	117248.77	0.00001108	0.99998892
15	117870.34*	0.99998973	0.00001027
16	118352.91*	0.99999350	0.00000650
17	118393.14*	0.99999977	0.00000023
18	118408.66*	0.99999960	0.00000040
19	118427.18*	0.99999938	0.00000062
20	118448.48*	0.99999913	0.00000087
21	118472.04*	0.99999883	0.00000117
22	118497.13*	0.99999845	0.00000155
23	118523.76*	0.99999793	0.00000207
24	118553.48*	0.99999735	0.00000265
25	118587.56*	0.99999678	0.00000322
26	118626.00*	0.99999620	0.00000380
27	118668.50*	0.99999560	0.00000440
28	118714.81*	0.99999496	0.00000504
29	118764.84*	0.99999427	0.00000573
30	118818.49*	0.99999354	0.00000646
31	118875.72*	0.99999277	0.00000723
32	118936.48*	0.99999195	0.00000805
33	119000.74*	0.99999109	0.00000891
34	119068.47*	0.99999018	0.00000982
35	119139.64*	0.99998916	0.00001084
36	119214.22*	0.99989237	0.00010763
37	119217.06	0.00010933	0.99989067
38	119292.19*	0.99998718	0.00001282
39	119373.52*	0.99998624	0.00001376
40	119458.20*	0.99998518	0.00001482
41	119546.20*	0.99998407	0.00001593
42	119637.50*	0.99998291	0.00001709
43	119732.08*	0.99998172	0.00001828
44	119829.93*	0.99998049	0.00001951
45	119931.02*	0.99997922	0.00002078
46	120035.35*	0.99997792	0.00002208
47	120142.89*	0.99997658	0.00002342
48	120253.63*	0.99997521	0.00002479

Table 2.10 – *Les énergies ro-vibrationelles et les pourcentages de caractères électroniques de la molécule H_2, obtenus lors de la résolution du système d'équations couplées pour les états $C^1\Pi_u^-$ et $D^1\Pi_u^-$ pour $J = 1$.Le symbole * désigne les énergies libres de l'état électronique $C^1\Pi_u^-$*

$$M^P = \begin{array}{l} \sqrt{J'+1}(\langle f_{BJ'}|M_{BX}(R)|f_{Xv''J''}\rangle + \langle f_{B'J'}|M_{B'X}(R)|f_{Xv''J''}\rangle) \\ +\sqrt{J'}(\langle f_{C^+J'}|M_{CX}(R)|f_{Xv''J''}\rangle + \langle f_{D^+J'}|M_{DX}(R)|f_{Xv''J''}\rangle) \end{array}. \tag{2.6}$$

$$M^Q = \sqrt{2J'+1}(\langle f_{C^-J'}|M_{CX}(R)|f_{Xv''J''}\rangle + \langle f_{D^-J'}|M_{DX}(R)|f_{Xv''J''}\rangle). \tag{2.7}$$

$$M^R = \begin{array}{l} \sqrt{J'}(\langle f_{BJ'}|M_{BX}(R)|f_{Xv''J''}\rangle + \langle f_{B'J'}(R)|M_{B'X}|f_{Xv''J''}\rangle) \\ -\sqrt{J'+1}(\langle f_{C^+J'}|M_{CX}(R)|f_{Xv''J''}\rangle + \langle f_{D^-J'}|M_{DX}(R)|f_{Xv''J''}\rangle) \end{array}. \tag{2.8}$$

Les M_{nX} sont les données *ab initio* des moments de transition électroniques. Dans la Figure 2.5 on montre la variation des différents moments de transition utilisés dans nos calculs en fonction de la distance internucléaire R. Il est évident que $f_{Xv''J''}$ est la fonction d'onde vibrationnelle pour un nombre quantique J'' de l'état fondamental X. Les fonctions non adiabatiques $f_{nv'J'}$ sont les composantes de la fonction non adiabatique f_i(R).

La force d'oscillateur d'une raie peut être obtenue à partir de la probabilité de transition en émission par l'expression suivante :

$$f_{nv'J';Xv''J''} = \frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\frac{m_e c}{8\pi^2\sigma^2}\frac{(2J'+1)}{(2J''+1)}A_{nv'J';Xv''J''}. \tag{2.9}$$

où m_e est la masse de l'électron et σ est le nombre d'onde de la transition étudiée.

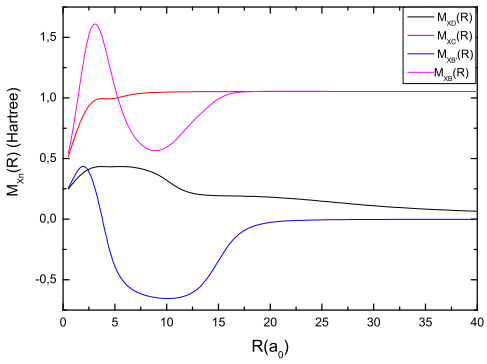


Figure 2.5 – *Les moments de transition des états électroniques* $(B,B')^1\Sigma_u^+$ *et* $(C,D)^1\Pi_u$ *de la molécule* H_2 *vers l'état fondamental.*

Pour les états électroniques $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+$, $D'^1\Pi_u$ et $D''^1\Pi_u$ étudiés dans l'approximation adiabatique, les expressions des éléments de matrice du moment de transition peuvent être déduits à partir des équations (2.6, 2.7, 2.8) en remplaçant simplement les fonctions d'onde vibrationnelles par celles appartenant à chaque état électronique étudié, et en annulant les autres termes.

2.4 L'effet des couplages non adiabatiques sur les probabilités de transition de la molécule H_2.

En spectroscopie, on définit aussi la probabilité de transition de bande A_v. Elle est obtenue à partir d'une somme sur le nombre quantique J de toutes les probabilités de transition des raies R, P ou Q (équation 2.5) appartenant à la même bande $v' - v''$.

Récemment, de nouvelles mesures de longueurs d'onde et de probabilités de transition de raies et de bandes de la molécule H_2 ont été effectuées par M. Glass-Maujean et ses collaborateurs (49; 50) dans la gamme spectrale $[720 - 780]$ Å, par absorption d'un rayonnement synchrotron BESSY II. Dans cette gamme spectrale, les raies proviennent des transitions entre l'état fondamental et des états électroniques très excités appartenant aux série de Rydberg ≥ 3.

Pour confirmer l'identification de ces nouvelles transitions électroniques, et mettre en évidence l'effet des couplages non adiabatiques sur les probabilités de transition électroniques, nous avons calculé pour des états très excités de la molécule H_2, à savoir $D'^1\Pi_u$, $D''^1\Pi_u$, $5^1\Pi_u$, $6^1\Sigma_u^+$ et $7^1\Sigma_u^+$, les probabilités de transition de raies vers le niveau vibrationnel $v" = 0$ de l'état fondamental $X^1\Sigma_g^+$. Le calcul est fait en deux fois : une première fois dans l'approximation de Born-Oppenheimer et une deuxième fois en tenant compte des couplages entre les différents états électroniques (couplages radial et rotationnel). Les équations couplées sont résolues sans tenir compte de la correction adiabatique pour les courbes de potentiels. En effet les données *ab initio* que nous avons utilisées pour ces états très élevés sont calculées par A. Spielfiedel (51) en utilisant le code de chimie quantique MOLPRO (52), et ce code ne permet pas de calculer la correction adiabatique.

Dans la Figure 2.6 on donne les résultats de calculs des probabilités de transition des raies Q(1) pour les états électroniques D' et D'' de symétrie $^1\Pi_u^-$ en comparaison avec les premiers résultats expérimentaux. Nous constatons que pour ces deux états électroniques, la théorie, avec ou sans couplages, prévoit bien le comportement décroissant de la probabilité de transition quand le nombre quantique vibrationnel augmente.

Pour l'état électronique D', d'une manière générale, les résultats théoriques obtenus avec la prise en compte des couplages non adiabatiques sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. De plus, les couplages non adiabatiques permettent de localiser les perturbations entre les niveaux d'énergie des états électroniques et de retrouver la bonne variation en fonction du nombre v' de la probabilité de transition, tel est le cas pour les niveaux v'=10, 11 et 13.

En ce qui concerne l'état électronique D'', on trouve que certaines probabilités de transition expérimentales liées aux premiers niveaux vibrationnels sont loin des prédictions théoriques. Cependant l'effet des couplages non adiabatiques permet de prévoir les perturbations entre certains niveaux d'énergie, tel est le cas pour le niveau $D''(v' = 8)$. Les différences entre les prévisions théoriques et les résultats expérimentaux sont liées essentiellement aux interactions avec d'autres niveaux d'énergie appartenant à d'autres états électroniques plus excités et de même symétrie dont on n'a pas tenu compte. L'effet de ces interactions est observé par exemple pour le niveau d'énergie $v' = 12$ de l'état D'.

Les résultats théoriques des probabilités de transition obtenus ici à l'aide de la résolution des équations couplées, peuvent êtres améliorés en utilisant la méthode du défaut quantique (MQDT) (93), plus adaptée aux états très excités, mais ceci dépasse le cadre du travail présent.

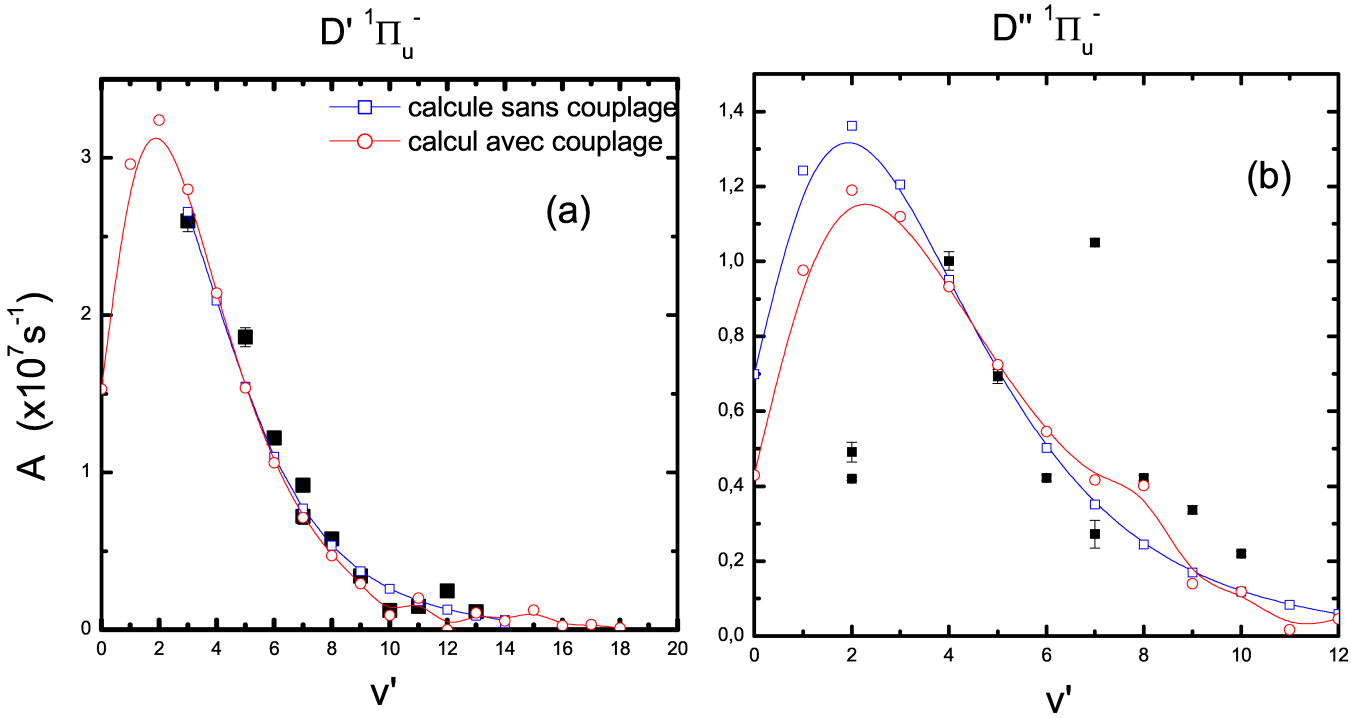


Figure 2.6 – *Comparaison entre les probabilités de transition A mesurées (50) et calculées, avec et sans couplages non adiabatiques, des niveaux d'énergie v', J' appartenant aux états électroniques $D'^1\Pi_u^-$ (a) et $D''^1\Pi_u^-$ (b) vers les niveaux $v'', J'' = J'$ de l'état fondamental $X^1\Sigma_g^+$ pour la raie Q(1) ($J' = J'' = 1$).*

Chapitre 3

Brisure de symétrie dans la molécule HD

3.1 Position du problème

Nous avons déterminé dans le chapitre précédent 2.3 le système d'équations couplées pour une molécule diatomique. Cependant nous avons négligé dans l'hamiltonien total H_T le terme H_{gu} qui tient compte du couplage entre le mouvement des électrons et celui des noyaux. Ici nous allons montrer l'importance de ce terme dans la description de certaines caractéristiques spécifiques aux isotopes héteronucléaires de molécules avec deux noyaux de même charge.

On peut définir l'opérateur $\hat{\imath}$ d'inversion des coordonnées électroniques par rapport au centre géométrique d'une molécule diatomique. L'opérateur possède deux valeurs propres : $+1$ et -1. Dans le cas d'une molécule diatomique homonucléaire le potentiel d'interaction, donc le hamiltonien électronique H_e, est invariant sous l'effet de cet opérateur. Par conséquent, H_e commute avec $\hat{\imath}$ et ceci nous permet de distinguer deux catégories d'états électroniques : les états électroniques pairs indicés g (*gerade*), associés à la valeur propre $(+1)$, et les états électroniques impairs indicés u (*ungerade*), associés à la valeur propre (-1). Pour ces molécules, H_2 et D_2 par exemple, le terme μ_α qui apparaît dans l'opérateur H_{gu} (1.5) est infinie, ainsi l'opérateur H_{gu} s'annule dans l'expression de l'Hamiltonien total H_T (eq. 1.11). Par conséquent l'opérateur H_T commute avec l'opérateur d'inversion, et les parités g/u sont des bons nombres quantiques. En revanche, pour l'isotope hétéronucléaire, les masses des deux noyaux ne sont plus les mêmes. Par conséquent, le terme μ_α est bien défini, et l'opérateur H_{gu} figure dans l'expression de l'hamiltonien total. On peux montrer facilement que cet opérateur (H_{gu}) ne commute pas avec l'opérateur d'inversion $\hat{\imath}$, et qu'il est un opérateur impair par rapport à l'inversion, c'est à dire $\hat{\imath}H_{gu} = -H_{gu}$ (20). Par conséquent, l'hamiltonien total H_T ne commute plus avec l'opérateur d'inversion $\hat{\imath}$, et g/u ne sont plus bons nombres quantiques. On dit qu'il y a brisure de la symétrie $g - u$. Cette brisure de symétrie existe dans toutes les molécules diatomiques avec deux noyaux de même charge, de masses différentes, mais la quantité μ_α augmente très vite avec les masses des noyaux et l'effet du terme H_{gu} devient très difficile à observer sauf dans des molécules très légères comme l'hydrogène. Cependant, un effet de brisure de symétrie a été observé sur la prédissociation de l'état $B^1\Pi_u$ de $^6Li^7Li$ dans une expérience de spectroscopie laser sans effet Doppler (53; 54).

La conséquence de la commutation de H_T et de l'opérateur $\hat{\imath}$ est observée à partir des transitions entre les états électroniques de la molécule. En effet, les transitions entre états électroniques de même symétrie g ou u dans une molécule diatomique homonucléaire sont interdites. On parle alors d'une conservation de la parité g et u. Les règles de sélection dipolaire électrique gouvernant ces transitions sont données par : $g \nleftrightarrow g$, $u \nleftrightarrow u$ et $g \leftrightarrow u$. Ces règles ne sont plus strictement respectées dans l'isotope hétéronucléaire. Les états électroniques de différentes symétries g et u, états propres de l'hamiltonien électronique H_e, seront couplés par l'opérateur H_{gu} et se mélangeront pour donner des états électroniques qui n'ont pas un caractère g ou u défini. L'effet devrait être d'autant plus important que les états sont proches en énergie, en particulier lorsqu'ils tendent vers la même limite asymptotique.

Le centre de masse et le centre de charge ne coïncidant plus dans HD, cette molécule sera caractérisée par la présence d'un moment dipolaire électrique permanent très faible, de l'ordre de $\approx 10^{-4}$ Debye, qui permettra l'observation dans l'infrarouge des transitions du spectre vibration-rotation, alors que ces transitions sont complètement absentes dans les molécules homonucléaires H_2 et D_2 (22). Les premières transitions dans ce domaine ont été observées pour la molécule HD par Herzberg et al (23) en 1950, et étudiées par Durie et Herzberg en 1960 (24).

Les conséquences de cette brisure de la symétrie $g - u$ sont observées aussi dans les spectres VUV de la molécule HD étudiés par Dabrowski et Herzberg (21), à travers la présence de raies issues de différentes transitions électroniques connues comme interdites dans les molécules homonucléaires. Les travaux expérimentaux de Dabrowski et Herzberg sur HD (21) concernent les états corrélés à la limite asymptotique où un des atomes est dans un état excité $n = 2$. Ils montrent que la brisure de symétrie fait que ces états électroniques peuvent converger vers l'une des deux limites asymptotiques H(2ℓ)+D(1s) ou H(1s)+D(2ℓ), l'écart entre les deux limites représentant le déplacement isotopique entre l'atome de l'hydrogène et l'atome de deutérium, qui est de l'ordre de ≈ 22.38 cm^{-1}. Les conséquences de cette situation entraînent des erreurs dans le calcul des niveaux d'énergie proches de la limite de dissociation $n = 2$. Pour éviter de tels problèmes, il sera intéressant de prendre en compte l'effet de la brisure de symétrie en calculant les bonnes limites asymptotiques des courbes de potentiel électroniques.

Cette brisure de symétrie à été récemment étudiée par le groupe de W. Ubachs en utilisant la spectroscopie à très haute résolution pour tous les états électroniques convergeant vers les limites atomiques $n = 2$ (20; 45) et $n = 3$ (46; 47). Pour la limite $n = 2$, De Lange et al (20) avaient réussi à construire les asymptotes des douze courbes de potentiel électronique de la molécule HD corrélées aux limites asymptotiques H(2ℓ)+D(1s) et H(1s)+D(2ℓ). Cette démarche suppose que l'on peut regrouper par paire les états électroniques de parités opposées g et u de même multiplicité, et tendant vers les mêmes configurations des atomes séparés. De plus, le couplage entre ces deux états est supposé constant à très longue distance, et égal à la moitié de l'écart en énergie entre les deux limites asymptotiques. Cet écart est donné par le déplacement isotopique entre les atomes hydrogène-deutérium dans les états électroniques $1s - 2l$, en négligeant la structure fine. On écrit pour chaque paire d'états de différentes symétries une matrice 2×2 dont les éléments diagonaux représentent les comportement asymptotiques des potentiels adiabatiques, par exemple : $\Sigma_u(2s\sigma_u)$ avec $\Sigma_g(2s\sigma_g)$ ou $\Pi_u(2p\pi_u)$ avec $\Pi_g(2p\pi_g)$, variant en $1/R^6$ ou en $1/R^3$ respectivement. Ces potentiels tendent vers une limite commune qui ne tient pas compte de la différence de masse des noyaux H et D et qui devrait être à mi-chemin des deux limites expérimentales. Les éléments non diagonaux de la matrice représentent la valeur du couplage $g - u$ à l'infini. La diagonalisation de cette matrice permet de déterminer deux nouvelles courbes de potentiel qui tendent chacune vers une des deux limites expérimentales. Ces potentiels montrent un comportement asymptotique en $1/R^6$. Ce résultat est plus proche de la réalité du fait que les atomes H et D sont distincts et que, pour $n = 2$, leurs interactions à longue distance sont gouvernées par l'interaction dipôle-dipôle induit qui est proportionnelle à $1/R^6$.

Cette approche permet de traiter le problème de la brisure de symétrie et de trouver le bon comportement asymptotique des courbes de potentiel. Par contre si nous comparons les résultats théoriques avec les données expérimentales de Dabrowski et Herzberg (21), on trouve qu'avec de telles approximations, on peut attribuer un état électronique à une limite qui ne convient pas. Ce cas se présente pour l'état électronique $C^1\Pi_u$. En effet l'étude du spectre en émission et en absorption à très haute résolution de HD (21) montre qu'il n'existe aucun niveau d'énergie au delà de la première limite de dissociation pour cet état électronique, et que par conséquent $C^1\Pi_u$ est, très probablement, le premier état de symétrie Π corrélé à la premier limite de dissociation (21).

Un traitement général sans approximation est nécessaire pour confirmer ou améliorer les résultats existant jusqu'à maintenant, mais il nécessite la connaissance des opérateurs de couplage H_{gu} en fonction de la distance internucléaire entre tous les états tendant vers la même limite de dissociation. Ce sont des données *ab initio* pas toujours disponibles. Six états singulets tendent vers la limite $n = 2$ dans l'hydrogène moléculaire : $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $EF^1\Sigma_g^+$, $GK^1\Sigma_g^+$, $II'^1\Pi_g$. Seuls les opérateurs de couplage entre les états B, C et EF ont été calculés par Alemar-Rivera et Ford (34). Dans ce chapitre, nous allons calculer les énergies des niveaux de l'état électronique $EF^1\Sigma_g^+$ et les probabilités de transitions correspondantes vers l'état fondamental $X^1\Sigma_g^+$ de la molécule HD, en utilisant les données *ab initio* pour les courbes de potentiels et en tenant compte de la brisure de symétrie $g - u$.

3.2 Opérateurs couplage

Au delà de l'approximation de Born-Oppenheimer, les équations couplées 1.11 et 1.23 restent valables pour décrire les caractéristiques des molécules hétéronucléaires. En revanche, ces équations ne prennent pas en compte les couplages entre les états électroniques de différentes symétries g et u, donc ne permettent pas de décrire les transitions qui n'obéissent pas aux règles de sélection sur la parité. Pour une meilleure description des molécules diatomiques hétéronucléaires, il faut inclure dans ces équations couplées les éléments de matrice de l'opérateur H_{gu}.

Les expressions analytiques de ces éléments de couplage en représentation adiabatique sont données par (12) :

$$H_{gu}^{\Lambda\Lambda} = -\frac{i}{2\mu_\alpha}\{P_z\frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{2R}\langle\Lambda|P^+L^-P^-L^+|\Lambda\rangle\} \tag{3.1}$$

$$H_{gu}^{\Lambda+1\Lambda} = -\sqrt{[(J+\Lambda+1)(J-\Lambda)]} \times \{\frac{i}{4\mu_\alpha R}\langle\Lambda+1|P^+|\Lambda\rangle\} \tag{3.2}$$

$$H_{gu}^{\Lambda-1\Lambda} = \sqrt{[(J-\Lambda+1)(J+\Lambda)]} \times \{\frac{i}{4\mu_\alpha R}\langle\Lambda-1|P^-|\Lambda\rangle\} \tag{3.3}$$

où $P^\pm = P_x \pm P_y$ est l'opérateur impulsion total des électrons. Après passage en représentation diabatique, ces éléments de couplage apparaîtront dans la matrice d'interaction $\mathbf{V}$.
On constate à partir de ces trois formules, que le couplage H_{gu} permet de coupler un état g avec simultanément un état Π_u^+ et un état Σ_u^+.

Pour la molécule HD, les calculs que nous avons décrits et effectués dans le chapitre précédent 2.3, ainsi que l'effet des couplages non adiabatiques et de la correction adiabatique restent valables. Cependant pour améliorer les résultats sur les niveaux d'énergie, nous avons fait un autre calcul d'états électroniques couplés qui tient compte de l'effet de la brisure de symétrie. Pour cela un système de cinq équations couplées pour les états $B^1\Sigma_u^+$ (B), $C^1\Pi_u$ (C), $EF^1\Sigma_g^+$ (EF), $B'^1\Sigma_u^+$ (B') et $D^1\Pi_u$ (D) a été résolu. Sur la Figure 3.1 on donne les courbes d'énergie potentielles des cinq états électroniques. Pour l'état EF, nous avons utilisé la courbe de potentiel calculée par Wolniewicz (43) en incluant la correction adiabatique de masse ainsi que la correction relativiste (44).

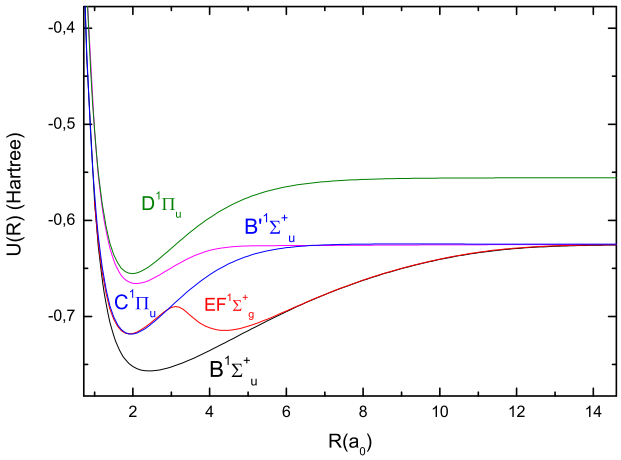


Figure 3.1 – *Les courbes de potentiels éléctroniques* $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $EF^1\Sigma_g^+$, $B'^1\Sigma_u^+$ *et* $D^1\Pi_u$.

L'état électronique EF est le premier état à double puits de la molécule H_2 et de ses isotopes. Il est la conséquence d'un croisement évité entre le potentiel électronique de configuration $2s1\sigma_g\ ^1\Sigma_g^+$ avec le potentiel électronique de la configuration $(1\sigma_u)^2\ ^1\Sigma_g^+$ (33; 31; 32). Pour les couplages non adiabatiques liés à la brisure de symétrie, nous avons tenu compte seulement des interactions entre l'état électronique $EF^1\Sigma_g^+$ et les états électroniques $B^1\Sigma_u^+$ et $C^1\Pi_u^+$ (34). Pour les états électroniques $B'^1\Sigma_u^+$ et $D^1\Pi_u$, les couplages avec l'état EF n'existent actuellement pas dans la littérature. Donc nous les avons considérés, en première approximation, comme nuls.

Pour les états électroniques B, C et EF, les formules analytiques des couplages $g-u$ sont simplifiées par rapport à celles données dans les équations précédentes (4.1 et 4.2), et elles sont données par (34) :

$$\langle\Phi_{EF}|H_{gu}^{B,EF}|\Phi_B\rangle = -\frac{1}{2\mu_\alpha}\langle f(v_{EF},J)|\{\underbrace{\langle\Psi_{EF}|\frac{\partial}{\partial z}|\Psi_B\rangle}_{1}\frac{\partial}{\partial R} + \underbrace{\langle\Psi_{EF}|\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial R}|\Psi_{B)}\rangle}_{2}\} - \frac{1}{4\mu_\alpha}\frac{1}{R}\underbrace{\langle\Psi_{EF}|i(P^+L^- - P^-L^+)|\Psi_B\rangle}_{3}|f(v_B,J)\rangle. \tag{3.4}$$

$$\langle\Phi_{C^+}|H_{gu}^{C^+,EF}|\Phi_{EF}\rangle = -\frac{\sqrt{J(J+1)}}{2\mu_\alpha}\langle f(v_C,J)|\frac{1}{\sqrt{2}R}\underbrace{\langle\Psi_C|P^+|\Psi_{EF}\rangle}_{4}|f(v_{EF},J)\rangle. \tag{3.5}$$

où Φ_Λ, $f(v,J)$ et Ψ_Λ sont respectivement la fonction d'onde totale, la fonction d'onde vibrationnelle et la fonction d'onde électronique.

Les différentes parties de ces deux couplages (désignés par 1, 2, 3 et 4) ont été calculées par Alemar-Rivera et al (34), et sont tracées sur la Figure 3.2.

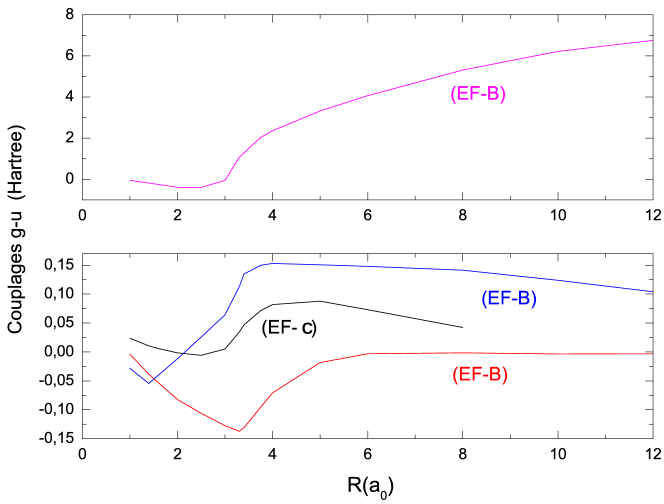


Figure 3.2 – *Différentes parties du couplage g-u entre l'état électronique EF et (B,C) de la molécule HD : noir : $\langle\Psi_{C^+}|P^+|\Psi_{EF}\rangle$, bleu : $\langle\Psi_B|\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial R}|\Psi_{EF)}\rangle$, rouge : $\langle\Psi_B|\frac{\partial}{\partial z}|\Psi_{EF}\rangle$ et violet : $\langle\Psi_B|i(P^+L^- - P^-L^+)|\Psi_{EF}\rangle$.*

L'état électronique $B^1\Sigma_u^+$ a un puits de potentiel qui s'étend sur une gamme de distances internucléaires allant jusqu'à 15 a.u.(voir la Figure 3.1). Pour résoudre le système d'équations couplées pour les cinq états électroniques, il est nécessaire d'interpoler les données *ab initio* sur une grille de points choisis. En revanche, vue la gamme de distances internucléaires sur laquelle les couplages $g-u$ ont été calculés (voire la Figure 3.2), une simple extrapolation vers les grandes distances R risque de créer des parties non physiques dans ces couplages. Ceci se traduira, selon l'importance du couplage, par des erreurs sur les calculs des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde correspondantes. Pour cette raison, nous nous sommes d'abord proposés de déterminer les bonnes limites asymptotiques des couplages non adiabatiques $g-u$ comme première étape, ensuite de les introduire dans la résolution des équations couplées.

3.3 Limites asymptotiques des couplages non adiabatiques $g-u$ dans HD

Pour déterminer le comportement asymptotique des éléments de matrice du couplage H_{gu}, il faut développer les fonctions d'onde moléculaires des états électroniques sur une base de fonctions d'onde atomiques. À l'infini les états électroniques convergent vers la limite atomique H(2ℓ)+D(1s) ou H(1s)+D(2ℓ). La différence d'énergie entre ces deux limites atomiques correspond au déplacement isotopique entre l'atome D et l'atome H pour $n=2$: $\Delta \approx 22.38$ cm^{-1}.
A très longue distance internucléaire et dans la représentation adiabatique, une fonctions d'onde électronique d'un état corrélé à la limite $n=2$ de la molécule HD s'écrit comme une combinaison linéaire des fonctions d'onde atomiques des états corrélés aux deux limites H(2ℓ)+D(1s) et H(1s)+D(2ℓ) (35).
Nous allons adopter les notations utilisées dans le travail de De Lange et al (20) pour le développement des fonctions d'onde électroniques sur une base atomique. Dans la limite asymptotique les fonctions d'onde électroniques des états singulet $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, et $EF^1\Sigma_g^+$, corrélées à la limite

$n = 2$, s'écrivent en termes des fonctions d'onde atomiques, quand $R \rightarrow \infty$, comme :

$$B^1\Sigma_u^+ \longmapsto \Psi_B \approx \frac{1}{\sqrt{2}}\{\phi_{H1s}(\vec{r_{1H}})\phi_{D2p\sigma}(\vec{r_{2D}}) + \phi_{H2p\sigma}(\vec{r_{1H}})\phi_{D1s}(\vec{r_{2D}})\}. \tag{3.6}$$

$$EF^1\Sigma_g^+ \longmapsto \Psi_{EF} \approx \frac{1}{\sqrt{2}}\{\phi_{H1s}(\vec{r_{1H}})\phi_{D2s\sigma}(\vec{r_{2D}}) + \phi_{H2s\sigma}(\vec{r_{1H}})\phi_{D1s}(\vec{r_{2D}})\}. \tag{3.7}$$

$$C^1\Pi_u^+ \longmapsto \Psi_C \approx \frac{1}{\sqrt{2}}\{\phi_{H1s}(\vec{r_{1H}})\phi_{D2p\pi}(\vec{r_{2D}}) + \phi_{H2p\pi}(\vec{r_{1H}})\phi_{D1s}(\vec{r_{2D}})\}. \tag{3.8}$$

où $\vec{r_{1H}}$ et $\vec{r_{2D}}$ désignent les coordonnées de l'électron 1 et de l'électron 2 par rapport aux atomes H et D (voir Figure 3.3), $\phi_{H(D)2p\sigma}$ et $\phi_{H(D)2p\pi}$ sont, respectivement, la fonction d'onde de l'orbitale atomique $2p(m_l = 0)$ et $2p(m_l = \pm 1)$ de l'atome d'hydrogène (deutérium) et $\phi_{H(D)1s}$ est la fonction d'onde atomique de l'orbitale atomique $1s$ de l'atome d'hydrogène (deutérium). Les fonctions d'onde électroniques des états excités doivent obéir aux différentes opérations de symétrie (35; 20). Nous signalons que dans ces développements (3.6, 3.7, 3.8) nous avons négligé le terme d'échange des deux électrons, considéré comme très petit quand $R \rightarrow \infty$ (35).

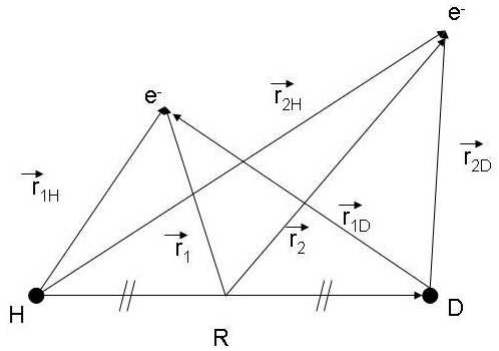


Figure 3.3 – *Les coordonnées des électrons (1) et (2) exprimées par rapport au centre géométrique de la molécule HD et par rapport aux atomes H et D.*

A partir de la formule de l'opérateur de couplage H_{gu}, donnée par l'équation 1.4, le calcul de la valeur asymptotique des éléments de matrice de cet opérateur revient à calculer l'application des opérateurs $\vec{\nabla}_{\vec{R}}$ et $\vec{\nabla}_{\vec{r}}$ sur les fonctions d'onde atomiques. Cependant, l'opérateur $\vec{\nabla}_{\vec{R}}$ est exprimé par rapport au centre de masse de la molécule pour des distances $\vec{r_1}$ et $\vec{r_2}$ fixe. A partir de la Figure 3.3, les coordonnées des deux électrons par rapport au centre de masse de la molécule $(\vec{r_1}, \vec{r_2})$ et par rapport à chaque atome $(\vec{r}_{1H(D)}, \vec{r}_{2H(D)})$ sont liées par :

$$\vec{r}_{1H} = \vec{r}_1 + \frac{1}{2}\vec{R} \quad ; \quad \vec{r}_{1D} = \vec{r}_2 - \frac{1}{2}\vec{R} \tag{3.9}$$

$$\vec{r}_{2H} = \vec{r}_1 + \frac{1}{2}\vec{R} \quad ; \quad \vec{r}_{2D} = \vec{r}_2 - \frac{1}{2}\vec{R} \tag{3.10}$$

A très grande distance internucléaire, les deux électrons seront localisés sur un des deux atomes H et D, et l'application de l'opérateur $\vec{\nabla}_{\vec{R}}|_{\vec{r_1},\vec{r_2}}$ sur les fonctions d'onde atomiques n'est pas nul.

Cependant, à partir des deux équations (3.9, 3.10) l'opérateur $\vec{\nabla}_{\vec{R}}|_{\vec{r_1},\vec{r_2}}$ s'écrira par rapport aux centres atomiques comme (36) :

$$\vec{\nabla}_{\vec{R}}|_{\vec{r}_1,\vec{r}_2} = \{\vec{\nabla}_{\vec{R}}|_{\vec{r}_{1H},\vec{r}_{2D}} + \frac{1}{2}\vec{\nabla}_{\vec{r}_1}|_{\vec{R}} - \frac{1}{2}\vec{\nabla}_{\vec{r}_2}|_{\vec{R}}\} = \{\vec{\nabla}_{\vec{R}}|_{\vec{r}_{1D},\vec{r}_{2H}} - \frac{1}{2}\vec{\nabla}_{\vec{r}_1}|_{\vec{R}} + \frac{1}{2}\vec{\nabla}_{\vec{r}_2}|_{\vec{R}}\} \tag{3.11}$$

A partir de l'équation 3.11, l'opérateur de brisure de symétrie H_{gu} s'écrira en fonction des coordonnées électroniques repérées parrapport à chaque atome H et D comme :

$$\begin{aligned} H_{gu} = -\tfrac{1}{2\mu_\alpha}\vec{\nabla}_{\vec{R}}|_{\vec{r}_1,\vec{r}_2}(\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} + \vec{\nabla}_{\vec{r}_2}) &= -\tfrac{1}{2\mu_\alpha}(\vec{\nabla}_{\vec{R}}|_{\vec{r}_{1H},\vec{r}_{2D}} + \tfrac{1}{2}\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} - \tfrac{1}{2}\vec{\nabla}_{\vec{r}_2})(\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} + \vec{\nabla}_{\vec{r}_2}) \\ &= -\tfrac{1}{2\mu_\alpha}(\vec{\nabla}_{\vec{R}}|_{\vec{r}_{1D},\vec{r}_{2H}} - \tfrac{1}{2}\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} + \tfrac{1}{2}\vec{\nabla}_{\vec{r}_2})(\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} + \vec{\nabla}_{\vec{r}_2}) \end{aligned} \tag{3.12}$$

Dans ce cas, lorsque $R \to \infty$, l'application de l'opérateur $\vec{\nabla}_{\vec{R}}|_{\vec{r}_{1H},\vec{r}_{2D}}$ sur les fonctions d'onde atomiques donne une valeure nulle, on aura donc :

$$\vec{\nabla}_{\vec{R}}|_{\vec{r}_{1H},\vec{r}_{2D}}|\phi_{H1s}(\vec{r}_{1H})\phi_{D2lm}(\vec{r}_{2D})\rangle \approx 0 \tag{3.13}$$

et aussi

$$\vec{\nabla}_{\vec{R}}|_{\vec{r}_{1D},\vec{r}_{2H}}|\phi_{D1s}(\vec{r}_{1D})\phi_{H2lm}(\vec{r}_{2H})\rangle \approx 0 \tag{3.14}$$

où l prend, réspectivement, les valeurs 0 ou 1 pour l'état atomique s et p, et m prend, respectivement, les valeurs 0 et ± 1 pour les orbitales atomique σ et π.

A partir des équations (3.12, 3.13 et 3.14), l'application de l'opérateur H_{gu} (donné par l'équation 3.12) sur les fonctions d'onde atomiques donnera :

$$H_{gu}|\phi_{H1s}(1)\phi_{D2pm}(2)\rangle = \frac{1}{2}[|\{\vec{\nabla}_1^2\phi_{H1s}(1)\}\phi_{D2pm}(2)\rangle - |\phi_{H1s}(1)\{\vec{\nabla}_2^2\phi_{D2pm}(2)\}\rangle] \tag{3.15}$$

Par conséquent, si l'opérateur H_{gu} couple deux états électroniques qui tend vers la même orbitale atomique ($2\ell m$), l'élément de matrice de l'opérateur H_{gu} s'écrira, quand $R \to \infty$, comme :

$$\langle\psi_g|H_{gu}|\psi_u\rangle = \langle\psi_u|H_{gu}|\psi_g\rangle = -\frac{1}{4\mu_\alpha}[\langle\phi_{H1s}(1)|\vec{\nabla}_1^2|\phi_{H1s}(1)\rangle - \langle\phi_{D2pm}(2)|\vec{\nabla}_2^2|\phi_{D2pm}(2)\rangle] \tag{3.16}$$

Donc, les éléments de matrice de l'opérateur H_{gu} sont donnés par les éléments diagonaux de l'opérateur énergie cinétique électronique $T_e = \frac{1}{2}\vec{\nabla}^2$. Le calcul de ces éléments diagonaux (voir le détails de calcul dans l'annexe C) donne le résultat suivant :

$$\langle\psi_g|H_{gu}|\psi_u\rangle = \langle\psi_u|H_{gu}|\psi_g\rangle = \frac{3}{16\mu_\alpha} \tag{3.17}$$

Ainsi, on trouve que la valeur de l'élément de matrice $\langle\psi_g|H_{gu}|\psi_u\rangle$ (équation 3.17) entre deux états électroniques de symétrie g et u qui tendent vers la même orbitale atomique lorsque $R \to \infty$ est égale à $3/16\mu_\alpha = 11.20$ cm^{-1}. Cette valeur est très proche de la valeur expérimentale 11.19 cm^{-1} donnée par la moitié du déplacement isotopique entre les atomes hydrogène-deutérium dans les états électroniques $1s-2l$. La différence entre ces deux valeurs (0.01 cm^{-1}) peut être attribuée à la structure fine dont on n'à pas tenu compte dans notre calcul.

Par ailleurs, si le couplage H_{gu} couple deux états électroniques qui tendent vers deux orbitales atomiques différentes, alors l'élément de matrice du couplage H_{ug} entre ces deux états est nul à cause de l'orthogonalité des fonctions d'onde atomiques (voir équation 3.15) :

$$\langle \psi_g | H_{gu} | \psi_u \rangle = \langle \psi_u | H_{gu} | \psi_g \rangle = 0 \tag{3.18}$$

Par conséquent, étend donnée que les états électroniques $B^1\Sigma_u^+$ (2pσ) et $C^1\Pi_u$ (2pπ) tendent vers deux limites asymptotiques différentes de la limite asymptotique de l'état électronique $EF^1\Sigma_g^+$ (2sσ), les éléments de matrice $\langle C^1\Pi_u | H_{gu} | EF^1\Sigma_g^+ \rangle$ et $\langle B^1\Sigma_u^+ | H_{gu} | EF^1\Sigma_g^+ \rangle$ sont nuls à l'infinie.

3.4 Résultats de calculs

Puisque les courbes de potentiels des énergies électroniques sont déterminées dans l'approximation adiabatique, les états B, C, EF et B' ont une même limite de dissociation H(1s)+D(2ℓ) ou H(2ℓ)+D(1s). La valeur de l'énergie de dissociation de cette limite est donnée ci-dessus par $T_{HD}(n = 2)$. Par contre l'énergie de dissociation de l'état électronique D, corrélé à la limite atomique $n = 3$, est donnée par $T_{HD}(n = 3) = 133911.154$ cm^{-1}. Le système des cinq équations couplées est résolu sur une grille de points [0.5-20 a.u.] avec un pas de 0.02 a.u.. Une partie des résultats des énergies de niveaux ainsi que les pourcentages de caractères sont donnés dans la Table 3.2 pour les cinq états électroniques.

À partir de ce tableau, on peut voir l'interaction non adiabatique entre les différents états électroniques à partir des pourcentages de caractère des états. Une telle interaction se présente pour les niveaux $N = 17$ et $N = 18$ avec des pourcentages de 80.70%EF et 20.7%B respectivement. La position des niveaux d'énergie et l'amplitude de la perturbation (pourcentage de caractère) dépendent étroitement de la présence de tous les couplages qui sont susceptibles d'exister et de leurs qualités de calcul.

Le couplage entre cet état et les états électroniques B et C que nous avons utilisé nous a permis de calculer les probabilités de transition à partir de différents niveaux d'énergie de $EF^1\Sigma_g^+$ vers l'état fondamental $X^1\Sigma_g^+$, qui auraient été interdites en l'absence du couplage de brisure de symétrie.

Dans la Table 3.4 nous présentons quelques résultats sur les prédictions théoriques des nombres d'onde et les probabilité de transitions de l'état électroniques $EF^1\Sigma_g^+$ vers l'état fondamental $X^1\Sigma_g^+$.

Les données *Ab initio* utilisées dans notre travail sont résumées dans la.Table 3.1.

Potentiels adiabatiques	Moments de transition $M_{nX}(R)$
$X^1\Sigma_g^+$ (37)	
$EF^1\Sigma_g$ (43)	
$B^1\Sigma_u^+$ (38)	$B - X$ (40)
$B'^1\Sigma_u^+$ (38)	$B' - X$ (40)
$B''\overline{B}^1\Sigma_u^+$ (38)	$B''\overline{B} - X$ (40)
$C^1\Pi_u$ (39)	$C - X$ (39)
$D^1\Pi_u$ (39)	$D - X$ (39)
$D'^1\Pi_u$ (39)	$D' - X$ (39)
$D''^1\Pi_u$ (51)	$D'' - X$ (39)
Couplage non adiabatique (16; 34)	

Table 3.1 – *Les données Ab initio utilisées dans nos calculs théoriques.*

N	E_{cal}	$\rho(B^1\Sigma_u^+)$	$\rho(B'^1\Sigma_u^+)$	$\rho(EF^1\Sigma_g^+)$	$\rho(C^1\Pi_u^+)$	$\rho(D^1\Pi_u^+)$
0	90428.7630	0.99998320	0.00000028	0.00000044	0.00001593	0.00000015
1	91575.2014	0.99997749	0.00000029	0.00000094	0.00002114	0.00000014
2	92693.1602	0.99997097	0.00000030	0.00000187	0.00002673	0.00000013
3	93784.6616	0.99996330	0.00000031	0.00000337	0.00003289	0.00000013
4	94850.8453	0.99995397	0.00000032	0.00000571	0.00003988	0.00000012
5	95891.8890	0.99994175	0.00000032	0.00000958	0.00004823	0.00000012
6	96908.3511	0.99992435	0.00000033	0.00001596	0.00005924	0.00000012
7	97900.4009	0.99989451	0.00000034	0.00002694	0.00007810	0.00000011
8	98868.4058	0.99975822	0.00000035	0.00004981	0.00019151	0.00000011
9	99276.5024	0.00028823	0.00000202	0.00000001	0.99970907	0.00000067
10	99346.5809	0.00001015	0.00000000	0.99998984	0.00000000	0.00000000
11	99585.5511	0.00003771	0.00000000	0.99996229	0.00000000	0.00000000
12	99812.7396	0.99978677	0.00000036	0.00007744	0.00013532	0.00000010
13	100627.6498	0.00011555	0.00000000	0.99988443	0.00000002	0.00000000
14	100733.5015	0.99960528	0.00000037	0.00015214	0.00024210	0.00000010
15	101290.1944	0.00058077	0.00000204	0.00000014	0.99941495	0.00000210
16	101386.3743	0.00003720	0.00000000	0.99996272	0.00000009	0.00000000
17	101627.9023	0.20340829	0.00000008	0.79651799	0.00007362	0.00000002
18	101632.2537	0.79619275	0.00000030	0.20353121	0.00027566	0.00000008
19	102506.0317	0.99810438	0.00000040	0.00163709	0.00025803	0.00000010
20	102587.8569	0.00161801	0.00000000	0.99838169	0.00000030	0.00000000
21	103202.6232	0.00236908	0.00000207	0.00000202	0.99762344	0.00000339
22	103262.6458	0.00016177	0.00000000	0.99983627	0.00000196	0.00000000
23	103358.8332	0.99650640	0.00000040	0.00140140	0.00209171	0.00000009
24	103508.2839	0.00124914	0.00000000	0.99875049	0.00000037	0.00000000
25	104188.7393	0.99820866	0.00000043	0.00152240	0.00026842	0.00000009
26	104347.0736	0.00148133	0.00000000	0.99851844	0.00000022	0.00000000
27	104886.0116	0.00084950	0.00000000	0.99914405	0.00000645	0.00000000
28	104994.3944	0.87538929	0.00000072	0.00124547	0.12336378	0.00000073
29	105019.5164	0.12356325	0.00000179	0.00013516	0.87629589	0.00000391
30	105319.9158	0.00056309	0.00000000	0.99943668	0.00000023	0.00000000
31	105784.3548	0.99856518	0.00000046	0.00113681	0.00029747	0.00000008
32	106003.3758	0.00102827	0.00000000	0.99897153	0.00000019	0.00000000
33	106549.6546	0.99136328	0.00000049	0.00595185	0.00268427	0.00000011
34	106604.3676	0.00568393	0.00000000	0.99429337	0.00002270	0.00000000
35	106732.5656	0.00313723	0.00000207	0.00000345	0.99685171	0.00000555
36	107178.8860	0.00078160	0.00000000	0.99921789	0.00000051	0.00000000
37	107295.5435	0.99851710	0.00000049	0.00109341	0.00038892	0.00000008
38	107803.3148	0.00077932	0.00000000	0.99922045	0.00000023	0.00000000
39	108019.8241	0.99776324	0.00000052	0.00119955	0.00103660	0.00000009
40	108350.9995	0.00178013	0.00000209	0.00001198	0.99819934	0.00000646
41	108425.1462	0.00116264	0.00000000	0.99883168	0.00000567	0.00000000
42	108724.6615	0.99738572	0.00000053	0.00192258	0.00069109	0.00000007
43	109026.1767	0.00188722	0.00000000	0.99811254	0.00000023	0.00000000
44	109408.9428	0.99606420	0.00000057	0.00328586	0.00064930	0.00000008
45	109622.7354	0.00322809	0.00000000	0.99677019	0.00000171	0.00000000
46	109872.4671	0.00282319	0.00000212	0.00000577	0.99716172	0.00000721
47	110074.4620	0.99197999	0.00000058	0.00592112	0.00209824	0.00000007
48	110218.7278	0.00584199	0.00000000	0.99415612	0.00000188	0.00000000
49	110670.3463	0.00000035	0.99952932	0.00000000	0.00000211	0.00046822
50	110719.5855	0.98641270	0.00000062	0.01307394	0.00051267	0.00000007

Table 3.2 – *Les énergies ro-vibrationelles et les pourcentages de caractère des états électroniques de la molécule HD, obtenus par la résolution du système d'équations couplées pour les états* $(B^1\Sigma_u^+, B'\Sigma_u^+, EF^1\Sigma_g^+, C^1\Pi_u^+, D^1\Pi_u^+)$ *pour* $J = 1$.

v'	v''	J'	J''	σ (cm^{-1})	λ (Å)	$f_{nv'J';Xv''J''}$	$A_{nv'J';Xv''J''}$ (s^{-1})	$o-c$ (cm^{-1})
0	0	1	0	99346.58	1006.5772	0.3463E-07	0.7593E+02	-
0	0	0	1	99209.54	1007.9676	0.1562E-07	0.3073E+03	-
0	0	2	1	99352.67	1006.5155	0.8026E-08	0.3168E+02	-
0	0	1	2	99079.46	1009.2909	0.1158E-07	0.1263E+03	-
0	0	3	2	99317.02	1006.8768	0.1879E-09	0.8824E+00	-
0	0	2	3	98909.58	1011.0244	0.2943E-08	0.2686E+02	-
0	0	4	3	99135.96	1008.7157	0.7236E-07	0.3686E+03	-
0	0	3	4	98700.84	1013.1626	0.1358E-08	0.1133E+02	-
1	0	1	0	99585.55	1004.1617	0.9368E-07	0.2064E+03	-
1	0	0	1	99487.11	1005.1553	0.3300E-07	0.6530E+03	-
1	0	2	1	99514.73	1004.8764	0.5420E-07	0.2146E+03	-
1	0	1	2	99318.43	1006.8625	0.3610E-07	0.3955E+03	-
1	0	3	2	99364.42	1006.3965	0.3910E-07	0.1838E+03	-
1	0	2	3	99071.64	1009.3706	0.3358E-07	0.3075E+03	-
2	0	1	0	100627.65	993.7626	0.2346E-05	0.5276E+04	0.05
2	0	0	1	100529.38	994.7341	0.8980E-06	0.1814E+05	0.02
2	0	2	1	100556.49	994.4659	0.1124E-05	0.4543E+04	-0.29
2	0	1	2	100360.53	996.4077	0.8326E-06	0.9314E+04	-0.20
2	0	3	2	100405.68	995.9596	0.6841E-06	0.3283E+04	0.63
2	0	2	3	100113.40	998.8673	0.5990E-06	0.5601E+04	-0.09
3	0	1	0	101386.37	986.3259	0.2261E-06	0.5164E+03	-
3	0	0	1	101251.90	987.6358	0.6562E-07	0.1345E+04	-
3	0	2	1	101387.33	986.3165	0.2981E-06	0.1225E+04	-
3	0	1	2	101119.25	988.9314	0.1298E-06	0.1474E+04	-
3	0	3	2	101343.92	986.7390	0.9465E-06	0.4627E+04	-
3	0	2	3	100944.24	990.6459	0.3145E-06	0.2990E+04	-

Table 3.3 – *Nombres d'onde et probabilités de transition de l'état EF vers l'état fondamental X de la molecule HD.*

Deuxième partie

SPECTROSCOPIE VUV EN EMISSION À HAUTE RÉSOLUTION

Chapitre 4

La spectroscopie à réseau

4.1 Le spectrographe/spectromètre de Meudon

La spectroscopie ultraviolet extrême (XUV) et ultraviolet sous vide (VUV), couvrant la gamme spectrale 2 - 2000 Å, est un bon outil de diagnostic pour l'astrophysique et la physique des plasmas. Par exemple, les paramètres d'un plasma, à savoir la température, la densité de particules (neutres ou ions), l'opacité, l'abondance des espèces, et même les constantes de la physique, sont couramment déterminés par des mesures spectroscopiques.
La spectroscopie à réseau est très utilisée pour l'étude des caractéristiques des molécules. Dans cette section nous allons décrire le dispositif expérimental que nous avons utilisé pour l'enregistrement des spectres d'émission à haute résolution dans le VUV des molécules diatomiques. Pour obtenir ces spectres il faut exciter la molécule, initialement dans son état électronique fondamental, vers ses états électroniques excités, par l'absorption d'un rayonnement électromagnétique (visible ou UV) ou par des collisions avec d'autre particules (électrons par exemple). Lorsque la molécule est dans un état électronique excité, elle se désexcite vers les niveaux ro-vibrationnels d'énergie inférieure en émettant de la lumière. Ce spectre de lumière est constitué d'un grand nombre de raies dont la longueur d'onde dépend de la molécule. Ces raies seront enregistrées par des détecteurs. L'analyse de ces spectres nous permettra l'identification des raies émises et de remonter aux niveaux d'énergie des états excités et de l'état fondamental de la molécule.

4.1.1 Techniques spectrographiques

Dans ce travail, nous avons enregistré à haute résolution ($\approx$ 150 000) le spectre des molécules D_2 et HD en utilisant le spectrographe de 10 m de l'Observatoire de Meudon. Malgré les grands progrès technologiques enregistrés dans le domaine de la spectroscopie à haute résolution, à savoir la Transformée de Fourier dans l'ultraviolet, le laser XUV, cet instrument reste incontournable et incomparable car il permet l'étude de l'ultraviolet sous vide jusqu'à 500 Å avec des sources pulsées en émission, et il permet l'enregistrement à haute résolution et en une seule exposition d'un intervalle spectral de 240 Å contenant un grand nombre de raies.
Les techniques d'enregistrement des spectres dans l'ultraviolet lointain sont déterminées essentiellement par l'opacité des matériaux solides et de l'air. En effet, en dessous de 2000 Å, le coefficient d'absorption de l'air, composé essentiellement de O_2 et N_2, impose l'utilisation de spectrographe fonctionnant sous vide. Le spectrographe est équipé d'un réseau de diffraction concave qui constitue à la fois l'élément dispersif et l'élément focalisateur ce qui évite de multiplier les surfaces de réflexion. Dans la théorie des réseaux concaves (55), on montre que la fente, le réseau et le récepteur doivent être situés sur un même cercle appelé cercle de Rowland (Figure 4.2). Ce cercle est tangent au réseau et a un diamètre égal au rayon de courbure du réseau. Comme nous l'avons cité au début du paragraphe, nous disposons à l'Observatoire de Meudon d'un spectrographe de rayon de courbure R = 10.7 mètres à incidence normale avec un montage "Eagle in plane" (Figure 4.1) dans lequel le faisceau incident et le faisceau diffracté ont des directions voisines.

Le spectrographe de 10 m (voir Figure 4.1) de Meudon fonctionne depuis 1972. Le réseau concave utilisé est un réseau holographique de 3600 traits par millimètre. Deux fentes de largeur fixe,

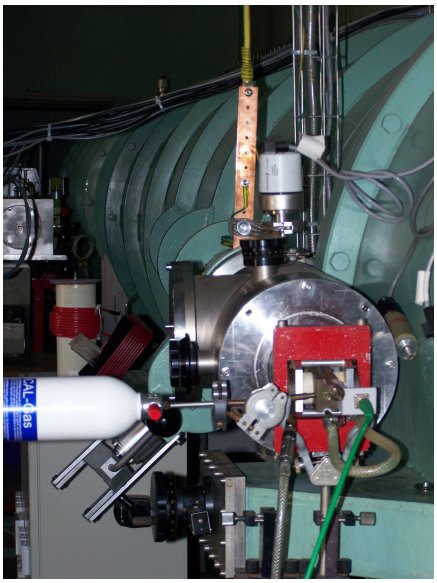


Figure 4.1 – *Photo du spectrographe/spectromètre de 10.7 m de l'Observatoire de Meudon.*

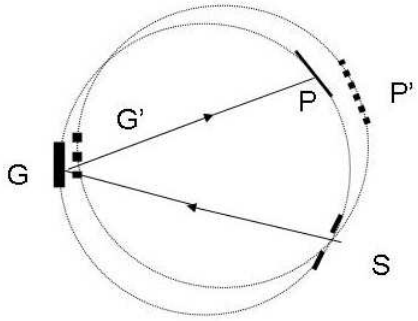


Figure 4.2 – *Le montage Eagle in plane d'un réseau concave, montrant la position de la fente S et du porte plaque P sur le cercle de Rowland. La figure montre aussi comment le réseau concave G et le porte plaque doivent être tournés et déplacés quand la gamme de longueurs d'onde est changée.*

30 et 100 μm, sont interchangeables et permettent de trouver un compromis entre la résolution et la luminosité recherchées. La fente de 30 μ est souvent utilisée, ce qui correspond à un pouvoir de résolution égal à $\sim$ 150000. La dispersion linéaire est de 0.25 Å/mm dans le premier ordre. Cet instrument, qui est actuellement unique en Europe, est équipé de deux pompes turbomoléculaires qui permettent d'atteindre rapidement un vide de 10^{-6} torr et d'éviter toute trace de vapeur d'huile. Un spectrographe semblable au nôtre existe aussi au NIST mais avec une dispersion trois fois moins grande. A l'aide de notre spectrographe, nous pouvons enregistrer des spectres moléculaires, ainsi que des spectres atomiques, dans des domaines de longueurs d'onde qui s'étalent de 500 à 3000 Å.

4.1.2 Source lumineuse

Caractéristiques

Les spectres VUV en émission sont produits par une source de décharge du type Penning à très basse pression, en présence d'un champ magnétique (56). Ce type de source a été décrit pour la première fois dans la littérature en 1963 (58). Le présent modèle résulte des perfectionnements apportés à la version Damany du laboratoire des Haute Pressions (C.N.R.S Bellevue).
La faible pression régnant dans la lampe ($\approx 10^{-2}$ mbar) évite les phénomènes de réabsorption généralement présents dans les lampes à décharges de type classique ; elle permet donc l'observation de raies situées dans l'extrême ultraviolet. Cette source est prévue pour être adaptée devant la fente d'entrée d'un montage dispersif. Son fonctionnement à basse pression est avantageux financièrement à double titre : d'une part, le débit de gaz est faible ce qui est surtout intéressant dans le cas de gaz coûteux tel que HD, d'autre part, son emploi ne nécessite pas la présence d'un pompage différentiel au niveau de la fente d'entrée. L'absence de ce pompage et la localisation de la décharge par le champ magnétique lui confèrent en outre une grande stabilité. La pulvérisation des cathodes en aluminium est limitée par leur conception mécanique et un refroidissement efficace. Toutefois la géométrie est telle que le métal ne peut se déposer sur la fente d'entrée. Par ailleurs, cette géométrie assure un alignement automatique de la source qui peut être contrôlé grâce à la présence d'une fenêtre sur la face arrière qui assure une visée optique à travers la lampe.

La source est alimentée par une alimentation continue de 2500 V, en série avec une résistance de stabilisation.
La localisation de la décharge par le champ magnétique permet d'avoir une intensité lumineuse importante pour une puissance dissipée dans la lampe relativement faible. Avec un courant de 200 mA, la puissance dissipée varie, suivant le gaz utilisé, de 50 à 150 W. Le débit de gaz doit être convenablement ajusté pour l'obtention d'un régime de fonctionnement stable. Ce régime correspond à une tension aux bornes de la lampe relativement faible (500 à 1500 V).
Comme il été dit, le seul phénomène gênant est la pulvérisation des cathodes. Il est nécessaire de les remplacer après une centaine d'heures de fonctionnement, et de nettoyer les autres pièces (alumines et anode) dans un bain d'acide. Le modèle est conçu pour que ces opérations de démontage et de remontage ne présentent aucune difficulté.
Cette source avait été déjà utilisée pour produire les spectres d'émission VUV de la molécule H_2 entre 780 Å et 1700 Å permettant ainsi la réalisation d'un Atlas pour H_2 (9).

4.1.3 Plaques photographiques

Les spectres moléculaires produits par la décharge de Penning sont enregistrés sur des plaques photographiques du type Short-Wave-Radiation (SWR-Kodak) de dimensions 45×5 cm. Ces spectres peuvent être enregistrés simultanément sur deux plaques, couvrant en une seule exposition un intervalle de 240 Å. Ces plaques photographiques sont choisies pour leur bon contraste, elles sont recouvertes d'une couche de gélatine particulièrement mince de façon à diminuer l'absorption des rayonnements ultraviolets. La durée d'exposition des plaques diffère d'une région spectrale à une autre. En effet, pour les grandes longueurs d'onde, au-dessus de 800 Å, la durée d'exposition est d'environ 30 minutes à 60 minutes. En revanche, pour les courtes longueurs d'onde, entre 780 à 800 Å, les raies spectrales sont très faibles en intensité, ce qui nécessite une durée d'exposition plus grande atteignant 10 heures. Cependant, l'observation des raies faibles implique souvent une saturation des raies intenses.

4.1.4 Mesure de longueurs d'onde et dépouillement des spectres

Comparateur

Les premiers spectroscopistes (en physique atomique ou moléculaire) de l'Observatoire de Meudon utilisaient un comparateur Zeiss pour mesurer les abscisses des raies. C'était un microscope à réticule devant lequel ils faisaient défiler la plaque en pointant chaque raie. Le déplacement linéaire de la plaque était assuré par un comptage électronique de franges de Moiré, formées par un réseau index fixe et un réseau optique solidaire du porte-plaque. Grâce aux travaux de Françoise Launay (59), l'équipe de Meudon a mis au point un comparateur semi-automatique. Sur ce nouveau comparateur, le déplacement linéaire est aussi assuré par un comptage électronique de franges de Moiré, mais il a l'avantage d'être équipé d'un système photoélectrique de pointé.
La Figure 4.3 montre le principe du montage optique. La lumière éclairant la plaque traverse un objectif et une lame tournante à faces parallèles, avant d'atteindre la fente placée devant un photomultiplicateur : on obtient ainsi le défilement de l'image des raies spectrales sur la fente. Le signal reçu par le photomultiplicateur est envoyé sur les plaques de réflexion verticales (Y) d'un oscilloscope. D'autre part, un alternateur entraîné par le moteur de la lame tournante délivre un signal sinusoïdal qui est envoyé sur le balayage horizontal (X) de l'oscilloscope. On visualise ainsi sur l'écran de l'oscilloscope (Figure 4.3) l'image de deux profils symétriques correspondant au contour de transmission de la raie. Le pointé d'une raie consiste donc à déplacer la plaque jusqu'à la superposition des deux profils.

Le nouveau système de visualisation avec amplification diminue la fatigue visuelle, il a surtout l'avantage d'accroître la précision des mesures, en particulier pour les raies larges, asymétriques, complexes ou très faibles. En revanche, la densité des raies dans les spectres d'émision VUV des molécules D_2 et HD est impressionnante (plus de 20 000 raies), et il est préférable que deux personnes soient présentes lors de la mesure des plaques photographiques afin de diminuer la probabilité que des raies soient oubliées, aussi pour la numérotation des raies. Ceci sera très utile dans la construction d'un atlas VUV pour les molécules.

Suivant la finesse de la raie, les pointés sont reproductibles à ± 1 ou 2μ prés. Lors de la mesure, nous attribuons à chaque raie du spectre, par le biais du photo multiplicateur, une intensité visuelle qui dépend du noircissement de la plaque. Ainsi une raie très sombre sur la plaque aura une intensité de 99 et une raie très claire aura une intensité de 3 par exemple. Le comparateur est digitalisé et les abscisses des raies sont enregistrées sur une disquette permettant ainsi leur dépouillement sur un ordinateur.

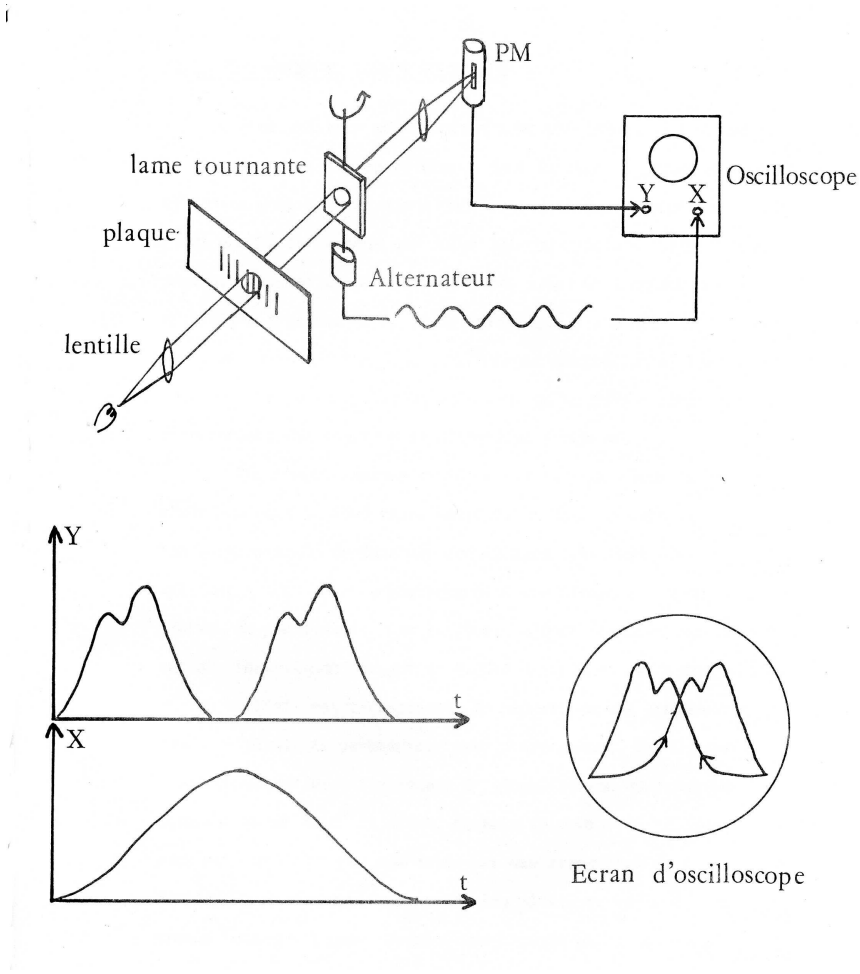


Figure 4.3 – *Principe du système photoélectrique de pointé sur le comparateur*

Références de longueurs d'onde

Pour la calibration de nos spectres, il est nécessaire de disposer de raies de référence dont la longueur d'onde soit très bien connue. Nous utilisons pour cela les raies qui ont été publiées par

Kaufman et Edlén (60). Dans leurs publications, les auteurs ont proposé comme raies de référence plus de 5000 raies entre 15 et 25 000 Å dont ils ont rassemblé les longueurs d'onde dans une publication. Ces raies appartiennent à des éléments divers, généralement neutres ou peu ionisés. Les longueurs d'onde retenues par les auteurs ont une incertitude variant de 0.0001 à 0.002 Å. Au-dessus de 2000 Å, la plupart de ces longueurs d'onde sont des résultats de mesures interférométriques. En-dessous de 2000 Å, elles résultent essentiellement de l'application du principe de combinaison de Ritz. En effet, le principe de Ritz stipule qu'on peut déterminer la différence entre deux niveaux d'énergie connectés par une transition de longueur d'onde λ_0, en mesurant avec précision plusieurs raies λ_i, formant une cascade entre ces deux mêmes niveaux. On obtient ainsi le nombre d'onde σ_0 de la raie λ_0 en additionnant les nombres d'onde σ_i des raies mesurées. Il en résulte que l'incertitude sur la longueur d'onde calculée $\lambda_0 = \frac{1}{\sigma_0}$ est petite, en vertu de la relation :

$$|\frac{\Delta\lambda}{\lambda}| = |\frac{\Delta\sigma}{\sigma}| \tag{4.1}$$

Ces longueurs d'onde calculées sont appelées "références de Ritz".

En pratique, pour calibrer les spectres moléculaires, nous avons enregistré des spectres atomiques juxtaposés aux spectres moléculaires à l'aide d'une lampe à cathode creuse en cuivre dans laquelle nous établissons une circulation d'argon. Les raies d'ArII, Cu II, Ge II, O II et Si II ainsi obtenues constituent des références externes de bonne qualité. La lampe à cathode creuse est placée perpendiculairement à la source de décharge de Penning. Les faisceaux issus de cette cathode creuse sont envoyés vers la fente du spectrographe à l'aide d'un miroir réfléchissant placé à 45° par rapport à la direction incidente du faisceau moléculaire. Cependant, le placement de ces deux sources dans deux endroits différents peut induire un éventuel décalage aléatoire entre les spectres moléculaires enregistrés. Pour corriger ce décalage, on se recale souvent sur d'autres raies atomiques de référence interne. Ces raies appartiennent généralement à des spectres d'atomes neutres ou peu ionisés comme Al II, O I, N I. Dans la région des très courtes longueurs d'onde, en-dessous de 1000 Å, les raies de référence sont très peu nombreuses, et nous avons utilisé principalement des raies de Cu II et O I.

Dépouillement

Après avoir mesuré au comparateur les abscisses des raies de référence, nous obtenons une première liste de longueurs d'onde approximatives par simple interpolation linéaire entre deux raies connues. Une fois que l'identification des raies de référence est faite, nous mesurons ensuite les raies du spectre moléculaire. Nous calculons ensuite les longueurs d'onde de toutes les raies mesurées avec une meilleure précision à l'aide d'un programme écrit par des chercheurs de l'Observatoire de Meudon. Le programme lit des couples de valeurs x et λ (abscisse et longueur d'onde des raies de référence) et calcule par la méthode de moindres carrés les coefficients d'un polynôme en x : $y = a_1 + a_2x + ...a_nx^{n-1}$ de façon à ce que les valeurs de l'ordonnée y reproduisent le mieux possible les longueurs d'onde λ de la liste. Le choix de la valeur de n dépend essentiellement de l'étendue du domaine mesuré. Nous utilisons en général $n = 2$ pour nos mesures. Le programme lit ensuite une liste de valeurs représentant les abscisses de toutes les raies de la tranche mesurée et calcule les longueurs d'onde correspondantes en utilisant les coefficients ainsi déterminés.

4.2 Nouveau système de détection

Dans cette partie nous parlons de la nécessité de remplacer les plaques photographiques par un nouveau système de détection.
En effet, jusqu'à présent, la plaque photographique était le moyen de détection qui permettait la

plus grande résolution et les meilleures mesures de longueurs d'onde en spectroscopie à réseau, et comme nous l'avons signalé au début du paragraphe (2.1.1), seulement deux puissants instruments existe dans le monde : le spectrographe de 10 m de l'Observatoire de Meudon avec une résolution de ∼150 000, et le spectrographe du NIST. Par conséquent, actuellement, le nombre de chercheurs qui utilisent les détecteurs plaques photographiques est très restreint. Le problème auquel on doit faire face est l'arrêt progressif de fabrication des plaques photographiques aux courtes longueurs d'onde dû au manque de débouchés commerciaux. En parallèle, la communauté scientifique, à savoir les chercheurs qui travaillent auprès des réacteurs de fusion et les astrophysiciens, a toujours besoin des spectres moléculaires et atomiques à haute résolution obtenus en laboratoires. Ainsi le besoin d'un remplacement des détecteurs est devenu évident.
Des découvertes récentes ont permis de développer un système de détection très sensible aux rayonnements ionisants tels que la radioactivité ou les rayons X (61). Ce système est couramment utilisé en recherche biologique et en radiologie, c'est l'écran phosphore photostimulable (en anglais Imaging Plates "IP"). Il s'avère que certains types d'écran possèdent une sensibilité suffisante dans l'ultraviolet. Leur dimensions et leur souplesse permettent de les adapter à la courbure du porte plaque du spectrographe.

4.2.1 Écrans phosphore photostimulable

Principe physique

Lorsqu'un détecteur photostimulable est exposé à un flux de particules ionisantes ou à un faisceau de rayonnement électromagnétique, il retient l'énergie absorbée pour former une image latente, au lieu de la libérer immédiatement comme dans le cas des écrans classiques. L'énergie emmagasinée peut être ensuite libérée en différé sous l'effet d'une stimulation optique sélective des électrons piégés entraînant l'émission d'une luminescence visible caractéristique. La densité de population des électrons est corrélée à la fois dans l'espace et en amplitude avec l'intensité du rayonnement incident. Cette population est métastable et peut rester dans cet état plusieurs jours, bien qu'une recombinaison progressive des électrons piégés se produise lentement, provoquant une diminution de l'énergie stockée.

Le détecteur photostimulable agit comme un transducteur d'énergie, permettant de convertir le spectre des rayonnements incidents en un motif optique visible. Ce processus est purement électronique et non chimique comme dans le cas des détecteurs photographiques. Il est entièrement réversible et le détecteur peut subir un grand nombres de cycle de mesures sans dégradation notable.

La lecture et la numérisation de l'information stockée sur le détecteur photostimulable s'effectuent par balayage à l'aide d'un laser (Figure 4.4). La dimension du faisceau laser et le pas déchantillonnage commandé par un bloc électronique de détection déterminent la résolution du système. La luminescence émise par chaque élément est capturée et envoyée dans un tube photomultiplicateur, où elle est convertie en un signal électrique. Ce signal analogique est amplifié, numérisé et stocké en mémoire d'ordinateur en fonction de la position du laser sur le détecteur. Lorsque la totalité du détecteur est balayé, l'image finale numérisée est affichée sur un moniteur.

4.2.2 Détecteur BaFBr :Eu^{+2}

Actuellement, les détecteurs photostimulables sont introduits dans des secteurs variés et trouvent des applications pratiques, dans le milieu médical pour l'imagerie et dans le milieu industriel. Le présent travail peut être considéré comme une première application des films phosphostimulables BaFBr :Eu^{+2} à la détection des spectres moléculaires dans le domaine des longueurs d'onde VUV. Il a été choisi en raison de sa forte luminescence. Les détecteurs photostimulables mis en oeuvre

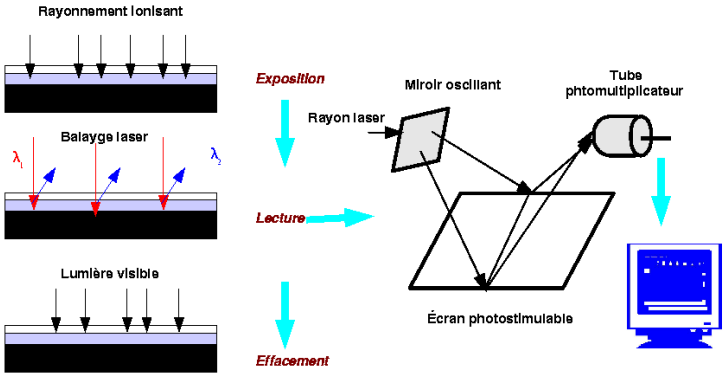


Figure 4.4 – *Principe général du fonctionnement et de lecture des écrans phosphostimulables*

sont constitués d'écrans souples de dimensions variant de 12.5 × 19.2 cm à 12.5 × 43.2 cm de 360μ d'épaisseur. Ils sont composés de 4 couches distinctes (Figure 4.5). La couche sensible est colorée afin d'éviter la diffusion lumineuse. Constituée de cristaux minuscules, elle conserve localement le rayonnement énergetiquement élevé. Le support en polyéthylène soutenant et protégeant la couche sensible est noirci au carbone pour prévenir la réflexion du laser sur sa face supérieure et empêcher sa rétro diffusion. Les dimensions des plaques de nos détecteurs sont résumées dans le Table 4.1.

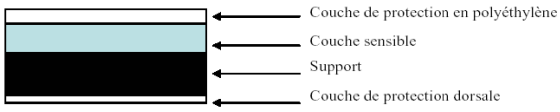


Figure 4.5 – *Schéma d'un détecteur photostimulable vu en coupe. La couche protectrice doit être absente pour une utilisation dans l'UV*

Table 4.1 – *Différentes tailles de détecteur photostimulable*

Taille	Petit	Moyen	Large
Dimension(cm)	12.5 × 19.2	12.5 × 25.2	12.5 × 43.0

4.2.3 Système de lecture

L'image latente stockée par le détecteur est transformée en une image numérique par l'unité de lecture. Un balayage point par point des lignes de l'écran est effectué par un faisceau laser finement focalisé de longueur d'onde λ =6328 Å, réfléchi par un miroir tournant polyédrique ou miroir oscillant.

La luminescence (stimulée par le laser), dont l'intensité est proportionnelle à la densité du rayonnement ionisant absorbé, est collectée par un miroir et un faisceau de fibres optiques positionné en regard de la ligne balayée par le laser. Un filtre sépare la lumière de stimulation (laser rouge) de la luminescence (bleu-pourpre λ= 3900 Å) pour éviter toute interférence. Le signal lumineux est converti en signal électrique grâce à un tube photomultiplicateur puis amplifié. Le signal est échantillonné puis numérisé par un convertisseur analogique/numérique.

Très récemment, l'équipe du LERMA de l'Observatoire de Meudon s'est équipée d'un système de lecture (Figure 4.6) de type Cyclone commercialisé par la société Perkin Elmer. Ce système est couramment utilisé pour le diagnostic par rayons X dans le domaine dentaire ou par les biologistes. Il est équipé d'un tambour tournant d'axe vertical permettant de fixer plusieurs détecteurs de différentes tailles. Une diode laser de lecture se déplace le long d'une fente verticale, le pas de la tête de lecture peut être sélectionné par le logiciel d'acquisition. Cependant d'autres systèmes de lecture existent avec une résolution supérieurs mais à un prix nettement plus élevé, tel que le lecteur FLA 7000.

Figure 4.6 – *Le lecteur Cyclone de Perkin Elmer*

4.2.4 Acquisition du signal

Pour l'acquisition du signal, nous avons utilisé le logiciel OptiQuant livré avec le lecteur Cyclone. Ce logiciel, fonctionnant sous environnement Windows, est conçu initialement pour l'imagerie et la radiographie X. Il est développé pour la quantification et l'analyse d'une large gamme de données biologiques. Il contrôle la capture, l'affichage, le traitement et l'analyse ainsi que l'archivage d'images radiologiques provenant des systèmes d'imageries numériques radiologiques.
Nous avons utilisé la fonction *scanner* pour lancer la procédure de lecture de l'écran fixé sur le tambour tournant. Une autre fenêtre permet de choisir la zone à lire. Il est possible de modifier la résolution d'acquisition : le doublement de la résolution de 300 dpi (dot per inch) à 600 dpi par exemple, permet d'améliorer la définition de l'image mais augmente la taille du fichier image et le temps d'acquisition.

4.2.5 Traitement des données numériques

Les outils de traitement d'images dans le logiciel OptiQuant sont principalement orientés vers la radiographie X. Ils comportent une variétés d'outils de traitement de l'image numérique (sélection de volumes, de bandes, reconnaissance de forme, extraction de profils, soustraction du bruit de fond, ... etc). Une fois l'acquisition de l'image faite, elle est enregistrée sous un format TIF (Target Image File). Sous ce format le fichier est ransformé en un fichier ASCII contenant des informations sur la position (x, y) des raies et le niveau de gris correspondant. L'intensité d'une raie est ensuite déterminée par une moyenne sur le niveau de gris le long de l'ordonnée y. Ce sont des données qui

seront utilisées dans l'analyse spectrale, à savoir l'identification des longueurs d'ondes des raies et leurs attributions.

4.2.6 Système de mise à zéro

De par sa nature, le film photostimulable accumule un signal croissant dû aux rayonnements ambiants (rayonnement cosmique et radioactivité naturelle). Pour cette raison il est nécessaire de procéder à une mise à zéro du détecteur avant toute utilisation. Une durée d'une dizaine de minutes d'exposition à la lumière blanche est suffisante pour effacer le signal résiduel après exposition à une source de rayonnements ionisants ainsi qu'à celui du bruit de fond dû aux rayonnements ambiants.

4.2.7 Premières applications des écrans phosphore photostimulables dans l'ultraviolet

Spectres atomiques

Des études techniques récentes ont montré la possibilité d'application dans le VUV des écrans photostimulables (61). L'utilisation de ces écrans pour la spectroscopie d'extrême ultraviolet (EUV) a été d'abord démontrée par le groupe de Joseph Reader (63) au NIST en utilisant le modèle Fujifilm BAS-2500 software. Ils ont comparé des spectres atomiques enregistrés sur ces écrans phosphore avec les spectres enregistrés sur des plaques photographiques dans la région spectrale 50-500 Å. Une ressemblance entre les deux spectres a bien été observée. Bien que les spectres soient qualitativement comparables, ils ont trouvé que la détermination des longueurs d'onde des raies à partir des écrans phosphore photostimulables était compliquée.
Ultérieurement, Ben Kish et al (64) ont réussi à enregistrer des spectres XUV-VUV en-dessous de 500 Å sur des écrans phosphore. Ils ont observé la réponse linéaire et la grande sensibilité de ces écrans contrairement aux anciennes plaques photographiques. De plus ils ont prouvé que ces écrans sont sensibles aux rayonnements ultraviolets au-dessus de 1800 Å. Récemment, Gillian Nave et al (65) ont utilisé ces nouveaux détecteurs pour enregistrer des spectres dans le VUV sur le spectrographe de 10 m du NIST en incidence normale, afin de déterminer la durée de vie des atomes étudiés, en se basant sur la mesure des intensités.

Spectres moléculaires

En ce qui concerne les spectres moléculaires, aucune étude n'avait été réalisée avec ces nouveaux détecteurs jusqu'à maintenant. Nous avons effectué le premier enregistrement du spectre d'émission de la molécule D_2 sur un écran phosphore photostimulable de 25 cm dans la région [800-900 Å] en utilisant le spectrographe de 10.7 m de l'Observatoire de Meudon. La même région spectrale avait déjà été enregistrée sur une plaque photographique. Les premiers résultats seront présentés ultérieurement dans le chapitre 6.

4.2.8 Comparaison entre les deux détecteurs

Pour chacun des deux détecteurs il y a avantages et inconvénients. En effet, les plaques photographiques étaient jusqu'à maintenant l'unique détecteur utilisé en spectroscopie à réseau dans le VUV, ceci pour leur bon contraste et à leur sensibilité au rayonnement VUV et XUV. Malgré le travail fastidieux que cela représente, la mesure des longueurs d'onde avec ces plaques donne, en utilisant le comparateur photoélectrique semi-automatique, des positions de raies précises à 1 μm près. Par contre ces plaques sont en verre. Il faut les utiliser avec grand soin et leur développement nécessite l'utilisation de produits chimiques. Ajoutons à cela, que pour observer les raies faibles, il faut exposer les plaques pour de longues durées, ce qui fait saturer les raies intenses. De plus le

détecteur a une réponse non linéaire en intensité (64).
Les écrans phosphore photostimulables, par contre, sont un remplaçant éventuel des anciens détecteurs. Ils sont caractérisés par leur souplesse à épouser le cercle de Rowland, par leur sensibilité aux rayonnement XUV et VUV et ils présenter une réponse linéaire en intensité avec une dynamique de 10^5 Figure 4.7 (62). Néanmoins, la résolution de ces détecteurs présente un handicap majeur car elle dépend de la résolution du système de lecture.

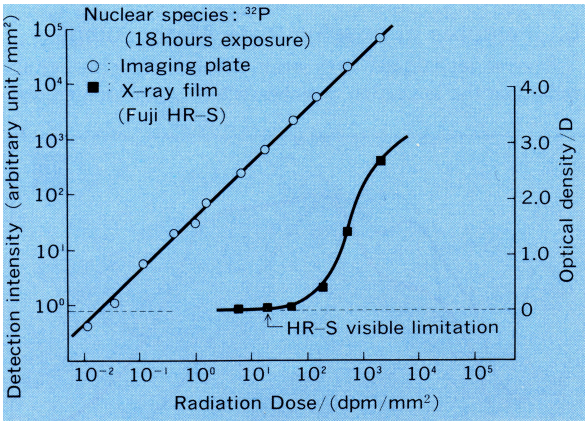


Figure 4.7 – *Comparaison entre la réponse en intensité du détecteur photostimulable et de la plaque photographique. En abscisse la dose de radiation issus de l'atome ^{32}P (rayonnement β de 1.7 MeV). l'ordonnée à droite représente la quantité de luminescence du détecteur photostomulable, et l'ordonnée à droite représente la densité du noircissement de la plaque photographique (62).*

Chapitre 5

Nouvelle méthode pour l'analyse des spectres d'émission

5.1 Démarche générale

Dans cette partie nous allons présenter la méthode que nous avons utilisée dans l'analyse du spectre de la molécule D_2 obtenu à l'aide du spectrographe de 10 mètres.
L'analyse du spectre émis par une molécule consiste en une interprétation des longueurs d'onde mesurées dans le cadre de la théorie quantique des molécules diatomiques. Elle a pour but de construire un ensemble de niveaux d'énergie liés de la molécule où chaque niveau est décrit par un groupe de nombres quantiques appropriés. Chaque transition observée connecte un niveau d'énergie supérieur appartenant à un état électronique excité à un niveau d'énergie inférieur dans l'état électronique fondamental. L'analyse repose sur le principe de recombinaison de Ritz qui stipule que : tout nombre d'onde σ_i de raie spectrale peut être exprimé comme la différence de deux termes spectraux caractéristiques de la molécule. Ce nombre d'onde s'écrira donc comme :

$$\sigma_i = \frac{E_i^{sup} - E_i^{inf}}{hc} \tag{5.1}$$

On rappelle que les transitions radiatives entre les niveaux d'énergie qui appartiennent à différents états électroniques sont gouvernées par des règles de sélection sur la symétrie des états électroniques, et sur les nombres quantiques rotationnels (voir Chapitre III).
En se basant sur les prédictions théoriques des nombres d'ondes, il est difficile de procéder à l'identification des raies moléculaires par une simple comparaison directe des valeurs calculées et mesurées des nombres d'onde. Ceci est lié à plusieurs facteurs : d'une part expérimentaux, à cause de la densité spectrale des raies et de la précision des mesures, et d'autre part, théorique, lié surtout à la qualité des prédictions théoriques. En effet si la densité des raies est très importante et si la résolution du spectrographe ne permet pas de séparer toutes les raies prédites par les calculs théoriques, il est difficile d'attribuer ces raies à des transitions en se basant simplement sur des calculs théoriques.

Dans le cas de la molécule H_2, le spectre d'émission VUV enregistré dans la gamme spectrale 780-1700 Å à l'Observatoire de Meudon contient environ 12 000 raies. Pour l'attribution de ces raies, il a été nécessaire d'améliorer les résultats des prédictions théoriques. Pour cela, Abgrall et al (79; 80; 81) ont calculé les nombres d'onde et les probabilités de transition correspondantes en modifiant les courbes de potentiel de H_2 d'une manière itérative, afin d'ajuster au premier ordre du nombre quantique rotationnel J, les données expérimentales précédentes des niveaux d'énergie ($J = 0$ pour les états électroniques excités de symétrie Σ, et $J = 1$ pour les états électroniques excités de symétrie Π).
Il était très utile dans l'analyse du spectre de H_2 d'utiliser aussi les prédictions théoriques des probabilités de transition, qui s'avèrent être un outil précieux. Cette probabilité de transition est comparée à l'intensité estimée de chaque raie. Apres l'identification des raies et la construction des branches R, P et Q dans des systèmes de bandes, une vérification de la cohérence globale des résultats était nécessaire.

Cette analyse avait permis de construire un atlas de la molécule H_2 (9), où 95 % des raies sont attribuées aux différentes transitions prédites par la théorie. Cela avait couté dix ans de travail.

5.2 Le programme d'analyse des spectres moléculaires

La molécule D_2 est un isotope lourd de H_2. La masse réduite des noyaux est deux fois plus grande et l'intervalle entre les niveaux vibrationnels, qui est proportionnel à l'inverse de cette masse, devient deux fois plus petit, ce qui fait que la molécule aura beaucoup plus de niveaux d'énergie ro-vibrationnels à l'intérieur de chaque puits de potentiel électronique. Il en résulte beaucoup plus de transitions entre les niveaux d'énergie liés des états électroniques excités et de l'état fondamental. Ceci peut être observé sur le spectre de la molécule D_2 qui contient un plus grand nombre de raies, si on le compare avec le spectre de H_2 dans la même zone spectrale. Le spectre de D_2 contient plus de 20 000 raies réparties dans la gamme spectrale [780, 1700] Å. Ce grand nombre de raies fait de leur identification une tâche longue et difficile.

La molécule étudiée est une molécule légère par rapport à d'autres molécules (par exemple CO et N_2...etc). Par conséquent, l'intervalle entre les énergies rotationnelles, qui est proportionnel à l'inverse de la masse réduite, est grand, et est de l'ordre de 30 cm^{-1} pour l'état fondamental (84). Cette caractéristique se traduit par le chevauchement des bandes moléculaires dans le spectre. Ainsi le spectre de la molécule n'a pas la structure de bandes habituellement rencontrée dans les spectres de molécules diatomiques.

A haute résolution, le spectre de la molécule D_2 ressemble aux spectres des atomes (ions) complexes. Cette ressemblance nous a incité à utiliser pour la première fois dans le cadre de l'étude de la spectroscopie des molécules diatomiques légères, un outil utilisé dans notre laboratoire pour l'analyse des spectres d'atomes (ions) complexes. En effet nous avons utilisé le programme de visualisation des raies IDEN (82; 83) construit et développé spécialement pour l'analyse des spectres complexes des atomes et des ions fortement chargés. Ce programme est un outil très puissant pour l'identification des raies, la recherche des niveaux d'énergie ro-vibrationnels et l'optimisation de leurs valeurs.

Les données lues par le programme IDEN sont contenues dans :

1) la liste "DLV.dat" contenant les longueurs d'onde des raies expérimentales mesurées et les intensités "visuelles" correspondantes,

2) la liste "ENLEV.dat" contenant les énergies de niveaux calculées par ordre croissant où les nombres quantiques vibrationnels et rotationnels ainsi que l'état électronique sont indiqués,

3) la liste "TRANS.dat" contenant les nombres d'onde calculés et les probabilités de transition de chaque niveau d'énergie ro-vibrationnel de l'état électronique excité vers tous les niveaux d'énergie ro-vibrationnels de l'état fondamental.

Aussi il faut définir les incertitudes sur les longueurs d'onde expérimentales et les énergies théoriques des niveaux. Pour ces dernières, l'erreur peut être estimée en comparant l'ensemble des données théoriques avec les résultats expérimentaux existants.

Ce programme nous permet durant l'analyse de voir le grand nombre de données théoriques et expérimentales manipulées durant le travail, grâce à l'ouverture des trois fichiers d'entrée dans

des fenêtres séparées. L'analyse commence d'abord par fixer tous les niveaux d'énergies de l'état fondamental $X^1\Sigma_u^+$.

Dans la Figure 5.1 on montre un exemple de l'interface du programme IDEN. Pour un niveau supérieur, donnée recherchée, on peut lire sur la partie gauche de l'écran les caractéristiques du niveau : le nombre quantique rotationnel J', le nombre quantique vibrationnel v' et l'état électronique concerné, ainsi que le numéro d'ordre dans la liste ENLEV.dat. En haut de la fenêtre à droite on peut lire : sur la première ligne, le numéro de toutes les transitions possibles à partir de ce niveau vers des niveaux inférieurs. Sur la deuxième ligne, le numéro du niveau d'énergie inférieur concerné par la transition. Sur la troisième ligne on trouve la probabilité de transition correspondante donnée en unité de $10^5 s^{-1}$. Chaque colonne représente l'image du spectrogramme sur une échelle en nombre d'onde ayant pour origine un niveau inférieur d'énergie fixée (voir Figure 5.2). Une raie est affichée sur l'écran de l'ordinateur par une boite de couleur verte de hauteur donnée par l'incertitude expérimentale. Finalement les intensités estimées des raies spectrales sont données en bas de l'écran dans l'avant dernière et la dernière ligne.

Pour la détermination des énergies supérieures, on se met à la position théorique du niveau recherché (par un simple clic sur le niveau d'énergie dans la liste ENLEV.dat), le programme cherchera systématiquement, en utilisant le principe de combinaison de Ritz, toutes les raies issues de ce niveau vers les différents niveaux (fixés) de l'état fondamental en déplaçant les images du spectrogramme. Ainsi toutes les raies issues du même niveau supérieur seront positionnées sur une même ligne (voir Figure 5.1). Cette ligne est représentée par un curseur glissant sur l'axe des nombres d'onde donnant la valeur expérimentale du niveau d'énergie supérieur, obtenue à partir de la formule $E_{sup} = \sigma_i + E^i_{inf}$. Cette valeur est obtenue en déplaçant le curseur, initialement positionné sur la valeur théorique du niveau supérieur, vers l'alignement formé par les raies, qui donne la valeur expérimentale de l'énergie du niveau. L'optimisation de la valeur de l'énergie expérimentale est obtenue en faisant passer le curseur par un nombre maximum de raies. Lorsqu'une raie expérimentale est attribuée à une transition donnée, elle est colorée en rouge pour la distinguer des autres raies non identifiées.

Il est très intéressant de souligner que dans cette étude, les valeurs des probabilités de transition électroniques constituent un guide précieux pour la prédiction des raies et pour leurs identifications. Finalement la vraie valeur du niveau d'énergie observé sera fixée par l'utilisateur, en cliquant sur une case prévue pour cela, et la différence entre cette valeur et la valeur théorique est affichée sur l'écran. On répète ainsi les mêmes étapes pour la détermination de l'ensemble des niveaux d'énergie susceptibles d'exister. Pour une nouvelle recherche d'un niveau d'énergie, les raies moléculaires déjà attribuées seront peintes en couleur rose.

Bien que le programme IDEN permette de manipuler un grand nombre de données spectroscopiques, expérimentales et théoriques, d'identifier les raies moléculaires et déterminer les énergies des niveaux supérieurs avec une précision améliorée, l'analyse des spectres ne peut pas se faire d'une manière automatique, à cause des coïncidences fortuites et des raies mal mesurées qu'il faut attribuer. En effet, vue la forte densité spectrale et la limite de résolution du spectrographe 8×10^{-3} Å, une raie peut être mesurée comme un épaulement d'une autre raie voisine et sera libellée par Sh (Shoulder) ou comme une raie asymétrique et sera libellée par A (Asymmetrical)... etc dans la liste des raies. Lors de l'analyse, ces raies sont généralement en dehors de l'alignement des autres raies bien mesurées. Cependant, la comparaison des probabilités de transition théoriques et les intensités visuelles estimées est un bon outil pour identifier ces raies, de plus la construction des branches R, P et Q nous permet de vérifier la cohérence des résultats. Néanmoins l'utilisation de

ce programme nous permet de gagner énormément en temps d'analyse. Ainsi une table des transitions identifiées est construite lors de l'analyse où les nombres d'onde, les probabilités de transition ainsi que la différence entre le nombre d'onde de Ritz et le nombre d'onde expérimental sont donnés.

Dans notre cas, pour l'état fondamental, nous avons introduit dans la liste des niveaux d'énergie ENLEV.dat les valeurs expérimentales de Bredhol et Herzberg obtenues à partir des spectres d'absorption (84), et qui sont connues avec une bonne précision. Ainsi l'incertitude sur les nombres d'onde théoriques dépendra uniquement de l'incertitude des niveaux d'énergie des états excités qui peut être estimée à : $\Delta E_{v',J'} = \pm 1$ cm^{-1} pour les quatre états électroniques couplés B, B', C et D, $\Delta E_{v',J'} = \pm 5$ cm^{-1} pour les états $B''\overline{B}$ et D' et $\Delta E_{v',J'} = \pm 15$ cm^{-1} pour l'état électronique D''.

Récemment, en collaboration avec Alexander E. Kramida chercheur du NIST nous avons adapté une nouvelle version de ce programme à l'étude des spectre de molécules légères. Ainsi plusieurs problèmes ont été surmontés avec cette nouvelle version, à savoir la dimension des fichiers d'entrées et la présentation des résultats dans les fichiers de sorties. En effet dans cette version la classification des raies identifiées se fait par bandes ($v' - v''$) et par branches spectroscopiques R, P et Q.

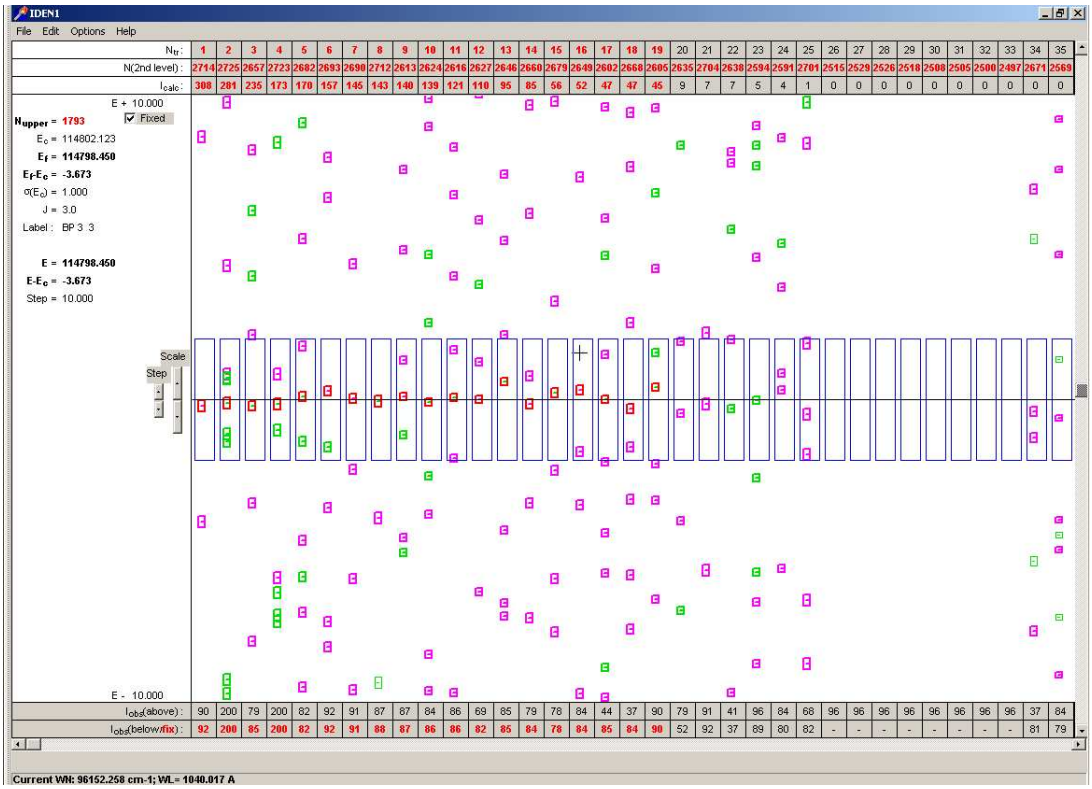


Figure 5.1 – *Programme de visualisation IDEN1*

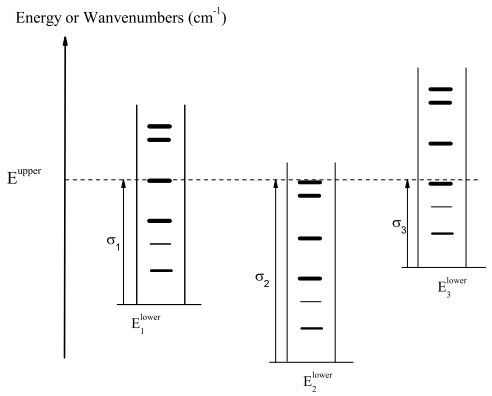


Figure 5.2 – *La recherche du niveau supérieur à partir de l'image du spectrogramme*

Chapitre 6

Résultats et discussions

Dans cette partie nous allons présenter l'ensemble des résultats obtenus à partir de notre étude des spectres d'émissions de D_2 enregistrés à l'aide du spectrographe de 10 mètres de Meudon dans le domaine spectral [780,1242 Å] . Ces résultats concernent les états électroniques excités $D'^1\Pi_u^-$, $D^1\Pi_u$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ et $B^1\Sigma_u^+$ et leurs transitions vers l'état $X^1\Sigma_u^+$. Une série de tableaux est constituée de listes de raies attribuées aux différents systèmes de bandes. Ces tableaux donnent, pour chacun de ces systèmes, les nombres d'onde mesurés des raies observées σ_{obs} ainsi que la probabilité de transition. Une deuxième série de tableaux contient les informations sur les niveaux d'énergie des états électroniques excités déterminés à partir des raies observées. L'énergie du niveau supérieur E_{sup} d'une transition est calculée en moyennant sur un grand nombre de transitions issues de ce niveau.

6.1 La liste des raies spectrales identifiées dans la région $[780, 1242]$ Å

La liste des raies dans la région $[780, 1242]$ Å que nous avons analysée contient **11906** raies. Nous avons pu attribuer plus de 80 % de ces raies dans un délai raisonable grâce à l'utilisation du programme IDEN. Les raies identifiées appartiennent essentiellement aux systèmes de bandes $D'^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$, $D^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$, $B'^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$, $C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ et $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. Les tableaux correspondants sont donnés dans les annexes $E.1....E.6$.
Chacun des tableaux contient la liste des nombres d'onde observés σ_{obs} et des probabilités de transition (coefficient d'Einstein d'émission spontanée en s^{-1}) correspondantes.

Les raies identifiées sont classées par bandes $(v' - v'')$ et par branches spectroscopiques $R(J' - J'' = +1)$, $P(J' - J'' = -1)$ et $Q(J' - J'' = 0)$. Certaines de ces raies possèdent plusieurs attributions, et sont marquées par différent labels :
"*" pour les raies ayant une double identification dans le même système de bandes,
"d" pour les raies ayant plusieurs identifications, les autres attributions appartenant à d'autres systèmes de bandes.
Le label "r" dénote les raies présentant une réabsorption à leur centre. Ces raies connectent généralement des niveaux (v', J') des états électroniques excités aux niveaux $(v'' = 0, J'' = 0 - 5)$ de l'état fondamental X.

Certaines raies prédites avec une grande probabilité de transition ne sont pas observées dans nos spectres. Ceci pourrait être dû soit au fait qu'elles sont complètement réabsorbées, soit que le niveau supérieur de la transition est insuffisamment peuplé car l'équilibre thermodynamique n'est pas satisfait dans notre source. Pour ces raies on donne entre parenthèses les valeurs des "nombres d'onde de Ritz", σ_{Ritz}, calculés à partir des énergies des niveaux observés.
On donne aussi dans les tableaux, quand l'espace le permet (E3, E5), la différence $(\sigma_{obs} - \sigma_{Ritz})$ pour les raies observées. Cette différence nous permet de voir la qualité de nos identifications.

Au début de l'analyse nous avons travaillé dans la région de longueurs d'onde $[780, 1030]$ Å. Cette région spectrale contient plus de **6000** raies. Les longueurs d'onde de ces raies sont obtenues à

partir d'une moyenne effectuée sur deux ou trois mesures de spectres sur plaques photographiques, enregistrés dans des conditions expérimentales différentes (tension de décharge et pression). L'incertitude sur ces longueurs d'onde dans cette région spectrale est estimée à ±0.0015 Å pour les raies qui ne sont pas mélangées, ce qui correspond à une incertitude sur les nombres d'onde de ± 0.14 - 0.25 cm^{-1}.

Plus de **2000** raies ont été identifiées durant cette première étape d'analyse, permettant ainsi de construire, principalement, les deux systèmes de bandes $D'^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ et $D^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$, contenant respectivement **125** et **165** bandes. Un grand nombre de ces bandes est présenté pour la première fois. Pour chacun de ces systèmes du type $\Pi - \Sigma$, les branches R et P sont dues à la composante Π^+ de l'état eléctronique excité, tandis que la branche Q est due à la composante de symétrie Π^-.

Pour le système $D^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$, à cause de la prédissociation de l'état D^+, nous avons observé seulement les bandes $(v' - v'')$ impliquant les quatre premiers niveaux vibrationnels supérieurs $(v' = 0 \ldots 3)$ (voir l'annexe E.1). Les autres bandes $(v' = 4 \ldots 19)$ correspondent à la symétrie $D^1\Pi_u^-$ (voir l'annexe E.2). Elles sont composées uniquement par la branche Q, et sont données dans l'annexe E.2. Le système $D^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ était déjà l'objet d'études en absorption par Takezawa (88), et en émission dans la région des courtes longueurs d'onde (proche de 800 Å) par Larzillière et al (87) en utilisant le même spectrographe de 10 m de Meudon. Cependant le nombre de raies identifiées était beaucoup plus faible que le nôtre.

Pour l'état électronique $D'^1\Pi_u$, nous avons déterminé seulement le système de bandes $D'^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ qui est présenté dans l'annexe E.3. Cet état électronique a déjà été étudié par Takezawa (88) et Takezawa et Tanaka (86) en absorption dans l'ultra-violet du vide. Leurs spectres ont été enregistrés en incidence normale au second ordre avec un spectrographe de 6.65 mètre sous vide, et ont été calibrés en utilisant des raies de la molécule CO, ce qui a donné une incertitude de ± 0.6 cm^{-1} sur les nombre d'onde des raies. Leurs système de bandes contenaient seulement 11 bandes construites par les branches R, P et Q.

Dans la région spectrale précédente ([780, 1030] Å), nous avons identifié beaucoup de raies appartenant à d'autres systèmes électroniques. Afin de compléter et de construire ces systèmes de bandes, il était indispensable d'étendre la région spectrale étudiée vers les grandes longueurs d'onde. Dans la nouvelle région spectrale allant de 1030 à 1242 Å, bien que les longueurs d'onde aient été obtenues à partir d'une seule mesure, leur incertitude peut être estimée à moins de ±0.002 Å pour des raies isolées, ce qui correspond à ±0.13 - 0.14 cm^{-1} en nombre d'onde. La cohérence des longueurs d'onde dans toute la région [780-1242 Å] a été verifiée.

A partir de cette région spectrale plus étendue, nous avons construit, d'abord, le système de bandes $B'^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$, constituées seulement par les branches R et P. Ce système est composé de **110** bandes, et contient **1480** raies appartenant au domaine spectral [841 - 1216 Å]. Elles sont listées dans l'annexe E.4.
Les transitions $B' - X$ aboutissant aux niveaux d'énergie vibrationnels proches de la limite de dissociation de l'état fondamental X sont identifiées pour la première fois. En effet le travail précédent de Dabrowski et Herzberg (57) sur ce système rapportait 14 bandes déterminées en absorption dans le VUV, toutes à partir du niveau vibrationnel fondamental $v'' = 0$ de l'état X.

L'étude de cette région spectrale [780-1242 Å] nous a permis aussi d'explorer les bandes de Werner et de Lyman qui sont les transitions les plus intenses de la molécule D_2 dans le VUV :

* les bandes de Werner $C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. Pour ce système nous avons identifié **248** bandes. Elles sont listées dans l'annexe E.5. Ceci constitue une véritable extension des travaux précédents de Herzberg et al (84; 57), où seulement 58 bandes avaient été identifiées en absorption et en émission avec la même précision. Les transitions $C - X$ aboutissant aux niveaux d'énergie vibrationnels proches de la limite de dissociation de l'état fondamental X sont identifiées aussi pour la première fois. Dans notre travail, seulement quelques raies de grande longueur d'onde manquent encore dans la bande $(14 - 19)$.

* une partie des bandes de Lyman $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ impliquant des transitions à partir des niveaux excités au dessus de $v' = 10$ vers les différents niveaux de l'état fondamental X. Les résultats préliminaires pour ce système électronique contiennent **310** bandes, dont plusieurs sont identifiées pour la première fois. Elles sont listées dans l'annexe E.6.

Durant cette analyse, nous avons également identifié des raies appartenant aux transitions $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ et $D''^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. Il s'agit des raies les plus intenses de grandes probabilités de transition prévues par les calculs théoriques. Cependant il reste à identifier beaucoups de raies de faibles probabilités de transition. La construction complète de ces deux systèmes est en cours.

6.2 Niveaux d'énergies et interactions entre les états électroniques

Les valeurs expérimentales des énergies de niveaux appartenant aux états électroniques excités sont déduites des listes des raies précédentes. L'énergie du niveau supérieur E_{sup} d'une transition est calculée en ajoutant le nombre d'onde mesuré de la transition observée à l'énergie du niveau inférieur E_{inf}, considérée comme connue avec une incertitude négligeable, et en moyennant sur un grand nombre de transitions issues de ce même niveau. Cette valeur moyenne nous permet de recalculer le nombre d'onde de Ritz pour une transition particulière : $\sigma_{Ritz} =< E_{sup} > -E_{inf}$.

L'incertitude sur la position d'un niveau d'énergie est évaluée à partir de l'écart quadratique donné par :

$$\Delta E = \frac{1}{N}\sqrt{\sum(\sigma_{Ritz} - \sigma_{obs})^2}. \tag{6.1}$$

où N est le nombre de raies impliquant un niveau supérieur donné.

Dans notre cas, l'ensemble des niveaux d'énergie observés sont déterminés avec une incertitude de ± 0.05 cm^{-1} à ± 0.08 cm^{-1}.

Les niveaux d'énergie appartenant aux états électroniques $C^1\Pi_u$ et $B^1\Sigma_u^+$ sont présentés dans l'annexe D, alors que deux articles présentent dans les annexes B.1 et B.2 les résultats concernant les niveaux d'énergie des états $D'^1\Pi_u^-$ et $D^1\Pi_u$ d'une part, et de l'état $B'^1\Sigma_u^+$ d'autre part. Un grand nombre de niveaux d'énergie ro-vibrationnels de J élevés sont observés pour la première fois.

Pour chaque état électronique excité, le tableau présentant les niveaux d'énergie donne le nombre quantique rotationnel J pour chaque niveau vibrationnel v', la valeur de l'énergie expérimentale E du niveau et le nombre de raies N impliquées dans la détérmination du niveau. Les niveaux nouvellement déterminés sont soulignés en caractéres gras. Nos valeurs d'énergies expérimentales (o) sont comparées aux valeurs expérimentales précedentes compilées par Freund et al (85) dans la colonne

$(o-o')$, à nos valeurs calculées $(c1)$ dans la colonne $(o-c1)$, et aux valeurs semi-empiriques d'Abgrall et al (28), lorsqu'elles existent (états B, B', C et D), dans la colonne $(o-c2)$.

A partir de ces énergies ro-vibrationnelles, nous avons mis en évidence les interactions non adiabatiques entre les états électroniques excités. Ceci est possible à partir du développement des énergies ro-vibrationnelles en puissance de $J(J+1)$ (10) donné par :

$$E(J,v) = B_v(J(J+1) - \Lambda^2) - D_v(J(J+1) - \Lambda^2)^2 + ... \tag{6.2}$$

où B_v et D_v sont des constantes moléculaires déterminées à partir de l'ajustement des énergies, et Λ est la projection du moment cinétique électronique sur l'axe de quantification z, tel que $\Lambda = 0$ pour un état électronique Σ, et $\Lambda = 1$ pour un état électronique Π.

6.2.1 L'état électronique excité $D'^1\Pi_u^-$

$D'^1\Pi_u$ $(4p\pi)$ est un état électronique de la série $np\pi$ de Rydberg de la molécule H_2 et de ses isotopes. Il est corrélé à la limite D(1s)+D(3ℓ) des atomes séparés.
Pour la molécule D_2 les niveaux d'énergie de cet état ont été observés pour la première fois par Takezawa et Tanaka (86) à partir des spectres d'absorption. Dans ce travail, nous avons analysé plus en détail la composante de symétrie négative $^1\Pi_u^-$ de l'état D' (D'^-) à partir de nos spectres d'émission enregistrés à haute résolution.

La Table V de l'article I (voir l'annexe B.1) résume les résultats concernant les niveaux d'énergie de l'état D'^- . Nous avons déterminé **96** niveaux d'énergie ro-vibrationnels dont **44** sont nouveaux. Les niveaux d'énergie sont obtenus à partir des nombres d'onde mesurés dans l'annexe E.3.

Nous présentons la différence $o-o'$ et $o-c1$ pour les premiers niveaux vibrationnels $v' = 0, 1$ dans, respectivement, la Figure 6.1 et la Figure 6.2.

A partir des résultats de la Table V, la comparaison avec les résultats de compilation de Freund montre un bon accord entre les deux résultats. Cependant, une grande différence est observée pour certains niveaux d'énergie. Tel est le cas pour les niveaux $E(v'=1, J'=6)$ et $E(v'=7, J'=5)$ où la différence atteint, respectivement, 14.36 cm^{-1} et -7.10 cm^{-1}. Nos vérifications ont montré que ces désaccords sont très probablement dus à des erreurs d'impression des nombres d'onde publiés par Takezawa et Tanaka (86), et qui sont reprises ensuite par Freund dans le calcul des niveaux d'énergie.

La comparaison des valeurs expérimentales et théoriques des énergies montre un écart qui n'excède pas, en général, ± 1 cm^{-1} pour les niveaux de v' inférieure à 7. Par contre cet écart augmente et excède ± 2 cm^{-1} pour $v' \geq 8$. Dans la table VI de l'article I, on donne l'écart en énergie entre les niveaux vibrationnels pour le nombre quantique rotationnel $J = 0$ obtenus par extrapolation. L'extrapolation à $J = 0$ nous permet d'exclure l'effet du couplage rotationnel avec les états électroniques de symétrie $^1\Sigma_u^+$. Nous avons trouvé que les valeurs théoriques sont supérieures à ± 1 cm^{-1} par rapport aux valeurs expérimentales entre les niveaux $v' = 5$ et $v' = 10$. Cette différence peut être due au fait que dans nos calculs nous avons traité cet état électronique tout seul, sans interactions avec les autres états électroniques voisins, à savoir, les états de symétrie $V^1\Pi_u^-$ et $D''^1\Pi_u^-$ qui sont couplés par le couplage radial.

Cependant, dans notre travail, la précision des niveaux d'énergie est nettement améliorée par rapport aux résultats précédents, ceci s'explique par le fait que nous avons observé les niveaux avec

un grand nombre de raies, qui sont de plus obtenues à partir des spectres d'émission à haute résolution avec une précision supérieure à celle de Takezawa et Tanaka sur le nombre d'onde.

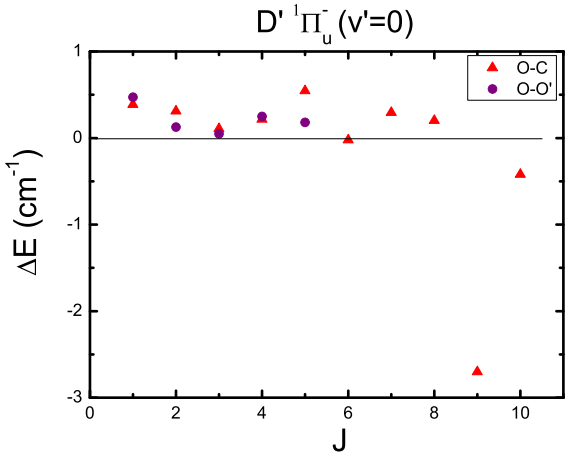


Figure 6.1 – *Différences d'énergie $o-c1$ et $o-o'$ de l'état électronique $D'^1\Pi_u^-(v'=0)$ en fonction de J*

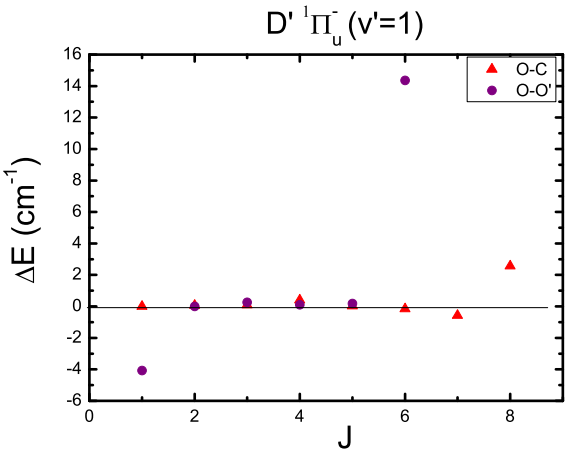


Figure 6.2 – *Différences d'énergie $o-c1$ et $o-o'$ de l'état électronique $D'^1\Pi_u^-(v'=1)$ en fonction de J*

6.2.2 L'état électronique excité $D^1\Pi_u$

Cet état électronique est le deuxième état excité de symétrie $^1\Pi_u$ $(3p\pi)$ de la série de Rydberg $np\pi$ de la molécule D_2. Il est corrélé asymptotiquement à la limite D(1s)+D(3 p). L'état $D^1\Pi_u$ était déjà l'objet de plusieurs études spectroscopiques. Les dernières études remontent à celles menées par Larzillière et al (87) en utilisant les spectres d'émission à haute résolution enregistrés à l'Observatoire de Meudon dans une région spectrale proche de 800 Å, et celles menées par Freund et al à partir des spectres obtenus dans le visible (85).

Dans la table II de l'article I (voir l'annexe B.1) on donne les niveaux d'énergie observés pour la symétrie $^1\Pi_u^+$ (D^+) obtenus à partir d'une moyenne sur les nombres d'onde des raies des branches R et P, et dans la Table III les niveaux d'énergie appartenant à la symétrie $^1\Pi_u^-$ (D^-) obtenus à partir d'une moyenne sur les nombres d'onde des raies de la branche Q.
Nous avons déterminé **206** niveaux d'énergie dans cet état électronique, quatre niveaux vibrationnels $(v'=0-3)$ pour la symétrie $^1\Pi_u^+$ et vingt niveaux vibrationnels $(v'=0-19)$ pour la symétrie $^1\Pi_u^-$. Parmi ces niveaux, **131** sont nouveaux. Ces tableaux contiennent une colonne donnant la différence $o-c2$ entre les valeurs d'énergie déterminées dans notre analyse avec les valeurs obtenues par le calcul semi-empirique d'Abgrall et al (28).

Dans la Figure 6.3 et la Figure 6.4 on présente les trois différences, $o-o'$, $o-c1$ et $o-c2$ en fonction du nombre quantique J pour, respectivement, les deux premiers niveaux vibrationnels $v'=0,1$.

A partir du Tableau II, on observe que les deux résultats expérimentaux sont en accord satisfaisant pour tous les v' et J. Le désaccord n'excède pas ± 0.28 cm^{-1}. De plus, à partir des différences $o-c1$ et $o-c2$, nous constatons que les résultats de nos calculs et ceux du calcul semi-empirique sont tous deux satisfaisants pour les premiers niveaux rotationnels. Par contre leurs désaccords avec

les valeurs expérimentales augmentent légèrement pour les énergies rotationelles élevées, plus précisément pour J=7-9. Un tel comportement est examiné par l'analyse des résultats en termes de perturbations.

Les études théoriques montrent que l'état électronique $D^1\Pi_u^+$ (D^+) est couplé par un couplage radial à l'état électronique $C^1\Pi_u^+$ et par couplage rotationnel avec les états électroniques $B^1\Sigma_u^+$ et $B'^1\Sigma_u^+$. Ces quatre états sont caractérisés par leurs fortes interactions via ces couplages non adiabatiques. Pour mettre en évidence ces interactions à partir des énergies observées, nous avons tracé, pour chaque niveau vibrationnel, la variation des énergies E en fonction de $J(J+1)$, et ajusté cette variation par un polynôme quadratique en puissance de $(J(J+1)-\Lambda^2)$. La Figure 6.5 et la Figure 6.6 représentent cette variation pour, respectivement, les niveaux vibrationnels $v'=0$ et $v'=1$. Sur la Figure 6.5 on constate que les niveaux $J=8$ et 9 sont en dehors de l'ajustement, contrairement à l'ensemble des autres niveaux. Pour comprendre ce décalage, nous avons eu recours à nos calculs théoriques. En effet ceux-ci montrent que pour $v'=0$, les niveaux $J=8$ et 9 sont très mélangés aux autres états électroniques, et ils sont fortement perturbés par les niveaux de même J de l'état $B'(v'=2)$. Les pourcentages de mélanges des états électroniques D^+ et B' sont les suivants :

87.52% $D^+(v=0)$ +12.48% $B'(v=2)$ pour J =7,
60.00% $D^+(v=0)$ +40.00% $B'(v=2)$ pour J =8,
69.74% $D^+(v=0)$ +30.26% $B'(v=2)$ pour J =9.

Ces pourcentages sont aussi donnés dans la Figure 6.5. Les mêmes perturbations sont observées pour le niveau vibrationnel $v'=1$ qui est perturbé essentiellement par le niveau $B'(v'=3)$ mais avec une faible amplitude. Les pourcentages de mélange sont :

95.68% $D^+(v=1)$ +4.32% $B'(v=3)$ pour J =7,
95.63% $D^+(v=1)$ +4.37% $B'(v=3)$ pour J =8,
95.56% $D^+(v=1)$ +4.44% $B'(v=3)$ pour J =9.

Nous avons analysé, de la même manière, l'ensemble des niveaux d'énergie appartenant à cette symétrie électronique de l'état D.

La raison pour laquelle nous avons observé seulement quatre niveaux vibrationnels pour l'état D^+ est liée directement au couplage rotationnel de cet état avec l'état $B'^1\Sigma_u^+$. En effet, une grande partie du potentiel électronique de l'état D est plongée dans le continuum du potentiel de l'état B', et les niveaux d'énergie de l'état D^+ sont prédissociés par le biais du couplage rotationnel avec ce continum. Cette prédissociation a déjà été observée par Namioka (89) et par Dabrowski et Herzberg (57) pour la molécule H_2, où seulement trois niveaux vibrationnels ont pu être observés.

L'état électronique de symétrie $^1\Pi_u^-$ (D^-) est couplé essentiellement à l'état $C^1\Pi_u^-$ par le couplage radial. A partir du Tableau III, la comparaison avec les résultats expérimentaux précédents donne un écart qui n'excède pas ± 0.80 cm^{-1}. Cependant de grands écarts sont observés entre les deux résultats expérimentaux pour les niveaux d'énergie $E(v'=6, J'=3)$ et $E(v'=12, J'=2)$. Ceci est dû aux erreurs d'écriture des nombres d'onde dans la référence (87), utiliser dans le travail de compilation de Freund. Nous avons ainsi corrigé les erreurs sur les valeurs des nombres d'onde et des énergies correspondantes.

On donne dans le tableau IV, toujours de l'article I, les intervalles entre les niveaux vibrationnels pour le nombre quantique rotationnel $J=0$. A partir de ce tableau, on constate que l'écart entre le

calcul et l'expérience est très petit, ceci explique que ces niveaux d'énergie ne sont pas perturbés. Cette constatation a été confirmée aussi à partir de l'analyse des perturbations utilisée dans le paragraphe précédent.

La levée de dégénérescence dans l'état D : Λ-doubling

Nous avons déterminé à partir des niveaux ro-vibrationnels observés, l'écart en énergie entre les deux composantes de symétries + et - de l'état D. Cet écart en énergie, dit "Λ-doubling", est une levée de dégénérescence entre ces deux composantes, conséquence du couplage rotationnel de cet état avec les états B et B'.

La Figure 6.7 et la Figure 6.8 présentent la variation du Λ-doubling $E(D^+) - E(D^-)$ en fonction de $J(J+1)$ pour les niveaux $v' = 0$ et $v' = 1$.

Comme première remarque, nous constatons que les niveaux d'énergie de l'état D^+ sont au-dessus des niveaux d'énergie de l'état D^-. Nous constatons aussi que cet écart augmente bien avec le nombre quantique rotationnel J. Sur la Figure 6.7, la discontinuité en énergie entre $J = 7$ et $J = 10$ du niveau $v' = 0$ est liée à l'effet de l'interaction rotationnelle avec l'état B' mise en évidence par les pourcentages de mélanges discutés précédemment. En revanche pour le niveau vibrationel $v' = 1$, la variation est pratiquement lisse en fonction de $J(J+1)$, ce qui signifie que ce niveau n'est que faiblement perturbé. Ce dernier résultat est confirmé aussi par les résultats des pourcentages de mélanges correspondants. Par conséquent, nous pouvons conclure que la variation du Λ-doubling en fonction de $J(J+1)$, permet de localiser avec netteté les effets des couplages non adiabatiques sur les niveaux d'énergie.

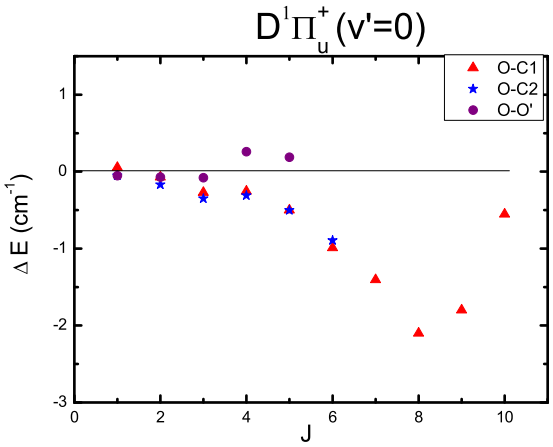


Figure 6.3 – *Différences d'énergie $o - c1$, $o - c2$ et $o - o'$ de l'état électronique $D^1\Pi_u^+(v' = 0)$ en fonction de J*

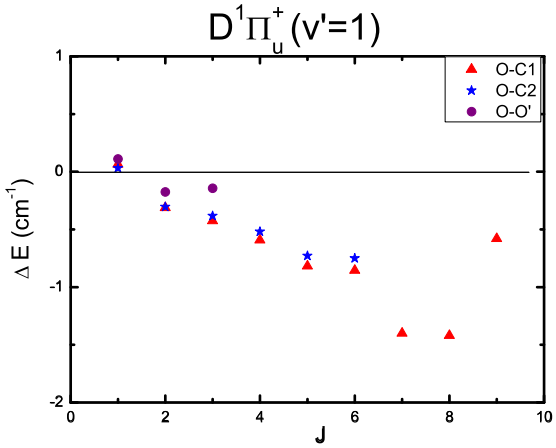


Figure 6.4 – *Différences d'énergie $o - c1$, $o - c2$ et $o - o'$ de l'état électronique $D^1\Pi_u^+(v' = 1)$ en fonction de J*

6.2.3 L'état électronique excité $B'^1\Sigma_u^+$

En 1958 Dieke avait repris les travaux entrepris avec ses collaborateurs (90) sur les spectres d'émission de la molécule H_2 et ses isotopes, enregistrés dans le visible au-dessus de 3000 Å (91).

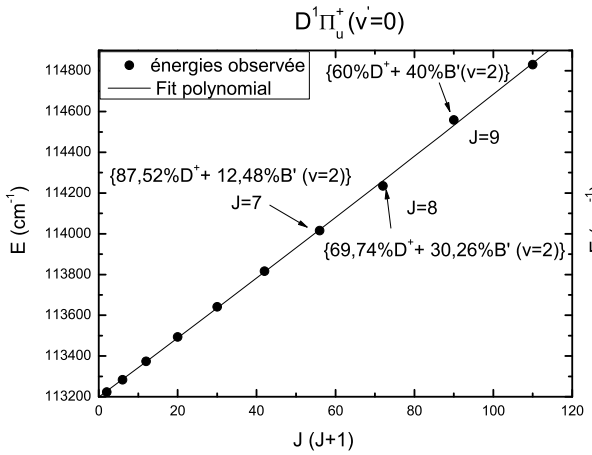


Figure 6.5 – *Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique* $D^1\Pi_u^+(v' = 0)$ *en fonction de* $J(J+1)$

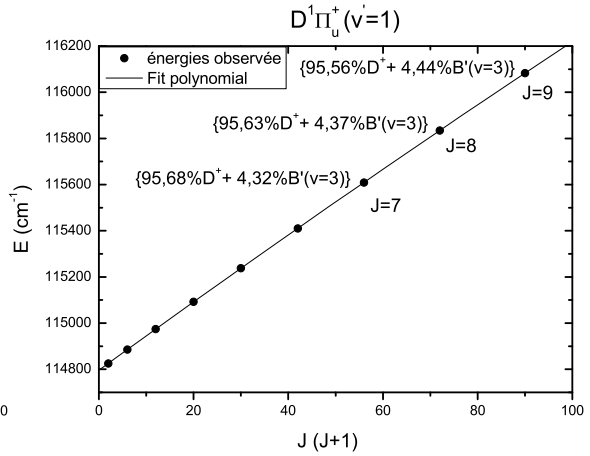


Figure 6.6 – *Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique* $D^1\Pi_u^+(v' = 1)$ *en fonction de* $J(J+1)$

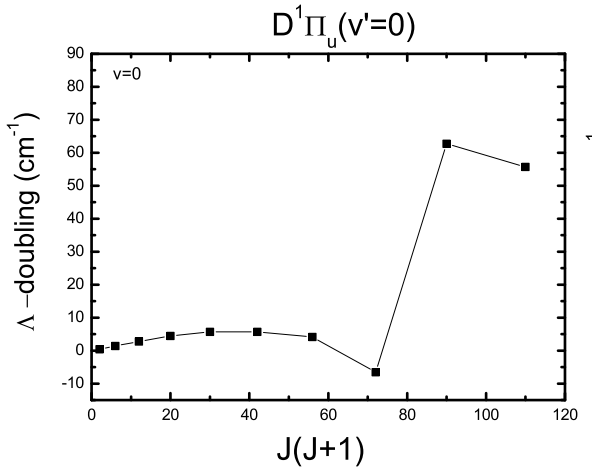


Figure 6.7 – *Λ-doubling observé en fonction de* $J(J+1)$ *pour* $D^1\Pi_u^+(v' = 0)$

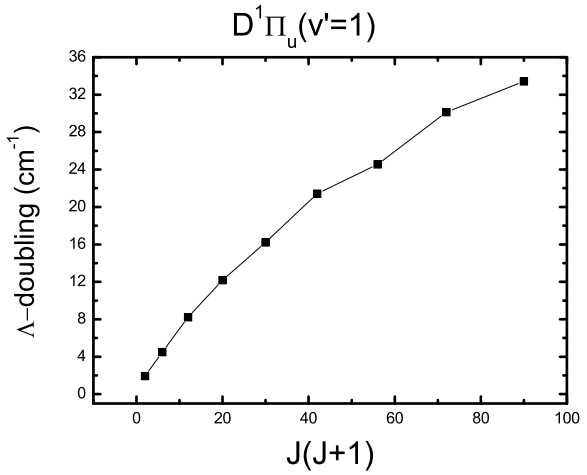


Figure 6.8 – *Λ-doubling observé en fonction de* $J(J+1)$ *pour* $D^1\Pi_u^+(v' = 1)$

A partir de ces spectres d'émission, l'état électronique $B'^1\Sigma_u^+$ était observé pour la première fois, et était identifié par Dieke comme le deuxième état ($n = 3$) de la série de Rydberg $1s\sigma\ np\sigma\ \Sigma_u^+$ de la molécule. Cependant les résultats correspondant à la molécule D_2 n'étaient publiés qu'après, en 1985, dans la compilation de Freund et al (85). En 1960, Herzberg et Monfils ont déterminé à partir des spectres d'absorption les limites de dissociation de H_2 et de HD, et ils ont discuté les résultats obtenus sur le système de bandes $B'^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ de la molécule H_2 (92). L'analyse de ces derniers spectres avait permis à Monfils d'observer 9 niveaux vibrationnels ($v' = 0 - 8$) appartenant à l'état $B'^1\Sigma_u^+$ de D_2. Plus tard, ce travail a été étendu par Dabrowski et Herzberg qui ont étudié les spectres d'absorption à haute résolution de la molécule D_2 dans la région spectrale 840-1100 Å (57), et ont observé 14 niveaux vibrationels ($v' = 0-13$) appartenant à cet état électronique.

La Table I de l'article B.2 contient les niveaux d'énergie que nous avons obtenus à partir d'une moyenne sur les nombres d'onde des raies des branches R et P (voir l'annexe E.4). Nous avons déterminé **111** niveaux, dont **31** sont nouveaux.

Sur la Figure 6.9 et la Figure 6.10 nous rapportons deux exemples de comparaisons $o-o'$, $o-c1$ et $o-c2$ en fonction de J pour, respectivement, les niveaux vibrationnels $v'=0$ et $v'=1$.

Dans notre travail d'analyse, nous avons obtenu plus de niveaux rotationnels pour l'ensemble des niveaux vibrationnels observés (voir la Table I de l'article B.2). Cependant, nous avons déterminé seulement douze niveaux vibrationnels ($v'=0-11$), alors que Dabrowski et Herzberg (57) avaient déterminé 14 niveaux ($v'=0-13$). Les niveaux manquants $E(v'=12, J=0)$ et $E(v'=13, J=0)$ situés respectivement aux énergies 119003.57 cm^{-1} et 119025.57 cm^{-1}, étaient difficiles à déterminer à partir de nos spectres d'émission. Ceci est dû à deux raisons :
1) les raies de forte intensité connectant ces deux niveaux d'énergie aux niveaux d'énergie de l'état fondamental X tombent dans l'aile de la raie Lymanα située à 1215 Å, toujours présente avec une forte saturation sur nos spectres, ce qui rend leurs mesures difficiles, sinon impossibles.
2) les raies d'absorption observées dans les travaux précédents (57), et qui ont permis la détermination de ces deux niveaux d'énergie, sont complètement masquées dans nos spectres par des raies d'émission plus intenses, appartenant aux bandes $D-X$ et $D'-X$.

Pour les niveaux d'énergie v' inférieur à 6, nos valeurs d'énergie sont en bon accord avec les résultats de Freund, le désaccord ne dépassant pas ± 0.20 cm^{-1}, sauf exceptions. Par exemple pour le niveau $E(v'=0, J'=8)$ le désaccord atteint 0.85 cm^{-1}. Ceci s'explique par la précision des niveaux d'énergie, qui est liée au nombre de raies observées et à la précision de leurs mesures (voir l'équation 6.1). En effet ce niveau a été observé dans notre analyse à partir de 11 raies tandis que Freund l'avait déterminé à partir d'une seule raie mesurée dans les spectres visible de Dieke (90).

A partir de la Table I des énergies de l'article B.2, la comparaison entre nos résultats expérimentaux et les calculs semi empiriques (28) sont en très bon accord, meilleurs que celui de nos calculs *ab initio*. Ce résultat en soi n'est pas surprenant, puisque les auteurs (28) avaient modifié les courbes de potentiel *ab initio* existantes de manière à reproduire au premier ordre de J les données expérimentales de Freund et al (85). Il est donc tout à fait naturel que ces résultats, que ce soit pour les énergies ou pour les probabilités de transitions, soient plus en accord avec les résultats expérimentaux. Cependant nous pouvons considérer que nos calculs sont suffisamment bons pour prédire les positions des niveaux d'énergie expérimentaux. L'écart entre nos résultats expérimentaux et nos résultats de calculs est au maximum ± 5.81 cm^{-1}.
Cet écart peut être lié à la qualité des données *ab initio* utilisées dans nos calculs, mais aussi aux effets des interactions non adiabatiques avec les états de Rydberg très excités. En effet, les calculs précédents de Jungen et Atabek (93), basés sur la théorie du défaut quantique (MQDT), montrent un écart très petit par rapport aux données expérimentales précédentes. Cependant, leur comparaison est donnée seulement pour $J=0$. Récemment, Meshkov et al (94) ont évalué, à partir de calculs basés sur la MQDT (95), l'écart en énergie causé par les interactions non adiabatiques entre les états de Rydberg ($n \geq 4$) et les états électroniques B et C sur la position des niveaux d'énergie de B et C. Il est de l'ordre de 2.0 cm^{-1}. Étant donné que l'état électronique B' est plus haut en énergie que les états B et C, nous supposons que ses niveaux d'énergie seront plus affectés par ces interactions non adiabatiques, et que leur déplacement en énergie pourrait être plus grand que 2.0 cm^{-1}.

Dans notre calcul nous avons considéré seulement l'interaction de l'état B' avec les états électroniques B, C et D à travers le couplage radial et le couplage rotationnel. Pour étudier l'effet des perturbations sur les niveaux d'énergie de B', nous avons utilisé la même méthode d'analyse des perturbations. Des exemples sur l'ajustement des niveaux $v' = 2$, $v' = 5$, $v' = 7$ et $v' = 8$ en fonction de $J(J+1)$ sont donnés, respectivement, dans la Figure 6.11, la Figure 6.12, la Figure 6.13 et la Figure 6.14.

Pour le niveau $v' = 2$, nous avons ajusté les données expérimentales des énergies rotationnelles par un polynôme quadratique. Sur la Figure 6.11, nous observons que les énergies correspondant aux niveaux $J = 8$ et $J = 9$ sont en dehors de l'ajustement contrairement aux autres niveaux d'énergie. Nos calculs théoriques montrent que ces niveaux sont fortement perturbés par les composantes rotationnelles du niveau vibrationnel $v' = 0$ de l'état $D^1\Pi_u^+$ (D^+). Les pourcentages de mélanges des états électroniques D^+ et B' sont donnés par :

$$\begin{aligned}
&87.84\%\ B^{'}(v=2)\ +12.16\%\ D^{+}(v=0) \text{ pour } J=7,\\
&70.13\%\ B^{'}(v=2)\ +29.87\%\ D^{+}(v=0) \text{ pour } J=8,\\
&60.47\%\ B^{'}(v=2)\ +39.53\%\ D^{+}(v=0) \text{ pour } J=9.
\end{aligned}$$

Ce résultat est une bonne confirmation de la perturbation observée dans l'état D^+ évoquée dans la partie 6.2.2. Par consequent, les deux niveaux vibrationnels $D^+(v' = 0)$ et $B'(v' = 2)$ se perturbent mutuellement sans impliquer d'autres niveaux.

Sur la Figure 6.13 on observe le même type de déviation pour les niveaux d'énergie $J = 8$ et $J = 9$ de $v' = 7$. Cependant, l'ajustement des énergies rotationnelles était réalisé par un polynôme d'ordre 3 en $J(J+1)$. Une augmentation de l'ordre du polynôme signifie qu'il faut plus de paramètres pour reproduire la variation des niveaux d'énergie. En d'autre termes, l'amplitude des perturbations qui affectent ces niveaux est plus importante.
Les calculs théoriques prévoient que le niveau vibrationel $v' = 7$ est mélangé non seulement avec l'état D^+, mais aussi avec l'état B et l'état C^+. Les pourcentages de mélanges sont donnés par :

$$\begin{aligned}
&\{75.11\%\ B^{'}(v'=7)\ +24.76\%\ D^{+}(v'=3)\}+\{0.11\%\ C^{+}(v'=17)\ +0.02\%\ B(v'=48)\} \text{ pour } J=8,\\
&\{87.91\%\ B^{'}(v'=7)\ +10.41\%\ D^{+}(v'=3)\}+\{1.56\%\ C^{+}(v'=17)\ +0.12\%\ B(v'=48)\} \text{ pour } J=9.
\end{aligned}$$

Cette perturbation est observée et analysée pour la première fois. Celle-ci est une conséquence directe de la détermination des niveaux d'énergie à nombre quantique rotationnel J élevé, non accessible par les travaux précédents.

Pour les deux niveaux vibrationnels $v' = 5$ et $v' = 8$ les ajustements des énergies expérimentales sont faits, respectivement, par des polynômes d'ordre 2 et 3. Ces deux états vibrationnels sont aussi mélangés principalement à l'état électronique D^+. Cependant aucune perturbation n'est observée sur la position de ces niveaux. Il est difficile dans la représentation non adiabatique, de trouver un niveau d'énergie possédant un caractère électronique pur. Il y a toujours un mélange entre tous les états électroniques pris en compte dans le système d'équations couplées pour la fonction d'onde d'un seul niveau d'énergie, même s'il peut être présenté par un développement paramétrique.

Dans la Figure 6.15 nous présentons la variation de l'intervalle vibrationnel observée pour $J = 0$. Nous avons comparé ces valeurs avec celles déterminées à partir des niveaux expérimentaux précédents (85) et avec nos données théoriques. Les résultats sont donnés dans la Table II de l'article B.2. On constate, à partir de cette table, que nos résultats de calculs théoriques sont légérement

différents de nos résultats éxpérimentaux. Ce désaccord est lié à la qualité des données *ab initio* que nous avons utilisées dans notre calcul théorique, ainsi qu'aux interactions avec les états de Rydberg plus excités. Tandis que les deux résultats experimentaux sont en bon accord. .

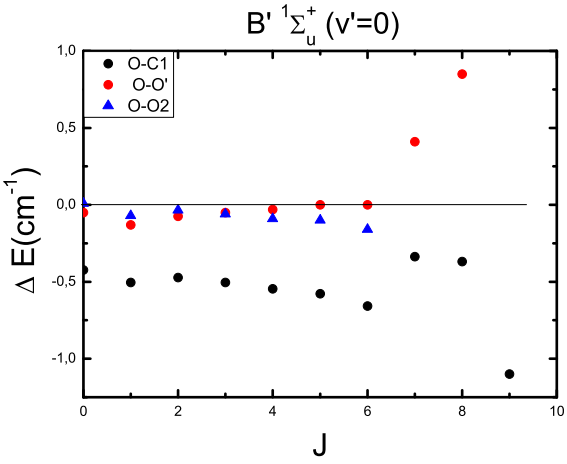


Figure 6.9 – *Différences d'énergie $o-c1$, $o-c2$ et $o-o'$ de l'état électronique $B'^1\Sigma_u^+(v'=0)$ en fonction de J.*

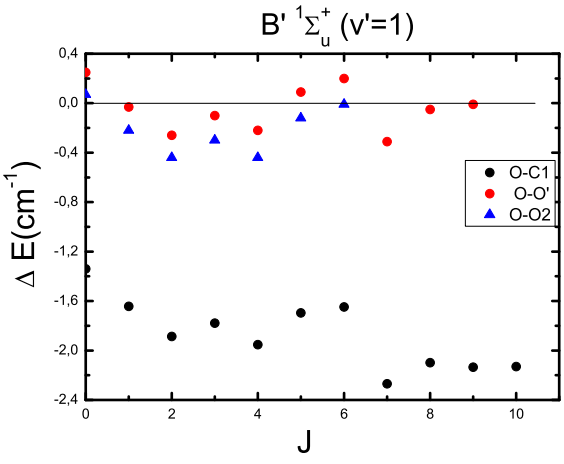


Figure 6.10 – *Différences d'énergie $o-c1$, $o-c2$ et $o-o'$ de l'état électronique $B'^1\Sigma_u^+(v'=1)$ en fonction de J.*

6.2.4 L'état électronique excité $C^1\Pi_u$

L'état électronique $C^1\Pi_u$ (C) est le premier état de symétrie $^1\Pi_u$ ($2p\pi$) dans la série $np\pi$ de Rydberg. Il est corrélé asymptotiquement à la limite D(1s)+D(2p) de la molécule D_2.
Cet état électronique a été observé pour la première fois en 1926 par Werner (96), grâce à l'identification des bandes d'absorption UV de H_2, appelées depuis, bandes de Werner, provenant de l'état fondamental X. Après cela, l'état C a été l'objet de plusieurs études spectroscopiques dans divers domaines spectraux : à partir des spectres d'émission enregistrés dans le visible par Dieke et al (90), à partir des spectres d'émission VUV enregistrés dans la région spectrale [810, 1375] Å par Rulon (98). Il y a eu aussi les travaux de Monfils et Herzbzeg (92), de Bredohl et Herzberg (84), et finalement Dabrowski et Herzbzerg (21) à partir des spectres d'émission et d'absorption VUV enregistrés à haute résolution. L'ensemble des données spectroscopiques obtenues dans les divers domaines spectraux a été compilé par Freund et al (85) pour déterminer les niveaux d'énergie ro-vibrationnels appartenant à l'état électronique $C^1\Pi_u$. Cet état a été aussi l'objet d'études en utilisant la spectroscopie laser XUV à très haute résolution pour l'étude des bandes de Werner (66; 99).

Dans l'annexe D, nous donnons les nouvelles valeurs des énergies ro-vibrationnelles appartenant à l'état $C^1\Pi_u$ sous formes de tableaux. Les énergies des niveaux appartenant à la symétrie positive $C^1\Pi_u^+$ (C^+) sont déterminées à partir d'une moyenne sur les nombres d'onde des raies des branches R et P, et sont données dans la Table D.1. Les énergies des niveaux appartenant à la symétrie négative $C^1\Pi_u^-$ (C^-) sont déterminées à partir d'une moyenne sur les nombres d'onde des raies de la branche Q, et sont données dans la Table D.2. Nous avons déterminé **363** niveaux d'énergie appartenant à l'état électronique C, dont **139** sont nouveaux.

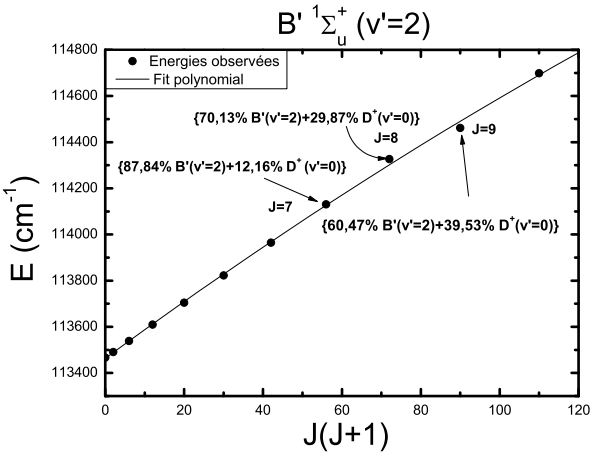


Figure 6.11 – *Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique* $B'^1\Sigma_u^+(v'=2)$ *en fonction de* $J(J+1)$

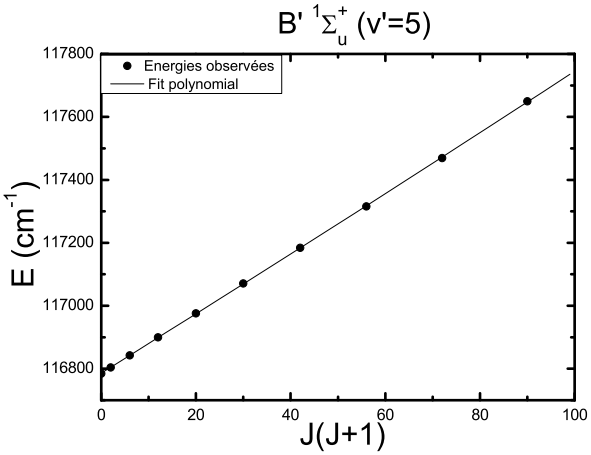


Figure 6.12 – *Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique* $B'^1\Sigma_u^+(v'=5)$ *en fonction de* $J(J+1)$

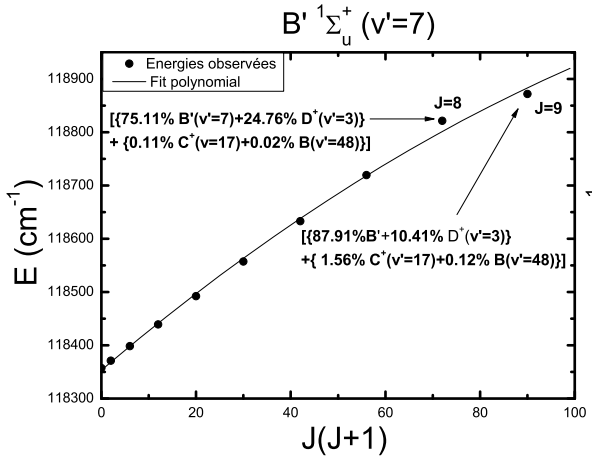


Figure 6.13 – *Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique* $B'^1\Sigma_u^+(v'=7)$ *en fonction de* $J(J+1)$

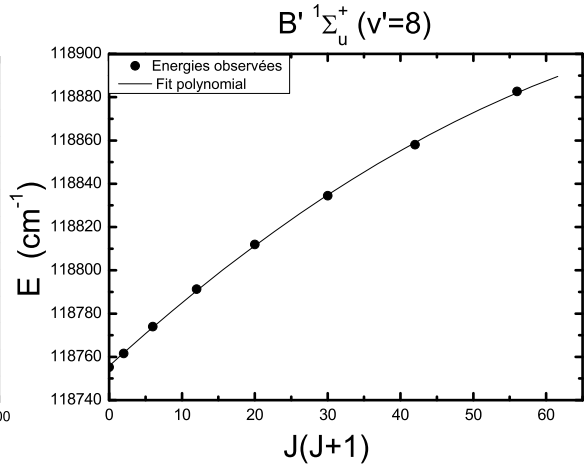


Figure 6.14 – *Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique* $B'^1\Sigma_u^+(v'=8)$ *en fonction de* $J(J+1)$

La Figure 6.16 et la Figure 6.17 présentent les différentes comparaisons $o-o'$, $o-c1$ et $o-c2$ en fonction de J pour, respectivement, les niveaux vibrationnels $v'=0$ et $v'=1$.

Pour l'état électronique de symétrie positive C^+, la comparaison entre nos valeurs d'énergie expérimentales et les données précédentes de Freund est satisfaisante (voir la Table D.1), le désaccord ne dépassant pas ± 0.60 cm^{-1} de manière générale. Pour certains niveaux ce désaccord peut augmenter : pour le niveau d'énergie $E(v'=18, J'=2)$, le désaccord atteint exceptionnellement ± 0.85 cm^{-1}. Ce désaccord est lié à la précision obtenue sur l'énergie du niveau. En effet, Freund avait déterminé ce niveau à partir de deux raies R et P observées en absorption par Dabrowski et

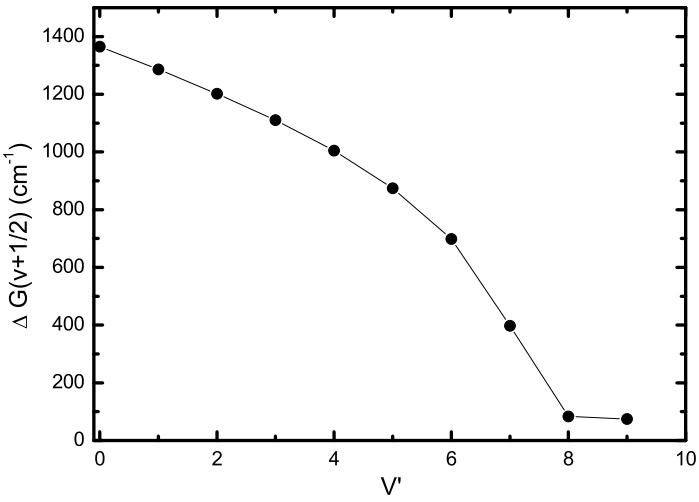


Figure 6.15 – *Variation de l'intervalle d'énergie vibrationnelle* $\Delta G(v+1/2)$ *de l'état* $B'^1\Sigma_u^+(J=0)$ *en fonction de* v'

Herzberg, alors que dans notre analyse, nous l'avons déterminé à partir de 9 raies en émission.
D'autre part nous avons trouvé plusieurs erreurs dans les valeurs des niveaux d'énergie proposées par Freund : $E(v'=8, J'=3)$, $E(v'=11, J'=6)$, $E(v'=16, J'=2)$, $E(v'=17, J'=6)$ et $E(v'=18, J'=5)$, décalés respectivement de 25.30 cm^{-1}, 42.96 cm^{-1}, 11.91 cm^{-1}, -6.24 cm^{-1} et -4.63 cm^{-1} par rapport à nos valeurs. Ces erreurs peuvent être attribuées essentiellement aux erreurs d'impression sur les nombres d'onde des raies donnés dans les tables de Dabrowski et Herzberg (57). Par exemple pour le niveau $E(v'=8, J'=3)$, la vraie valeur du nombre d'onde de la raie R(2), que Freund avait utilisée pour déterminer la valeur de ce niveau, est à 110801.55 cm^{-1} au lieu de la valeur 110776.26 cm^{-1} donnée par Dabrowski et Herzberg (57). La différence entre ces deux nombres d'onde (25.29 cm^{-1}) explique l'erreur sur l'énergie du niveau correspondant. Ajoutons à cela que, notre niveau d'énergie était déterminé à partir d'une moyenne sur 21 raies, ce qui lui donne une meilleur précision.
Les données semi-empiriques nous ont servi aussi comme un bon outil dans nos vérifications des erreurs sur les niveaux d'énergie déterminés par Freund. En effet la différence d'énergie entre les valeurs expérimentales de Freund avec, d'une part, les valeurs semi-empiriques et, d'autre part, nos valeurs expérimentales, est du même ordre de grandeur, ce qui confirme les erreurs sur les niveaux d'énergie de Freund.

A partir de la Table D.1, l'écart en énergie $o-c1$ entre nos données expérimentales et nos valeurs théoriques ne dépasse pas ± 1.80 cm^{-1}, alors que l'écart en énergie $o-c2$ avec les valeurs semi-empiriques est plus petit.

Pour la symétrie électronique $^1\Pi_u^-$, l'accord entre nos valeurs d'énergie expérimentales et les données précédentes de Freund est satisfaisant (voir la Table D.2). Cependant, nous avons trouvé aussi des erreurs sur la position des niveaux d'énergie $E(v'=5, J'=5)$ et $E(v'=5, J'=7)$ de 1.12 cm^{-1} et -2.99 cm^{-1}. Ce désaccord est dû aux mêmes raisons que celles citées dans le paragraphe ci-dessus.

A partir de la Table D.2, l'ensemble de nos résultats de calculs théoriques est en bon accord avec nos résultats expérimentaux, à l'exception de certains niveaux où la différence $o-c1$ est $\leq$ -2.40 cm^{-1}. Cependant, les résultats semi-empiriques sont en très bon accord avec nos résultats expérimentaux.

Étant donné que la composante électronique C^+ est fortement couplée aux états B et B' par le couplage rotationnel et à l'état D^+ par le couplage radial, nous avons étudié l'effet des perturbations sur les niveaux d'énergie de C^+. Dans la Figure 6.18 et la Figure 6.19 nous présentons le résultat d'ajustement en $(J(J+1)-\Lambda^2)$ des deux niveaux vibrationnels $v'=0$ et $v'=1$.
A partir de ces deux Figures, nous remarquons que les énergies rotationnelles perturbées sont légèrement décalées par rapport à l'ajustement, contrairement à ce que nous avons déjà observé pour les états électroniques B' et D. Ceci rend difficile la localisation directe des perturbations. Cependant, en se basant sur les résultats d'analyse de l'état D, nous pouvons utiliser la variation de l'écart $\Lambda-$ *doubling* en fonction de $J(J+1)$ pour voir plus clairement ces perturbations. Pour cela nous nous sommes proposés de déterminer, d'abord, l'écart en énergie entre les deux symétrie C^+ et C^-.

Dans la Figure 6.20, la Figure 6.21, la Figure 6.22 et la Figure 6.23 nous présentons, respectivement, la variation du $\Lambda-$ *doubling* $E(C^+)$-$E(C^-)$ en fonction de $J(J+1)$ pour les niveaux vibrationnels $v'=0$, $v'=1$, $v'=2$ et $v'=3$. Dans la Figure 6.20, on trouve que le $\Lambda-$ *doubling* présente une variation monotone et lisse en fonction de $J(J+1)$, ce qui signifie que le niveau $v'=0$ est très peux perturbé. Par contre dans les autres Figures, nous observons des discontinuités dans la variation du $\Lambda-$ *doubling* pour l'énergie rotationnelle $J=7$ du niveau vibrationnel $v'=1$, pour l'énergie rotationnelle $J=6$ du niveau vibrationnel $v'=2$ et finalement pour les énergies rotationnelles $J=4$ et $J=10$ du niveau vibrationnel $v'=3$. En se basant sur nos résultats théoriques, nous avons trouvé que les niveaux d'énergie de l'état C^- sont très peu perturbés par ceux de l'état D^-, alors que l'état C^+ est principalement pérturbé par l'état B. Ainsi les discontinuités observées sont une conséquence des interactions non adiabatiques entre les niveaux d'énergie appartenant à C^+ et les niveaux d'énergie appartenant à l'état B. Les pourcentages de mélanges des niveaux pérturbés sont donnés par :

$$\begin{gathered}
91.24\%\ C^+(v'=1)\ +8.76\%\ B(v'=12) \text{ pour } J=7 \text{ de } v'=1,\\
61.77\%\ C^+(v'=2)\ +38.23\%\ B(v'=15) \text{ pour } J=6 \text{ de } v'=2,\\
94.64\%\ C^+(v'=3)\ +05.36\%\ B(v'=17) \text{ pour } J=4 \text{ de } v'=3,\\
63.43\%\ C^+(v'=3)\ +36.57\%\ B(v'=18) \text{ pour } J=10 \text{ de } v'=3.
\end{gathered}$$

Nous avons observé d'autres niveaux qui sont très perturbés dans cette analyse, à savoir le niveau $C^+(v'=7)$ avec le niveau $B(v'=26)$ pour $J'=5$, avec un pourcentage de mélange de $\{57.48\%\ C^+(v'=7)\ +42.18\%\ B(v'=26)\}$.

6.2.5 L'état électronique excité $B^1\Sigma_u^+$

Cet état électronique est le premier état ($n=2$) de la série $np\sigma$ de Rydberg. Il a été observé pour la première fois en 1906 par Lyman (97), à partir de l'identification des bandes d'absorption de la molécule H_2, appelées depuis bandes de Lyman. Plus tard, plusieurs travaux spectroscopiques, dans divers domaines de longueurs d'onde, ont permis d'approfondir la connaissance des caractéristiques de cet état. L'état électronique $B^1\Sigma_u^+$ est souvent étudié simultanément avec l'état électronique $C^1\Pi_u$. Pour plus de détails sur l'état B, nous faisons référence aux articles donnés précédemment pour l'état C (90; 98; 92; 84; 21; 99; 66).

Dans la Table D.3 de l'annexe D, nous présentons les résultats préliminaires sur les niveaux d'énergie appartenant à l'état électronique $B^1\Sigma_u^+$, obtenus à partir d'une moyenne sur les nombres

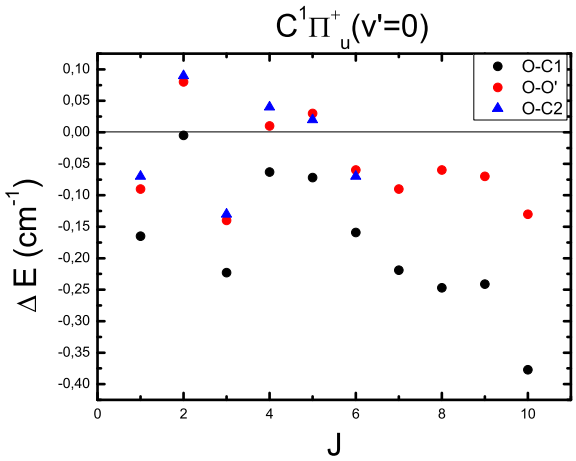


Figure 6.16 – *Différence d'énergie* $o-c1$, $o-o2$ *et* $o-o'$ *de l'état électronique* $C^1\Pi_u^+(v'=0)$ *en fonction de* J.

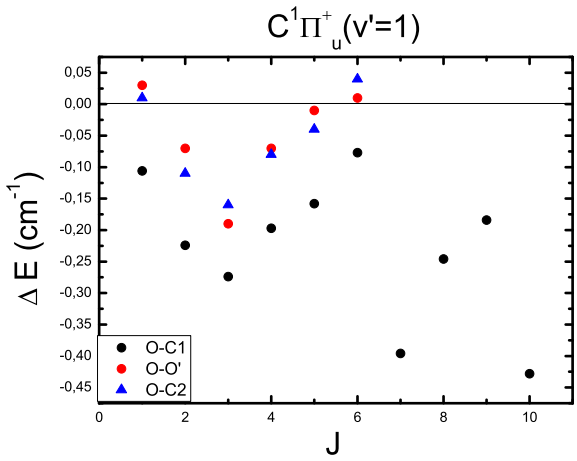


Figure 6.17 – *Différence d'énergie* $o-c1$, $o-o2$ *et* $o-o'$ *de l'état électronique* $C^1\Pi_u^+(v'=1)$ *en fonction de* J.

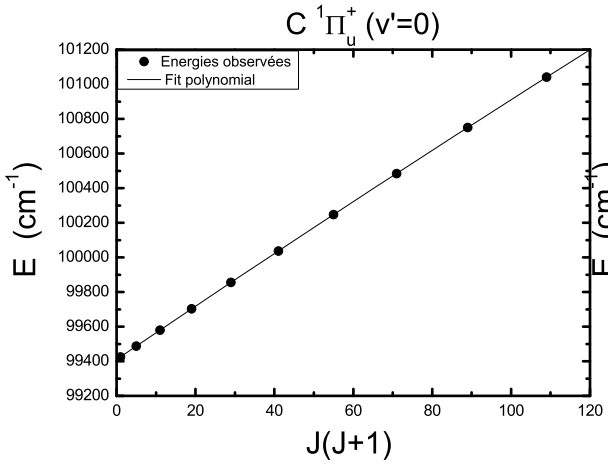


Figure 6.18 – *Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique* $C^1\Pi_u^+(v'=0)$ *en fonction de* $J(J+1)$.

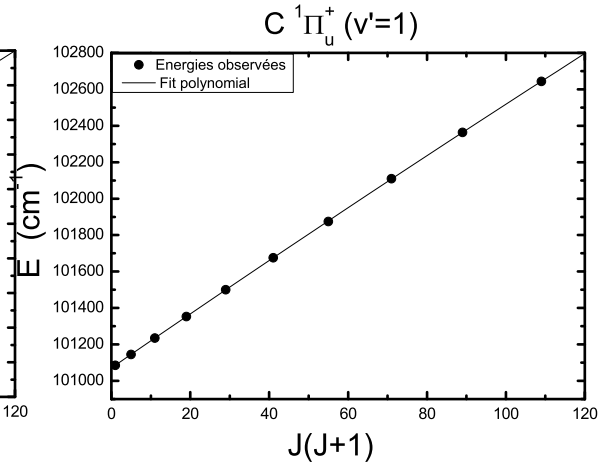


Figure 6.19 – *Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique* $C^1\Pi_u^+(v'=1)$ *en fonction de* $J(J+1)$.

d'onde des raies R et P. Théoriquement il existe 54 niveaux vibrationnels $v'=0-53$ dans cet état. Cependant, dans la région spectrale limitée à notre étude ([780, 1242] Å), nous avons déterminé seulement $v'=10-40$ avec **207** niveaux d'énergie rovibrationnels dont **18** sont nouveaux. Les niveaux vibrationnels $v'>40$ sont déterminés avec moins de précision. Cette précision pourra être améliorée dans les prochaines analyses étendues à de plus grandes longueurs d'onde.

Nous presentons un exemple des différences $o-o'$, $o-c1$ et $o-c2$ en fonction de J dans la Figure 6.24 pour le niveau $v'=10$ et dans la Figure 6.25 pour le niveau $v'=17$.

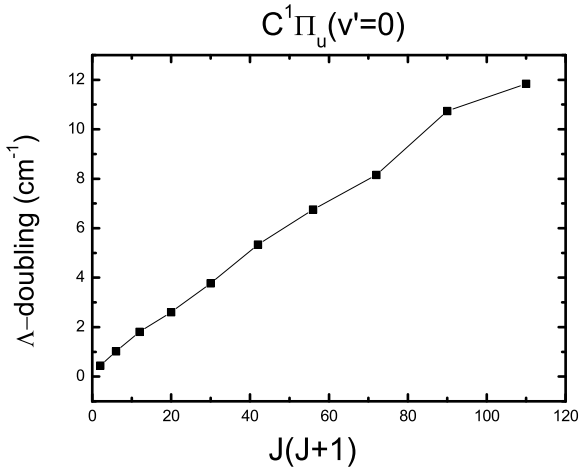


Figure 6.20 – *Λ-doubling observé en fonction de $J(J+1)$ pour $C^1\Pi_u^+(v'=0)$.*

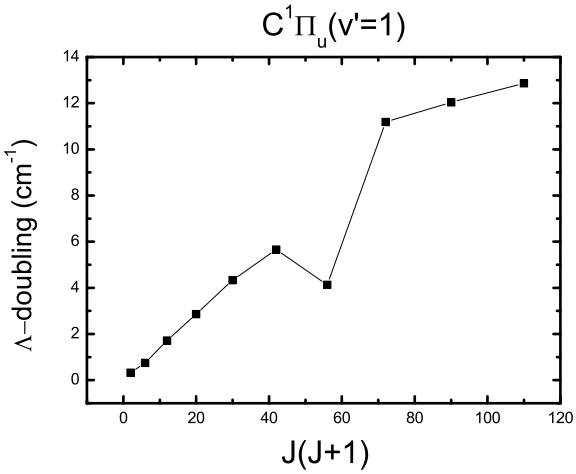


Figure 6.21 – *Λ-doubling observé en fonction de $J(J+1)$ pour $C^1\Pi_u^+(v'=1)$.*

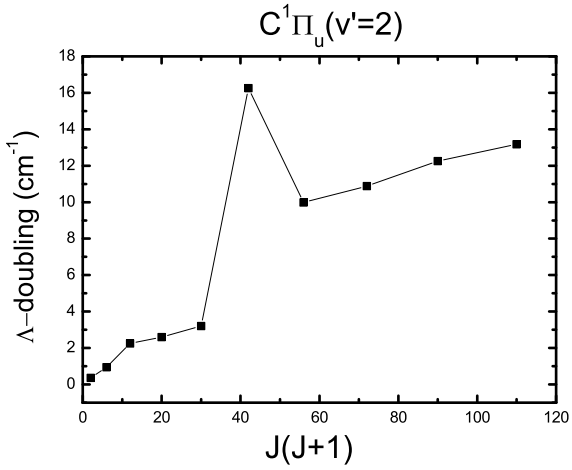


Figure 6.22 – *Λ-doubling observé en fonction de $J(J+1)$ pour $C^1\Pi_u^+(v'=2)$.*

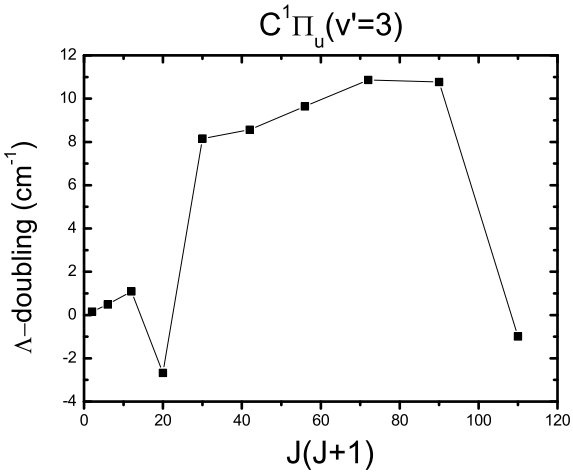


Figure 6.23 – *Λ-doubling observé en fonction de $J(J+1)$ pour $C^1\Pi_u^+(v'=3)$.*

L'accord entre nos valeurs d'énergie expérimentales et les données précédentes de Freund est satisfaisant pour l'ensemble des niveaux, et ne dépasse pas ± 0.70 cm^{-1}. En revanche, nous avons trouvé plusieurs erreurs dans les valeurs des niveaux d'énergie proposées par Freund : $E(v'=15, J'=5)$, $E(v'=27, J'=6)$, $E(v'=28, J'=3)$ et $E(v'=39, J'=4)$, décalées respectivement de 8.23 cm^{-1}, -38.98 cm^{-1}, -24.88 cm^{-1} et -11.15 cm^{-1}. Ces erreurs sont dues aux raisons évoquées dans les paragraphes précédents. Par exemple le niveau d'énergie $E(v'=27, J'=6)$ est déterminé par Freund (85) à partir d'une seule raie R(5) mesurée en absorption par Dabrowski et Herzberg (57). Bien que cette raie se trouve à la même position que celle que nous avons mesurée, nous suposons que ce niveau d'énergie a été mal rapporté dans les tables des énergies dans la référence (85). Ce résultat est confirmé par la valeur du niveau d'énergie obtenue par le calcul semi-empirique.

La différence entre nos énergies expérimentales et nos calculs théoriques ne dépasse pas 1.90

cm^{-1}, alors que les résultats semi-empiriques sont plus proches de nos valeurs expérimentales.

Pour l'analyse des perturbations, nous présentons sur la Figure 6.26 et la Figure 6.27, respectivement, la variation des niveaux d'énergie $v' = 26$ et $v' = 28$ en fonction de $J(J+1)$. Pour ces deux niveaux l'ajustement est fait avec un polynôme d'ordre 3 en $J(J+1)$. Sur la Figure 6.26 nous observons que les niveaux d'énergie rotationnels $J = 5$ et $J = 6$ de $v' = 26$ sont perturbés. Nos calculs théoriques montrent que cette perturbation est due au niveau $v' = 7$ de l'état C^+. Les pourcentages de mélange sont donnés par :

$$57.82\%\ B(v'=26)+42.18\%\ C^+(v'=7) \text{ pour } J=5,$$
$$92.76\%\ B(v'=26)+07.24\%\ C^+(v'=7) \text{ pour } J=6.$$

A partir de ces pourcentages, nous remarquons que le niveau rotationnel $J = 5$ est très perturbé par rapport au niveau rotationnel $J = 6$. Les autres énergies rotationnelles appartenant à ce même niveau vibrationnel, sont faiblement perturbées et ont un caractère dominant de l'état B.
Le résultat d'analyse de perturbation montre aussi que les énergies rotationnelles des niveaux $J = 2$, $J = 3$ et $J = 4$ du niveau vibrationnel $v' = 28$ sont très perturbées par le niveau $v' = 8$ de l'état C^+. Les pourcentages de mélange sont donnés par :

$$95.40\%\ B(v'=28)+04.60\%\ C^+(v'=8) \text{ pour } J=2.$$
$$50.42\%\ B(v'=28)+49.76\%\ C^+(v'=8) \text{ pour } J=3.$$
$$92.30\%\ B(v'=28)+07.70\%\ C^+(v'=8) \text{ pour } J=4.$$

Les interactions mutuelles entre les niveaux d'énergie de l'état C^+ et de l'état B discutées dans le paragraphe 6.2.4 sont aussi observées dans l'analyse de l'état B.

Nous présentons dans la Figure 6.28 la variation de l'intervalle d'énergie vibrationnelle $\Delta G(v+1/2)$ déterminé pour $J = 0$. Nous retrouvons bien la décroissance de cet intervalle d'énergie lorsque le nombre quantique v' augmente. En plus la comparaison avec l'intervalle d'énergie obtenu à partir des énergies expérimentales précédentes (85) est très satisfaisante. D'autre part cette variation montre que les niveaux vibrationnels de $J = 0$ ne sont pas affectés par les perturbations.

6.2.6 Autres considérations sur les perturbations

Diagramme des niveaux d'énergies

Dans les paragraphes précédents, nous avons discuté en détail les niveaux d'énergie appartenant à chacun des états électroniques excités $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $B'^1\Sigma_u^+$ et $D^1\Pi_u$, déterminés à partir de nos spectres d'émission. Les nouvelles valeurs d'énergie ont été comparées aux données expérimentales précédentes (85), aux valeurs de nos calculs théoriques utilisant des données *ab initio* et à celles des calculs semi-empiriques (28). A partir de ces nouvelles données expérimentales, nous avons localisé et étudié les différentes interactions entre ces états électroniques excités.

Bien que ces quatre états électroniques soient tous couplés par des couplages non adiabatiques, nous avons montré que les interactions impliquant les états deux par deux sont les plus importantes. Ainsi l'état D^+ est perturbé essentiellement par l'état B', et l'état électronique C^+ est perturbé essentiellement par l'état électronique B. Par conséquent, nous avons résumé la position des niveaux d'énergie rovibrationnels pour chacun de ces couples d'états sur un diagramme en fonction de $J(J+1)$. La Figure 6.29 représente le diagramme pour le couple $B'^1\Sigma_u^+$ et $D^1\Pi_u^+$, et la Figure 6.30 représente le diagramme pour le couple $B^1\Sigma_u^+$ et $C^1\Pi_u^+$. Les perturbations mises en évidence par

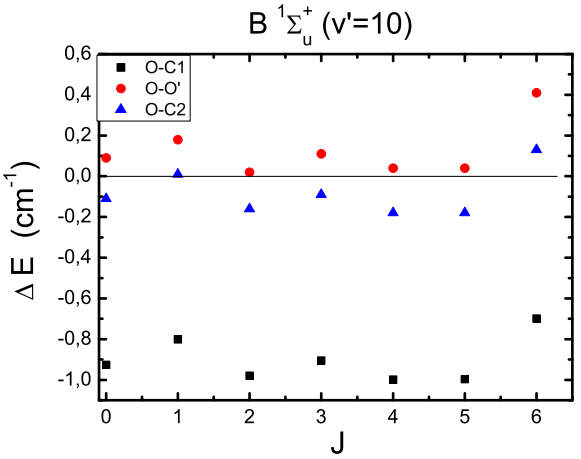


Figure 6.24 – *Différence d'énergie $o-c1$, $o-c2$ et $o-o'$ de l'état électronique $B^1\Sigma_u^+(v'=10)$ en fonction de J*

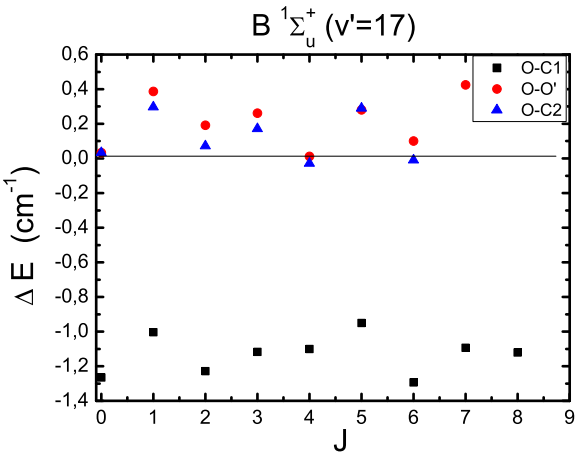


Figure 6.25 – *Différence d'énergie $o-c1$, $o-c2$ et $o-o'$ de l'état électronique $B^1\Sigma_u^+(v'=17)$ en fonction de J*

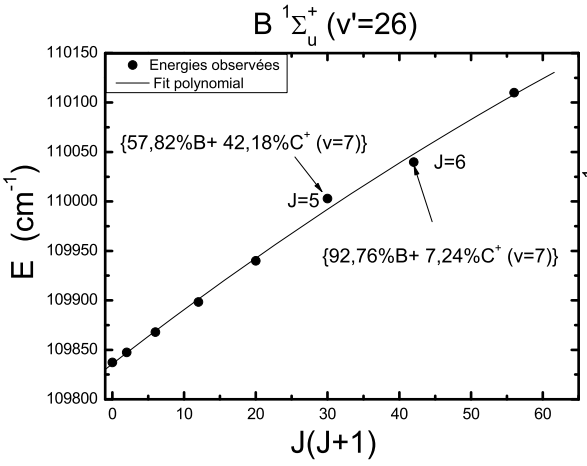


Figure 6.26 – *Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $B^1\Sigma_u^+(v'=26)$ en fonction de J*

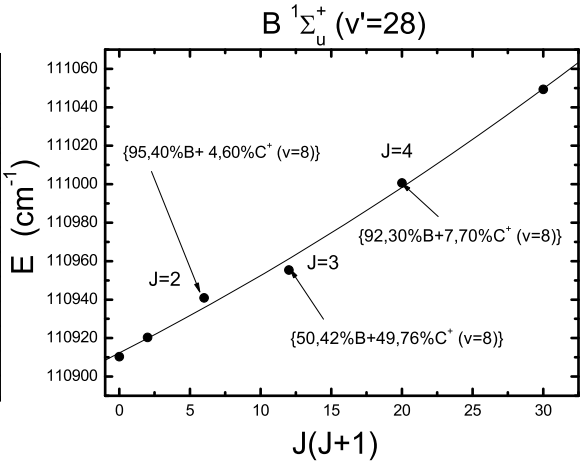


Figure 6.27 – *Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $B^1\Sigma_u^+(v'=28)$ en fonction de J*

les calculs, à travers les mélanges de caractères électroniques, concernent des niveaux vibrationnels proches, de même J, appartenant aux différents états électroniques. Ils sont entourés par des cercles rouges sur les diagrammes.

Sur la Figure 6.29, en plus des cas déjà discutés dans les paragraphes 6.2.2 et 6.2.3, en l'occurence $B'(v'=2)-D^+(v'=0)$ et $B'(v'=7)-D^+(v'=3)$, on peut remarquer d'autres pertubations entre le niveau $B'(v'=3)$ et le niveau $D^+(v'=1)$ pour $J=1..,5$, et le niveau $B'(v'=5)$ avec le niveau $D^+(v'=2)$ pour $J=7$ et 8.

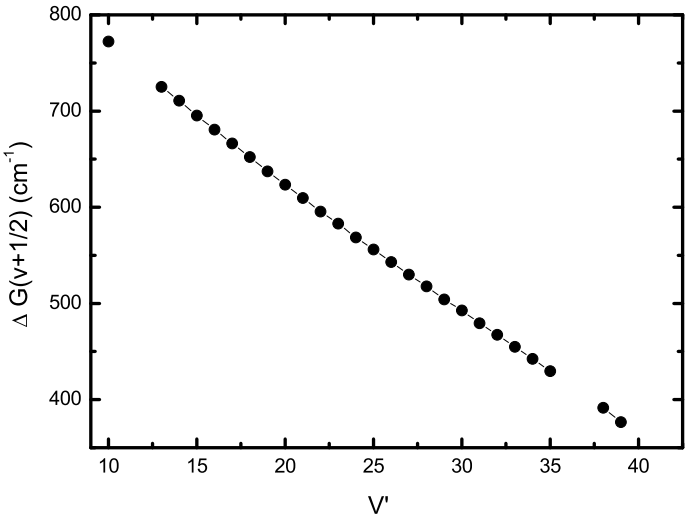


Figure 6.28 – *Variation de l'intervalle d'énergie vibrationnelle* $\Delta G(v+1/2)$ *de l'état* $B^1\Sigma_u^+(J=0)$ *en fonction de* v'

Sur la Figure 6.30, en plus des cas déjà discutés dans les paragraphes 6.2.4 et 6.2.5, en l'occurence $B(v'=12)$ et $C(v'=1)$ pour $J=7$, $B(v'=15)$ et $C(v'=2)$ pour $J=6$, $B(v'=12)$ et $C(v'=1)$ pour $J=4,10$, $B(v'=26)$ et $C(v'=7)$ pour $J=5$, et $B(v'=28)$ et $C(v'=8)$ pour $J=5$, une autre perturbation est localisée entre les niveaux $B(v'=19)$ et $C(v'=4)$ pour $J=2,3,4$.

Il est intéressant de noter sur le diagramme de la Figure 6.30 les interactions faisant intervenir trois niveaux d'énergie, où un seul niveau de l'état C^+ perturbe simultanément deux niveaux de l'état B. Ces cas sont encadrés sur le diagramme par un rectangle bleu. Un exemple est donné par le niveau $C^1\Pi_u^+(v'=5)$ perturbé par les niveaux $B^1\Sigma_u^+(v'=21)$ et $B^1\Sigma_u^+(v'=22)$, pour $J=4$ et 5. Cet exemple a déjà été observé par Hinnen dans son analyse des états B et C (99).

Dans le travail de Hinnen (99), le traitement théorique de la perturbation entre des niveaux vibrationnels proches de même J appartenant aux états B et C consiste à diagonaliser des matrices vibroniques (écrites dans la base des fonctions vibrationnelles pour un J donné) 2×2 ou 3×3, suivant qu'il s'agisse d'étudier deux ou trois niveaux proches. Les éléments non diagonaux de ces matrices sont des couplages effectifs ajustés sur les énergies des niveaux expérimentaux. Cette méthode de diagonalisation de matrice localise et isole les perturbations dans des sous-espaces de dimension limitée par le nombre de niveaux vibrationnels pris en considération. En revanche la méthode des équations couplées que nous avons appliquée est plus générale et tient compte de tous les états vibrationnels y compris les états du continuum de chaque état électronique. Les résultats que nous avons obtenus sont donc plus complets et plus quantitatifs pour ces deux états électroniques.

Toutefois, l'amplitude de la perturbation entre deux niveaux en interaction n'augmente pas systématiquement avec la diminution de leur écart en énergie. Un exemple est donné par les niveaux $B'(v'=3)$ et $D^+(v'=1)$, dont les calculs montrent que l'amplitude des mélanges entre ces deux niveaux augmente lorque J augmente, i.e., lorsque l'écart en énergie augmente (voir les pourcentages de mélange sur la Table 6.1). En fait, comme le montre l'expression de la correction d'énergie

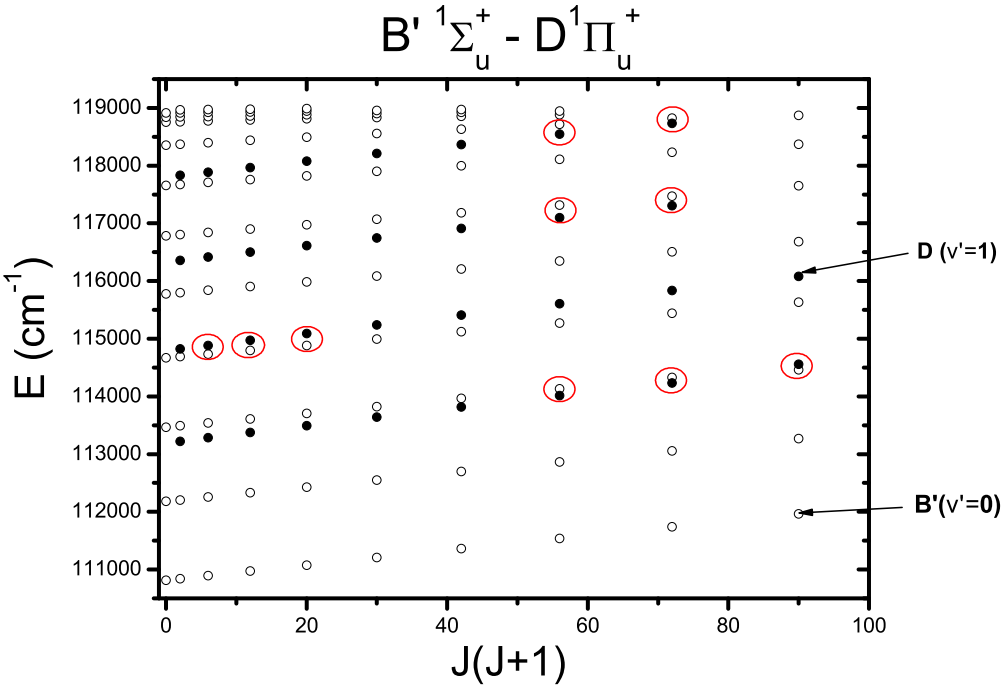


Figure 6.29 – *Diagramme des niveaux d'énergie ro-vibrationnels observés pour les états électroniques $B'^1\Sigma_u^+$ (cercle ouvert) et $D^1\Pi_u^+$ (cercle fermé) en fonction de $J(J+1)$. Les perturbations locales importantes sont entourées par un cercle rouge.*

au second ordre de la théorie des perturbations stationnaires, l'élément de matrice au numérateur intervient également dans l'amplitude de la perturbation, qui est donnée par (100) :

$$\epsilon_2 = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0}. \tag{6.3}$$

où $\hat{W}$ est la petite perturbation apportée à l'énergie du système physique étudié, et φ_n est la fonction d'onde correspondante.
Pour obtenir des résultats quantitatifs sur les perturbations, nous avons besoin de nos calculs théoriques qui fournissent les pourcentages des caractères électroniques pour chaque niveau.

Observation des perturbations à partir des systèmes de bandes

Les interactions entre les différents états électroniques excités devraient se traduire par des effets observables sur les intensités des raies correspondant à des transitions de ces états vers l'état fondamental. En effet, les probabilités de transition calculées $A_{nv'J';Xv''J''}$ entre les niveaux excités (nv', J') et les niveaux d'énergie inférieurs (X, v'', J'') dépendent des pourcentages de caractères électroniques des niveaux excités et permettent de prévoir les anomalies d'intensités à l'intérieur des branches spectroscopiques. A l'intérieur de certaines bandes, les probabilités de transition par branche (R, P ou Q) présentent une variation aléatoire en fonction du nombre quantique J''. L'analyse des résultats nous a permis de montrer que ces branches sont formées à partir des niveaux

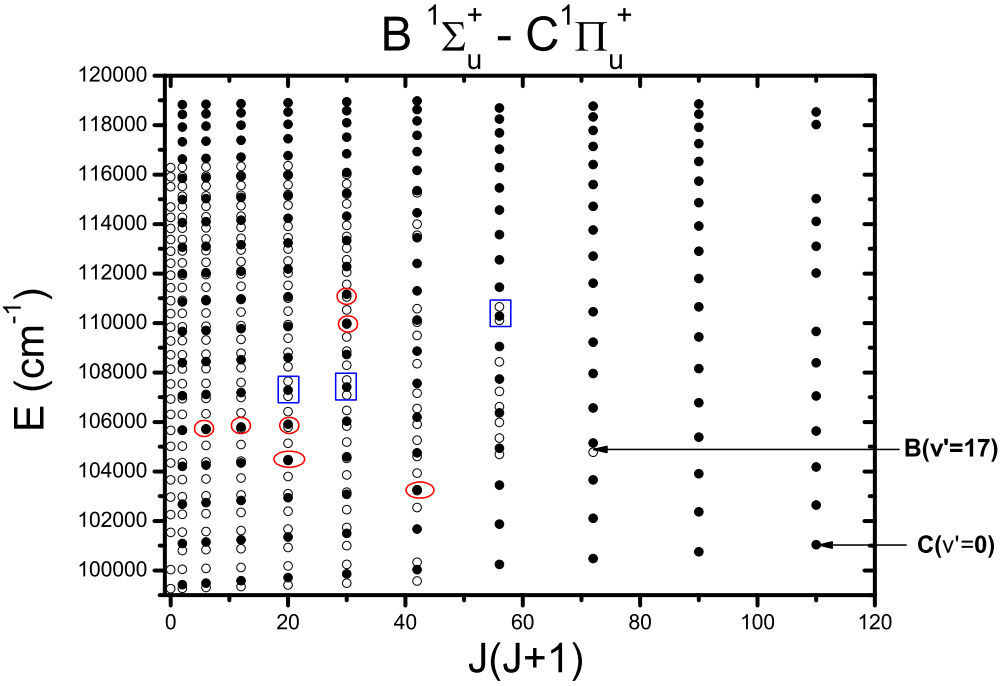


Figure 6.30 – *Diagramme des niveaux d'énergie ro-vibrationnels observés pour les états électroniques $B^1\Sigma_u^+$ (cercle ouvert) et $C^1\Pi_u^+$ (cercle fermé) en fonction de $J(J+1)$. Les perturbations locales importantes sont entourées par un cercle rouge.*

d'énergie perturbés.

La Figure 6.31 présente les probabilités de transition en fonction de J'' des branche R et P de deux bandes $D^1\Pi_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(0-0)$ avec $B'^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(2-0)$ dont les états supérieurs sont en interaction. La Figure 6.32 présente les données similaires pour les bandes $C^1\Pi_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(7-4)$ et $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(26-4)$.

Sur la Figure 6.31 nous remarquons que les probabilités de transition de la branche R pour les deux bandes ($\mathrm{R}^{B'}$ et R^{D}) varient de manière corrélée en sens inverse, d'une part, et présentent la même variation brusque mais de signe contraire entre $J''=7$ et $J''=8$, d'autre part. Les raies $\mathrm{R}(J''=7)$ et $\mathrm{R}(J''=8)$ correspondent bien aux transitions à partir des niveaux rotationnels $J'=8$ et 9 des deux niveaux $D(v'=0)$ et $B'(v'=2)$, déjà montrés comme très perturbés. Le même comportement se manifeste pour la branche P entre $J''=9$ et 10. Cet échange d'intensité entre deux bandes est une conséquence directe des mélanges de fonctions d'onde rovibrationnelles de caractères électroniques différents des niveaux perturbés (voir équation 2.5 du chapitre I).

Les mêmes variations en amplitude des probabilités de transition sont prévues dans la Figure 6.32 pour les bandes $B-X(26-4)$ et $C^+-X(7-4)$ entre $J''=4$ et 5 pour les branches R et entre $J''=6$ et 7 pour les branches P, correspondant ainsi à la perturbation des niveaux rotationnels $J'=5$ et 6.

J	$\rho(B')$	$\rho(D)$
1	99.12 %	0.80 %
2	98.10 %	1.90 %
3	97.10 %	2.90 %
4	95.50 %	3.50 %
5	96.20 %	3.80 %
6	96.20 %	3.80 %
7	96.20 %	3.80 %

Table 6.1 – *Variation du pourcentage de mélange en fonction de J pour les niveaux d'énergie $B'(v'=3)$ et $D(v'=1)$*

Sur le plan expérimental, pour le moment nous disposons des intensités des raies obtenues à partir des spectres sur plaques photographiques, qui sont estimées à partir du degré de transparence de la plaque pour chaque raie. Etant donnée la réponse non linéaire des plaques photographiques, ces valeurs ne sont pas suffisamment satisfaisantes pour mettre en évidence les perturbations d'intensité de manière quantitative. Comme nous le décrirons dans le paragraphe suivant, de nouveaux spectres de D_2 peuvent maintenant être enregistrés sur écran phosphore photostimulable qui possède une réponse linéaire en intensité avec une grande dynamique. Une comparaison quantitative des probabilités de transition prévues avec les intensités expérimentales pourra être ainsi réalisée dans le futur.

En attendant, nos probabilités de transition calculées peuvent néanmoins être considérées comme suffisamment fiables pour permettre une étude des perturbations. En effet, dans le paragraphe 2.3 du chapitre I, nous avons déjà montré, pour la molécule H_2, le bon accord entre nos probabilités de transition de bandes calculées pour les bandes $D'-X$ et $D''-X$ et les résultats expérimentaux de Glass et al (49).

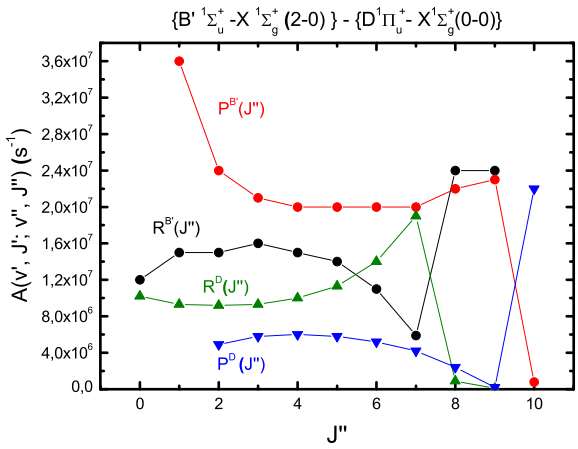


Figure 6.31 – *Mise en évidence des perturbations entre deux bandes à partir de la variation de la probabilité de transition en fonction de J"*

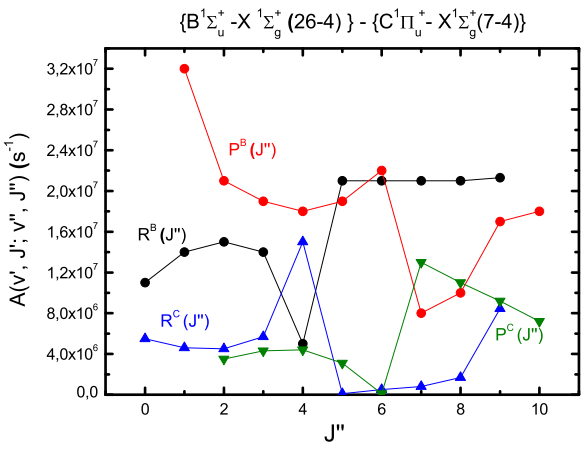


Figure 6.32 – *Mise en évidence des perturbations entre deux bandes à partir de la variation de la probabilité de transition en fonction de J"*

6.3 Mesures d'intensité

Nous présentons ici les premières mesures d'intensité de raies obtenues en utilisant les écrans phosphore photostimulables. Comme nous les avons décrits dans la partie III ces écrans ont une réponse linéaire en intensité lumineuse sur environ cinq ordres de grandeur (64; 62) tandis que celle des plaques photographiques n'est linéaire que sur un domaine limité et sont très vite saturées.

Le spectre de la molécule D_2 a été enregistré dans l'intervalle spectral 840-900 Å sur un écran phosphore. La lecture de l'écran a été effectuée à l'aide d'un scanner du type FLA 7000 caractérisé par une résolution de 25 μm. On obtient d'abord une image numérisée du spectre, d'aspect semblable à celle du spectre sur plaque photographique enregistré dans le même intervalle spectral, ce qui permet de retrouver les raies déjà identifiées dans le spectre sur plaque photographique (voir la Figure 6.33). Le profil de variation d'intensité en fonction de la longueur d'onde est obtenu en utilisant un logiciel qui intègre le niveau de réponse des pixels verticalement sur la hauteur du spectre numérisé. Ce profil peut être comparé à un densitogramme donnant la transmission de la plaque photographique dans le même intervalle spectral. La Figure 6.34 montre une telle comparaison dans l'intervalle 892 - 898 Å qui contient des raies appartenant essentiellement aux systèmes de bandes $B' - X$ et $D - X$

L'ensemble des raies identifiées sur les plaques photographiques a été retrouvé sur l'écran phosphore photostimulable. Ce résultat est en lui même très intéressant, car cela nous rassure sur la sensibilité des écrans phosphore photostimulables dans cette région spectrale VUV. En effet, à l'origine, ils sont surtout utilisés pour des rayonnements ionisants (R-X ou autres).

Sur le densitogramme de la Figure 6.34 (a), on observe un bruit de fond inhomogène, difficile à extraire sur tout le domaine de longueurs d'onde. Ajoutons à cela que, les intensités de ces raies sont complètement saturées. Par conséquent, aucune information quantitative ne peut être extraite à partir de ces intensités. En revanche, ce problème de saturation ne se présente pas sur le spectre enregistré sur l'écran phosphore (Figure 6.34 (b)). Les différentes raies observées possèdent des amplitudes en intensité différentes.

L'intensité d'une raie d'émission est proportionnelle à la probabilité de transition correspondante et à la population du niveau supérieur. Cette population est proportionnelle au poids statistique du niveau, lequel contient le facteur $(2J + 1)$ mais aussi le facteur $(2I + 1)$ où I est le spin nucléaire total de la molécule.

Dans le cas d'une molécule homonucléaire comme D_2, les propriétés de symétrie de la fonction d'onde totale déterminent les valeurs de J permises pour une valeur de I donnée. En effet la molécule D_2 possède deux noyaux identiques, des bosons de spin $i = 1$, formant un spin nucléaire total I = 0, 1 et 2, avec un poids statistique $(2I + 1)$ égale à 1, 3 et 5 . La fonction d'onde totale doit être symétrique par rapport à un échange des deux noyaux qui sont des bosons et ceci impose que J soit pair pour les états de I pair, tandis que J soit impair pour les états de I impair (10). Ainsi le poids statistique total dû au spin nucléaire est de (5+1)=6 pour les valeur I=0 et 2, et de 3 pour I=1. Autrement dit, les intensités des raies sont modulées par le rapport 2 :1 au sein de chaque bande moléculaire.

En effet cette alternance en intensité est observées pour la bande $D - X(1 - 1)$ du diagramme (b) dans lequel les raies de J'' pair sont deux fois plus intenses que les raies de J'' impair. Comme exemple on observe que l'intensité de la raie Q(5) est deux fois plus faible que celle des raies Q(4) et Q(2). Il est cependant difficile d'observer directement cette alternance en intensité pour les branches

R(J'') et P(J'') du moment qu'elles sont mélangées dans cette bande. Cependant, nous nous sommes proposés de déterminer les profils des raies mélangées afin de les séparer, et obtenir leurs caractéristiques, à savoir l'intensité et la longueur d'onde. Pour cela nous avons ajusté ces raies par un profil de Voigt en utilisant le logiciel Origine 7.0. Le fichier de sortie de ce programme contient essentiellement la position de la raie en pixel (1 pixel = 25 μm ce qui correspond à 6.25 m Å en longueur d'onde), la valeur maximale du pic de la raie, la largueur à mi hauteur. Le choix de la fonction de Voigt, qui est le produit de convolution d'une fonction gaussienne et d'une fonction lorentzienne, est lié aux conditions expérimentales du gaz moléculaire dans la source. Dans notre source, décharge de Penning, les raies sont élargies par effet Doppler et par élargissement collisionnel.

Dans la Figure 6.35 nous présentons un exemple sur le résultat de l'analyse des raies mélangées R(0) et R(1) de la bande $D-X(1-1)$ ainsi que la raie isolée Q(2) de la bande $D-X(3-2)$. On signale que les deux raies R(0) et R(1) sont mélangées dans le spectre enregistré sur l'écran phosphore alors qu'elle ne le sont pas sur la plaque photographique. Ceci est lié à la résolution du lecteur FLA7000 qui est inférieure à celle du spectrographe de 10 mètres (voir la Table E.1 du chapitre E). Les raies interpolées par la fonction de Voigt possédent une largeur à mi-hauteur pratiquement égale . Par consequent, l'intensité des raies, définie comme étant l'aire sous la courbe, est donnée simplement par la hauteur maximale de chaque pic de raie. Ainsi les intensités mesurées des raies R(0), R(1) et R(2) de la bande $D-X(1-1)$ sont données réspectivement par 2.34, 1.39 et 2.72. De ce résultat on trouve bien l'alternance en intensité entre les valeurs de J'' pairs et impairs. La même procédure d'ajustement de profil a été utilisée pour un grand nombres de raies mélangées.

Rapports de branchement

Étant donné que l'équilibre thermodynamique n'est pas établi dans notre source, il est difficile pour nous de faire un spectre synthétique et de le comparer aux résultats experimentaux afin d'obtenir des informations sur la densité du milieu et sur la qualité de nos calculs de probabilités de transition. Cependant, nous pouvons à partir des intensités des raies R($J'-1$), P($J'+1$) tirer profit et voir la qualité de nos prévisions théorique sur les probabilités de transition. Or pour un même niveau d'énergie, le nombre de molécules occupant le niveau et le poids statistique sont les mêmes. Donc nous pouvons déterminer à partir d'un même niveau supérieur, le rapport de probabilités de transition T^{the} et le rapport correspondant en intensité expérimentale T^{exp}. Ce rapport, dit rapport de branchement, est donné par la formule suivante :

$$T = \frac{I(R(J'-1))}{I(P(J'+1))} \propto \frac{A(R(J'-1))}{A(P(J'+1))}. \tag{6.4}$$

Vue la densité des raies dans nos spectres d'émission, le rapport T^{exp} doit être déterminé pour des raies R($J'-1$), P($J'+1$) isolées, non mélangées, et appartenant à la même bande, ie, issue du même niveau supérieur. Dans la Table 6.2 on donne les probabilités de transition calculées et les intensités pour les raies R(2) et P(4) de la bande $D-X(1-1)$ et pour les raies R(0) et P(2) de la bande $B'-X(3-1)$. Dans la Table 6.3 on donne le résultat de calcul des rapports T^{exp} et T^{the} pour ces bandes. A partir de cette table on trouve un bon accord entre les deux rapports, expérimental et théorique.

Estimation de la température de la source

Le profil des raies moléculaires enregistrées sur l'écran phosphore peut être utilisé dans la détermination des caractéristiques du plasma généré dans notre source à décharge. Les ajustements des profils des raies mélangées et des raies isolées par une fonction de Voigt montrent que la composante

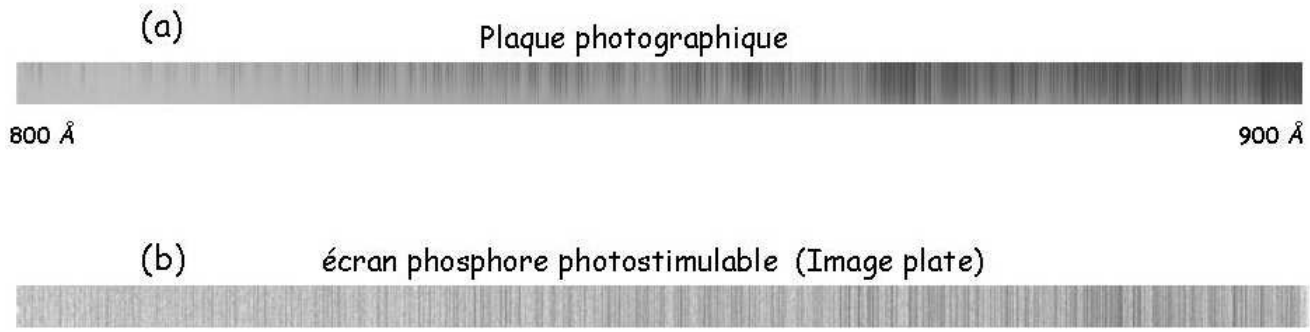


Figure 6.33 – *(a) Photo du spectre de la molécule D_2 enregistré sur une plaque photographique dans la région spectrale 840-900 Å. (b) Photo du spectre de la molécule D_2 enregistré sur l'écran phosphore dans la même region spectrale.*

	$D-X(1-1)$		$B'-X(3-1)$	
raies	R(2)	P(4)	R(0)	P(2)
I^{exp} (arbitrary units)	2.72	4.44	2.00	2.50
A^{theo} ($\times 10^7$)	2.70	4.40	2.11	2.40

Table 6.2 – *Intensités et probabilités de transition des raies appartenant aux bandes $D-X(1-1)$ et $B'-X(3-1)$.*

Gaussienne est plus importante que la composante Lorentzienne. De plus la largeur à mi-hauteur (FWHM) de l'ensemble des raies isolées est pratiquement la même, elle est de l'ordre de $\Delta_T \approx 0.018$ Å. Cette largeur à mi-hauteur est une convolution de la largeur instrumentale Δ_I, de la largeur Doppler Δ_D et de la largeur homogène (pression + naturelle) Δ_P. Étant donné que la source fonctionne sous faible pression, la largeur de raie causée par les collisions (pression) peut être négligée. Ainsi seul l'élargissement Doppler et l'élargissement instrumental sont importants. La connaissanse de la largeur instrumentale causée par la fente du spectrographe et par le lecteur laser FLA 7000, nous permettra de remonter à la valeur de l'élargissement Doppler selon la formule suivante :

$$\Delta_D^2 = \Delta_T^2 - \Delta_I^2 \tag{6.5}$$

avec :

$$\Delta_I^2 = \Delta_L^2 + \Delta_F^2 \tag{6.6}$$

où Δ_L et Δ_F sont respectivement les largeurs dues au lecteur laser et à la fente . Sachant que la largeur instrumentale est de 0.008 Å pour une fente de largeur 30 μm, et que, en première approximation, la largeur instrumentale du lecteur est égale à la résolution du système qui est de 25 μm sur l'écran phosphore (0.006 Å), la limite supérieure de la largeur instrumentale totale est de $\approx$ 0.010 Å. Par conséquent, à partir de l'équation 6.5 la largeur Doppler est de $\approx$ 0.015 Å.
A partir de la largeur Doppler nous pouvons donner une estimation de la température cinétique du gaz moléculaire dans le plasma de la source. En supposant une distribution Maxwellienne pour la vitesse des molécules, la relation entre la largeur Doppler et la température est donnée par :

$$\Delta_D = \lambda_0 \times 7.16 \times 10^{-7}\sqrt{T/M} \tag{6.7}$$

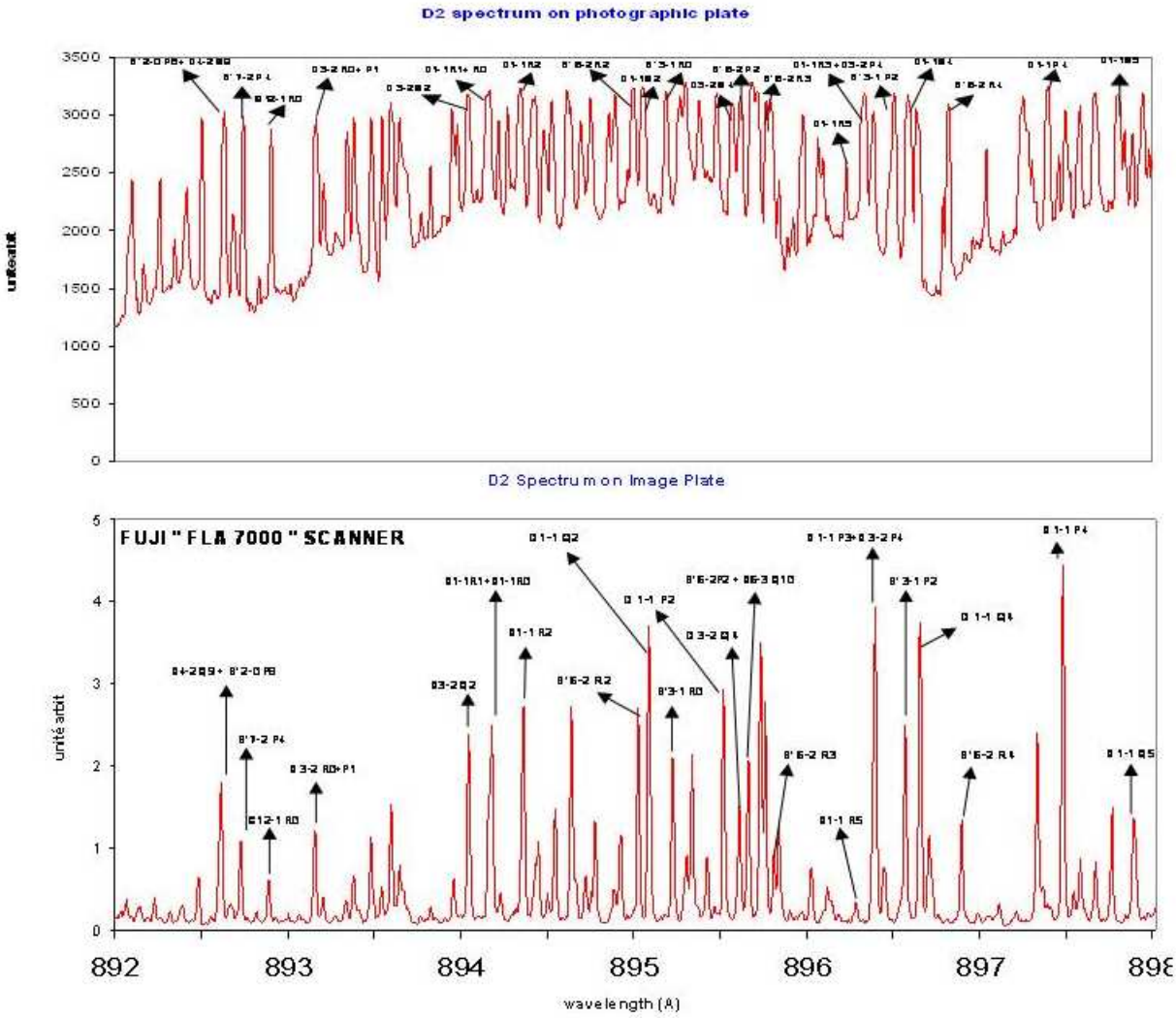
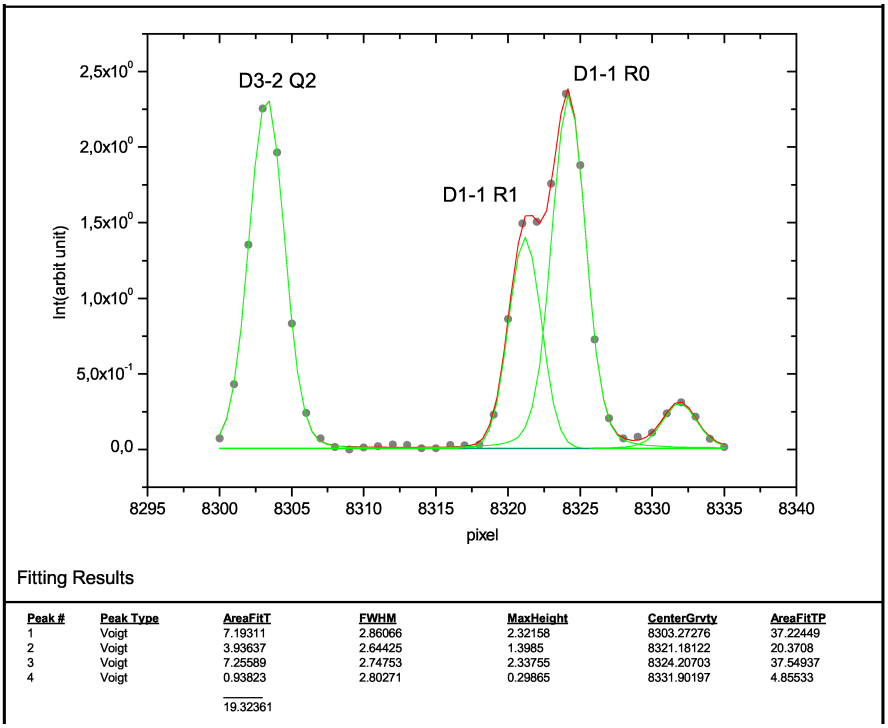


Figure 6.34 – *Les intensité des raies moléculaire de D_2 identifiées sur le détecteur écran phosphore photostimulable et sur une plaque photo Kodak SWR.*

où T est la température cinétique (K), M est la masse de la molécule en unité de masse atomique (ici M=4), et λ_0 est la longueur d'onde de la raie.
Ainsi pour une raie de longueur d'onde appartenant à la gamme spectrale [840 - 900 Å], nous avons trouvé que la borne inférieure de la température cinétique du gaz est de l'ordre de 2500 K.



Peak #	Peak Type	AreaFitT	FWHM	MaxHeight	CenterGrvty	AreaFitTP
1	Voigt	7.19311	2.86066	2.32158	8303.27276	37.22449
2	Voigt	3.93637	2.64425	1.3985	8321.18122	20.3708
3	Voigt	7.25589	2.74753	2.33755	8324.20703	37.54937
4	Voigt	0.93823	2.80271	0.29865	8331.90197	4.85533
		19.32361				

Figure 6.35 – *Détermination des intensités des raies mélangées à partir de leurs profils. 1 pixel = 25 μm sur la plaque, ce qui correspond à 6.25 m Å en longueur d'onde.*

		T^{exp}	T^{theo}
J'=3	$D - X(v' = 1 - v'' = 1)$	0.61	0.61
J'=1	$B' - X(v' = 3 - v'' = 1)$	0.80	0.78

Table 6.3 – *Comparaison entres les deux rapports T^{exp} et T^{theo} pour les deux bandes choisies.*

Troisième partie

SPECTROSCOPIE LASER XUV À TRÈS HAUTE RÉSOLUTION

Chapitre 7

La spectroscopie laser

7.1 Introduction

Dans la partie expérimentale précédente (Chapitre III), nous avons décrit l'utilisation du spectrographe VUV de 10 m pour enregistrer le spectre d'émission des molécules D_2 et HD dans le domaine de longueurs d'onde de 780 à 1700 Å. L'avantage de l'instrument est qu'il permet d'enregistrer en une seule exposition un intervalle spectral de 240 Å contenant un grand nombre de raies. La calibration relative des longueurs d'onde se fait à l'aide de références choisies parmi les raies atomiques d'un spectre de comparaison juxtaposé au spectre étudié ou parmi les raies d'impuretés présentes dans cet intervalle du spectre moléculaire. Cependant, dans l'ultraviolet du vide, les longueurs d'onde de référence sont généralement connues avec une précision de l'ordre de $\Delta\lambda/\lambda = 5 \times 10^{-7}$ ce qui limite la précision de nos mesures à $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-6}$.
Afin d'améliorer cette précision et de corriger tout décalage systématique, nous avons soumis un projet européen ACCESS pour accéder aux installations du centre laser XUV d'Amsterdam LCVU (Laser Center Vrije Universiteit) de manière à effectuer des mesures de haute précision par spectroscopie laser.
Le LCVU, dirigé par le Professeur Wim Ubachs, possède un dispositif laser de pointe permettant de mesurer des longueurs d'onde dans l'ultraviolet lointain en atteignant une précision de $\Delta\lambda/\lambda = 5 \times 10^{-8}$. De nombreuses mesures ont été précédemment effectuées dans ce laboratoire pour la molécule H_2 et ses isotopes dans le domaine de longueurs d'onde 870-980 Å(66; 67; 68; 69; 70). Nous avons entrepris les mesures pour un nombre limité de raies de D_2 et de HD dans l'intervalle 999-1040 Å. Les longueurs d'onde ainsi mesurées seront utilisées comme de nouvelles références pour les spectres d'émission enregistrés sur le spectrographe de 10 m. Bien que la liste de raies de référence disponibles soit limitée par le domaine de l'accordabilité en longueur d'onde du laser, il est possible de la compléter par des références de Ritz calculées à partir des énergies déterminées par ces mesures laser. L'ensemble des mesures de haute précision obtenues au LCVU constitue une base de données de longueurs d'onde de référence pour le domaine de l'ultraviolet du vide qui sera un outil précieux pour l'astrophysique (71) et la physique des plasmas.

7.2 Principe de l'expérience

Un laser à colorant en anneau, accordable en fréquence, délivre un faisceau visible de fréquence ω_0 et de largeur à mi-hauteur (FWHM) 1 MHz. Il est amplifié par un amplificateur à colorant pulsé (PDA), avant d'être doublé en fréquence par génération de la deuxième harmonique à travers un cristal KD*P, donnant ainsi un rayonnement UV de fréquence $\omega_{uv} = 2 \times \omega_0$. La fréquence du faisceau UV est ensuite triplée par génération de la troisième harmonique dans du xénon. On obtient alors un rayonnement XUV de fréquence $\omega_{xuv} = 6 \times \omega_0 = 3 \times \omega_{uv}$. Les deux faisceaux ainsi créés interagissent avec un faisceau moléculaire de HD ou D_2. Durant cette interaction la molécule est photoionisée par absorption de deux photons 1 XUV + 1 UV (voir la Figure 7.1).
Le premier photon XUV est résonnant pour la transition électronique moléculaire entre le niveau fondamental et le niveau excité étudié. L'absorption correspondante est détectée par l'intermédiaire de l'ion produit par l'absorption du deuxième photon UV dans un dispositif à temps de vol (TOF).

Le laser visible est balayé en longueur d'onde, ce qui entraîne le balayage en longueur d'onde des rayonnements XUV et UV. La calibration en fréquence de la raie d'absorption est obtenue en utilisant les composantes hyperfines de la molécule d'iode I_2, qui sont connues avec une très grande précision dans le visible. Ces composantes hyperfines sont mesurées par spectroscopie d'absorption saturée (qui permet de s"affranchir de l'élargissement Doppler) en utilisant une partie du faisceau laser initial. En plus des positions des raies hyperfines de I_2, un étalonnage est nécessaire pour faire une calibration relative (interpolation, à l'aide de franges d'interférence fournies par un étalon Fabry-Perot (FP) éclairé par une autre partie du faisceau laser initial. Le spectre d'ionisation, les franges d'interférences et les raies de calibration de I_2 sont enregistrés simultanément. Dans la Figure 7.2 on donne un exemple d'enregistrement des trois signaux. Un schéma des différentes parties du dispositif expérimental est présenté dans la Figure 7.3.

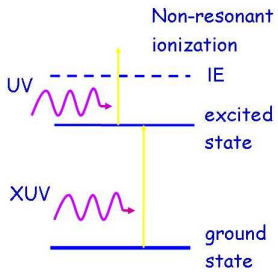


Figure 7.1 – *Schéma d'ionisation à deux photons (1XUV+1UV).*

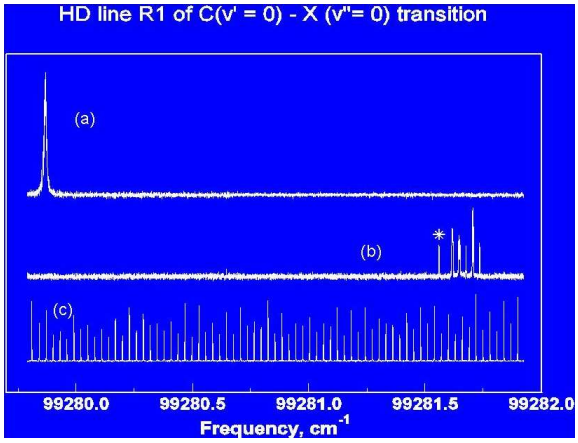


Figure 7.2 – *(a) : Spectre d'ionisation 1 XUV +1 UV, (b) : Enregistrement simultané du spectre d'absorption saturée de la molécule I_2. La raie marquée par un astérix est la composante hyperfine "t" de la raie P(52) de la bande B-X(11-2) de I_2 à 16546.92662 cm^{-1}. (c) : L'enregistrement simultané des franges de l'étalonnage.*

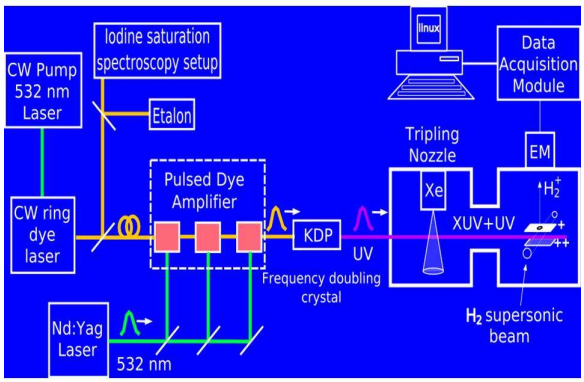


Figure 7.3 – *Schéma des différentes parties du laser XVU du centre laser LCVU d'Amsterdam .*

7.3 Description du dispositif expérimental

7.3.1 Le laser visible

Cavité laser continu (CW)

Le laser que nous avons utilisé au laboratoire LCVU, est un laser à colorant en anneau du type 380 D Spectra Physics. Il se compose principalement de quatre miroirs M1, M2, M3 et M4, un filtre biréfringent et de deux étalons (Figure 7.4) Fabry-Perot qui servent à sélectionner la fréquence d'oscillation. Une photo de la cavité laser est présentée sur la Figure 7.5. Un laser de pompe Nd :YVO_4 Spectra Physics Millennia de 5 W, est focalisé à l'aide du miroir M0 (pump mirror), dans un jet de colorant (milieu amplificateur). En régime continu, le gain est égal aux pertes. Ainsi, plus les pertes dans la cavité seront faibles plus la puissance de sortie sera importante. Ces pertes sont de deux sortes : celles dues aux éléments optiques (miroirs, filtre, étalons) sont considérées comme constantes, et celles dues aux modes géométriques transverses (TEM_{mn}) du faisceau laser dépendent de l'alignement de la cavité.
Au cours de l'expérience, un éventuel décrochage de mode peut se produire. Ce décrochage est essentiellement dû au désalignement du laser, aux vibrations mécaniques et à l'échauffement thermique du colorant, et peut être contrôlé par un système d'asservissement comprenant deux interféromètres de Fabry-Perot externes et un système électronique.

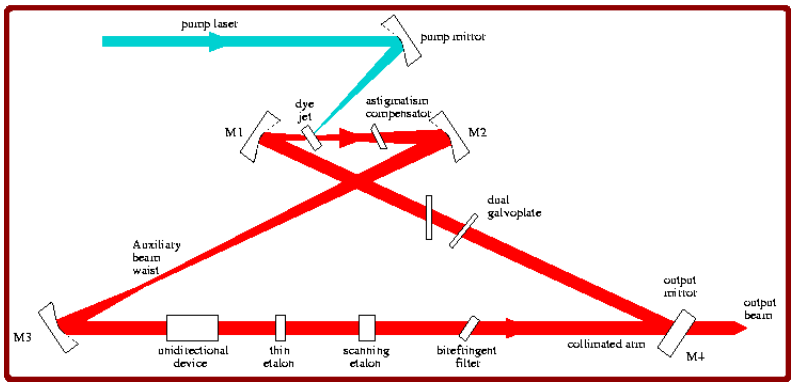


Figure 7.4 – *Différentes composantes du laser à colorant en anneau.*

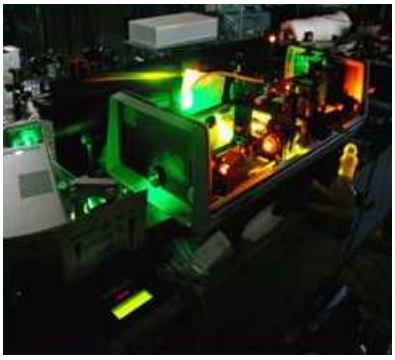


Figure 7.5 – *Photo du laser à colorant en anneau 380 D Spectra Physics de LCVU.*

Le choix du colorant (Dye)

Dans notre expérience, le milieu amplificateur est un colorant rendu fluorescent dans le visible par un pompage optique. Un colorant est une substance chimique composée de molécules complexes. Chaque colorant est caractérisé par un spectre de fluorescence sur une plage de longueurs d'onde. Le domaine de longueurs d'onde que nous avons étudié s'étale de 999Å à 1040Å, ce qui correspond dans le visible à une gamme de 5994 - 6140 Å. Le colorant qui est susceptible d'émettre de la lumière dans cette région de longueurs d'onde est la Rhodamine B. En effet, ce colorant, de formule chimique $C_{28}H_{31}N_2O_3Cl$ (voir la Figure 7.6), présente un maximum de fluorescence dans une zone variant de 5500 à 6000 Å(voir la Figure 7.7).

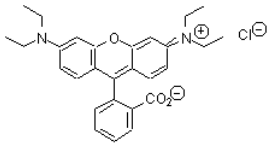


Figure 7.6 – *Formule chimique du colorant Rhodamine B.*

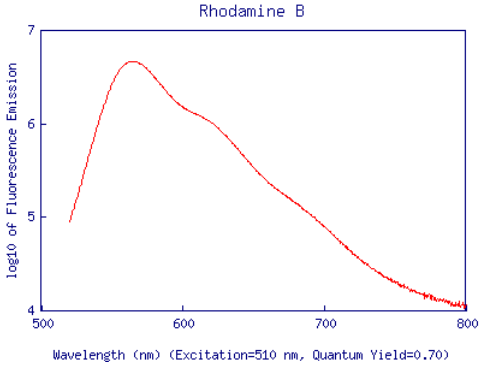


Figure 7.7 – *Spectre de fluorescence (visible) du colorant Rhodamine B.*

7.3.2 L'amplificateur à colorant pulsé (Pulsed Dye Amplifier)

Le faisceau de sortie délivré par le laser continu (CW) est caractérisé par une puissance d'enivron 300 mW. Cette puissance n'est pas constante dans toute la gamme de longueurs d'onde étudiées. Elle dépend essentiellement de l'intensité de la fluorescence du colorant (voir Figure 7.7). Pour augmenter cette puissance, le faisceau est transporté par une fibre optique vers un amplificateur. Néanmoins, en arrivant dans l'amplificateur, le faisceau laser a perdu environ 70% de son énergie initiale.

Dans notre cas l'amplificateur est composé de trois étages, correspondant à trois cellules successives de colorant C1, C2 et C3 positionnées sur le trajet du faisceau.

Le choix du colorant pour l'amplification dépend de l'intensité de fluorescence qui doit être maximale dans la gamme spectrale de la Rhodamine B. Dans la gamme spectrale 999-1040 Å nous avons utilisé la Rhodamine 101, alors que pour la gamme spectrale variant de 1020 à 1040 Å, nous avons utilisé la Sulforhodamine 101 diluée dans une substance composée de 40 % d'eau (H_2O) et de 60 % de méthanol (MeOH) .
La concentration du colorant est différente dans les trois cellules. En effet, la concentration du colorant est faible dans les cellules C2 et C3 comparativement à celle de la cellule C1. L'objectif est de réduire l'émission spontanée des molécules du colorant dans C2 et C3. L'inversion de population dans ces trois cellules est assurée par pompage optique à l'aide d'un laser Nd :YAG pulsé (Physics Spectra GCR-5, avec une fréquence de 10Hz) de longueur d'onde 5320 Å. À la sortie de l'amplificateur (PDA) la mesure de l'énergie de l'impulsion laser amplifiée donne une valeur variant entre 100 et 160 mJ selon la longueur d'onde choisie.

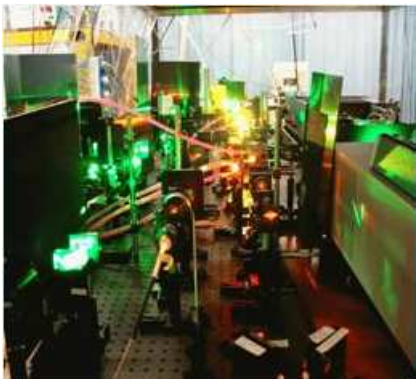


Figure 7.8 – *Photo de l'amplificateur à colorant pulsé (PDA) de LCVU.*

7.3.3 Génération d'harmoniques

Le but de cette partie est de créer à partir du faisceau amplifié, de fréquence ω_0 dans le visible, un autre faisceau lumineux de longueur d'onde XUV. Pour cela, il faut multiplier la fréquence initiale par un facteur 6. Cette étape n'est possible que si on utilise un milieu dont la réponse est non linéaire face à une onde électromagnétique.

Bref rappel du principe

Quand une onde électromagnétique traverse un milieu matériel, elle crée une polarisation $\vec{P}$ (moment dipolaire électrique par unité de volume). Pour une onde à faible intensité, cette polarisation est proportionnelle à l'amplitude du champ électrique de l'onde via la susceptibilité d'ordre 1 $\chi^{(1)}$. On parle dans ce cas d'une réponse linéaire du milieu. Cependant, pour une onde ayant une grande intensité, tel le cas d'un faisceau laser, la réponse du milieu devient non linéaire.
La polarisation créée par l'onde lumineuse peut s'écrire comme un développement du champ électrique incident **E**, sous la forme :

$$\vec{P} = \vec{P}^{(1)} + \vec{P}^{(2)} + \vec{P}^{(3)} + ..., \tag{7.1}$$

où $\vec{P}^{(i)}$ est la polarisation d'ordre i en puissances de l'amplitude du champ électrique. Plus précisément, on peut montrer que pour i ondes incidentes de fréquences $\omega_1, ..., \omega_i$ dont on note les amplitudes $\vec{E}(\omega_i)$, la polarisation suivante est créée :

$$\vec{P}^{(i)}(\omega_1 + ... + \omega_i) = \epsilon_0 \chi^{(i)}(\omega_1, ..., \omega_i)\vec{E}(\omega_1)...\vec{E}(\omega_i) \tag{7.2}$$

où ϵ_0 est la constante diélectrique, et $\chi^{(i)}(\omega_1, ..., \omega_i)$ est le tenseur de susceptibilité électrique d'ordre i qui dépend du matériau utilisé. Cette dernière expression montre que l'onde sortante créée a une fréquence différente des ondes incidentes. Pour un milieu matériel isotrope, les termes d'ordre pair dans l'équation 7.1 s'annulent pour des raisons de symétries.
Chaque type de matériau présente des susceptibilités électriques différentes. Ils donnent donc des effets non-linéaires de différents ordres :

*Au premier ordre : seul le premier terme de la polarisation intervient : $\vec{P}^{(1)}(\omega) = \epsilon_0 \chi^{(1)}(\omega)\vec{E}(\omega)$. Il s'agit de l'optique linéaire classique où la fréquence de l'onde créée est forcément égale à celle de l'onde initiale. Les effets observés concernent la réfraction des ondes et la biréfringence.

*Au second ordre : La polarisation est donnée par $\vec{P}^{(2)}(\omega_1 + \omega_2) = \epsilon_0 \chi^{(2)}(\omega_1, \omega_2)\vec{E}(\omega_1)\vec{E}(\omega_2)$. Elle donne lieu à la génération de fréquence $\omega_g = \omega_1 + \omega_2$, et la génération de la seconde harmonique si $\omega_1 = \omega_2$.

*Au troisième ordre : La polarisation est $\vec{P}^{(3)}(\omega_1+\omega_2+\omega_3) = \epsilon_0 \chi^{(3)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)\vec{E}(\omega_1)\vec{E}(\omega_2)\vec{E}(\omega_3)$. Elle concerne le mélange paramétrique à trois ondes et la génération de la troisième harmonique si $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3$.

Dans ces processus non linéaires, la génération d'harmoniques doit satisfaire une condition d'accord de phase. Celle-ci exige que la différence entre le vecteur d'onde $\vec{k_g}$ du faisceau généré et la somme des vecteurs d'ondes initiaux $\vec{k_i}$ soit nulle.
Pour un exposé plus complet sur l'optique non linéaire, on peut se reporter à la référence (73).

Génération de la deuxième harmonique : doublage de fréquence

À partir du faisceau lumineux amplifié de fréquence ω_0 dans le visible, nous avons créé une deuxième harmonique en utilisant un cristal KD*P. Le faisceau lumineux résultant possède une fréquence $\omega_{uv} = 2 \times \omega_0$ dans l'ultraviolet (UV). L'énergie du faisceau UV varie entre 6 et 25 mJ.

Génération de la troisième harmonique : triplement de fréquence

Pour obtenir le faisceau XUV, il faut créer une troisième harmonique à partir du faisceau UV dans un gaz à faible pression (xénon). Ce gaz est injecté dans une enceinte par une valve électrique, dont l'ouverture est contrôlée par un cristal piezo-électrique. La pression dans l'enceinte de triplement (Tripling Chamber) est maintenue durant l' expérience à $\approx 10^{-5}$ mbar par une pompe à diffusion. Nous avons focalisé le rayonnement UV dans le gaz par une lentille de distance focale 20 cm. Pour obtenir la lumière XUV, la distribution spatiale du faisceau UV dans le jet atomique du gaz doit être optimisée jusqu'à l'obtention de l'accord de phase (72). Cette optimisation est réalisée en modifiant la position de la valve, construite sur une plaque mobile selon les axes x, y et z.
Ainsi, la fréquence du faisceau XUV résultant est donnée par $\omega_{xuv} = 3 \times \omega_{uv}$ ($\omega_{xuv} = 6 \times \omega_0$) avec une largeur à mi-hauteur(FWHM) variant entre 250 et 300 MHz (66).

7.3.4 Interaction faisceau moléculaire-rayonnement et détection

Le gaz moléculaire d'hydrogène ou de ses isotopes est contenu dans un tube se terminant par une tuyère (nozzle) sous une pression de 2 bar. Il se détend dans une enceinte maintenue sous vide à travers la tuyère, formant ainsi un faisceau moléculaire supersonique refroidi. La tuyère est équipée d'une vanne électro-mécanique (poppet) permettant de contrôler la densité du gaz émis dans le faisceau. Le faisceau traverse ensuite un écorceur (skimmer) de diamètre d'environ 2 mm qui sert à

obtenir un faisceau bien collimaté dans lequel la vitesse des molécules est bien définie. Le tube est mobile selon son axe ce qui permet de règler la distance de la tuyère par rapport à l'écorceur, qui a une influence sur la densité des molécules observées, leur température rotationnelle et l'élargissement Doppler résiduel des raies observées. La température rotationnelle des molécules décroît avec cette distance ainsi que la largeur Doppler. Dans notre expérience, le meilleur compromis correspondait à une distance de 8 cm environ.

Les deux faisceaux lumineux, l'UV et le XUV, interagissent ensuite avec le faisceau moléculaire dans la chambre d'interaction (interaction chamber) sous une pression d'environ 10^{-7} mbar. Le pompage est assuré par une pompe turbomoléculaire (Figure 7.10).

La molécule absorbe d'abord le photon XUV de fréquence ω_{xuv} correspondant à une transition entre un niveau d'énergie inférieur appartenant à l'état électronique fondamental et un niveau d'énergie supérieur appartenant à un état électronique excité. Une fois dans un état excité, la molécule est ionisée sous l'effet de l'absorption du photon UV (Figure 7.1). Le produit ionisé est ensuite extrait par une différence de potentiel qui l'accélère vers un analyseur à temps de vol (TOF) pour être analysé par spectroscopie de masse. Dans le TOF, les ions lourds et les ions légers sont récupérés par un électro-multiplicateur. Dans la Figure 7.9, on montre l'enregistrement simultané du signal de l'ion moléculaire H_2^+ et du signal de l'ion atomique H^+ produit par dissociation de l'ion moléculaire.

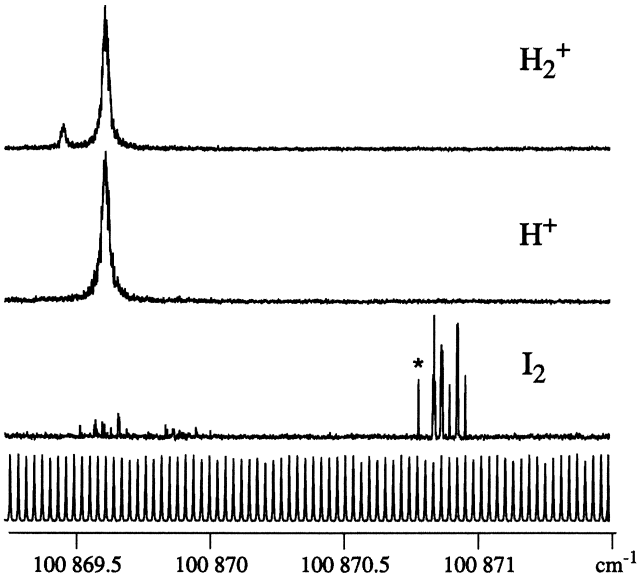


Figure 7.9 – *Enregistrement simultané du signal de l'ion moléculaire H_2^+ et de l'ion atomique H^+. La première figure représente l'enregistrement de deux signaux de l'ion moleculaire H_2^+ correspondant à deux raies, la deuxième figure represente l'enregistrement du signal de l'ion atomique H^+.*

Spectromètre de masse à temps de vol (TOF)

Le principe de base repose sur la mesure du temps de trajet de particules chargées qui ont été initialement accélérées par un champ électrique uniforme. Puisque la même énergie cinétique est fournie aux ions indépendamment de leur masse, leur temps de vol est directement proportionnel à la racine carrée de cette masse. Le détecteur mesure en fonction du temps une succession des pics de courant (pics de masse) chancun étant associé à un type d'ion et ayant une intensité proportionnelle

au nombre de molécules (atomes) ionisées initialement présentes dans le jet.

Figure 7.10 – *Photo du dispositif expérimental de LCVU pour la génération de la sixième harmonique et la photo-ionisation des molécules.*

7.4 Calibration en fréquence

La procédure de calibration par des fréquences relatives (74) est utilisée dans notre expérience. La fréquence de la raie absorbée dans le XUV est déterminée à partir des fréquences des raies hyperfines de la molécule I_2 et des franges d'interférence (étalonnage), enregistrées simultanément avec le signal des ions. Les composantes hyperfines sont mesurées par la spectroscopie d'absorption saturée, en envoyant une partie du faisceau laser continu (visible) par un système optique vers une enceinte contenant de l'iode à faible pression. Les franges d'interférence sont obtenues à partir d'un interféromètre de Fabry-Perot (Figure 7.2) alimenté par une autre partie du faisceau issu du laser continu (voir Figure 7.3).
La distance séparant deux franges (intervalle spectral libre) est déterminée avec une grande précision et vaut 148.9567 MHz.
Lors de l'enregistrement une dérive des franges (variation de la distance entre deux franges) est possible. Elle est provoquée par un éventuel changement de la pression, de la température ou d'un désalignement du laser continu. Pour diminuer les conséquences de cette dérive des franges sur la calibration des raies, l'interféromètre de Fabry-Perot est asservi par un laser He-Ne (66) pour le stabiliser. Pour les positions des composantes hyperfines de la molécule I_2 nous avons utilisé la liste des raies mesurées au sein du laboratoire LCVU (75; 76), ou la liste des valeurs calculées (77).

L'acquisition des données se fait sur un micro-ordinateur en utilisant un programme SCAN TOOL construit par le groupe. Ce programme nous permet de générer l'enregistrement des trois signaux à distance, par un balayage de la fréquence initiale du laser continu. Cette variation de fréquence est réalisée en faisant varier la tension au bord d'un stabilisateur de mode connecté au laser à colorant en anneaux continu par d'autres interféromètres de Febry-Perot. La variation, lisse, de cette tension obligera le laser, à partir de ce stabilisateur, à modifier la longueur d'onde asservie autour de la longueur d'onde XUV résonante.

Chapitre 8

Résultats et discussions

8.1 Traitement des données

Les fréquences ν des raies moléculaires mesurées par spectroscopie laser sont converties en longueurs d'onde λ(Å) selon la loi :

$$\lambda = c/\nu. \tag{8.1}$$

où c= 299792458 m/s est la vitesse de la lumière dans le vide.
Nous allons présenter les résultats des mesures à très haute précision des longueurs d'onde des raies moléculaires de D_2 et HD obtenues par la spectroscopie en absorption XUV dans la gamme spectrale [999.51 - 1037.89] Å. Nous avons mesuré 43 raies pour HD et 39 raies pour D_2. Ces longueurs d'onde mesurées appartiennent aux bandes de Lyman $X \rightarrow B$ et de Werner $X \rightarrow C$. Ces raies ont été déjà mesurées par Herzberg (21) mais avec moins de précision.

Pour avoir une bonne statistique sur la valeur de la longueur d'onde, une raie moléculaire est enregistrée quatre fois. Le choix de ce nombre dépend de la position de la composante hyperfine de calibration de la molécule I_2 par rapport à la raie d'absorption. Quelques fois ce nombre se réduit à deux fois. Lorsque l'enregistrement est effectué on détermine les caractéristiques de la raie, à savoir, la longueur d'onde, la largeur à mi hauteur (FWHM) ainsi que les incertitudes correspondantes. Ces caractéristiques sont obtenues à partir de la forme de le raie, ajustée avec des profils de Lorentz ou de Voigt. Le choix de ces deux profils repose sur le fait que la raie moléculaire enregistrée est élargie, en plus de l'élargissement naturel, par l'effet des collisions (composante lorentzienne), par l'effet Doppler (composante gaussienne), et par l'effet Stark (AC). Ce dernier est causé par l'intensité des faisceaux XUV et UV.

Afin de minimiser les effets des élargissement Doppler et collisionnel, nous avons entrepris une nouvelle méthode lors de l'enregistrement. Cette méthode consiste à faire interagir les deux photons XUV et UV avec la partie froide du jet moléculaire supersonique. Cette partie du jet est sondée en introduisant un temps de retard (delay time) entre l'échappement du jet moléculaire de l'enceinte à gaz et l'arrivée des faisceaux lumineux XUV et UV à la zone d'interaction. Sur la Figure 8.1 nous présentons la variation du signal de l'ion et de la largeur de la raie en fonction du temps de retard. Lorsque ce temps de retard est grand, les deux rayonnements interagissent avec la partie froide du jet moléculaire. Ainsi nous avons constaté que lorsqu'on sonde la partie chaude du jet, correspondant à la partie frontale de celui-ci, le profil de la raie est plus large que lorsqu'on sonde la partie froide. Cette différence de profil est due au fait que la partie froide du jet correspond à la partie où la vitesse moyenne et la densité des molécules sont les plus faibles.

Les raies moléculaires mesurées avec cette technique ont une largeur à mi-hauteur (FWHM) d'environ 320 à 430 MHz alors que la largueur à mi-hauteur du faisceau XUV varie entre 300 et 250 MHz. Ainsi la conséquence de cet effort expérimental se voit dans la finesse de nos raies, et dans l'amélioration de nos mesures par rapport aux précédentes où la largeur des raies était d'environ 500 MHz (66). On donne comme exemple, dans la Table 8.2 et la Table 8.3, les caractéristiques

obtenues pour les raies R0 $B9 - X0$ et Q3 $C0 - X0$ de HD et D_2 respectivement.

Cependant, dans certains cas la raie de calibration de I_2 se trouve plus loin, sur l'échelle des fréquences, par rapport à la raie d'absorption XUV. Par conséquent l'enregistrement de cette raie moléculaire prend beaucoup plus de temps, durant lequel l'intervalle spectral libre de l'étalonnage peut dériver. En raison de ces difficultés, une raie moléculaire est mesurée au moins deux fois. La fréquence finale de la raie (MHz) et sa largeur à mi hauteur sont déterminées à partir d'une moyenne de l'ensemble des enregistrements, en utilisant un ajustement par le profil de Lorentz.

Le bilan des incertitudes sur la position des raies a été soigneusement déterminé précédemment par Philip et al (66) lors des mesures des raies de Lyman et de Werner de la molécule H_2. Nous l'avons donc adopté pour nos mesures. Ces incertitudes sont liées aux décalage en fréquence dus essentiellement à l'effet Doppler résiduel, lié au faisceau moléculaire, à l'effet Stark (AC), à la dérive en fréquence dans le milieu amplificateur, à la longueur d'onde de la raie de calibration I_2 et à la statistique. La limite supérieure de ce bilan est résumée dans la Table 8.1. La précision sur les meilleures mesures et de 0.005 cm^{-1} (1 $cm^{-1} \approx 30$ GHz) ce qui donne une précision $\Delta\sigma/\sigma = \Delta\lambda/\lambda$ de 5 $\times 10^{-8}$.

Pour vérifier la calibration des longueurs d'onde de toutes les raies mesurées pour D_2 et HD et leur cohérence, nous avons calculé à partir des longueurs d'onde de raies issues d'un même niveau d'énergie supérieur (par exemple R(1) et P(3) de la bande B 9 -X 0), la différence ΔE entre les niveaux d'énergie ro-vibrationnels de l'état fondamental (voir la Figure 8.2). Nous avons comparé ces valeurs calculées avec celles qui sont déterminées à partir des transitions dans l'infra rouge (IR) connectant les niveaux rotationnels des niveaux $(v'' - v')$ où $v'' = 0$ et $v' = 0$ ou 1 à l'intérieur de l'état fondamental X. Ces transitions ro-vibrationnelles, qui obéissent à la règle de sélection $\Delta J = 0, \pm 2$, sont mesurées avec une incertitude sur les nombres d'onde de 0.001 cm^{-1}, par la spectroscopie Raman en utilisant un spectromètre à Transformée de Fourier (78).

Dans la Figure 8.3 et la Figure 8.4 on montre un exemple pour cette vérification en utilisant les raies R(0) et P(2) des bandes de Lyman et de Werner, respectivement, de D_2 et HD. Le trait plein donne la valeur de l'écart en énergie et les traits en pointillés donnent l'incertitude correspondante. A partir de ces différences de combinaison entre les raies R(J) et P(J+2), nous avons trouvé que les précisions sont meilleures que celles évaluées dans le bilan des incertitudes. Les longueurs d'onde mesurées avec cette très grande précision ($\Delta\lambda/\lambda$=5 $\times 10^{-8}$) sont ensuite comparées à celles obtenues par la spectroscopie classique et par nos prédictions théoriques.

8.2 Résultats de D_2

Dans la Table 8.4 on donne l'ensemble des nouvelles mesures de longueurs d'onde pour la molécule D_2. Ces longueurs d'onde s'étalent de 999.51 à 1020.07 Å. Dans ce tableau on trouve : dans la première colonne l'attribution de la raie, où "L" est l'abréviation de la bande de Lyman et " W " est l'abréviation de la bande de Werner, dans la deuxième et troisième colonne le nombre d'onde et la longueur d'onde correspondante ainsi que leurs incertitudes associées sur le dernier chiffre. La quatrième colonne donne la différence Δ_{o-h} de nos résultats avec les résultats précédents en absorption (57) et la cinquième colonne, la différence Δ_{o-m} avec les nombres d'onde obtenus à partir des spectrogrammes enregistrés en émission sur le spectrographe de 10 m de Meudon. Pour cette dernière colonne, lorsque la raie n'est pas observée dans nos spectres d'émission, on donne la différence avec le nombre d'onde de Ritz. Dans la dernière colonne on donne la différence entre ces nouvelles mesures et les valeurs issues de nos calculs théoriques.

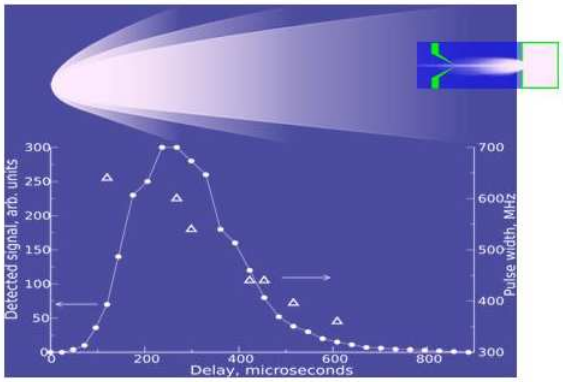


Figure 8.1 – *Variation de l'amplitude du signal de l'ion moléculaire (à gauche en unité arbitraire) et de la largeur de la raie (à droite en MHz) en fonction du temps de retard introduit entre le faisceau moléculaire et les faisceaux UV et XUV.*

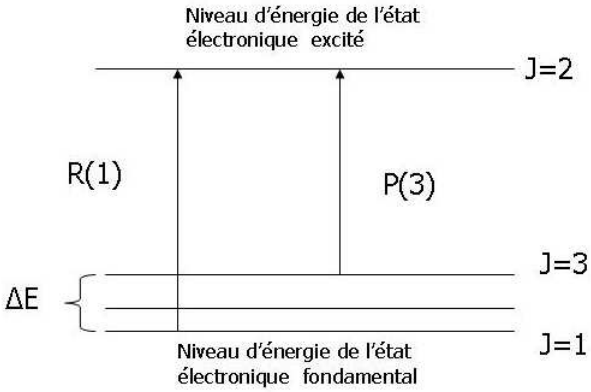


Figure 8.2 – *Principe de combinaison entre les raies R(1) et P(3) des bandes de Lyman et de Werner de la molécule D_2.*

Nous avons rapporté sur la Figure 8.5 la différence Δ_{o-h} entre nos résultats et les valeurs expérimentales de Dabrowski et Herzberg (57), connues comme les plus précises jusqu' a présent, mesurées avec une incertitude de ± 0.15 cm^{-1}. Comme première remarque, ces données sont en moyenne décalées de -0.12 cm^{-1} par rapport à nos valeurs avec une déviation standard de $\sigma = 0.17$ cm^{-1}. D'après cette figure nous voyons que les valeurs des longueurs d'onde des raies appartenant aux bandes $B(11) - X(0)$, $B(10) - X(0)$ et $B(9) - X(0)$ sont toutes décalées vers le haut contrairement à la bande de $C(0) - X(0)$. Ces raies, rappelons le, sont déterminées à partir d'une calibration relative basée sur l'utilisation des raies de références atomiques, moins précises que les composantes hyperfines de la molécule I_2. Ce décalage observé n'est donc pas surprenant. En plus cela confirme l'importance de ces nouvelles mesures, très précises, de raies pour recaler nos spectres d'émission du spectrographe de 10 m.

La comparaison avec nos résultats expérimentaux obtenus avec la spectrographe de 10 m, préliminaires dans cette gamme de longueurs d'onde, montre une différence supérieure par rapport à la comparaison du paragraphe précédent. Ceci s'explique par le fait que le spectre des raies observées

en émission est dense et les raies sont affectées, soit en ayant plusieurs attributions ou soit elles ne sont pas bien mesurées. Néanmoins les premiers résultats des nombres d'onde de Ritz pour les raies non observées sont en très bon accord, ce qui nous permet d'avoir une idée sur la bonne qualité et la précision des niveaux ro-vibrationnels des états électroniques excités qui sont déterminés à partir d'une moyenne sur un grand nombre de raies observées dans l'UV.

A partir de ces mesures laser très précise dans l'UV, nous avons déterminé quelques valeurs de niveaux d'énergie dans les états B et C pour les comparer avec celles que nous avons obtenues par spectroscopie UV classique. Pour cela nous avons déduit les valeurs d'énergie des niveaux de l'état X à partir des transitions $S(J'')$ et $Q(J'')$ entre les niveaux $v'' = 0$ et $v'' = 0$ ou 1 du fondamental mesurées dans l' IR (78). Cette comparaison est donnée dans la Table 8.6 pour les valeurs de ces énergies pour $J' = 2$ et $J' = 3$.

A partir de cette table, nous voyons que l'écart entre les valeurs des énergies est très petit. Cela nous confirme une fois de plus la précision des niveaux d'énergie obtenue par émission UV. Néanmoins l'écart pour le niveau d'énergie $E(v = 11, J = 3)$ est relativement grand (0.124 cm^{-1}). Cela est lié à la précision de ce niveau dont la détermination dépend du nombre de raies observée. Pour améliorer la précision de ces niveaux nous envisageons d'étendre l'analyse des spectres en émission vers les grandes longueurs d'onde afin de mesurer plus de raies.

La comparaison avec les résultats théoriques donne une différence qui ne dépasse pas ± 1 cm^{-1} pour les raies des bandes de Lyman et ± 0.25 cm^{-1} pour les raies de la bande de Werner. Pour un calcul théorique obtenu à partir de données *ab initio*, cette différence nous rassure sur la bonne qualité de nos résultats pour prévoir la position des raies pour les premiers niveaux d'énergie des états B et C de la molécule. Néaumoins cette différence peut se réduire si les données *ab initio* sont améliorées et les interactions avec les autres états électroniques supérieurs sont prises en compte.

8.3 Résultats de HD

Pour la Table 8.5 on donne aussi l'ensemble des nouvelles mesures de longueurs d'onde pour la molécule HD. Les raies sont enregistrées dans la gamme spectrale [1001.88 - 1037.89 Å]. Dans ce tableau on trouve : dans la première colonne l'attribution de la raie à chaque bande de Lyman "L" et de Warner "W", dans la deuxième et la troisième colonne le nombre d'onde et la longueur d'onde correspondante ainsi que leurs incertitudes associées. La quatrième colonne donne la différence Δ_{o-h} de nos résultats avec les précédents résultats en absorption (57). La cinquième et la sixième colonne donne, respectivement, la différence $\sigma_o - \sigma_{cal1}$ avec nos résultats de calculs théoriques obtenus par la résolution des équations couplées sans tenir en compte de la brisure de symétrie H_{gu}, et la différence $\sigma_o - \sigma_{cal2}$ avec les résultats de calculs obtenus par la résolution des équations couplées en tenant compte de cette brisure.

Pour cette molécule, les précédentes données de Dabrowski et Herzberg sont aussi mesurées avec une incertitude de ± 0.15 cm^{-1} et sont la référence unique pour les transitions VUV. La comparaison avec nos nouvelles mesures montre que ces anciennes longueurs d'onde sont en moyenne décalées de 0.30 cm^{-1} par rapport à nos valeurs, avec une déviation standard de $\sigma = 0.28$ cm^{-1}. Nous avons rapporté cette différence dans la Figure 8.6. Sur cette figure nous observons que ce décalage semble être cette fois " systématique " pour toutes les bandes mesurées, contrairement à ce que nous avons trouvé pour la molécule D_2. Ceci n'est pas surprenant du moment que ces longueurs d'onde sont déterminées de la même manière que pour D_2, ce qui rend possible un décalage de l'ensemble des raies.

effet Doppler	40 Mhz
effet Stark (AC)	50 Mhz
dérive de fréquence	150 Mhz
calibration I_2	10 Mhz
statistique	40 Mhz
Totale (meilleur mesures)	0.005 cm^{-1}

Table 8.1 – *Le bilan des incertitudes sur la position des raies.*

La comparaison avec les résultats théoriques (colonnes 5 et 6) donne des différences qui n'excèdent pas 1.90 cm^{-1} pour les deux calculs. Cependant nous constatons que la prise en compte de la brisure de symétrie H_{gu} améliore nettement les résultats des raies R et P contrairement aux raies Q qui ne sont pas influencées par ce couplage. Ainsi nous arrivons à améliorer les résultats du calcul théorique d'environ 17 % au minimum en tenant en compte du couplage H_{gu}.

Les raies appartenant aux transitions électroniques entre l'état fondamental et le premier état excité de symétrie "g", en l' occurrence $EF^1\Sigma_g^+$, se trouvent dans cette gamme spectrale ([1001.88-1037.89 Å]). Ces raies appartiennent à la bande $X(0) \rightarrow EF(0)$. Nous avons essayé d'enregistrer les longueurs d'onde de ces raies, mais nous n'avons pas réussi à observer le signal correspondant, et ceci malgré l'augmentation de la densité du gaz dans la chambre d'interaction. Cependant nos calculs théoriques montrent que les probabilités de transitions de ces raies sont très faibles. Ceci explique la raison pour laquelle nous n'avons pas réussi à les observer.

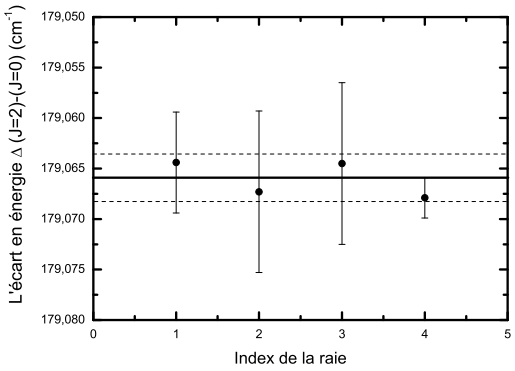


Figure 8.3 – *Principe de combinaison entre les raies R(0) et P(2) des bandes de Lyman et de Werner de la molécule D_2.*

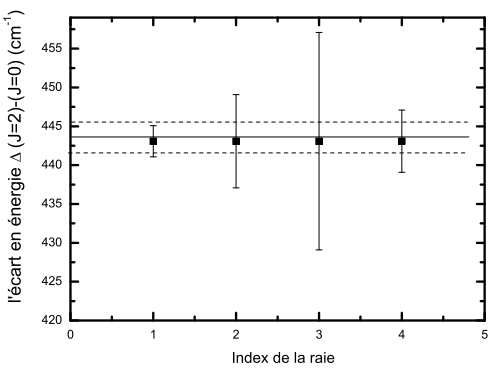


Figure 8.4 – *Principe de combinaison entre les raies R(0) et P(2) des bandes de Lyman et de Werner de la molécule HD.*

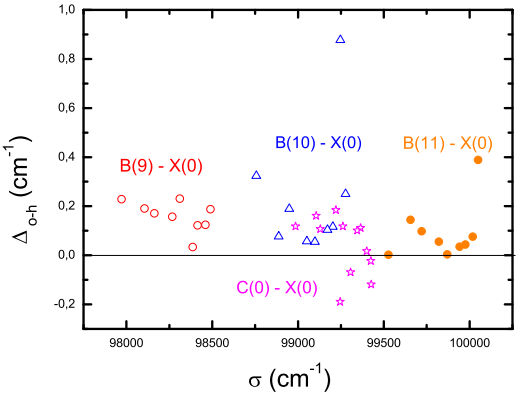


Figure 8.5 – *Différence entre nos mesures expérimentales de longueurs d'onde des raies des bandes de Lyman et Werner avec les anciennes données (57) pour la molécule D_2.*

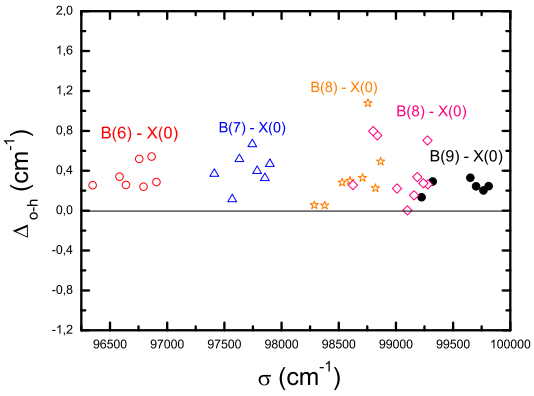


Figure 8.6 – *Différence entre nos mesures expérimentales de longueurs d'onde des raies des bandes de Lyman et Werner avec les anciennes données (57) pour la molécule HD.*

la raie R0 B9-X0								
	profil de Lorentz				profil de Voigt			
date	position(Mhz)	uncert.	FWHM	uncert.	position (Mhz)	uncert.	FWHM	uncert.
060717-03	2992256870	4	301	8	2992256864	3	374	15
060717-04	2992256826	3	333	8	2992256826	3	432	13
060717-05	2992256844	4	291	8	2992256846	4	449	15
060717-06	2992256833	4	396	10	2992256830	3	481	15
moyenne	**2992256843**	**23**	**330**	**56**	**2992256841**	**20**	**434**	**60**

Table 8.2 – *Une raie de HD enregistrée.*

la raie Q3 C0 - X0								
	profil de Lorentz				profil de Voigt			
date	position (Mhz)	uncert	FWHM	uncert	position	uncert	FWHM	uncert
060706-02	2974560069	4	436	9	2974560068	3	580	14
060706-03	2974560084	3	354	7	2974560078	3	452	13
060706-04	2974560084	3	330	6	2974560086	2	390	11
060706-05	2974560077	3	330	7	2974560077	3	429	13
moyenne	**2974560078**	**11**	**362**	**58**	**2974560077**	**10**	**463**	**95**

Table 8.3 – *Une raie de D_2 enregistrée.*

Raies	σ_o **(cm^{-1})**	λ_o **(Å)**	Δ_{o-h}	Δ_{o-m}	$\sigma_o - \sigma_{cal}$
L11 R0	100049.179 (5)	999.50845 (5)	0.389* [2]	(-0.071)[1]	-1.091
L11 R1	100018.106 (5)	999.81897 (5)	0.076	(0.046)	-1.094
L11 P1	99975.024 (15)	1000.24982 (15)	0.044	(-0.076)	-1.086
L11 R2	99941.755 (4)	1000.58279 (4)	0.035	(-0.190)	-1.095
L11 P2	99870.114 (4)	1001.30055 (4)	0.004	-1.216[3]	-1.086
L11 R3	99820.536 (3)	1001.79787 (3)	0.056	-0.464	-1.094
L11 P3	99720.578 (7)	1002.80205 (7)	0.098	0.038[4]	-1.092
L11 R4	99655.055 (7)	1003.46139 (7)	0.145	-0.695b	-1.105
L11 P4	99527.112 (7)	1004.75135 (7)	0.002	0.132r	-1.088
W0 R1	99427.161 (9)	1005.76139 (9)	-0.119	-1.089b	-0.209
W0 R0	99424.957 (8)	1005.78369 (8)	-0.023	-0.973b	-0.203
W0 R2	99400.517 (4)	1006.03098 (4)	0.017	0.017b	-0.213
W0 Q1	99364.891 (5)	1006.39168 (5)	0.111	0.421b	-0.199
W0 R3	99345.181 (8)	1006.59135 (8)	0.101	-0.879b	-0.219
W0 Q2	99307.041 (13)	1006.97794 (13)	-0.069	-1.279ℵ [5]	-0.199
L10 R0	99277.320 (8)	1007.27941 (8)	0.250	–	-1.040
W0 R4	99261.458 (12)	1007.44037 (12)	0.118	-0.792b	-0.232
L10 R1	99246.947 (8)	1007.58767 (8)	0.877	–	-1.043
W0 P2	99245.890 (2)	1007.59840 (2)	-0.190*	(-0.090)	-0.200
W0 Q3	99220.644 (4)	1007.85478 (4)	0.184	0.704b	-0.206
L10 P1	99202.816 (5)	1008.03590 (5)	0.116	–	-1.044
L10 R2	99171.654 (1)	1008.35265 (1)	0.104	–	-1.046
W0 P3	99129.627 (3)	1008.78015 (3)	0.107	-0.573b	-0.203
W0 Q4	99106.151 (6)	1009.01911 (6)	0.161	-1.189	-0.209
L10 P2	99098.255 (6)	1009.09950 (6)	0.055	–	-1.045
L10 R3	99051.837 (6)	1009.57239 (6)	0.057	–	-1.053
C0 P4	98985.868 (5)	1010.24522 (5)	0.118	–	-0.212
L10 P3	98949.409 (5)	1010.61746 (5)	0.189	–	-1.051
L10 R4	98888.097 (2)	1011.24405 (2)	0.077	–	-1.063
L10 P4	98757.004 (3)	1012.58641 (3)	0.324	–	-1.056
L9 R0	98489.648 (2)	1015.33513 (2)	0.188	–	-0.992
L9 R1	98460.044 (5)	1015.64042 (5)	0.124	–	-0.996
L9 P1	98414.752 (1)	1016.10783 (1)	0.122	–	-0.998
L9 R2	98385.884 (6)	1016.40597 (6)	0.034	–	-1.006
L9 P2	98310.581 (3)	1017.18451 (3)	0.231	–	-0.999
L9 R3	98267.557 (1)	1017.62986 (1)	0.157	–	-1.013
L9 P3	98162.511 (4)	1018.71885 (4)	0.171	–	-0.999
L9 R4	98105.661 (4)	1019.30917 (4)	0.191	–	-1.009
L9 P4	97971.239 (1)	1020.70772 (1)	0.229	–	-1.001

Table 8.4 – *Nombres d'onde et longueurs d'onde des raies mesurées de D_2. σ_0 est le nombre d'onde mesuré et λ la longueur d'onde associée. Δ_{o-h} est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et ceux de la référence (57). Δ_{o-m} est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et nos valeurs du spectrographe de 10 m de Meudon. $\sigma_o - \sigma_{cal}$ est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et nos prédictions théoriques.*

[1] nombre d'onde de Ritz.
[2] raie double.
[3] raie avec plusieurs attributions.
[4] raie réabsorbée.
[5] raie épaulée.

Raies	σ_o **(cm^{-1})**	λ_o **(Å)**	Δ_{o-h}	$\sigma_o - \sigma_{cal1}$	$\sigma_o - \sigma_{cal2}$
L9 R0	99810.945 (8)	1001.89413 (8)	-0.245	-1.855	-1.795
L9 R1	99764.337 (2)	1002.36220 (2)	-0.203	-1.863	-1.803
L9 P1	99700.356 (7)	1003.00545 (7)	-0.244	-1.854	-1.794
L9 R2	99650.191 (6)	1003.51037 (6)	-0.329	-1.829	-1.759
L9 P3	99321.258 (7)	1006.83380 (7)	-0.292	-1.852	-1.792
W0 R1	99279.867 (6)	1007.25357 (6)	-0.263	-0.313	-0.263
W0 R0	99276.257 (10)	1007.29019 (10)	-0.703	-0.303	-0.243
W0 R2	99240.487 (8)	1007.65326 (8)	-0.273	-0.283	-0.233
L9 R4	99223.735 (5)	1007.82338 (5)	-0.135	-1.755	-1.675
W0 Q1	99186.383 (5)	1008.20291 (5)	-0.337	-0.297	-0.297
W0 R3	99158.393 (6)	1008.48750 (6)	0.153	-0.357	-0.307
W0 Q2	99100.143 (5)	1009.08028 (5)	0.003	-0.247	-0.247
W0 P2	99009.187 (7)	1010.00728 (7)	-0.223	-0.253	-0.193
L8 R0	98866.808 (2)	1011.46180 (2)	-0.492* [1]	-1.752	-1.602
W0 P3	98836.784 (6)	1011.76906 (6)	0.754	-0.306	-0.256
L8 R1	98821.444 (7)	1011.92612 (7)	-0.226	-1.756	-1.596
W0 Q4	98801.832 (7)	1012.12698 (7)	-0.798	-0.178	-0.178
L8 P1	98755.602 (14)	1012.60078 (14)	-1.078*	-1.738	-1.588
L8 R2	98709.153 (5)	1013.07728 (5)	-0.327	-1.707	-1.017
W0 P4	98624.394 (6)	1013.94793 (6)	-0.256	-0.196	-0.146
L8 P2	98599.741 (3)	1014.20145 (3)	-0.299	-1.699	-1.549
L8 R3	98530.818 (5)	1014.91089 (5)	-0.282	-1.772	-1.602
L8 P3	98378.361 (6)	1016.48370 (6)	0.051*	-1.749	-1.589
L8 R4	98287.815 (4)	1017.42011 (4)	-0.055*	-1.665	-1.475
L7 R0	97899.042 (3)	1021.46046 (3)	-0.468	-1.618	-1.358
L7 R1	97855.114 (4)	1021.91900 (4)	-0.326	-1.626	-1.366
L7 P1	97787.102 (5)	1022.62975 (5)	-0.398	-1.608	-1.358
L7 R2	97744.943 (12)	1023.07083 (12)	-0.667	-1.587	-1.317
L7 P2	97631.973 (6)	1024.25463 (6)	-0.517	-1.567	-1.307
L7 R3	97569.385 (10)	1024.91166 (10)	-0.115	-1.645	-1.375
L7 P3	97412.030 (8)	1026.56725 (8)	-0.370	-1.620	-1.360
L7 R4	97329.771 (10)	1027.43486 (10)		-1.539	-1.259
L6 R0	96907.213 (6)	1031.91493 (6)	-0.287	-1.487	-1.137
L6 R1	96864.758 (10)	1032.36721 (10)	-0.542	-1.502	-1.152
L6 P1	96794.529 (15)	1033.11624 (15)	-0.241	-1.491	-1.141
L6 R2	96756.782 (9)	1033.51928 (9)	-0.518	-1.458	-1.098
L6 P2	96640.142 (2)	1034.76669 (2)	-0.258	-1.438	-1.088
L6 R3	96584.110 (13)	1035.36700 (13)	-0.340	-1.510	-1.140
L6 R4	96348.046 (11)	1037.90377 (11)	-0.254	-1.404	-1.024

Table 8.5 – *Nombres d'onde et longueurs d'onde des raies mesurées de HD.σ_0 est le nombre d'onde mesuré et λ la longueur d'onde associée. Δ_{o-h} est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et ceux de la référence (57). $\sigma_o - \sigma_{cal1}$ est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et nos prédictions théoriques sans tenir compte de la brisure de symétrie $g-u$. $\sigma_o - \sigma_{cal2}$ est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et nos prédictions théoriques en tenant compte de la brisure de symétrie $g-u$.*

[1] raie double.

	B(v, J=1)						C^+(v, J=1)					
v	E_o^l [1]	E_o^m [2]	Δ_{o-m}	E_o^l	E_o^m	Δ_{o-m}	E_o^l	E_o^m	Δ_{o-m}	E_o^l	E_o^m	Δ_{o-m}
	J=2			J=3			J=2			J=3		
0	–	–	–	–	–	–	99424.958	99424.99	**-0.032**	99579.584	99579.57	**0.014**
9	98489.649	–	–	98564.954	–	–	–	–	–	–	–	–
10	99277.322	–	–	99350.721	–	–	–	–	–	–	–	–
11	100049.181	100049.25	**-0.069**	100120.826	100120.95	**0.124**	–	–	–	–	–	–

Table 8.6 – *Comparaison entres les niveaux d'énergie (cm^{-1}) de la molécule D_2 obtenue par spectroscopie laser et par spectroscopie classique.*

[1] énergie calculée à partir des raies d'absorption mesurées par spectroscopie laser.
[2] énergie calculée à partir des raies d'émission mesurées à l'aide du spectrographe de 10 m de Meudon.

Quatrième partie

APPORT DE LA SPECTROSCOPIE MOLÉCULAIRE À L'ASTROPHYSIQUE : DEUX EXEMPLES

Chapitre 9

L'étude de la possible variation cosmologique du rapport de masse $\mu = m_p/m_e$.

Le développement technologique des systèmes de détection et la grande résolution des spectrographes utilisés dans les observations du milieu interstellaires (le spectrographe peut être soit sur terre comme le cas du télescope VLT de l'observatoire européen ESO, où soit équipé sur un satellite comme FUSE) permettent aux astrophysiciens d'enregistrer de nouveaux spectres moléculaires ou atomiques avec une bonne résolution. L'analyse des ces nouveaux spectres amène à découvrir de nouvelles espèces chimique, ou d'améliorer les connaissances sur celles déjà connues (la molécule H_2 par exemple). Cependant pour une bonne identification des raies observées, la demande de données spectroscopiques à haute résolution est constante. Ainsi pour ces molécules, les longueurs d'onde mesurées dans les laboratoires avec une très grande précision, et les probabilités de transitions correspondantes obtenues par des calculs théorique, sont réclamées.
D'autre part la spectroscopie à haute résolution nous permet aussi d'apporter des contraintes nécessaires dans l'étude de la possible variation du rapport de masse μ, à partir de la comparaison des longueurs d'onde des molécules H_2 et HD mesurées avec une très grande précision dans les laboratoires et les longueurs d'onde mesurées à partir des spectres d'absorption observés dans les quasars.

9.1 Introduction

La possibilité d'une variation cosmologique des constantes fondamentale de la nature est actuellement une matière d'activité accrue dans la physique et l'astronomie. Les grandes travaux de recherche théoriques et expérimentaux effectués jusqu'ici conduisent à une conclusion : si les constantes de la nature changent, la quantité et le taux de changement est extrêmement petit. Il reste cependant une question importante : si oui ou non les lois de la physique sont universelles ?
Dirac (101) était parmi les premiers à discuter la variation possible des constantes physiques fondamentales. Il existe deux types de constantes fondamentale : des constantes avec dimension et des constantes sans dimension.
Pour les constantes fondamentales ayant une dimension, il est difficile de trouver une éventuelle variation cosmologique. En effet, des mesures sur le fond cosmique dans le domaine micro-onde, et des déductions sur le rapport de baryon-à-photon combiné avec des mesures indépendantes des rapports D/H obtenues à partir des spectres d'absorption des quasars, conduisent à une variation possible de 15-20% de la constante de la gravité G depuis le Big Bang (102). Des théories cosmologiques évoquant une variation de la vitesse de la lumière c ont été formulées (103), mais en raison de la définition courante de c (étant constant par définition à 299 792 458 m/s) aucune mesure opérationnelle ne semble pouvoir détecter un tel effet de façon tranchante. Par ailleurs, Karshenboim (104) affirme qu'une variation possible de la constante de Rydberg ne peut pas être distinguée du déplacement vers le rouge.
Il est plus significatif de rechercher des variations de quantités sans dimensions, telles que la constante

de structure fine $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$, ou le rapport des masses proton-électron $\mu = m_p/m_e$. Dans certains cas, des combinaisons de paramètres sans dimensions peuvent être examinées pour l'étude de la variabilité. Tel est le cas, par exemple, de la constante $g_p[\alpha^2/\mu]^\gamma$, étudiée à partir des spectres micro-onde de la molécule de l'OH (106; 107; 108; 109), avec g_p le facteur de Landé g du proton et γ un nombre spécifique à chaque raie.
Pour une discussion générale sur la question d'utilisation des paramètres sans dimensions où des paramètres dimensionnels, nous nous référons à l'article de Duff (105).

Il est intéressant de noter les grand efforts des théoriciens pour relier la variation possible des deux quantités sans dimensions α et μ. Dans ce contexte, grâce à la théorie de la grande unification (111; 112) mais également dans la théorie des cordes (113), une relation de proportionnalité est dérivée entre les changements possibles de α et μ :

$$\frac{\Delta\mu}{\mu} = R\frac{\Delta\alpha}{\alpha} \tag{9.1}$$

Tandis que les signes résultant des dérivations peuvent différer, la valeur absolue du facteur de proportionnalité $|R|$ est souvent grande, c.-à-d., comprise entre 20 et 40, bien que des valeurs légèrement plus petites aient aussi été rapportées (114). Par conséquent, on s'attend à ce que si une variation quelconque des constantes se produit, celle de μ soit la plus grande. Ceci fait du rapport des masses proton-électron une cible importante pour rechercher la variation temporelle d'une constante. La question qui se pose est la suivante : est-ce que la constante μ est aussi fondamentale que α ? Le proton est une particule composée, sa masse implique des énergies de liaison entre ses constituants, les quarks ; ceci implique que la masse de proton n'est pas vraiment une constante fondamentale ! Cependant, comme discuté par Flambaum et al (115), la masse du proton, et par conséquence μ, est reliée au paramètre fondamental de la chromodynamique quantique (QCD) Λ_{QCD} régissant la force de l'interaction nucléaire. Considérant que la constante α est purement reliée à l'électromagnétisme, la constante μ est considérée comme importante puisqu'elle relie différents secteurs de la théorie fondamentale : l'origine de m_e est reliée au secteur de Higgs, alors que la masse m_p est relié à la QCD (104).

La renaissance et l'intérêt accru de la variation possible des constantes fondamentales sont dûs aux résultats obtenus par Webb et al (116; 117; 118; 119) réclamant une variation possible de la constante de structure fine α. Cela était rendu possible grâce au spectromètre à très haute résolution HIRES, relié au télescope Keck utilisé pour les observations astronomiques.

En 1975 Thompson (120) avait suggéré que les spectres d'absorption moléculaire de nuages interstellaires, de déplacement vers le rouge z très élevé, observés sur la ligne de visée des quasars, pourraient indiquer une possible variation cosmologique du rapport de masse μ. Il avait indiqué la grande dépendance en masse des mouvements de rotation et de vibration d'une molécule, en particulier de la molécule H_2, comme un bon outil pour rechercher la variation de μ. Au cours des années, cette idée a été poursuivie par un certain nombre de chercheurs. Cependant, on a cherché à mettre en évidence une variation possible en terme de $\Delta\mu/\mu$, c.-à-d., la variation au cours du temps du rapport plutôt que de déterminer le rapport de masses lui-même.

Étant donné que l'hydrogène compose environ 80% de la matière connue dans l'univers et sa majeure partie se présente sous forme d'hydrogène atomique ou moléculaire dans la phase gazeuse (3), des études récentes (124) ont montré qu'une possible variation cosmologique du rapport de masses $\mu = m_p/m_e$ peut être déduite de la comparaison des longueurs d'onde des raies d'absorption VUV de H_2 mesurées en laboratoire avec leurs équivalentes mesurées dans plusieurs spectres d'absorption de quasars situés à de grandes distances astronomiques, c'est-à-dire, de grands z. Les raies

d'absorption observées sont dues à des nuages moléculaires situés sur la ligne de visée des quasars, formés à des temps lointains différents et caractérisés par des z différents. Cependant, cette étude doit être basée sur la connaissance des coefficients de sensibilité des longueurs d'onde par rapport à une possible variation du rapport $\mu = m_p/m_e$, ce qui demande une modélisation de la molécule.

D'autres moyens de déceler une variation possible du rapport μ ont été proposés. Pagel (121) a noté que la détection simultanée des déplacements isotopiques de divers atomes pourrait également fournir une limite à cette variation. Wiklind et Combes (122) ont utilisé une méthode pour contraindre cette possible variation en comparant les déplacements vers le rouge des transitions micro-ondes dans différentes molécules (CO, HCN, HCO^+, H_2CO, N_2H^+) qui ont été observées dans la gamme $z = 0.2 - 0.9$. Tzanavaris et al (110) ont conçu une méthode pour détecter la variation de μ en combinaison avec d'autres constantes sans dimensions. En plus de cette stratégie adoptée pour dériver cette possible variation de μ par la spectroscopie moléculaire, une expérience de laboratoire pour détecter une dépendance de temps de μ dans l'époque moderne par des mesures basées sur l'utilisation des résonateur optique monolithique (123) avait aussi été proposée .

9.2 Détermination des coefficients de sensibilités K_i des longueurs d'onde de H_2 et de HD

Dans ce paragraphe nous allons donner en détail les différentes étapes du calcul des coefficients de sensibilité K_i des longueurs d'onde par rapport à la variation du rapport $\mu = m_p/m_e$ des masses proton-électron pour la molécule H_2 et pour son isotope HD. Pour HD, les coefficients K_i sont donnés pour la première fois.

9.2.1 Démarche générale

Des raies appartenant aux bandes de Lyman et Werner de H_2 et de HD peuvent être détectées dans les spectres de quasars par suite à l'absorption par les nuages interstellaires situés sur la ligne de visée. En l'absence d'effets de variation de μ, les longueurs d'onde des raies déplacées vers le rouge λ_i sont reliées aux longueurs d'onde mesurées dans le laboratoire (zéro-déplacement vers le rouge) λ_i^0 par l'intermédiaire de :

$$\frac{\lambda_i}{\lambda_i^0} = (1 + z_{abs}) \tag{9.2}$$

où z_{abs} est la valeur du déplacement vers le rouge du nuage absorbant illuminé par le quasar Q. En cas de variation du rapport μ, un déplacement supplémentaire pour chaque longueur d'onde observée peut être défini, et sera la conséquence directe de la dépendance de la longueur d'onde à ce rapport. Cette dépendance s'ajoute dans l'équation 9.2 par l'introduction du coefficient de sensibilité K_i de la $i^{\,e}$ raie (125) :

$$\frac{\lambda_i}{\lambda_i^0} = (1 + z_{abs})(1 + \frac{\Delta\mu}{\mu} K_i) \tag{9.3}$$

avec :

$$\Delta\mu = \mu_z - \mu \tag{9.4}$$

où $\mu = m_p/m_e$ est le rapport des masses proton-électron de notre époque, à zéro déplacement vers le rouge, et μ_z et le rapport de masse dans le nuage absorbant au déplacement z_{abs}. La définition

d'un déplacement vers le rouge pour chaque raies spectrale $z_i = \lambda_i/\lambda_i^0 - 1$ permettra de récrire l'équation 9.3 comme :

$$z_i = z_{abs} + (1 + z_{abs})\frac{\Delta\mu}{\mu}K_i \tag{9.5}$$

Le coefficient de sensibilité K_i est définie implicitement pour chaque raie moléculaire, en terme de dérivée de la longueur d'onde par rapport à la masse (94) :

$$K_i = \frac{d(ln\lambda_i)}{d(ln\mu)} = \frac{\mu}{\lambda_i}\frac{d\lambda_i}{d\mu} = -\frac{\mu}{\sigma_i}\frac{d\sigma_i}{d\mu} \tag{9.6}$$

sachant que $\lambda_i = 1/\sigma_i$ et que $\sigma = E^{sup}(v', J') - E^{inf}(v'', J'')$.

D'après l'équation 9.6, le calcul du coefficient K_i revient au calcul de la dérivée de la longueur d'onde par rapport au rapport de masse $\mu = m_p/m_e$.

Les coefficients de sensibilité avaient été calculés précédemment dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer par Varshalovich et Levshakov (126) à partir des constantes spectroscopiques de la molécule H_2. Plus tard, Varshalovich et Potekhin (127) ont calculé ces coefficients par une autre méthode, basée sur la comparaison des longueurs d'onde expérimentales de la molécule H_2 et celles des molécules isotopiques D_2, T_2 et HD. Les deux méthodes utilisées ont donné des résultats similaires. Cependant, leur amélioration était nécessaire afin de prévoir une meilleur variation de μ. En 1998 Potekhin et al (129) ont calculé de nouveau les coefficients de sensibilité en utilisant une méthode semi-empirique. Ces coefficients sont déterminés pour les raies des bandes de Lyman $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Sigma_u^+$ et de Werner $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow C^1\Pi_u$ de H_2 en écrivant le développement de Dunham (128) pour les énergies des niveaux ro-vibrationnels des états électroniques :

$$E(v, J) = \sum_{m,n} Y_{mn}(v + 0.5)^m[J(J + 1) - \Lambda^2]^n \tag{9.7}$$

avec $\Lambda = 0$ pour les états $B^1\Sigma_u^+$ et $X^1\Sigma_g^+$ et $\Lambda = 1$ pour l'état $C^1\Pi_u$.

Pour ces trois états électroniques, X, B, et C, les auteurs ont utilisé les valeurs des coefficients de Dunham Y_{mn} obtenus par Huber et Herzberg (130). Dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer, les coefficients de Dunham sont proportionnels à $\mu_n^{-(n+m/2)}$ (129), où μ_n est la masse réduite des noyaux. Ainsi le coefficient de sensibilité d'une longueur d'onde par rapport à la variation de μ est déterminé comme la dérivée de la longueur d'onde, obtenue à partir de la différence de dérivées de deux énergies ro-vibrationnelles de l'équation 9.7. Cependant les valeurs de K_i obtenues par cette méthode peuvent être affectées par le fait que les corrections non adiabatiques, qui sont importantes pour H_2 et ses isotopes (voir la partie calcule théorique du le Chapitre I), n'ont pas été prises en compte dans le calcul semi-empirique.

Récemment, Ubachs et Reinhold ont amélioré cette démarche semi-empirique en incluant les corrections adiabatiques et les corrections non adiabatiques nécessaires pour la molécule H_2 (124). Dans cette nouvelle version de calcul, les coefficients de Dunham pour l'état fondamental X étaient déterminés à partir des énergies ro-vibrationnelles calculées avec une grande précision par Wolniewicz (41). Par contre pour les états B et C, ils sont ajustés sur l'ensemble des énergies ro-vibrationnelles moyennées sur les longueurs d'onde des raies R et P mesurées à très haute précision par la spectroscopie laser XUV. Les interactions non adiabatiques sont traitées de manière localisée et perturbative par diagonalisation de matrices vibroniques. Pour les étapes de calculs plus de détails sont données

dans la référence (124).

Les méthodes semi-empiriques utilisées dans le calcul du coefficient de sensibilité sont fondamentalement limitées. Ceci est essentiellement dû au fait qu'aucune distinction ne peut être faite entre les contributions électroniques, vibrationnelles et rotationnelles aux énergies des niveaux. Par exemple, la dépendance en nombre quantique J de l'énergie reflète non seulement l'énergie de rotation, mais également l'interaction non-adiabatique dépendant de J (couplage rotationnel). Pour traiter les interactions non adiabatiques de manière plus générale dans le calcul des coefficients K_i, nous avons entrepris une nouvelle approche, alternative, basée sur des données *ab initio* sur la molécule d'hydrogène. Ainsi en utilisant des courbes d'énergie potentiel adiabatiques les plus récentes et les plus précises pour les états électroniques $B^1\Sigma_u^+$ et $C^1\Pi_u$, aussi bien que pour les états de $B'^1\Sigma_u^+$ et de $D^1\Pi_u$ (38; 39), nous avons calculé les énergies et les fréquences de transition en résolvant un système d'équations couplées pour ces états. Le calcul est effectué pour plusieurs valeurs différentes de μ, qui intervient dans la masse réduite des noyaux, choisies au voisinage de sa valeur de référence, de manière à déduire les dérivées cherchées.
Pendant le cours de nos calculs, le groupe de Meshkov et al (94) ont publié les coefficients de sensibilité K_i dérivés par la même méthode, ie, à partir de la résolution des équations couplées pour les quatre états électronique cités ci-dessus. De plus, les auteurs prennent en compte dans leur calcul l'effet des états de Rydberg (n>4) sur les niveaux d'énergie appartenant aux états électroniques B, B', C et D (95). En revanche, Mishkov et al (94) n'ont pas expliqué dans leurs travail les étapes de calculs des coefficients de sensibilité des raies, d'une part, et d'autre part, les résultats publiés ont été explicitement limités aux raies observées pour les systèmes de quasar Q 0405 et de Q 0347.

9.2.2 Variation du rapport de masse μ pour les molécules H_2 et HD

Les longueurs d'onde sont calculées pour les transitions entre les niveaux d'énergie ro-vibrationnels des états électroniques excités B et C et l'état fondamental. Les niveaux d'énergie ro-vibrationnels des états électroniques excités B, C, B' et D sont obtenus par la résolution des équations couplées des quatre états électroniques excités, et par celle de l'équation de Schrödinger à une dimension pour l'état fondamental X. Les couplages non adiabatiques entres les quatre états électroniques et les corrections adiabatiques (15) sont aussi pris en compte dans le calcul des équations couplées. Les corrections non adiabatiques dues aux interactions entres les états électroniques de symétrie g et u, respectivement, et l'état fondamental X sont incluses dans les valeurs des énergie calculées de l'état fondamental. Ces corrections sont déterminées par une méthode semi-empirique (42), et sont données, pour la molécule H_2 par :

$$\Delta E_X = E_{\Sigma_g} + J''(J''+1)E_{\Pi_g} \tag{9.8}$$

et pour la molécule HD :

$$\Delta E_X = E_{\Sigma_g} + E_{\Sigma_u} + J''(J''+1)(E_{\Pi_g} + E_{\Pi_u}) \tag{9.9}$$

avec :

$$E_{\Sigma_{g(u)}} = \frac{\langle v_X | E_X^{ad} - U_X^{ad}(R) | v_X \rangle}{\mu_n} \sum_i a_i(\Pi_{g(u)})\eta^i. \tag{9.10}$$

$$E_{\Pi_g} = \frac{1}{\mu_n^2} \sum_i b_i(\Pi_g)\eta^i. \tag{9.11}$$

i	1	2	3	4	5	6	7
$\mu_i = (m_p/m_e)_i$	1836.10267261	1836.12267261	1836.14267261	1836.15267261	1836.16267261	1836.18267261	1836.20267261

Table 9.1 – *Variation du rapport de masse proton-à-électron.*

$$E_{\Pi_g} = \frac{1}{\mu_\alpha^2} \sum_i b_i(\Pi_u)\eta^i \tag{9.12}$$

$E_{\Sigma_{g(u)}}$ et $E_{\Pi_{g(u)}}$ sont des énergies appartenant, respectivement, aux états électroniques $\Sigma_{g(u)}$ et $\Pi_{g(u)}$ de la molécule. v_X représente la fonction d'onde ro-vibrationnelle associée à l'énergie E_X de l'état fondamental. $U_X^{ad}(R)$ est l'énergie potentielle adiabatique de l'état fondamental incluant le potentiel centrifuge. Les coefficients a_i et b_i (indépendant de la masse) des développements polynomiaux (équations 9.10, 9.11, 9.12) sont déterminés à partir des énergies expérimentales des molécules H_2, D_2, T_2 et HD. η est un nombre quantique qui dépend de la masse réduite de la molécule, il s'écrit comme : $\eta = (v_X + \frac{1}{2})/\sqrt{\mu_n}$.

Les équations de Schrödinger sont résolues pour chaque valeur de la masse réduite des noyaux μ_n. Pour les molécules H_2 et HD la masse réduite des noyaux est liée directement au rapport des masses m_p/m_e par :

$$\mu_{H_2} = \frac{m_p/m_e \times m_p/m_e}{m_p/m_e + m_p/m_e} = \frac{1}{2} m_p/m_e \tag{9.13}$$

$$\mu_{HD} = \frac{m_p/m_e \times m_D/m_e}{m_D/m_e + m_p/m_e} \tag{9.14}$$

avec $m_D/m_e = m_p/m_e + m_n/m_e$ est le rapport des masses deutérium-électron, alors que m_n/m_e est le rapport des masses neutron-électron.

La valeur de référence la plus précise de $\mu = m_p/m_e$ résulte des expériences dans les pièges d'ion, où la masse de l'électron m_e (131) et la masse du proton m_p (132) sont mesurées indépendamment par rapport à la masse de ^{12}C, donnant pour résultat la valeur $\mu = 1836.15267261$ [85] (133). Les petites variations du rapport des masses proton-électron se font au voisinage de cette valeur "réelle". Les différentes valeurs de μ utilisées dans nos calculs des niveaux d'énergie de H_2 et HD sont données dans la Table 9.1.

Dans le cas de la molécule HD, la variation de ce rapport n'est pas aussi simple à appliquer, contrairement au cas de la molécule H_2. La présence du neutron dans HD rend la variation du rapport m_p/m_e plus compliqué. En effet la masse du proton est directement reliée à la masse du neutron lors de la désintégration β^+ gouvernée par la force faible (134). Lors de la désintégration, le proton donne lieu à d'autre particules qui sont : le neutron , d'énergie au repos $m_n c^2$, le positron, d'énergie au repos $m_e c^2$, et le neutrino, d'énergie au repos $m_\nu c^2$. Dans le bilan énergétique de cette réaction, nous avons supposé que si une faible variation du rapport de masse m_p/m_e avait lieu au cours du temps, elle serait essentiellement due à la variation de la masse baryonique, alors que la masse leptonique resterait constante. En d'autres termes, dans le bilan énergétique de la désintégration β^+, la variation de l'énergie des électrons, des neutrinos et de l'énergie de liaison serait très faible. Ainsi avec cette première approche, nous pouvons écrire que :

$$m_n/m_e = m_p/m_e + C_1 \tag{9.15}$$

où $C_1 = 2.53098719$ est une constante déterminée à partir de la différence entre la masse réelle du proton et la masse réelle du neutron.

La même approximation est utilisée pour la masse du deutérium, c'est -à-dire que nous avons supposé que l'énergie de liaison entre le neutron et le proton dans le noyau D reste constante lors d'une possible variation du rapport de masse m_p/m_e. Ainsi la masse du deutérium s'écrira comme :

$$m_D/m_e = m_p/m_e + m_n/m_e + C_2 \tag{9.16}$$

où $C_2 = -4.353367210$ est une constante déterminée à partir de la différence entre la masse réelle de l'atome D et les masses réelles du proton et du neutron. Nous avons utilisé les dernières valeurs des masses du deutérium et du neutron obtenues à partir de la base de données du NIST (135).

Dans ce travail, la précision sur le calcul des longueurs d'onde est demandée. Pour cela nous avons fait un test sur l'effet de l'origine des énergies sur la valeur de la longueur d'onde pour chaque variation de masse.
En effet, dans une première étape, nous avons fait un calcul des niveaux d'énergie en choisissant le niveau fondamental $E_X(v'' = 0, J'' = 0)$ comme origine des énergies. De plus nous avons pris en compte l'effet de la variation de masse (semblable à l'effet isotopique) sur le comportement asymptotique des courbes de potentiel. Pour cela nous avons déterminé les valeurs asymptotiques des potentiels corrélés aux limites $n = 1$ et $n = 2$ en tenant en compte de la variation de masse dans la constante de Rydberg. Nous rappelant que la constante de Rydberg est donnée par :

$$R_y = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m_e}{M}} \qquad R_\infty = 1.0973731568525(73) \cdot 10^7\,\mathrm{m}^{-1} \tag{9.17}$$

où M est la masse du noyau. $M = m_p$ si l'atome et un hydrogène, et $M = m_p + m_n$ si l'atome est un deutérium.
Dans la deuxième étape, nous avons refait le calcul des longueurs d'onde, en déterminant les énergies ro-vibrationnelles d'un état électronique par rapport à la limite asymptotique de son potentiel. Cependant à longue distance les potentiels *ab initio* des états excités étaient décalés de 0.005 cm^{-1} par rapport à l'asymptote déterminée dans la première étape. Ce décalage est lié à la convergence des calculs *ab initio* des courbes de potentiels. Les longueurs d'onde obtenues à partir de ce dernier calcul étaient légèrement différentes de celles obtenues avec une origine des énergies en $E_X(v'' = 0, J'' = 0)$, considérées comme plus proches des valeurs expérimentales. Pour cette raison nous avons choisi d'adopter la première origine dans nos calculs. Ainsi avec ces résultats, nous avons construit des listes de longueurs d'onde théoriques pour les bandes de Lyman et de Werner de H_2 et HD pour chaque variation du rapport de masse μ.

9.2.3 Détermination de la dérivée $d\lambda_i/d\mu$

A partir des listes de longueurs d'onde que nous avons obtenues précédemment, nous avons déterminé la quantité $d\lambda_i/d\mu$ pour chaque raie moléculaire R, P ou Q en portant la variation des longueurs d'onde λ_i en fonction du rapport de masse μ_i sur un graphe. Ce graphe est très intéressant car il nous permet de vérifier la linéarité de cette variation et aussi la qualité de nos calculs. La dérivée $d\lambda_i/d\mu$ n'est rien d'autre que la pente de la droite obtenue. Pour obtenir la valeur de cette pente, nous avons ajusté les points du graphe par une interpolation polynomiale du premier ordre en μ. Dans la Figure 9.1 et la Figure 9.2 on donne des exemples de la détermination de la pente pour certaines raies de H_2 et HD respectivement. Cette interpolation est réalisée par un module intégré dans le programme Origine utilisé pour tracer les figures. Ce module calcule aussi l'erreur sur la valeur de la pente déterminée, la déviation standard des points par rapport à la moyenne, et

aussi la valeur du χ^2.
Cependant, nous avons trouvé que certaines longueurs d'onde présentent de très petite variation en fonction du rapport de masse $\mu = m_p/m_e$. Pour ces longueurs d'onde, la détermination de la pente est souvent difficile à obtenir avec une grande précision à cause de la grande dispersion des points sur le graphe. Pour ces raies la valeur de la pente déterminée est très petite, et elle est de l'ordre de grandeur de l'erreur correspondante. Pour la molécule H_2, nous avons calculé des longueurs

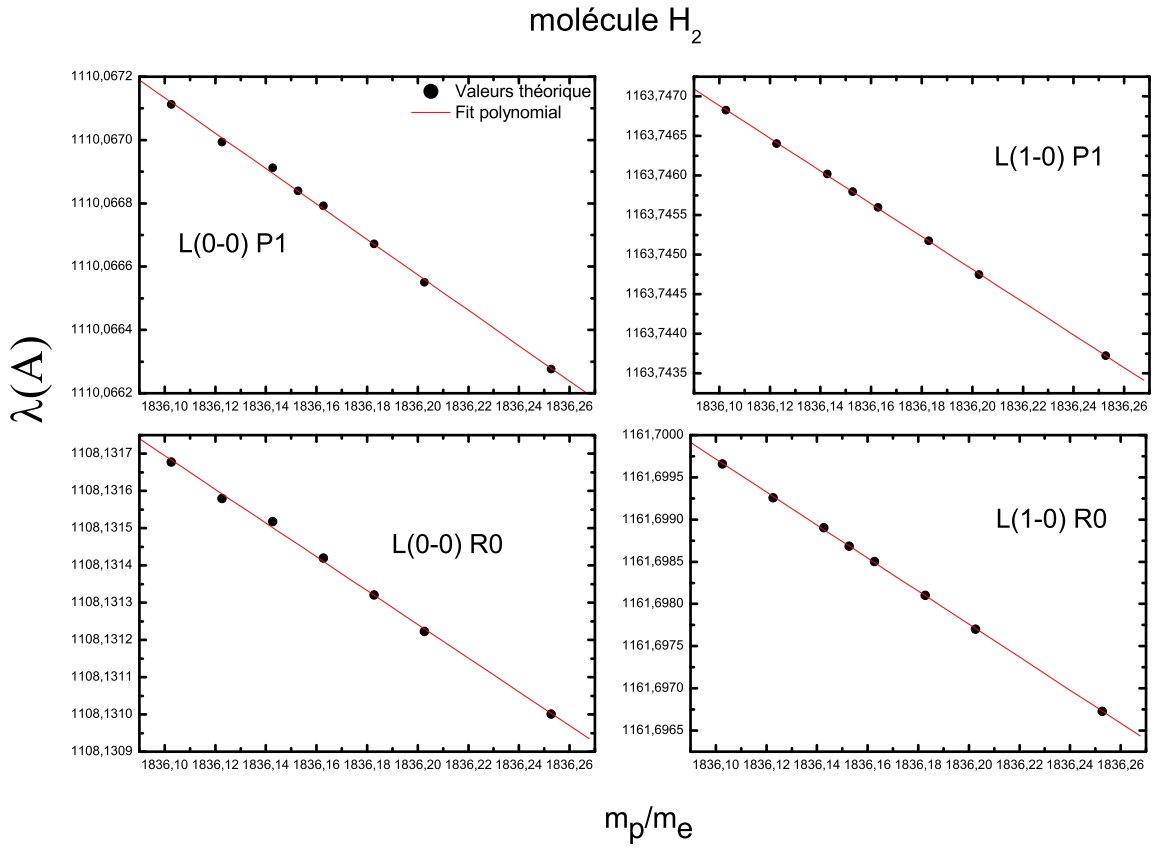


Figure 9.1 – *Variation de la longueur d'onde en fonction du rapport des masses m_p/m_e : détermination de la pente $d\lambda_i/d\mu$ pour la bande de Lyman (L(v'-v")) de la molécule H_2.*

d'onde pour une autre valeur supplémentaire du rapport de masse m_p/m_e=1836.25267261. Ce calcul supplémentaire était une vérification de la variation linéaire de la longueur d'onde en fonction du rapport des masses.
Finalement la valeur du coefficient K_i est déterminée facilement pour chaque raie moléculaire à partir de l'équation 9.6.

9.3 Résultats et discussions

Dans la Table 9.2 et la Table 9.3 nous donnons les résultats du calcul des coefficients de sensibilité des longueurs d'onde par rapport à une possible variation cosmologique du rapport des masses

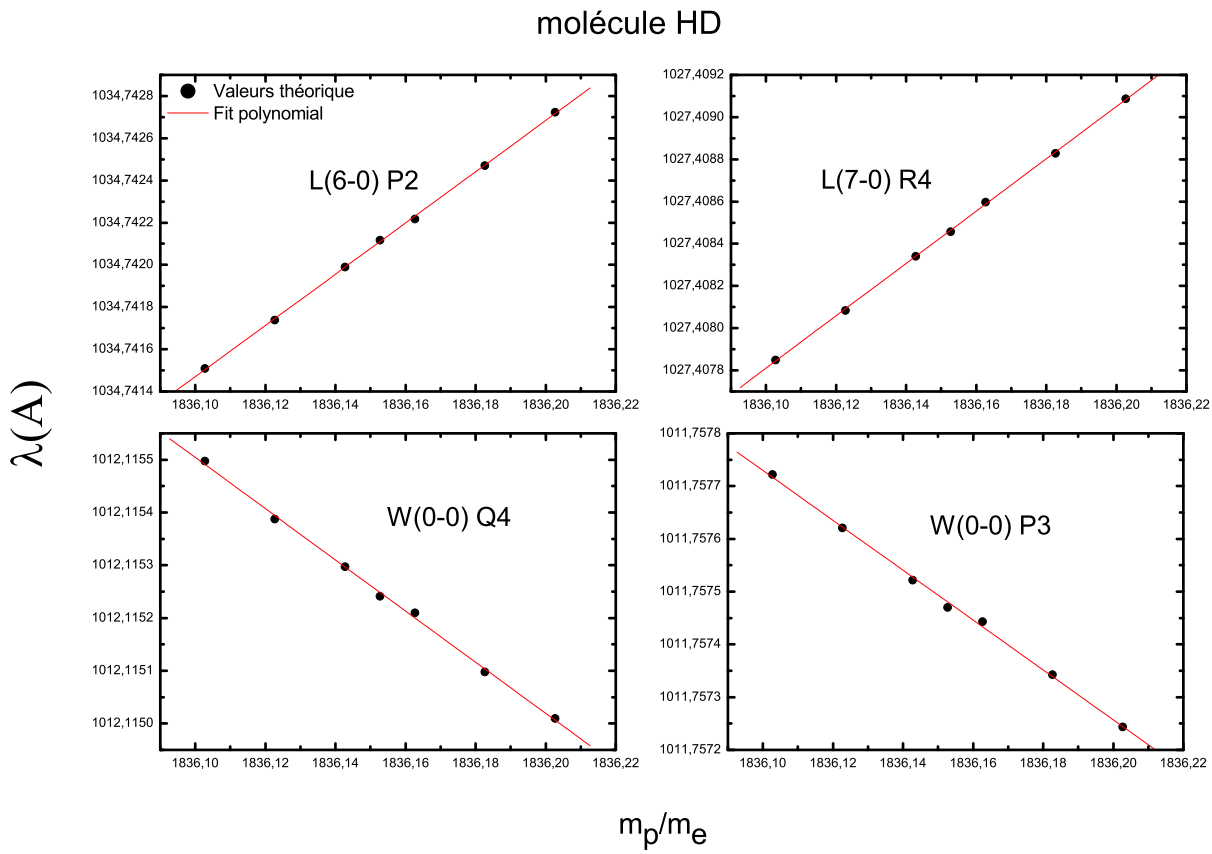


Figure 9.2 – *Variation de la longueur d'onde en fonction du rapport des masses m_p/m_e : détermination de la pente $d\lambda_i/d\mu$ pour la bande de Lyman (L(v'-v")) et de Werner (W(v'-v")) la molécule HD.*

$\mu = m_p/m_e$. Pour certaines longueurs d'onde de raies de H_2 présentées dans la Table 9.2, les coefficients de sensibilités ont été déjà calculés par la méthode semi-empirique et par le calcul théorique de Meshkov et al (94). Ici nous avons complété la liste des coefficients de sensibilités pour toutes les longueurs d'onde de raies mesurées au Centre Laser LCVU d'Amsterdam.

Dans la Table 9.2 nous trouvons : dans la première colonne l'attribution de la raie moléculaire labelée par L ou W pour désigner, respectivement, la bande de Lyman ou de Werner, suivie du nombre quantique vibrationnel de l'état excité, B ou C, et aussi de la branche R(J''), P(J'') ou Q(J''). Dans la deuxième et la troisième colonne sont présentés, respectivement, les résultats de calcul de la pente et de l'erreur correspondante. La quatrième et la cinquième colonnes donnent respectivement, le coefficient de sensibilités de chaque raie et l'erreur correspondante, et finalement on donne les valeurs des coefficients déterminés par la méthode semi-empirique du groupe d'Amsterdam (124).

Dans la Table 9.3 les premiers résultats des coefficients de sensibilité des raies pour la molécule HD sont présentées sous la même forme que pour la molécule H_2, sauf que la colonne des calculs semi-empirique n'existe pas. Les raies dont les longueur d'onde présentent de très petite variation

en fonction du rapport des masses $\mu = m_p/m_e$ sont indiquées par $^{(*)}$ dans les deux tableaux.

Sur la Figure 9.3 et la Figure 9.4, nous avons représenté les coefficients K_i *ab initio* en fonction des longueurs d'onde correspondantes pour les bandes de Lyman et de Werner, respectivement pour les molécules H_2 et HD. A partir de ces deux figures nous remarquons que pour les bandes de Ly-

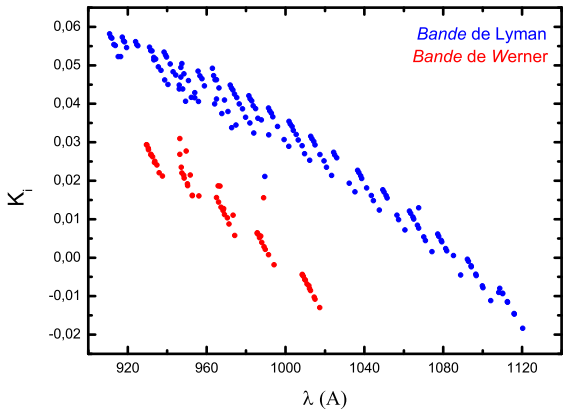


Figure 9.3 – *Variation du coefficient de sensibilité K_i de chaque raie des bandes de Lyman et de Werner de H_2 en fonction de la longueur d'onde λ_0 .*

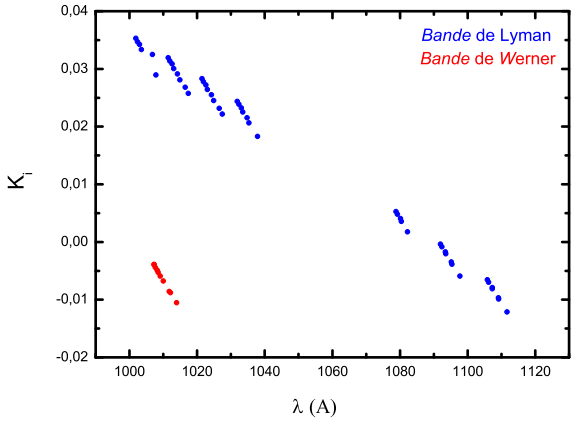


Figure 9.4 – *Variation du coefficient de sensibilité K_i de chaque raie des bandes de Lyman et de Werner de HD en fonction de la longueur d'onde λ_0 .*

man $B \rightarrow X$ et Werner $C \rightarrow X$, le coefficient de sensibilité d'une raie est autant plus grand que sa longueur d'onde est petite. De plus, nous avons trouvé que le coefficient de sensibilité peut avoir, au sein d'une même bande, des valeurs négatives et des valeurs positives. Ce changement de signe est lié au déplacement "isotopique" (lié à la variation de μ) des niveaux d'énergie. Ce déplacement est plus important pour les niveaux de l'état fondamental que pour les niveaux des états excités. De plus il augmente avec le nombre quantique v pour les niveaux ro-vibrationnels des états excités, ce qui explique les grandes valeurs de K_i pour les petites longueurs d'onde.

L'effet des corrections adiabatiques et des couplages non adiabatiques (radial et rotationnel) entres les états électroniques excités sur la valeur du coefficient de sensibilité est importante. Ceci est lié à l'influence de ces corrections sur la position des niveaux d'énergie des états excités (voir Chapitre III). Dans la Figure 9.5 et la Figure 9.6 on montre l'effet des interactions entre les états B et C sur les coefficients de sensibilité des raies R(0) dans les bandes de Lyman de H_2 et des R(1) des bandes de Werner de HD. Grâce à la résolution du système d'équations couplées pour les états B, C, B' et D, nous avons déterminé les coefficients de mélange pour les niveaux d'énergie perturbés (voir les pourcentages sur les figures). Si les couplages entres les états électroniques n'avaient pas été pris en compte dans nos calculs, les valeurs du coefficient de sensibilité de ces raies auraient été modifiées respectivement, de $\approx 50\%$ pour la raie R(0) de la bande de Lyman de H_2, et de $\approx 15\%$ pour la raie R(1) de la bande de Werner de HD.

Il est intéressant de signaler la présence d'un maximum dans la variation du coefficient de sensibilité en fonction du niveau vibrationnel de l'état électronique excité dans les deux figures (Figure 9.5 et Figure 9.6). Il est lié aux déplacements "isotopiques" différents des niveaux d'énergie supérieurs et inférieurs discutés ci-dessus. Pour les niveaux excités de grands nombres vibrationnels

proches de la limite de dissociation, le coefficient de sensibilité change de signe et tend vers la valeur correspondant à la transition atomique, c'est ce qui explique la diminution de la valeur du coefficient dans ces deux figures.

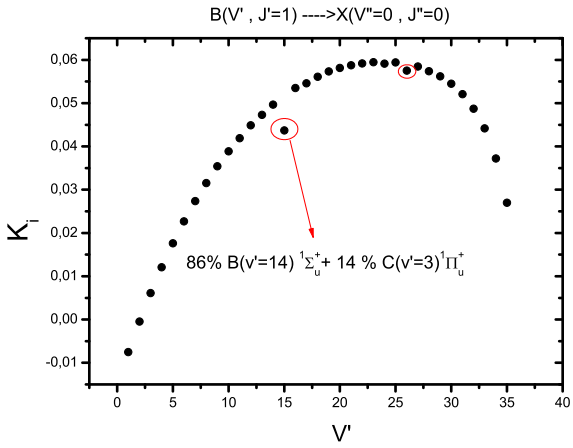


Figure 9.5 – *Variation du coefficient de sensibilité K_i de la raie R(0) dans les bandes de Lyman de H_2 en fonction du nombre vibrationnel v' de l'état excité B : l'effet des couplages non adiabatiques et des corrections adiabatiques sur la valeur du coefficient K_i.*

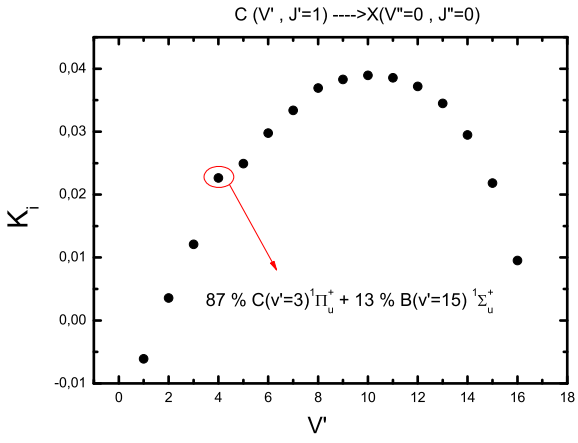


Figure 9.6 – *Variation du coefficient de sensibilité K_i de la raie R(1) dans les bandes de Werner de HD en fonction du nombre vibrationnel v' de l'état excité C : l'effet des couplages non adiabatiques et des corrections adiabatiques sur la valeur du coefficient K_i.*

La comparaison des coefficients de sensibilité obtenus pour les raies observées dans les quasars Q 0405 et Q 0347 pour H_2 par la méthode semi empirique $K_i(se)$ (124) et par la méthode quantique (94), montre un accord satisfaisant. En effet les plus grandes différences remarquées entres les deux résultats étaient de -2×10^{-4} et 4×10^{-4} dans l'intervalle K_i variant de -0.01 à 0.05. Ce qui correspond à une déviation de moins de 1 %.
A partir des résultats de nos calculs, la comparaison avec les résultats obtenus par la méthode semi empirique (124) (voir la Table 9.2 pour la molécule H_2) donne en général un accord satisfaisant. En revanche, pour les coefficients de sensibilité de très faibles valeurs, la différence avec les valeurs de $K_i(se)$ est très grande. En éliminant ces coefficients de la comparaison, la différence maximum entre nos résultats de calculs et les résultats semi-empiriques est de -9×10^{-4} et 9×10^{-4} dans la gamme de K_i variant de -0.02 à 0.06. Ce qui donne une déviation variante de 1.5 % à 4.5 %. Ce qui signifie que les deux résultats sont très proches pour les grandes longueurs d'onde alors qu'ils sont un peu différents pour les petites longueurs d'onde.
Pour la molécules HD, nous remarquons que les premiers résultats sur les coefficients de sensibilités des raies sont du même ordre de grandeur que les résultats obtenus pour la molécule H_2. Des valeurs plus proches de la réalité seront calculées ultérieurement par la méthode semi-empirique. Cependant, nous pouvons supposer que la déviation entre les résultats de ces deux calculs sera légèrement supérieure à la déviation dans le cas de H_2. Ceci peut être lié aux effets des états de Rydberg sur les niveaux d'énergie des états B et C, mais aussi à l'effet de la brisure de symétrie $g - u$ dans HD. Néanmoins, nos résultats de calcul des coefficients de sensibilité de raies de HD sont toujours nécessaires en prévision d'une détermination de la possible variation cosmologique du rapport μ à partir des longueurs d'onde de raies de HD qui sont récemment observées dans les spectres d'absorption

de quasars.

9.4 Observation de H_2 et de HD : détermination de la variation relative $\Delta\mu/\mu$

Carlson (136) et Aaronson et al (137) ont évoqué la possibilité de détecter des raies de H_2 dans des sites à grand déplacement vers le rouge z, il y a déjà trois décennies. Cependant l'identification des raies rotationnelles de la molécule d'hydrogène observées dans ces sites restait incertaine. En 1985, Levshakov et Varshalovich (141) ont assigné quelques raies d'absorption de H_2 des bandes de Lyman et de Werner dans les spectres obtenus par Morton et al (138) dans la direction du quasar PKS 0528-250 (désigné aussi par Q 0528-250). Des spectres similaires ont été enregistrés par Foltz et al (139). Pour Varshalovich et Levshakov (140), ces données constituent une base pour l'étude de la possible variation de μ. Plus tard Cowie et Songaila ont enregistré le spectre de ce quasar avec une meilleure résolution (142), puis Potekhin et al (129) ont amélioré la précision des données sur ce quasar à l'aide du télescope CTIO, ce qui leur a permis de mieux étudier la possible variation de μ. D'autres observations de raies de H_2 à grand z sont présentées par Ge et Bechtold (143) dans le système Q 0013-004 à $z = 1.97$, par Reimers et al (144) dans le système Q 0515-441 à $z = 1.15$, et par Cui et al (145) dans le système Q 1331+170 à $z = 1.78$. Les observations par l'instrument VLT/UVES, télescope terrestre basé au Chili, permet la détection H_2 dans les quasars Q 0347-383, Q 1232+082 (146; 147) et dans le système Q 0551-336 (148). Les premières observations de H_2 sont rapportées pour le quasar Q 0841+129 (149) et dans Q 0000-263 (150). Récemment Petitjean et al (151) ont observé les systèmes Q 2343+125 et Q2348-011, alors que Ledoux et al (152) ont observé les raies de H_2 dans une source caractérisée par le plus grand déplacement vers le rouge observé jusqu'ici ($z = 4.22$). Des nouvelles observations démontrent que le nombre de nuages à grand z et avec une forte absorption de H_2 augmente rapidement. Ceci nous permettra à travers les données spectroscopiques de haute résolution obtenues à partir de ces sites d'avoir plus d'information sur la possible variation cosmologique de μ.

Jusqu'à présent, les mesures les plus précises des raies d'absorption de H_2 observées à grand z sont obtenues par Petitjean et al (153) et Ivanchik et al (125) pour les systèmes Q 0347-383 et Q 0405-443. Ils ont observé un total de 82 raies avec le spectrographe UVES (UV-Visual Echelle Spectrograph) du télescope VLT (Very Large Telescop) de l'observatoire européen ESO avec une résolution de R = 53 000 et un rapport signal/bruit de 30-70, dans la gamme de longueurs d'onde 3290-4510 Å. Récemment Varshalovich et al (154) ont réussi à identifier quelques raies R(0) dans les bandes de Lyman [L5-0, L4-0, L3-0, L2-0 et L0-0] de la molécule HD dans le quasar PKS 1232+082 à z=2.3377. Cette observation est devenue possible grâce à l'utilisation du spectrographe UVES monté sur le télescope 8.2-m VLT de l'ESO.

A partir des raies de H_2 observées pour chaque système absorbant correspondant à un quasar, la comparaison de leurs longueurs d'onde λavec leurs équivalentes mesurées en laboratoire λ_i^o permet de calculer une variation relative du rapport de masse $\Delta\mu/\mu$, en utilisant la formule donnée par l'équation 9.5. Une regression linéaire des déplacements vers le rouge z_i des raies individuelles d'un même système d'absorption devrait conduire à la détermination de z_{abs} et de $\Delta\mu/\mu$, avec une erreur statistique.

L'étude entreprise par Ivanchik et al (146) avait amené à une estimation sur la possible variation de μ depuis 10 .10^9 ans, qui est de l'ordre de : $\Delta\mu/\mu = (3.05 \pm 0.75) \times 10^{-5}$. Ce résultat était obtenu en utilisant les données sur les bandes de Lyman et de Werner du groupe de Meudon (79; 80). En

revanche, en utilisant les mesures à très haute précision par spectroscopie laser de Philip et al (66), cette valeur a été nettement améliorée $\Delta\mu/\mu = (1.65 \pm 0.74) \times 10^{-5}$. En combinant les mesures par spectroscopie laser de longueurs d'onde λ_i^o et les nouvelles données d'observation des quasars Q0347-383 et Q0405-443 (146) comportant 76 raies des bandes de Lyman et de Werner, Ubachs et al (124) ont déterminé une valeur améliorée de la variation relative de μ. L'ajustement des données spectroscopiques séparément pour chaque système absorbant de quasar conduit à une valeur de $\Delta\mu/\mu = (2.06 \pm 0.79) \times 10^{-5}$ pour le quasar Q 0347-383 et une valeur de $\Delta\mu/\mu = (2.78 \pm 0.88) \times 10^{-5}$ pour le quasar Q 0405-443.

En réalité, le déplacement vers le rouge z_i d'une raie observée est mesurée avec une erreur déterminée par les erreurs statistiques des mesures astrophysiques de λ_i et les incertitude de mesure de laboratoire de λ_i^o. Pour avoir une bonne signification statistique et une meilleure précision sur la variation relative de μ, on peut utiliser un ajustement de l'ensemble des données provenant de différents systèmes absorbants. Pour cela, on peut définir un déplacement vers le rouge réduit pour chaque raie ξ_i par :

$$\xi_i = \frac{z_i - z_{abs}}{1 + z_{abs}} = \frac{\Delta\mu}{\mu} K_i \tag{9.18}$$

Un seul ajustement incluant toutes les données peut alors s'effectuer sur les ξ_i portés comme une fonction de K_i. Un tel ajustement incluant les 76 raies observées dans les systèmes des quasars Q0347-383 et Q0405-443 (146) a été réalisé par Ubachs et al (124) utilisant les coefficients K_i calculés par la méthode semi-empirique (Voir Figure 9.7). La nouvelle valeur de la variation relative de μ obtenue par un ajustement pondéré est de $\Delta\mu/\mu = (2.45 \pm 0.59) \times 10^{-5}$, alors que la valeur obtenue par un ajustement simple (non pondéré) est de $\Delta\mu/\mu = (1.99 \pm 0.58) \times 10^{-5}$. Ce qui signifie que le rapport des masses proton-électron a probablement diminué dans le temps avec un pourcentage de 0.002 %. A partir de nos propres résultats théoriques des coefficients de sensibilité K_i, calculés par

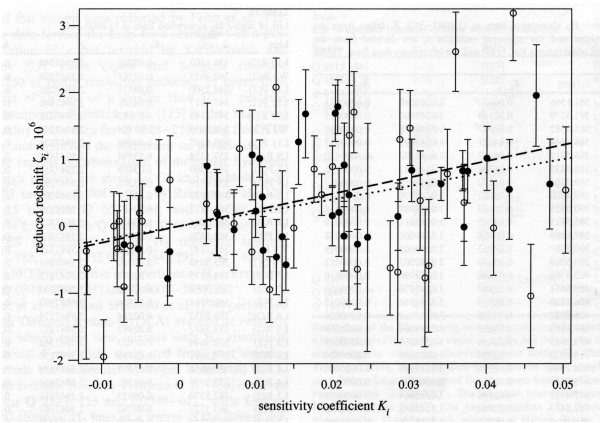


Figure 9.7 – *Ajustement des valeurs du déplacement vers le rouge réduit ξ comme fonction linéaire des coefficients de sensibilité K_i. Cercles fermés : données du système de quasar Q 0347-383, z = 3.0248970(5). Cercles ouverts : données du système de quasar Q0405-443, z = 2.594732 5(4). L'interpolation pondérée est donné par le trait plein, et l'interpolation non pondérée est donnée par le trait en pointillés (124).*

résolution des équations couplées et utilisant les données *ab initio*, nous avons ajusté les nouvelles données d'observation des quasars Q0347-383 et Q0405-443, nous avons calculé la valeur de la variation relative du rapport des masses $\Delta\mu/\mu$. Nous avons trouvé la valeur $\Delta\mu/\mu = (2.39 \pm 0.59) \times 10^{-5}$ par un ajustement pondéré, et une valeur de $\Delta\mu/\mu = (1.99 \pm 0.58) \times 10^{-5}$ par un ajustement non

pondéré (124).

Alors que le résultat du rapport de masse $\Delta\mu/\mu$ montre une même variation en utilisant les coefficients de sensibilités K_i obtenus à partir de calculs semi-empiriques ou à partir de calculs théoriques, une amélioration de la valeur $\Delta\mu/\mu$ est possible si d'autres spectres de quasar avec des raies d'absorption de H_2 sont observés. Une possible adjonction des données de H_2 et de HD pourra également améliorer la valeur de $\Delta\mu/\mu$.

Table 9.2 – *Les coefficients de sensibilités de raies des bandes de Lyman " L" et de Werner "W" de H_2.*

Line	$d\lambda/d\mu$ [a]	$\Delta(d\lambda/d\mu)$ [b]	K_i [c] (*ab initio*)	ΔK_i [d] (*ab initio*)	$K_i(se)$ [e]
L0 P(1)	-0.005600	0.0000826	-0.009263	0.000137	-0.009738
L0 P(2)	-0.006930	0.0000813	-0,011438	0.000134	-0.011909
L0 P(3)	-0.008810	0.0000797	-0.014496	0.000131	-0.014920
L0 P(4)	-0.011190	0.0000857	-0.018341	0.000140	-0.018720
L0 R(0)	-0.005430	0.0000858	-0.008997	0.000142	-0.008003
L0 R(1)	-0.004810	0.0000904	-0.007966	0.000150	-0.008462
L0 R(2)	-0.005650	0.0000806	-0.009345	0.000133	-0.009800
L0 R(3)	-0.007030	0.0000776	-0.011602	0.000128	-0.012015
L0 R(4)	-0.008910	0.0000837	-0.014659	0.000138	-0.015070
L1 P(1)	-0,001250	0.0000793	-0,002098	0.000133	-0.002592
L1 P(2)	-0.002550	0.0000794	-0.004270	0.000133	-0.004746
L1 P(3)	-0.004390	0.0000842	-0.007329	0.000141	-0.007747
L1 P(4)	-0.006710	0.00008305	-0.011159	0.000138	-0.011560
L1 R(0)*	-0.000244	0.0000760	-0.000411	0.000127	-0.000920
L1 R(1)	-0.000560	0.0000798	-0.000940	0.000134	-0.001431
L1 R(2)	-0.001400	0.0000792	-0.002349	0.000133	-0.002830
L1 R(3)	-0.002790	0.0000778	-0.004671	0.000130	-0.005094
L1 R(4)	-0.004670	0.0000827	-0.007794	0.000138	-0.008210
L2 P(1)	0.002650	0.0000785	0.004510	0.000134	0.003970
L2 P(2)	0.001390	0.0000786	0.002360	0.000133	0.001840
L2 P(3)*	-0.000405	0.0000735	-0.000686	0.0001244	-0.000115
L2 P(4)	-0.002680	0.0000797	-0.004520	0.000134	-0.004950
L2 R(0)	0.003600	0.0000752	0.006137	0.000128	0.005580
L2 R(1)	0.003270	0.0000755	0.005571	0.000129	0.005037
L2 R(2)	0.002420	0.0000782	0.004117	0.000133	0.003601
L2 R(3)	0.001060	0.0000581	0.001799	0.000099	0.001300
L2 R(4)*	0.000347	0.000325	0.000586	0.000550	-0.001850
L3 P(1)	0.006130	0.0000745	0.010573	0.000129	0.010009
L3 P(2)	0.004900	0.0000743	0.008433	0.000128	0.007895
L3 P(3)	0.003160	0.0000751	0.005422	0.000128	0.004926
L3 P(4)	0.000933	0.0000748	0.001594	0.000128	0.001140
L3 R(0)	0.007030	0.0000716	0.012145	0.000124	0.011570
L3 R(1)	0.006690	0.0000743	0.011551	0.000128	0.010992
L3 R(2)	0.005830	0.0000728	0.010052	0.000125	0.009525
L3 R(3)	0.004460	0.0000749	0.007672	0.000129	0.007188
L3 R(4)	0.002600	0.0000770	0.004458	0.000132	0.004020
L4 P(1)	0.009240	0.0000749	0.016142	0.000131	0.015556
L4 P(2)	0.008050	0.0000736	0.014033	0.000128	0.013460
L4 P(3)	0.006350	0.0000725	0.011036	0.000126	0.010512
L4 P(4)	0.004170	0.0000778	0.007219	0.000135	0.006740
L4 R(0)	0.010100	0.0000703	0.017673	0.000123	0.017070
L4 R(1)	0.009750	0.0000744	0.017051	0.000130	0.016467
L4 R(2)	0.008900	0.0000740	0.015541	0.000129	0.014974
L4 R(3)	0.007530	0.0000706	0.012952	0.000121	0.012612
L4 R(4)	0.005690	0.0000741	0.009881	0.000129	0.009420
L5 P(1)	0.120200	0.0000696	0.212595	0.000123	0.020644
L5 P(3)	0.009200	0.0000681	0.016188	0.000120	0.015640

[a] la pente de la variation de la longueur d'onde en fonction de la masse μ.
[b] l'erreur correspondante sur la valeur de la pente.
[c] le coefficient de sensibilité calculé pour chaque raie par la méthode théorique .
[d] l'erreur sur la valeur du coefficient de sensibilité.
[e] le coefficient de sensibilité calculé pour chaque raie par la méthode semi-empirique.

Table 9.2 continue.

Line	$d\lambda/d\mu$	$\Delta(d\lambda/d\mu)$	$K_i(ab\ initio)$	$\Delta K_i(ab\ initio)$	$K_i(se)$
L5 P(4)	0.007070	0.0000738	0.012392	0.000129	0.011890
L5 R(0)	0.012830	0.0000689	0.022727	0.000122	0.022110
L5 R(1)	0.012490	0.0000716	0.022112	0.000127	0.021488
L5 R(2)	0.011630	0.0000705	0.020559	0.000125	0.019972
L5 R(3)	0.010270	0.0000662	0.018112	0.000117	0.017588
L5 R(4)	0.008440	0.0000730	0.014836	0.000128	0.014370
L6 P(1)	0.014500	0.0000683	0.025951	0.000122	0.025300
L6 P(2)	0.013360	0.0000696	0.023861	0.000124	0.023240
L6 P(3)	0.011730	0.0000675	0.020887	0.000120	0.020330
L6 P(4)	0.009640	0.0000730	0.017099	0.000129	0.016590
L6 R(0)	0.015280	0.00006825	0.027389	0.000122	0.026720
L6 R(1)	0.014920	0.0000699	0.026728	0.000125	0.026080
L6 R(2)	0.014050	0.0000679	0.025131	0.000121	0.024540
L6 R(3)	0.012720	0.0000682	0.022698	0.000121	0.022140
L6 R(4)	0.010900	0.0000709	0.019387	0.000126	0.018910
L7 P(1)	0.016690	0.0000683	0.030213	0.000124	0.029540
L7 P(2)	0.015570	0.0000652	0.028126	0.000118	0.027500
L7 P(3)	0.013980	0.0000656	0.025179	0.000118	0.024600
L7 P(4)	0.011920	0.0000696	0.021386	0.000125	0.020890
L7 R(0)	0.017420	0.0000655	0.031581	0.000119	0.030930
L7 R(1)	0.017060	0.0000685	0.030910	0.000124	0.030268
L7 R(2)	0.016200	0.0000679	0.029307	0.000123	0.028714
L7 R(3)	0.014860	0.0000673	0.026818	0.000122	0.026290
L7 R(4)	0.013080	0.0000720	0.023529	0.000129	0.023040
L8 P(1)	0.018630	0.0000660	0.034096	0.000121	0.033390
L8 P(2)	0.017540	0.0000657	0.032034	0.000120	0.031374
L8 P(3)	0.015980	0.0000658	0.029098	0.000120	0.028494
L8 P(4)	0.013970	0.0000710	0.025341	0.000129	0.024790
L8 R(0)	0.019340	0.0000640	0.035447	0.000117	0.034750
L8 R(1)	0.018970	0.0000661	0.034747	0.000121	0.034075
L8 R(2)	0.018110	0.0000676	0.033121	0.000124	0.032505
L8 R(3)	0.016770	0.0000695	0.030596	0.000127	0.030032
L8 R(4)	0.014850	0.0000625	0.027005	0.000114	0.026650
L9 P(1)	0.020330	0.0000650	0.037600	0.000120	0.036889
L9 P(2)	0.019250	0.0000439	0.035529	0.000081	0.034890
L9 P(3)	0.01770	0.0000539	0.032571	0.000099	0.032020
L9 P(4)	0.015780	0.0000694	0.028927	0.000127	0.028340
L9 R(0)	0.021010	0.0000415	0.038914	0.000077	0.038220
L9 R(1)	0.020610	0.0000558	0.038148	0.000103	0.037526
L9 R(2)	0.019800	0.0000629	0.036592	0.000116	0.035944
L9 R(3)	0.018490	0.0000680	0.034088	0.000125	0.033500
L9 R(4)	0.016700	0.0000677	0.030687	0.000124	0.030220
L10 P(1)	0.021820	0.0000653	0.040765	0.000122	0.040049
L10 P(2)	0.020780	0.0000680	0.038742	0.000127	0.038060
L10 P(3)	0.019260	0.0000698	0.035803	0.000130	0.035160
L10 P(4)	0.017240	0.0000742	0.031926	0.000137	0.031380
L10 R(0)	0.022490	0.0000669	0.042077	0.000125	0.041350
L10 R(1)	0.022090	0.0000723	0.041302	0.000135	0.040590
L10 R(2)	0.021150	0.0000737	0.039483	0.000138	0.038880
L10 R(3)	0.019470	0.0000680	0.036259	0.000127	0.035590
L10 R(4)	0.011380	0.0000671	0.021116	0.000125	0.020680

Table 9.2 continue.

Line	$d\lambda/d\mu$	$\Delta(d\lambda/d\mu)$	$K_i(ab\ initio)$	$\Delta K_i(ab\ initio$	$K_i(se)$
L11 P(1)	0.023120	0.0000537	0.043615	0.000101	0.042900
L11 P(2)	0.022110	0.0000699	0.041624	0.000132	0.040923
L11 P(3)	0.020620	0.0000752	0.038705	0.000141	0.038090
L11 P(4)	0.018730	0.0000603	0.035024	0.000113	0.034450
L11 R(0)	0.023760	0.0000702	0.044885	0.000133	0.044170
L11 R(1)	0.023380	0.0000760	0.044138	0.000143	0.043450
L11 R(2)	0.022550	0.0000591	0.042504	0.000111	0.041850
L11 R(3)	0.021260	0.0000602	0.039974	0.000113	0.039390
L11 R(4)	0.019480	0.0000727	0.036506	0.000136	0.036100
L11 R(5)	0.017370	0.0000544	0.032416	0.000102	
L12 P(1)	0.024290	0.0000564	0.046252	0.000107	0.045450
L12 P(2)	0.023220	0.0000721	0.044124	0.000137	0.043393
L12 P(3)	0.021620	0.0000651	0.040964	0.000123	0.040220
L12 P(4)	0.017910	0.0000739	0.033809	0.000139	0.033060
L12 R(0)	0.024840	0.0000709	0.047333	0.000135	0.046610
L12 R(1)	0.024310	0.0000672	0.046254	0.000128	0.045520
L12 R(2)	0.021670	0.0000719	0.041231	0.000137	0.040410
L12 R(3)	0.019740	0.0000730	0.037457	0.000139	0.037074
L12 R(4)	0.020090	0.0000823	0.037997	0.000156	0.037420
L12 R(5)	0.018300	0.0000632	0.034468	0.000119	
L13 P(1)	0.025230	0.0000601	0.048474	0.000115	0.047720
L13 P(2)	0.024250	0.0000739	0.046496	0.000142	0.045773
L13 P(3)	0.022860	0.0000622	0.043704	0.000119	0.042970
L13 P(4)	0.020980	0.0000563	0.039958	0.000107	0.039360
L13 R(0)	0.025830	0.0000718	0.049252	0.000137	0.048940
L13 R(1)	0.025490	0.0000618	0.049425	0.000120	0.048209
L13 R(2)	0.024620	0.0000534	0.047259	0.000103	0.046590
L13 R(3)	0.023330	0.0000695	0.044672	0.000133	0.044120
L13 R(4)	0.021600	0.0000510	0.041574	0.000098	0.040830
L14 P(1)	0.026040	0.0000690	0.050463	0.000134	0.049720
L14 P(2)	0.021020	0.0000583	0.040655	0.000113	0.039310
L14 P(3)	0.021600	0.0000754	0.041649	0.000145	0.041050
L14 P(4)	0.021130	0.0000408	0.040590	0.000078	0.039990
L14 R(0)	0.022590	0.0000561	0.043839	0.000109	0.042470
L14 R(1)	0.024200	0.0000768	0.046923	0.000149	0.046399
L14 R(2)	0.024700	0.0000396	0.047818	0.000077	0.047150
L14 R(3)	0.023830	0.0000542	0.046020	0.000105	0.045300
L14 R(4)	0.022300	0.0000552	0.042921	0.000106	0.042270
L15 P(1)	0.026700	0.0000708	0.052172	0.000138	0.051470
L15 P(2)	0.025810	0.0000567	0.050331	0.000111	0.049540
L15 P(3)	0.024420	0.0000488	0.047483	0.000095	0.046760
L15 P(4)	0.022640	0.0000631	0.043857	0.000122	0.043170
L15 R(0)	0.027320	0.0000579	0.053454	0.000113	0.052650
L15 R(1)	0.026940	0.0000515	0.052673	0.000101	0.051890
L15 R(2)	0.026130	0.0000601	0.051412	0.000118	0.050249
L15 R(3)	0.024810	0.0000553	0.048311	0.000108	0.047760
L15 R(4)	0.023130	0.0000803	0.044889	0.000156	0.044480
L16 P(1)	0.027310	0.0000628	0.053790	0.000124	0.052970
L16 P(2)	0.026260	0.0000687	0.051618	0.000135	0.050850

Table 9.2 continue.

Line	$d\lambda/d\mu$	$\Delta(d\lambda/d\mu)$	$K_i(ab\ initio)$	$\Delta K_i(ab\ initio)$	$K_i(se)$
L16 P(3)	0.024850	0.0000679	0.048705	0.000133	0.047920
L16 P(4)	0.023050	0.0000464	0.045007	0.000091	0.044290
L16 R(0)	0.027740	0.0000653	0.054707	0.000129	0.053920
L16 R(1)	0.027320	0.0000701	0.053840	0.000138	0.053000
L16 R(2)	0.026470	0.0000453	0.052081	0.000089	0.051310
L16 R(3)	0.025270	0.0000604	0.049596	0.000119	0.048830
L16 R(4)	0.023620	0.0000521	0.046202	0.000102	0.045570
L17 P(1)	0.027750	0.0000615	0.055075	0.000122	
L17 R(0)	0.028270	0.0000669	0.056180	0.000133	
L17 R(1)	0.027890	0.0000568	0.055385	0.000113	
L18 P(1)	0.028050	0.0000675	0.056080	0.000135	
L18 R(0)	0.028650	0.0000466	0.057353	0.000093	
L18 R(1)	0.028190	0.0000581	0.056391	0.000116	
L18 R(2)	0.027340	0.0000548	0.054601	0.000109	
L19 P(1)	0.028330	0.0000543	0.057041	0.000109	
L19 P(2)	0.027440	0.0000625	0.055140	0.000126	
L19 P(3)	0.026100	0.0000662	0.052297	0.000133	
L19 R(0)	0.028850	0.0000594	0.058161	0.000120	
L19 R(1)	0.028450	0.0000672	0.057313	0.000135	
L19 R(2)	0.027550	0.0000548	0.055410	0.000110	
L19 R(3)	0.026050	0.0000385	0.052264	0.000077	
W0 P(2)	-0.004430	0.0000708	-0.008036	0.000128	-0.083100
W0 P(3)	-0.005670	0.0000703	-0.010262	0.000127	-0.010560
W0 P(4)	-0.007190	0.0000713	-0.012976	0.000129	-0.013310
W0 Q(1)	-0.003130	0.0000685	-0.005692	0.000125	-0.059600
W0 Q(2)	-0.003770	0.0000693	-0.006847	0.000126	-0.007098
W0 Q(3)	-0.004720	0.0000684	-0.008558	0.000124	-0.008780
W0 Q(4)	-0.005960	0.0000710	-0.010782	0.000128	-0.010980
W0 R(0)	-0.002450	0.0000710	-0.004460	0.000129	-0.004770
W0 R(1)	-0.002390	0.0000705	-0.004351	0.000128	-0.004720
W0 R(2)	-0.002640	0.0000689	-0.004804	0.000125	-0.005246
W0 R(3)	-0.003210	0.0000701	-0.005835	0.000127	-0.006305
W0 R(4)	-0.004000	0.0000736	-0.007259	0.000134	-0.007820
W1 P(2)	0.001550	0.0000680	0.002877	0.000126	0.002600
W1 P(3)*	0.000421	0.0000601	0.000779	0.000111	0.000390
W1 P(4)	-0.000993	0.0000799	-0.001834	0.000148	-0.002280
W1 Q(1)	0.002780	0.0000656	0.005173	0.000122	0.004870
W1 Q(2)	0.002140	0.0000685	0.003977	0.000127	0.003675
W1 Q(3)	0.001150	0.0000672	0.002133	0.000125	0.001910
W1 R(0)	0.003400	0.0000697	0.006334	0.000130	0.006020
W1 R(1)	0.003480	0.0000586	0.006483	0.000109	0.006040
W1 R(2)	0.003250	0.0000809	0.006051	0.000151	0.005510
W1 R(3)	0.003020	0.0000822	0.005616	0.000153	0.005120
W1 R(4)	0.008390	0.0000439	0.015579	0.000082	0.014940
W2 P(2)	0.006480	0.0000679	0.012288	0.000129	0.011854
W2 P(3)	0.005490	0.0000608	0.010386	0.000115	0.009920
W2 P(4)	0.005860	0.0000673	0.011053	0.000127	0.010620

Table 9.2 fin.

Line	$d\lambda/d\mu$	$\Delta(d\lambda/d\mu)$	$K_i(ab\ initio)$	$\Delta K_i(ab\ initio)$	$K_i(se)$
W2 Q(1)	0.007600	0.0000722	0.014444	0.000137	0.013963
W2 Q(2)	0.006910	0.0000599	0.013117	0.000114	0.012718
W2 Q(3)	0.005920	0.0000648	0.011217	0.000123	0.010875
W2 Q(4)	0.004640	0.0000744	0.008771	0.000141	0.008460
W2 Q(5)	0.003080	0.0000673	0.005805	0.000127	
W2 R(0)	0.008220	0.0000729	0.015641	0.000139	0.015160
W2 R(1)	0.008370	0.0000611	0.016075	0.000117	0.015400
W2 R(2)	0.009820	0.0000662	0.018670	0.000126	0.018150
W2 R(3)	0.009810	0.0000583	0.018632	0.000111	0.017898
W2 R(4)	0.006720	0.0000779	0.012738	0.000148	0.012030
W3 P(2)	0.014350	0.0000666	0.027747	0.000129	0.027820
W3 P(3)	0.011150	0.0000619	0.021513	0.000120	0.020821
W3 P(4)	0.008360	0.0000643	0.016111	0.000124	0.015520
W3 Q(1)	0.011360	0.0000555	0.022016	0.000108	0.021492
W3 Q(2)	0.010680	0.0000722	0.020672	0.000140	0.020200
W3 Q(3)	0.009700	0.0000586	0.018740	0.000113	0.018280
W3 Q(4)	0.008410	0.0000680	0.016208	0.000131	0.015760
W3 R(0)	0.015970	0.0000670	0.030983	0.000130	0.031030
W3 R(1)	0.013850	0.0000603	0.026871	0.000117	0.026280
W3 R(2)	0.012130	0.0000626	0.023516	0.000121	0.022740
W3 R(3)	0.011060	0.0000595	0.021412	0.000115	0.020710
W3 R(4)	0.009930	0.0000627	0.019186	0.000121	0.018290
W4 P(2)	0.013320	0.0000505	0.026225	0.000099	0.025690
W4 P(3)	0.012260	0.0000622	0.024082	0.000122	0.023500
W4 P(4)	0.010830	0.0000620	0.021210	0.000121	0.020580
W4 Q(1)	0.014220	0.0000506	0.028058	0.000100	0.027580
W4 Q(2)	0.013560	0.0000687	0.026721	0.000135	0.026240
W4 Q(3)	0.012580	0.0000557	0.024742	0.000110	0.024240
W4 Q(4)	0.011260	0.0000504	0.022090	0.000099	0.021620
W4 R(0)	0.014880	0.0000563	0.029393	0.000111	0.028850
W4 R(1)	0.014850	0.0000634	0.029329	0.000125	0.028700
W4 R(2)	0.014430	0.0000639	0.028476	0.000126	0.027760
W4 R(3)	0.013630	0.0000588	0.026858	0.000116	0.026090
W4 R(4)	0.012740	0.0000610	0.025051	0.000120	0.023760

Table 9.3 – *Les coefficients de sensibilités de raies des bandes de Lyman " L" et de Werner "W" de HD.*

Line	$d\lambda/d\mu$ [a]	$\Delta(d\lambda/d\mu)$ [b]	K_i [c] (*ab initio*)	ΔK_i [d] (*ab initio*)
L9 R(0)	0.019260	0.0000515	0.035298	0.000094
L9 R(1)	0.018950	0.0000827	0.034714	0.000151
L9 P(1)	0.018710	0.0000881	0.034252	0.000161
L9 R(2)	0.018240	0.0000959	0.033375	0.000176
L9 P(3)	0.017820	0.0001000	0.032499	0.000183
W0 R(1)	-0.002130	0.0000910	-0.003883	0.000166
W0 R(0)	-0.002140	0.0000613	-0.003901	0.000112
W0 R(2)	-0.002420	0.0000940	-0.004410	0.000171
L9 R(4)	0.015890	0.0000868	0.028951	0.000158
W0 Q(1)	-0.002670	0.0000876	-0.004863	0.000160
W0 R(3)	-0.002900	0.0000890	-0.005280	0.000162
W0 Q(2)	-0.003240	0.0000970	-0.005896	0.000176
W0 P(2)	-0.003720	0.0000933	-0.006763	0.000170
L8 R(0)	0.017590	0.0000524	0.031933	0.000095
W0 P(3)	-0.004720	0.0000896	-0.008566	0.000163
L8 R(1)	0.017290	0.0000843	0.031374	0.000153
W0 Q(4)	-0.004850	0.0000895	-0.008799	0.000162
L8 P(1)	0.017020	0.0000890	0.030863	0.000161
L8 R(2)	0.016590	0.0000982	0.030069	0.000178
W0 P(4)	-0.005800	0.0000874	-0.010503	0.000158
L8 P(2)	0.016100	0.0000934	0.029149	0.000169
L8 R(3)	0.015530	0.0000921	0.028097	0.000167
L8 P(3)	0.014860	0.0000898	0.026844	0.000162
L8 R(4)	0.014270	0.0000828	0.025754	0.000149
L7 R(0)	0.015750	0.0000571	0.028313	0.000103
L7 R(1)	0.015460	0.0000898	0.027779	0.000161
L7 P(1)	0.015160	0.0000948	0.027221	0.000170
L7 R(2)	0.014730	0.0000969	0.026437	0.000174
L7 P(2)	0.014230	0.0000947	0.025510	0.000170
L7 R(3)	0.013690	0.0000888	0.024527	0.000159
L7 P(3)	0.012960	0.0000953	0.023181	0.000171
L7 R(4)	0.012400	0.0000931	0.022161	0.000166
L6 R(0)	0.013710	0.0000529	0.024396	0.000094
L6 R(1)	0.013430	0.0000956	0.023887	0.000170
L6 P(1)	0.013080	0.0000885	0.023248	0.000157
L6 R(2)	0.012690	0.0000942	0.022546	0.000167
L6 P(2)	0.012140	0.0001020	0.021543	0.000182
L6 R(3)	0.011640	0.0000925	0.020643	0.000164
L6 R(4)	0.010350	0.0000939	0.018311	0.000166
L0 R(0)	-0.003940	0.0000714	-0.006542	0.000119
L0 R(1)	-0.004190	0.0001100	-0.006955	0.000182
L0 R(2)	-0.004890	0.0001090	-0.008109	0.000180
L0 R(3)	-0.005960	0.0001140	-0.009867	0.000189
L1 R(0)*	-0.000228	0.0000697	-0.000384	0.000117
L1 R(1)*	-0.000498	0.0001040	-0.000837	0.000174
L1 R(2)	-0.001210	0.0001150	-0.002032	0.000193
L1 R(3)	-0.002290	0.0001050	-0.003839	0.000176

[a] la pente de la variation de la longueur d'onde en fonction de la masse μ.M[b] l'erreur correspondante sur la valeur de la pente.
[c] le coefficient de sensibilité calculé pour chaque raie par la méthode théorique .
[d] l'erreur sur la valeur du coefficient de sensibilité.

Table 9.3 fin.

Line	$d\lambda/d\mu$	$\Delta(d\lambda/d\mu)$	$K_i(ab\ initio)$	$\Delta K_i(ab\ initio)$
L2 R(0)	0.003100	0.000070	0.005276	0.000119
L2 R(1)	0.002840	0.000104	0.004832	0.000177
L2 R(2)	0.002110	0.000112	0.003586	0.000191
L2 R(3)	0.001030	0.000108	0.001748	0.000183
L0 P(1)	-0.004760	0.000113	-0.007893	0.000188
L0 P(2)	-0.005850	0.000114	-0.009685	0.000189
L0 P(3)	-0.007330	0.000108	-0.012107	0.000179
L1 P(1)	-0.001030	0.0000956	-0.001730	0.000161
L1 P(2)	-0.002070	0.000115	-0.003471	0.000193
L1 P(3)	-0.003520	0.0000992	-0.005888	0.000166
L2 P(1)	0.002390	0.000101	0.004063	0.000171

Chapitre 10

Etude du satellite quasi-moléculaire de la raie Lymanβ dû à la collision H-H

Dans les parties précédentes nous avons étudié les spectres d'émission et d'absorption des molécules D_2 et HD enregistrés en laboratoire. Les raies moléculaires de ces spectres correspondent à des transitions entres les niveaux liés des états électroniques excités et les niveaux d'énergie liés de l'état électronique fondamental. Ces transitions d'états liés à états liés sont provoquées soit par l'absorption d'un photon ou par collision avec un électron.
Dans cette partie, nous allons nous intéresser à une autre forme de transition qui met en jeu les états libres d'une molécule. Ceci dit, nous allons étudier des transitions entre des états liés et des états libres, et entre des états libres et des états libres.

10.1 Introdution

Durant une collision entre deux atomes d'hydrogène dans leur état électronique fondamental, les transitions d'un état libre à un autre état lié ou libre d'un état électroniquement excité contribuent à l'absorption dans les ailes de la raie atomique correspondante. Ces absorptions à partir du complexe collisionnel (H-H) sont responsables de l'apparition de satellites quasi-moléculaires observés dans les spectres d'étoiles riches en hydrogène telle que les naines blanches DA (voir la Figure 10.1) ou les λ bootis (155). En effet, dans les spectres IUE, HST et FUSE des naines blanches, des structures présentes aux voisinage des raies d'hydrogène atomique ont été identifiées comme étant dues aux absorptions de quasi-molécules formées par collision d'un atome d'hydrogène et d'un autre atome d'hydrogène ou proton dans un état excité. Ces raies "satellites" sont considérées comme une importante source d'opacité, et sont un bon outil de diagnostic de température et de gravité des étoiles (155).

Les satellites des raies Lymanα ($n = 1 \rightarrow n = 2$) et Lymanβ ($n = 1 \rightarrow n = 3$) du complexe collisionnel H-H ont fait déjà l'objet d'étude théorique par un traitement classique des collisions (156; 157; 158). Les calculs des coefficients d'absorption de la quasi-molécule H-H montraient bien la dépendance en température des amplitudes de ces satellites. La comparaison de ces résultats avec les observations des naines blanches permettent de remonter à leurs caractéristiques, à savoir la densité de l'hydrogène et la température des atmosphères.

Pour voir l'effet sur le coefficient d'absorption des couplages non adiabatiques entres les états électroniques excité, une étude quantique du satellite quasi-moléculaire Lymanα a été faite avec et sans couplages non adiabatiques entre les états électroniques concernés par cette transition, en l'occurrence $B^1\Sigma_u^+$ et $C^1\Pi_u$ (160). La comparaison des résultats incluant le couplage rotationnel entre les niveaux d'énergie liés de $B^1\Sigma_u^+$ et $C^1\Pi_u$ avec ceux obtenus dans l'approximation adiabatique a montré que la différence n'est pas significative. D'autre part, cette étude théorique a montré l'importance des transitions libres-libres et libres-liées, entre les états électroniques excités B et C et l'état fondamental X, à la contribution des coefficients d'absorption.

Dans ce travail, on s'intéressera tout particulièrement à l'étude quantique du satellite de la raie Lymanβ à 1150Å. Le calcul prend en compte la contribution des transitions libres-libres et liées-libres entre l'état électronique fondamental $X^1\Sigma_u^+$ corrélé à $n = 1$ et l'état électronique excité $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+$ corrélé à $n = 3$. Nous allons décrire dans la partie 10.3 le calcul de la contribution des transitions libres-libres, alors que la contribution libre-liée était déjà l'objet d'étude dans notre laboratoire (161).
Les unités atomiques seront utilisées dans cette partie.

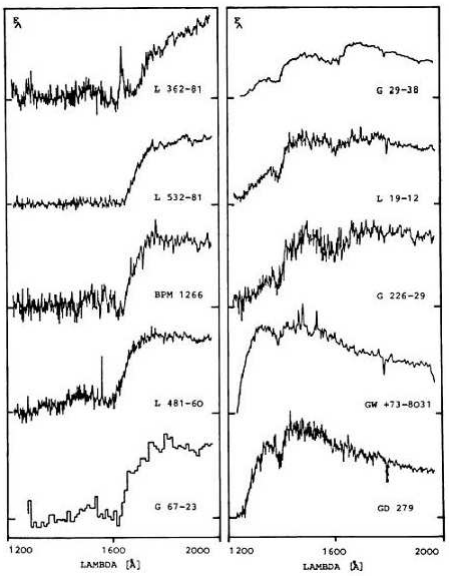


Figure 10.1 – *Les naines blanches DA observée par IUE (159).*

10.2 Formation d'un satellite

Durant une collision entre deux atomes une quasi-molécule est formée. Cette molécule peut absorber du rayonnement. Cette absorption fait passer la molécule d'un état électronique initial vers d'autres états électroniques, et cela donne un changement du profil de la raie atomique correspondante. Ce changement peut se manifester par l'apparition d'un "satellite" dans l'aile, rouge ou bleu, de la raie atomique. Cependant ce satellite est formé sous certaines conditions.

En effet lorsque la différence ΔV(R) entre l'un des états électroniques supérieurs et l'état électronique fondamental présente un maximum en fonction de la distance inter nucléaire, et que cette valeur maximale correspond au maximum du moment de transition eléctronique entre les deux états en question, une augmentation en intensité, ou satellite, dans l'aile de la raie atomique est observée. Dans notre cas cette condition est satisfaite (voir Figure 10.2), et la fréquence du satellite est donné par la différence entre la valeur maximum de ΔV(R) et le centre de la raie atomique Lymanβ. Ainsi le satellite se trouve dans l'aile rouge de la raie atomique à une longueur d'onde de 1150 Å.

10.3 Formalisme

La théorie de collision-élargissement non adiabatique des profils de raies est très bien connue (163; 164; 165). Dans un processus collisionnel entre deux atomes en présence d'un champs électromagnétique, le composé formé par ces deux atomes peut absorber un photon. Ce schéma de collision

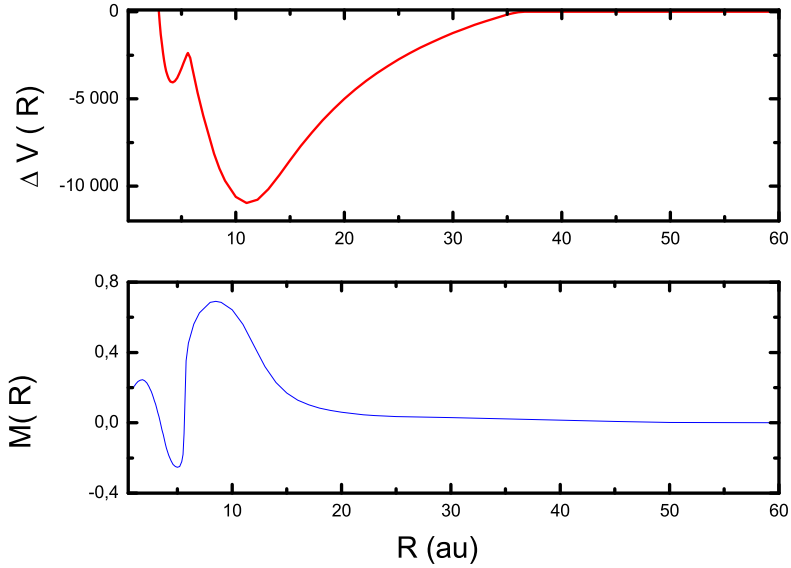


Figure 10.2 – *La différence de potentiel $\Delta V(R)$ en cm^{-1} et le moment de transition correspondant $M(R)$ entre les états électroniques $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+ \rightleftarrows X^1\Sigma_u^+$, responsables du satellite Lymanβ.*

peut être décrit par l'équation suivante (164) :

$$A_i + B + n\omega \rightarrow A_f + B + (n-1)\omega. \tag{10.1}$$

où A et B représentent, respectivement, l'atome irradié par le photon d'énergie ω et le perturbateur. n est le nombres de photons incident. À la fin de la collision, un photon est absorbé par l'atome A, qui passera de l'état i à l'état final f. La conservation de l'énergie s'écrit donc :

$$E_i + \epsilon_i + \omega = E_f + \epsilon_f. \tag{10.2}$$

où E_i et E_f sont, respectivement, les énergies internes des états initiale et finale des atomes séparés, ϵ_i et ϵ_f sont les énergies cinétiques initiale et finale du mouvement relatif. Le décalage en énergie Δ par rapport à l'énergie de résonance de la raie atomique non perturbée ω_0 est donné par :

$$\Delta = \omega - \omega_0 = \epsilon_f - \epsilon_i. \tag{10.3}$$

L'Hamiltonien total du système composé des deux atomes et du champ électromagnétique est donné par :

$$H = H^{AB} + H^{rad} + V^{rad} \tag{10.4}$$

où H^{AB} est le hamiltonien du système isolé AB (dans le centre de masse), H^{rad} est le hamiltonien du champ de rayonnement incident, et V^{rad} est le potentiel d'interaction molécule-champ de rayonnement, donnée par :

$$V^{rad} = (2\pi\omega\phi/c)^{1/2}\vec{\varkappa}.\vec{M} \tag{10.5}$$

où ϕ est l'intensité du champ incident, $\vec{\varkappa}$ est le vecteur de polarisation du champ incident (choisi dans la direction de l'axe z) et $\vec{M}$ est l'opérateur dipolaire de la moléculaire AB.

Pour une énergie E donnée, la fonction d'onde totale du couple molécule-photon s'écrit comme un développement sur une base des fonctions d'onde sous la forme :

$$\Psi_j^{JM}(E) = |i\rangle\, F_{ij}(E,R) + \sum_f |f\rangle\, F_{fj}(E,R) \tag{10.6}$$

où $|i\rangle$ contient les caractéristiques de l'état initial incluant les états initiaux des atomes A et B, les nombres quantiques initiaux de la molécule (JMp) et du photon (n). L'état final $|j\rangle$ contient les caractéristiques des états atomiques finaux des différents canaux de sortie, les nombres quantiques finaux de la molécule $(J_f M_f p_f)$ et du photon $(n-1)$.
On rappelle que M et p sont, respectivement, la projection sur l'axe de quantification z du moment cinétique total J, et la parité de l'état électronique par rapport à l'inversion de tout les coordonnées par rapport au centre de masse.

L'application de l'hamiltonien total sur la fonction d'onde totale (équation 10.6) donne un système d'équations couplées qui s'écrit sous la forme matricielle :

$$\{\frac{1}{2\mu}\frac{d^2R}{dR^2} + E - V_i - n\omega\}F_{ii} = \sum_f V_{if}^{rad} F_{fi}.$$

$$\{\frac{1}{2\mu}\frac{d^2R}{dR^2} + E - V_f - (n-1)\omega\}F_{ff} = \sum_{f'} H_{ff'}^{NAD} F_{f'f} + V_{fi}^{rad} F_{if}. \tag{10.7}$$

où μ est la masse réduite des deux atomes en collision. Le potentiel $V_j(R)$ contient la courbe de potentiel électronique et le potentiel centrifuge donné par $J_j(J_j+1)/R^2$ (j désigne soit l'état initial i ou soit l'état final f). La matrice V^{rad} donne le couplage radiatif et la matrice H^{NAD} donne les couplages non adiabatiques entre les états électroniques finaux.

Le but de la théorie de collision est de déterminer les fonctions d'onde libres $F(E,R)$ de l'équation 10.6, à partir de laquelle on extrait la matrice de diffusion S. La probabilité de transition radiative est lié directement aux éléments de la matrice S. Cette probabilité s'écrit dans le cas d'un seul état dans la voie d'entrée (voie désignée par 1) et d'une énergie cinétique initiale ϵ, et d'un seul état dans la voie de sortie (voie désignée par 2) comme (164) :

$$P^J(\epsilon,\Delta) = \frac{1}{(2J+1)} \sum_{M=-J}^{M=J} |S_{12}^{JM}(\epsilon,\Delta)|^2 \tag{10.8}$$

La section efficace de transition radiative est aussi liée directement à l'élément de matrice S_{12} par :

$$\sigma(\epsilon,\Delta) = \frac{\pi}{k_i^2} \sum_J^{\infty} |S_{12}^J(\epsilon,\Delta)|^2 \tag{10.9}$$

Pour une distribution de vitesse de Maxwell-Boltzmann à une température T, le coefficient d'absorption pour une transition d'état libre à état libre est (164) :

$$K(\Delta,T) = 1/4 \times (\frac{1}{\phi})(\frac{1}{Q_T}) \int_0^{\infty} \sum_J (2J+1) P^J(\epsilon,\Delta) \times e^{-\epsilon/k_B T} \quad d\epsilon. \tag{10.10}$$

où $Q_T = (2\pi\mu k_B T/h^2)^{3/2}$ est la fonction de partition translationnelle. Le facteur 1/4 est ici introduit pour tenir compte de la probabilité 1/4 d'être dans un état singulet de la quasimolécule H_2.

10.4 Détails de calcul et résultats

Dans notre cas nous avons utilisé les données *ab initio* des courbes d'énergie potentielle de l'état fondamental $X^1\Sigma_u^+$, de l'état excité $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+$ et du moment de transition électronique M(R), calculées par Wolniewicz (37; 38; 40).
A très grande distance internucléaire R, la transition de l'état électronique fondamental $X^1\Sigma_u^+$, corrélé à la limite atomique H(1s) -H(1s), vers l'état électronique supérieur $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+$, corrélé à la limite atomique H(1s) -H(3s), est interdite. Ceci donne un comportement asymptotique nul pour le moment dipolaire électronique M(R). Cependant, pour des problèmes de convergence des calculs *ab initio*, il est difficile de reproduire le bon comportement asymptotique du moment de transition. Pour cette raison, nous avons extrapolé le moment de transition vers la bonne limite asymptotique. Par conséquent, le couplage radiatif $V^{rad}(R)$ donné par l'équation 10.5 est nul à l'infini.
Dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer ; c.-à-d. sans tenir en compte des couplages non adiabatiques entre l'état électronique supérieur avec les autres états voisins, nous avons déterminé les fonctions d'onde libres à partir de la résolution du système d'équations couplées (équation 10.7) en utilisant la méthode log dérivative (166), sur une grille de points [0.6-70.6] a.u. avec un pas de 0.001. Pour une valeur de l'énergie du photon ($h\nu$), les fonctions d'onde sont calculées pour chaque valeur du moment cinétique J et pour chaque valeur de l' énergie initiale ϵ_i. La matrice de diffusion S, donc la section efficace de transition radiative, est déterminée à partir des amplitudes des fonctions d'onde.

Comme première étape de calcul, nous avons vérifié la convergence des calculs de la probabilité de transition radiative en fonction de la distance inter nucléaire R. Ensuite, une fois cette convergence assurée, un autre test de convergence est vérifié en fonction du moment cinétique J et en fonction des énergies E_i, et ceci pour chaque valeur de l'énergie du photon. Dans la Figure 10.3 et la Figure 10.4 on montre, respectivement, un exemple de la convergence de la section efficace de transition radiative en fonction du moment cinétique et de l'énergie.

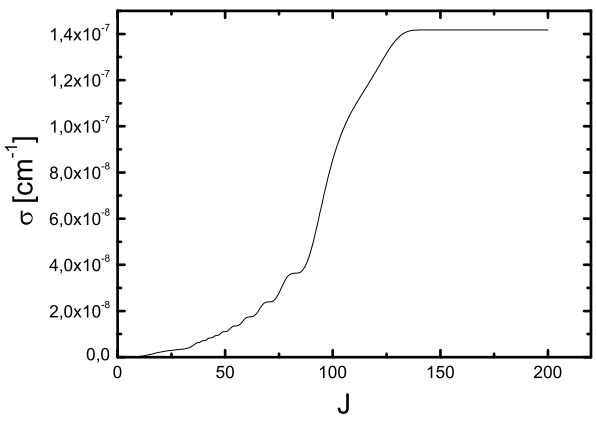


Figure 10.3 – *Convergence de la section efficace σ de transition radiative en fonction du moment cinétique J pour une énergies $\epsilon_i = 0.06$ a.u. et une longueur d'onde $\lambda = 1120$ Å.*

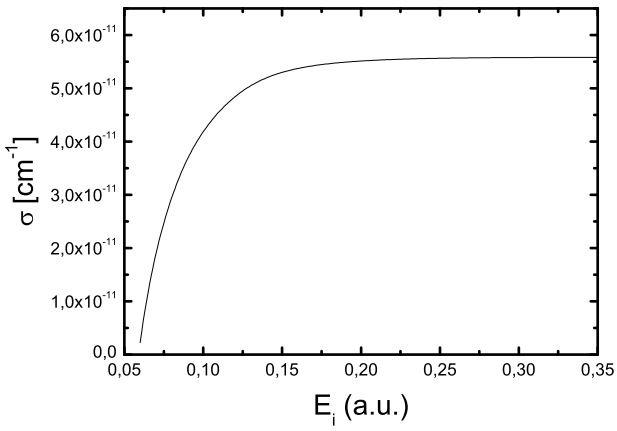


Figure 10.4 – *Convergence de la section efficace σ de transition radiative en fonction de l'énergie ϵ_i pour une valeur de $J = 10000$ et une longueur d'onde $\lambda = 1150$ Å.*

Etant donnée la symétrie Σ des états électroniques supérieurs et inférieurs, la section efficace de transition radiative est calculée en deux fois : une première fois pour la branche $R(\Delta J = J_f - J_i = +1)$, et une deuxième fois pour la branche $P(\Delta J = J_f - J_i = -1)$.

Nous avons calculé ensuite la contribution des transitions d'états libres à états libres au coefficient d'absorption donné par l'équation 10.10. Ce calcul est effectué pour différentes valeurs de la température T=8000 K, 10 000 K, 11 000K, 12 000 K et 15 000 K. Pour ces températures, les tests de convergences en J et en E_i restent valables.

Dans la Figure 10.5 on donne la variation de la contribution libre-libre en fonction de T. A partir de cette figure, nous constatons que le coefficient d'absorption augmente avec la température.

En utilisant les résultats des calculs du coefficient d'absorption des transitions libres-liées déterminées précédemment (161), nous avons comparé les deux contributions libres-libres et libres-liées en fonction de la température. Sur la Figure 10.6 on présente cette comparaison pour les températures 8000 K, 10 000 K, 12 000 K et 15 000. On remarque que, comme attendu, le coefficient d'absorption des transitions libres-liées diminue quand la température augmente contrairement à la contribution libres-libres. Cependant, à basse température, les transitions libres-libres et libres-liées contribuent de façon semblable au coefficient d'absorption, en revanche ce sont les transitions libres-libres qui dominent assez largement dès que la température augmente. Le coefficient d'absorption total est obtenu en additionnant ces deux contributions. On remarque alors que l'intensité du satellite de la Lymanβ croît avec la température (voir la Figure 10.7).

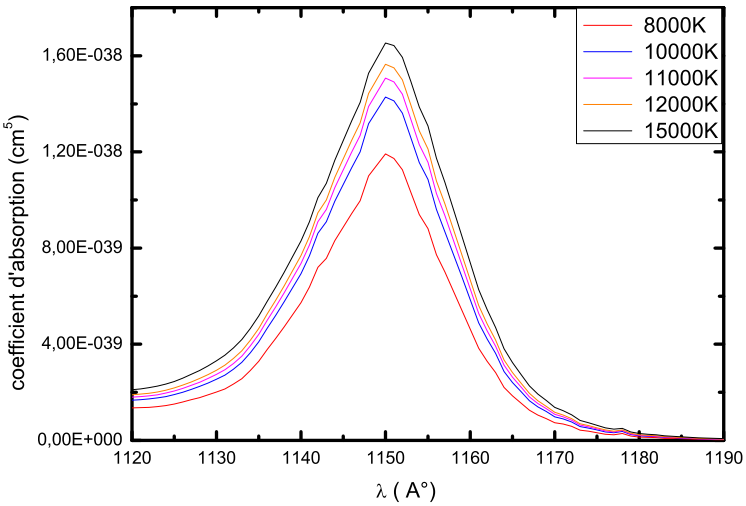


Figure 10.5 – *Variation de la contribution d'états libres-libres, au coefficient d'absorption du satellite de la Lymanβ, en fonction de la température.*

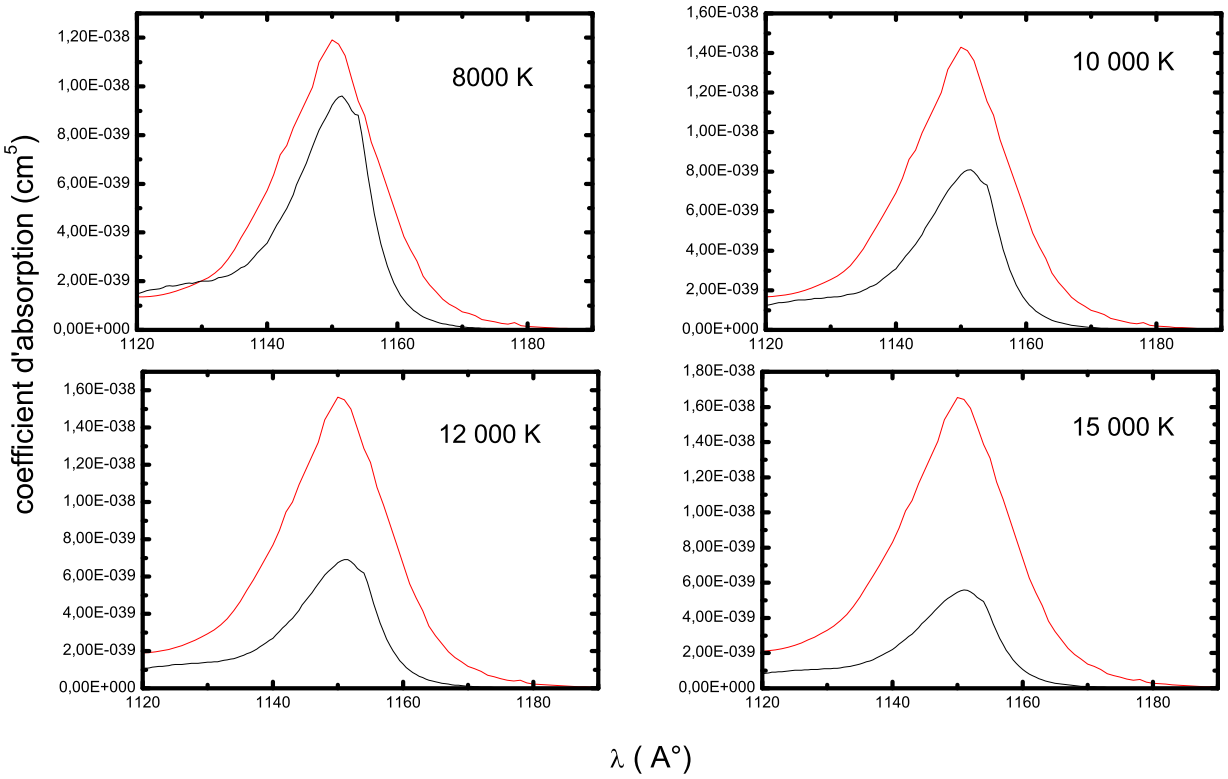


Figure 10.6 – *Conparaison entres la contribution des transitions libres-libres (en rouge) et des transitions libres-liées (en noir) au coefficient d'absorption pour diverses températures.*

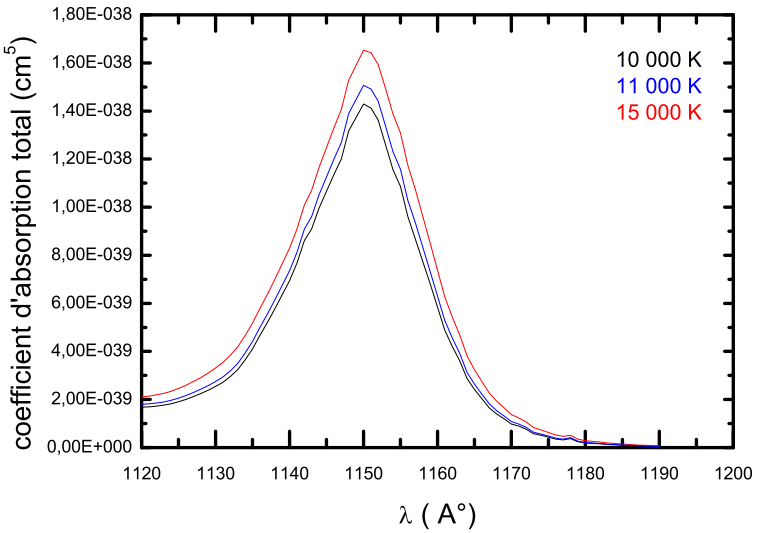


Figure 10.7 – *Variation du coefficient d'absorption total du satellite de la Lymanβ en fonction de la température.*

Chapitre 11

Conclusions et perspectives

11.1 Conclusions

Durant les trois années de thèse, nous avons étudié les spectres d'émission et d'absorption dans l'ultraviolet lointain des molécules D_2 et HD en utilisant différentes techniques expérimentales en relation avec l'étude théorique des états électroniques impliqués dans les transitions formant ces spectres.

Les spectres d'émission de ces molécules ont été produits par une source à décharge Penning opérant sous faible pression et ont été enregistrés dans la région spectrale étendue de 780 - 1700 Å à l'aide du spectrographe à haute résolution de 10 mètres sous vide de l'Observatoire de Meudon, soit sur plaque photographique, soit sur écrans phosphore photostimulables (image plate) pour mesure d'intensités. Les spectres enregistrés contiennent plus de 20 000 raies pour chacune de ces molécules. La précision sur les longueurs d'onde mesurées est de $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-6}$.

Les raies des molécules D_2 et H_2 étant présentes dans le spectre de HD, l'analyse du spectre de D_2 devait nécessairement constituer une première étape inévitable dans l'objectif plus lointain d'étudier le spectre de HD. Le spectre de D_2 a été mesuré et complètement analysé dans le domaine de longueurs d'onde 780-1242 Å. La grande constante rotationnelle de la molécule entraîne le chevauchement des bandes et un aspect de spectre de raies, semblable à un spectre atomique complexe. L'originalité de notre démarche est d'avoir utilisé, dans notre analyse spectrale, un programme de visualisation développé pour les spectres d'atomes complexes, pour manipuler la grande quantité de données expérimentales et théoriques dans l'identification des raies et la détermination des niveaux d'énergie ro-vibrationnels.

L'analyse était basée sur nos calculs théoriques des niveaux d'énergie ro-vibrationnels et des probabilités de transition à partir des niveaux excités vers les niveaux de l'état fondamental $X^1\Sigma_g^+$. Ces résultats théoriques sont obtenus par la résolution des équations couplées entre les états électroniques excités $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ et $D^1\Pi_u$, en tenant compte des couplages non-adiabatiques entre les différents états, et dans l'approximation adiabatique pour les états électroniques excités $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+$, $D'^1\Pi_u$ et $D''^1\Pi_u$. Dans le cas de la molécule HD, une étude théorique de la brisure de symétrie $g-u$ basée sur les données *ab initio* a été effectuée.

Pour la molécule D_2, nous avons identifié 80% des 11906 raies moléculaires appartenant à la région spectrale 780 - 1242 Å. Par conséquent, nous avons construit le système électronique $D^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ contenant 165 bandes, composées par les branches R, P et Q, le système électronique $D'^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ contenant 125 bandes, composées par la branche Q, le système électronique $B'^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ contenant 110 bandes, composées par les branches R et P, les bandes de Werner $C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ contenant 248 bandes, composées par les branches R, P et Q et finalement une partie de la bande de Lyman $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ contenant 310 bandes, composées par les branches R et P. Un très grand nombres de bandes de ces systèmes électroniques sont déterminées pour la première fois.

Ensuite nous avons déterminé les niveaux d'énergie des états électroniques excités à partir d'une moyenne sur un grand nombre de raies identifiées. Nous avons obtenu 96 niveaux d'énergie ro-vibrationnels pour l'état électronique $D'^1\Pi_u^-$ dont 44 sont nouveaux, 206 niveaux d'énergie ro-vibrationels pour l'état électronique $D^1\Pi_u$ dont 131 sont nouveaux, 111 niveaux d'énergie ro-vibrationels pour l'état électronique $B'^1\Sigma_u^+$ dont 31 sont nouveaux, 363 niveaux d'énergie ro-vibrationels pour l'état électronique $C^1\Pi_u$ dont 139 sont nouveaux. Finalement dans la région spectrale limitée à notre étude ([780, 1242] Å), nous avons déterminé dans l'état $B^1\Sigma_u^+$, $v' = 10 - 40$, 207 niveaux d'énergie ro-vibrationnels dont 18 nouveaux. La précision sur les valeurs d'énergies auparavant connues a été nettement améliorée. Ajoutons à cela, plusieurs valeurs d'énergie ro-vibrationnelles ont été corrigées. La comparaison entres les nouveaux résultats expérimentaux et les résultats de nos calculs théoriques montre des différences comprisent entres 0.2 cm^{-1} et 5.80 cm^{-1}. Ce désaccord est lié à la qualité des données ab initio utilisées dans le calcul théorique, mais aussi aux couplages non adiabatiques définissant les interactions entres les états électroniques étudiés et les états de Rydberg ($n \geq 4$).

Nous avons étudié les interactions entres les quatre états électroniques excités B, C, B' et D, et localisé les perturbations entre les niveaux d'énergie ro-vibrationnels appartenant aux différents états, en nous basant sur les calculs théoriques des pourcentages de mélanges pour chaque niveau. Plusieurs nouvelles perturbations ont été localisées durant cette étude. Par conséquent, nous pouvons conclure que l'état électronique B' est perturbé essentiellement par l'état D, et que l'état électronique C est pérturbé essentiellement par l'état B. Ces perturbations se manifestent aussi à travers les valeurs des probabilités de transition liées aux fonctions d'onde vibrationnelles des niveaux d'énergie perturbés.

Dans l'objectif de mesurer les intensités des raies moléculaires, nous avons enregistré, pour la première fois en spectroscopie moléculaire, le spectre d'émission de D_2 sur un nouveau système de détection dans la gamme spectrale 840 - 900 Å. Ce détecteur, appelé écran phosphore photostimulable, présente, contrairement au détecteur plaque photographique, une réponse linéaire en fonction de l'intensité enregistrée avec une dynamique de 10^5. La comparaison des résultats de mesures des intensités des raies identifiées avec nos résultats théoriques des probabilités de transition, montre un accord satisfaisant, ce qui montre la bonne qualité de nos calculs théoriques. En plus, le profil des raies nous a permis d'estimer la température cinétique du gaz moléculaire dans notre décharge à environ 2500 K.

Nous avons par ailleurs réalisé une étude en absorption des molécules HD et D_2 au Centre Laser LCVU d'Amsterdam. Nous avons mesuré par spectroscopie laser à deux photons 1XUV+1UV, de nouvelles longueurs d'onde pour 43 raies de la molécule HD et pour 39 raies de la molécule D_2 avec une précision inégalée de $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-8}$, dans le domaine spectral 99.9 -104 nm permis par l'accordabilité du laser XUV. La comparaison des résultats des longueurs d'onde de la molécules HD avec les prédictions théoriques montre l'effet du couplage non adiabatique H_{gu} sur la position des niveaux d'énergie et son importance dans l'amélioration des résultats théoriques, alors qu'avant il était considéré comme un terme négligeable.

L'ensemble des mesures de haute précision obtenues par spectroscopie laser constitue une base de données de longueurs d'onde de référence pour la calibration des spectres moléculaires dans le domaine de l'ultraviolet du vide. D'autre part, nous avons apporté des nouvelles contraintes dans l'interprétation des observations astrophysiques. En effet, les nouvelles raies de HD mesurées par spectroscopie laser, ajoutées aux raies de H_2 déjà mesurées avec une précision similaire, seront utilisées comme références pour mettre en évidence une possible variation cosmologique du rapport des

masses proton-électron $\mu = m_p/m_e$ par comparaison avec des longueurs d'onde de raies de H_2 ou de HD observées dans les spectres d'absorption d'objets illuminés par des quasars à grand déplacement vers le rouge z. Cependant cette étude nécessite la connaissance du coefficient de sensibilité K_i de chaque raie par rapport à la possible variation de μ. Nous avons, pour cela, effectué des calculs théoriques des coefficients K_i pour les raies moléculaires de H_2 et, pour la première fois, pour HD en tenant compte des couplages non adiabatiques entres les états électroniques B, B', C et D. Pour la molécule H_2, le rapport des masses $\Delta\mu/\mu$ déduit de nos résultats est en parfait accord avec la valeur déduite des coefficients K_i calculés par une méthode semi-empirique. Dans le même contexte, les nouvelles valeurs de K_i calculées pour les longueurs d'onde de HD seront utilisées aussi dans la détermination.

Durant ce travail de thèse, nous nous sommes également intéressés à des transitions entre états libres-libres et états libres-liés de la molécule H_2. Ces transitions se produisent lors d'une collision H-H formant une quasi-molécule et sont responsables de l'apparition de satellites dans l'aile des raies de l'atome d'hydrogène. Nous avons effectué une étude quantique du satellite quasi-moléculaire de la raie Lyman β à 1150 Å, et calculé le profil d'absorption du satellite en fonction de la température. Nous avons trouvé que le coefficient d'absorption de la raie augmente en fonction de la température, et que cette augmentation est induite par les transitions libres-libres qui sont plus importantes que les transitions libres-liées aux températures élevées. Cette variation est un outil important de diagnostic pour la détermination des caractéristiques des atmosphères des naines blanches.

11.2 Perspectives

Le succès de l'utilisation du programme IDEN dans l'analyse d'un spectre aussi complexe que celui de la molécule D_2 et la grande quantité de résultats obtenus dans la région spectrale 780 à 1240 Å, dans un temps raisonnable, nous permet d'envisager l'extension de l'analyse spectrale vers les grandes longueurs d'onde, dans l'objectif de construire les bandes de Lyman $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$, les bandes de Werner $C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$, et les systèmes électroniques $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ et $D''^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. Afin de compléter le système de bandes $D'^1\Pi_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$, composées par les branches R et P, nous envisageons de résoudre un système d'équations couplées plus étendu, entre les états $B''\overline{B}^1$, $D''^1\Pi_u$ et $D'^1\Pi_u$ en utilisant les plus récentes données *ab initio* des couplages non adiabatiques entres ces états.
L'analyse du spectre de HD pourra être abordée de la même manière. La calibration du spectre de HD se fera à l'aide de la liste des raies de référence des molécules D_2 et H_2 mesurées à très haute précision par la spectroscopie laser XUV. Bien que cette liste de raies soit limitée par le domaine de l'accordabilité en longueur d'onde du laser visible, il est possible de la compléter par des références de Ritz calculées à partir des énergies déterminées par ces mesures laser. L'analyse spectrale reposera sur nos calculs des niveaux d'énergie et des probabilités de transition pour les états électroniques excités $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $EF^1\Sigma_g^+$, $C^1\Pi_u$ et $D^1\Pi_u$ en tenant compte des interactions non adiabatiques et de la brisure de symétrie. Le calcul pourra être effectué soit en utilisant des données *ab initio* sur l'opérateur de couplage Hgu, soit à l'aide d'une modélisation à partir des niveaux expérimentaux.
Vue l'importance des intensités des raies obtenues à partir des nouveaux spectres enregistrés sur les écrans phosphore photostimulables, nous allons enregistrer sur ce support le spectre de la molécule D_2 sur toute la gamme spectrale [780 - 1700 Å] pour mesurer les intensités des raies. Dans le cas de HD, nous pourrons ainsi mettre en évidence d'une manière plus quantitative l'effet de la brisure de symétrie $g - u$ sur les intensités.
Nous envisageons d'étudier, par la suite, la photodissociation et la photoionisation de la molécule afin de mieux comprendre les conséquences de la brisure de symétrie sur la dynamique de la molécule.

Bibliographie

[1] http ://www.fizyka.umk.pl/ftp/publications/ifiz/luwo/

[2] S. Brezinsek, P. T. Greenland, Ph. Mertens, A. Pospieszczyk, U. Samm, B. Schweer and G. Sergienko. Physica. Scripta. **T103**, 63 (2003).

[3] F. Combes, G. Pineau des Forets (Eds.), Molecular Hydrogen in Space, Cambridge University Press (2000).

[4] G.C. Carruthers. Astrophys. J. **161**, L81 (1970).

[5] D.C. Morton, H.L. Dinerstein, Astrophys. J. **204**, 1 (1976).

[6] S.R. Federman, J.A. Cardelli, E.F. van Dishoeck, D.L. Lambert, and J.H. Black. Astrophys. J. 445, 325 (1995).

[7] J. Ajello, D. Shemansky, W. Pryor, K. Tobiska, C. Hord, S. Stephens, I. Stewart, J. Clarke, K. Simmons,W. McClintock, C. Barth, J. Gebben, D. Miller, and B. Sandel. J. Geophys. Res. E9, **103**, 20125 (1998).

[8] H.W. Moos,W.C. Cash, L.L. Cowie,A.F.Davidsen,A.K. Dupree, P.D. Feldman, S.D. Friedman, J.C. Green, R.F. Green, C. Gry, J.B. Hutchings, E.B. Jenkins, J.L. Linsky, R.F. Malina, A.G. Michalitsianos, B.D. Savage, J.M. Shull, O.H.W. Siegmund, T.P. Snow, G. Sonneborn, A. Vidal-Madjar, A.J. Willis, B.E. Woodgate, D.G.York, T.B. Ake, B.-G. Andersson, J.P. Andrews, R.H. Barkhouser, L. Bianchi, W.P. Blair, K.R. Brownsberger, A.N. Cha, P. Chayer, S.J. Conard, A.W. Fullerton, G.A. Gaines, R. Grange, M.A. Gummin, G. Hebrard, G.A. Kriss, J.W. Kruk, D. Mark, D.K. McCarthy, C.L. Morbey, R. Murowinski, E.M. Murphy, W.R. Oegerle, R.G. Ohl, C. Oliveira, S.N. Osterman, D.J. Sahnow, M. Saisse, K.R. Sembach, H.A.Weaver, B.Y.Welsh, E.Wilkinson, and W. Zheng. Astrophys. J. **538**, L1 (2000).

[9] J.-Y. Roncin and F. Launay, J. Phys.Chem. Ref. Data Monograph **4** (1994)

[10] G. Herzberg. Molecular Spectra and Molecular Structure. I. Spectra of Diatomic Molecules. Van Nostrand Reinhold Company. 1950

[11] P. R. Bunker. J. Mole. Spectrosc. **28**, 422 (1968)

[12] W. Kolos and L. Wolniewicz. Rev. mod. Phys. **35**, 473 (1963)

[13] M. Born and J. R. Oppenheimer, Ann. Phys., **389**, 457 (1927)

[14] T. Sharp, " *Potential Energy Diagram for Molecular Hydrogen and Its Ions Atomic Data, Vol. 2 (Academic Pess, New York, 1971).*

[15] P. Senn, P. Quadrelli and K. Dressler. J . Chem. Phys., **89**, 7401 (1988)

[16] L. Wolniewicz and K. Dressler, J. Chem. Phys. **88**, 3861 (1988)

[17] G. Parlant and D. R. Yarkony, Int. Quant. Chem. Symposium **28**, 737 (1992)

[18] F. T. Smith, Phys. Rev. **179**, 111 (1969)

[19] E. F. van Dishoeck, M. C. van Hemert. A. C. Allison and A. Dalgarno, J. Chem. Phys. **81**, 5709 (1984)

[20] A. De Lange, E. Reinhold and X. Ubachs, Int. Rev. Phys. Chem. **21**, 257 (2002)

[21] I. Dabrowski and G. Herzberg. Can. J. Phys., **54**, 525 (1976).

[22] A. Lewis Ford and J. C. Browne, Phys. Rev A. **16**, 1992 (1977)

[23] G. Herzberg. Nature (Lond.) **166**, 563 (1950)

[24] R. A. Durie and G. Herzberg, Can. J. Phys. **38**, 806 (1960)

[25] H. Abgrall and E.Roueff. A and A, **445**, 361 (2005)

[26] I. Dabrowski. Can. J. Phys. **62**, 1639 (1984)

[27] A. Lewis Ford. J. Mol. Spec. **53**, 364 (1974)

[28] H. Abgrall, E. Roueff, X. Liu, R. E. Shemansky, and G. K. James, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **32**, 3813 (1999).

[29] B. R. Johnson, J. Chem. Phys. **69**, 4678 (1978).

[30] C. Clay Marston and G. Balint-Kurti, J. Chem. Phys. **91**, 3571 (1989).

[31] R. R. Davidson, J. Chem. Phys. **35**, 1189 (1961).

[32] S. C. Ross and C. Jungen, Phys. Rev. Lett. **59**, 1297 (1987).

[33] W. Kolos and L. Wolniewicz. J. Chem. Phys. **50**, 3228 (1968).

[34] J. D. Alemar- Rivera and A. Lewis Ford. J. Mol. Spec., **67**, 336 (1977).

[35] T. L. Stephens and A. Dalgarno. Mol. Phys. **28**, 1049 (1974).

[36] A K. Belyaev, A. Dalgarno and R. McCarroll. J. Chem. Phys. **116**, 5395 (2002).

[37] L. Wolniewicz, J. Chem. Phys. **99**, 1851 (1993).

[38] G. Staszewska and L. Wolniewicz, J. Mol. Spectrosc. **212**, 208 (2002).

[39] L. Wolniewicz and G. Staszewska. J. Mol. Spectrosc. **220**, 45 (2003).

[40] G. Staszewska and L. Wolniewicz, J. Mol. Spectrosc. **217**, 181 (2003).

[41] L. Wolniewicz, J. Chem. Phys. **103**, 1792 (1995).

[42] Carey Schwartz and Robert J. Le Roy. J. Mol. Spec. **121**, 420 (1987).

[43] L. Wolniewicz and K. Dressler, J. Chem. Phys. **82**, 3292 (1984).

[44] L. Wolniewicz, J. Chem. Phys. **109**, 2254 (1998).

[45] Th. G. P. Pielge, A. de Lange. F. Brandi and W. Ubachs., Chem. Phys. Lett., **366**, 583 (2002).

[46] E. Reinhold, W. Hogervost, W. Ubachs avd L. Wolineiwicz. Phys. Rev A., **60**, 1258 (1999).

[47] E. Reinhold, W. Hogervost and W. Ubachs., Chem. Phys. Lett., **296**, 411 (1998).

[48] H. Abgrall, E. Roueff and I. Drira. Astronomy and Astro suppl ser., **141**, 297 (2000).

[49] M. Glass-Maujean, S. Klumpp, L. Werner, A. Ehresmann and H. Schmoranzer. J . Chem. Phys., **126**, 144303 (2007)

[50] M. Glass-Maujean, S. Klumpp, L. Werner, A. Ehresmann and H. Schmoranzer. Mol. Phys. **105**, 1535 (2007)

[51] A. Spielfiedel (private comunication) (2005).

[52] MOLPRO is a package of *ab initio* paogram written by : Werner,H.-J. and Knowles, P. J. with xontributions from Almlöf, J., Amos, R. D. Deegan, M. J., et al.

[53] P. Cacciani and V. Kokoouline. Phys. Rev. Lett. **84**, 5296, 2000

[54] N. Bouloufa, P. Cacciani, V. Kokoouline, F. Masnou-Seeuws, R. Vetter, and Li Li. Phys. Rev. A., **63**, 042507 (2001)

[55] A. Thorne, U. Litzéne and S. Johansson. Spectrophysics. Principles and Applications, 1999, Sptinger edition.

[56] Source à decharge à très basse pression pour l'ultraviolet lointain.

[57] I. Dabrowski and G. Herzberg, Can. J . Phys. **52**, 1110 (1974)

[58] R. D. Deslattes, T. J. Peterson, and D. H. Tomboulian. J. Opt. Soc. Am **53**, 302 (1963)

[59] F. Launay, Le courrier du CNRS, **12**, 10 1974

[60] A. Kaufman and B. J. Edelén, J. Phys. Ref., Data, **3**, 825 1974

[61] Y. Iwabuchi, N. Mori, K. Takahashi, T. Matsuda and S. Shionoya, Jpn. J. Appl. Phys.**33**, 178 (1994)

[62] J. Miyahara, The Image Plates : A new radiation image sensor, Reprinted from CHEMESTRY TODAY, october 1989, pp. 29-36.

[63] J. Reader, C. J. Sansonetti, R. D. Deslattes, Applied Optics. **39**, 4 (1999)

[64] A. Ben-Kish, A. Fisher, E. Cheifetz and J. L. Schwob, Rev. Sci. Instrum. **71**, 2651 (2000)

[65] G. Nave, Z. Li, C. J. Sansonetti, U. Griesmann and A. D. Fried, Phisica Scripta.**T119**, 35 (2005)

[66] J. Philip, J. S. Sprengers, Th. Pielage, C. A. De Lange, W. Ubachs and E. Reinhold. Can. J. Chem. **82**, 713 (2004)

[67] C. R. Scheper, C. A. de Lange, A. De Lange, E. Reinhold and W. Ubachs. Chem. Phys. Lett. **312**, 131 (1999)

[68] A. De Lange, E. Reinhold and W. Ubachs. Phys. Rev. A., **65**, 064501 (2002)

[69] U. Hollenstein, E. Reinhold, C. A. de Lange and W. Ubachs. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **39**, L195 (2006)

[70] E. Reinhold, W. Hogervorst and W. Ubachs. Phys. Rev. A., **60**, 1258 (1999)

[71] E. Reinhold, R. Buning, U. Hollenstein, A. Ivanchik, P. Petitjean and W. Ubachs. Phys. Rev. Lett. **95**, 151101 (2006)

[72] P. C. Hinnen. XUV-laser Spectroscopy of H_2 and the Myster of the Diffuse Interstellar Bands. *Thèse de Doctorat d'état. Vrije Universteit.*

[73] A. Yariv, Optical electronic, CBS College Publishing ; Japon, 1985.

[74] W. Ubachs. Chem. Phys. Lett. **268**, 201 (1997)

[75] I. Velchev, R. van Dierendonk, W. Hogervorst and W. Ubachs. J. Mol. Spectrosc. **187**, 21 (1998)

[76] S. C. Xu, R. van Dierendonk, W. Hogervorst and W. Ubachs. J. Mol. Spectrosc. **201**, 256 (2000)

[77] B. Bodermann, H. Knöckel and E. Tiemann. *Basics and usage of the program Iodine Spectrum.* Institut für Quantenoptik Universität Hannover, 1999.

[78] D. E. Jennings, A. Weber, and J. W. Brault. APPLIED OPTICS. **25**, 2 (1986)

[79] H. Abgrall, E. Roueff, F. Launay, J.-Y. Roncin and J.-L. Subtil. Astron, Astrophys. Suppl. Ser. **101**, 273 (1993)

[80] H. Abgrall, E. Roueff, F. Launay, J.-Y. Roncin and J.-L. Subtil. Astron, Astrophys. Suppl. Ser. **101**, 323 (1993)

[81] H. Abgrall, E. Roueff, F. Launay and J.-Y. Roncin. Can. J. Phys. **72**, 856 (1994)

[82] V. I. Azarov, Physica Scripta **44**, 528 (1991)

[83] V. I. Azarov, Physica Scripta **48**, 656 (1993)

[84] H. Bredohl and G. Herzberg, Can. J . Phys. **51**, 867 (1973)

[85] R.S. Freund, J.A. Schiavone, H.M. Crooswhite, J. Phys. Ref. Data. 14, 235 (1985).

[86] S. Takezawa, Y. Tanaka, J. Mol. Spectrosc, **54**, 379 (1975).

[87] M. Larzillière, F. Launay, and J.-Y. Roncin, J. Phys. (Paris) **41**, 1431 (1980)

[88] S. Takezawa. J. Chem. Phys. **52**, 2575 (1970).

[89] T. Namioka, J. Chem. Phys. **43**, 1636 (1965).

[90] G. H. Dieke and R. W. Blue, Phys. Rev. **47**, 261 (1935) ; G. H. Dieke, Phys. Rev. **47**, 261 (1935) ; G. H. Dieke, Phys. Rev. **48**, 606 (1935) ; G. H. Dieke, Phys. Rev. **48**, 610 (1935) ; G. H. Dieke, Phys. Rev. **50**, 797 (1936) ; G. H. Dieke and M. N. Lewis, Phys. Rev. **52**, 100 (1937) ; S. P. S. Porto and G. H. Dieke, J. Opt. Soc. Am. **45**, 447 (1955) ; P. Gloersen and G. H. Dieke, J. Mol. Spectroc. **16**, 191 (1965) ; G. H. Dieke and S. P. Cunningham, J. Mol. Spectroc. **18**, 288 (1965).

[91] G. H. Dieke, J. Mol. Spectrosc. **2**, 494 (1958).

[92] G. Herzberg and A. Monfils, J. Mol. Spectrosc. **5**, 482 (1960).

[93] Ch. Jungen and O. Atabek, J. Chem. Phys. **66**, 5584 (1977).

[94] V. V. Meshkov, A. V. Stolyarov, A. V. Ivanchik and D. A. Varshalovish. JETP Letters, **83**, 303 (2006).

[95] A. V. Stolyarov and M. S. Child. Phys. Rev. A. **63** 052510 (2001).

[96] S. Werner, Proc. R. Soc. London Ser. A **113**, 107 (1926).

[97] T. Lyman, Astrophys. J. **23**, 181 (1906).

[98] C. Rulon Jeppsen. Phys. Rev. **44**, 165 (1933).

[99] P. C. Hinnen, W. Hogervorst, S. Stotle and W. Ubachs. Can. J. Phys. **72**, 1032 (1994)

[100] C. C. Tannoudji, B. Diu et F. Laloë. Mécanique Quantique Tome II. édition Hermann 1973. P 1081.

[101] P.A.M. Dirac, Nature (London) **139**, 323 (1937).

[102] C.J. Copi, A.N. Davis, L.M. Kraus, Phys. Rev. Lett. **92**, 171301 (2004).

[103] J.D. Barrow, Phys. Rev. D **59**, 043515, (1999).

[104] S.G. Karshenboim, Gen. Relat. Gravit. **38**, 159 (2006).

[105] M.J. Duff, L.B. Okun, G. Veneziano, JHEP **03**, 23 (2002).

[106] J.N. Chengalur, N. Kanekar, Phys. Rev. Lett. **91**, 241302 (2003).

[107] N. Kanekar, J.N. Chengalur, T. Ghosh, Phys. Rev. Lett. **93**, 051302 (2004).

[108] J. Darling, Phys. Rev. Lett. **91**, 011301 (2003).

[109] E.R. Hudson, H.J. Lewandowski, B.C. Sawyer, J. Ye, Phys. Rev. Lett. **96**, 143004 (2006).

[110] P. Tzanavaris, J.K. Webb, M.T. Murphy, V.V. Flambaum, S.J. Curran, Phys. Rev. Lett. **95**, 041301 (2005).

[111] X. Calmet, H. Fritsch, Eur. J. Phys. C **24**, 639 (2002).

[112] P. Langacker, G. Segre, M. Strassler, Phys. Lett. B **528**, 121 (2002).

[113] T. Dent, M. Fairbairn, Nucl. Phys. B **653**, 256 (2003).

[114] M. Dine, Y. Nir, G. Raz, T. Volansky, Phys. Rev. D **67**, 015009 (2003).

[115] V.V. Flambaum, D.B. Leinweber, A.W. Thomas, R.D. Young, Phys. Rev. D **69**, 115006 (2004).

[116] J.K. Webb, V.V. Flambaum, C.W. Churchill, M.J. Drinkwater, J.D. Barrow, Phys. Rev. Lett. **82**, 884 (1999).

[117] J.K. Webb, M.T. Murphy, V.V. Flambaum, V.A. Dzuba, J.D. Barrow, C.W. Churchill, J.X. Prochaska, A.M. Wolfe, Phys. Rev. Lett. **87**, 091301 (2001).

[118] M.T. Murphy, J.K. Webb, V.V. Flambaum, V.A. Dzuba, C.W. Churchill, J.X. Prochaska, J.D. Barrow, A.M. Wolfe, Mon. Not. R. Astron. Soc. **327**, 1208 (2001).

[119] M.T. Murphy, J.K. Webb, V.V. Flambaum, C.W. Churchill, J.potkhin and carswellX. Prochaska, Mon. Not. R. Astron. Soc. **327**, 1223 (2001).

[120] R. Thompson, Astroph. Lett. **16**, 3 (1975).

[121] B.E.J. Pagel, Mon. Not. R. Astron. Soc. **179**, 81P (1977).

[122] T. Wiklind, F. Combes, Astron. Astroph. **328**, 48 (1997).

[123] C. Braxmaier, O. Pradl, H. Müller, A. Peters, J. Mlynek, V. Loriette, S. Schiller, Phys. Rev. D **64**, 042001 (2001).

[124] W. Ubachs, R. Buning, K. S. E. Eikema and E. Reinhold. J. Mol. Spec. **241**, 155 (2007).

[125] A. Ivanchik, P. Petitjean, D. Varshalovich, B. Aracil, R. Srianand, H. Chand, C. Ledoux, P. Boissee, Astron. Astroph. **440**, 45 (2005) .

[126] D. A. Varshalovich and S. A. Levshakov. J. Exp. Theor. Phys. Lett., **58**, 237 (1993)

[127] D. A. Varshalovich and A. Y. Potekhin. Space Sci. Rev., **74**, 259 (1995).

[128] J. L. Dunham, Phys. Rev. **41**, 721 (1932).

[129] A. Y. Potekhin, A. V. Ivanchik, D. A. Varshalovich, K. M. Lanzetta, J. A. Baldwin, M. Williger, R. F. Carswell, Astrophys. J. **505**, 523 (1998)

[130] Huber, K. P. and Herzberg, G. 1979, Molecular Spectra and Molecular Structure. IV. Constants of Diatomic Molecules (Princeton : Van Nostrand)

[131] T. Beier, H. Häffner, N. Hermansphan, S.G. Karshenboim, H.-J. Kluge, W. Quint, J. Verdu , G. Werth, Phys. Rev. Lett. **88**, 87011603 (2002).

[132] D. L. Farnham, R. S. Van Dyck Jr., P. B. Schwinberg. Phys. Rev. Lett. **75**, 3598 (1995).

[133] P. J. Mohr, B. N. Taylor, Rev. Mod. Phys. **77**, 1 (2005).

[134] L. Valentin. Physique subatomique Noyaux et Particules. Edition Hermann, Page 84, 1975.

[135] http ://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html.

[136] R. W. Carlson, Astrophys. J. **190**, L99 (1974).

[137] M. Aaronson, J. H. Black, C. F. McKee, Astrophys. J. **190**, L53, (1974).

[138] D. C. Morton and H. L. Dinerstein, Astrophys. J. **204**, 1 (1976).

[139] C. B. Foltz, F. H. Chaffee Jr., J. H. Black, Astrophys. J. **324**, 267 (1988).

[140] D. A. Varshalovich and S. A. Levshakov, JETP Lett. **58**, 237 (1993).

[141] S.A. Levshakov, D.A. Varshalovich, Mon. Not. R. Astron. Soc. **212**, 517 (1985).

[142] L. L. Cowie and A. Songaila, Astrophys. J. **453**, 596 (1995).

[143] J. Ge, J. Bechtold, Astrophys. J. **477**, L73 (1997).

[144] D. Reimers, R. Baade, R. Quast, S.A. Levshakov, Astron. Astroph. **410**, 785 (2003).

[145] J. Cui, J. Bechtold, J. Ge, D.M. Meyer, Astrophys. J. **633**, 649 (2005).

[146] A.V. Ivanchik, E. Rodriguez, P. Petitjean, and D. A. Varshalovich, Astron. Lett. **28**, 423 (1998).

[147] S.A. Levshakov, M. Dessauges-Zavadsky, S. D'Orioco, P. Molaro, Mon. Not. R. Astron. Soc. **333**, 373 (2002).

[148] C. Ledoux, R. Srianand, P. Petitjean, Astron. Astroph. **392**, 781 (2002).

[149] P. Petitjean, R. Srianand, C. Ledoux, Astron. Astroph. **364**, L26 (2000).

[150] S.A. Levshakov, P. Molaro, M. Centurion, S. D'Orioco, P. Bonifacio, G. Vladilo, Astron. Astroph. **361**, 803, (2000).

[151] P. Petitjean, C. Ledoux, P. Noterdaeme, R. Srianand, Astron. Astroph. **456**, L9, (2006).

[152] C. Ledoux, P. Petitjean, R. Srianand, Astrophys. J. **640**, L25, (2006).

[153] P. Petitjean, A. Ivanchik, R. Srianand, B. Aracil, D. Varshalovich, H. Chand, E. Rodriguez, C. Ledoux, P. Boissee, Comp. Rend. Physique **5**, 411, (2004).

[154] D.A. Varshalovich, A.V. Ivanchik, P. Petitjean, R. Srianand, C. Ledoux. Ast L. **27**, 683, (2001).

[155] G. Hébrard et al. Astrophysic and Astronomy, **394**, 647 (2002).

[156] N. F. Allard, I. Drira, M. Gerbaldi, J. F. Kielkopf and A. Spielfiedel. Astron. Astrophys. **335**, 1124 (1998b)

[157] N. F. Allard, J. F. Kielkopf and N. Feautrier. Astron. Astrophys. **330**, 782 (1998a)

[158] N. F. Allard, A. Royer, J. F. Kielkopf and N. Feautrier Phys. Rev. A **60**, 102 (1999)

[159] D. Koester, V. Weidemann, E.-M. Zeidler-K. T. and G. Vauchair. Astron. Astrophys. **142**, L5-L8 (1985).

[160] F. Lique, W-Ü. L. Tchang-Brillet, A. Spielfiedel and N. Feautrier. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **37**, 3021 (2004).

[161] F. Lique, W-Ü. L. Tchang-Brillet, A. Spielfiedel and N. Feautrier. private communication SF2A 2005.

[162] N.F. Allard, J. Kielkopf, Rev. Mod. Phys. **54**, 1103, (1982).

[163] F. H. Mies. Theoretical Chemistry : Advances and Perspectives vol 6B, ed D Henderson (New York : Academic) pp 98-127 (1981).

[164] P. S. Julienne. Phys. Rev. A **26**, 3299 (1982).

[165] H. Van Regemorter and N. Feautrier. J. Phys. B : At. Mol. Phys. **18**, 2673 (1985).

[166] B. R. Johnson. J. Comput. Phys. **13**, 445 (1973)

[167] B. H. Bransden and C. J. Joachain.*Physics of atoms and molecules.* Edition Clarendon Press : OXFORD (1992).

[168] D. L. Cooper, P. C. Stancil, A. R. Turner, J.G. Wang, N.J. Clarke, and B. zygelman. Int. J. Mol. Sci. **3**, 220 (2002).

[169] M. Pieksma, M. Gargaud, R. McCarroll and C-C, Havener. Phys. Rev. A. **54**, R13 (1996).

[170] G. Giomousis and D.P. Stevenson, J. Chem. Phys. 29, 294 (1958).

[171] P. Langevin. Ann. Chim. Phys. **5**, 245 (1905).

[172] R. McCarroll and P. Valiron. Astron. Astrophys. **78**, 177 (1979).

[173] R. McCarroll and P. Valiron. Proc. 11th Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions (Amsterdam : North-Holland) (Invited papers and progress reports) p **453** (1980).

[174] M. Rittby, N. Elander, E. Brändas and A. Barany. J. Phys. B : At. Mol. Phys. **17**, L677 (1984).

[175] M.-S Child. Molecular Collision Theory (London : Academic) 1974.

[176] E.-E ikitin. Theory of Elementary Atomic and Molecular Processes in Gases (Oxford : Clarendon) 1974.

[177] A.-E Glassgold, P.-S Kristic and R.-R Schultz. Astrophys. J. **621**, 808 (2005).

[178] P. Barragán, L.-F Errea, L. Méndez, I. Rabadń and A. Riera. Phys. Rev. A. **74**, 24701 (2006).

[179] P. Barragán, L.-F Errea, L. Méndez, A. Maciás, I. Rabadń and A. Riera. Phys. Rev. A **70**, 22707 (2006)

[180] M. Gargaud, J. Hanssen, R. McCarroll and P. Valiron. J. Phys. B : At. Mol. Phys. **14**, 2259 (1981)

Annexe A

Echange de charge entre ions multichargés et atomes neutres dans le domaine des énergies thermiques : Validité du modèle de Langevin.

Durant ma thèse, et pour approfondir mes connaissances en physique des collisions, j'ai étudié le processus d'échange de charge qui ce produit lors de la collision entre l'ion atomique N^{+3} et l'atome neutre H(et/ou D) dans le domaine des énergies de collision allant de 0.1 à 100 meV. Ce processus, qui conduit à un peuplement sélectif des états éxcités de l'ion N^{2+}, est bien décrit par une représentation adiabatique du système, ce qui permet de traiter l'échange de charge comme un phénomène induit par un couplage non-adiabatique.

Vu le large domaine d'application en physique des plasmas et en astrophysique, cette réaction avait été déjà l'objet d'études dans diverses gammes d'énergies. Dans notre cas, le but de ce travail n'étant pas pour une application astrophysique, mais plutôt pour comparer les résultats de la section efficace d'échange de charge obtenues par la méthode quantique (résolution des équations couplées) à ceux prévus par le modèle classique (modèle de Langevin), et essayer de comprendre la raison pour laquelle ce modèle classique ne donne pas le bon rapport isotopique de la section efficace.

A.1 Introduction

Lors d'une collision entre un ion et un atome (ou une molécule) neutre, plusieurs phénomènes peuvent apparaître. Parmi cela le processus d'échange de charge. Ce processus est le passage d'un ou plusieurs électrons d'un système atomique (ou moléculaire) à un autre.
La réaction du transfert de charge de n électrons d'un atome neutre B à un ion A^{+q} s'écrit comme :

$$A^{+q} + B \rightarrow A^{(q-n)} + B^{+n}. \tag{A.1}$$

Dans la gamme des énergies de collision E $\leq$ 1KeV/a.m.u, la vitesse relative des deux partenaires est très inférieure devant la vitesse de leurs électrons liés, et cette réaction passe par une étape intermédiaire, qui consiste à la formation d'une molécule AB^{+q} (168). La compréhension du processus qui nous intéresse se fait par l'étude de la dynamique de cette molécule. Cette étude est réalisée après la détermination des courbes de potentiel adiabatiques de la molécule (167). Chaque courbe de potentiel est corrélée à une voie de sortie. Ainsi l'échange de charge est réalisé à partir d'une transition entre l'état adiabatique corrélé à l'état initial de la réaction A.1 et un état adiabatique corrélé à son état final. Cette transition est due aux couplages non adiabatiques entre les deux états en question.

Les travaux expérimentaux sur l'étude de l'échange de charge entre l'ion Si^{4+} et l'atome neutre D aux énergies $<$ 100 meV (169), montre que la section efficace de transfert de charge σ varie en

fonction de l'inverse de la vitesse de collision v. Ce résultat est en parfait accord avec le modèle de Langevin qui prévoit que (170) :

$$\sigma \propto \frac{q}{v} \times \sqrt{\frac{\alpha}{\mu}} \tag{A.2}$$

où, q est la charge de l'ion, α est la polarisabilité de l'atome neutre (α=4.5 a.u. pour H et D), et μ est la masse réduite du système étudié.
Cependant, la théorie quantique prévoit que la section efficace d'échange de charge du système S^{4+} + H doit être plus grande d'un facteur de 1.9 que celle du système S^{4+} + D, alors que le modèle classique prévoit un facteur de 1.4. Ce désaccord laisse penser que plusieurs hypothèses dans le modèle de Langevin ne sont pas valables.

L'objectif de ce travail est de comprendre la raison pour laquelle le modèle de Langevin, qui prévoit le bon comportement de la section efficace aux énergies variant de 10-100 meV, ne retrouve pas la dépendance isotopique de la section efficace d'échange de charge.

Le modèle de Langevin suppose que dans une collision réactive exothermique entre les systèmes atomiques à une énergie donnée, la réaction a lieu seulement à des collisions pour lesquelles la barrière centrifuge classique est moins que l'énergie de collision (171). Pour les faibles énergies de collision (quelque eV ou moins), cette hypothèse est satisfaisante pour les systèmes ion-neutres en raison du potentiel d'interaction à longue portée qui gouverne l'interaction, et qui varie en R^{-4} (où R est la distance ion-atome neutre). La plupart des applications du modèle de Langevin supposent également, pour simplification, que la probabilité de réaction est constante pour toutes les collisions. Elle est souvent estimée à partir du modèle de Laudau-Zener en combinaison avec une moyenne sur les phases des fonctions d'ondes des états en interaction. Cette procédure de moyenner sur les phases des fonctions d'ondes est fait afin de prendre en compte l'interférence entre les vois en interaction (175; 176). De plus, par exemple, dans le cas des collisions réactives d'ion-molécule, cette probabilité est souvent prise comme unité, en raison du grand nombre de voies réactives.
Dans notre cas présent, à savoir le transfert de charge dans des systèmes d'ion-atome neutre, nous avons seulement deux canaux couplés et la probabilité de transfert de charge, alors supposée constante, est beaucoup plus petite que l'unité.
Si la variation de la section efficace de transfert de charge en fonction de l'énergie est demandée, alors la valeur absolue de la probabilité est suffisante. Mais si la valeur absolue de la section efficace est recherchée, alors il est nécessaire de déterminer les probabilités de transfert de charge avec une bonne précision.

Les calculs récent de Barrágan et al (178) des sections efficaces d'échange de charges O^{2+} + H et N^{2+} + H, avaient montré une divergence encore plus grande par rapport aux résultats obtenus par le modèle de Langevin. Ils ont trouvé dans ces systèmes la présence des structures de résonance dans les sections efficaces. Cette divergence devient de plus en plus importante lorsque l'énergie de collision diminue en dessous 10 meV/amu, tandis qu'aux énergies supérieures à 10 meV/amu, la contribution des résonances aux sections efficaces reste petite. Cependant, même en présence des structures de résonance, il semblerait que la dépendance en énergie de la section efficace de ces systèmes atomiques diffère de manière significative du modèle de Langevin, même dans la gamme de meV 10-100. D'autres calculs de ce même groupe (179) montrent que la section efficace à des faibles énergies présente un maximum. Ce résultat avait été retiré par ces auteurs (178), en le qualifiant d'erreur numérique.
O^{2+} + H et de N^{2+} + H sont des systèmes complexes. Le processus de transfert de charge fait intervenir des configurations électroniques complexes pour le calcul des potentiels adiabatiques,

dont le résultat est difficile à vérifier. En plus de la détermination des couplages non adiabatiques dans la région des croisements évités entres les différentes courbes de potentiel électroniques, il est très important de représenter correctement les interactions à longue distance entre l'ion et l'atome neutre. Pour les très faibles énergies de collision, le comportement asymptotique en R^{-4} des courbes de potentiel est responsable de la variation correcte de la section efficace en fonction de l'énergie et des caractéristiques de l'effet tunnel.
Pour la raison de complexité de ces deux systèmes atomiques, nous nous sommes proposés, dans ce travail, d'étudier le processus d'échange de charge à des énergies variant de 0.1 à 100 meV pour le système N^{3+} + H. Indépendamment du fait que ce système est assez représentatif pour une large classe d'ions en collision avec un atome neutre, il a l'avantage que les potentiels d'interaction et les couplages non-adiabatiques sont connus avec une grande précision sur une large gamme de distances internucléaires, qui gouverne le processus d'échange de charge.

A.2 Méthodes

A.2.1 Démarche générale

Dans notre cas, les courbes de potentiel adiabatiques intervenant dans le processus d'échange de charge entres l'ion N^{3+} et l'atome neutre H sont : l'état électronique $1^2\Sigma$ et l'état électronique $2^2\Sigma$ (172). La première courbe de potentiel est corrélée à la vois de sortie $N^{2+}(1s^2\ 2s^2\ 3s)+H^+$, et la deuxième est corrélé à la voie d'entrée $N^{3+}(1s^2\ 2s^2)+H(1s)$. Ces deux états électroniques sont couplés par un couplage radial B(R). Ces données électroniques sont générées par le potentiel modèle à un électron (180). Dans ce modèle le coeur de l'ion $N^{3+}(1s^2\ 2s^2)\ ^1S$ est représenté par un potentiel effectif. Ce potentiel d'interaction est optimisé de manière à reproduire les énergies liées des états excités et de l'état fondamental de l'ion N^{2+} $(1s^2\ 2s^2\ n\ell)$. Le potentiel effectif est ensuite injecté dans le Hamiltonien électronique composé de l'énergie cinétique T et du potentiel de répulsion des noyaux U_{core}. Les courbes de potentiel adiabatiques et le couplage radial sont obtenus à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger électronique.

Une fois ces données électroniques déterminées, nous calculons la section efficace d'échange de charge à partir des éléments de la matrice de diffusion S, obtenue par la résolution des équations couplées dans la représentation diabatique. Pour cela nous déterminons les courbes de potentiels dans la représentation diabatique à partir d'une transformation unitaire C (le détail sur le changement de représentation adiabatique-diabatique est donné dans le chapitre théorique de la partie I). Dans cette nouvelles représentation, le couplage radial est nul dans la région du croisement évité.

Sur la Figure A.1 et la Figure A.2 on montre, respectivement, la variation des courbes de potentiels et du couplage radial dans les deux représentations.

La résolution des équations couplées est faite par la méthode de Johnson (29). Il est très important, dans le cas des faibles énergies de collision, de bien décrire l'interaction à longue distance dans la voie d'entrée. Ceci est vérifié pour nos courbes de potentiel, puisque les calculs convergent doucement vers la valeurs du potentiel de polarisation donné par $-q^2\alpha/R^4 = -20.25/R^4$.

Les détails de calculs des courbes de potentiels et du couplage non adiabatique (couplage radial) , ainsi que la résolution des équation couplées sont très bien décrite dans l'article B.3 de l'annexe B.

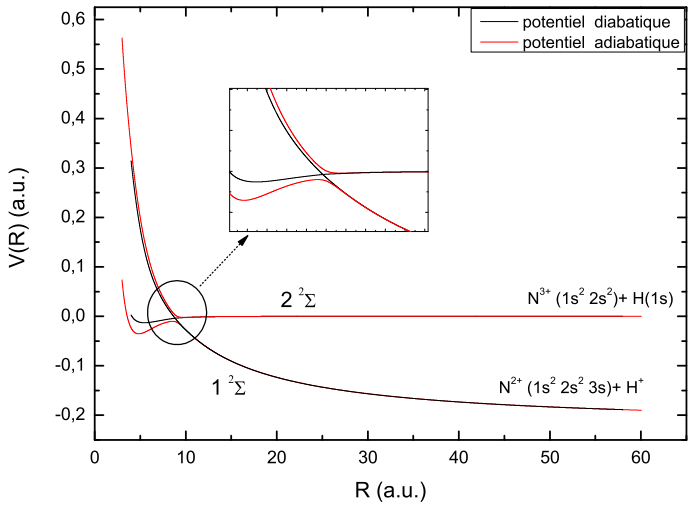


Figure A.1 – *Variation des courbes de potentiels* $1^2\Sigma$ *et* $2^2\Sigma$ *de l'ion moléculaire* NH^{3+} *en fonctions de R dans la représentation adiabatique et la représentation diabatique. Un agrandissement de la région du croisement évité est donné sur cette figure.*

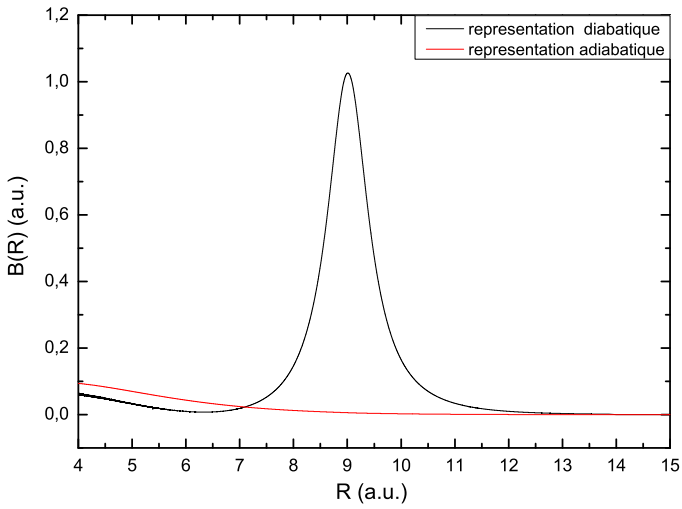


Figure A.2 – *Variation du couplage radial entre les courbes de potentiels* $1^2\Sigma$ *et* $2^2\Sigma$ *de l'ion moléculaire* NH^{3+} *en fonctions de R dans la représentation adiabatique et la représentation diabatique..*

A.3 Résultats et discussions

Les testes de convergences de la section efficace d'échange de charge en fonction de la distance inter nucléaire R, du moment angulaire L et de l'énergie de collisions E sont assurés.

Dans la Figure 1 et la Figure 2 de l'article B.3, on présente, respectivement, le résultat de calcul de la sections efficace σ des systèmes atomiques N^{3+} + H et N^{3+} + D, obtenus à partir de la résolution des équations couplées. Afin de facilité la comparaison avec le modèle de Langevin, nous présentons sur ces figures la variation du produit $\sigma \times \sqrt{E}$ en fonction de l'énergie de collision E déterminée dans le référence du centre de masse.
Nous avons trouvé des pics de résonances qui sont bien définis et stables en énergies. Ces résonances sont liées à la présence d'énergies quasi-liées dans la voie d'entrée, due à la traverser de la barrière centrifuge par effet tunnel. Pour des énergies au-dessus des quelques meV (> 4 meV), ces résonances sont bien localisé et peu nombreuse, et leurs contributions globales à la section efficace est petite. Dans cette plage de résonances, nous remarquons que le comportement de la section efficace varie effectivement en $\sqrt{E}$ pour les deux isotopes comme le prévoit le modèle de Langevin.
Deux quantités contribuent à l'effet isotopique. La première est la gamme des moments angulaires intervenant dans ce processus. Elle est régie par le potentiel à longue portée, qui donne un comportement variant comme l'inverse de la masse pour la section efficace. Cet effet est bien pris en compte par le modèle de Langevin. La deuxième est la probabilité d'échange de charge qui dépend de la masse à travers le couplage non adiabatique dans la région du croisement évité. Cet effet est correctement pris en compte dans le calcul quantique, tandis qu'il est estimé d'une manière approximative dans le modèle de Langevin. Donc il n'est pas surprenant que le modèle de Langevin ne retrouve pas bien le rapport isotopique des sections efficaces.

A partir du résultat de la section efficace, il est difficile de trouver une explication directe à notre problème. Pour mieux comprendre, nous avons entrepris une analyse en ondes partielles de la probabilité d'échange de charge $|S_{12}|^2$. Dans la Figure 3 et la Figure 4 nous présentons le résultats quantiques de la variation de $|S_{12}|^2$ en fonction, respectivement, du moment angulaire L (pour une énergies de collision donnée) et en fonction de l'énergie de collision E (pour un moment cinétique constant). Nous avons trouvé que la valeur du moment angulaire de résonance est proche de la valeur maximale du moment angulaire L_c déterminé à partir de la méthode classique de la barrière centrifuge (voir l'article). A partir de ces deux figures, nous avons trouvé aussi que la probabilité d'échange de charge oscille en fonction de L pour les grandes énergies. Ces oscillations sont une conséquence de l'interférence des phases des ondes partielles dans la région du croisement évité. Ces interférences sont aussi pris en compte dans le modèle classique du type Landau-Zener, et la probabilité totale d'échange de charge est obtenue par une moyenne sur les toutes les valeurs de L. Ce qui donne une probabilité pratiquement indépendante de l'énergie. Donc la notion de probabilité constante dans le modèle de Langevin reste valable.

Cependant, pour les très faibles énergies de collision, le calcul quantique montre que la probabilité est constante (inférieur à l'unité), et décroit d'une manière lisse vers la valeur du moment cinétique L_c. Ainsi la procédure qui consiste à moyenner sur les phases des fonctions d'ondes partielles n'est pas validé et sous estime la valeur de la section efficace σ. Dans la Figure 5 on donne en détail le comportement de la section efficace $\sigma \times \sqrt{E}$ en fonction de l'énergie de collision E, dont laquelle on trouve une région intermédiaire où le modèle de Langevin ne reproduit pas le bon comportement de la section efficace.

A.4 Conclusion

En conclusion, nos calculs montrent que même si le modèle de Langevin donne, pour des énergies inférieures à quelque meV, une bonne prévision de la variation de la section efficace en fonction de l'énergie pour n'importe quel isotope, il ne donne pas la valeur correcte de la section efficace. Par conséquent le bon rapport isotopique de la section efficace d'échange de charge n'est pas retrouvé.

La raison principale est liée à la manière dont la probabilité de transition, dans la région du croisement évité, est déterminée. La procédure de moyenner sur les phases des fonctions d'onde dans le calcul classique de la probabilité d'échange de charge montre son inefficacité à reproduire les calculs quantiques aux énergies thermiques.
Ainsi, hormis les énergies thermiques où l'effet tunnels doit être pris en compte, le succès de la détermination d'une phase moyenne explique pourquoi le modèle de Langevin prévoit le bon comportement de la section efficace en fonction de l'énergie, même si la valeur absolue n'est pas correcte.

Annexe B

Articles à comité de lecture

B.1 Article I : Spectroscopie en émission vuv à haute résolution de la molécule D_2 de 78 à 103 nm : Les systèmes de bandes $D'^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ et $D^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$.

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 125, 214305 (2006)

High resolution vacuum ultraviolet emission spectrum of D_2 from 78 to 103 nm: The $D\,^1\Pi_u \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ and $D'\,^1\Pi_u^- \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ band systems

Mourad Roudjane,[a] Françoise Launay,[b] and W.-Ü Lydia Tchang-Brillet[c]
Laboratoire d'Étude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique, UMR 8112 du CNRS, Observatoire de Paris-Meudon, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon Cedex, France

(Received 29 September 2006; accepted 26 October 2006; published online 4 December 2006)

The emission spectrum of the D_2 molecule has been studied at high resolution in the vacuum ultraviolet region 78.5–102.7 nm. A detailed analysis of the two $D\,^1\Pi_u \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ and $D'\,^1\Pi_u^- \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ electronic band systems is reported. New and improved values of the level energies of the two upper states have been derived with the help of the program IDEN [V. I. Azarov, Phys. Scr. **44**, 528 (1991); **48**, 656 (1993)], originally developed for atomic spectral analysis. A detailed comparison is made between the observed energy levels and solutions of coupled equations using the newest *ab initio* potentials by Wolniewicz and co-workers [J. Chem. Phys. **103**, 1792 (1995); **99**, 1851 (1993); J. Mol. Spectros. **212**, 208 (2002); **220**, 45 (2003)] taking into account the nonadiabatic coupling terms for the $D\,^1\Pi_u$ state with the lowest electronic states $B\,^1\Sigma_u^+$, $C\,^1\Pi_u$, and $B'\,^1\Sigma_u^+$. A satisfactory agreement has been found for most of the level energies belonging to the D and D' states. The remaining differences between observation and theory are probably due to nonadiabatic couplings with other higher electronic states which were neglected in the calculations. © *2006 American Institute of Physics*. [DOI: 10.1063/1.2400228]

I. INTRODUCTION

Molecular hydrogen is by far the most abundant molecule in the Universe. The knowledge of the structure and of the spectrum of its different isotopes is of fundamental interest. The emission spectrum of H_2 has been previously studied extensively from 78 to 170 nm and tabulated in an atlas in 1994.[1]

More recently, some UV absorption lines of the molecular hydrogen isotope HD have been detected with higher resolution and better sensitivity by the Far Ultraviolet Spectroscopic Explorer (FUSE) satellite for a variety of interstellar translucent clouds towards stars in the galactic and extragalactic environments.[2] In order to interpret these observations, astrophysicists need high quality laboratory spectroscopic data. In particular, the HD/H_2 abundance ratio from translucent interstellar clouds could be used for estimation of the D/H ratio which is known to be a tracer for the chemical evolution of the Universe. However, it is difficult to carry out, in the laboratory, the analysis of the HD spectrum without studying the D_2 one first. Indeed, in a Penning-type discharge source, the dissociation of HD leads to the formation of D_2 and H_2 through several collisional processes, and to the presence of H_2 and D_2 lines in the emission spectrum. Moreover, the D_2 spectrum has a great interest in its own, since this isotope of hydrogen molecule has been detected in its electronically excited states in cold regions of tokamaks and is involved in radiative losses of the plasmas. In other respects, the high resolution analysis of the D_2 molecule is a natural progression of works on molecular hydrogen and it offers one more opportunity to examine the accuracy of quantum calculations beyond the Born-Oppenheimer approximation.

Several absorption and emission investigations of the D_2 molecule have been made in the past. From the early 1930s, Dieke and co-workers performed extensive studies on D_2.[3] While the earlier spectra covered the region of 125–165 nm, Bredohl and Herzberg[4] extended the emission spectra at higher resolution down to 100 nm in 1973, and the year after Dabrowski and Herzberg[5] studied the absorption spectra from 84 to 110 nm at high resolution. In 1978 Takezawa and Tanaka[6] studied D_2 in absorption at high resolution between 76.2 and 85.6 nm. In 1980, Larzillière *et al.*[7] studied the emission spectra near 80 nm at high resolution. The electronic spectra and energy levels of D_2 obtained by all these authors have been reviewed and tabulated in 1985.[8] The far ultraviolet spectrum has been also studied using the electronic impact with the D_2 molecule at lower resolution.[9]

We have extended the previous high resolution studies (Refs. 4–6) by recording new spectra in the wavelength range of 78.5–170 nm, using the 10 m vacuum ultraviolet (vuv) spectrograph at the Meudon Observatory and the same Penning-type discharge source previously used for H_2. The analysis of the new spectra, limited in the present work to the 78.5–102.7 nm spectral range, has been carried out with the support of theoretical calculations of transition energies and line intensities for the bands predicted to be present in that range: from the $B\,^1\Sigma_u^+$, $C\,^1\Pi_u$, $B'\,^1\Sigma_u^+$, $D\,^1\Pi_u$, $B''\bar{B}\,^1\Sigma_u^+$, $D'\,^1\Pi_u$, and $D''\,^1\Pi_u$ excited states to the $X\,^1\Sigma_g^+$ ground state. The calculation of energy levels and transition

[a]Author to whom correspondence should be addressed. Electronic mail: mourad.roudjane@obspm.fr
[b]Present address: Systèmes de Référence Temps Espace, UMR 8630 du CNRS, Observatoire de Paris, section de Paris, 61 avenue de l'Observatoire, 75014 Paris, France.
[c]Also at Université Pierre et Marie Curie-Paris 6.

 © 2006 American Institute of Physics

Downloaded 01 Feb 2007 to 145.238.17.35. Redistribution subject to AIP license or copyright, see http://jcp.aip.org/jcp/copyright.jsp

probabilities to the ground state for the B, C, B', and D coupled system had been done previously (Ref. 9) with formerly available *ab initio* potentials empirically modified in order to reproduce in the zero-coupling approximation the few experimental levels for the lowest rotational quantum number J (Ref. 8). The present calculations of level energies and line intensities make use of the most recent *ab initio* data of adiabatic potentials and transition moments and take into account nonadiabatic coupling terms.

Since the large rotational intervals of the D_2 molecule result in a complex line spectrum similar to a complex atom spectrum, the program IDEN,[10,11] developed for the analysis of complex atomic spectra, has been experienced for identifying spectral lines, finding energy levels, and optimizing their energy values. In this wavelength range the analysis has led to the assignment of a number of bands belonging to the $D\,^1\Pi_u \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ and $D'\,^1\Pi_u^- \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ systems, with newly determined energy levels. The new improved level energies are then compared to the calculated ones.

The original line lists, including wave numbers, assignments, and transition probabilities, leading to the results presented here are available separately via the EPAPS data depository of the American Institute of Physics.[12]

Several excited energy levels belonging to the B, C, and B' electronic states and some low energy levels belonging to the $B''\bar{B}$ and D'' electronic states, which were also observed, will be reported later in future publication.

II. EXPERIMENT

The D_2 emission spectra have been produced in a low pressure Penning discharge source and photographed in the first order of the Eagle mounting vuv 10 m spectrograph of the Meudon Observatory, using 18 in. long Kodak SWR plates. The instrument is equipped with a concave (R=10.685 m), 3600 lines/mm Jobin Yvon holographic grating, which gives a plate factor of 0.025 nm/mm. The slit width was 30 μm, giving a resolving limit of 8×10^{-4} nm throughout the whole range of observation. A permanent magnet creating a magnetic field of 0.1 T in the lamp makes possible to run it at pressures as low as about 10^{-2} Torr. One of its advantages is that the self-absorption is much reduced so that the observed spectrum extends further towards the short wavelengths.

Typical exposure times were 30 min. However, in the short wavelength range (78.5–88.6 nm) the observed emission lines are quite weak and the required exposure time was about 10 h.

As previously pointed out (Ref. 1), the main difficulty lies in wavelength calibration because of the scarcity of standard lines in the far ultraviolet and of the possible unreproducible shift between the studied spectrum and the reference spectrum, due to a different illumination of the grating by the different lamps producing the different spectra. Reference lines (Cu II, Ge II, Si II) were obtained by flowing helium in an ancillary water cooled copper hollow cathode discharge lamp, operated at 600 V and 200 mA, with small pieces of germanium and silicon introduced inside the cathode. Impurity lines (O I, N I) appearing in both spectra were used to determine the possible shift mentioned above.

TABLE I. *Ab initio* data used in our theoretical calculations.

Adiabatic potentials	Electronic transition moments $M_{nX}(R)$
$X\,^1\Sigma_g^{+a}$	
$B\,^1\Sigma_u^{+b}$	$B-X^c$
$B'\,^1\Sigma_u^{+b}$	$B'-X^c$
$B''\,^1\Sigma_u^{+b}$	$B''-X^c$
$C\,^1\Pi_u^{d}$	$C-X^d$
$D\,^1\Pi_u^{d}$	$D-X^d$
$D'\,^1\Pi_u^{d}$	$D'-X^d$
$D''\,^1\Pi_u^{e}$	$D''-X^e$
Coupling matrix elements[f]	

[a]Reference 11.
[b]Reference 20.
[c]Reference 23.
[d]Reference 21.
[e]Reference 22.
[f]Reference 24.

In order to increase the accuracy of our measurements, we made an average over the various wavelengths obtained from various experimental conditions, such as increasing or decreasing the exposure time and pressure.

The plates were measured by means of the Meudon Observatory photoelectric comparator, which gives an accuracy of 1 μm on line positions. The accuracy of the obtained wavelengths is estimated to be $\pm15\times10^{-5}$ nm (±0.14–0.25 cm^{-1} on the wave numbers in the present wavelength range) for the unblended deuterium lines.

III. THEORY

Assignments of the lines of the D_2 molecule from the experimental spectrum are supported by comparison of the wavelengths and line intensities with theoretical predictions. In our theoretical study, we first calculated energies and wave functions of upper bound levels belonging to the $B\,^1\Sigma_u^+$, $C\,^1\Pi_u$, $B'\,^1\Sigma_u^+$, $D\,^1\Pi_u$, $D'\,^1\Pi_u$, $B''\bar{B}\,^1\Sigma_u^+$, and $D''\,^1\Pi_u$ excited states, using the newest *ab initio* potentials and available *ab initio* coupling functions to take into account nonadiabatic effects. Then in a second step, we calculated transition probabilities from these upper states to lower bound states belonging to the $X\,^1\Sigma_g^+$ ground state, involving the corresponding matrix elements of the electronic transition moments. Table I summarizes the references of all the *ab initio* data used in the present calculations.

The $X\,^1\Sigma_g^+$ ground state is isolated from the other excited states; therefore its vibrational eigenfunctions and eigenvalues were calculated for each rotational quantum number J in the adiabatic approximation adding the corresponding centrifugal term to the *ab initio* potential, which includes the adiabatic correction into the Born-Oppenheimer potential, computed by Wolniezwicz.[13] The relativistic and the radiative corrections[14] were also taken into account in the present calculations.

As for the excited states, it is well known that states of the same symmetry undergo homogeneous radial interactions leading to avoided crossings of their adiabatic potentials, whereas states of different symmetries such as $^1\Sigma_u^+$ and $^1\Pi_u$ may be affected by a heterogeneous rotational interaction

Downloaded 01 Feb 2007 to 145.238.17.35. Redistribution subject to AIP license or copyright, see http://jcp.aip.org/jcp/copyright.jsp

that perturbs the rotational structure of the $^1\Sigma_u^+$ and $^1\Pi_u^+$ states and causes irregular Λ-type splitting in the $^1\Pi_u$.[15]

For the $B''\bar{B}$, D', and D'' states, since none of the nonadiabatic couplings between these states and the other excited states can be found in the literature, the calculations of the level energies were performed in the adiabatic approximation. Using the new *ab initio* potentials for the $B''\bar{B}$, D', and D'' states and including the adiabatic energy corrections for the $B''\bar{B}$ and D' states, the vibrational eigenfunctions and eigenvalues were obtained separately for each electronic state by solving the one-state Schrödinger equation for each J value. In the present work, the one-state Schrödinger equations, as well as the coupled equations (see below), were solved by means of the Fourier grid Hamiltonian (FGH) method.[16]

For the B, B', C, and D states, which are well known to be strongly coupled, it is necessary to go beyond the adiabatic approximation. Coupled equations were then solved simultaneously for these four states of both $^1\Pi_u$ and $^1\Sigma_u^+$ symmetries, taking into account the radial couplings between the B and B' $^1\Sigma_u^+$ states and between the C and D $^1\Pi_u$ states, as well as the $(\Sigma^+-\Pi^+)$ rotational couplings. The formalism is the same as that described in details by Senn *et al.*[17] We will only summarize here some main features.

Within these singlet states of u symmetry, each bound state is characterized by the rotational quantum number J, the parity $(+,-)$ specified by electronic Λ^+ or Λ^- symmetry. For a given rotational number J and a given parity, the bound states can furthermore be specified by an ordering index i according to increasing energies. Each nonadiabatic wave function $\Phi_i(r,R)$ can be expanded in a basis of electronic-rotational functions $\Psi_{n,J}(r,R)$:

$$\Phi_i(r,R) = \sum_n \Psi_{n,J}(r,R) f_{n,i}(R). \tag{1}$$

The label n refers to the particular electronic state belonging to $\{B,B',C,D\}$. In the present case, the nonadiabatic wave function $f_i(R)$ is a four-component vector,

$$f_i(R) = \{f_{n,i}(R), f_{n',i}(R), \ldots,\}, \tag{2}$$

and satisfies the coupled equations which can be written in a 4×4 matrix form. In the adiabatic representation, the diagonal matrix elements of the Hamiltonian are constituted by the adiabatic potentials together with the centrifugal term and the diagonal part of the radial coupling term (adiabatic correction), whereas the off-diagonal matrix elements represent the rotational couplings and the nondiagonal part of the radial coupling. As the rotational interaction only affects the Σ^+ and Π^+ states, a system of coupled equations without rotational coupling has to be solved for the Π^- component. It is convenient to transform the coupled equations by a unitary transformation which makes the first derivative radial coupling to vanish. In the transformed equations, written in the so-called diabatic representation, the matrix of the Hamiltonian has diagonal elements given by diabatic potentials, which may cross even between states of the same symmetry, and off-diagonal elements given by electronic couplings between the diabatic states with no radial derivatives. The diabatic coupled equations were then solved. However, instead of employing the renormalized Numerov method developed by Johnson,[18] as have been done in Refs. 9 and 17, we applied, in the present study, the FGH method (Ref. 16), an efficient and accurate method for bound state problems. The advantage of this method is to provide all the energy values and the coupled-channel wave functions in one single diagonalization of the Hamiltonian matrix expressed in a discrete variable representation (DVR). References can be found in a previous work where six-state coupled equations in the nitrogen molecule were solved for Rydberg-valence interaction study.[19] For comparison purpose, we performed FGH calculations using the same previous *ab initio* data as in Ref. 17 and the results are in good agreement. Throughout our calculations, we adopted the values according to Ref. 17 for the system reduced mass and the energy conversion factor: $\mu_{D_2}=1835.2395$ a.u. and 1 a.u.$=219\,474.631$ cm^{-1}.

After solving the diabatic coupled equations, the solutions were transformed back to the adiabatic representation four-component vector $f_i(R)$. The percentage of the electronic character n is obtained by

$$\rho_i(n) = \int [f_{n,i}(R)]^2 dR, \tag{3}$$

with the normalization $\rho_i(B)+\rho_i(C)+\rho_i(B')+\rho_i(D)=1$.

The electronic component $f_{n,i}(R)$ takes into account not only the bound vibrational states but also the vibrational continuum. The percentage corresponding to a particular vibrational state v_n of the electronic state n can be obtained by expanding over a set of vibrational functions $f_{n,v}(R)$, solutions of the uncoupled equation for adiabatic state n:

$$\rho_i(n,v) = \left| \int f_{n,v}(R) f_{n,i}(R) dR \right|^2. \tag{4}$$

The above calculated energies and the corresponding wave functions in the adiabatic representation were then used to calculate the transition probabilities. For this purpose, a reordering of energy levels is necessary. Indeed, the calculations were carried out for a given J, with bound levels indexed (J,i) by increasing energies, while the transition arrays are usually reported by bands as $n-X(v'-v'')$, v' and v'' being, respectively, the upper and the lower vibrational quantum numbers with, for each band, spectroscopic branches P, Q, or R corresponding, respectively, to the selection rule $\Delta J=J'-J''=-1,0,+1$. For a given coupled bound state, not only a pure electronic character n no longer holds, the vibrational quantum number is neither a good quantum number. However, generally for a given (J,i) level, there is one main component (n,v) with the largest electronic percentage $\rho_i(n)$ and the largest coefficient $\rho_i(n,v)$. For convenience of spectral analysis, we therefore named a bound state according to its main component (n,v) and built the branches by increasing J values for all the levels with the same main component (n,v). One must note that exception may occur when different components have similar weights.

Furthermore, when the electronic wave function has a Σ^+ symmetry, the total parity of the total wave function in the laboratory frame is given by the parity of the rotational quan-

Downloaded 01 Feb 2007 to 145.238.17.35. Redistribution subject to AIP license or copyright, see http://jcp.aip.org/jcp/copyright.jsp

TABLE II. Experimentally determined level energies (cm^{-1}) of D_2 in the $D\,^1\Pi_u^+$ state. Energies E above the $X\,^1\Sigma_g^+(v=0,J=0)$ level.

J	E^a	N^b	$o-o'^c$	o-c1[d]	o-c2[e]	E	N	$o-o'$	o-c1	o-c2
			$v=0$					$v=1$		
1	113 223.06	12	−0.05	0.05	−0.05	114 825.35	12	0.11	0.06	0.03
2	113 283.51	12	−0.07	−0.07	−0.17	114 885.25	13	−0.18	−0.31	−0.31
3	113 373.74	12	−0.08	−0.27	−0.35	114 974.58	13	−0.14	−0.43	−0.38
4	113 493.48	12	0.26	−0.25	−0.31	**115 092.31**	13	⋯	−0.59	−0.52
5	113 641.43	12	0.19	−0.50	−0.50	**115 237.74**	12	⋯	−0.82	−0.73
6	**113 816.31**	12	⋯	−0.99	−0.89	**115 410.41**	13	⋯	−0.86	−0.75
7	**114 016.04**	11	⋯	−1.40	⋯	**115 608.86**	11	⋯	−1.40	⋯
8	**114 234.81**	7	⋯	−2.10	⋯	**115 834.29**	12	⋯	−1.42	⋯
9	**114 558.83**	8	⋯	−1.80	⋯	**116 083.09**	13	⋯	−0.58	⋯
10	**114 830.74**	4	⋯	−0.55	⋯					
			$v=2$					$v=3$		
1	116 359.88	14	0.19	0.05	0.13	117 831.36	14	−0.21	−0.53	−0.27
2	116 416.05	14	−0.05	−0.29	−0.20	117 886.94	15	−0.04	−0.44	−0.14
3	116 499.93	14	−0.26	−0.71	−0.59	117 968.78	15	−0.28	−0.84	−0.51
4	116 611.41	13	−0.10	−0.74	−0.58	118 076.87	14	−0.24	−0.95	−0.59
5	**116 748.86**	13	⋯	−1.23	−1.02	**118 210.37**	14	⋯	−0.78	−0.39
6	**116 912.59**	11	⋯	−0.79	−0.48	**118 367.07**	13	⋯	−1.36	−0.92
7	**117 098.09**	11	⋯	−2.21	⋯	**118 544.83**	13	⋯	−2.46	⋯
8	**117 306.23**	10	⋯	−1.20	⋯	**118 734.66**	11	⋯	−2.01	⋯

[a]Newly determined energies are in boldface.
[b]Number of observed lines from the upper level involved.
[c]Difference between the present and the previous (Ref. 8) experimental energies.
[d]Difference between the observed and the calculated energies from the present work.
[e]Difference between the observed and previously (Ref. 9) calculated energies.

tum number J, and all the levels are labeled by e. In the case of doubly degenerated state Π, no definite parity holds. As mentioned above, the presence of the rotational coupling between $(\Sigma^+-\Pi)$ splits the degeneracy into the Π^- and Π^+ states. The levels belonging to Π^+ states have the parity given by $(-1)^J$ and are labeled by e, whereas the levels belonging to the Π^- states have the parity given by $(-1)^{J+1}$ and are labeled by f. The combination of the selection rules on the parity change and on the rotational quantum numbers $\Delta J=J'-J''=-1,0,+1$, where J' and J'' characterize, respectively, the upper and lower levels, results in two spectroscopic branches P and R from a $\Sigma^+-\Sigma^+$ or a $\Pi^+-\Sigma^+$ transition array $(e\leftrightarrow e,\ f\leftrightarrow f)$ and only one Q branch for a $\Pi^-\Sigma^+$ transition array $(e\leftrightarrow f)$.

The spontaneous emission probability per unit time (Einstein coefficient) from an upper level of energy $E_{nv'J'}$ to a lower level of energy $E_{Xv''J''}$ is given in s^{-1} by the expression

$$A_{nv'J';\,Xv''J''}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{4}{3c^3\hbar^4(2J'+1)}\times(E_{nv'J'}-E_{Xv''J''})^3|M^\alpha|^2. \quad (5)$$

M^α is the electric dipole transition matrix element between the upper and lower states. The label α stands for the spectroscopic branches P, Q, or R corresponding, respectively, to the selection rule $\Delta J=J'-J''=-1,0,+1$. For coupled states ordered by the same main component (n,v), the expressions of dipole matrix elements are given by

$$M^P=\sqrt{J'+1}(\langle f_{BJ'}|M_{BX}|f_{Xv''J''}\rangle+\langle f_{B'J'}|M_{B'X}|f_{Xv''J''}\rangle)+\sqrt{J'}(\langle f_{C+J'}|M_{CX}|f_{Xv''J''}\rangle+\langle f_{D+J'}|M_{DX}|f_{Xv''J''}\rangle), \quad (6)$$

$$M^Q=\sqrt{2J'+1}(\langle f_{C-J'}|M_{CX}|f_{Xv''J''}\rangle+\langle f_{D-J'}|M_{DX}|f_{Xv''J''}\rangle), \quad (7)$$

$$M^R=\sqrt{J'}(\langle f_{BJ'}|M_{BX}|f_{Xv''J''}\rangle+\langle f_{B'J'}|M_{B'X}|f_{Xv''J''}\rangle)-\sqrt{J'+1}(\langle f_{C+J'}|M_{CX}|f_{Xv''J''}\rangle+\langle f_{D+J'}|M_{DX}|f_{Xv''J''}\rangle). \quad (8)$$

The M_{nX} are the real values of the *ab initio* electronic transition moments (see references in Table I) for each internuclear distance in the Born-Oppenheimer approximation. The $f_{Xv''J''}$ are vibrational wave functions of the X ground state for

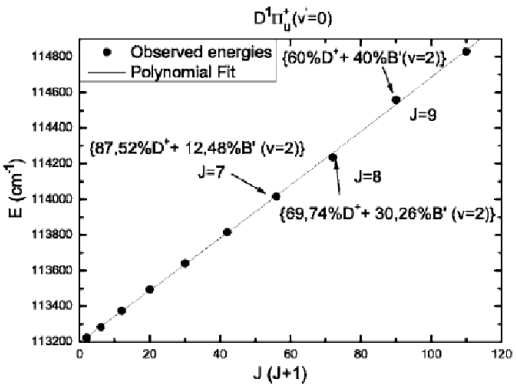


FIG. 1. Observed and calculated level energies vs $J(J+1)$.

Downloaded 01 Feb 2007 to 145.238.17.35. Redistribution subject to AIP license or copyright, see http://jcp.aip.org/jcp/copyright.jsp

TABLE III. Experimentally determined level energies (cm^{-1}) of D_2 in the $D^1\Pi_u^-$ state. Energies E above the $X\,^1\Sigma_g^+(v=0,J=0)$ level.

J	E[a]	o-c1[b]	$o-o'$[c]	N[d]	E	o-c1	$o-o'$	N	E	o-c1	$o-o'$	N	E	o-c1	$o-o'$	N
		$v=0$				$v=1$				$v=2$				$v=3$		
1	113 222.65	0.21	0.13	5	114 823.42	−0.19	−0.19	7	116 359.00	−0.10	0.00	6	117 830.21	−0.24	0.03	8
2	113 282.09	0.16	0.02	6	114 880.76	−0.13	−0.13	7	116 414.12	−0.10	0.01	7	117 883.21	−0.24	−0.03	8
3	113 370.99	0.12	0.01	5	114 966.35	−0.17	−0.23	7	116 496.63	0.00	0.12	7	117 962.46	−0.23	0.00	7
4	113 489.02	0.11	−0.08	6	115 080.13	−0.04	−0.05	7	116 605.66	−0.32	−0.19	7	118 067.54	−0.31	−0.11	8
5	113 635.75	0.16	0.04	6	115 221.54	0.15	0.18	7	116 741.83	−0.03	0.09	7	**118 198.57**	0.08	⋯	8
6	113 810.59	0.24	0.07	6	115 389.00	−0.63	−0.67	7	116 903.41	−0.31	0.73	6	**118 353.61**	−0.50	⋯	9
7	114 012.69	0.17	0.00	6	**115 584.31**	0.06	⋯	7	**117 091.26**	0.31	⋯	6	**118 533.56**	−0.55	⋯	7
8	114 241.33	−0.04	−0.19	6	**115 804.16**	−0.36	⋯	6	**117 302.53**	−0.32	⋯	4	**118 737.34**	−0.45	⋯	8
9	114 496.02	−0.04	−0.21	5	**116 049.68**	0.04	⋯	6	**117 538.39**	⋯0.23	⋯	7	**118 963.98**	−0.41	⋯	5
10	114 775.03	−0.65	−0.62	5	**116 318.62**	−0.12	⋯	6	**117 796.94**	−0.48	⋯	6	⋯	⋯	⋯	⋯
		$v=4$				$v=5$				$v=6$				$v=7$		
1	119 238.58	−0.28	0.01	9	120 585.05	−0.40	−0.04	7	121 870.53	−0.65	0.07	10	123 095.98	−0.74	0.14	9
2	119 289.49	−0.30	0.02	9	**120 634.01**	−0.34	⋯	8	121 917.45	−0.61	0.15	10	123 140.86	−0.74	0.16	9
3	119 365.43	−0.50	0.15	8	120 707.22	−0.21	0.32	8	121 987.39	−0.73	0.02[e]	10	123 207.89	−0.80	0.10	9
4	119 466.51	−0.46	−0.07	8	120 803.86	−0.54	0.09	9	122 080.33	−0.76	−0.05	9	123 296.92	−0.76	0.19	10
5	**119 591.58**	−0.90	⋯	9	**120 924.07**	−0.79	⋯	7	**122 195.72**	−0.83	⋯	9	**123 407.37**	−0.83	⋯	8
6	**119 741.53**	−0.45	⋯	9	**121 067.80**	−0.53	⋯	7	**122 333.79**	−0.26	⋯	9	**123 538.88**	−0.92	⋯	10
7	**119 914.67**	−0.20	⋯	8	**121 233.75**	−0.47	⋯	6	**122 492.43**	−0.60	⋯	10	**123 691.36**	−0.55	⋯	9
8	**120 109.65**	−0.84	⋯	7	**121 421.30**	−0.59	⋯	6	**122 671.63**	−1.21	⋯	9	**123 863.39**	−0.55	⋯	9
9	**120 327.67**	−0.42	⋯	9	**121 630.29**	−0.34	⋯	6	**122 872.31**	−0.49	⋯	7	**124 051.84**	−3.36	⋯	7
10	**120 566.39**	−0.49	⋯	9	**121 859.04**	−0.60	⋯	6	**123 090.81**	−1.33	⋯	10	**124 264.10**	−0.84	⋯	8
		$v=8$				$v=9$				$v=10$				$v=11$		
1	124 261.67	−0.87	0.03	11	125 368.16	−0.73	0.20	12	126 415.23	−0.82	0.22	10	127 402.67	−0.98	0.04	12
2	124 304.50	−0.94	−0.04	11	125 408.95	−0.93	0.16	12	126 454.32	−0.67	0.50	11	127 439.89	−0.71	0.45	14
3	124 368.67	−0.89	0.10	11	125 470.05	−0.98	0.10	12	126 512.38	−0.80	0.38	12	127 494.67	−1.14	0.10	11
4	124 454.15	−0.46	0.62	11	125 551.12	−1.03	−0.50	11	126 589.61	−0.74	0.37	10	127 567.86	−1.15	0.01	13
5	**124 559.32**	−0.90	⋯	9	**125 651.78**	−1.08	⋯	11	**126 685.09**	−1.05	⋯	12	**127 659.13**	−0.71	⋯	10
6	**124 685.08**	−0.87	⋯	10	**125 771.70**	−1.02	⋯	8	**126 799.27**	−0.85	⋯	10	**127 767.34**	−0.56	⋯	13
7	**124 830.72**	−0.53	⋯	9	**125 910.07**	−1.15	⋯	11	**126 931.11**	−0.68	⋯	4	**127 892.14**	−0.55	⋯	9
8	**124 994.64**	−0.90	⋯	10	**126 066.96**	−0.81	⋯	9	**127 080.22**	−0.35	⋯	7	**128 032.95**	−0.68	⋯	9
9	**125 178.52**	0.38	⋯	8	**126 240.96**	−0.76	⋯	9	**127 244.63**	−1.19	⋯	8	⋯	⋯	⋯	⋯
10	**125 376.77**	−1.55	⋯	9	**126 430.17**	−1.17	⋯	8	⋯	⋯	⋯	⋯	**128 361.14**	−0.29	⋯	10
		$v=12$				$v=13$				$v=14$				$v=15$		
1	128 330.40	−0.91	0.37	10	**129 197.40**	−0.91	⋯	10	**130 002.81**	−0.83	⋯	12	**130 745.02**	−0.98	⋯	10
2	128 365.32	−0.93	0.29[e]	11	**129 230.31**	−0.89	⋯	11	**130 033.30**	−1.14	⋯	13	**130 774.27**	−0.38	⋯	6
3	**128 417.41**	−1.03	⋯	8	**129 279.61**	−0.71	⋯	14	**130 079.20**	−1.23	⋯	8	**130 816.16**	−1.25	⋯	10
4	**128 486.45**	−1.17	⋯	10	**129 344.39**	−1.03	⋯	12	**130 140.40**	−0.95	⋯	10	**130 872.83**	−1.20	⋯	12
5	**128 571.95**	−1.50	⋯	6	**129 425.02**	−1.14	⋯	10	**130 215.87**	−1.01	⋯	9	**130 943.15**	−1.04	⋯	11
6	**128 674.12**	−1.40	⋯	9	⋯	⋯	⋯	⋯	**130 305.30**	−1.30	⋯	11	**131 025.84**	−1.64	⋯	9
7	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	**130 408.72**	−1.33	⋯	9	**131 121.64**	−1.78	⋯	7
8	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	**130 524.96**	−1.70	⋯	6	**131 230.84**	−0.63	⋯	9
9	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	**130 654.78**	⋯1.05	⋯	8	**131 349.31**	−1.70	⋯	9
		$v=16$				$v=17$				$v=18$				$v=19$		
1	**131 422.77**	−0.96	⋯	11	**132 033.62**	−1.21	⋯	11	**132 576.11**	−0.90	⋯	12	⋯	⋯	⋯	⋯
2	**131 449.28**	−0.87	⋯	12	**132 057.89**	−1.04	⋯	10	**132 596.80**	−1.89	⋯	13	**133 065.05**	−1.80	⋯	10
3	**131 488.75**	−0.82	⋯	12	**132 093.39**	−1.48	⋯	10	**132 630.09**	−0.89	⋯	8	**133 094.36**	−0.95	⋯	8
4	**131 542.63**	−1.11	⋯	14	**132 141.34**	−1.06	⋯	9	**132 672.35**	−1.30	⋯	9	**133 130.96**	−1.89	⋯	11
5	**131 605.07**	−1.26	⋯	13	⋯	⋯	⋯	⋯	**132 724.92**	−1.44	⋯	6	**133 177.33**	−1.80	⋯	13
6	**131 682.42**	−0.53	⋯	9	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	**133 232.86**	−0.86	⋯	12
7	**131 769.90**	−1.20	⋯	9	**132 349.85**	−1.00	⋯	11	**132 859.83**	−0.30	⋯	13	⋯	⋯	⋯	⋯
8	**131 868.46**	−1.78	⋯	9	**132 439.08**	−1.60	⋯	9	**132 937.55**	−2.60	⋯	13	⋯	⋯	⋯	⋯

[a]Newly determined energies are in boldface.
[b]Difference between the observed and the calculated energies from the present work.
[c]Difference between the present and the previous (Ref. 8) experimental energies.
[d]Number of observed lines from the upper level involved.
[e]Due to an error in Ref. 7, the value given in Ref. 8 has been corrected.

Downloaded 01 Feb 2007 to 145.238.17.35. Redistribution subject to AIP license or copyright, see http://jcp.aip.org/jcp/copyright.jsp

TABLE IV. Vibrational intervals $\Delta G = E_{v+1} - E_v$ (cm^{-1}) in the $D\,^1\Pi_u^-$ state for $J=0$.

	$\Delta G(v+1/2)$	
v	Obs.	Theor.
0	1602.07	1602.28
1	1536.53	1536.57
2	1472.34	1472.40
3	1409.32	1409.45
4	1347.60	1347.62
5	1286.36	1286.74
6	1226.61	1226.54
7	1165.43	1166.81
8	1107.38	1107.40
9	1048.26	1048.09
10	988.40	988.60
11	928.88	928.66
12	867.89	868.02
13	806.46	806.38
14	743.55	743.43
15	678.67	678.83
16	611.85	612.26
17	543.14	543.40
18	472.46	472.00

rotational number J''. The $f_{nJ'}$ are components of the nonadiabatic wave function $f_i(R)$ satisfying the coupled equations in the adiabatic representation. For the $B''\bar{B}\,^1\Sigma_u^+$, $D'\,^1\Pi_u^-$, and $D''\,^1\Pi_u^-$ excited states studied in the adiabatic approximation, the expression of the dipole matrix elements can be obtained straightforwardly by considering only the vibrational wave functions of the studied electronic state and canceling the other terms in Eqs. (6)–(8).

The emission oscillator strengths can be derived from the spontaneous emission probability via the following expression:

$$f_{nv'J';\,Xv''J''} = \frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\frac{m_e c}{8i^2\sigma^2}\frac{(2J'+1)}{(2J''+1)}A_{nv'J';\,Xv''J''}, \qquad (9)$$

where m_e is the electron mass and σ is the wave number of the transition.

IV. ANALYSIS OF THE SPECTRUM

The analysis of the experimental spectrum aims to the assignment of each spectral line of wave number σ_i to a given transition between an upper and a lower level of respective energies E_{up} and E_{low}. Although the energies from the theoretical study described in the precedent section provide predictions of wave numbers by energy differences, their accuracy, which is at best 1 cm^{-1}, is not sufficient for line assignment by direct comparison of the theoretical and experimental wave numbers. Indeed, the emission spectrum of the D_2 molecule is a quite dense line spectrum, with about three lines per wave number in average in the range of interest. To confirm a line assignment, one must make use of the information on line intensities; therefore the analysis must rely on the comparison between calculated transition probabilities and experimental line intensities.

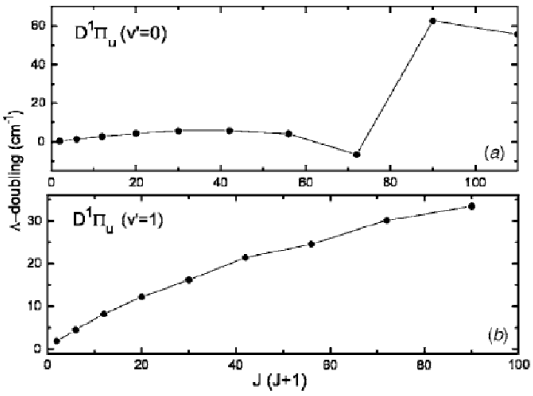


FIG. 2. Observed Λ doubling for (a) $v=0$ and (b) $v=1$ vibrational states in the $D\,^1\Pi_u$ state.

For a light molecule such as D_2, the large rotational intervals result in overlapping of different band systems. This gives rise to a complex line spectrum, which at high resolution looks similar to a complex atomic spectrum, rather than a usual molecular band spectrum. The key idea in the present analysis is to experience, for the first time in the case of a molecular spectrum, the application of the program IDEN (Refs. 10 and 11) developed for visual identification of complex atomic spectra. This program is based on pattern recognition and is a powerful tool for identifying spectral lines, finding energy levels and optimizing their energy values. The details of the code are described in Refs. 10 and 11. The input data for the code are lists of spectral lines, theoretical energies, and transition probabilities. Also specified are the estimated uncertainties for all measured and all theoretically calculated quantities, such as wavelengths and level energies. For the ground state vibrational levels, we introduced the experimental energies (Ref. 4) considered to be known with negligible uncertainty. Thus, the uncertainties on the theoretical transition wave numbers depend only on the uncertainties of the theoretical energies which can be estimated to be about $\Delta E_{v'J'} = \pm 1$ cm^{-1} for the coupled states and $\Delta E_{v'J'} = \pm 5$ cm^{-1} for the $B''\bar{B}$ and D' excited states. For the other higher excited states we estimated a $\Delta E_{v'J'} = \pm 15$ cm^{-1}.

The program is able to display in several different windows a large amount of numbers that have to be handled during the analysis, i.e., theoretical and experimental wave numbers, level energies, and line intensities. Even though the analysis cannot be completely automatic because of fortuitous coincidences, the use of IDEN has definitely sped up the analysis, which would have been otherwise much longer and tedious.

A table of assigned transitions is built during the analysis. In the present analysis, the wavelength region of interest (78.5–102.7 nm) contains more than 6000 lines, out of about 24 000 lines in the whole recorded wavelength region (78–170 nm). In spite of our high resolution limit (8×10^{-4} nm) many lines have more than one assignment.

Downloaded 01 Feb 2007 to 145.238.17.35. Redistribution subject to AIP license or copyright, see http://jcp.aip.org/jcp/copyright.jsp

TABLE V. Experimentally determined level energies (cm^{-1}) of D_2 for the $D'\ ^1\Pi_u^-$ state. Energies E above the $X\ ^1\Sigma_g^+(v=0,J=0)$ level.

J	E[a]	o-c1[b]	$o-o'$[c]	N[d]	E	o-c1	$o-o'$	N	E	o-c1	$o-o'$	N	E	o-c1	$o-o'$	N
		$v=0$				$v=1$				$v=2$				$v=3$		
1	118 189.19	0.39	0.09	6	119 775.43	0.01	−4.07	7	121 296.94	−0.01	−0.06	7	122 754.44	−0.50	−0.56	10
2	118 248.13	0.31	0.13	7	119 832.30	0.06	0.00	8	121 351.55	−0.07	0.15	9	122 807.24	−0.27	−0.26	11
3	118 336.15	0.11	0.05	6	119 917.26	0.09	0.26	9	121 433.01	−0.33	−0.19	8	122 885.77	−0.33	−0.03	10
4	118 453.35	0.22	0.25	7	120 030.30	0.41	0.10	7	121 541.49	−0.31	−0.21	8	122 990.27	−0.12	−0.03	10
5	118 599.18	0.55	0.18	6	120 169.98	0.03	0.18	7	121 676.10	−0.45	0.00	8	123 120.68	0.73	−0.12	11
6	**118 771.96**	−0.02	⋯	7	120 336.66	−0.16	14.36	6	**121 836.82**	−0.26	⋯	7	**123 273.54**	−0.75	⋯	8
7	**118 972.82**	0.29	⋯	6	**120 529.26**	−0.58	⋯	8	**122 022.33**	−0.43	⋯	8	**123 450.89**	−1.90	⋯	8
8	**119 199.72**	0.20	⋯	7	**120 750.87**	2.57	⋯	7	**122 232.18**	−0.72	⋯	8	**123 654.10**	−0.68	⋯	8
9	**119 449.43**	−2.70	⋯	8	⋯	⋯	⋯	⋯	**122 465.97**	−0.74	⋯	9	**123 879.40**	−0.11	⋯	9
10	**119 729.05**	−0.42	⋯	8	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	**124 125.75**	−0.40	⋯	8
		$v=4$				$v=5$				$v=6$				$v=7$		
1	124 150.38	−0.41	−0.32	11	125 485.20	−0.51	−0.40	10	126 760.55	−0.18	−0.35	13	127 977.11	0.39	−0.49	12
2	124 200.72	−0.59	−0.28	12	125 534.13	−0.08	0.33	10	126 807.14	−0.10	−0.26	13	128 021.67	0.40	−0.43	11
3	124 276.49	−0.33	−0.31	12	125 606.34	−0.36	−0.16	8	126 876.51	−0.25	−0.39	11	128 088.63	0.78	−0.27	10
4	124 376.66	−0.36	−0.14	10	125 702.63	−0.25	−0.17	7	126 968.89	−0.10	−0.31	13	128 176.85	0.67	−0.05	10
5	124 501.79	0.29	0.19	8	**125 822.08**	−0.29	⋯	10	127 083.75	0.19	−0.05	10	128 286.80	0.91	−7.10	10
6	**124 648.14**	−1.63	⋯	9	**125 964.93**	0.26	⋯	8	**127 219.49**	−0.49	⋯	6	**128 416.73**	0.22	⋯	10
7	**124 820.10**	−1.13	⋯	8	**126 128.74**	−1.03	⋯	8	**127 377.00**	−0.72	⋯	9	⋯	⋯	⋯	⋯
8	**124 014.90**	−0.34	⋯	8	**126 314.91**	−0.47	⋯	8	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯
9	**125 230.43**	−0.63	⋯	7	**126 522.03**	−0.40	⋯	7	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯
10	**125 467.49**	0.06	⋯	6	**126 750.38**	0.78	⋯	8	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯
		$v=8$				$v=9$				$v=10$				$v=11$		
1	129 136.84	2.46	−0.36	8	130 230.22	−3.98	1.22	10	131 278.65	2.12	5.15	12	**132 258.84**	−2.65	⋯	12
2	129 179.78	2.80	−0.12	12	130 270.35	−4.52	−0.25	13	131 313.13	−2.15	0.53	13	**132 296.00**	−2.32	⋯	13
3	129 243.45	2.80	−0.65	11	130 329.89	−5.77	−0.61	10	131 370.79	−2.39	−0.11	12	**132 350.59**	−2.75	⋯	10
4	129 328.35	3.24	−0.45	12	130 411.43	−4.82	−0.37	9	131 449.12	−0.85	0.62	12	⋯	⋯	⋯	⋯
5	**129 432.51**	2.51	⋯	6	**130 512.79**	−3.59	⋯	11	**131 542.88**	−2.41	⋯	11	⋯	⋯	⋯	⋯
6	**129 557.59**	2.72	⋯	11	**130 632.13**	−3.40	⋯	10	**131 656.04**	−2.70	⋯	11	⋯	⋯	⋯	⋯
7	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	⋯	**131 788.26**	−1.54		8	⋯	⋯	⋯	⋯
		$v=12$														
1	**133 186.15**	−2.90	⋯	13												
2	**133 220.16**	−3.78	⋯	10												
3	**133 273.57**	−2.50	⋯	5												
4	**133 342.96**	−2.21	⋯	14												

[a]Newly determined energies are in boldface.
[b]Difference between the observed and the calculated energies from the present work.
[c]Difference between the present and the previous (Ref. 8) experimental energies.
[d]Number of observed lines from the upper level involved.

V. RESULTS AND DISCUSSION

A. Line lists

As a result of the analysis, among the 6253 lines observed in the region of 78.5–102.7 nm, more than 2200 have been assigned as belonging to the $D\ ^1\Pi_u \rightarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ and $D'\ ^1\Pi_u^- \rightarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ band systems which allowed the determination of 302 energy levels belonging to the $D\ ^1\Pi_u$ and $D\ ^1\Pi_u^-$ states, of which 175 are new.

We report, in Table I of Ref. 12, part of the $D\ ^1\Pi_u \rightarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ band system limited to bands involving four upper vibrational states. For these bands, the R $(J'-J''=+1)$ and P $(J'-J''=-1)$ branches are due to the $D\ ^1\Pi_u^+$ component and the Q $(J'-J''=0)$ branch is due to the $D\ ^1\Pi_u^-$ component. The remaining identified bands, from $(v'=4,\ v''=0)$ to $(v'=19,\ v''=17)$, belonging to the $D\ ^1\Pi_u^-$ symmetry, consist only in a Q branch. They are listed in Table II of the EPAPS data archive. The identified lines belonging to the $D'\ ^1\Pi_u^- \rightarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ band system are listed in the same form in Table III.

The wavelength uncertainty of $\pm 15\times 10^{-5}$ nm for the unblended deuterium lines results in an uncertainty of 0.14–0.25cm^{-1} on the wave numbers.

B. Energy levels of the $D\ ^1\Pi_u$ excited state

In Table II are shown the observed energy levels of the $^1\Pi_u^+$ component of the D state derived from the emission lines in R and P branches (Ref. 12). The number of observed rotational levels has been increased compared with the previous results reported in Ref. 8. The rotational quantum numbers are given in the first column for each vibrational quantum number. Newly determined levels are in bold characters. The second column gives the observed energies E in (cm^{-1}) as the average of values derived from different observed line

Downloaded 01 Feb 2007 to 145.238.17.35. Redistribution subject to AIP license or copyright, see http://jcp.aip.org/jcp/copyright.jsp

wave numbers added to the corresponding lower level energies, the number of observed lines from the upper level involved being specified in the third column. The origin of the energies is taken at the X ($v''=0$, $J''=0$) ground state. The fourth column compares the present observed level energies and the previous ones when available in Ref. 8. Finally in the fifth and sixth columns our experimental energies are compared with calculated ones, respectively, from our present theoretical study ($o-c1$) and from the previous one (Ref. 9) using the empirically modified potentials ($o-c2$). Since the ground state levels are accurately known, the uncertainty on the energies of observed excited levels is also about ± 0.15 cm^{-1} as on the observed wave numbers (Ref. 12).

The theoretical study shows that the energy levels of the $D\ ^1\Pi_u^+$ state are perturbed by radial coupling with the $C\ ^1\Pi_u^+$ state and by rotational coupling primarily with the $B'\ ^1\Sigma_u^+$ state which dissociates to the $D(1s)+D(n=2)$ limit. As a matter of fact the state $D\ ^1\Pi_u^+$ predissociates through the last rotational coupling so that only four vibrational states are observed.

In Table II, a good agreement was found between the present experimental level energies and the existing previous ones (Ref. 8) for all v and J, since the difference does not exceed ± 0.28 cm^{-1}. Furthermore, both the present and the previous theoretical energies are in satisfactory agreement with the experimental ones for low J. However, the differences increase slightly with level energy in both calculations. The largest discrepancies $o-c1$ occur for $J=7-9$. To understand the origin of these discrepancies, we have plotted in Fig. 1 for the vibrational level $v=0$ the observed energies versus $J(J+1)$ and a fit of these energies by a quadratic polynomial function. It can be seen that the $J=8$ and $J=9$ levels are the most deviated from the fit. Our theoretical study shows that these levels are strongly perturbed by the $D\ ^1\Pi_u^+ - B'\ ^1\Sigma_u^+$ rotational coupling. The D^+ and B' electronic percentages are [87.52% $D^+(v=0)+12.48\%$ $B'(v=2)$], [60% $D^+(v=0)+40\%$ $B'(v=2)$] and [69.74% $D^+(v=0)+30.26\%$ $B'(v=2)$], respectively, for the $J=7$, $J=8$, and $J=9$ levels. These percentages are also indicated on Fig. 1. The same analysis was done for the rest of the levels. Although the theoretical calculations take into account the rotational perturbation, the larger $o-c1$ discrepancies for the most perturbed levels may just arise from small inaccuracies of the *ab initio* data.

The $^1\Pi_u^-$ component of the D state is only coupled to the $C\ ^1\Pi_u^-$ state via radial coupling and is not predissociated. We have observed vibrational states up to $v_{max}=19$. Table III lists the energies of all the observed energy levels derived from the Q branch lines (Ref. 12), with specification of the number of lines used for their determination. These energies are compared with our theoretical values and with the previous experimental values when available (Ref. 8). Newly determined levels are in bold characters. The discrepancies between the two sets of experimental level energies are less than ± 0.80 cm^{-1}. The vibrational intervals ΔG for the rotational quantum number $J=0$ are also determined from the extrapolation of the observed level energies. They are listed in Table IV. We have also determined the Λ doublings in the $D\ ^1\Pi_u$ state which are largely caused by the heterogeneous interaction between the $D\ ^1\Pi_u$ and the $B'\ ^1\Sigma_u^+$ states. In Fig. 2 we give the variation of the Λ doubling versus $J(J+1)$ for the $v=0$ and $v=1$ vibrational states. The discontinuity between $J=8$ and $J=9$ is a consequence of the same perturbation as explained above.

TABLE VI. Vibrational intervals $\Delta G=E_{v+1}-E_v$ (cm^{-1}) in the $D'\ ^1\Pi_u^-$ state for $J=0$.

	$\Delta G(v+1/2)$	
v	Obs.	Theor.
0	1587.79	1587.72
1	1522.00	1522.60
2	1459.10	1459.04
3	1396.74	1396.88
4	1335.96	1335.93
5	1275.84	1276.02
6	1217.43	1216.98
7	1160.94	1158.63
8	1094.10	1100.97
9	1048.23	1043.29
10	982.16	985.93
11	928.40	928.53

C. Energy levels of the $D'\ ^1\Pi_u^-$ excited state

The energy levels of the $D'\ ^1\Pi_u$ state were first determined by Takezawa and Tanaka[6] by absorption investigation using a normal incidence vacuum spectrograph equipped with a platinum-coated grating of 6.65 m radius of curvature with 1200 lines/mm, working in the second order. In the present work, we investigated the $^1\Pi_u^-$ symmetry of the D' state by emission study at high resolution. In Table V we give the energies of the observed levels derived from the spectral lines (Ref. 12), with specification of the number of lines used for their determination. The origin of energies is taken at the $v''=0$, $J''=0$ of the X ground state. The comparison between our observed energy values and the previous experimental values (Ref. 8) shows a good agreement within one wave number for most of the levels. Exceptionally large differences have been found, for example, 14.36 cm^{-1} for ($v=1$, $J=6$) and -7.10 cm^{-1} for ($v=7$, $J=5$). These differences might be attributed to misprints in Ref. 6.

The comparison between the observed and the theoretical energies in Table V shows that their differences stay within 1 cm^{-1} up to $v=7$ then suddenly increase to a few cm^{-1} for $v \geqslant 8$.

In Table VI we give the observed vibrational intervals ΔG obtained from the extrapolation of the observed level energies to $J=0$. We found that the theoretical vibrational intervals deviate by more than ± 1 cm^{-1} from the observed ones between $v'=5$ and $v'=10$ vibrational states. In our theoretical study, the $D'\ ^1\Pi_u$ state has been treated in adiabatic approximation, although including the adiabatic correction into the potential. However, these deviations could be due to possible nonadiabatic interactions of the $D'\ ^1\Pi_u$ state with the higher $V'\ ^1\Pi_u$ and $D''\ ^1\Pi_u$ excited states of the same

Downloaded 01 Feb 2007 to 145.238.17.35. Redistribution subject to AIP license or copyright, see http://jcp.aip.org/jcp/copyright.jsp

symmetry which are not taken into account in the present calculations. Furthermore the results depend on the availability and quality of the *ab initio* data.

VI. CONCLUSION

We have reported the results of a theoretical and experimental investigation of the D_2 molecule in vuv emission spectra. New high resolution emission spectra were recorded and analyzed in the wavelength range from 78.5 to 102.7 nm. The spectral analysis is based on the combination principle and is supported by theoretical predictions of the energy levels and the emission probabilities, taking into account nonadiabatic couplings between excited electronic states. Due to the large rotational constant of the D_2 molecule, the spectrum appears as a complex line spectrum at high resolution instead of a band spectrum. We showed that the analysis was made more efficient by handling the large amount of data with a powerful tool developed for complex atomic spectra, the program IDEN for visual identification (Refs. 10 and 11). Two electronic band systems comprising more than 2200 lines have been analyzed: the $D\,^1\Pi_u \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ and the $D'\,^1\Pi_u^- \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$. The analysis allowed the determination of 302 energy levels belonging to the $D\,^1\Pi_u$ and $D'\,^1\Pi_u^-$ states of which 175 are new. The accuracy of the experimental level energies has been improved. Indeed, for the $D\,^1\Pi_u$ state all our observed levels were determined with more spectral lines than in previous experimental studies compiled in Ref. 8. For the $D'\,^1\Pi_u^-$ the energy levels are determined using lines from spectra of unprecedently higher resolution. For the $D\,^1\Pi_u$ excited state the comparison between the observed energies and the theoretical predictions from *ab initio* data leads to a satisfactory agreement within $\pm 0.8\ \mathrm{cm}^{-1}$ for the lowest rotational levels but the difference can reach $\pm 2.46\ \mathrm{cm}^{-1}$ for some higher rotational levels. For the $D'\,^1\Pi_u^-$ excited state the differences become larger than $\pm 2\ \mathrm{cm}^{-1}$ for the vibrational states $v' = 8, 9, 10, 11, 12$. These discrepancies could be caused by interactions with higher excited states which are not included into the coupled equations. On the other hand, it is difficult to estimate the uncertainties originating from the quality of the *ab initio* data (potential energies, adiabatic corrections, nonadiabatic coupling operators) used in our calculations. One may note that discrepancies of the same order of magnitude remain, even between the experimental energies and the ones calculated using the semiempirically modified potentials (Ref. 9). Furthermore, when a large number of higher excited states are involved in the coupling scheme, an alternative method would be the application of multichannel quantum defect theory (MQDT) which has proven to provide level energies in good agreement with experimental values for the H_2 molecule and for its isotopes.[25]

ACKNOWLEDGMENTS

The authors wish to thank Maurice Benharrous for his efficient assistance in operating the experiments and are indebted to Jean-Yves Roncin for his critical reading of the manuscript.

[1] J.-Y. Roncin and F. Launay, J. Phys. Chem. Ref. Data Monogr. **4**, 1 (1994).
[2] R. Ferlet, M. André, G. Hébrard, *et al.*, Astrophys. J. **538**, L69 (2000).
[3] G. H. Dieke and R. W. Blue, Phys. Rev. **47**, 261 (1935); G. H. Dieke, *ibid.* **48**, 606 (1935); **48**, 610 (1935); **50**, 797 (1936); G. H. Dieke and M. N. Lewis, *ibid.* **52**, 100 (1937); S. P. S. Porto and G. H. Dieke, J. Opt. Soc. Am. **45**, 447 (1955); P. Gloersen and G. H. Dieke, J. Mol. Spectrosc. **16**, 191 (1965); G. H. Dieke and S. P. Cunningham, *ibid.* **18**, 288 (1965).
[4] H. Bredohl and G. Herzberg, Can. J. Phys. **51**, 867 (1973).
[5] I. Dabrowski and G. Herzberg, Can. J. Phys. **52**, 1110 (1974).
[6] S. Takezawa and Y. Tanaka, J. Mol. Spectrosc. **55**, 379 (1975).
[7] M. Larzillière, F. Launay, and J.-Y. Roncin, J. Phys. (Paris) **41**, 1431 (1980).
[8] R. S. Freund, J. A. Schiavone, and H. M. Crosswhite, J. Phys. Chem. Ref. Data **14**, 235 (1985).
[9] H. Abgrall, E. Roueff, X. Liu, R. E. Shemansky, and G. K. James, J. Phys. B **32**, 3813 (1999).
[10] V. I. Azarov, Phys. Scr. **44**, 528 (1991).
[11] V. I. Azarov, Phys. Scr. **48**, 656 (1993).
[12] See EPAPS Document No. E-JCPSA6-125-009646 for the line lists. This document can be reached via a direct link in the online article's HTML reference section or via the EPAPS homepage (http://www.aip.org/pubservs/epaps.html).
[13] L. Wolniewicz, J. Chem. Phys. **103**, 1792 (1995).
[14] L. Wolniewicz, J. Chem. Phys. **99**, 1851 (1993).
[15] I. Dabrowski, Can. J. Phys. **62**, 1639 (1984).
[16] C. Clay Marston and G. Balint-Kurti, J. Chem. Phys. **91**, 3571 (1989).
[17] P. Senn, P. Quadrelli, and K. Dressler, J. Chem. Phys. **89**, 7401 (1988).
[18] B. R. Johnson, J. Chem. Phys. **69**, 4678 (1978).
[19] W. Ubachs, R. Lang, I. Velchev, W.-Ü. L. Tchang-Brillet, A. Johansson, Z. S. Li, V. Lokhnygin, and C.-G. Wahlström, Chem. Phys. **270**, 215 (2001).
[20] G. Staszewska and L. Wolniewicz, J. Mol. Spectrosc. **212**, 208 (2002).
[21] L. Wolniewicz and G. Staszewska, J. Mol. Spectrosc. **220**, 45 (2003).
[22] A. Spielfiedel (private communication).
[23] G. Staszewska and L. Wolniewicz, J. Mol. Spectrosc. **217**, 181 (2003).
[24] L. Wolniewicz and K. Dressler, J. Chem. Phys. **88**, 3861 (1988).
[25] S. C. Ross, Ch. Jungen, and A. Matzkin, Can. J. Phys. **79**, 561 (2001).

Downloaded 01 Feb 2007 to 145.238.17.35. Redistribution subject to AIP license or copyright, see http://jcp.aip.org/jcp/copyright.jsp

B.2 Article II : Spectroscopie en émission vuv à haute résolution de la molécule D_2 : Le système de bande $B'^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$.

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **127**, 054307 (2007)

High resolution vacuum ultraviolet emission spectrum of D_2: The $B'\,^1\Sigma_u^+ \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ band system

Mourad Roudjane,[a] W.-Ü Lydia Tchang-Brillet, and Françoise Launay[b]
Laboratoire d'Étude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique, UMR 8112 du CNRS, Observatoire de Paris, Section de Meudon, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon Cedex, France and Université Pierre et Marie Curie-Paris 6, Paris F-75005, France

(Received 8 February 2007; accepted 20 June 2007; published online 7 August 2007)

In this work, we have extended our previous high resolution study of the vacuum ultraviolet emission spectrum of the D_2 molecule [M. Roudjane, *et al.* J. Chem. Phys. **125**, 214305 (2006)] up to 124.2 nm in order to investigate the $B'\,^1\Sigma_u^+ \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ band system. The analysis of the spectrum has been carried out by means of a complex spectrum visual identification code IDEN [V. I. Azarov, Phys. Scr. **44**, 528 (1991); **48**, 656, (1993)] and supported by theoretical calculations using *ab initio* data [L. Wolniewicz, J. Chem. Phys. **103**, 1792 (1995); **99**, 1851 (1993); G. Staszewska and L. Wolniewicz, J. Mol. Spectrosc. **212**, 208 (2002); L. Wolniewicz and G. Staszewska, **220**, 45 (2003)] which provided level energies and transition probabilities. More than 1480 new emission lines have been observed and 109 bands belonging to the $B'\,^1\Sigma_u^+ \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ system have been identified between 84.1 and 121.6 nm. Except for the $v'-0$ bands that were reported in absorption [I. Dabrowski and G. Herzberg, Can. J. Phys. **52**, 1110 (1974)], all the $v'-v''$ bands are reported here for the first time. The analysis led to the determination of 111 rovibronic energy levels in the $B'\,^1\Sigma_u^+$ state, of which 31 with higher rotational numbers J are new. Observed perturbations are accounted for through a set of coupled equations involving the four excited electronic states $B\,^1\Sigma_u^+$, $B'\,^1\Sigma_u^+$, $C\,^1\Pi_u$, and $D\,^1\Pi_u$ and including nonadiabatic couplings. The solution of this set provides the percent contribution of these four states to each of the observed rovibronic level. © *2007 American Institute of Physics.* [DOI: 10.1063/1.2759214]

I. INTRODUCTION

In the course of our effort to elaborate a complete data set concerning the high resolution vacuum ultraviolet (vuv) spectrum of the D_2 molecule, similar to the one published in an atlas for the H_2 molecule in the wavelength range of 78–170 nm,[1] we have recently carried out a high resolution study of the vuv emission spectrum of molecular deuterium (D_2) in the 78–103 nm wavelength range and we have reported the detailed analysis of the $D\,^1\Pi_u \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ and $D'\,^1\Pi_u^- \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ band systems.[2,3] The D_2 emission spectrum was produced in a low pressure Penning discharge source and recorded on photographic plates using the vuv 10 m spectrograph of the Paris-Meudon Observatory. The analysis was supported by theoretical wave numbers and transition probabilities resulting from the solution of a set of coupled equations involving four interacting excited electronic states: $B\,^1\Sigma_u^+$, $B'\,^1\Sigma_u^+$, $C\,^1\Pi_u$, and $D\,^1\Pi_u$. Available *ab initio* potential energies[4] and electronic transition moments[5,6] were used and rotational and radial couplings (Ref. 4) between the four electronic states were taken into account. The IDEN code,[7,8] a powerful tool developed for the visualization of complex atomic spectra was applied here for the first time to the assignment of molecular lines and for the determination of level energies. The experimental and theoretical studies are described in detail in Ref. 2. In the wavelength range investigated there (78–103 nm), more than 2200 out of 6253 emission lines were assigned to the two band systems $D-X$ and $D'-X$ and 175 new energy levels of the $3p\pi\ D\,^1\Pi_u$ and $4p\pi\ D\,^1\Pi_u^-$ electronic states were determined. The spectral range investigated in that study (Ref. 2) contains a large number of transitions between the ground electronic state and a few other excited electronic states, in particular, the $B\,^1\Sigma_u^+$, $B'\,^1\Sigma_u^+$, and $C\,^1\Pi_u$ states correlated to the D(1s)–D(2l) atomic limit. The aim of the present work, is to extend the wavelength range studied up to 124.2 nm, in order to perform the analysis of the $B'\,^1\Sigma_u^+ \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ band system.

The $B'\,^1\Pi_u^+$ electronic state of the H_2 molecule was reported for the first time in 1958 by Dieke who reviewed the work carried out with his co-workers on emission spectra of the hydrogen molecule and its isotopes for wavelengths longer than 300 nm.[9] Dieke assigned this state as the second member of the $1s\sigma\ np\sigma\ ^1\Sigma_u^+$ Rydberg series, the $B\,^1\Sigma_u^+$ state being the first member. However, the corresponding results for the D_2 molecule were not reported in his review but were included later in the compilation by Freund *et al.* in 1985.[10] On the other hand, from the vuv absorption spectra recorded in the sixth order of a 3 m vacuum spectrograph, Herzberg and Monfils determined the dissociation energies of the H_2, HD, and D_2 molecules but discussed only for H_2 the observation of the $B'\,^1\Sigma_u^+ \rightarrow X\,^1\Sigma_g^+$ absorption bands.[11] The first

[a]Author to whom correspondence should be addressed. Electronic mail: mourad.roudjane@obspm.fr
[b]Present address: Systèmes de Référence Temps-Espace, UMR 8630 du CNRS, Observatoire de Paris, section de Paris, 61 avenue de l'Observatoire, 75014 Paris.

 © 2007 American Institute of Physics

detailed report on the $B'\ ^1\Pi_u^+$ electronic state from absorption spectra of D_2 appeared in 1968 and was due to Monfils.[12] His investigation led to the determination of 9 vibrational levels ($v=0-8$). Later, in 1974, Dabrowski and Herzberg studied the high resolution spectra of D_2 recorded in absorption over the wavelength range of 110–840 nm, in the third order of a 10 m vacuum spectrograph (0.0254 nm/mm).[13] They were able to extend the analysis of the $B'\ ^1\Pi_u^+$ state up to $v_{max}=13$. The results obtained in Ref. 13 on electronic spectra and energy levels belonging to the $B'\ ^1\Pi_u^+$ electronic state of D_2 were also reviewed and tabulated by Freund *et al.*[10] The $B'\ ^1\Pi_u^+$ state was also studied by Jungen and Atabek who applied the multichannel quantum defect theory to rovibronic interactions in the photoabsorption spectrum of molecular hydrogen and deuterium.[14] Furthermore, the $B'\ ^1\Pi_u^+$ state was involved in a low resolution electron-impact excitation study of the D_2 molecule including comparison with semiempirical calculations.[15]

II. RESULTS AND DISCUSSION

A. Line list

The measurement and the calibration of the spectrograms were described in Ref. 2. For wavelengths shorter than 103 nm,[3] the $B'\ ^1\Sigma_u^+ \rightarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ line list is established from the complete line list used in the previous work in which wavelengths are averaged over three or four measurements and have an estimated uncertainty of $\pm 15\times 10^{-5}$ nm for unblended lines. From 103 to 124.1 nm, the wavelengths were obtained from only one well calibrated measurement. Their consistency with the shorter wavelength part has been carefully checked and their uncertainty is estimated to be less than $\pm 20\times 10^{-5}$ nm (± 0.13 to 0.14 cm^{-1}) for unblended lines.

As a result of the present analysis, more than 1480 emission lines in the wavelength region of 84.1–121.6 nm have been assigned to 109 bands of the $B'\ ^1\Sigma_u^+ \rightarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ transition. These vuv emission bands connect the $B'(v)$ levels to vibrationally excited levels of the X ground electronic state up to $v''=21$, and, except for the $v'-0$ bands that were previously reported in absorption (Ref. 13), all the bands are reported here for the first time.

The line list of the $B'\ ^1\Sigma_u^+ \rightarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ band system, arranged by R and P spectroscopic branches, is available via the EPAPS data depository of the American Institute of Physics.[16] The line list includes, for each line, the rotational quantum number of the ground state J'' labeled as J, the wave number, the assignment, and the transition probability determined from the solution of the set of coupled equations mentioned in Sec. I. The differences $(o-c)$ between observed wave numbers and Ritz wave numbers, i.e., wave numbers calculated as differences between experimental upper and lower level energies are also given. Since each excited level energy is averaged over several lines, the Ritz wave numbers could be determined more precisely for blended lines. In spite of our good resolution limit (8×10^{-4} nm) many lines have double or multiple assignments when comparable transition probabilities are predicted. The uncertainty on wave numbers is estimated to vary from ± 0.13 cm^{-1} at the long wavelength end to ± 0.30 cm^{-1} at the short wavelength end.

B. Energy levels of the $B'\ ^1\Sigma_u^+$ excited state

In Table I are displayed 111 observed energy levels of the $B'\ ^1\Sigma_u^+$ electronic state derived from the emission lines in R and P branches. Among these, 31 new levels extend the rotational quantum number J range. The energies are averages of values derived from different observed lines, the number of which is specified in the sixth column. Therefore, the uncertainties on these energies are smaller than the uncertainties on the wave numbers, depending on the number of lines involved. In the present analysis we have observed vibrational states up to $v=11$. Dabrowski and Herzberg (Ref. 13) observed in absorption two additional vibrational states, $v=12$ and 13, with the $J=0$ levels at 119 003.57 and 119 026.50 cm^{-1}, respectively. We could not locate these levels with certainty in our analysis. Indeed, in our emission spectrum, the strongest transitions connecting these levels to high vibrational levels of the X state fall in the Lyman α wings at 121.5 nm. Furthermore, the absorption lines observed in Ref. 13 for these levels are masked in the emission spectrum by stronger $D-X$ or $D'-X$ lines. In this study, as can be seen in the table, the number of observed rotational levels has been increased compared with the previous results reported in Ref. 10. A good agreement was found between the present experimental level energies and the existing ones (Ref. 10): for levels up to $v'=6$, the differences $(o-o')$ do not exceed ± 0.20 cm^{-1} except in a few cases. For instance, the difference of 0.85 cm^{-1} observed in the case of $v'=0$, $J'=8$ can be explained by the fact that, in our analysis, this level energy is averaged over 11 lines while the value given by Freund *et al.* was determined from only one line.

In Table I, the comparison of the experimental results with the theoretical calculations shows a better agreement with the previous calculations performed by Abgrall *et al.* (Ref. 15) than with our calculations. This is not surprising since the authors in Ref. 15 empirically modified the *ab initio* potentials in order to fit a set of experimental values, while our results depend entirely on the precision of the *ab initio* data used. However, our calculations provided predictions sufficiently good to guide the present analysis, the maximum difference being ± 5.81 cm^{-1} between calculated and observed energies. The discrepancies likely include the effect of perturbations from higher excited electronic states which were not taken into consideration in our calculations. Indeed, Meshkov *et al.*,[17] using analytical quantum defect theory,[18] estimated the energy shifts of levels in the B and C states due to interactions with high discrete and continuum Rydberg states ($n\geqslant 4$) to be smaller than 2.0 cm^{-1}. One could speculate that the B' state being higher than the B and C states may be slightly more affected, but quantitative conclusions would need further theoretical investigations.

The vibrational intervals ΔG for the rotational quantum number $J=0$ are also determined from the observed energies. They are listed in Table II and compared to previous experimental results (Ref. 10) and to our theoretical predictions.

TABLE I. Experimentally determined level energies (cm^{-1}) of D_2 in the $B'\ ^1\Sigma_u^+$ state. Energies E are above the $X\ ^1\Sigma_g^+(v=0,J=0)$ level.

J	E_{obs} [a]	$o-o'$ [b]	o-$c1$ [c]	o-$c2$ [d]	N [e]
		$v=0$			
0	110 815.78	−0.05	−0.42	0.01	7
1	110 841.98	−0.13	−0.51	−0.07	14
2	110 894.48	−0.08	−0.47	−0.04	14
3	110 972.88	−0.05	−0.51	−0.06	13
4	111 076.95	−0.03	−0.55	−0.09	14
5	111 206.30	0.00	−0.58	−0.10	14
6	111 360.38	0.00	−0.66	−0.16	13
7	111 539.05	0.41	−0.34		11
8	111 740.89	0.85	−0.37		11
9	**111 964.80**		−1.10		13
		$v=1$			
1	112 181.28	0.25	−1.34	0.07	9
2	112 205.87	−0.03	−1.64	−0.22	17
3	112 255.32	−0.26	−1.89	−0.44	17
4	112 329.74	−0.10	−1.78	−0.30	18
5	112 428.22	−0.22	−1.95	−0.44	17
6	112 551.11	0.09	−1.70	−0.12	18
7	112 697.31	0.20	−1.65	−0.01	15
8	112 865.81	−0.31	−2.27		17
9	113 057.44	−0.05	−2.10		10
10	113 270.48	−0.01	−2.14		11
11	**113 504.39**		−2.13		6
		$v=2$			
0	113 467.26	0.08	−2.60	0.25	11
1	113 490.93	−0.09	−2.76	0.10	20
2	113 538.59	−0.03	−2.69	0.17	20
3	113 609.72	−0.13	−2.81	0.08	20
4	113 704.55	−0.05	−2.73	0.18	19
5	113 822.79	−0.02	−2.65	0.26	19
6	113 964.79	0.20	−2.39	0.48	19
7	114 131.16	−0.02	−2.43		17
8	**114 326.83**		−1.80		15
9	**114 462.21**		−3.50		12
10	**114 698.94**		−1.69		8
		$v=3$			
1	114 669.44	−0.15	−3.73	−0.04	9
2	114 690.95	0.03	−3.54	0.12	19
3	114 733.71	−0.08	−3.69	−0.04	19
4	114 798.45	−0.03	−3.67	−0.03	19
5	114 885.20	0.17	−3.50	0.15	19
6	114 993.05	−0.10	−3.86	−0.17	19
7	115 122.68	0.17	−3.65	0.09	18
8	**115 272.28**		−4.12		16
9	**115 442.12**		−4.30		15
10	**115 631.85**		−3.79		17
11	**115 838.90**		−4.29		4
		$v=4$			
0	115 779.97	−0.06	−4.37	0.08	12
1	115 800.64	0.03	−4.31	0.15	21
2	115 841.71	−0.03	−4.37	0.09	24
3	115 903.29	0.03	−4.33	0.15	24
4	115 984.84	−0.12	−4.51	0.00	23
5	116 086.41	−0.10	−4.53	0.01	22

TABLE I. (*Continued.*)

J	E_{obs}[a]	$o-o'$[b]	o-$c1$[c]	o-$c2$[d]	N[e]
6	**116 207.35**		−4.65	−0.07	18
7	**116 347.55**		−4.44		16
8	**116 505.80**		−4.50		16
9	**116 681.58**		−4.67		15
		$v=5$			
1	116 784.61	−0.05	−4.93	0.06	12
2	116 804.04	0.16	−4.72	0.27	24
3	116 842.28	0.01	−4.85	0.14	24
4	116 899.70	0.04	−4.80	0.18	24
5	116 975.88	0.00	−4.80	0.18	24
6	117 070.75	0.07	−4.68	0.29	22
7	**117 183.97**		−4.66	0.26	18
8	**117 315.81**		−4.74		20
9	**117 469.25**		−3.72		13
10	**117 649.47**		−3.38		16
		$v=6$			
0	117 659.25	−0.23	−5.24	−0.12	13
1	117 675.56	0.00	−5.03	0.07	24
2	117 708.02	0.00	−4.98	0.08	26
3	117 756.91	0.00	−4.98	0.06	25
4	**117 822.12**	...	−5.01	0.01	24
5	117 903.33	−0.02	−4.96	0.04	24
6	**117 999.83**		−4.88	0.11	18
7	**118 110.20**		−5.30		17
8	**118 233.74**		−5.81		16
9	**118 371.42**		−4.12		16
10	**118 517.04**		−4.80		9
		$v=7$			
1	118 357.47	0.18	−4.38	0.17	13
2	118 371.30	0.31	−4.28	0.26	24
3	118 398.56	0.28	−4.30	0.20	22
4	118 439.30	0.55	−4.02	0.42	24
5	118 492.15	0.22	−4.25	0.10	20
6	118 557.46	0.31	−3.83	0.39	17
7	118 633.20	−0.01	−3.76	0.20	15
8	118 719.61	0.04	−3.38		16
9	**118 821.38**		−3.42		13
10	**118 871.94**		−2.00		8
		$v=8$			
0	118 755.28	0.59	−1.07	0.61	8
1	118 761.60	0.33	−1.16	0.44	11
2	118 773.79	−0.06	−1.25	0.21	12
3	118 791.27	0.33	−0.87	0.40	12
4	118 811.96	0.44	−0.68	0.38	8
5	118 834.46	0.09	−0.69	0.20	7
6	**118 858.02**		−0.75	0.03	6
7	**118 882.65**		−0.67		4
		$v=9$			
1	118 838.44	−0.02	−1.08	0.15	6
2	118 843.32	0.52	−0.60	0.63	10
3	118 852.52	0.37	−0.64	0.59	8
4	118 863.45	−0.03	−1.20	0.06	10
5	118 881.36	0.39	−0.65	0.57	9
6	**118 901.21**		−1.20	−0.07	8

TABLE I. (*Continued.*)

J	E_{obs}[a]	$o-o'$[b]	o-$c1$[c]	o-$c2$[d]	N[e]
7	**118 922.27**		−2.40	−1.40	9
8	**118 946.25**		−1.14		4
		$v=10$			
0	118 913.21	0.12	−0.70	0.33	2
1	118 916.32	0.08	−0.70	0.33	1
2	118 922.35	−0.19	−0.99	0.05	4
3	118 931.97	0.04	−0.75	0.30	4
4	118 944.39	0.18	−0.59	0.44	3
5	118 958.61	−0.36	−1.25	−0.20	3
6	**118 974.57**		−1.00	0.02	2
		$v=11$			
	...	...	...	...	...
1	118 969.24	−0.72	−0.30	0.59	3
2	118 973.11	−0.63	−1.00	−0.12	3
3	118 979.69	−0.55	−1.14	−0.27	3
4	118 988.53	−0.40	−1.00	−0.14	2

[a]Energies of newly determined levels are in boldface.
[b]Difference between the present and the previous (Ref. 10) experimental energies.
[c]Difference between our observed and calculated energies.
[d]Difference between the observed and previously (Ref. 15) calculated energies.
[e]Number of observed lines from the upper level involved.

C. Level perturbations

The $B'\ ^1\Sigma_u^+$ electronic state strongly interacts with the $D\ ^1\Pi_u^+$ and $C\ ^1\Pi_u^+$ states via rotational coupling (heterogeneous interaction), which only affects the e-parity rotational levels of the $^1\Pi$ states, and with the $B^1\Sigma_u^+$ state via radial coupling (homogeneous interaction). To characterize the effect of these perturbations, we made use of the percentages of the different electronic characters that we calculated for each excited bound level. To check the consistency of our analysis, we have plotted the observed energies versus $J(J+1)$ for all excited bound levels. For instance, Figs. 1 and 2 show these plots, respectively, for $v=2$ and $v=7$. Fits of these energies, respectively, by a quadratic and a third order polynomial function of $J(J+1)$ are also shown in the figures.

TABLE II. D_2 vibrational intervals (in cm^{-1}) from the $J=0$ levels of $B'\ ^1\Sigma_u^+$.

	$\Delta G(v+1/2)$		
v	Obs[a]	Obs.[b]	Theor.[c]
0	1365.50	1365.20	1366.42
1	1285.98	1286.15	1287.24
2	1202.18	1202.41	1203.31
3	1110.53	1110.44	1111.18
4	1004.64	1004.63	1005.19
5	874.64	874.82	874.96
6	698.22	697.81	697.35
7	397.81	397.40	394.50
8	83.16	83.77	83.16
9	74.77	74.56	74.24

[a]Present work.
[b]Previous work (Ref. 10).
[c]Calculations (Ref. 2) using *ab initio* data.

In Fig. 1, it can be seen that for $v=2$, the $J=8$ and $J=9$ levels deviate most from the fit. Our theoretical studies yield the following contributions of the respective interacting states for $B'(v=2)$: 87.84% $B'(v=2)+12.16\%D^+(v=0)$, for $J=7$, 70.13% $B'(v=2)+29.87\%D^+(v=0)$, for $J=8$, 60.47% $B'(v=2)+39.53\%D^+(v=0)$, for $J=9$. These percentages are also indicated in Fig. 1. This result confirms that of our previous investigation[2] of the $D\ ^1\Pi_u^+$ state. This mutual perturbation between $B'(v=2)$ and $D^+(v=0)$ levels, was also observed by Dabrowski and Herzberg (Ref. 13). A similar perturbation was pointed out by Namioka for H_2.[19]

From Fig. 2, it is seen that, for $v=7$, the $J=8$ and $J=9$ levels are the most perturbed since they clearly deviate from the polynomial fit. The results of our theoretical calculations show that these two levels of the B' state are strongly perturbed by the D^+ and C^+ ($C\ ^1\Pi_u^+$) states via rotational cou-

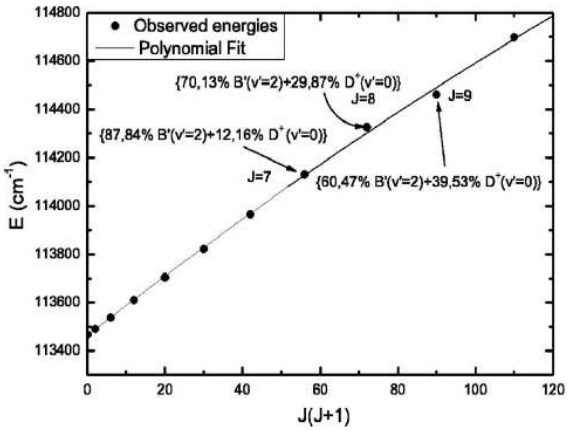


FIG. 1. Perturbations in the observed level energies $E(v'=2)$ of $B'\ ^1\Sigma_u^+$ state.

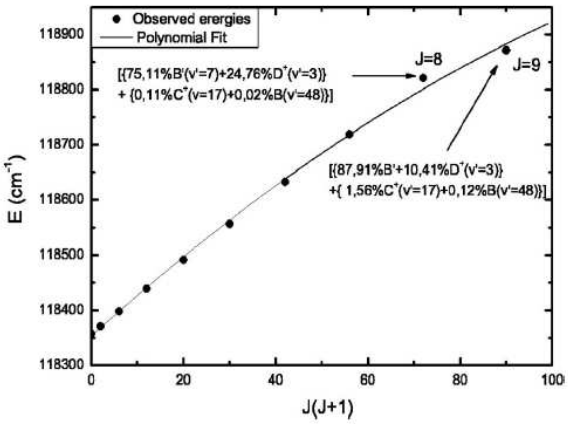


FIG. 2. Perturbations in the observed level energies $E(v'=7)$ of $B'\ ^1\Sigma_u^+$ state.

pling, and by the $B\ ^1\Sigma_u^+$ state via radial coupling. For these levels, one obtains the following: 75.11% $B'(v=7)+24.76\%D^+(v=3)+0.11\%C^+(v=17)+0.02\%B(v=48)$, for $J=8$, 87.91% $B'(v=7)+10.41\%D^+(v=3)+1.56\%C^+(v=17)+0.12\%B(v=48)$, for $J=9$. As a consequence of the perturbations discussed, the predicted emission probabilities given in the line list, for these levels, deviate from those of the neighboring levels. This effect can be seen, for instance, on the coefficient A values for the R(7) and R(8) lines in the $B'-X(2-v'')$ and $B'-X(7-v'')$ bands.

New *ab initio* data on coupling operators have been published very recently by Wolniewicz *et al.*[20] As our analysis was already completed using the former *ab initio* data (Ref. 4), they may slightly change the percentages of electronic characters without changing the main features discussed above.

III. CONCLUSION

In this paper, we have extended the wavelength range of our previous investigation of high resolution vuv emission spectra for the D_2 molecule. The upper limit was increased from 102.7 to 124.2 nm. The spectral analysis, based on the combination principle and supported by theoretical studies, has led to the assignment of more than 1480 emission lines, belonging to 109 emission bands of the $B'\ ^1\Sigma_u^+ \rightarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ system in the range of 84.1–121.6 nm. These vuv emission bands are reported here for the first time. The present analysis has allowed the determination of 111 energy levels belonging to the $B'\ ^1\Pi_u^+$ state, of which 31 are new. The number of observed rotational levels has been increased toward higher rotational quantum number J values and the accuracy of the experimental level energies has been improved. Indeed, all the levels that we observed have been determined with more lines than in Ref. 10. The theoretical calculations of level energies and transition probabilities take into account the nonadiabatic couplings between the B, B', C, and D excited electronic states. They provide good predictions that guide the analysis and furthermore allow the investigation of perturbation effects. We have found more evidence of the strong mutual interaction between the B' and the D states via rotational coupling, especially between the $B'\ ^1\Sigma_u^+(v=2)$ and $D\ ^1\Pi_u^+(v=0)$ levels, and between the $B'\ ^1\Sigma_u^+(v=7)$ and $D\ ^1\Pi_u^+(v=2)$ levels which involve newly determined higher J components. This perturbation is also evidenced by the variation of the emission transition probabilities in the R and P branches belonging to the perturbed band systems. The discrepancies between our calculated energies and the experimental ones can be attributed, on the one hand, to the shortcomings of the *ab initio* data (potential energies, adiabatic corrections, and radial and rotational couplings), and on the other hand to the unaccounted effect of higher excited states ($n \geqslant 4$ Ry states). A possible theoretical tool for further investigations would be the multichannel quantum defect theory (MQDT) method, developed for diatomic molecule Rydberg state calculations by Jungen and Atabek (Ref. 14), since it has proven to provide level energies in good agreement with experimental values for the H_2 molecule and its isotopes.[21]

ACKNOWLEDGMENTS

The authors wish to thank Maurice Benharrous and Jean-Yves Roncin for their efficient assistance during the experiments and measurements, respectively, and François Rostas for his critical reading of the manuscript. They are deeply indebted to Alexander Kramida for adjusting and implementing of the IDEN code for application to spectra of hydrogen molecule and its isotopes. Financial support of the PCMI and PNPS programs of CNRS are greatly acknowledged.

[1] J.-Y. Roncin and F. Launay, J. Phys. Chem. Ref. Data Monogr. **4**, 1 (1994).
[2] M. Roudjane, F. Launay, and W.-Ü L. Tchang-Brillet, J. Chem. Phys. **125**, 214305 (2006).
[3] See EPAPS Document No. E-JCPSA6-125-009646 for the line lists. This document can be reached through a direct link in the online article's HTML reference section or via the EPAPS homepage (http://www.aip.org/pubservs/epaps.html).
[4] L. Wolniewicz and K. Dressler, J. Chem. Phys. **88**, 3861 (1988).
[5] G. Staszewska and L. Wolniewicz, J. Mol. Spectrosc. **212**, 208 (2002).
[6] L. Wolniewicz and G. Staszewska, J. Mol. Spectrosc. **220**, 45 (2003b).
[7] V. I. Azarov, Phys. Scr. **44**, 528 (1991).
[8] V. I. Azarov, Phys. Scr. **48**, 656 (1993).
[9] G. H. Dieke, J. Mol. Spectrosc. **2**, 494 (1958).
[10] R. S. Freund, J. A. Schiavone, and H. M. Crosswhite, J. Phys. Chem. Ref. Data **14**, 235 (1985).
[11] G. Herzberg and A. Monfils, J. Mol. Spectrosc. **5**, 482 (1960).
[12] A. Monfils, J. Mol. Spectrosc. **25**, 513 (1968).
[13] I. Dabrowski and G. Herzberg, Can. J. Phys. **52**, 1110 (1974).
[14] Ch. Jungen and O. Atabek, J. Chem. Phys. **66**, 5584 (1977).
[15] H. Abgrall, E. Roueff, X. Liu, R. E. Shemansky, and G. K. James, J. Phys. B **32**, 3813 (1999).
[16] See EPAPS Document No. E-JCPSA6-127-032729 for line list from the present work. This document can be reached through a direct link in the online article's HTML reference section or via the EPAPS homepage (http://www.aip.org/pubservs/epaps.html).
[17] V. V. Meshkov, A. V. Stolyarov, A. V. Ivanchik, and D. A. Varshalovish, JETP Lett. **83**, 303 (2006).
[18] A. V. Stolyarov and M. S. Child, Phys. Rev. A **63**, 052510 (2001).
[19] T. Namioka, J. Chem. Phys. **43**, 1636 (1965).
[20] L. Wolniewicz, T. Orlikowski, and G. Staszewska, J. Mol. Spectrosc. **238**, 118 (2006).
[21] S. C. Ross, Ch. Jungen, and A. Matzkin, Can. J. Phys. **79**, 561 (2001).

B.3 Article III : L'échange de charge aux énergies thermiques : Validité du modèle de Langevin.

IOP Publishing Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics

J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **40** (2007) 2491–2501 doi:10.1088/0953-4075/40/12/022

Validity of the Langevin capture model for charge exchange processes at thermal energies

M Roudjane[1], R McCarroll[2] and Djamal Rabli[3]

[1] LERMA (UMR 8112 du CNRS), Observatoire de Paris-Meudon, 92195-Meudon Cedex, France
[2] Laboratoire de Chimie Physique—Matière et Rayonnement (UMR 7614 du CNRS), Université Pierre et Marie Curie, 75231-Paris Cedex-05, France
[3] Homer L Dodge Department of Physics and Astronomy, University of Oklahoma, 440 W Brooks, Norman, OK 73019, USA

Received 13 March 2007, in final form 26 April 2007
Published 11 June 2007
Online at stacks.iop.org/JPhysB/40/2491

Abstract
A detailed coupled state quantum mechanical calculation using an adiabatic basis is analysed to investigate the validity of the Langevin model for very low energy charge transfer processes in ion–atom collisions. Taking as an example the N^{3+}/H system, it is shown that the success of the Langevin model in describing the energy variation of the cross section is due to the accuracy of the phase averaging procedure in the double passage through the avoided crossing. On the other hand, the model does not yield the correct isotopic dependence of the cross sections. These can only be accurately determined by a coupled state calculation. At low thermal and sub-thermal energies less than 1 meV, the phase averaging procedure breaks down and quantum tunnelling effects become important. In these conditions, the energy variation of the cross section exhibits an appreciable departure from the Langevin model.

1. Introduction

The merged beam measurements of Pieksma *et al* [1] involving collisions of Si^{4+} ions with neutral D atoms show that for energies less than about 100 meV amu^{-1} the electron capture cross section exhibits an inverse velocity dependence, in accordance both with the coupled state calculations and with the Langevin capture model. However, the coupled state calculations predict that the electron capture cross sections for Si^{4+}+H should be a factor of 1.9 larger than for Si^{4+} + D, whereas the Langevin model predicts a factor of only 1.4. This disagreement is a strong indication that one or more of the assumptions of the Langevin model is of doubtful validity. If such is indeed the case, then it is of interest to understand why the Langevin model, which yields the correct inverse velocity dependence of the cross section in the 10–100 meV amu^{-1} energy range, does not predict the correct isotope dependence.

Other shortcomings of the Langevin model have been revealed by the recent calculations of Glassgold *et al* [2] concerning the determination of momentum transfer cross sections in H^++H collisions. While the Langevin model is satisfactory for energies above 10 meV, it is

less satisfactory for energies less than 10 meV, being at best a crude approximation down to energies of 0.1 meV. It fails for even smaller energies.

The Langevin model assumes that in an exothermic reactive collision between atomic systems with a given energy, the reaction takes place only for those collisions, for which the classical centrifugal barrier is less than the collision energy [3]. In the low collision energy range (typically of a few eV or less), this assumption is satisfactory for ion–neutral systems by virtue of the strongly attractive long-range interaction potential between the reactants, which varies as R^{-4} (where R is the ion–neutral distance). Most applications of the Langevin model also make the additional simplifying assumption that the reaction probability is constant for all effective collisions. For example, in the case of reactive ion–molecule collisions, this probability is often taken as unity, because of the large number of reactive channels. In the case, with which we are concerned in this work, namely charge transfer in ion–atom systems, there are only two coupled channels. Then, the charge transfer probability, while still assumed constant, is much smaller than unity. If the main concern is to determine how the cross section varies with energy, the absolute value of the probability is critical. But if absolute cross sections are required, it is necessary to estimate the probabilities with precision.

It is therefore clear that there are several sources of error in the Langevin model at very low energies. The most obvious is the incapacity of a classical (or semi-classical) description of the dynamics to correctly allow for quantum mechanical tunnelling effects. The coupled state calculations of McCarroll and Valiron [4, 5] and Rittby *et al* [6] on the N^{3+}–H system showed that resonant structures in the cross section do indeed occur at very low energies. These are related to the presence of quasi-bound states in the entry channel, which can tunnel through the centrifugal barrier. So, for any given collision energy, classically forbidden reactions can occur for angular momentum beyond the Langevin limit. But, while it is indeed found that for collision energies greater than a few meV, the contribution of classically forbidden reactions is appreciable, it is rarely of dominant importance. So, it is unlikely that any resonant structure can explain the isotope effect observed in the 10–100 meV range. A more probable source of error arises from the way the charge transfer probabilities are determined. These are often estimated by a Landau–Zener-type model together with some phase averaging procedure to take account of interference between different reaction paths [7, 8]. For energies greater than a few meV, the phase averaging procedure is satisfactory, but at energies less than a few meV, it may lead to a significant underestimation of the reaction rate [2].

In the coupled state calculations there is no need to make any of the simplifying assumptions commonly used in the Langevin model. But in view of its ease of application, especially to study systems for which the non-adiabatic interactions leading to charge exchange are not available, it is of some to understand more fully the conditions under which the Langevin model can be reliably used.

Recent calculations by Barragán *et al* [9] of the electron capture cross sections in collisions of O^{2+} and N^{2+} ions with atomic hydrogen had shown an even larger divergence of the Langevin capture model from the coupled states calculation. They find that in these systems, as in N^{3+}+H, the presence of resonance structures in the cross sections becomes increasingly important as the energy decreases below 10 meV amu^{-1} while, for energies exceeding 10 meV amu^{-1}, the contribution of the resonances to the total cross sections remains small. But even allowing for the presence of resonance structures, it would seem that the overall energy dependence of both the O^{2+}+H and N^{2+}+H cross sections does differ significantly from the Langevin model even in the 10–100 meV range.

In the calculations of Barragan *et al* [9], no simple pattern emerges for energies less than 10 meV. The resonance widths appear to be comparable with the energy scale and it becomes meaningless to attempt a separation of the resonance contribution from the background. Some

earlier calculations by the same authors [10] did suggest that at very low energy the charge transfer cross section attains a maximum. But more recent work [9] indicated that this may have been due to numerical errors and, when corrected, no maximum was observed.

Unfortunately, both the O^{2+}+H and N^{2+}+H systems are quite complex. The electron capture process takes place via avoided crossings which involve strong configuration mixing and the accuracy of even the best calculations cannot be guaranteed with absolute certainty. But aside from the problem of determining the non-adiabatic coupling in the vicinity of the avoided crossing regions, it is equally important to ensure an accurate representation of the long-range interaction between the ion and the neutral atom. At low meV energies, the R^{-4} dependence of this interaction in the asymptotic region governs the inverse velocity dependence of the cross section and the characteristics of the tunnelling resonances. For this reason, we propose to reinvestigate the electron capture cross section in the energy range 0.1–100 meV for the simpler N^{3+}H system. Apart from the fact that this system is fairly representative of a wide class of multiply charge ions in collision with a neutral atom, it has the advantage that the interaction potentials and the non-adiabatic matrix elements are known with precision over the entire range of internuclear distances, which control the charge transfer process.

Atomic units will be used throughout except where otherwise stated.

2. Method

The adiabatic states intervening in the electron capture process can be accurately generated by a one-electron model [11], in which the $N^{3+}(1s^22s^2)^1S$ ion core is represented by an effective potential of the form

$$V_{N^{3+}}(r) = -\frac{1}{r}[3 + (4 + 0.4608r)\exp(-2.422r)]. \tag{1}$$

This potential has been optimized to reproduce the spectroscopic energies of the ensemble of ground and excited states of $N^{2+}(1s^22s^2nl)$ to within a few meV. Taking the N nucleus as A and the H nucleus as B, the electron Hamiltonian is then given by

$$H_e = T + V_{N^{3+}}(r_a) - \frac{1}{r_b} + U_{core} \tag{2}$$

where T is the electronic kinetic energy, r_a, r_b are the radial distances of the electron from nuclei A and B, respectively. The core–core interaction is designated by U_{core}. Since the electron capture process is governed by the non-adiabatic interactions for large internuclear distances, it is sufficient for all practical purposes to approximate U_{core} by the nuclear repulsion term, namely

$$U_{core} = \frac{3}{R}. \tag{3}$$

The eigenenergies E_i and eigenvectors $|\chi_i\rangle$ of the Hamiltonian (2) are determined for a range of R by a standard variational method using a set of monoelectronic Slater orbitals $|\upsilon\rangle$, expressed in prolate spheroidal coordinates $\lambda = (r_a + r_b)/R$, $\mu = (r_a - r_b)/R$. In the low energy regime with which we are concerned, only two $^2\Sigma$ states, designated as Σ_1, Σ_2, are involved in the charge exchange process [4]. There is a well-defined avoided crossing around $9a_0$ with a minimum energy separation of 0.3 eV. For the charge transfer to occur at very low energies, special conditions are required. The energy gap at avoided crossing must be neither too large nor too small for the electron capture probability to be significant. For systems such as N^{3+}/H, involving a single molecular orbital (Type I), favourable avoided crossing are located at distances between about 7 and $12a_0$, while for systems such as O^{2+}/H, involving two molecular

orbitals (Type II), favourable crossings are located at somewhat shorter distances (between 4 and $10a_0$). In the case of the N^{3+}/H system, both the entrance channel N^{3+}+H(1s) and the electron capture channels $N^{3+}(1s^22s^23s)^2S+H^+$ are correlated to a $^2\Sigma$ state. These are labelled, respectively, as $2^2\Sigma$ and $1^2\Sigma$ states. The non-adiabatic coupling between these two states is of radial type. Detailed results of the adiabatic potential curves and of the non-adiabatic coupling matrix elements have been given in [4].

The non-adiabatic radial matrix elements are generated from the eigenvectors $|\chi_i\rangle$ expressed in terms of the Slater-type orbitals as follows:

$$|\chi_i\rangle = \sum_j C_{ij}(R)|\upsilon_j\rangle \tag{4}$$

where the column vectors of the matrix **C** are the eigenvectors of H_e. The radial coupling matrix elements may then be written as

$$\left\langle \chi_i \left| \frac{\partial}{\partial R} \chi_j \right. \right\rangle = \sum_{kl} C_{il}(R) \left\{ \left[\frac{\mathrm{d}C_{jk}}{\mathrm{d}R} \right] \langle \upsilon_l | \upsilon_k \rangle + C_{jk} \left\langle \upsilon_l \left| \frac{\partial}{\partial R} \upsilon_k \right. \right\rangle \right\}. \tag{5}$$

In the energy range investigated in this work, it is quite satisfactory to use the standard definition of the non-adiabatic coupling, in which the radial derivative $\partial/\partial R$ in (5) is taken with respect to the centre of mass of the nuclei. However, we have also carried out some calculations with the reaction coordinate formalism [12] in which the radial derivative $\partial/\partial R$ is replaced by

$$\frac{\partial}{\partial R} + \frac{z}{R}\frac{\partial}{\partial z} \tag{6}$$

where the origin of coordinates is located at any arbitrary point on the internuclear axis and z is the projection of the electron on this axis. However, for the energy range of interest in this work, there is no real need to introduce reaction coordinates. Indeed, for energies less than a few eV, all coordinate systems give the same result (see section 3).

The different integrals appearing in (5) or with the operator (6) can be evaluated analytically, while the derivative of the C_{ij} matrix elements are calculated numerically using the finite difference formula

$$\frac{\mathrm{d}C_{ij}(R)}{\mathrm{d}R} = \frac{C_{ij}(R+\delta R) - C_{ij}(R-\delta R)}{2\delta R}. \tag{7}$$

In the calculations, a value of $\delta R = 10^{-3}a_0$ was found to be satisfactory.

The wavefunction of the collision system is then written in the form

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{j=1}^{2} F_j(\mathbf{R})\chi_j(\mathbf{r}, R). \tag{8}$$

Substituting (8) into the Schrödinger equation we obtain a system of coupled partial differential equations, which, in matrix form, can be written as

$$\left[\nabla_{\mathbf{R}}^2 + 2m_{\mathrm{a,b}}\{E_T\mathbf{I} - \mathbf{E}(R)\}\right]\mathbf{F}(\mathbf{R}) = [\mathbf{Q}(\mathbf{R}) + \mathbf{P}(\mathbf{R}) \cdot \nabla_{\mathbf{R}})]\mathbf{F}(\mathbf{R}) \tag{9}$$

where E_T is the relative kinetic energy and **E** is a diagonal matrix, whose elements are the adiabatic energies

$$E_{ij}(R) = E_j(R)\delta_{ij}. \tag{10}$$

The matrix elements of **Q** and **P** involve the non-adiabatic coupling terms

$$Q_{ij}(R) = -\int \chi_i^*(\mathbf{r}, R)\nabla_{\mathbf{R}}^2\chi_j(\mathbf{r}, R)\,\mathrm{d}\mathbf{r} \tag{11}$$

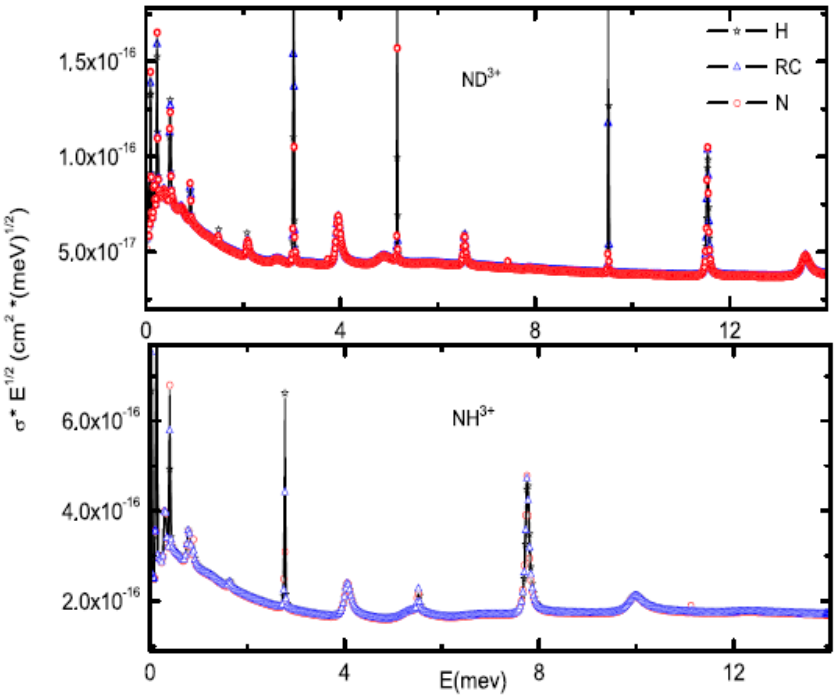


Figure 1. Variation of the charge exchange cross-section σ as a function of the centre of mass energy E for the N^{3+}/H, D systems. In order to facilitate comparison with the Langevin model, the quantity plotted is $\sigma\sqrt{E}$ in units of $cm^2(meV)^{1/2}$. Calculations have been performed using both reaction coordinates (triangle), coordinate origin on H (or D) atom (star) or coordinate origin on N (circle).

(This figure is in colour only in the electronic version)

$$P_{ij}(R) = -2\int \chi_i^*(\mathbf{r}, R)\nabla_{\mathbf{R}}\chi_j(\mathbf{r}, R)\,\mathrm{d}\mathbf{r}. \tag{12}$$

Standard procedures are used to obtain the dynamical equations for a fully quantum mechanical description of the nuclear motion. As in most other calculations of this kind, there is a considerable practical advantage in making an adiabatic–diabatic transformation [13] which removes the first derivative terms from the equations reducing them to a set of coupled second-order differential equations with no first-order derivative. Standard numerical techniques based on log derivative methods [14, 15] are used to solve these equations and extract the elements of the S-matrix.

It should be remarked that at these very low energies, it is very important to ensure an accurate description of the very long-range interaction in the entry channel. This does not raise any serious problem in our work since our calculated potential converges smoothly to the polarization potential $-q^2\alpha/R^4 = -20.25/R^4$.

3. Results

In figures 1 and 2, we present the total cross sections for the N^{3+}+H and N^{3+}+D systems. Results for the coupled two-state adiabatic expansion are given both for the standard adiabatic variables, which do not describe the exact asymptotic conditions, and for a system of reaction coordinates [12], which do allow for a correct description of the asymptotic conditions.

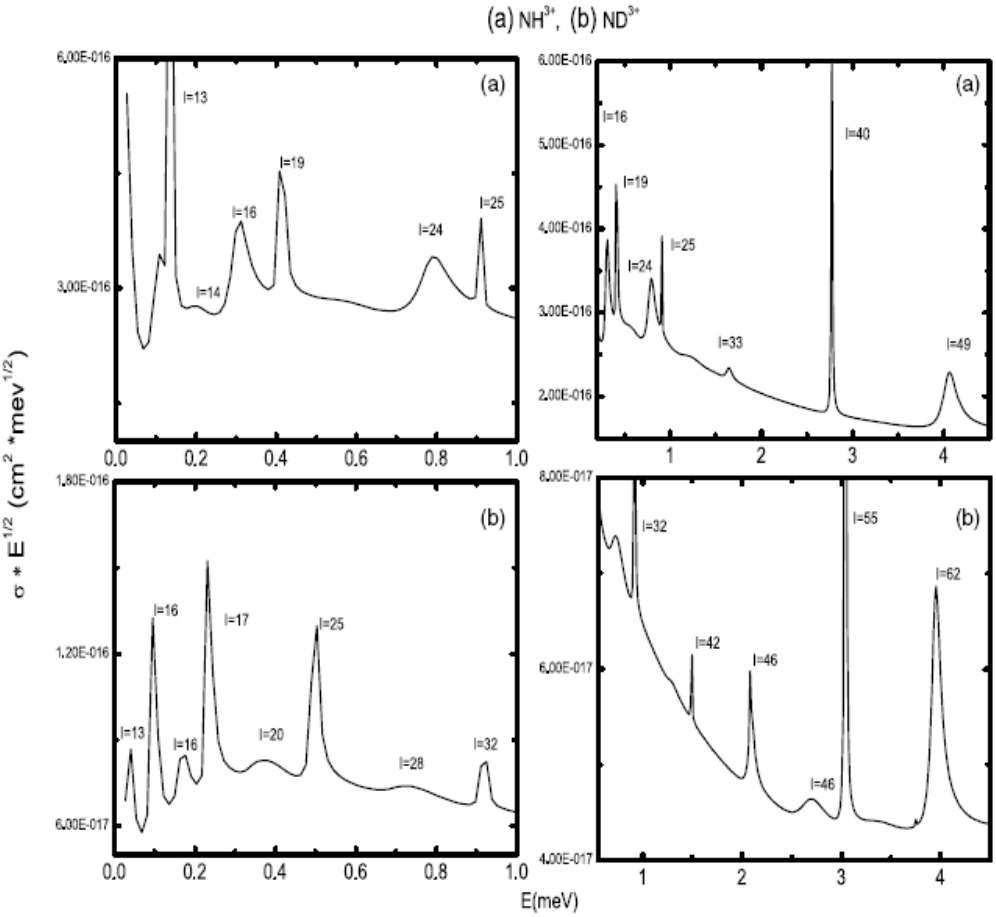


Figure 2. Variation of the quantity $\sigma\sqrt{E}$ (see caption of figure 1) with E in the range 0.003–4 meV. The labels used to identify the resonance peaks designate their angular momentum. It may be observed that these resonance peaks correspond to quantum tunnelling through the centrifugal barrier.

In order to facilitate the comparison of the coupled state calculations with the Langevin model, the cross sections have been multiplied by $E^{1/2}$. Their most striking feature is the presence of a number of well-identified (and stable) resonance peaks. For energies in excess of a few meV, these resonances are well localized and few in number. But their overall contribution to the cross section is quite small for energies above a few meV and can be considered separately. So, except for these specific resonance energies, it is found that the cross section does indeed vary as $E^{1/2}$ for both isotopic systems, just as predicted by the Langevin model.

Another general result is that the use of standard adiabatic variables is quite satisfactory throughout the energy range investigated. The only observable influence of reaction coordinates concerns the height of the some of the resonance peaks, but their position is unchanged.

But, the main apparent weakness of the Langevin model stems from its failure to describe correctly the isotopic dependence of the N^{3+}+H and N^{3+}+D cross sections. Two effects contribute to the isotope effect. Firstly, the range of angular momentum leading to charge exchange is governed by the long-range potential, which results in a cross section inversely

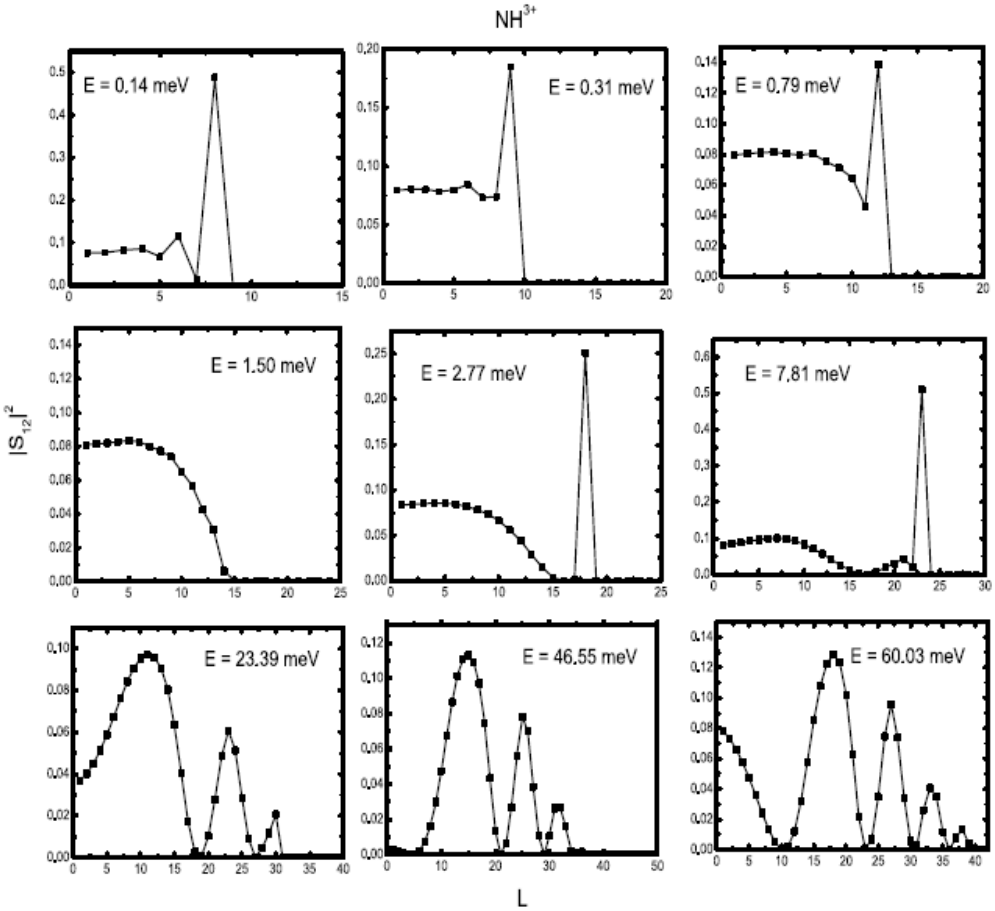


Figure 3. Variation of the N^{3+} + H charge exchange probability $|S_{12}^{L}|^2$ plotted as a function of the angular momentum quantum number L for several centre of mass energies in the 1–100 meV range.

proportional to the square root of the reduced mass. This effect is correctly taken account of in the Langevin model. Secondly, the charge transfer probability depends on the mass-dependent non-adiabatic coupling in the vicinity of the avoided crossing. This second effect is calculated correctly in the coupled state method but, in the Langevin model, it is estimated in an approximate way. So it is not surprising that the isotopic dependence of the cross section is not well described. On the other hand, since the charge transfer probability (when averaged over angular momentum) is independent of energy, the Langevin model does indeed yield the correct energy variation of the cross section for a given isotope. However, implicit assumptions made in the averaging procedure need to be examined. In the coupled state calculations, the charge transfer probability oscillates as a sinusoidal function of the angular momentum. For energies above 10 meV, the usual averaging procedure is surprisingly accurate but as the energy decreases below 10 meV the frequency of the oscillations decreases and at very low energies the probability exhibits a monotonic variation with the angular momentum quantum number L. Under these conditions, the averaging procedure is unsatisfactory. But since no very simple pattern emerges from the total cross section results, it is of interest to present a partial wave analysis of the coupled state results, which makes it possible to separate the various factors which govern the total cross section.

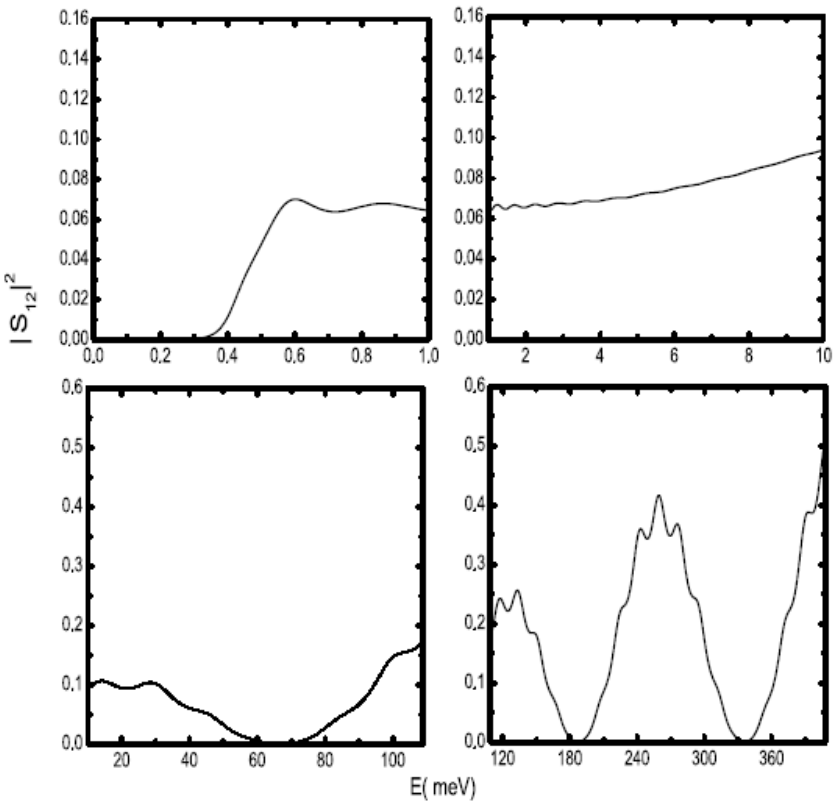


Figure 4. Variation of the N^{3+} + H charge exchange probability $|S_{12}^L|^2$ plotted as a function of the centre of mass energy E in the 1–400 meV range for the angular momentum quantum number $L = 10$.

In figure 3, we present a representative sample of $\left|S_{12}^L\right|^2$ where $S_{i,j}^L$ is an element of the S-matrix for the angular momentum quantum number L. The total cross section is then given by

$$Q_{12} = \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1)\left|S_{1,2}^L\right|^2. \tag{13}$$

If we identify $(L + 1/2)$ with the semi-classical quantum angular momentum, S_{12}^L can be considered as corresponding to the semi-classical charge transfer probability of the Langevin formula. The maximum value $L = L_c$, determined from the classical centrifugal barrier is given by

$$L_c + \frac{1}{2} = \sqrt{2mE}\left(\frac{81}{E}\right)^{1/4} = 3\sqrt{2m}E^{1/4}. \tag{14}$$

From these results, it is observed that since quantum tunnelling is only efficient near the maximum of the centrifugal barrier, there is, in general, only one value of the angular momentum where there is a strong resonance. It occurs for the first value of L exceeding L_c. The height and width of the resonance depend of course on the barrier height, which will vary with the collision energy. But, in general, it is possible to isolate the (non-classical) resonance contribution from the classically accessible contribution for $L < L_c$. And, if the resonance contribution is excluded, the close coupled and Langevin models are in excellent agreement for energies greater than about 4 meV.

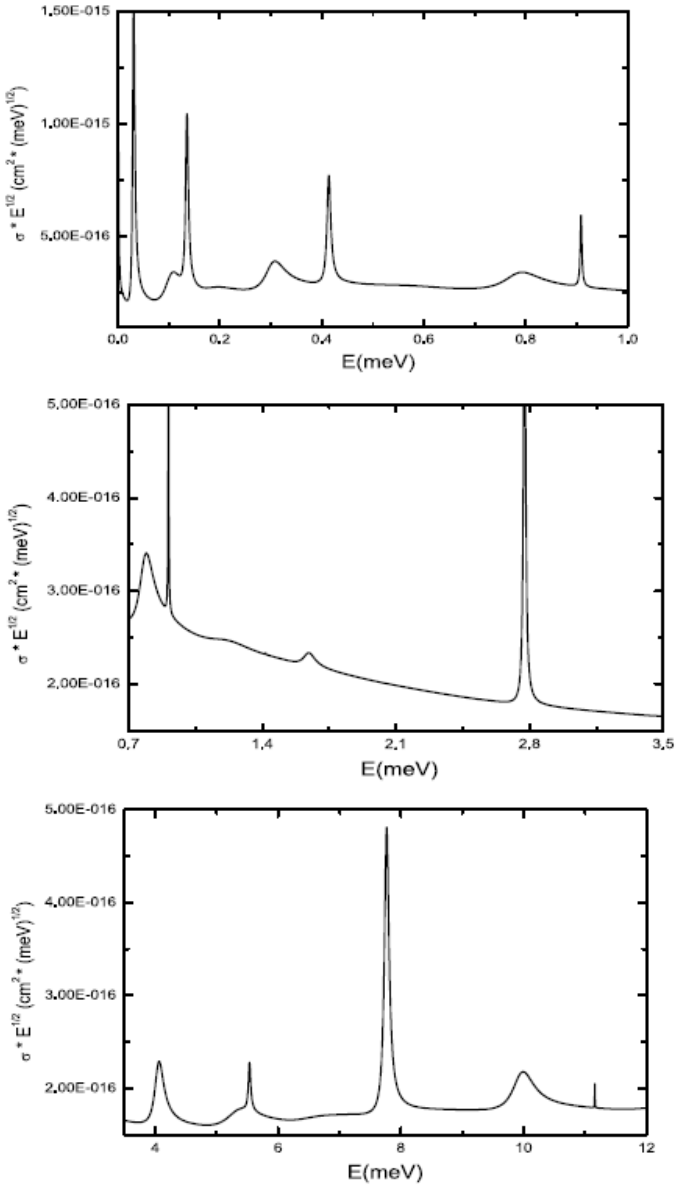


Figure 5. Detailed behaviour of the $N^{3+} + H$ charge exchange cross sections in the centre of mass energy range from 0 to 12 meV. The existence of an intermediate regime between 1 and 4 meV indicates the breakdown of the phase averaging procedure used in the Langevin model to sum over angular momentum (see the text for discussion).

It is seen from figure 3 that for collision energies exceeding a few meV, the probability $\left|S_{12}^{L}\right|^2$ oscillates as a function of L. For example, at an energy of 23 meV, there are three peaks fairly evenly spaced between 0 and L_c. This oscillatory behaviour is quite regular and is characteristic of a Landau–Zener-type avoided crossing, arising from the phase difference of the two reaction paths leading to charge transfer. When summed over L, these oscillations average out to give a total probability fairly independent of energy. So, the notion of a constant probability in the Langevin model remains valid.

However, we see that the notion of a constant mean probability for $L < L_c$ is manifestly not the case for exceedingly low energies less than about 1 meV. Then, the probability

oscillations disappear. The probability is fairly constant for small values of L and then decreases monotonically to L_c. For example, at an energies around 0.1 meV, the charge transfer probability for the N^{3+}/H system is about 0.08 for $0 < L < 10$, then decreasing uniformly to zero for $L = L_c = 14$. The corresponding probability for the N^{3+}/D system is much lower, about 0.015. It is therefore clear that at these very low energies, the averaging procedure used implicitly in the Langevin LZ model will underestimate the cross section. This is borne out by the results of the coupled states calculation.

In figure 4, we present an alternative illustration of $\left|S_{12}^{L}\right|^2$ to show its variation with the collision energy for a given value of L. For example, for $L = 10$, we observe the existence of a threshold energy around 0.4 meV, caused by the centrifugal barrier. Of course, this threshold will vary with L. For energies above threshold, the charge transfer probability becomes an oscillatory function of the energy.

In figure 5, a detailed presentation of the total cross sections is shown for an extended range of energies from 0.1 to 12 meV. It covers three distinct regimes. For collision energies down to about 4 meV, the quantity $\sigma\sqrt{E}$ is practically constant around 1.7 cm^2 (meV)$^{1/2}$, indicating that the phase averaging procedure of the Langevin model is valid. But, between 4 and 1 meV, $\sigma\sqrt{E}$ increases, attaining a higher plateau of about 3.5 cm^2 (meV)$^{1/2}$ at around 1 meV, which remains constant as E decreases. This behaviour is due to the breakdown of the phase averaging procedure around a few meV. So between 1 and 4 meV, no simple procedure is satisfactory for approximating the sum of the probabilities over the angular momentum. However, for very low energies below 1 meV, the charge exchange probability no longer oscillates and, aside from the resonance contribution, $\sigma\sqrt{E}$ is practically independent of the angular momentum up to the critical Lanevin value. This explains the existence of a second plateau of $\sigma\sqrt{E}$ at very low energies below 1 meV.

Of course, the resonance contribution to these very low energy (<1 meV) cross section is much larger than at higher energies in the meV range. But in this case, the resonance contribution is quite distinct. The reason is that resonances are controlled by the long-range interaction and tunnelling through the centrifugal barrier, while the phase averaging effects are governed by the non-adiabatic interaction in the region of the avoided crossing.

4. Conclusion

In conclusion, our calculations show that while the Langevin model does indeed give an excellent prediction of the energy variation of the charge transfer cross section down to energies of a few meV for any given isotope, it does not provide accurate value of the cross sections. For this reason, it does not give the correct isotopic dependence of the cross section. The main reason stems, not from any major defect of the Langevin capture model as such, but from the way the charge transfer probability in the avoided crossing region has been determined. For example, the use of the Landau–Zener approximation introduces errors in the determination of the isotope effect. And the phase averaging often used in summing over partial wave amplitudes introduces errors in the sub-thermal regime.

The effect of quantum mechanical tunnelling through the centrifugal barrier close to maximum is also absent from the Langevin model but the resonances are governed by the long-range interaction and their influence can be accurately calculated. Besides, the overall resonant contribution is not appreciable at energies exceeding 10 meV.

So, aside from the very low thermal energy range where the effect of quantum tunnelling needs to be explicitly included, the remarkable success of the phase averaging procedure

explains why the Langevin model is predicting the correct energy variation of the cross section (even though the absolute value may be in error).

References

[1] Pieksma M, Gargaud M, McCarroll R and Havener C-C 1996 *Phys. Rev.* A **54** R13
[2] Glassgold A-E, Kristić P-S and Schultz D-R 2005 *Astrophys. J.* **621** 808
[3] Langevin P 1905 *Ann. Chim. Phys.* **5** 245
[4] McCarroll R and Valiron P 1979 *Astron. Astrophys* **78** 177
[5] McCarroll R and Valiron P 1980 *Proc. 11th Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions* (Amsterdam: North-Holland) (Invited papers and progress reports) p 453
[6] Rittby M, Elander N, Brändas E and Bárány A 1984 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** L677
[7] Child M-S 1974 *Molecular Collision Theory* (London: Academic)
[8] Nikitin E-E 1974 *Theory of Elementary Atomic and Molecular Processes in Gases* (Oxford: Clarendon)
[9] Barragán P, Errea L-F, Méndez L, Rabadán I and Riera A 2006 *Phys. Rev.* A **74** 24701
[10] Barragán P, Errea L-F, Méndez L, Maciás A, Rabadán I and Riera A 2006 *Phys. Rev.* A **70** 22707
[11] Gargaud M, Hanssen J, McCarroll R and Valiron P 1981 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **14** 2259
[12] Gargaud M, McCarroll R and Valiron P 1987 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20** 1555
[13] Smith F T 1960 *Phys. Rev.* **120** 1058
[14] Johnson B-R 1973 *J. Comput. Phys.* **13** 445
[15] Manolopoulos D 1986 *J. Chem. Phys.* **85** 6425

Annexe C

Calcul des éléments diagonaux de la matrice énergie cinétique électronique T_e

En unité atomique, l'élément de matrice diagonal de l'opérateur énergie cinétique $T_e = -1/2\vec{\nabla}^2$, pour un électron dans un état atomique $|nl\rangle$ d'énergie ϵ_{nl} s'écrit comme :

$$\langle nl|T|nl\rangle = \langle nl| - \frac{1}{2}\vec{\nabla}^2|nl\rangle = \langle nl|\epsilon_{nl} + \frac{1}{r}|nl\rangle \tag{C.1}$$

Dans le cas où l'électron se trouve dans l'orbitale $1s$, l'élément de matrice $\langle 1s|T_e|1s\rangle$ est donné par :

$$\langle 1s|T_e|1s\rangle = \langle 1s|\epsilon_{1s} + \frac{1}{r}|1s\rangle = -\frac{1}{2} + 4\int_0^\infty exp(-2r)\,dr \tag{C.2}$$

Après integration on obtient :

$$\langle 1s|T_e|1s\rangle = -\frac{1}{2} + 1 = \frac{1}{2} \tag{C.3}$$

Pour une orbitale atomique $2s$, l'élément de matrice $\langle 2s|T|2s\rangle$ est donné par :

$$\langle 2s|T_e|2s\rangle = \langle 2s|\epsilon_{2s} + \frac{1}{r}|2s\rangle = -\frac{1}{8} + \frac{1}{8}\int_0^\infty (2 - r^2)exp(-r)\,dr \tag{C.4}$$

on obtient l'après integration :

$$\langle 2s|T_e|2s\rangle = -\frac{1}{8} + \frac{1}{8}[4 - 8 + 6] = \frac{1}{8} \tag{C.5}$$

Finalement, pour une orbitale atomique $2p$, l'élément de matrice $\langle 2p|T_e|2p\rangle$ est donné par :

$$\langle 2p|T_e|2p\rangle = \langle 2p|\epsilon_{2p} + \frac{1}{r}|2p\rangle = -\frac{1}{8} + \frac{1}{24}\int_0^\infty r^3 exp(-r)\,dr \tag{C.6}$$

Après intégration on aura :

$$\langle 2p|T_e|2p\rangle = -\frac{1}{8} + \frac{1}{24}[6] = \frac{1}{8} \tag{C.7}$$

Annexe D

TABLES DES ÉNERGIES EXPÉRIMENTALES

D.1 Énergies ro-vibrationnelles de l'état électronique $C^1\Pi_u$

Table D.1 – *Niveaux d'énergie expérimentales (cm^{-1}) de D_2 pour l'état $C^1\Pi_u^+$. La référence des énergies E est le niveau $X^1\Sigma_g^+(v=0, J=0)$.*

J	E [a]	N [b]	$o-o'$ [c]	$o-o_1$ [d]	$o-o_2$ [e]	E	N	$o-o'$	$o-o_1$	$o-o_2$
		v'=**0**						v'=**1**		
1	99 425.00	14	-0.09	-0.17	-0.07	101 085.54	16	0.03	-0.11	0.01
2	99 487.14	13	0.08	-0.01	0.09	101 145.23	15	-0.07	-0.22	-0.11
3	99 579.57	14	-0.14	-0.22	-0.13	101 234.55	15	-0.19	-0.27	-0.16
4	99 702.65	14	0.01	-0.06	0.04	101 353.16	16	-0.07	-0.20	-0.08
5	99 855.33	14	0.03	-0.07	0.02	101 500.36	16	-0.01	-0.16	-0.04
6	100 037.08	14	-0.06	-0.16	-0.07	101 675.47	16	0.01	-0.08	0.04
7	100 247.25	13	-0.09	-0.22		**101 875.21**	15		-0.40	
8	100 484.60	14	-0.06	-0.25		**102 109.70**	16		-0.25	
9	100 750.87	10	-0.07	-0.24		**102 364.02**	12		-0.18	
10	101 040.88	7	-0.13	-0.38		**102 643.33**	8		-0.43	
		v'=**2**						v'=**3**		
1	102 678.03	18	-0.03	-0.27	-0.12	104 203.93	20	-0.02	-0.32	-0.11
2	102 735.69	18	-0.03	-0.22	-0.06	104 259.19	20	-0.09	-0.34	-0.13
3	102 821.86	18	0.16	-0.10	0.06	104 341.47	19	0.04	-0.32	-0.09
4	102 935.82	18	0.08	-0.15	0.02	104 446.49	18	0.08	-0.47	-0.03
5	103 076.71	17	0.04	-0.24	-0.06	**104 592.46**	19		-0.24	0.03
6	**103 256.95**	12		-0.86	-0.31	**104 753.46**	19		-0.33	-0.09
7	**103 444.32**	16		-0.35		**104 940.58**	16		-0.52	
8	**103 664.18**	16		-0.50		**105 152.68**	15		-0.26	
9	**103 909.39**	16		-0.34		**105 387.17**	17		-0.53	
10	**104 177.80**	5		-0.30		**105 632.27**	8		-0.61	
		v'=**4**						v'=**5**		
1	105 662.67	20	0.07	-0.46	-0.05	107 059.61	20	-0.03	-0.32	0.09
2	105 720.16	20	-0.12	-0.54	-0.12	107 110.84	20	-0.15	-0.57	-0.16
3	105 798.97	19	-0.11	-0.49	-0.16	107 187.74	19	-0.08	-0.40	0.02
4	105 904.53	19	0.05	-0.39	-0.07	107 289.18	20	0.03	-0.40	0.02
5	106 035.57	17	-0.13	-0.42	-0.10	107 414.83	19	-0.27	-0.64	-0.22
6	**106 191.72**	13		-0.20	0.14	**107 563.91**	14		-0.77	-0.35
7	**106 371.32**	13		-0.50		**107 734.84**	13		-0.52	
8	**106 573.45**	13		-1.04		**107 954.25**	12		-0.18	
9	**106 782.56**	5		-1.37		**108 156.55**	10		-1.02	
10	**107 056.52**	7		-0.59		**108 392.65**	6		-0.67	

[a] Les nouvelles énergies déterminées sont en caractère gras.
[b] Nombre de raies utilisées dans l'identification du niveau d'énergie .
[c] Différence entres les nouvelles valeurs des énergies expérimentale et les énergies de la références (85) .
[d] Différence entres les nouvelles valeurs des énergies expérimentales et les énergies calculées dans le présent travail.
[e] Différence entres les nouvelles valeurs des énergies expérimentales et les énergies calculées par la méthode semi-empirique. (28).

D.1. continue.

J	E	N	$o-o'$	$o-o_1$	$o-o_2$	E	N	$o-o'$	$o-o_1$	$o-o_2$
		v'=**6**						v'=**7**		
1	108 389.82	20	-0.04	-0.46	-0.03	109 655.54	24	0.19	-0.48	0.03
2	108 439.06	19	0.03	-0.40	0.03	109 702.31	24	0.11	-0.53	-0.01
3	108 512.17	18	-0.26	-0.64	-0.20	109 771.96	24	0.26	-0.52	0.00
4	108 609.39	20	0.06	-0.41	0.03	109 863.15	22	0.15	-0.51	0.04
5	108 728.97	18	-0.07	-0.56	-0.10	109 965.37	21	0.19	-1.02	-0.08
6	**108 868.39**	17		-0.47	0.08	110 124.94	21	0.23	-0.53	0.06
7	**109 051.95**	16		-0.34		110 280.75	16	0.11	-0.64	
8	**109 231.99**	14		-0.92		**110 458.75**	20		-0.10	
9	**109 437.30**	10		-1.60		**110 654.14**	19		-0.80	
10	**109 663.67**	8		-0.48						
		v'=**8**						v'=**9**		
1	110 855.99	24	0.11	-0.69	-0.12	111 992.41	24	0.12	-0.66	-0.03
2	110 899.48	25	0.15	-0.57	0.04	112 035.95	25	0.50	-0.31	0.32
3	110 980.56	21	25.30	-0.83	0.21	112 099.67	23	0.25	-0.58	0.05
4	111 061.89	20	0.51	-0.44	0.20	112 184.03	24	0.20	-0.66	-0.04
5	111 170.02	23	0.09	-0.92	-0.32	112 288.58	20	0.52	-0.50	0.51
6	111 300.40	16	0.40	-0.58	0.00	112 412.13	12	0.25	-0.60	0.03
7	111 450.23	17	0.38	-0.72		112 552.65	13	0.06	-0.98	
8	111 617.48	12	-0.38	-1.48		**112 700.80**	8		-0.86	
9	**111 793.56**	11		-1.19		**112 907.63**	8		-0.65	
10	**112 027.92**	5		-0.44		**113 098.32**	6		-1.49	
		v'=**10**						v'=**11**		
1	113 060.87	22	0.13	-0.69	0.06	114 061.43	22	0.25	-0.70	0.17
2	113 101.45	21	-0.04	-0.73	0.02	114 099.56	22	0.27	-0.68	0.19
3	**113 161.86**	22		-0.77	-0.02	114 156.17	23	0.24	-0.76	0.11
4	113 241.54	16	-0.04	-0.86	-0.12	114 230.66	18	0.13	-0.84	0.04
5	113 339.84	10	0.08	-0.91	-0.15	114 321.14	19	0.06	-0.95	-0.04
6	113 455.58	16	-0.43	-0.32	0.47	114 457.35	9	42.96	-0.19	0.98
7	**113 575.11**	15		-1.35		114 571.14	10	-0.33	-1.06	
8	**113 756.97**	13		-0.32		**114 712.77**	12		-0.33	
9	**113 921.80**	11		-1.10		**114 868.95**	12		-1.01	
10	**114 104.17**	9		-0.81		**115 035.59**	8		-1.61	

D.1. fin.

J	E	N	$o-o'$	$o-o_1$	$o-o_2$	E	N	$o-o'$	$o-o_1$	$o-o_2$
		v'=**12**						v'=**13**		
1	114 991.49	22	0.36	-0.80	0.11	115 848.19	22	0.50	-0.75	0.17
2	115 027.12	21	0.53	-0.64	0.27	115 880.68	16	0.57	-0.71	0.22
3	**115 079.38**	20		-0.88	0.03	115 927.03	24	0.62	-0.77	0.22
4	115 147.32	20	0.77	-0.48	0.47	116 004.45	16	-0.34	-1.79	-0.73
5	115 252.31	11	0.59	-0.66	0.43	116 082.40	18	0.52	-0.81	0.13
6	**115 348.26**	12		-0.87	0.04	**116 176.90**	14		-1.10	-0.19
7	115 464.91	13	-0.40	-1.51		**116 286.69**	17		-0.72	
8	**115 598.73**	11		-0.30		**116 408.85**	10		-0.74	
9	**115 742.70**	11		-1.13		**116 537.29**	15		-1.60	
		v'=**14**						v'=**15**		
1	116 627.07	24	0.31	-0.88	0.11	117 323.16	24	0.44	-0.78	0.24
2	**116 655.11**	18		-0.85	0.21	117 357.74	17	0.54	-0.84	0.35
3	116 709.68	17	0.01	-0.97	0.13	**117 395.92**	16		-1.05	-0.01
4	116 766.64	13	-0.61	-1.69	-0.68	117 449.78	12	0.28	-0.80	0.22
5	116 841.00	12	0.05	-0.86	0.12	117 515.61	16	-0.30	-1.56	-0.55
6	116 928.70	13	0.61	-0.51	0.46	117 594.37	15	-0.06	-1.44	-0.44
7	117 028.29	16	0.29	-0.91		**117 684.15**	11		-1.28	
8	**117 139.03**	12		-0.76		**117 783.12**	9		-0.52	
9	**117 248.78**	10		-1.15		**117 916.16**	11		-0.92	
10						**118 024.88**	8		-1.60	
		v'=**16**						v'=**17**		
1	117 929.93	23	0.46	-0.70	0.40	118 436.97	20.00	0.11	-0.93	0.20
2	117 960.02	13	11.91	-1.49	-0.17	118 454.21	15.00	-0.56	-1.80	-0.59
3	117 994.28	20	0.34	-0.79	0.35	118 491.62	15.00	0.00	-1.01	0.16
4	118 041.49	16	0.30	-0.70	0.41	118 531.12	15.00	0.12	-0.85	0.29
5	**118 099.18**	15		-1.45	-0.35	118 579.80	13.00	-0.12	-1.10	0.04
6	**118 169.17**	11		-0.24	0.84	118 637.44	9.00	-6.24	-0.77	0.42
7	**118 246.08**	20		-1.37		**118 700.48**	15.00		-1.83	
8	**118 331.07**	12		-1.09		**118 765.57**	11.00		-2.18	
9	**118 442.21**	12		-2.00		**118 854.75**	11.00		-1.31	
10	**118 539.05**	4		-1.01						
		v'=**18**								
1	**118 831.64**	12		-0.54	0.67					
2	118 846.12	9	-0.82	-1.72	-0.51					
3	118 872.50	10	-0.44	-0.70	0.48					
4	118 903.30	13	0.25	-0.51	0.67					
5	118 938.94	10	-4.63	-1.52	-0.32					
6	**118 986.19**	8		-0.63	0.70					

Table D.2 – *Niveaux d'énergie expérimentales (cm^{-1}) de D_2 pour l'état $C^1\Pi_u^-$. La référence des énergies E est le niveau $X^1\Sigma_g^+(v=0, J=0)$.*

J	E [a]	N [b]	$o-o'$ [c]	$o-o_1$ [d]	$o-o_2$ [e]	E	N	$o-o'$	$o-o_1$	$o-o_2$
		v'=**0**						v'=**1**		
1	99 424.65	7	-0.12	-0.22	-0.12	101 085.22	8	0.02	-0.11	0.00
2	99 486.12	7	-0.12	-0.19	-0.09	101 144.48	8	0.12	-0.03	0.08
3	99 577.96	6	-0.12	-0.20	-0.10	101 232.83	8	-0.05	-0.17	-0.05
4	99 700.05	7	0.06	-0.02	0.08	101 350.30	8	0.01	-0.13	-0.02
5	99 851.56	7	0.07	0.00	0.10	101 496.03	7	-0.17	-0.33	-0.22
6	100 031.74	7	-0.25	-0.32	-0.23	101 669.81	7	-0.31	-0.41	-0.29
7	100 240.50	7	-0.30	-0.40		101 871.08	8	-0.06	-0.27	
8	100 476.85	7	-0.37	-0.45		102 098.51	7	-0.32	-0.50	
9	100 740.13	7	-0.29	-0.28		**102 351.98**	7		-0.38	
10	101 029.04	7	0.11	-0.27		**102 630.47**	7		-0.05	
		v'=**2**						v'=**3**		
1	102 677.67	9	-0.10	-0.30	-0.15	104 203.77	10	0.07	-0.20	0.01
2	102 734.75	10	0.01	-0.20	-0.04	104 258.70	10	0.21	-0.08	0.14
3	102 819.61	10	-0.32	-0.53	-0.36	104 340.38	10	-0.03	-0.33	-0.11
4	102 933.22	9	0.23	0.04	0.20	104 449.16	9	0.05	-0.27	-0.05
5	103 073.51	9	0.10	-0.13	0.03	104 584.30	7	0.06	-0.21	0.00
6	103 240.69	8	-0.04	-0.29	-0.12	104 744.90	9	-0.22	-0.52	-0.30
7	103 434.34	9	0.08	-0.20		**104 930.94**	10		-0.60	
8	**103 653.30**	8		-0.31		**105 141.82**	8		-0.33	
9	**103 897.14**	9		-0.24		**105 376.40**	9		-0.07	
10	**104 164.62**	8		-0.36		**105 633.26**	8		-0.39	
		v'=**4**						v'=**5**		
1	105 663.85	9	-0.03	-0.37	-0.08	107 058.89	9	-0.14	-0.51	-0.09
2	105 716.61	9	0.09	-0.28	0.02	107 109.50	9	-0.12	-0.43	-0.01
3	105 795.14	9	-0.07	-0.46	-0.16	107 184.96	10	-0.07	-0.50	-0.09
4	105 899.77	9	0.06	-0.29	0.02	107 285.29	10	-0.07	-0.39	0.02
5	106 029.39	9	-0.11	-0.44	-0.12	107 409.91	9	1.12	-0.27	0.15
6	106 183.98	9	-0.02	-0.41	-0.08	107 558.02	10	-0.13	-0.42	0.00
7	106 362.83	8	0.03	-0.30		107 729.64	9	-2.99	-0.24	
8	**106 564.57**	7		-0.81		**107 923.33**	8		-0.48	
9	**106 790.01**	7		-0.34		**108 138.99**	9		-0.51	
10	**107 036.63**	8		-0.59		**108 375.75**	6		-0.38	

[a] Les nouvelles énergies déterminées sont en caractère gras.
[b] Nombre de raies utilisées dans l'identification du niveau d'énergie .
[c] Différence entres les nouvelles valeurs des énergies expérimentales et les énergies de la références (85) .
[d] Différence entres les nouvelles valeurs des énergies expérimentales et les énergies calculées dans le présent travail.
[e] Différence entres les nouvelles valeurs des énergies expérimentales et les énergies calculées par la méthode semi-empirique (28).

Table D.2 continue.

J	E	N	$o-o'$	$o-o_1$	$o-o_2$	E	N	$o-o'$	$o-o_1$	$o-o_2$
		v'=**6**						v'=**7**		
1	108 389.55	11	0.11	-0.32	0.11	109 655.18	11	0.29	-0.54	-0.02
2	108 437.80	11	-0.10	-0.48	-0.05	109 701.50	12	0.00	-0.52	0.00
3	108 510.22	9	0.05	-0.43	0.01	109 770.64	12	-0.22	-0.57	-0.05
4	108 606.35	9	-0.01	-0.30	0.14	109 862.37	12	-0.07	-0.62	-0.11
5	**108 725.39**	10		-0.50	-0.06	109 976.68	12	0.46	-0.29	0.22
6	**108 867.32**	10		-0.56	-0.11	110 112.07	12	0.21	-0.60	-0.09
7	**109 031.57**	9		-0.45		110 268.32	10	-0.59	-1.19	
8	**109 217.18**	8		-0.49		110 446.11	8	-0.06	-0.74	
9	**109 423.56**	8		-0.53		**110 642.98**	11		-1.00	
10	**109 649.79**	5		-0.70		**110 859.90**	8		-0.21	
		v'=**8**						v'=**9**		
1	110 856.25	11	0.38	-0.46	0.11	111 991.63	13	0.13	-0.56	0.07
2	110 900.37	13	0.80	-0.5	0.07	112 033.48	13	-0.01	-0.71	-0.09
3	110 966.26	13	0.24	-0.61	-0.04	112 096.30	14	0.20	-0.66	-0.04
4	111 053.66	12	0.14	-0.74	-0.18	112 179.44	13	0.21	-0.75	-0.13
5	111 162.53	12	0.54	-0.56	0.01	112 282.83	12	0.14	-0.68	-0.06
6	111 291.90	10	0.46	-0.55	0.02	112 405.95	10	0.44	-0.50	0.12
7	111 441.37	11	0.07	-0.76		**112 549.05**	10		0.60	
8	**111 610.59**	8		-0.3		**112 708.16**	7		-0.74	
9	**111 797.83**	7		-0.8		**112 886.30**	5		-0.80	
10	**112 003.59**	5		-0.79		**113 081.57**	7		-0.72	
		v'=**10**						v'=**11**		
1	113 060.40	13	0.01	-0.69	0.06	114 061.28	12	0.48	-0.52	0.35
2	113 100.15	12	0.05	-0.74	0.00	114 098.66	13	0.35	-0.68	0.19
3	113 159.68	11	0.22	-0.68	0.07	114 154.62	9	0.01	-0.79	0.08
4	113 238.56	11	0.11	-0.64	0.11	114 229.05	12	0.28	-0.68	0.19
5	113 336.18	9	0.06	-0.85	-0.11	114 321.03	12	0.06	-0.89	-0.02
6	113 452.43	10	-0.02	-0.98	-0.23	114 430.78	12	-0.22	-0.74	0.12
7	113 587.67	5	0.80	-0.10		**114 557.57**	7		-0.43	
8						**114 700.17**	5		-0.56	
9	**113 902.17**	10		0.24		**114 859.13**	8		0.10	
10	**114 091.81**	8		-0.47		**115 031.35**	10		-0.81	

Table D.2 fin.

J	E	N	$o-o'$	$o-o_1$	$o-o_2$	E	N	$o-o'$	$o-o_1$	$o-o_2$
		v'=**12**						v'=**13**		
1	114 991.05	12	-0.60	-1.04	-0.13	115 848.14	12	0.40	-0.78	0.14
2	115 026.54	10	0.66	-0.74	0.17	115 880.86	13	0.52	-0.77	0.15
3	115 078.97	8	0.36	-0.85	0.05	115 929.57	12	0.44	-0.89	0.02
4	115 148.62	11	0.40	-0.81	0.08	115 994.45	12	0.60	-0.67	0.24
5	115 235.03	11	0.45	-0.71	0.16	116 073.98	10	0.06	-1.26	-0.36
6	115 337.24	9	0.05	-1.05	-0.19	**116 169.07**	11		-1.27	-0.38
7	**115 455.70**	6		-0.84		**116 279.08**	11		-0.81	
8						**116 402.65**	8		-0.60	
9						**116 539.62**	11		-0.10	
10						**116 687.71**	10		-0.82	
		v'=**14**						v'=**15**		
1	116 627.49	11	0.27	-0.76	0.23	117 323.92	14	0.29	-0.83	0.18
2	116 657.73	12	0.58	-0.60	0.39	117 351.15	13	0.42	-0.81	0.19
3	116 702.65	9	0.62	-0.55	0.44	117 391.93	8	0.56	-0.60	0.40
4	116 761.65	13	0.11	-0.92	0.06	117 445.46	15	0.45	-0.69	0.31
5	116 835.15	7	0.30	-0.91	0.06	**117 511.39**	8		-1.03	-0.04
6	**116 922.20**	9		-0.99	-0.03	**117 590.34**	6		-0.51	0.48
7	**117 021.95**	9		-1.45		**117 679.98**	10		-0.86	
8	**117 134.53**	8		-1.51		**117 780.71**	7		-1.00	
9	**117 258.98**	9		-1.40		**117 891.11**	8		-1.57	
10	**117 394.95**			-0.67						
		v'=**16**						v'=**17**		
1	117 930.80	10	0.53	-0.49	0.59	118 437.75	12.00	0.47	-0.46	0.67
2	117 954.71	11	0.52	-0.63	0.45	118 458.33	9.00	0.67	-0.30	0.83
3	117 990.48	10	0.37	-0.65	0.43	118 488.37	9.00	1.87	-0.59	0.54
4	118 037.84	8	0.60	-0.52	0.56	118 527.34	10.00	-0.52	-1.50	-0.37
5	118 095.88	10	0.45	-0.70	0.37	118 577.26	13.00	0.34	-0.53	0.61
6	**118 164.25**	6		-1.03	0.05	**118 633.87**	8.00		-1.32	-0.18
7	**118 243.45**	4		-0.34		**118 699.31**	13.00		-0.98	
8	**118 329.99**	10		-1.38		**118 770.73**	9.00		-1.48	
9	**118 426.57**	6		-0.58		**118 849.69**	8.00		-0.19	
10	**118 529.84**	11		-0.30						
		v'=**18**								
1	**118 830.82**	10		-0.70	0.48					
2	**118 846.36**	14		-1.22	-0.04					
3	**118 870.63**	5		-0.68	0.50					
4	**118 901.39**	8		-0.86	0.31					
5	**118 938.88**	5		-0.93	0.25					
6	**118 980.80**	6		-2.35	-1.18					

D.2 Énergies ro-vibrationnelles de l'état électronique $B^1\Sigma_u^+$

Table D.3 – *Niveaux d'énergie expérimentales (cm^{-1}) de D_2 pour l'état $B^1\Sigma_u^+$. La référence des énergies E est le niveau $X^1\Sigma_g^+(v=0, J=0)$.*

J	E [a]	N [b]	$o-o'$ [c]	$o-o1$ [d]	$o-o2$ [e]	E	N	$o-o'$	$o-o1$	$o-o2$
		v'=**10**					v'=**11**			
0	99 262.71	6	0.09	0.09	-0.11	100 034.89	7	-0.14	-0.14	-0.12
1	99 277.56	12	0.18	0.18	0.01	100 049.25	14	-0.11	-0.11	-0.14
2	99 306.79	12	0.02	0.02	-0.16	100 077.85	15	-0.21	-1.13	-0.24
3	99 350.86	11	0.11	0.11	-0.09	100 120.95	14	-0.07	-0.07	-0.08
4	99 409.20	11	0.04	0.04	-0.18	100 178.00	16	-0.03	-0.03	-0.05
5	99 481.87	11	0.04	0.04	-0.18	100 248.78	16	-0.11	-0.11	-0.19
6	99 568.82	10	0.41	0.41	0.13	100 333.65	13	0.13	0.13	0.08
		v'=**12**					v'=**13**			
0						101 532.64	7	0.15	-0.90	0.13
1	100805.47	13	-0.04	-1.01	-0.05	101 546.33	11	0.18	-0.90	0.12
2	100833.34	10	-0.15	-1.11	-0.15	101 573.48	10	-0.09	-1.10	-0.08
3	100875.32	12	-0.02	-0.99	-0.03	101 614.50	10	0.04	-1.00	0.03
4	100930.69	10	-0.28	-1.22	-0.26	101 668.86	11	-0.08	-1.00	0.03
5	100999.98	10	-0.17	-1.11	-0.14	101 736.43	10	0.02	-1.10	-0.07
6										
		v'=**14**					v'=**15**			
0	**102 257.84**	7		1.44	-0.34	**102 968.76**	8		-1.10	0.07
1	102 271.71	10	0.13	-0.90	0.19	102 981.77	16	-0.02	-1.16	0.01
2	102 298.25	15	0.01	-1.00	-0.56	103 007.85	16	-0.04	-1.19	-0.02
3	102 338.11	12	0.06	-1.00	0.09	103 046.93	15	-0.03	-1.20	-0.03
4	102 391.08	13	0.09	-1.00	0.10	103 099.07	14	2.42	-1.10	0.07
5	**102 456.98**	14		-1.00	0.10	103 164.38	15	8.23	-1.10	0.06
6	**102 535.41**	11		-1.20	-0.09	**103 229.46**	13		-0.89	-0.10
		v'=**16**					v'=**17**			
0	**103 664.20**	6		-1.27	-0.04	104345.03	8	0.03	-1.27	0.03
1	103 677.09	12	0.07	-1.09	0.14	104357.82	14	0.39	-1.00	0.30
2	103 702.40	13	0.01	-1.17	0.06	104382.66	15	0.19	-1.23	0.07
3	103 740.51	15	0.13	-1.06	0.18	104420.62	15	0.26	-1.12	0.17
4	**103 790.86**	13		-1.20	0.04	104474.82	12	0.01	-1.10	-0.03
5	**103 853.36**	15		-1.53	-0.29	104527.18	13	0.28	-0.95	0.29
6	**103 928.76**	12		-1.12	0.12	104601.49	16	0.10	-1.29	-0.01
7						104686.96	15	0.43	-1.09	
8						**104783.33**	10		-1.12	
		v'=**18**					v'=**19**			
0	105 011.23	6	0.00	-1.29	0.06	105 663.43	10	0.46	-0.90	0.50
1	105 023.41	17	-0.04	-1.24	0.12	105 676.40	18	-0.06	-1.25	0.03
2	105 047.95	16	0.44	-0.91	0.44	105 695.94	19	0.21	-1.19	0.08
3	105 083.82	18	0.09	-1.28	0.07	105 732.33	18	0.25	-1.20	0.17
4	105 132.37	14	0.52	-0.90	0.46	105 779.93	17	0.48	-0.90	0.48
5	105 191.76	15	-0.03	-1.47	-0.11	105 838.19	15	0.00	-1.30	0.09
6	105 263.18	13	-0.13	-1.63	-0.28	105 907.93	14	0.07	-1.49	-0.10
7	**105 346.13**	11		-1.72		105 988.74	15	-0.12	-1.68	

[a] Les nouvelles énergies déterminées sont en caractère gras.
[b] Nombre de raies utilisées dans l'identification du niveau d'énergie .
[c] Différence entres les nouvelles valeurs des énergies expérimentales et les énergies de la références (85) .
[d] Différence entres les nouvelles valeurs des énergies expérimentales et les énergies calculées dans le présent travail.
[e] Différence entres les nouvelles valeurs des énergies expérimentales et les énergies calculées par la méthode semi-empirique (28).

Table D.3. continue.

J	E	N	$o-o'$	$o-o1$	$o-o2$	E	N	$o-o'$	$o-o1$	$o-o2$
		v'=**20**					v'=**21**			
0	106 300.79	8	0.17	-1.12	0.31	106 924.35	6	0.25	-1.10	0.36
1	106 312.18	17	0.31	-1.30	0.13	106 935.33	14	0.33	-1.23	0.22
2	106 335.26	16	-0.49	-1.33	0.10	106 957.66	14	0.28	-1.21	0.23
3	106 369.99	17	0.26	-1.20	0.23	106 991.05	18	-0.02	-1.36	0.09
4	106 415.97	16	0.13	-1.21	0.22	107 035.73	14	1.41	-1.38	0.07
5	106 473.05	16	0.03	-1.40	0.02	107 091.33	13	-0.16	-1.50	-0.06
6	106 542.01	10	0.55	-0.90	0.53	107 158.12	13	0.27	-1.28	0.17
7	106 621.26	13	0.17	-1.26		**107 235.34**	10		-1.25	
		v'=**22**					v'=**23**			
0	107 534.03	10	0.34	-1.09	0.39	108 129.46	7	-0.30	-1.66	-0.16
1	107 544.98	16	0.33	-1.19	0.29	108 140.48	20	0.15	-1.32	0.18
2	107 567.00	18	0.26	-1.25	0.23	108 161.79	17	0.03	-1.36	0.13
3	107 600.02	20	0.11	-1.28	0.19	108 193.70	20	-0.12	-1.47	0.02
4	107 643.97	19	0.17	-1.31	0.17	108 236.36	17	0.10	-1.44	0.05
5	107 698.66	16	0.04	-1.47	0.00	108 289.30	19	0.02	-1.62	-0.14
6						108 352.92	16	0.13	1.48	0.00
7						108 426.24	11	-0.26	-1.80	
		v'=**24**					v'=**25**			
0	108 712.50	10	0.33	-1.11	0.41	109 281.20	9	-0.10	-1.56	-0.03
1	108 722.78	19	0.23	-1.39	0.12	109 291.72	21	0.27	-1.25	0.28
2	108 743.87	14	0.10	-1.42	0.09	109 311.75	15	-0.19	-1.62	-0.10
3	108 775.64	18	0.25	-1.31	0.20	109 342.56	18	0.17	-1.38	0.14
4	108 817.69	16	0.05	-1.48	0.02	109 383.10	17	0.02	-1.51	0.01
5	108 871.15	16	0.42	-1.10	0.39	109 433.81	14	0.08	-1.48	0.03
6						109 494.73	9	0.44	-1.12	0.38
		v'=**26**					v'=**27**			
0	109 837.34	5	0.05	-1.40	0.13	110 380.30	6	0.51	-1.40	0.14
1	109 847.47	18	0.07	-1.41	0.13	110 389.96	18	0.25	-1.49	0.06
2	109 868.02	13	0.36	-1.17	0.37	110 409.25	14	0.19	-1.67	-0.13
3	109 898.44	16	0.14	-1.36	0.16	110 438.62	15	0.31	-1.47	0.06
4	109 940.09	14	0.04	-1.47	0.02	**110 477.48**	12		-1.42	0.11
5	110 002.92	9	0.26	-0.90	0.19	110 525.79	11	0.19	-1.47	0.05
6	110 039.75	10	0.27	-1.30	0.14	110 583.92	12	-38.98	-1.16	0.35
7	**110 109.94**	6		-1.90		**110 650.56**	12		-1.72	
		v'=**28**					v'=**29**			
0	110 910.31	9	0.02	-1.48	0.08	111 428.14	6	0.56	-0.98	0.57
1	110 920.39	15	0.21	-1.34	0.20	111 436.88	9	0.09	-1.54	0.01
2	110 940.93	12	0.17	-1.39	0.11	111 455.41	13	0.16	-1.59	-0.04
3	110 955.44	18	-24.88	-1.08	-0.01	111 483.37	14	0.22	-1.46	0.09
4	111 000.65	11	0.11	-1.58	-0.11	111 520.41	13	0.20	-1.45	0.09
5	111 049.29	14	0.13	-1.48	0.02	111 566.53	12	0.38	-1.50	0.03

Table D.3. fin.

J	E	N	$o-o'$	$o-o1$	$o-o2$	E	N	$o-o'$	$o-o1$	$o-o2$
		v'=**30**					v'=**31**			
0	111 932.23	8	-0.18	-1.60	-0.04	112 424.84	7	0.29	-1.16	0.40
1	111 940.96	18	0.17	-1.40	0.15	112 433.37	16	-0.01	-1.50	0.07
2	111 958.71	20	0.54	-1.25	0.29	112 451.23	18	0.23	-1.35	0.21
3	111 985.53	20	0.37	-1.23	0.31	112 477.75	21	0.12	-1.38	0.18
4	112 020.90	15	0.04	-1.73	-0.19	112 512.95	13	0.12	-1.52	0.03
5	112 065.88	17	0.17	-1.54	-0.01	112 557.24	13	0.28	-1.38	0.16
		v'=**32**					v'=**33**			
0	112 904.21	7	0.05	-1.50	0.07	113 371.70	7	0.06	-1.30	0.27
1	112 912.96	12	0.31	-1.20	0.37	113 379.92	18	0.07	-1.53	0.04
2	112 929.82	11	0.18	-1.30	0.27	113 396.89	15	0.09	-1.45	0.12
3	112 955.02	10	-0.10	-1.60	-0.04	113 422.31	18	0.24	-1.35	0.21
4	112 988.75	10	-0.39	-1.91	-0.36	113 456.16	11	0.11	-1.30	0.26
5	113 031.58	9	0.08	-1.58	-0.04	113 498.81	12	0.61	-1.11	0.44
6						113 550.72	10	0.11	-1.40	0.10
		v'=**34**					v'=**35**			
0	113 826.48	6	0.14	-1.41	0.16	114 268.94	3	0.12	-1.40	0.16
1	113 834.38	16	0.01	-1.59	-0.02	114 277.00	14	0.36	-1.39	0.17
2	113 850.55	10	0.13	-1.59	-0.02	114 293.45	10	0.65	-1.04	0.52
3	113 875.02	9	0.22	-1.38	0.18	114 317.34	15	0.54	-1.36	0.19
4	113 907.23	8	0.09	-1.51	0.05					
5	113 947.50	11	0.00	-1.58	-0.03					
6	113 995.79	11	0.00	-1.54	0.00					
		v'=**36**					v'=**37**			
0	114 698.49	6	-0.01	-1.78	-0.25					
1	114 706.29	13	0.13	-1.65	-0.12	115 123.76	10	0.36	-1.44	0.08
2	114 721.87	14	0.38	-1.42	0.12	115 138.93	11	0.13	-1.67	-0.15
3	114 744.88	19	0.38	-1.41	0.12	115 162.44	16	-0.22	-1.56	-0.06
4	114 774.70	12	-0.50	-2.22	-0.69	115 195.54	10	0.34	-1.40	0.05
5	114 813.53	14	0.17	-1.59	-0.07	**115 214.72**	10		-1.57	-0.29
6						**115 266.56**	10		-1.42	0.04
		v'=**38**					v'=**39**			
0	115 520.35	7	0.31	-1.56	-0.04	115 911.96	9	0.66	-1.10	0.42
1	115 527.70	12	0.47	-1.46	0.06	115 919.21	13	0.65	-1.18	0.34
2	115 542.43	13	0.62	-1.20	0.32	115 933.98	13	0.48	-1.34	0.17
3	115 563.86	15	0.40	-1.47	0.05	**115 958.10**	8		-1.48	-0.05
4	115 592.81	10	0.49	-1.40	0.11	115 973.27	10	-11.15	-1.41	-0.06
5	115 628.53	9	-0.01	-1.70	-0.19	116 011.66	16	0.09	-1.90	-0.43
		v'=**40**								
0	116 288.60	6	-0.34	-1.91	-0.41					
1	116 295.87	11	0.72	-1.42	0.08					
2	116 309.31	10	0.15	-1.54	-0.03					
3	116 329.83	11	0.50	-1.32	0.18					
4	116 356.73	10	0.29	-1.46	0.04					

Annexe E

Table des Raies

E.1 Le système $D^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. $v' = 0 - 3$.

Table E.1 – *Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système* $D^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. $v' = 0 - 3$.

			0 - 0						0 - 1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	113223.34r [a]	1.0E+07 [b]					110229.46	4.0E+07				
1	113223.34r	9.3E+06	(113162.86) [c]	1.5E+07			110232.08	3.6E+07	110171.14	6.1E+07		
2	113195.20* [d]	9.2E+06	113102.79r	1.5E+07	113042.80	4.9E+06	110207.24	3.4E+07	110115.58	6.1E+07	110056.63	2.0E+07
3	113136.63	9.3E+06	113014.32	1.5E+07	112926.08	5.8E+06	110155.01	3.4E+07	110032.57	6.1E+07	109945.17	2.5E+07
4	113046.30	1.0E+07	112894.89	1.5E+07	112779.08*	6.0E+06	110074.76	3.5E+07	109922.65	6.0E+07	109807.07	2.6E+07
5	112928.46	1.1E+07	112748.66	1.5E+07	112606.02	5.8E+06	109966.62	3.8E+07	109786.17	6.0E+07	109643.77	2.6E+07
6	112779.08	1.4E+07	112573.81	1.5E+07	112404.42	5.2E+06	109829.31	4.3E+07	109624.04	6.0E+07	109454.52	2.5E+07
7	112595.50	1.9E+07	112372.18	1.5E+07	112176.33	4.2E+06	109659.33	5.3E+07	109436.93	5.9E+07	109240.62	2.2E+07
8		9.0E+00	112144.96	1.5E+07	111919.84	2.4E+06			109226.02	5.9E+07	108999.90	1.6E+07
9			(111892.57)	1.5E+07					108991.64	5.9E+07	(108730.72)	5.8E+06
10			111616.12	1.5E+07					108735.15	5.9E+07	108518.28	6.3E+07

			0 - 2						0 - 3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	107377.04	6.6E+07					104597.25	6.2E+07				
1	107359.68	5.3E+07	107298.72	1.0E+08			104604.26	5.3E+07	104543.31	9.6E+07		
2	107338.87	5.4E+07	107247.39	1.0E+08	107188.93	3.6E+07	104589.55	4.8E+07	104495.97	9.6E+07	104436.94	3.5E+07
3	107292.14	5.2E+07	107170.74	1.0E+08	107083.15	4.4E+07	104548.66*	4.4E+07	104425.26	9.6E+07	104337.81	4.3E+07
4	107221.14	5.1E+07	107068.75	1.0E+08	106953.68	4.8E+07	104483.80	4.0E+07	104331.61	9.6E+07	104216.17	4.8E+07
5	107123.13	5.0E+07	106942.66	1.0E+08	106800.40	5.0E+07	104396.03	3.6E+07	104216.17	9.6E+07	104073.23	5.2E+07
6	106997.91	5.1E+07	106792.85	1.0E+08	106623.55	5.0E+07	104282.87	3.0E+07	104077.50	9.6E+07	103908.42	5.5E+07
7	106841.61	5.1E+07	106620.05	1.0E+08	106423.65	4.8E+07	(104140.59)	1.9E+07	103918.58	9.6E+07	103722.38	5.7E+07
8	106741.79*	5.5E+06	106424.89	1.0E+08	106199.22	4.2E+07	104054.47	3.2E+07	103735.52	9.6E+07	103512.61d [e]	5.7E+07
9	106543.58	1.4E+07	106208.69	1.0E+08	105947.07	2.7E+07	103876.52	3.6E+07	103541.58	9.6E+07	103280.06	5.2E+07
10			105973.50	1.0E+08	105755.57	6.2E+07			103324.17	9.6E+07	103108.11	2.4E+07

			0 - 4						0 - 5			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	101955.22	3.5E+07					99428.25	1.3E+07				
1	101963.99	3.0E+07	101903.32	5.6E+07			99438.15	1.2E+07	99377.57	2.1E+07		
2	101951.69	2.7E+07	101859.85	5.6E+07	101800.86	2.0E+07	99429.61	1.1E+07	99337.62	2.1E+07	(99278.98)	7.1E+06
3	101917.44	2.4E+07	101795.12	5.6E+07	101707.95	2.6E+07	99401.53*	9.4E+06	(99279.33)	2.1E+07	99191.98d	8.7E+06
4	101861.64	2.0E+07	101710.82	5.6E+07	101592.30	2.9E+07	99354.54*	8.4E+06	99201.12d	2.1E+07	99086.00d	9.6E+06
5	101783.86	1.6E+07	101903.60	5.6E+07	101461.09	3.1E+07	99285.81*	6.3E+06	99104.29	2.1E+07	98963.63	1.0E+07
6	101683.18	1.0E+07	101477.68	5.6E+07	101308.24	3.4E+07	(99197.34)	3.6E+06	99991.20	2.0E+07	98822.27	1.1E+07
7	101554.56	2.5E+06	101332.15	5.6E+07	101135.21	3.8E+07	(99082.17)	4.0E+05	98858.14	2.0E+07	98663.41	1.2E+07
8	101482.38	4.9E+07	101165.58	5.6E+07	100941.87	4.2E+07	(99024.71)	2.8E+07	98707.02	2.0E+07	98481.97	1.4E+07
9			100986.70	5.6E+07	100726.25	4.6E+07	98883.55	2.4E+07	98548.39d	2.0E+07	(98287.63)	1.5E+07
10			100790.14	5.6E+07	100574.29*	2.9E+06			(98369.98)	2.0E+07		

			1 - 0						1 - 1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	114825.97r	2.1E+07					111831.73	4.1E+07				
1	114825.97r	1.5E+07	114763.68r	3.7E+07			111833.88	3.2E+07	111772.19	7.2E+07		
2	114795.16	1.3E+07	114701.63r	3.7E+07	114646.61	1.7E+07	111807.85	2.7E+07	111714.38	7.2E+07	111658.72	3.1E+07
3	114736.11	1.1E+07	114609.15r	3.7E+07	114528.57	2.2E+07	111754.17	2.4E+07	111628.15	7.2E+07	111547.10	3.9E+07
4	114643.69	1.0E+07	114486.58	3.7E+07	114381.25	2.5E+07	111671.40	2.2E+07	111513.48	7.2E+07	111408.27	4.4E+07
5	114522.68	9.7E+06	114334.47	3.7E+07	114205.65	2.6E+07	111560.81	2.1E+07	111372.54	7.2E+07	111243.01	4.7E+07
6	(114372.48)	9.5E+06	114152.79	3.7E+07	114001.83	2.7E+07	111423.11	2.1E+07	111203.00	7.2E+07	111051.56	4.9E+07
7	114192.17	9.5E+06	113944.21	3.7E+07	113770.26	2.8E+07	111258.38	2.0E+07	111009.50	7.1E+07	110843.94	5.0E+07
8	113986.98	9.7E+06	113708.06	3.6E+07	113512.35	2.8E+07	111067.62*	2.0E+07	110788.92	7.1E+07	110593.40	5.0E+07
9			113446.23	3.6E+07	113229.19	2.7E+07			110546.68	7.1E+07	110329.15	5.1E+07
10			113158.23*	3.6E+07	112923.19	2.7E+07			110278.78	7.1E+07	110043.37	5.1E+07

[a] Une raie réabsorbée.
[b] E(+x) : 10^x .
[c] Le nombre d'onde de Ritz .
[d] Une raie avec une double attributions, l'autre attribution est dans cette list de raies.
[e] Une raie avec plusieurs attributions, les autres attributions ne sont pas dans cette list de raies.

TableE.1. continue

			1 - 2						1 - 3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	108956.85	1.8E+07						7.0E+05				
1	108961.57	1.5E+07	108899.76	2.9E+07				2.0E+05	106144.57	2.1E+06		
2	108940.32	1.4E+07	108846.29	2.9E+07	108790.74	1.0E+07		1.0E+05	106094.81d	2.0E+06	106039.53d	1.6E+06
3	108891.95	1.3E+07	108765.76	2.9E+07	108685.03	1.3E+07		1.0E+05	106020.31d	2.0E+06	105939.30d	2.4E+06
4	108818.05	1.2E+07	108659.69	2.9E+07	108554.30	1.4E+07		1.0E+05	105923.77*	2.0E+06	105816.81d	2.8E+06
5	108716.60	1.1E+07	108528.26	2.9E+07	108399.33	1.5E+07		1.0E+05	105802.19	2.0E+06	105671.04*	3.1E+06
6	108590.89	1.1E+07	108371.56	2.9E+07	108219.97	1.5E+07		1.0E+05	105657.05*	2.0E+06	105505.25	3.1E+06
7			108191.70	2.9E+07	108018.07	1.6E+07		1.0E+05	105490.93*	2.0E+06	(105316.19)	3.1E+06
8			107987.98	2.9E+07	107793.11	1.7E+07		1.0E+05	(105299.95)	1.9E+06	105104.55	3.3E+06
9			107762.31	2.9E+07	107545.63	1.7E+07			(105096.75)	1.9E+06	104880.06	2.8E+06
10			107516.71	2.9E+07	107278.32	1.8E+07			(104865.42)	1.9E+06	104631.49	2.6E+06

			1 - 4						1 - 5			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	103557.60	3.1E+07					101029.81	5.4E+07				
1	103565.86	2.4E+07	103504.31	5.3E+07			101040.01	4.7E+07	100978.14	8.3E+07		
2	103552.57	2.1E+07	103458.71	5.3E+07	103403.13	2.2E+07	101029.81*	4.3E+07	100936.68	8.3E+07	100880.99*	2.8E+07
3	103516.31	1.8E+07	103390.85	5.3E+07	103309.50	2.8E+07	101000.92	4.1E+07	100874.19	8.3E+07	100792.85*	3.4E+07
4	103458.71*	1.7E+07	103300.69	5.3E+07	103195.23	3.4E+07	100950.33	3.8E+07	100792.85	8.3E+07	100687.02	3.7E+07
5	103377.99	1.5E+07	103189.26	5.3E+07	103060.28	3.4E+07	100880.99	3.6E+07	100691.01	8.3E+07	100562.26	3.9E+07
6	103276.59	1.5E+07	103057.03	5.3E+07	102905.14	3.5E+07	100790.14*	3.5E+07	100570.28	8.3E+07	100418.72	4.0E+07
7	103154.33	1.4E+07	102903.84	5.3E+07	102730.46	3.6E+07	100681.46	3.3E+07	100431.53	8.3E+07	100257.69	4.2E+07
8	103008.22	1.4E+07	102730.46	5.3E+07	(102533.67)	3.7E+07	100548.05	3.1E+07	100269.90	8.3E+07	100072.79	4.4E+07
9			102541.96	5.3E+07	102325.77	3.8E+07			100101.05	8.3E+07	99885.88	4.5E+07
10			102333.76	5.3E+07	102098.79	3.8E+07			99912.88	8.3E+07	99677.13	4.7E+07

			1 - 6						2 - 0			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	98614.83	3.9E+07					116361.58r	3.4E+07				
1	98627.39	3.7E+07	98565.64	5.4E+07			116357.81	3.0E+07	116299.83r	5.3E+07		
2	98621.77	3.6E+07	98528.09	5.4E+07	98472.25*	1.5E+07	116320.76r	2.7E+07	116235.67	5.3E+07	116180.90	1.9E+07
3	98598.08	3.5E+07	98472.25	5.4E+07	98390.91	1.7E+07	116255.81	2.6E+07	116139.78	5.3E+07	116059.26	2.3E+07
4	98555.74	3.5E+07	98398.04	5.4E+07	98292.31	1.7E+07	116155.27r	2.6E+07	116013.47	5.3E+07	115906.90	2.6E+07
5	98495.33	3.4E+07	98306.47	5.4E+07	98177.41	1.8E+07	116026.23	2.7E+07	115854.73	5.3E+07	115724.82	2.6E+07
6	98417.06	3.3E+07	98197.58	5.4E+07	98045.95	1.8E+07	115861.62	2.9E+07	115666.75	5.3E+07	115512.42	2.6E+07
7	98320.86	3.2E+07	98072.32	5.4E+07	97897.84	1.9E+07	115666.04	3.3E+07	115451.50	5.2E+07	115271.73	2.5E+07
8	98212.43	3.0E+07	97933.69	5.4E+07	97736.35d	2.0E+07			115206.11	5.2E+07	115001.95	2.3E+07
9			97776.41	5.3E+07	97559.65	2.1E+07			114936.02	5.2E+07	114702.75	1.7E+07
10			97606.80	5.3E+07	97372.04	2.1E+07			114638.08	5.1E+07		

			2 - 1						2 - 3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	113365.37*	2.6E+07					107734.18	2.7E+07				
1	113365.73*	2.2E+07	113307.71r	4.1E+07			107736.81	2.3E+07	107679.69	4.2E+07		
2	113333.61	2.0E+07	113247.68	4.1E+07	113195.20d	1.5E+07	107714.18	2.1E+07	107628.03d	4.2E+07	107573.89	1.5E+07
3	113273.18	1.9E+07	113158.23	4.1E+07	113077.87	1.9E+07	107665.63	2.0E+07	107550.89	4.2E+07	107470.18	1.9E+07
4	113182.66	1.9E+07	113039.50	4.1E+07	112933.75	2.0E+07	107591.76	1.9E+07	107448.20	4.2E+07	107342.82	2.1E+07
5	113062.53	1.8E+07	112892.28	4.1E+07	112761.96	2.2E+07	107492.43*	1.9E+07	107321.66	4.2E+07	107191.58	2.2E+07
6	112911.59	1.8E+07	112717.21	4.1E+07	112562.81	2.2E+07	107363.49	2.0E+07	107170.74*	4.2E+07	107016.76	2.2E+07
7	112730.70	1.9E+07	112515.50	4.1E+07	112336.74	2.2E+07	107212.37	2.1E+07	106997.91	4.2E+07	106818.25	2.2E+07
8			112287.26	4.1E+07	112083.01	2.1E+07			(106798.32)	4.1E+07	106593.74	2.1E+07
9			112034.24	4.1E+07	111800.46	1.8E+07			106583.70	4.1E+07	106349.95	1.7E+07
10			111757.23	4.1E+07					106345.63	4.1E+07		

			2 - 4						2 - 5			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	105091.84	1.6E+07					102564.74d	1.7E+06				
1	105096.75	1.4E+07	105039.51	2.5E+07			102569.80*	1.4E+06	102513.98d	3.0E+06		
2	105078.17	1.2E+07	104991.20	2.5E+07	104937.42d	9.0E+06	102555.44d	1.3E+06	102470.07	3.0E+06	102415.95d	1.2E+06
3	105035.68	1.1E+07	104920.87	2.5E+07	104840.29	1.1E+07	102521.66d	1.2E+06	102404.79d	3.0E+06	102325.77d	1.5E+06
4	104970.45d	1.0E+07	104824.73	2.5E+07	104720.84	1.3E+07	102461.41d	1.2E+06	102318.52	3.0E+06	102212.05d	1.7E+06
5	104880.06*	9.4E+06	104709.53	2.5E+07	104579.75	1.4E+07	102381.90d	1.4E+06	102212.05d	3.0E+06	102081.48	1.8E+06
6	104765.73	8.2E+06	104570.87	2.5E+07	104416.40	1.4E+07	(102279.39)	1.9E+06	(102086.63)	3.0E+06	101930.08d	1.8E+06
7	104627.44*	6.5E+06	104410.62	2.5E+07	104232.09	1.5E+07	102151.81	3.2E+06	101940.04d	3.0E+06	(101759.95)	1.6E+06
8			104226.14	2.5E+07	104021.39*	1.6E+07			(101773.51)	3.0E+06	101565.24d	1.2E+06
9			104030.80	2.5E+07	103797.21	1.6E+07			101592.31d	3.0E+06		
10			103812.91	2.5E+07					101391.32*	3.1E+06		

TableE.1. fin

			2 - 6						2 - 7			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	100149.24	3.6E+07					97848.04	4.9E+07				
1	100158.12	3.0E+07	100101.05*	5.7E+07			97858.94	4.3E+07	97802.10	7.6E+07		
2	100147.32	2.7E+07	100061.97	5.7E+07	100006.92	2.1E+07	97852.25	4.0E+07	97766.30	7.6E+07	97712.15	2.7E+07
3	100117.14	2.5E+07	100003.36	5.7E+07	99921.81	2.6E+07	97827.92	3.7E+07	97712.97	7.6E+07	97632.92	3.3E+07
4	100067.01	2.3E+07	99923.70	5.7E+07	99817.91	2.9E+07	97785.65	3.4E+07	97642.53	7.6E+07	97537.20	3.6E+07
5	99997.07	2.2E+07	99826.69	5.7E+07	99696.67	3.2E+07	97726.40	3.1E+07	97555.66	7.6E+07	97425.30	3.8E+07
6	99906.49	2.1E+07	99711.37	5.7E+07	99557.16	3.3E+07	97646.68	2.7E+07	97452.32	7.6E+07		
7	99794.31	1.9E+07	99579.78	5.7E+07	99401.53	3.5E+07	97548.71	2.0E+07				
8			99429.61	5.8E+07	99225.65	3.5E+07						
9			99264.93	5.8E+07	99033.94	3.4E+07						
10			99084.57	5.8E+07								

			3 - 0						3 - 1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	117831.33r	3.4E+07					114837.60	6.8E+06				
1	117826.83r	2.8E+07	117770.08r	5.8E+07			114835.67	5.7E+06	114778.54	1.1E+07		
2	117789.79r	2.4E+07	117703.81r	5.8E+07	117652.01r	2.4E+07	114802.48	5.1E+06	114716.68	1.1E+07	114665.11	4.3E+06
3	117719.50r	2.3E+07	117604.90r	5.8E+07	117529.42r	3.0E+07	114738.65	4.7E+06	114623.83	1.1E+07	114548.89	5.4E+06
4	117616.20r	2.2E+07	117473.70r	5.8E+07	117375.02r	3.4E+07	114643.69	4.4E+06	114501.12	1.1E+07	114402.51	6.0E+06
5	117479.68	2.3E+07	117311.49	5.8E+07	117189.50r	3.5E+07	114517.79	4.4E+06	114348.68	1.1E+07	114227.03	6.4E+06
6	117308.51	2.6E+07	117117.01	5.8E+07	116973.05	3.5E+07	114358.73	4.1E+06	114166.79	1.1E+07	114023.45	6.7E+06
7	117095.03	3.1E+07	116893.36	5.8E+07	116726.57	3.3E+07	(114159.18)	3.7E+06	113958.08	1.2E+07	113792.28	6.9E+06
8			116640.93	5.7E+07	116448.91	2.9E+07			113722.84	1.2E+07	113529.83	6.8E+06
9			116361.58d	5.7E+07					113460.32	1.2E+07	113320.70	5.0E+06
10			116053.64	5.7E+07					113173.15	1.2E+07		

			3 - 2						3 - 3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	111963.18	1.2E+07					109205.77	1.7E+07				
1	111963.18*	9.3E+06	111906.25	2.1E+07			109207.61	1.4E+07	109150.95	2.7E+07		
2	111934.18	8.1E+06	111848.33	2.1E+07	111796.99	8.7E+06	109182.88	1.2E+07	109097.00	2.7E+07	109045.25	1.0E+07
3	111876.51d	7.5E+06	111762.23	2.0E+07	111686.52	1.1E+07	109130.26	1.1E+07	109016.59	2.7E+07	108940.32	1.3E+07
4	111790.01	7.5E+06	111647.38	2.0E+07	111548.52	1.2E+07	109052.92	1.1E+07	108910.11	2.7E+07	108811.63	1.4E+07
5	111673.60	7.9E+06	111505.48	2.0E+07	111383.85	1.3E+07	108946.87	1.0E+07	108778.04	2.7E+07	108657.46	1.5E+07
6	111528.53	9.2E+06	111336.49	2.0E+07	111192.13	1.3E+07	108811.63*	1.0E+07	108620.63	2.7E+07	108477.46	1.6E+07
7	111343.87	1.3E+07	111141.42	2.0E+07	110974.49	1.2E+07	108640.26	8.9E+06	108438.22*	2.7E+07	108273.23	1.6E+07
8			110921.21	2.0E+07	110728.83	9.8E+06			108234.61	2.7E+07	108039.84	1.6E+07
9			110676.67	1.9E+07	110447.14	4.2E+06			(108009.19)	2.7E+07	107779.21	1.1E+07
10			110409.61	1.9E+07					107762.31	2.7E+07		

			3 - 4						3 - 5			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	106562.59	1.2E+06					104033.70d	2.5E+07				
1		8.0E+05	106511.09	2.5E+06			104041.71	2.0E+07	103985.00	4.0E+07		
2		6.0E+05	106460.68d	2.5E+06	106409.18d	1.3E+06	104026.50d	1.8E+07	103939.18	4.0E+07	103887.52	1.6E+07
3		5.0E+05	106387.79d	2.5E+06	106311.25d	1.8E+06	103985.00	1.6E+07	103870.81	4.0E+07	103795.00	2.0E+07
4		6.0E+05	106288.34*	2.5E+06	106189.69	2.0E+06	103922.84	1.5E+07	103780.18	4.0E+07	103681.79	2.2E+07
5		8.0E+05	106166.46	2.4E+06	106044.92d	2.0E+06	103837.59	1.5E+07	103667.44	4.0E+07	103546.86	2.3E+07
6	106211.31	1.2E+06	106020.31d	2.4E+06	105877.96	1.9E+06	103726.68	1.5E+07	103534.91	4.0E+07	103390.85	2.4E+07
7			(105852.95)	2.4E+06	(105686.46)	1.6E+06	103580.14	1.4E+07	103381.53	4.0E+07	103213.85	2.4E+07
8			105661.45d	2.3E+06	105469.56d	1.1E+06			103203.78	4.0E+07	103011.31	2.3E+07
9			(105456.18)	2.3E+06					103016.64	4.0E+07	102788.44	1.6E+07
10			(105227.29)	2.3E+06					102807.83	4.0E+07		

			3 - 6						3 - 7			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	101621.31	6.9E+06					99319.93	9.8E+06				
1	101629.21d	6.4E+06	101572.43	9.8E+06			99329.75d	7.5E+06	99273.13	1.8E+07		
2	101616.14d	6.1E+06	101530.55	9.7E+06	101478.72	2.7E+06	99319.93*	6.2E+06	99235.29	1.8E+07	99183.66	7.8E+06
3	101583.82d	5.7E+06	101468.27d	9.7E+06	101391.32*	3.2E+06	99292.89d	5.5E+06	99178.90	1.8E+07	99103.45	1.0E+07
4	101528.70d	5.2E+06	101385.64	9.7E+06	101287.09	3.4E+06	(99247.18)	8.1E+06	99104.29	1.8E+07	99006.75	1.2E+07
5			101283.83d	9.6E+06	101162.08*	3.6E+06	99180.49d	5.0E+06	99011.83	1.9E+07	98892.41	1.3E+07
6			101162.08	9.6E+06	101018.50	3.9E+06	(99093.63)	5.4E+06	98901.90	1.8E+07	98758.53	1.3E+07
7			101023.27d	9.5E+06	100853.98d	4.4E+06	98977.87	6.9E+06	98775.82	1.8E+07	98610.20	1.3E+07
8			100864.83d	9.4E+06	100672.13d	5.1E+06			98636.09	1.9E+07	98442.42	1.3E+07
9			100691.01	9.3E+06	100459.71d	6.5E+06			(98478.28)	1.9E+07	98247.50d	8.2E+06
10			100499.95d	9.2E+06					98309.08*	1.9E+07		

E.2 Le système $D^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v^{'} - v^{''})$. $v^{'} = 4 - 19$.

Table E.2 – *Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système $D^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. $v' = 4 - 19$.*

	4 - 0		4 - 2		4 - 3		4 - 4	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	119178.39r [a]	5.5E+07 [b]	113314.63	3.2E+07	110559.29d [c]	2.2E+06	107919.36	2.6E+07
2	119110.41r	5.5E+07	113254.70	3.2E+07	110503.23d	2.2E+06	107867.22	2.6E+07
3	119008.22r	5.5E+07	113165.07	3.2E+07	110419.68d	2.2E+06	107789.46	2.6E+07
4	118872.76r	5.5E+07	113046.30	3.2E+07	110308.76d	2.2E+06	107687.28	2.6E+07
5	118704.49r	5.5E+07	112898.94	3.2E+07	110171.14* [d]	2.2E+06	107560.91	2.6E+07
6	118505.12	5.4E+07	112723.79	3.2E+07	110009.11d	2.3E+06	107408.58	2.6E+07
7	118273.88	5.4E+07	112520.15	3.2E+07	109821.25d	2.3E+06	107234.13	2.7E+07
8	118013.58	5.4E+07	112292.72	3.2E+07	109605.91d	2.4E+06	107033.89	2.5E+07
9	117724.20	5.4E+07	112040.65	3.2E+07	109373.45d	2.4E+06	106819.99	2.5E+07
10	117407.38	5.4E+07	111762.23	3.1E+07	109116.06*	2.5E+06	106580.84	2.5E+07

	4 - 5		4 - 6		4 - 7		5 - 0	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	105393.34	1.1E+07	102980.61	1.5E+07	100681.46	3.2E+07	120524.98r	4.7E+07
2	105345.70	1.1E+07	102936.88	1.5E+07	100641.76	3.2E+07	120454.69r	4.7E+07
3	105273.72	1.1E+07	102871.48	1.5E+07	100582.06	3.2E+07	120349.98r	4.7E+07
4	105179.26	1.1E+07	102784.32	1.5E+07	100503.36	3.2E+07	120210.02r	4.7E+07
5	105063.19	1.1E+07	102676.91	1.5E+07	100405.44	3.2E+07	120036.98	4.7E+07
6	104924.47	1.1E+07	102549.80	1.5E+07	100290.40	3.2E+07	119831.42	4.6E+07
7	104760.97*	1.1E+07	102403.09	1.5E+07	100158.12	3.2E+07	119593.66	4.6E+07
8	104575.49	1.1E+07	102237.15	1.5E+07	100006.92	3.2E+07	119324.94	4.6E+07
9	104380.33	1.1E+07	102055.87	1.5E+07	99842.49*	3.2E+07	119026.83	4.6E+07
10	104161.13	1.1E+07	101853.19	1.5E+07	99659.92	3.1E+07	118700.05	4.6E+07

	5 - 1		5 - 2		5 - 3		5 - 4	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	117533.74	3.3E+06	114660.98	2.5E+07	111906.25*	3.6E+06	109265.82	2.3E+07
2	117466.30	3.3E+06	114599.15	2.5E+07	111848.33*	3.6E+06	109211.76	2.3E+07
3	117368.73*	3.3E+06	114506.48	2.5E+07	111762.23*	3.5E+06	109131.07	2.3E+07
4	117237.43	3.2E+06	114383.46	2.5E+07	111647.38*	3.5E+06	109024.52	2.3E+07
5	117074.91	3.2E+06	114230.54	2.5E+07	111505.48*	3.4E+06	108891.95	2.3E+07
6	116881.21	3.1E+06	114050.00	2.5E+07	(111334.67) [e]	3.4E+06	108735.15	2.3E+07
7	116657.53	3.0E+06	113840.75	2.5E+07	(111139.53)	3.3E+06	108554.30	2.3E+07
8	(116405.92)	2.9E+06	113604.89	2.5E+07	110918.47d	3.2E+06	108344.94	2.3E+07
9	(116126.20)	2.9E+06	113343.44	2.5E+07	110676.67*	3.1E+06	108121.36d	2.3E+07
10	(115819.34)	2.8E+06	113055.99	2.5E+07	(110409.61)	3.0E+06	107874.36	2.3E+07

	5 - 5		5 - 6		5 - 8		6 - 0	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	(106739.81)	2.0E+06	104327.34	2.7E+07	99842.49	3.4E+07	121810.78r	3.7E+07
2	(106689.93)	2.0E+06	104281.40	2.7E+07	99804.63	3.4E+07	121738.10r	3.7E+07
3	106614.99*	2.0E+06	104213.02	2.7E+07	99748.23	3.4E+07	121630.63	3.7E+07
4	106516.90*	2.0E+06	104122.00	2.7E+07	99673.40	3.4E+07	121486.61	3.7E+07
5	(106392.14)	2.0E+06	104009.08	2.7E+07	99579.78*	3.4E+07	121308.64	3.7E+07
6	(106249.10)	1.9E+06	103876.52	2.7E+07	99471.13	3.4E+07	121096.84	3.7E+07
7	(106081.11)	1.9E+06	103722.38	2.7E+07	99346.06	3.4E+07	120852.33	3.7E+07
8	105888.23*	1.9E+06	103546.86d	2.7E+07	99205.14	3.4E+07	120575.31	3.7E+07
9	105682.26*	1.8E+06	103357.47	2.7E+07	99044.57	3.4E+07	120268.85	3.7E+07
10	105454.06*	1.8E+06	103146.97	2.7E+07	98873.85	3.4E+07	119932.65	3.7E+07

	6 - 1		6 - 2		6 - 3		6 - 4	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	118819.27	1.2E+07	115946.64	1.2E+07	113191.52	1.5E+07	110551.00	6.5E+06
2	118750.98	1.2E+07	115882.66	1.2E+07	113131.45	1.5E+07	110496.35d	6.5E+06
3	118649.18	1.1E+07	115786.83	1.2E+07	113042.80	1.5E+07	110411.99	6.5E+06
4	118514.15	1.1E+07	115660.07	1.2E+07	112923.19	1.5E+07	110300.20	6.5E+06
5	118346.57	1.1E+07	115502.78	1.2E+07	(112775.43)	1.5E+07	110163.89	6.6E+06
6	118147.09	1.1E+07	115315.59	1.2E+07	112600.77	1.5E+07	110001.17	6.6E+06
7	117916.99	1.1E+07	115101.33*	1.2E+07	112397.60	1.5E+07	109812.26d	6.7E+06
8	117656.90	1.1E+07	114855.66	1.2E+07	(112167.42)	1.5E+07	109596.34d	6.7E+06
9	117368.73	1.1E+07	114585.57d	1.2E+07	(111917.53)	1.5E+07	(109364.51)	6.8E+06
10	117050.82	1.0E+07	114287.62	1.2E+07	111640.83d	1.4E+07	109105.90	6.8E+06

	6 - 5		6 - 6		6 - 7		6 - 8	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	108025.91	1.7E+07	105613.16d	5.7E+06	103313.54	1.8E+07	101128.20	8.8E+06
2	107973.36	1.7E+07	105565.12d	5.7E+06	103269.44	1.8E+07	101088.61	8.8E+06
3	107896.48	1.7E+07	105493.30d	5.7E+06	103203.78	1.8E+07	101029.81	8.7E+06
4	107793.11	1.7E+07	(105398.43)	5.7E+06	103117.50	1.8E+07	100949.06	8.7E+06
5	107665.63	1.7E+07	105281.14	5.7E+06	103008.22	1.8E+07	100853.11	8.6E+06
6	107516.71	1.7E+07	105141.91	5.7E+06	102882.56	1.8E+07	100736.40d	8.5E+06
7	107338.87	1.7E+07	104982.75	5.7E+06	102734.01	1.8E+07	100603.97	8.4E+06
8	107136.72	1.7E+07	104799.17d	5.7E+06	102569.80	1.8E+07	100452.32	8.3E+06
9	106926.38	1.7E+07	(104599.07)	5.7E+06	102385.70*	1.8E+07	100286.90	8.1E+06
10	106692.38	1.7E+07	104378.46d	5.7E+06	102187.47	1.8E+07	100107.64d	8.0E+06

[a] Une raie réabsorbée.
[b] E(+x) : 10^x .
[c] Une raie avec a plusieurs attributions, les autres attributions ne sont pas dans cette list de raies .
[d] Une raie avec une double attributions, l'autre attribution est dans cette list de raies.
[e] Le nombre d'onde de Ritz .

TableE.2. continue

	6 - 9		7 - 0		7 - 1		7 - 2	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	99057.47	1.8E+07	123035.90r	2.9E+07	120044.69	1.9E+07	117172.33d	2.7E+06
2	99021.66	1.8E+07	122961.76r	2.9E+07	119974.59	1.9E+07	117106.07	2.7E+06
3	98968.04	1.8E+07	122850.62r	2.9E+07	119869.71	1.9E+07	117007.33	2.7E+06
4	98897.61	1.8E+07	122703.15	2.9E+07	119730.68	1.9E+07	116876.38	2.7E+06
5	98810.14	1.8E+07	122520.12	2.9E+07	119558.28	1.8E+07	116713.41*	2.8E+06
6	98707.02	1.8E+07	122302.38	2.9E+07	119352.88	1.8E+07	116521.50*	2.8E+06
7	98586.89	1.9E+07	122051.05	2.8E+07	119115.91	1.8E+07	116297.27*	2.9E+06
8	98455.52	1.9E+07	121767.01	2.8E+07	118848.07	1.8E+07	116046.67	2.9E+06
9	98306.47*	1.9E+07	121448.38	2.8E+07	118549.74	1.8E+07	(115764.52)	3.0E+06
10	98145.26*	1.9E+07	121105.09	2.8E+07	(118224.39)	1.7E+07	115459.44	3.1E+06

	7 - 3		7 - 5		7 - 7		7 - 8	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	114416.74	2.1E+07	109250.80d	2.0E+07	104539.31	1.9E+07	102355.33d	2.8E+06
2	114354.82	2.1E+07	109196.91	2.0E+07	104493.46	1.9E+07	102311.86	2.8E+06
3	114262.26	2.1E+07	109116.06	2.0E+07	104425.26	1.9E+07	(102249.21)	2.8E+06
4	114139.58	2.1E+07	109009.77	2.0E+07	104334.29	1.9E+07	102165.80d	2.8E+06
5	113986.98	2.1E+07	108876.41	2.0E+07	104221.56	1.9E+07	(102063.96)	2.8E+06
6	113806.43	2.0E+07	108721.12	1.9E+07	104087.47	1.9E+07	101941.62	2.9E+06
7	113597.59	2.0E+07	(108538.72)	1.9E+07	103934.51d	1.9E+07	101802.76	2.9E+06
8	113358.67	2.0E+07	108328.00	1.9E+07	108761.13	1.9E+07	101645.47	1.9E+06
9	113099.77	2.0E+07	108105.35d	1.9E+07	103565.86	1.9E+07	101468.27d	2.9E+06
10	112811.49	2.0E+07	107859.03d	1.9E+07	103357.47d	1.9E+07	(101280.68)	3.0E+06

	7 - 9		7 - 10		8 - 0		8 - 1	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	100282.93	2.1E+07	98328.76d	3.4E+06	124201.89	2.1E+07	121210.40	2.3E+07
2	100245.19	2.1E+07	98295.27*	3.4E+06	124125.47	2.1E+07	121138.22	2.3E+07
3	100188.83	2.1E+07	98245.70d	3.5E+06	124011.32	2.1E+07	121030.47	2.3E+07
4	100114.27	2.1E+07	98177.41*	3.6E+06	123860.05	2.1E+07	120887.57	2.3E+07
5	100021.96	2.1E+07	(98096.88)	3.8E+06	123672.24	2.1E+07	120710.10	2.2E+07
6	99912.88	2.1E+07	98000.02d	3.9E+06	123448.36	2.1E+07	120499.04	2.2E+07
7	99787.12	2.1E+07	97889.10	4.1E+06	123191.06	2.1E+07	120255.24	2.2E+07
8	99644.53	2.1E+07	97763.10	4.3E+06	122898.26	2.1E+07	119979.24	2.2E+07
9	99485.43	2.0E+07	97622.88	4.6E+06	122574.60	2.1E+07	119674.43	2.2E+07
10	99318.67	2.0E+07	97477.00	4.9E+06	122217.09	2.1E+07	119337.04	2.1E+07

	8 - 3		8 - 4		8 - 5		8 - 6	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	115582.43	1.8E+07	112942.74	4.6E+06	110415.96d	9.7E+06	108004.07	1.1E+07
2	115518.51	1.8E+07	112882.81	4.5E+06	110360.90	9.7E+06	107952.35	1.1E+07
3	115423.07	1.8E+07	112794.23	4.5E+06	110277.37	9.7E+06	107874.36*	1.1E+07
4	115296.52	1.8E+07	112675.02d	4.4E+06	110166.73	9.7E+06	107772.23	1.1E+07
5	115137.55*	1.8E+07	112527.46	4.4E+06	110028.04	9.7E+06	107644.31	1.1E+07
6	114952.50	1.7E+07	112354.27d	4.3E+06	109866.41d	9.8E+06	107492.43	1.1E+07
7	114736.11	1.7E+07	112149.77	4.2E+06	(109678.08)	9.8E+06	107320.49	1.1E+07
8	114490.44	1.7E+07	111919.84d	4.1E+06	109461.90d	9.8E+06	107123.13	1.1E+07
9	(114223.74)	1.7E+07	111671.40d	4.0E+06	109232.73d	9.9E+06	(106905.28)	1.1E+07
10	113923.94	1.7E+07	111391.91d	3.8E+06	108970.85d	9.9E+06	(106664.87)	1.0E+07

	8 - 7		8 - 8		8 - 9		8 - 10	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	105704.96	4.1E+06	103519.72	1.7E+07	101450.16d	1.2E+06	99494.35	2.2E+07
2	105657.05	4.1E+06	103475.68	1.7E+07	101409.06d	1.2E+06	99459.19	2.2E+07
3	105584.55	4.1E+06	103410.85	1.7E+07	101349.74*	1.2E+06	99406.41	2.2E+07
4	105490.93	4.1E+06	103324.17	1.6E+07	101271.39d	1.2E+06	99336.22	2.2E+07
5	105373.84	4.1E+06	103215.67	1.6E+07	101173.73	1.1E+06	99249.43	2.2E+07
6	105235.45d	4.1E+06	103090.48	1.6E+07	101059.78	1.1E+06	99147.06	2.2E+07
7	105073.04d	4.1E+06	102942.20	1.6E+07	100926.62	1.1E+06	99027.65	2.2E+07
8	104892.03d	4.1E+06	102778.01	1.6E+07	(100776.79)	1.0E+06	98893.98	2.2E+07
9	104694.08d	4.1E+06	102594.39	1.6E+07	100612.75d	1.0E+06	98750.31	2.2E+07
10	104471.43d	4.1E+06	102394.18	1.6E+07	100431.53d	9.0E+00	98589.48	2.2E+07

	9 - 0		9 - 1		9 - 2		9 - 3	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	125307.72	1.6E+07	122316.66	2.4E+07	119444.03	1.9E+06	116688.81	1.1E+07
2	125229.80	1.6E+07	122242.57	2.4E+07	119374.36	1.7E+06	116623.01	1.1E+07
3	125112.52	1.6E+07	122131.74	2.4E+07	119270.57*	1.7E+06	116524.37	1.1E+07
4	124957.39	1.6E+07	121984.90	2.3E+07	119130.87	1.7E+06	116393.77	1.1E+07
5	124764.62	1.6E+07	121802.56	2.3E+07	118958.85	1.6E+06	116232.04	1.1E+07
6	124535.31	1.6E+07	121585.50	2.3E+07	118755.47	1.6E+06	116039.07	1.1E+07
7	(124269.98)	1.6E+07	121334.59	2.3E+07	118517.20	1.5E+06	115816.80	1.1E+07
8	(123970.60)	1.6E+07	121051.57	2.3E+07	118251.78	1.4E+06	115561.15	1.1E+07
9	(123637.51)	1.6E+07	120735.22	2.3E+07	117952.90	1.4E+06	115286.15	1.1E+07
10	123272.19	1.6E+07	120391.07	2.2E+07	(117627.97)	1.3E+06	114981.20	1.1E+07

	9 - 4		9 - 5		9 - 6		9 - 8	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	114049.18	1.1E+07	111524.33d	1.5E+06	109110.58	1.6E+07	104627.44	1.4E+07
2	113986.98*	1.1E+07	111465.10*	1.5E+06	109056.51	1.6E+07	104579.75	1.4E+07
3	113894.48	1.1E+07	111378.51	1.5E+06	108975.84	1.6E+07	104511.66*	1.4E+07
4	113771.56	1.1E+07	111265.41*	1.5E+06	108869.19	1.6E+07	104420.94	1.4E+07
5	113619.99	1.1E+07	111122.67	1.5E+06	108735.15*	1.5E+07	104307.55	1.4E+07
6	113439.24	1.1E+07	110954.84d	1.6E+06	108578.88	1.5E+07	(104175.29)	1.4E+07
7	113229.19	1.1E+07	110759.06d	1.6E+06	108399.33	1.5E+07	104021.39	1.4E+07
8	(112995.84)	1.1E+07	110532.11*	1.7E+06	108193.10*	1.5E+07	103848.36	1.4E+07
9	(112730.70)	1.0E+07	110294.84+NI	1.7E+06	107966.27	1.5E+07	103657.18	1.4E+07
10	112445.68*	1.0E+07	110024.27d	1.8E+06	107718.23	1.5E+07	(103447.75)	1.4E+07

TableE.2. continue

	9 - 9		9 - 10		9 - 11		10 - 0	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	102555.44d	4.9E+06	100601.21	9.9E+06	98766.42	1.3E+07	126355.05	1.1E+07
2	102513.98d	4.9E+06	100562.95	9.8E+06	98733.06	1.3E+07	126274.66	1.1E+07
3	102449.68d	4.9E+06	100507.65	9.8E+06	98683.54	1.3E+07	126154.50	1.1E+07
4	(102368.39)	4.9E+06	100433.64	9.7E+06	98618.27	1.3E+07	125995.35	1.1E+07
5	102265.68	4.9E+06	100340.46	9.6E+06	98538.22*	1.3E+07	125797.67	1.1E+07
6	102143.48	4.9E+06	100232.42	9.4E+06	98442.42*	1.3E+07	125562.46	1.1E+07
7	102004.93d	4.8E+06	100107.64d	9.3E+06	98332.06	1.3E+07	(125921.02)	1.1E+07
8	101849.47	5.0E+06	(99967.578)	9.1E+06	98207.38	1.3E+07	(124983.86)	1.1E+07
9	101647.90	5.0E+06	99813.82*	8.9E+06	98072.32	1.4E+07	(124641.18)	1.1E+07
10	101486.63	5.0E+06	99644.53*	8.6E+06	97923.52	1.4E+07		

	10 - 1		10 - 2		10 - 3		10 - 4	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	123363.73	2.2E+07	120491.39	5.3E+06	117735.79	4.5E+06	115096.44	1.4E+07
2	123287.54	2.2E+07	120419.43	5.3E+06	117668.03	4.5E+06	115032.00	1.4E+07
3	123173.95	2.2E+07	120311.94	5.3E+06	117566.34	4.5E+06	114936.02*	1.4E+07
4	123023.00	2.2E+07	120168.35	5.2E+06	117432.02	4.6E+06	114810.17	1.4E+07
5	122835.77	2.2E+07	119992.79	5.1E+06	117264.90	4.6E+06	114652.27	1.4E+07
6	122612.96	2.2E+07	119781.65	5.0E+06	117066.11	4.7E+06	114466.48	1.4E+07
7	122355.62	2.2E+07	(119538.47)	4.8E+06	(116836.89)	4.7E+06	114251.50	1.4E+07
8	122064.84	2.2E+07	119263.51	4.7E+06	(116576.01)	4.8E+06	114005.48	1.4E+07
9	(121740.54)	2.2E+07	(118957.31)	4.6E+06	116290.41	4.9E+06	113736.84	1.4E+07

	10 - 7		10 - 8		10 - 6		10 - 9	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	107859.03d	6.4E+06	105673.11d	3.8E+06	110157.37	1.1E+07	103602.38	1.4E+07
2	107806.27d	6.4E+06	105625.21	3.8E+06	110101.71	1.1E+07	103558.77	1.4E+07
3	107729.80d	6.4E+06	105554.76d	3.8E+06	110018.24	1.1E+07	103493.51	1.4E+07
4	107628.03d	6.3E+06	105459.29	3.8E+06	109908.13	1.1E+07	103406.88	1.3E+07
5	107499.97	6.3E+06	(105337.81)	3.8E+06	109768.99	1.1E+07	103300.69*	1.3E+07
6	107349.28d	6.2E+06	(105202.86)	3.8E+06	109605.91d	1.1E+07	103172.50	1.3E+07
7	107175.00d	6.1E+06	(105042.58)	3.8E+06	109420.161	1.1E+07	(103026.56)	1.3E+07
8	106976.38*	6.0E+06	(104862.32)	3.8E+06	109207.61	1.1E+07	(102862.37)	1.3E+07
9	106757.17*	5.9E+06	104660.38	3.8E+06	108970.85	1.1E+07	102679.21	1.3E+07

	10 - 11		10 - 12		11 - 0		11 - 1	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	99813.82	1.6E+07	98100.63d	3.6E+06	127342.93	8.0E+06	124351.31	2.0E+07
2	99778.57	1.6E+07	98072.32*	3.6E+06	127261.06	8.0E+06	124273.27	2.0E+07
3	99725.97	1.6E+07	98023.59d	3.7E+06	127137.22	8.0E+06	124156.45	2.0E+07
4	99655.75	1.6E+07	97964.68d	3.8E+06	126973.92	8.1E+06	124001.65	2.0E+07
5	99571.35*	1.5E+07	97889.10*	4.0E+06	126771.54	8.1E+06	123809.59	2.0E+07
6	99468.53	1.5E+07	97801.04d	4.2E+06	126529.76	8.1E+06	123580.51	2.0E+07
7	(99351.62)	1.5E+07	(97699.74)	4.4E+06	126252.09	8.1E+06	123316.03	1.9E+07
8	99219.93	1.5E+07	97585.43	4.6E+06	(125936.59)	8.1E+06	123016.77	1.9E+07
9	99075.35	1.5E+07	97462.46d	4.9E+06				

	11 - 2		11 - 3		11 - 4		11 - 5	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	121478.55	8.7E+06	118723.45	9.0E+00	116083.36	1.3E+07	113557.61	3.5E+06
2	121404.96	8.7E+06	118652.89*	1.0E+06	116017.64	1.3E+07	113496.27	3.5E+06
3	121294.37	8.7E+06	118549.74	1.0E+06	115919.23	1.3E+07	(113403.01)	3.4E+06
4	121147.91	8.6E+06	118410.39	1.0E+06	115788.30	1.3E+07	113280.78	3.4E+06
5	120966.20	8.5E+06	118238.82	1.0E+06	115626.56	1.3E+07	113128.62	3.3E+06
6	120749.35	8.3E+06	118034.22	1.0E+06	115433.97	1.3E+07	112948.86d	3.2E+06
7	120499.04*	8.2E+06	(117797.92)	1.1E+06	115211.70	1.3E+07	112736.71d	3.2E+06
8	120217.13	8.0E+06	117528.60	1.2E+06	(114957.76)	1.3E+07	112498.63	3.0E+06
9		7.8E+06		1.2E+06		1.3E+07		3.0E+06
10	119558.28*	7.6E+06	(116909.96)	1.3E+06	114376.26	1.3E+07	111957.30d	2.8E+06

	11 - 6		11 - 7		11 - 9		11 - 10	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	111145.08	4.5E+06	108846.29	1.1E+07	104589.55	1.1E+07	(102635.68)	5.0E+06
2	111087.96d	4.5E+06	108791.55	1.1E+07	104543.31	1.1E+07	102594.39*	5.0E+06
3	111002.21d	4.5E+06	108710.84	1.1E+07	104476.02	1.1E+07	(102531.97)	5.0E+06
4	110885.52d	4.5E+06	108605.71	1.1E+07	104384.13	1.1E+07	102449.68d	5.0E+06
5	110744.85	4.6E+06	108473.13	1.1E+07	104275.00d	1.1E+07	(102348.64)	5.0E+06
6	110576.31d	4.6E+06	108316.97*	1.1E+07	(104140.87)	1.1E+07	102229.03d	5.0E+06
7	110381.27*	4.7E+06	(108135.31)	1.1E+07	(103987.59)	1.1E+07	102090.02	5.0E+06
8	110159.46	4.7E+06	107930.64d	1.1E+07	(103815.10)	1.1E+07	101934.71d	5.0E+06
9		4.8E+06		1.1E+07		1.1E+07		5.0E+06
10	109650.79d	4.9E+06	107456.08d	1.1E+07	103414.50*	1.1E+07	101572.43*	5.0E+06

	11 - 11		11 - 12		12 - 1		12 - 2	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	100800.71d	4.3E+06	99088.82	1.4E+07	125278.68	1.7E+07	122406.44	1.1E+07
2	100763.39d	4.2E+06	99056.72	1.4E+07	125198.75	1.7E+07	122330.50	1.1E+07
3	(100707.97)	4.2E+06	99006.57	1.4E+07	125079.14	1.7E+07	122217.09	1.1E+07
4	100632.76d	4.1E+06	98942.70	1.4E+07	124920.13	1.7E+07	122066.24	1.1E+07
5	(100544.06)	4.0E+06	(98863.27)	1.4E+07	124722.74	1.7E+07	121879.77	1.1E+07
6	100437.32d	3.9E+06	98769.17	1.4E+07	124488.09	1.7E+07	121657.11	1.1E+07
7	100312.55	3.8E+06	98659.09	1.4E+07				
8	100173.86d	3.7E+06	98538.22	1.4E+07				
9		3.6E+06		1.4E+07				
10	99855.14d	3.4E+06	98261.60	1.4E+07				

TableE.2. continue

	12 - 4		12 - 5		12 - 7		12 - 8	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	117011.10	9.5E+06	114484.92	7.2E+06	109773.77d	1.1E+07	107587.06*	2.9E+06
2	116943.09	9.5E+06	114421.23	7.2E+06	109717.67	1.1E+07	107536.29d	2.9E+06
3	116841.62	9.5E+06	114326.09	7.2E+06	(109634.08)	1.1E+07	107459.40	2.8E+06
4	116707.03	9.5E+06	114198.92d	7.1E+06	109523.30d	1.1E+07	107355.04d	2.8E+06
5	116540.32	9.0E+06	114041.89d	6.5E+06	(109385.79)	1.1E+07	107227.73d	2.7E+06
6	116342.65	9.5E+06	113855.41	6.9E+06	(109222.92)	1.1E+07	107079.16d	2.7E+06

	12 - 9		12 - 10		12 - 12		12 - 13	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	105518.03d	4.1E+06	(103563.41)	1.1E+07	100016.83	9.9E+06	98433.57d	7.6E+06
2	105469.56d	4.1E+06	103519.72*	1.1E+07	99981.91d	9.8E+06	98401.36d	7.6E+06
3	(105389.34)	4.1E+06	(103454.71)	1.0E+07	99930.71d	9.7E+06	98359.08d	7.7E+06
4	105304.69d	4.1E+06	103369.23d	1.0E+07	99859.71d	9.6E+06	98298.58*	7.8E+06
5	105187.78d	4.4E+06	(103261.46)	1.1E+07	(99776.09)	9.4E+06	98223.49d	8.0E+06
6	105046.91d	4.1E+06	103133.29	1.0E+07	99677.13	9.4E+06	98139.65	8.0E+06

	13 - 1		13 - 2		13 - 4		13 - 5	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	126145.53	1.4E+07	123273.37	1.2E+07	117878.18	5.7E+06	115351.92	9.3E+06
2	126063.65	1.4E+07	123195.43	1.2E+07	117808.19	5.8E+06	115286.15	9.2E+06
3	125940.79	1.4E+07	123078.53	1.2E+07	117703.81*	5.8E+06	115187.76	9.2E+06
4	125778.14	1.4E+07	122924.36	1.2E+07	117565.58	5.8E+06	115057.10	9.2E+06
5	125574.99	1.4E+07	122731.93	1.2E+07	(117392.66)	5.8E+06	114894.93	9.0E+06

	13 - 7		13 - 8		13 - 10		13 - 11	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	110641.74d	6.9E+06	108454.58d	6.8E+06	104430.50	9.3E+06	102594.39*	4.0E+06
2	110583.11d	6.9E+06	108401.18	6.8E+06	104384.13*	9.3E+06	102554.11d	4.0E+06
3	110496.35d	7.0E+06	108319.56d	6.8E+06	104316.92	9.3E+06	102493.68d	4.0E+06
4	110381.27d	7.0E+06	108213.24	6.7E+06	104226.14	9.2E+06	(102410.99)	4.0E+06
5	110239.11	7.0E+06	108081.35d	6.6E+06	(104114.53)	9.2E+06	102309.52d	4.0E+06

	13 - 12		13 - 13		13 - 14	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	100882.33d	2.0E+06	99300.00	1.1E+07	97848.04*	2.4E+06
2	100846.75d	2.0E+06	99267.91	1.1E+07	(97822.49)	2.4E+06
3	100792.85d	2.0E+06	99219.93*	1.1E+07	97781.82d	2.5E+06
4	100717.54d	1.9E+06	99155.54	1.1E+07	97727.27d	2.6E+06
5	100629.68d	1.9E+06	(99077.80)	1.1E+07	97660.91d	2.6E+06

	14 - 1		14 - 2		14 - 3		14 - 4	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	126950.97	1.1E+07	124078.81	1.2E+07	121322.90	1.9E+06	118683.50*	2.8E+06
2	126866.52	1.1E+07	123998.40	1.2E+07	121247.41	1.9E+06	118611.44d	2.8E+06
3	126740.59	1.1E+07	123878.83	1.2E+07	(121133.47)	1.9E+06	118504.53	2.9E+06
4	126573.47	1.1E+07	123720.10	1.2E+07	(120982.98)	1.9E+06	118361.01	2.9E+06
5	126365.87	1.1E+07	123522.81	1.2E+07	(120795.58)	1.7E+06	118182.22	2.9E+06
6	126118.93	1.1E+07	123287.54	1.2E+07	120573.26	1.7E+06	(117972.65)	3.0E+06
7	(125833.24)	1.1E+07	123016.77*	1.2E+07	120314.34	1.6E+06	(117728.11)	3.1E+06
8	(125509.58)	1.1E+07	122707.97	1.2E+07	(120020.75)	1.5E+06	(117449.77)	3.1E+06
9	(125150.69)	1.1E+07	122367.45	1.2E+07	(119699.99)	1.4E+06	117148.32	3.2E+06

	14 - 5		14 - 6		14 - 7		14 - 8	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	116156.44	9.3E+06	113745.57*	1.7E+06	111445.81	3.1E+06	109260.45	8.4E+06
2	116089.29d	9.3E+06	113680.44d	1.7E+06	111385.14d	3.1E+06	109205.18d	8.4E+06
3	115987.51	9.2E+06	(113585.02)	1.6E+06	111296.96d	3.1E+06	(109120.52)	8.3E+06
4	115853.31	9.2E+06	(113458.50)	1.6E+06	111177.55	3.1E+06	109009.77*	8.3E+06
5	115684.91	9.1E+06	(113301.14)	1.5E+06	111030.84	3.2E+06	(108869.19)	8.2E+06
6	115487.08	9.0E+06	113113.36d	1.5E+06	110855.33	3.2E+06	108709.97d	8.1E+06
7	115254.71	9.0E+06	112898.94*	1.5E+06	110653.42d	3.3E+06	108520.30	8.0E+06
8	114990.84d	8.9E+06	(112652.44)	1.3E+06	(110422.58)	3.3E+06	108306.96d	7.9E+06
9	(114707.60)	8.8E+06	(112381.54)	1.2E+06	(110169.08)	3.4E+06	108072.31d	7.8E+06

	14 - 10		14 - 11		14 - 13		14 - 14	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	105235.45	4.7E+06	(103401.07)	7.7E+06	100106.72d	6.2E+06	98653.74d	7.8E+06
2	105187.78*	4.7E+06	103357.47*	7.7E+06	100070.39	6.2E+06	98624.20	7.8E+06
3	(105116.50)	4.7E+06	103290.83d	7.6E+06	(100019.43)	6.1E+06	(98581.72)	7.8E+06
4	(105022.43)	4.7E+06	103206.33	7.6E+06	99951.02d	6.0E+06	98524.84	7.9E+06
5	104905.82d	4.7E+06	103099.48	7.5E+06	99868.60d	5.9E+06	98451.95d	7.9E+06
6	104765.73*	4.7E+06	(102974.34)	7.5E+06	99769.21	5.7E+06	(98369.15)	7.9E+06
7	104606.55d	4.7E+06	(102829.23)	7.4E+06	(99656.35)	5.6E+06	98273.19*	7.9E+06
8	104425.26*	4.7E+06	(102665.56)	7.4E+06	99527.85d	5.4E+06	98164.87d	7.9E+06
9	104226.14*	4.7E+06	102483.85*	7.2E+06	99390.44	5.2E+06	(98049.19)	7.9E+06

TableE.2. continue

	15 - 2		**15 - 3**		**15 - 4**	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	124820.99	1.2E+07	122066.24*	3.3E+06	119423.82*	1.0E+06
2	124738.69	1.2E+07	121986.70	3.3E+06	119352.88*	1.0E+06
3	124615.79	1.2E+07	(121870.43)	3.2E+06	(119240.41)	1.0E+06
4	124452.56	1.2E+07	(121715.41)	3.1E+06	119093.29	1.1E+06
5	(124250.05)	1.2E+07	(121522.86)	3.1E+06	118910.67*	1.1E+06
6	(124008.10)	1.1E+07	121294.37*	3.0E+06	118693.36	1.1E+06
7	(123729.00)	1.1E+07	(121027.42)	2.8E+06	(118441.03)	1.2E+06
8	(123414.94)	1.1E+07	120726.03	2.7E+06	118155.68	1.3E+06
9	(123061.99)	1.1E+07	120394.33	2.6E+06	(117841.51)	1.3E+06

	15 - 5		**15 - 6**		**15 - 8**		**15 - 9**	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	116899.56	7.9E+06	114486.58*	3.6E+06	110003.69	7.4E+06	107932.16	2.9E+06
2	116830.73*	7.9E+06	114421.23*	3.6E+06	109945.17d	7.4E+06	107880.02d	2.9E+06
3	116723.62d	7.9E+06	114322.98	3.5E+06	(109857.48)	7.4E+06	107795.79d	2.8E+06
4	116584.29	7.9E+06	114191.01d	3.5E+06	109743.21d	7.3E+06	107689.67d	2.8E+06
5	116413.13	7.9E+06	114031.05d	3.4E+06	109599.03d	7.3E+06	107556.01d	2.7E+06
6	116207.02	7.9E+06	113832.71*	3.3E+06	(109429.43)	7.3E+06	(107399.37)	2.7E+06
7	115969.03	7.8E+06	113609.98*	3.2E+06	109232.73*	7.2E+06	(107217.09)	2.6E+06
8	115697.34	7.7E+06	(113358.32)	3.0E+06	(109012.94)	7.2E+06	107011.76	2.5E+06
9	115402.08	7.7E+06	(113076.07)	2.9E+06	108765.76*	7.1E+06	106783.83d	2.4E+06

	15 - 11		**15 - 12**		**15 - 14**		**16 - 2**	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	(104143.28)	7.4E+06	102430.50	2.5E+06	99397.09	7.8E+06	125498.75	1.1E+07
2	(104098.29)	7.4E+06	(102390.96)	2.5E+06	99366.37d	7.7E+06	125414.31	1.1E+07
3	104030.80*	7.5E+06	(102328.73)	2.5E+06	99318.67*	7.7E+06	125287.94	1.1E+07
4	103939.18*	7.5E+06	(102247.66)	2.5E+06	99255.08d	7.6E+06	125120.02	1.1E+07
5	103827.29d	7.4E+06	102148.06d	2.5E+06	99180.49	7.5E+06	124911.97	1.0E+07
6	103693.73d	7.4E+06	(102027.62)	2.4E+06	99089.77d	7.4E+06	(124664.68)	1.0E+07
7	103543.66d	7.3E+06	101891.10d	2.4E+06	98986.20d	7.2E+06	(124377.26)	1.0E+07
8	103371.57d	7.2E+06	(101737.365)	2.4E+06	98871.44	7.0E+06	(124052.56)	1.0E+07
9	(103179.92)	7.1E+06	101565.24d	2.4E+06	98744.07d	6.9E+06		

	16 - 3		**16 - 5**		**16 - 6**		**16 - 8**	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	122743.66	4.3E+06	117577.54d	6.1E+06	115165.01	4.9E+06	(110680.41)	5.2E+06
2	122663.36	4.3E+06	117504.88	6.1E+06	115096.44d	4.9E+06	110620.29	5.2E+06
3	122542.71	4.2E+06	117396.91	6.1E+06	114994.75	4.9E+06	(110530.07)	5.2E+06
4	122383.37	4.2E+06	117253.25	6.1E+06	114858.34	4.8E+06	110409.61*	5.2E+06
5	(122184.78)	4.1E+06	117074.91	6.1E+06	114690.28d	4.7E+06	110261.01d	5.2E+06
6	121947.37	4.0E+06	116863.77	6.1E+06	114490.44*	4.6E+06	110085.76	5.2E+06
7	(121675.68)	3.8E+06	116617.25d	6.1E+06	114260.08d	4.5E+06	109880.87d	5.2E+06
8	(121364.25)	3.7E+06	116334.29	6.1E+06	113995.93d	4.3E+06	109650.79d	5.2E+06

	16 - 9		**16 - 11**		**16 - 12**		**16 - 14**	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	108610.49d	4.8E+06	104821.55	5.1E+06	103108.11*	5.0E+06	(100075.10)	4.2E+06
2	108554.30d	4.7E+06	104773.33d	5.1E+06	(103065.97)	4.9E+06	100042.77	4.2E+06
3	108469.94d	4.7E+06	104702.23	5.1E+06	(103001.32)	4.9E+06	99990.87	4.2E+06
4	(108357.90)	4.6E+06	104606.55	5.1E+06	102915.77d	4.9E+06	99923.70d	4.1E+06
5	108219.97d	4.5E+06	104489.39d	5.0E+06	102809.91d	4.8E+06	99842.49*	4.0E+06
6	(108055.95)	4.4E+06	(104351.46)	5.0E+06	102682.86d	4.8E+06	(99746.27)	3.8E+06
7	(107865.35)	4.3E+06	(104190.41)	5.0E+06	(102538.53)	4.7E+06	99635.71	3.7E+06
8	107650.07d	4.2E+06	104009.08*	5.0E+06	(102374.99)	4.6E+06	99510.61d	3.7E+06

	16 - 15		**17 - 2**		**17 - 3**		**17 - 5**	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	98766.42*	6.2E+06	126109.61	9.4E+06	123354.28	4.9E+06	118190.05	4.3E+06
2	(98738.57)	6.2E+06	126022.56	9.3E+06	123272.19*	4.9E+06	118113.65	4.3E+06
3	98697.97	6.1E+06	125892.90	9.3E+06	123147.57	4.8E+06	118001.62	4.3E+06
4	98640.22	6.1E+06	125720.87	9.2E+06	122982.71	4.7E+06	117853.80	4.3E+06
5	98570.08d	6.1E+06		9.2E+06		4.7E+06		4.4E+06
6	(98491.29)	6.0E+06		9.1E+06		4.6E+06		4.4E+06
7	98398.04*	6.0E+06	124957.39*	9.0E+06	122256.74	4.4E+06	117198.15	4.4E+06
8	98295.27	5.9E+06	(124623.18)	8.8E+06	(121934.87)	4.2E+06	(116904.96)	4.4E+06

	17 - 6		**17 - 8**		**17 - 9**		**17 - 11**	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	115776.20	5.4E+06	111291.77	3.0E+06	(109220.61)	5.4E+06	105430.70d	2.5E+06
2	(115705.27)	5.4E+06	111228.33d	3.0E+06	109162.44*	5.3E+06	105381.73d	2.5E+06
3	115599.29	5.3E+06	111133.83d	3.0E+06	109074.91	5.3E+06	105306.78d	2.5E+06
4	115459.44	5.3E+06	111009.50*	3.1E+06	108956.85*	5.2E+06	105209.19d	2.5E+06
5		5.2E+06		3.2E+06		5.2E+06		2.5E+06
6		5.1E+06		3.2E+06		5.1E+06		2.5E+06
7	114837.60*	4.9E+06	110459.94d	3.2E+06	108445.26d	5.0E+06	104770.49d	2.5E+06
8	114567.26d	4.8E+06	(110221.18)	3.2E+06	108221.98	4.8E+06	104579.75*	2.5E+06

TableE.2. fin

	17 - 12		17 - 14		17 - 15		17 - 16	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	103718.96d	5.6E+06	100687.02d	1.2E+06	99377.57*	5.2E+06	(98221.38)	3.5E+06
2	103675.63	5.5E+06	100650.87*	1.2E+06	99347.33	5.3E+06	98197.58*	3.5E+06
3	(103605.96)	5.5E+06	100597.59*	1.1E+06	99300.00*	5.2E+06	98160.02	3.6E+06
4	103516.31	5.4E+06	(100525.29)	1.1E+06	99241.52	5.1E+06	(98110.68)	3.6E+06
5		5.4E+06		1.1E+06		5.1E+06		3.7E+06
6		5.4E+06		1.0E+06		5.0E+06		3.7E+06
7	103117.50*	5.2E+06	100213.99d	1.0E+06	98977.87d	4.8E+06	97900.67d	3.7E+06
8	102946.95*	5.1E+06	100079.67d	9.0E+00	(98865.499)	4.6E+06	97811.22d	3.7E+06

	18 - 2		18 - 3		18 - 5		18 - 6	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	(126652.10)	7.9E+06	123897.16	5.1E+06	(118730.87)	2.7E+06	116319.63	5.2E+06
2	126562.43	7.9E+06	123809.59*	5.0E+06	118652.89	2.8E+06	116245.30	5.1E+06
3	126428.92	7.9E+06	123684.54	5.0E+06	(118538.43)	2.8E+06	(116135.91)	5.1E+06
4	126252.09*	7.8E+06	123514.95	4.9E+06	(118384.83)	2.8E+06	(115990.45)	5.0E+06
5	(126031.82)	7.7E+06	(123304.63)	4.8E+06	(118194.87)	2.8E+06	115810.20	5.0E+06
6		7.7E+06		4.7E+06		2.9E+06		4.9E+06
7	(125467.19)	7.6E+06	(122765.61)	4.5E+06	117707.34	2.9E+06	115348.34	4.8E+06
8	(125121.65)	7.4E+06	122433.89*	4.3E+06	117402.98	2.9E+06	115065.00	4.6E+06

	18 - 8		18 - 9		18 - 10		18 - 12	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	111833.88*	1.4E+06	109763.03d	4.9E+06	107808.63d	1.4E+06	104262.43*	4.7E+06
2	111769.15	1.5E+06	109700.20d	4.9E+06	107750.90	1.4E+06	104213.02*	4.7E+06
3	111671.40*	1.5E+06	109610.80	4.9E+06	107665.63*	1.3E+06	(104142.66)	4.6E+06
4	(111541.90)	1.5E+06	(109489.62)	4.8E+06	107556.01d	1.3E+06	104047.56d	4.6E+06
5	(111381.51)	1.5E+06	(109339.38)	4.8E+06	107414.15d	1.2E+06	(103929.06)	4.5E+06
6		1.6E+06		4.7E+06		1.2E+06		4.5E+06
7	110971.76d	1.6E+06	108955.99d	4.6E+06	107058.33d	1.1E+06	103628.39d	4.4E+06
8	110719.86d	1.7E+06	108721.12d	4.5E+06	106837.02d	1.0E+06	103443.35	4.3E+06

	18 - 13		18 - 15		18 - 16		19 - 3	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	102679.21*	2.4E+06	99921.81d	3.1E+06	98763.96	4.2E+06		4.9E+06
2	(102634.13)	2.4E+06	99885.88*	3.1E+06	(98735.47)	4.2E+06	124278.98	4.8E+06
3	102569.80*	2.4E+06	(99837.65)	3.1E+06	(98695.70)	4.2E+06	124148.64	4.7E+06
4	102483.85d	2.3E+06	99771.94d	3.0E+06	98640.22	4.1E+06	123973.58	4.6E+06
5	102377.20	2.3E+06	99691.25	2.9E+06	(98575.47)	4.1E+06	123757.09	4.5E+06
6		2.3E+06		2.8E+06		4.0E+06	123499.76	4.4E+06
7	102105.66	2.2E+06	99488.03d	2.7E+06	98410.05d	3.9E+06		
8	101941.62*	2.1E+06	99364.47d	2.5E+06	98309.08d	3.8E+06		

	19 - 5		19 - 6		19 - 7		19 - 9	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1		1.7E+06		4.5E+06		1.4E+06		4.0E+06
2	(119120.98)	1.7E+06	116713.41	4.4E+06	114416.74*	1.3E+06	110171.14d	3.9E+06
3	(119002.70)	1.7E+06	(116600.18)	4.4E+06	114311.01*	1.3E+06	110074.76d	3.9E+06
4	118842.81d	1.7E+06	116448.91*	4.4E+06	114166.79*	1.2E+06	(109948.23)	3.9E+06
5	118646.86	1.7E+06	116263.33	4.3E+06	(113991.17)	1.1E+06	109790.80	3.9E+06
6	118415.88d	1.8E+06	(116040.95)	4.2E+06	(113781.66)	1.1E+06	109605.91d	3.8E+06

	19 - 10		19 - 12		19 - 13		19 - 15	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1		2.1E+06		3.3E+06		3.1E+06		1.4E+06
2	108219.97d	2.1E+06	104681.55	3.2E+06	(103102.39)	3.1E+06	100354.75d	1.3E+06
3	108133.00d	2.0E+06	104606.55*	3.2E+06	(103034.59)	3.1E+06	100303.07d	1.3E+06
4	108013.01d	1.9E+06	104507.60	3.2E+06	102942.20*	3.0E+06	100230.86d	1.2E+06
5	107867.22*	1.9E+06	104380.33*	3.1E+06	102831.33d	2.9E+06	100143.69d	1.2E+06
6	107694.76d	1.8E+06	104234.55d	3.1E+06	102698.51d	2.8E+06	100042.77*	1.1E+06

	19 - 16		19 - 17	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1		3.5E+06		2.4E+06
2	99205.14d	3.5E+06	(98218.15)	2.4E+06
3	(99159.97)	3.4E+06	(98183.98)	2.4E+06
4	99100.73	3.3E+06	98136.64	2.4E+06
5	99027.65d	3.2E+06	98079.95d	2.3E+06
6	98942.70*	3.1E+06	98016.11d	2.3E+06

E.3 Le système $D'^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$.

Table E.3 – *Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système $D'^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ ($v' - v''$).*

	0 - 0		0 - 1		0 - 2		0 - 3	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	(118129.40) [a]	5.9E+06 [b]	115137.55	2.4E+07	112265.18	4.3E+07	109509.55	4.2E+07
2	118068.65	5.9E+06	115081.49	2.4E+07	112213.26	4.3E+07	109461.90	4.2E+07
3	117978.72	5.9E+06	114997.89	2.4E+07	112135.77	4.3E+07	109390.42	4.2E+07
4	117859.26	5.9E+06	114886.78	2.4E+07	112033.12	4.3E+07	109295.76	4.2E+07
5	117711.33	5.8E+06	114749.18	2.4E+07	111906.25	4.2E+07	109178.88	4.2E+07
6	117534.57	5.8E+06	114585.57	2.4E+07	111754.17	4.2E+07	109039.43	4.2E+07
7	117333.28	5.8E+06	114397.90	2.4E+07	111579.38	4.2E+07	108878.59	4.1E+07
8	117101.48d [c]	5.8E+06	114184.19	2.4E+07	111383.85	4.2E+07	108695.50	4.1E+07
9	116846.13	5.7E+06	113944.84	2.4E+07	111162.11	4.2E+07	108496.44	4.1E+07
10	116569.63* [d]	5.7E+06	113689.98	2.4E+07	110925.84	4.2E+07	108277.89	4.1E+07

	0 - 4		0 - 5		0 - 6	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	106869.87	2.5E+07	104344.06	9.6E+06	101932.45	2.3E+06
2	106826.02	2.5E+07	104304.10	9.6E+06	101896.34d	2.3E+06
3	106760.71	2.5E+07	104245.10	9.6E+06	(101841.97)	2.3E+06
4	106674.36	2.5E+07	104165.83	9.6E+06	(101771.45)	2.3E+06
5	106566.69	2.5E+07	(104069.13)	9.5E+06	101683.18*	2.3E+06
6	106439.41	2.5E+07	103952.06	9.5E+06	(101850.05)	2.3E+06
7	(106292.21)	2.5E+07	(103820.18)	9.5E+06	101461.09*	2.3E+06
8	106124.76	2.5E+07	103667.44*	9.5E+06	101327.97d	2.3E+06
9	105941.39	2.5E+07	103502.16d	9.5E+06	101176.58d	2.2E+06
10	105742.93	2.5E+07	103324.17*	9.5E+06	101018.50*	2.2E+06

	1 - 0		1 - 1		1 - 2		1 - 4	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	119716.09	1.5E+07	116723.62	3.0E+07	113851.50	1.3E+07	108455.95	2.1E+07
2	119653.11	1.5E+07	116666.01	3.0E+07	113797.92	1.3E+07	108409.93	2.1E+07
3	119561.65	1.5E+07	116578.61	3.0E+07	113716.68	1.3E+07	108341.34	2.1E+07
4	119436.50	1.5E+07	116463.6	3.0E+07	113609.98	1.3E+07	108250.71	2.1E+07
5	119282.38	1.5E+07	116320.76	3.0E+07	113476.84	1.3E+07	108137.40	2.1E+07
6	119100.18	1.5E+07	(116150.64)	3.0E+07	113318.79	1.4E+07	108004.07	2.0E+07
7	118889.67	1.5E+07	115953.77	3.0E+07	113136.62	1.4E+07	107848.20	2.0E+07
8	118652.89	1.5E+07	115735.41	3.0E+07	112933.75	1.4E+07	107675.66	2.0E+07

	1 - 5		1 - 6		1 - 7		1 - 8	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	105930.19	3.5E+07	103518.11	2.4E+07	101218.38	8.8E+06	99033.94*	1.7E+06
2	105888.23	3.5E+07	103479.63	2.4E+07	101184.55	8.8E+06	99003.43d	1.7E+06
3	105825.69	3.5E+07	103423.23	2.4E+07	101135.21d	8.8E+06	98959.23d	1.7E+06
4	105742.93	3.5E+07	103348.49	2.4E+07	101066.68d	8.7E+06	(98899.85)	1.7E+06
5	105641.07	3.5E+07	103255.5	2.4E+07	100984.54d	8.7E+06	(98826.57)	1.7E+06
6	105518.03	3.5E+07	103145.56	2.4E+07	100885.97	8.7E+06	(98740.25)	1.6E+06
7	105378.42	3.5E+07	103016.64*	2.4E+07	100771.64d	8.6E+06	98640.22*	1.6E+06
8	105216.7d	3.5E+07	102878.12	2.4E+07	(100648.49)	8.6E+06	98533.30d	1.6E+06

	2 - 0		2 - 1		2 - 3		2 - 4	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	121236.60	2.2E+07	(118245.66)	1.8E+07	112617.56	1.7E+07	109977.84	1.2E+07
2	121172.86	2.2E+07	118184.8	1.8E+07	112565.96	1.7E+07	109929.32	1.2E+07
3	121075.64	2.2E+07	118094.69	1.8E+07	112487.43	1.7E+07	109855.54d	1.2E+07
4	120947.85	2.2E+07	117975.17	1.8E+07	112384.29	1.7E+07	109763.03d	1.2E+07
5	120788.76	2.2E+07	117826.83*	1.8E+07	112255.72	1.7E+07	109643.77d	1.2E+07
6	120600.33	2.1E+07	117650.99	1.8E+07	112103.63	1.7E+07	109504.61d	1.2E+07
7	120382.23	2.1E+07	117446.76	1.8E+07	(111928.11)	1.7E+07	109341.71d	1.2E+07
8	120135.81	2.1E+07	117218.03	1.8E+07	111726.85	1.7E+07	109156.92d	1.2E+07
9	119862.51	2.1E+07	116962.48	1.8E+07	111511.37	1.6E+07	108956.85*	1.2E+07

	2 - 6		2 - 7		2 - 8		2 - 9	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	(105039.20)	2.2E+07	102740.11	3.3E+07	100554.27	1.8E+07	98483.31	4.7E+06
2	104998.66d	2.2E+07	102703.82	3.3E+07	100522.17	1.8E+07	98455.52*	4.7E+06
3	104939.29	2.2E+07	102649.67	3.3E+07	100474.54	1.8E+07	98413.38d	4.6E+06
4	104859.41	2.2E+07	102579.35	3.3E+07	100411.28	1.8E+07	98359.08d	4.6E+06
5	104760.97d	2.2E+07	102490.20	3.3E+07	100332.67	1.8E+07	98290.25d	4.6E+06
6	104644.31	2.2E+07	102385.70	3.3E+07	100240.41	1.8E+07	(98210.35)	4.5E+06
7	104511.66	2.2E+07	102265.68	3.3E+07	100134.41	1.8E+07	98118.66d	4.4E+06
8	104359.86d	2.2E+07	102128.85	3.3E+07	100014.66	1.8E+07	98014.29d	4.4E+06
9	104192.31	2.2E+07	101980.18	3.3E+07	99882.88	1.8E+07	97900.67d	4.3E+06

[a] Le nombre d'onde de Ritz .
[b] E(+x) : 10^x .
[c] Une raie avec une double attributions, l'autre attribution est dans cette list de raies.
[d] Une raie avec plusieurs attributions, les autres attributions ne sont pas dans cette list de raies.

TableE.3. continue

	3 - 0		3 - 1		3 - 2		3 - 3	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	122694.61	2.4E+07	119703.21	5.6E+06	116830.37*	7.5E+06	114075.36	1.2E+07
2	122628.19	2.4E+07	119640.80	5.6E+06	116772.30	7.5E+06	114021.04	1.2E+07
3	122527.61	2.4E+07	119547.53	5.7E+06	116685.17	7.5E+06	113939.85	1.2E+07
4	122396.14	2.4E+07	119423.82	5.7E+06	116569.63	7.4E+06	113832.71	1.2E+07
5	122233.21	2.4E+07	119270.57	5.7E+06	116427.27	7.4E+06	113700.48	1.2E+07
6	122037.02	2.4E+07	119087.61	5.7E+06	116255.81	7.3E+06	113541.04	1.2E+07
7	121810.78*	2.4E+07	118876.62	5.8E+06	116057.59	7.3E+06	113355.26	1.2E+07
8	121557.71	2.4E+07	118638.64	5.8E+06	(115838.20)	7.2E+06	(113149.89)	1.2E+07
9	121275.96	2.4E+07	118376.23	5.8E+06	115592.92	7.1E+06	112923.19*	1.2E+07
10	120966.20	2.4E+07	118086.48	5.9E+06	(115322.55)	7.0E+06	112675.02	1.2E+07

	3 - 5		3 - 6		3 - 7		3 - 8	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	108910.11*	1.7E+07	106497.26d	5.6E+06	104197.90	5.5E+06	102012.57	3.0E+07
2	108863.22	1.7E+07	106454.87	5.6E+06	104159.33d	5.5E+06	101978.13	3.0E+07
3	108794.45d	1.7E+07	106392.14	5.5E+06	104103.03d	5.5E+06	101927.43	3.0E+07
4	108702.82	1.7E+07	106308.54	5.5E+06	104026.50d	5.6E+06	101859.82	3.0E+07
5	108590.89	1.6E+07	106205.55d	5.5E+06	103934.51d	5.6E+06	101777.15	3.1E+07
6	108454.58	1.6E+07	(106081.63)	5.5E+06	103822.89	5.7E+06	101677.93	3.1E+07
7	108297.73	1.6E+07	105939.30d	5.5E+06	103693.73d	5.7E+06	(101562.36)	3.1E+07
8	108121.36d	1.6E+07	105782.86	5.4E+06	103552.57*	5.8E+06	101437.49	3.1E+07
9	107932.16	1.6E+07	105605.16d	5.4E+06	103393.88*	5.9E+06	101296.66	3.1E+07
10	107722.31d	1.6E+07	105413.72	5.3E+06	(103220.72)	6.0E+06	(101142.33)	3.1E+07

	3 - 9		3 - 10		4 - 0		4 - 2	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	99940.52	2.7E+07	97987.34d	9.3E+06	124090.36	2.3E+07	118226.54	1.3E+07
2	99911.39	2.7E+07	97961.72d	9.2E+06	124021.70	2.3E+07	118166.13	1.3E+07
3	99866.66	2.7E+07	97923.52*	9.2E+06	123918.47	2.3E+07	118075.90	1.3E+07
4	99807.72	2.7E+07	97871.74	9.1E+06	123782.86	2.3E+07	117956.39	1.3E+07
5	99735.28	2.7E+07	97811.22	9.0E+06	123613.98	2.3E+07	117808.19	1.3E+07
6	99647.18	2.7E+07	(97734.66)	8.9E+06	123411.78	2.3E+07	117630.88	1.3E+07
7	99546.76	2.7E+07	97646.68	8.7E+06	123179.91	2.3E+07	117427.50	1.3E+07
8	99435.59	2.7E+07	97555.66	8.6E+06	122918.54	2.3E+07	117198.15	1.3E+07
9	99313.90d	2.7E+07	97451.80	8.4E+06	122627.18	2.3E+07	116943.09	1.3E+07
10	99180.49	2.7E+07	97336.98	8.2E+06	122309.45	2.3E+07	116666.01	1.3E+07

	4 - 3		4 - 4		4 - 5		4 - 6	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	115470.92	1.5E+06	112830.89	1.0E+07	110305.55	5.7E+06	107892.27d	5.0E+06
2	115414.60	1.5E+06	112779.08*	1.0E+07	110256.50d	5.7E+06	107848.20d	5.0E+06
3	115330.22	1.5E+06	112700.74	1.0E+07	110185.82	5.7E+06	107782.48d	5.0E+06
4	115219.47d	1.6E+06	112597.14	9.9E+06	110089.92d	5.7E+06	107694.76	5.0E+06
5	115081.49	1.6E+06	112469.14d	9.9E+06	(109971.74)	5.7E+06	107587.06	5.0E+06
6	114915.19	1.6E+06	112316.71	9.8E+06	109829.31	5.7E+06	107456.08d	5.0E+06
7	114726.96d	1.6E+06	112139.53	9.8E+06	109666.15	5.7E+06	(107308.62)	5.0E+06
8	114510.39d	1.6E+06	111939.74	9.7E+06	(109480.78)	5.7E+06	107142.84	5.0E+06
9	114276.49	1.7E+06	111722.12*	9.7E+06	(109283.25)	5.7E+06	(106957.19)	5.0E+06
10	114016.76	1.7E+06	111483.04*	9.6E+06	(109062.89)	5.7E+06	(106756.05)	5.0E+06

	4 - 7		4 - 9		4 - 10		4 - 11	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	105593.48	1.5E+07	101337.42	2.0E+07	99383.12	3.4E+07	97548.71*	1.5E+07
2	105551.34	1.5E+07	101305.38	2.0E+07	99354.54	3.4E+07	97525.80d	1.5E+07
3	105493.30	1.5E+07	101257.29	2.0E+07	99313.90	3.4E+07	97489.24	1.5E+07
4	105413.72	1.5E+07	101193.74	2.1E+07	99258.11	3.4E+07	97443.33	1.5E+07
5	(105315.63)	1.5E+07	101116.25	2.1E+07	99191.98	3.4E+07	97386.72	1.4E+07
6	105197.39	1.5E+07	(101021.67)	2.1E+07	99108.89	3.4E+07		
7	105063.19	1.5E+07	100915.23	2.1E+07	99017.56	3.4E+07		
8	104912.45	1.5E+07	100796.63	2.2E+07	(98915.52)	3.4E+07		
9	104743.34*	1.4E+07	100665.76	2.2E+07	98801.63	3.4E+07		
10	(104562.91)	1.4E+07	100522.17	2.2E+07	98679.98	3.4E+07		

	5 - 0		5 - 2		5 - 4		5 - 6	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	125425.41	2.0E+07	119561.65*	1.1E+07	114166.46	1.1E+07	109227.50	1.2E+07
2	125354.69	2.0E+07	119499.28	1.1E+07	114111.70	1.1E+07	109181.88	1.2E+07
3	125248.79	2.0E+07	119406.09	1.1E+07	114031.05	1.1E+07	109113.15*	2.0E+07
4	125108.55	2.0E+07	119282.38*	1.1E+07	113923.65	1.0E+07	109021.00	1.2E+07
5	124934.72	2.0E+07	119129.41	1.1E+07	113791.09*	1.0E+07	108907.33	1.2E+07
6	124728.53	2.0E+07	118947.87	1.1E+07	113631.74	1.0E+07	108774.45d	1.2E+07
7	124488.09	2.0E+07	118736.11	1.1E+07	113448.66	1.0E+07	108616.62	1.2E+07
8	124217.79	2.0E+07	118498.77	1.11E+07	(113239.72)	1.0E+07	108442.37d	1.2E+07
9	123918.47*	2.0E+07	118233.9	1.1E+07	113014.32*	1.0E+07	108247.31*	1.2E+07
10	123589.79*	2.0E+07	(117947.18)	1.1E+07	(112765.50)	1.0E+07	108039.84*	1.2E+07

TableE.3. continue

	5 - 8		5 - 9		5 - 10		5 - 11	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	104743.34*	1.3E+07	102672.85d	4.5E+06	100717.54	9.6E+06	98883.55	3.6E+07
2	104705.11d	1.3E+07	102639.12d	4.4E+06	100687.02*	9.7E+06	98858.14	3.6E+07
3	104647.63	1.3E+07	102587.58	4.4E+06	(100643.63)	9.8E+06	98819.65	3.6E+07
4	104572.19	1.3E+07	(102519.90)	4.3E+06	100584.59	1.0E+07	98769.17	3.6E+07
5	104477.68	1.3E+07	102435.02d	4.2E+06	100510.62d	1.0E+07	98707.02	3.6E+07
6	104368.61d	1.3E+07	102338.31d	4.1E+06	(100426.05)	1.1E+07	(98633.97)	3.7E+07
7	104240.22d	1.4E+07	102223.20d	4.0E+06	(100325.54)	1.1E+07	98548.39	3.7E+07
8	(104097.01)	1.4E+07	(102097.06)	3.9E+06	100215.53	1.1E+07	98455.52	3.7E+07
9	103939.18*	1.4E+07	(101956.65)	3.7E+06	100093.75	1.2E+07	98353.73	3.7E+07
10	103766.92*	1.4E+07	101805.20d	3.5E+06	(99962.47)	1.2E+07	98242.69	3.7E+07

	6 - 0		6 - 1		6 - 2		6 - 3	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	126700.43	1.6E+07	123709.25	4.1E+06	120836.87	5.8E+06	118081.31	5.6E+06
2	126627.78	1.6E+07	123640.57	4.1E+06	120772.45	5.8E+06	118021.03	5.6E+06
3	126518.91	1.6E+07	123538.28	4.1E+06	120676.14	5.8E+06	117930.84	5.6E+06
4	126374.82	1.6E+07	123402.60	4.0E+06	120548.53	5.8E+06	117811.59	5.5E+06
5	126195.83	1.6E+07	123234.27	4.0E+06	120391.07*	5.9E+06	117663.53	5.5E+06
6	125983.19	1.6E+07	(123033.47)	3.9E+06	120201.25	5.9E+06	117487.40	5.4E+06
7	(125736.91)	1.6E+07	(122801.52)	3.9E+06	119984.86	5.9E+06	117282.65	5.4E+06

	6 - 4		6 - 5		6 - 6		6 - 7	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	115441.14	3.6E+06	112915.25	6.3E+06	110503.23d	3.4E+06	108203.37	6.5E+06
2	115385.26d	3.6E+06	112862.91	6.3E+06	110454.46d	3.4E+06	108159.50	6.5E+06
3	115300.72	3.6E+06	112785.31	6.3E+06	110381.27d	3.4E+06	108092.67d	6.5E+06
4	115189.19	3.6E+06	112681.33d	6.3E+06	110286.46d	3.4E+06	108005.43	6.5E+06
5	115050.95d	3.7E+06	112554.78	6.2E+06	(110169.02)	3.4E+06	107896.48d	6.5E+06
6	114886.78d	3.7E+06	112400.41	6.2E+06	110028.04	3.4E+06	107768.04d	6.5E+06
7	114695.55	3.7E+06	112224.89d	6.1E+06	109866.41*	3.4E+06	107620.19	6.5E+06

	6 - 8		6 - 9		6 - 10		6 - 11	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	106018.98	5.1E+06	103947.74	5.8E+06	101993.84d	1.1E+07	100158.12*	2.6E+06
2	105977.38d	5.0E+06	103911.26	5.8E+06	101960.12	1.1E+07	100131.10*	2.7E+06
3	105917.65d	5.0E+06	103856.30	5.8E+06	(101913.81)	1.1E+07	(100089.81)	2.8E+06
4	105838.90	5.0E+06	103786.34	5.9E+06	101851.19	1.1E+07	100035.59d	3.0E+06
5	105740.25	5.0E+06	103697.64d	6.0E+06	101773.51	1.1E+07	(99968.68)	3.2E+06
6	(105623.08)	4.9E+06	103591.02	6.0E+06	(101680.61)	1.0E+07	(99888.51)	3.4E+06
7	105487.94	4.9E+06	(103472.45)	6.1E+06	101574.36d	1.0E+07	99797.54d	3.7E+06

	6 - 12		7 - 1		7 - 2		7 - 3	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	98446.59	3.5E+07	124925.39	7.2E+06	122052.75	1.6E+06	119298.15	8.4E+06
2	98423.94	3.5E+07	124854.92	7.2E+06	121986.70*	1.6E+06	119235.61	8.4E+06
3	98389.70	3.6E+07	124749.80	7.2E+06	121887.23	1.6E+06	119143.09	8.4E+06
4	98343.47	3.6E+07	124610.16	7.1E+06	121758.07*	1.6E+06	119019.37	8.4E+06
5	98286.57	3.6E+07	124436.94	7.1E+06	(121593.70)	1.7E+06	118866.62	8.3E+06
6	(98221.27)	3.7E+07	124231.49	7.0E+06	(121398.99)	1.7E+06	118683.50	8.3E+06
7	98145.26	3.8E+07						

	7 - 5		7 - 7		7 - 9		7 - 11	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	114131.84	8.4E+06	109420.16d	8.5E+06	105163.77d	9.7E+06	101375.38	1.4E+07
2	114077.47	8.4E+06	109373.45d	8.5E+06	105126.20d	9.7E+06	101346.05d	1.4E+07
3	113998.14d	8.4E+06	109305.08d	8.5E+06	105069.11d	9.7E+06	101301.90	1.4E+07
4	113889.33	8.4E+06	(109213.71)	8.5E+06	104994.18	9.6E+06	101244.46	1.3E+07
5	113756.56	8.4E+06	(109100.64)	8.5E+06	104901.99d	9.6E+06	101170.55*	1.3E+07
6	113598.04	8.4E+06	108965.73d	8.5E+06	104789.90	9.5E+06	101085.38d	1.3E+07

	7 - 13		8 - 1		8 - 3		8 - 4	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	98079.95	3.4E+07	126085.12	9.1E+06	120457.55	7.7E+06	117817.64	1.3E+06
2	98059.64	3.4E+07	126012.86	9.1E+06	120393.55	7.7E+06	117756.13	1.3E+06
3	98028.86	3.5E+07	125905.13	9.0E+06	120297.87	7.7E+06	117668.03	1.2E+06
4	97989.30	3.5E+07	125762.01	9.0E+06	120170.22	7.7E+06	117549.05	1.2E+06
5	97939.69	3.6E+07	(125583.39)	9.0E+06	120013.93*	7.7E+06	117400.60	1.2E+06
6	97881.13	3.7E+07	(125371.57)	8.9E+06	119825.74	7.7E+06	117223.70*	1.2E+06

	8 - 5		8 - 6		8 - 7		8 - 8	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	115291.42d	4.9E+06	112879.80	3.8E+06	(110579.95)	2.6E+06	108393.26d	6.1E+06
2	115236.24	4.9E+06	112828.70	3.8E+06	110532.11	2.6E+06	108351.02d	6.1E+06
3	115151.36	4.9E+06	112748.66*	3.8E+06	110459.94d	2.6E+06	(108284.77)	6.1E+06
4	115041.41	4.9E+06	112646.48d	3.8E+06	110366.26d	2.6E+06	108197.22d	6.1E+06
5	(114902.46)	4.9E+06	(112517.78)	3.7E+06	(110246.35)	2.6E+06	(108089.10)	6.1E+06
6	114738.65*	4.9E+06	112365.89	3.7E+06	(110106.39)	2.6E+06	107960.30d	6.1E+06

	8 - 9		8 - 10		8 - 12		8 - 14	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	106322.02d	1.2E+06	104369.88	8.5E+06	100824.69d	1.2E+07	97789.55	3.4E+07
2	106283.48*	1.2E+06	104334.29*	8.5E+06	100796.63	1.2E+07	97771.88	3.4E+07
3	106224.72d	1.2E+06	104281.40*	8.5E+06	100755.29	1.2E+07	97745.94	3.5E+07
4	106144.57*	1.2E+06	104208.96d	8.5E+06	100703.77	1.2E+07	97712.15	3.6E+07
5	106047.08*	1.1E+06	104122.00*	8.5E+06	(100636.65)	1.2E+07	97669.57	3.7E+07
6	105930.19*	1.1E+06	104018.48*	8.5E+06	100558.46	1.2E+07	97621.55d	3.8E+07

TableE.3. continue

	9 - 1		9 - 3		9 - 4		9 - 5	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	(127178.94)	9.7E+06	(121550.98)	5.1E+06	118910.67	4.1E+06	(116384.98)	1.1E+06
2	127103.50	9.7E+06	121484.54	5.1E+06	118848.07	4.0E+06	116326.80	1.1E+06
3	126991.63	9.7E+06	121384.63	5.1E+06	118755.47	4.0E+06	116238.22	1.1E+06
4	126844.94	9.6E+06	121254.02	5.1E+06	(118631.99)	4.0E+06	116122.98	1.1E+06
5	126662.44	9.6E+06	121092.28	5.1E+06	118480.89	3.9E+06	115984.29*	1.1E+06
6	126446.00	9.5E+06	120899.12	5.1E+06	(118299.48)	3.9E+06	(115813.43)	1.1E+06

	9 - 6		9 - 8		9 - 9		9 - 10	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	113972.43	6.4E+06	109486.63	6.5E+06	(107417.21)	1.2E+06	105464.94d	5.2E+06
2	113917.65	6.4E+06	109441.03	6.5E+06	107375.16d	1.2E+06	105425.22d	5.2E+06
3	113835.84	6.4E+06	(109371.21)	6.5E+06	(107310.82)	1.2E+06	105367.58	5.2E+06
4	(113729.56)	6.3E+06	(101281.01)	6.5E+06	107227.73d	1.2E+06	105293.80	5.1E+06
5	113598.04	6.3E+06	109168.21d	6.4E+06	107127.26d	1.2E+06	(105202.30)	5.1E+06
6	113439.24*	6.3E+06	(109035.72)	6.4E+06	107006.20d	1.2E+06	105091.84*	5.0E+06

	9 - 11		9 - 12		9 - 13		9 - 15	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	103628.39d	4.0E+06	101916.41*	3.4E+06	100332.67d	8.7E+06	97574.51d	3.7E+07
2	103595.32*	4.0E+06	(101887.04)	3.3E+06	100306.39d	8.8E+06	97559.65d	3.8E+07
3	103543.66d	4.1E+06	(101842.46)	3.3E+06	100269.90d	8.9E+06	97537.20	3.9E+07
4	103478.56d	4.1E+06	(101786.29)	3.2E+06	100224.19	9.0E+06	97510.68	4.0E+07
5	103398.49d	4.2E+06	101716.88*	3.0E+06	(100165.57)	9.1E+06	(97479.20)	4.2E+07
6	103300.69d	4.2E+06	101634.02*	2.9E+06	100096.09	9.3E+06	97440.60*	4.4E+07

	10 - 2		10 - 3		10 - 4		10 - 6	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	125354.69	1.7E+06	(122599.41)	2.4E+06	119959.34	5.7E+06	115021.05	5.2E+06
2	125278.68	1.7E+06	122527.61	2.4E+06	119890.64	5.7E+06	114960.47d	5.2E+06
3	(125170.42)	1.7E+06	122425.17	2.4E+06	119794.93	5.7E+06	114876.69	5.2E+06
4	(125028.85)	1.7E+06	122291.70	2.4E+06	119668.99	5.6E+06	114766.70	5.2E+06
5	(124849.78)	1.7E+06	122121.86	2.5E+06	119510.74	5.6E+06	114629.22	5.2E+06
6	(124638.30)	1.6E+06	(121922.91)	2.5E+06	119324.94	5.5E+06	114464.27	5.2E+06
7	(124395.62)	1.6E+06	(121694.04)	2.5E+06	(119107.65)	5.5E+06	114276.49	5.2E+06

	10 - 7		10 - 8		10 - 9		10 - 11	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	(112721.76)	2.0E+06	110537.15	2.3E+06	108465.08d	5.1E+06	104675.54*	6.9E+06
2	(112665.40)	2.0E+06	(110484.00)	2.3E+06	108418.92d	5.1E+06	104637.22	6.9E+06
3	112586.17d	2.0E+06	110411.99*	2.3E+06	108351.20d	5.1E+06	104584.88	6.9E+06
4	112487.43*	1.9E+06	(110318.67)	2.3E+06	108265.18d	5.1E+06	104515.57d	6.8E+06
5	112358.07d	1.9E+06	110200.21d	2.3E+06	108157.32d	5.1E+06	104426.84	6.8E+06
6	112204.88d	1.9E+06	110060.29d	2.3E+06	108030.09d	5.1E+06	104324.33	6.8E+06
7	(112031.43)	1.9E+06	(109899.73)	2.3E+06	107883.31d	5.1E+06	104208.96d	6.70E+06

	10 - 13		10 - 14		10 - 16		11 - 2	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	101382.25d	6.0E+06	99930.71d	5.4E+06	97466.15	4.6E+07	(126334.83)	3.2E+06
2	101349.74	5.9E+06	99906.49*	5.5E+06	97451.80	4.7E+07	126260.97*	3.2E+06
3	101309.85*	5.8E+06	(99873.31)	5.6E+06	97436.67	4.8E+07	(126150.22)	3.2E+06
4	101259.50	5.7E+06	(99833.07)	5.8E+06	97418.61	5.0E+07		
5	101195.58d	5.5E+06	(99780.21)	5.9E+06	97393.19	5.2E+07		
6	101120.47d	5.3E+06	99719.84d	6.2E+06	97366.67	5.4E+07		
7	(101035.89)	5.1E+06	99653.80d	6.4E+06	97339.07	5.7E+07		

	11 - 4		11 - 6		11 - 7		11 - 9	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	120939.53	5.6E+06	116001.10	2.5E+06	113701.55	4.3E+06	109446.87d	5.2E+06
2	120873.81	5.6E+06	115944.84	2.5E+06	113648.17	4.3E+06	109399.85d	5.1E+06
3	(120774.84)	5.6E+06	(115856.41)	2.5E+06	(113567.26)	4.3E+06	(109331.52)	5.1E+06

	11 - 10		11 - 11		11 - 12		11 - 14	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	107492.43d	1.4E+06	105657.05	2.6E+06	(103945.32)	5.2E+06	100910.34d	6.9E+06
2	107450.65d	1.4E+06	105620.83d	2.6E+06	103913.82d	5.2E+06	(100888.18)	6.8E+06
3	107387.67d	1.4E+06	105563.45	2.6E+06	103863.14d	5.2E+06	100853.11d	6.7E+06

	11 - 15		11 - 17		12 - 4		12 - 5	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	99603.47d	3.0E+06	97455.02	6.0E+07	121867.18	4.4E+06	119341.06	2.6E+06
2	99583.82d	3.1E+06	97449.15	6.1E+07	(121797.94)	4.4E+06	(119276.08)	2.5E+06
3	99557.16d	3.2E+06	97440.06	6.3E+07	121697.07	4.4E+06	(119181.91)	2.5E+06
4					121562.83	4.4E+06	119056.32	2.5E+06

	12 - 7		12 - 12		12 - 13		12 - 15	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	114629.22*	4.7E+06	(104872.63)	4.7E+06	103288.70*	2.3E+06	100530.02d	6.4E+06
2	(114572.43)	4.7E+06	104836.76*	4.7E+06	103256.87d	2.4E+06	100509.36d	6.4E+06
3	114490.44*	4.6E+06	104786.07d	4.7E+06	103213.85d	2.4E+06	100481.08	6.3E+06
4	114379.99d	4.6E+06	104717.73d	4.6E+06	103154.33*	2.4E+06	100442.70d	6.3E+06

	12 - 16		12 - 18	
J	**Q(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**
1	(99373.91)	1.5E+06	97569.52	7.1E+07
2	99359.13	1.6E+06	97568.67	7.1E+07
3	(99339.18)	1.6E+06	97569.52*	7.1E+07
4	99312.09d	1.7E+06	97569.52*	7.1E+07

E.4 Le système $B^{'1}\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v^{'} - v^{''})$.

Table E.4 – *Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système $B'^1\Sigma_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$.*

			0-0						0-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	110840.94d	-1.04	2.4E+06				107848.20d	-0.18	1.3E+07			
1	110834.94d	0.26	2.9E+06	110755.71d	-0.28	7.1E+06	107843.18	-0.02	1.5E+07	107764.39*	-0.11	3.6E+07
2	(110793.87)		3.2E+06	110662.30d	-0.67	4.6E+06	107806.27	-0.33	1.7E+07	107675.66	-0.04	2.4E+07
3	110719.86d	0.16	3.3E+06	110537.15d	-0.08	4.0E+06	107738.33	-0.41	1.7E+07	107556.01*	-0.26	2.1E+07
4	110612.10d	-0.56	3.4E+06	110379.30d	0.06	3.7E+06	107639.88	-0.20	1.8E+07	107406.56	-0.10	1.9E+07
5	110474.56d	1.26	3.4E+06	110189.86	-0.01	3.5E+06	107511.52	0.36	1.8E+07	107227.73d	0.00	1.8E+07
6	(110302.67)		3.5E+06	109969.76d	-0.16	3.4E+06	107352.67	-0.36	1.8E+07	107020.01	-0.27	1.8E+07
7	110100.63d	-0.17	3.5E+06	109720.26	-0.03	3.2E+06	107164.89d	-0.52	1.8E+07	106784.94	0.04	1.7E+07
8	109868.45d	0.01	3.4E+06	(109442.69)		3.1E+06	106949.21*	-0.21	1.8E+07	106523.83d	0.17	1.6E+07
9				(109137.44)		3.0E+06				106236.25	-0.55	1.6E+07
10				108806.37	0.57	2.8E+06				105925.610	0.516	1.5E+07

			0-2						0-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	104973.89d	0.37	2.8E+07				102216.23	-0.04	3.6E+07			
1	104970.45d	-0.02	3.4E+07	104892.03	0.26	8.2E+07	102215.79	0.56	4.4E+07	102136.55	0.01	1.0E+08
2	104937.42d	-0.59	3.7E+07	104807.25	0.14	5.3E+07	102187.47d	0.70	4.8E+07	102055.87	0.00	6.8E+07
3	104876.22d	-0.36	3.9E+07	104694.08	-0.03	4.7E+07	102131.17	-0.05	5.1E+07	101948.75	0.01	6.0E+07
4	104786.07d	0.04	4.0E+07	104552.65d	0.04	4.3E+07	102048.92d	0.04	5.2E+07	101815.45	-0.01	5.5E+07
5	104667.23	-0.05	4.1E+07	104384.13	0.28	4.1E+07	101940.04	-0.05	5.4E+07	101656.81	0.15	5.3E+07
6	104521.35	0.04	4.2E+07	104188.50	-0.06	3.9E+07	101805.80	-0.12	5.5E+07	101473.70	0.53	5.0E+07
7	104347.43d	-0.82	4.2E+07	103967.61	-0.13	3.8E+07	101646.65*	-0.02	5.5E+07	101267.22*	1.06	4.8E+07
8	104147.92d	-0.98	4.2E+07	103723.13	-0.02	3.6E+07	101461.09d	0.50	5.6E+07	(101034.84)		4.6E+07
9				(103453.57)		3.5E+07				100787.00d	0.89	4.5E+07
10				103161.73	0.13	3.4E+07				100513.45	-0.17	4.3E+07

			0-4						0-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	99574.61*	0.44	3.0E+07				97046.08	-0.18	1.6E+07			
1	99574.61*	-0.56	3.6E+07	99496.16	-0.31	8.5E+07	97049.63d	0.39	2.0E+07	96970.77	0.23	4.6E+07
2	99550.55*	-0.11	4.0E+07	99419.69	-0.07	5.5E+07	97029.18	0.38	2.1E+07	96898.53d	0.63	3.0E+07
3	99501.24	0.04	4.2E+07	99318.67	-0.06	4.8E+07	96985.49	0.20	2.3E+07	96803.11	0.30	2.6E+07
4	99425.92d	-0.91	4.3E+07	99193.22	-0.19	4.5E+07	96919.38	0.60	2.4E+07	96685.81	0.45	2.4E+07
5	99328.16	0.14	4.5E+07	99044.57	-0.02	4.2E+07	96829.96d	-0.37	2.4E+07	96547.08	0.18	2.2E+07
6	99207.25	0.85	4.5E+07	98873.85	0.20	4.0E+07	96721.06d	0.71	2.5E+07	96387.59	-0.01	2.1E+07
7	99060.46	0.18	4.6E+07	98679.98d	0.21	3.9E+07	96586.43d	-1.82	2.6E+07	96208.38d	0.64	2.0E+07
8	(98889.61)		4.7E+07	98463.13	-0.73	3.7E+07	96431.66d	0.98	2.6E+07	96006.10d	1.17	2.0E+07
9				98233.14d	0.05	3.6E+07				95794.42d	0.72	1.9E+07
10				97978.89d	-1.03	3.4E+07				95559.53	-0.22	1.8E+07

			0-6						1-0			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	94632.78d	1.07	5.7E+06				112204.88d	-0.99	7.5E+06			
1	94636.54d	-0.19	7.1E+06	94557.92*	-0.12	1.6E+07	(112195.53)		9.2E+06	112121.25	-0.24	2.1E+07
2	94619.58d	-0.68	7.8E+06	94489.57*	0.21	1.1E+07	112151.33	0.60	1.0E+07	112026.45	-0.41	1.4E+07
3	94582.10d	-0.67	8.2E+06	94400.59d	0.29	9.1E+06	112071.09d	0.12	1.1E+07	111897.88	-0.19	1.2E+07
4	94524.08	-0.32	8.6E+06	94290.51	-0.47	8.4E+06	111957.30d	-0.17	1.1E+07	111735.68*	-0.42	1.1E+07
5	94445.37d	-0.28	8.9E+06	94161.96d	-0.26	7.9E+06	(111810.23)		1.1E+07	111540.19d	-0.95	1.0E+07
6	94347.11d	-0.03	9.2E+06	94014.20d	-0.19	7.5E+06	111628.15d	-1.28	1.1E+07	111314.47	-0.26	9.5E+06
7	94228.37d	-1.04	9.4E+06	(93848.90)		7.1E+06	111417.34	-0.01	1.1E+07	111056.75*	-0.47	9.0E+06
8	94091.37d	-0.91	9.6E+06	93667.54*	1.01	6.8E+06	111174.38	0.26	1.1E+07	110769.18*	-0.27	8.5E+06
9				(93467.65)		6.5E+06				110454.46d	0.47	8.1E+06
10				93254.21d	1.30	6.2E+06				110112.14	0.66	7.7E+06

			1-1						1-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	109211.76d	-0.51	2.4E+07				106337.80d	0.39	2.5E+07			
1	109205.18d	1.14	2.9E+07	109129.60	-0.40	6.7E+07	106331.98d	0.67	3.1E+07	106257.26	-0.01	6.8E+07
2	109162.44d	-1.02	3.2E+07	109039.43d	-0.16	4.3E+07	106295.21d	0.34	3.4E+07	106171.26	0.26	4.3E+07
3	109089.92d	-0.09	3.4E+07	108917.05	-0.06	3.7E+07	106228.07d	0.22	3.6E+07	106054.92*	-0.03	3.7E+07
4	108984.27d	-0.62	3.6E+07	108763.44*	-0.08	3.4E+07	106131.02d	0.18	3.8E+07	105909.51	0.04	3.4E+07
5	108846.29*	-1.80	3.7E+07	108578.88*	-0.12	3.2E+07	106004.18	-0.03	4.0E+07	105735.27	0.15	3.1E+07
6	108679.70	-0.09	3.7E+07	108364.62d	-0.47	3.0E+07	105848.40d	0.33	4.1E+07	105533.38	0.01	2.9E+07
7	108481.93	-0.03	3.8E+07	108121.36d	-0.47	2.8E+07	105664.42d	-0.38	4.2E+07	105304.69d	0.02	2.7E+07
8	108255.14	0.05	3.8E+07	107850.44	0.02	2.7E+07	105454.06	-0.52	4.3E+07	105049.16	-0.75	2.6E+07
9	108000.31	0.01	3.8E+07	(107553.35)		2.5E+07	105216.76d	-0.31	4.3E+07	104770.49	0.37	2.5E+07
10				107230.64	-0.13	2.4E+07				104468.52d	1.24	2.4E+07

			1-3						1-4			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	103580.14d	-0.02	6.2E+06				100936.68d	-1.38	1.2E+06			
1	103576.31	0.23	8.0E+06	103502.16	0.12	1.6E+07	100936.68d	0.67	1.3E+06	100861.29d	-0.68	4.5E+06
2	103543.66	0.03	9.2E+06	103419.80	0.04	9.8E+06	100907.47d	-0.05	1.3E+06	100783.55	-0.10	3.2E+06
3	103482.70	0.21	1.0E+07	103309.50d	-0.09	8.1E+06	(100852.47)		1.2E+06	100679.92d	0.35	3.1E+06
4	103393.88	0.19	1.1E+07	103172.50d	0.18	7.1E+06	100771.64d	0.00	1.0E+06	100550.24	-0.03	3.1E+06
5	103276.59d	-0.43	1.2E+07	103008.22d	0.29	6.4E+06	100665.76d	0.81	9.0E+05	100397.02d	1.16	3.2E+06
6	103133.29d	0.61	1.3E+07	102818.65	0.67	5.8E+06	(100533.16)		8.0E+05	100217.91d	-0.55	3.2E+06
7	(102963.22)		1.3E+07	(102603.09)		5.3E+06	100376.76d	-0.07	6.0E+05	100016.83d	0.13	3.3E+06
8	102765.96	-0.31	1.4E+07	102362.14	0.54	4.9E+06	100195.25d	-0.04	5.0E+05	99791.25d	0.63	3.3E+06
9	102549.80	0.20	1.5E+07	(102102.66)		4.6E+06				(99549.64)		3.2E+06
10				(101819.30)		4.6E+06				(99285.60)		3.2E+06

			1-5						1-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	98410.05*	-0.10	1.5E+07				95995.96	0.36	2.1E+07			
1	98410.05*	-0.03	1.8E+07	98335.48d	-0.56	4.5E+07	95998.04	0.46	2.6E+07	95923.51	-0.03	6.2E+07
2	98384.73d	-0.93	1.9E+07	98261.60	-0.19	3.0E+07	95977.54	0.42	2.8E+07	95853.37d	0.12	4.1E+07
3	98335.48d	-1.08	1.9E+07	98163.73	0.07	2.7E+07	95934.49	0.45	2.9E+07	95761.56	0.42	3.6E+07
4	98263.23	-0.36	2.0E+07	98042.17	-0.05	2.5E+07	95869.23	0.02	3.0E+07	95648.09	0.25	3.4E+07
5	98168.94d	1.68	2.0E+07	97897.84	-0.33	2.5E+07	95782.39d	-0.19	3.0E+07	95513.29	-0.20	3.2E+07
6	98046.52d	-0.59	1.9E+07	97731.93d	-0.48	2.4E+07	95673.91	0.01	3.1E+07	95359.21	0.01	3.1E+07
7	97904.81	0.01	1.9E+07	97544.75	0.08	2.3E+07	95544.34*	-1.63	3.1E+07	95185.97	0.14	3.0E+07
8	97736.35	-0.01	1.9E+07	97330.02d	-1.67	2.2E+07	95399.33d	1.37	3.1E+07	94993.29	0.00	2.9E+07
9	97557.06	-0.14	1.8E+07	(97110.26)		2.2E+07	95231.91d	0.77	3.1E+07	94783.68d	-0.51	2.8E+07
10				(96865.43)		2.1E+07				94557.92*	-0.67	2.6E+07

TableE.4. continue

			1-7						1-8			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	93694.13	-0.36	1.4E+07				91507.10	0.10	4.8E+06			
1	93699.44d	1.01	1.7E+07	93623.72d	-0.67	3.9E+07	91512.73	-0.24	5.9E+06	91438.90	-0.02	1.4E+07
2	93681.85d	-0.16	1.8E+07	93559.17d	1.03	2.6E+07	91500.45	-0.16	6.4E+06	91376.73*	-0.01	8.7E+06
3	93644.61	-0.28	1.9E+07	93471.84	-0.15	2.2E+07	91469.58	0.04	6.8E+06	91297.04d	0.40	7.6E+06
4	93587.59	-0.38	2.0E+07	93366.41	-0.19	2.1E+07	91420.69	0.03	7.1E+06	91199.48	0.19	7.0E+06
5	93510.99d	-0.16	2.0E+07	93242.74d	0.68	2.0E+07	91354.36	0.46	7.3E+06	91084.69	-0.12	6.5E+06
6	93413.89d	-0.72	2.1E+07	93099.68	-0.23	1.9E+07	91270.32d	0.92	7.4E+06	90955.89d	1.19	6.1E+06
7	93302.31d	1.70	2.1E+07	92939.54d	-0.94	1.8E+07	91169.72d	0.81	7.5E+06	90808.25d	-0.53	5.8E+06
8	93166.77d	-1.33	2.1E+07	92764.46d	1.03	1.7E+07	(91052.58)		7.6E+06	90647.28d	-0.63	5.4E+06
9	93018.92	0.23	2.1E+07	(92571.74)		1.6E+07	(90920.43)		7.7E+06	(90473.48)		5.1E+06
10				(92365.45)		1.6E+07				(90287.06)		4.8E+06

			2-0						2-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	113490.32d	-0.61	1.2E+07				110497.37d	0.04	2.2E+07			
1	113478.91	0.11	1.5E+07	113407.23	-0.24	3.6E+07	110487.26	-0.05	2.6E+07	110415.96	-0.02	6.6E+07
2	113431.48	0.77	1.5E+07	113311.30	-0.62	2.4E+07	110443.44	0.00	2.7E+07	110324.55	-0.10	4.4E+07
3	113347.12	-0.18	1.6E+07	113182.66d	1.32	2.1E+07	110366.26	-0.08	2.7E+07	110200.21	-0.17	4.0E+07
4	113229.19d	0.04	1.5E+07	113015.98	-0.10	2.0E+07	110256.50*	-0.07	2.6E+07	110043.37d	-0.13	3.8E+07
5	113077.87d	0.16	1.4E+07	112817.21d	-0.26	2.0E+07	110115.58d	0.01	2.3E+07	109855.54*	0.21	3.8E+07
6	112894.89d	0.11	1.1E+07	112586.17	-0.24	2.0E+07	109945.17d	0.03	1.7E+07	109636.32	-0.45	3.9E+07
7	112688.22d	1.48	5.9E+06	112324.30	-0.40	2.0E+07	109751.41	0.06	6.9E+06	109390.42d	1.11	4.2E+07
8	112365.89	0.04	2.4E+07	112034.24d	-0.56	2.2E+07	109446.87	0.05	5.9E+07	109116.06d	0.29	4.8E+07
9	112095.50	0.01	2.4E+07	111722.12*	-1.26	2.3E+07	109194.39d	-0.47	5.7E+07	108822.35d	-0.39	5.7E+07

			2-2						2-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	107622.86	0.39	5.8E+06				104865.42d	0.20	2.7E+06			
1	107614.78d	0.20	6.7E+06	107543.50d	0.25	1.9E+07	104859.41d	0.06	3.7E+06	104787.66*	-0.36	6.4E+06
2	107575.00	0.15	6.7E+06	107456.08d	0.02	1.3E+07	104824.73d	1.12	4.5E+06	104705.11d	0.29	3.6E+06
3	(107504.18)		6.3E+06	107338.87d	0.65	1.2E+07	104759.61d	0.79	5.4E+06	104592.98d	0.12	2.6E+06
4	107402.65d	0.13	5.4E+06	107188.93d	-0.52	1.3E+07	104665.38	0.01	6.6E+06	104452.40d	0.10	1.8E+06
5	107272.33d	0.64	3.8E+06	107011.76*	0.31	1.4E+07	104543.31d	-1.19	8.7E+06	104283.69d	-0.57	1.1E+06
6	(107113.42)		1.4E+06	106805.02	-0.03	1.6E+07	104397.79	-0.24	1.3E+07	104089.98d	0.32	4.0E+05
7	(106934.19)		1.0E+05	106571.80d	-0.35	2.0E+07	104232.09d	-0.52	2.1E+07	(103870.57)		1.0E+05
8	106646.27	-0.04	4.5E+07	106314.62d	-0.64	2.7E+07	(103958.00)		7.7E+06	(103626.95)		8.0E+05
9	106411.94*	0.32	3.6E+07	106039.53	0.02	4.3E+07	103744.71d	0.55	2.0E+06	103371.57d	-0.48	7.3E+06
10				105658.98d	-0.03	9.0E+06				103011.31d	0.28	3.6E+07

			2-4						2-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	102223.20d	0.08	1.7E+07				99695.14	-0.07	9.1E+06			
1	102219.53d	0.25	2.2E+07	102148.06	0.11	4.4E+07	99693.08	-0.27	1.2E+07	99621.71d	-0.31	2.3E+07
2	102187.47d	-0.03	2.5E+07	102069.15d	0.44	2.7E+07	99665.55	-0.09	1.4E+07	99546.76d	-0.09	1.4E+07
3	102128.85d	0.05	2.8E+07	101962.86	0.02	2.2E+07	99612.73d	-0.16	1.6E+07	99447.84*	0.91	1.1E+07
4	102043.38	0.06	3.1E+07	101830.40d	0.15	1.9E+07	99535.46	0.19	1.8E+07	99323.03d	0.83	9.3E+06
5	101932.45d	0.02	3.5E+07	101672.49d	0.30	1.6E+07	99433.85d	-0.89	2.1E+07	99173.09d	-1.41	7.8E+06
6	101798.76*	0.25	4.0E+07	101490.07	-0.07	1.3E+07	99312.09	-0.37	2.4E+07	99003.43d	-0.66	6.3E+06
7	101646.65*	0.43	4.7E+07	101283.83d	-0.35	9.2E+06	99174.15	-0.04	2.8E+07	98813.70d	1.55	4.7E+06
8	(101387.02)		4.0E+05	101056.53d	0.56	4.5E+06	(98928.09)		1.0E+06	98598.08d	1.04	2.6E+06
9	101191.14d	0.00	5.1E+06	(100819.03)		2.0E+05	98750.31d	-1.45	5.3E+06	(98379.65)		4.0E+05
10				100477.21	-0.12	4.3E+07				(98057.16)		1.5E+07

			2-7						2-8			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	94979.65d	0.10	9.6E+06				92792.07d	0.01	1.5E+07			
1	94981.69d	-0.01	1.1E+07	94909.69d	-0.68	3.0E+07	92796.22	-0.01	1.8E+07	92724.23d	-0.67	4.4E+07
2	94962.10	0.11	1.2E+07	94843.21	0.01	2.0E+07	92780.95d	0.36	1.9E+07	92661.74	-0.06	2.9E+07
3	94921.34d	0.12	1.2E+07	94755.22	-0.04	1.8E+07	92745.81	-0.06	2.0E+07	92579.77	-0.14	2.6E+07
4	94859.58d	-0.07	1.1E+07	94646.38d	-0.20	1.7E+07	92691.92	-0.42	2.0E+07	92479.48	0.21	2.4E+07
5	94779.13	0.50	1.0E+07	94517.75d	-0.65	1.7E+07	92621.23d	-0.15	1.9E+07	92361.12	-0.02	2.2E+07
6	94679.94d	-0.02	8.5E+06	94371.48d	-0.11	1.6E+07	(92534.75)		1.8E+07	92225.89d	-0.49	2.1E+07
7	(94570.00)		5.4E+06	94207.10d	-0.86	1.5E+07	(92438.30)		1.3E+07	92076.37d	0.11	2.0E+07
8	(94359.83)		1.0E+07	94028.71*	-0.07	1.4E+07	92243.53d	-0.78	1.4E+07	91912.84	-0.42	1.8E+07
9	94212.61d	-0.63	1.1E+07	(93841.13)		1.1E+07	(92114.98)		1.8E+07	91742.11d	-0.77	1.3E+07
10				93556.71d	-0.47	7.7E+06				91477.80d	-0.99	1.1E+07

			2-9						2-10			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	90719.26d	-0.19	8.4E+06				88763.90	0.60	2.2E+06			
1	90725.08d	-0.50	1.0E+07	90654.12*	-0.13	2.4E+07	88771.23d	-0.37	2.7E+06	88699.24d	-1.03	6.1E+06
2	90713.99	-0.07	1.1E+07	90595.20	-0.08	1.6E+07	88764.39	0.17	2.9E+06	88645.53d	0.10	3.9E+06
3	90685.48	0.00	1.2E+07	90519.22	-0.30	1.4E+07	88742.39d	0.54	3.1E+06	88575.85	-0.04	3.3E+06
4	90639.31	-0.75	1.2E+07	90427.05	0.06	1.3E+07	88704.90	0.08	3.1E+06	88491.87	0.12	3.0E+06
5	90579.04d	-0.21	1.2E+07	90319.07	0.06	1.2E+07	88654.35d	0.05	3.1E+06	88393.19d	-0.87	2.8E+06
6	90505.66d	0.97	1.1E+07	90196.34	0.02	1.1E+07	88593.16d	0.88	3.0E+06	88283.88d	-0.03	2.5E+06
7	90422.19d	-0.09	8.7E+06	90059.88d	-0.36	1.0E+07	88524.91d	0.73	2.4E+06	88161.99	-0.14	2.3E+06
8	90243.66d	-0.71	7.9E+06	89913.88	0.57	8.8E+06	88362.22d	-0.61	2.0E+06	88031.27d	-0.51	1.9E+06
9	90133.10d	-0.47	1.1E+07	89759.83d	-1.62	6.6E+06				87898.47	0.10	1.4E+06
										87674.72d	0.43	1.0E+06

			3-0						3-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	114690.95r	-0.29	2.0E+07				111697.17	-0.18	2.1E+07			
1	114673.73	-0.19	2.5E+07	114609.11r	-0.54	4.6E+07	111682.40d	-0.03	2.7E+07	111618.09	-0.07	4.5E+07
2	114619.33	-0.11	2.8E+07	114511.54r	-0.40	2.6E+07	111631.94*	-0.23	3.1E+07	111524.33d	-0.34	2.4E+07
3	114526.82r	-1.13	3.0E+07	114376.26d	-0.20	2.1E+07	111547.10d	0.11	3.3E+07	111394.77d	-0.73	1.8E+07
4	114399.07	-0.34	3.0E+07	114204.66r	-0.15	1.7E+07	111426.70	-0.13	3.4E+07	111232.18	-0.05	1.4E+07
5	114235.57	-0.03	3.1E+07	113998.14d	0.02	1.5E+07	111273.19d	-0.27	3.5E+07	111035.53d	-0.45	1.2E+07
6	114035.71	-0.19	3.1E+07	113756.56d	-0.11	1.4E+07	111086.24	-0.02	3.5E+07	110806.69	-0.34	1.1E+07
7	113801.79	-0.24	3.0E+07	113482.21	-0.38	1.3E+07	110866.20d	-0.44	3.5E+07	110546.68d	-0.52	1.1E+07
8	113534.99	-0.50	3.0E+07	113176.05	0.13	1.3E+07	110616.45	-0.02	3.5E+07	110256.50*	-0.40	1.0E+07
9	113235.79	0.34	2.9E+07	112838.62d	-0.05	1.2E+07	110334.80	-0.01	3.5E+07	109938.31	0.28	1.0E+07
10				(112472.85)		1.2E+07				109591.05d	-1.09	1.0E+07

TableE.4. continue

			3-3						3-4			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	106065.25d	0.01	1.2E+07				103423.23d	0.09	1.1E+07			
1	106054.92*	0.45	1.4E+07	105990.06	-0.14	3.2E+07	103414.50d	0.10	1.5E+07	103350.17	0.04	2.2E+07
2	106012.63*	0.29	1.6E+07	105905.00	0.16	2.0E+07	103376.31	0.08	1.7E+07	103269.04d	0.31	1.1E+07
3	105939.30d	-0.17	1.6E+07	105788.16	0.18	1.6E+07	103309.50d	0.05	1.8E+07	103158.05d	0.09	7.4E+06
4	105835.62d	-0.01	1.7E+07	105641.07d	0.04	1.5E+07	103213.85d	0.27	1.9E+07	103019.19	0.21	5.6E+06
5	105702.46	0.07	1.7E+07	105464.94*	0.03	1.3E+07	103090.48	0.16	2.0E+07	102851.86d	-0.98	4.6E+06
6	105539.66d	0.51	1.7E+07	105260.43d	0.51	1.2E+07	102939.42*	-0.21	2.0E+07	102660.28	-0.12	3.9E+06
7	105347.98	0.08	1.7E+07	105027.44d	-1.02	1.2E+07	102762.39	0.88	2.1E+07	102441.23d	-0.84	3.6E+06
8	105126.20d	-1.44	1.7E+07	(104768.07)		1.1E+07	102556.78	0.12	2.1E+07	(102197.09)		3.3E+06
9	104885.86d	1.74	1.7E+07	104486.86d	-0.48	1.0E+07				101934.71*	0.39	3.2E+06
10				104182.24d	1.57	9.7E+06				101646.65*	-0.32	3.1E+06

			3-5						3-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(100895.23)		2.7E+04				98480.48d	-0.20	7.9E+06			
1	(100888.74)		6.0E+03	(100824.20)		2.2E+06	98475.90d	-0.07	8.5E+06	98411.42	-0.28	3.2E+07
2	(100854.37)		6.1E+03	100746.65	-0.22	2.9E+06	98445.68d	-0.15	8.5E+06	98337.99	-0.34	2.4E+07
3	(100793.54)		1.2E+05	100641.76d	-0.29	3.9E+06	98390.91d	-0.11	8.6E+06	98239.24d	-0.29	2.4E+07
4	(100705.53)		1.6E+05	100510.62d	-0.31	4.7E+06	98311.26d	0.11	8.8E+06	98116.34	-0.21	2.4E+07
5	(100592.63)		1.9E+05	100354.75d	-0.40	5.2E+06	98207.38d	-0.57	9.1E+06	97969.91d	-0.56	2.3E+07
6	(100453.58)		2.2E+05	100173.86d	-0.49	5.4E+06	98079.95d	-0.42	9.3E+06	97801.04d	-0.10	2.2E+07
7	(100289.48)		2.5E+05	(99970.04)		5.3E+06	97931.16d	0.52	9.6E+06	97611.57	0.37	2.1E+07
8	(100097.73)		2.9E+05	(99738.16)		5.2E+06	97759.29d	-0.04	9.7E+06	97400.08	0.32	2.0E+07
9				99494.35d	-0.59	4.9E+06				97168.79	-0.09	1.9E+07
10				99225.65d	-1.15	4.5E+06				96920.57	0.61	1.8E+07

			3-7						3-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	96179.68d	0.11	4.3E+06				91919.34	-0.13	8.7E+06			
1	96178.06d	1.24	4.9E+06	96112.72d	0.17	1.5E+07	91920.62	-0.08	1.0E+07	91856.43	0.00	2.6E+07
2	96151.04d	0.32	5.2E+06	96043.41	0.19	1.1E+07	91902.78	-0.01	1.1E+07	91795.36	0.07	1.7E+07
3	96102.12d	0.25	5.5E+06	95950.66d	0.28	1.0E+07	91865.83d	-0.30	1.1E+07	91714.18	-0.46	1.5E+07
4	96028.94d	-0.97	5.9E+06	95835.89d	0.58	9.5E+06	91810.39	0.07	1.1E+07	91615.62	-0.10	1.4E+07
5	95936.55d	0.03	6.4E+06	95698.40d	-0.64	9.0E+06	91736.89	-0.25	1.1E+07	91499.44d	-0.22	1.3E+07
6	95821.17	0.09	6.9E+06	95541.94d	0.09	8.5E+06	91645.01d	-0.80	1.1E+07	91366.42	-0.16	1.3E+07
7	(95685.29)		7.4E+06	95365.83	-0.02	7.9E+06	(91537.57)		1.1E+07	91218.03	-0.10	1.2E+07
8	95529.36d	-0.11	7.9E+06	95169.79	-0.11	7.4E+06	91414.69d	0.69	1.0E+07	91053.66d	-0.77	1.2E+07
9				94955.98d	-0.44	7.0E+06				90876.81d	0.06	1.1E+07
10				94727.18d	0.37	6.6E+06				90687.77d	1.18	1.1E+07

			3-10						3-11			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	89963.18d	-0.14	9.4E+06				88126.77d	0.36	3.4E+06			
1	89966.73d	0.01	1.1E+07	89902.52d	0.07	2.7E+07	88132.07	0.10	4.1E+06	88067.74	0.04	9.7E+06
2	89953.01	0.06	1.2E+07	89845.38	-0.07	1.8E+07	88122.88d	0.41	4.5E+06	88014.89	-0.08	6.2E+06
3	89922.73d	0.23	1.3E+07	89771.07	0.06	1.5E+07	88098.50d	0.00	4.6E+06	87947.00d	-0.01	5.2E+06
4	89875.07	-0.01	1.3E+07	89680.57	0.09	1.4E+07	88059.82d	0.17	4.8E+06	87865.04	-0.01	4.7E+06
5	89812.48d	0.29	1.3E+07	89574.04d	-0.67	1.3E+07	88007.02d	-0.59	4.8E+06	87769.88d	-0.26	4.3E+06
6	89732.87d	-0.53	1.3E+07	89453.91d	-0.26	1.2E+07	87942.34d	1.02	4.9E+06	87662.22	0.13	3.9E+06
7	(89639.47)		1.3E+07	89320.86d	0.83	1.2E+07	87862.98d	0.35	4.9E+06	87543.07d	-0.12	3.6E+06
8	89532.24d	-0.22	1.3E+07	89172.66d	-0.24	1.1E+07	87772.58d	0.13	4.8E+06	87411.80d	-1.08	3.3E+06
9	89410.29d	-0.15	1.3E+07	89014.45	0.78	1.0E+07	(87669.51)		4.7E+06	(87272.73)		3.0E+06
10				88843.88d	-0.06	9.8E+06				(87124.16)		2.7E+06

			4-0						4-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	115800.13r	-0.51	1.8E+07				112806.81	-0.23	8.3E+06			
1	115782.40	0.48	2.3E+07	115719.20	-0.98	5.0E+07	112790.30	-0.13	1.1E+07	112728.62	-0.07	2.2E+07
2	115724.82d	0.54	2.5E+07	115621.09r	-0.54	3.2E+07	112736.71d	-0.30	1.2E+07	112634.06	-0.30	1.4E+07
3	115627.11r	-0.48	2.7E+07	115484.11	-0.35	2.7E+07	112646.48d	-0.15	1.3E+07	112503.20*	-0.30	1.2E+07
4	115492.51	-0.26	2.8E+07	115309.27	-0.39	2.4E+07	112520.15d	-0.04	1.4E+07	112336.74d	-0.33	1.1E+07
5	115320.04	-0.23	2.8E+07	115097.67	-0.09	2.2E+07	112358.07	-0.06	1.4E+07	112135.77d	0.15	9.7E+06
6	(115111.17)		2.9E+07	114849.83	-0.20	2.1E+07	112161.09	-0.44	1.4E+07	111900.18	-0.21	9.2E+06
7	114865.49*	-0.22	2.9E+07	114567.26	0.00	2.0E+07	111930.39d	0.07	1.5E+07	111631.94*	0.07	8.9E+06
8	114585.57d	0.37	2.8E+07	114251.50d	0.31	1.9E+07	111666.25	0.08	1.5E+07	111332.33	0.17	8.7E+06
9				(113902.35)		1.8E+07				111002.21d	0.50	8.8E+06
10				113522.48	-0.08	1.8E+07				110641.74*	-0.11	9.1E+06

			4-2						4-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	109933.47d	1.29	2.6E+06				107175.00d	0.07	1.2E+07			
1	109918.17d	0.47	3.1E+06	109855.54*	-0.42	7.4E+06	107162.6	0.13	1.5E+07	107100.91	0.18	3.1E+07
2	109868.45d	0.03	3.4E+06	109765.80	0.03	4.7E+06	107117.23	0.05	1.7E+07	107014.73	0.20	1.9E+07
3	109784.81	0.34	3.5E+06	109641.07	-0.27	4.0E+06	107039.05*	-0.06	1.8E+07	106896.08	0.10	1.6E+07
4	109666.15d	0.01	3.5E+06	109482.83d	-0.19	3.6E+06	106929.01d	0.02	1.9E+07	106745.90d	0.03	1.4E+07
5	109514.22d	-0.03	3.4E+06	109291.93d	0.19	3.2E+06	106787.36d	0.30	2.0E+07	106564.98d	0.43	1.3E+07
6	109329.60	-0.21	3.3E+06	109069.20	0.53	2.9E+06	106614.99	0.57	2.0E+07	106353.84	0.56	1.2E+07
7	109113.15	-0.01	3.2E+06	(108814.71)		2.6E+06	106411.94*	0.36	2.0E+07	106113.01	-0.12	1.1E+07
8	108867.07d	1.41	3.1E+06	(108531.65)		2.3E+06	106176.40d	-0.95	2.1E+07	105844.27	0.93	1.1E+07
9				(108218.48)		2.0E+06				105551.34d	0.32	1.0E+07
10				(107878.36)		1.6E+06				105230.07	-0.31	9.8E+06

			4-5						4-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	102004.93d	0.01	8.5E+06				99590.09d	-0.28	5.9E+06			
1	101996.41d	-0.06	1.1E+07	101934.71*	-0.02	2.4E+07	99583.82d	-0.15	7.9E+06	99521.96	-0.27	1.4E+07
2	101959.32	0.11	1.2E+07	101856.71d	0.15	1.5E+07	99550.55*	-0.12	9.3E+06	99447.84*	-0.18	8.1E+06
3	101893.38	0.20	1.2E+07	101749.99	-0.06	1.3E+07	99490.60	-0.06	1.1E+07	99347.33d	-0.20	6.3E+06
4	101798.76*	-0.13	1.3E+07	101616.14d	0.37	1.1E+07	99404.44d	-0.07	1.2E+07	99221.41d	0.02	5.2E+06
5	101677.93d	0.63	1.3E+07	101454.76	-0.03	1.0E+07	99292.89d	0.27	1.3E+07	99069.92d	-0.19	4.3E+06
6	101528.70d	-0.15	1.3E+07	101267.22*	-0.49	9.3E+06	99155.54d	-0.10	1.4E+07	98893.98d	-0.52	3.7E+06
7	101355.00d	1.84	1.3E+07	101054.31d	-0.40	8.5E+06	98996.03d	1.71	1.5E+07	(98695.87)		3.2E+06
8	101145.94d	-1.50	1.3E+07	(100813.43)		7.6E+06	98810.14d	1.10	1.6E+07	(98475.03)		2.7E+06
9				100558.46d	-0.16	6.8E+06				(98232.56)		2.4E+06
10				100275.73d	-0.78	5.8E+06				(97969.66)		2.3E+06

TableE.4. continue

			4-7						4-8			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	97289.71d	0.45	8.4E+05				95101.70	-0.07	8.1E+06			
1	97285.20	0.38	7.0E+05	97223.61	0.53	3.9E+06	95099.31	-0.04	9.5E+06	95037.62d	0.01	2.6E+07
2	97256.10	0.54	5.0E+05	97153.24d	0.33	3.1E+06	95073.81d	-0.35	9.9E+06	94971.42d	-0.09	1.7E+07
3	(97201.51)		4.2E+05	97058.77	0.39	3.3E+06	95026.33d	0.17	1.0E+07	94882.99d	-0.03	1.6E+07
4	(97123.27)		2.8E+05	96940.44	0.29	3.5E+06	94955.98d	0.02	9.9E+06	94772.69	-0.15	1.5E+07
5	(97021.19)		1.6E+05	96798.53	-0.15	3.8E+06	94863.91d	-0.03	9.8E+06	94641.39d	-0.04	1.5E+07
6	(96896.35)		7.3E+04	96635.64d	0.43	4.0E+06	94751.16	0.02	9.6E+06	94489.57*	-0.43	1.4E+07
7	(96748.97)		1.6E+04	(96450.520)		4.1E+06	94619.05d	1.78	9.3E+06	94318.49d	-0.33	1.4E+07
8	(96579.18)		8.6E+02	96245.19d	0.02	4.1E+06	94462.52d	-1.14	9.0E+06	94129.35d	-0.31	1.3E+07
9				(96020.10)		4.1E+06				93921.70d	-0.14	1.3E+07
10				95776.49	-0.04	4.1E+06				(93698.14)		1.2E+07

			4-9						4-10			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	93028.41*	-0.75	2.0E+06				91072.78d	-0.23	1.6E+06			
1	93028.41*	-0.29	2.6E+06	92965.68*	-1.28	5.8E+06	91074.49d	-0.23	1.8E+06	91012.89	-0.09	5.3E+06
2	93007.82d	0.19	2.8E+06	92904.40	-0.59	3.7E+06	91057.62*	-0.17	1.9E+06	90955.89d	0.75	3.6E+06
3	92965.68*	-0.09	3.1E+06	92822.43*	-0.21	3.2E+06	91021.77d	-0.37	1.8E+06	90879.23d	0.22	3.3E+06
4	92903.91*	0.23	3.3E+06	92720.33d	-0.23	2.9E+06	(90968.44)		1.7E+06	90785.19	-0.13	3.1E+06
5	92822.43*	0.62	3.5E+06	92599.08	-0.22	2.7E+06	(90896.86)		1.6E+06	90674.94d	0.59	3.0E+06
6	92720.33d	-0.75	3.7E+06	92459.70d	-0.24	2.5E+06	(90808.67)		1.4E+06	90546.93d	-0.60	3.0E+06
7	92601.16d	-0.09	4.0E+06	(92302.80)		2.4E+06	(90703.15)		1.2E+06	90405.28d	0.58	2.9E+06
8	92464.12d	0.41	4.2E+06	(92129.70)		2.3E+06	(90582.18)		1.0E+06	(90248.17)		2.7E+06
9				(91940.42)		2.2E+06				90076.89d	-0.45	2.6E+06
10				(91736.30)		2.1E+06				(89893.65)		2.4E+06

			4-11						4-12			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	89236.38	0.28	6.7E+06				87522.28d	0.18	3.8E+06			
1	89239.90	-0.07	8.0E+06	89178.48d	0.25	2.0E+07	87528.54	0.35	4.6E+06	87466.61	0.16	1.1E+07
2	89227.05d	-0.26	8.5E+06	89124.62	-0.04	1.3E+07	87519.56d	-0.42	5.0E+06	87417.21d	-0.12	6.9E+06
3	89198.23	0.09	8.7E+06	89054.99	-0.02	1.2E+07	87498.02	0.61	5.2E+06	87354.26d	-0.02	5.9E+06
4	89153.16	0.15	8.8E+06	88969.79d	-0.10	1.1E+07	87461.59	0.35	5.3E+06	87278.05	-0.07	5.3E+06
5	89092.54	0.26	8.6E+06	88869.87	0.10	1.0E+07	87411.41	-0.08	5.3E+06	87188.98	0.00	4.8E+06
6	89016.42d	-0.17	8.4E+06	88755.49d	0.04	9.4E+06	87349.31	-0.02	5.2E+06	87089.29d	1.10	4.4E+06
7	88926.28d	-0.04	8.1E+06	88627.78d	-0.78	8.8E+06	87273.32d	-1.11	5.1E+06	86976.76d	0.78	4.0E+06
8	(88822.16)		7.9E+06	88488.15*	0.00	8.3E+06	87187.97d	-0.12	4.9E+06	86853.31	-0.77	3.5E+06
9				(88336.41)		7.7E+06				86722.47	0.21	3.1E+06
10				88174.19d	0.32	7.1E+06				86582.14d	0.29	2.7E+06

			5-0						5-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	116804.53	0.49	1.6E+07				113810.01	-0.43	2.4E+06			
1	116783.55*	1.06	1.9E+07	116723.62*	-1.20	4.8E+07	113791.09d	0.09	2.9E+06	113733.04	-0.29	7.5E+06
2	116720.41	-0.28	2.1E+07	116625.22	0.19	3.1E+07	113733.81	0.39	3.0E+06	113637.32*	-0.44	5.0E+06
3	116618.21	-0.42	2.1E+07	116484.68	-0.35	2.8E+07	113637.32*	-0.35	3.0E+06	113503.87*	-0.20	4.7E+06
4	116475.85	-1.26	2.0E+07	116305.71	-0.35	2.7E+07	113503.87*	-0.66	2.9E+06	113333.61d	0.13	4.7E+06
5	116296.60	-0.29	1.9E+07	116088.46	-0.34	2.6E+07	(113334.75)		2.6E+06	113126.59	-0.07	4.9E+06
6	116079.32	-0.11	1.6E+07	115833.80	-0.57	2.6E+07	113128.62d	-1.17	1.9E+06	112885.50d	0.77	5.4E+06
7	115828.56	-0.60	1.1E+07	(115543.88)		2.7E+07	(112893.77)		8.0E+05	112608.36	-0.13	6.4E+06
8	(115553.11)		3.2E+06	115219.47	0.02	3.0E+07	(112634.09)		1.0E+05	112300.15	-0.28	8.1E+06
9				114865.49*	-0.31	3.5E+07				(111965.16)		1.2E+07
10				114490.44d	-0.03	4.4E+07				111610.52	0.76	1.9E+07

			5-2						5-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	110935.73	0.15	6.4E+06				108178.14	-0.19	5.2E+06			
1	110918.47d	0.20	7.7E+06	110860.73	0.13	1.8E+07	108162.94	-0.10	6.3E+06	108105.35d	-0.02	1.5E+07
2	110864.97	0.14	8.4E+06	110769.18*	0.01	1.2E+07	108113.58	-0.01	6.8E+06	108018.07d	0.14	1.0E+07
3	110775.04d	-0.47	8.6E+06	110641.74*	-0.17	1.0E+07	108030.09d	-0.06	6.9E+06	107896.48d	-0.07	9.1E+06
4	110650.40d	-0.08	8.7E+06	110479.43	0.00	9.2E+06	107913.40	0.07	6.8E+06	107742.26d	-0.02	8.8E+06
5	110490.93	0.06	8.5E+06	110282.83	0.05	8.5E+06	107764.39*	0.71	6.4E+06	107556.01*	0.42	8.9E+06
6	110299.36	1.29 + N I	8.0E+06	110052.96	-0.05	8.0E+06	107583.24	0.56	5.3E+06	107338.87d	1.25	9.3E+06
7	(110076.61)		7.0E+06	109790.80d	-0.53	7.5E+06	107375.16d	0.13	3.3E+06	107090.21	0.46	1.0E+07
8	(109833.57)		4.8E+06	109499.04	-0.87	7.0E+06	(107145.26)		5.0E+05	106811.28	-0.32	1.2E+07
9				109181.88d	-0.05	6.4E+06				106514.47	0.00	1.6E+07
10				108846.29*	0.02	5.2E+06				106199.22d	0.93	2.4E+07

			5-4						5-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	105535.87d	-0.36	2.1E+06				103008.22d	-0.10	7.9E+06			
1	105522.94	-0.03	2.7E+06	105464.94*	-0.36	5.8E+06	102997.04d	0.00	9.9E+06	102939.42*	0.05	2.2E+07
2	105477.59	0.11	3.0E+06	105381.73	-0.09	3.5E+06	102955.06	-0.02	1.1E+07	102859.75	-0.21	1.4E+07
3	105400.51	0.38	3.2E+06	105266.48d	-0.05	2.8E+06	102884.24	0.02	1.2E+07	102750.60	-0.02	1.2E+07
4	105291.51	0.23	3.4E+06	105120.27d	0.04	2.3E+06	102783.75d	0.52	1.2E+07	102612.16	-0.02	1.1E+07
5	105151.74	0.13	3.7E+06	104943.57	0.05	1.9E+06	102654.22d	0.30	1.2E+07	102445.74	-0.09	1.0E+07
6	104982.75d	-0.41	4.2E+06	104737.80d	-0.30	1.4E+06	102497.24*	0.13	1.2E+07	102251.67	-0.38	9.8E+06
7	104787.66*	-0.98	5.2E+06	(104503.36)		9.0E+05	102316.50	-0.11	1.1E+07	102032.11d	0.78	9.6E+06
8	104575.49d	1.21	7.4E+06	104240.22d	-0.400	3.0E+05	102114.16*	-1.19	7.6E+06	101782.14d	0.45	9.6E+06
9				(103961.45)		1.0E+05				(101522.07)		9.9E+06
10				(103664.59)		1.2E+06				101244.46d	0.04	1.0E+07

			5-7						5-8			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	98292.31d	-0.35	8.0E+06				96105.66d	0.49	2.6E+06			
1	98285.10d	-0.29	1.0E+07	98227.47d	-0.25	2.1E+07	96100.15	0.23	3.8E+06	96042.53d	0.28	5.5E+06
2	98251.77	-0.20	1.2E+07	98155.93	-0.38	1.2E+07	96071.04	0.47	4.8E+06	95975.13	0.22	2.9E+06
3	98192.32	-0.23	1.3E+07	98058.50d	-0.45	1.0E+07	96017.67d	0.47	6.0E+06	95884.33d	0.73	2.1E+06
4	98108.58d	0.97	1.5E+07	97936.31	-0.25	8.3E+06	95940.53	0.23	7.3E+06	95768.99	-0.26	1.5E+06
5	97997.04	-0.77	1.6E+07	97789.55d	-0.17	6.9E+06	95840.54	-0.02	9.1E+06	95631.98d	-0.49	1.1E+06
6	97864.71	0.10	1.9E+07	97619.50	-0.05	5.4E+06	95719.39d	-0.01	1.2E+07	(95474.34)		7.0E+05
7	97712.15d	-0.27	2.4E+07	97426.65*	-0.49	3.7E+06	95579.85d	-0.87	1.6E+07	(95295.44)		3.0E+05
8	97547.06	-0.03	3.3E+07	97212.89d	-0.54	1.9E+06	95431.54d	-0.03	2.4E+07	(95097.91)		1.0E+05
9				(96983.45)		1.0E+05				(94885.19)		1.0E+05
10				96744.32d	-0.12	1.9E+06				94665.43d	-0.62	1.3E+06

TableE.4. continue

			5-9						5-10			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	94031.76d	-0.80	2.1E+06				92076.37*	-0.04	5.5E+06			
1	94028.71*	-0.56	2.2E+06	93971.30	-0.31	7.8E+06	92076.37*	1.08	6.6E+06	92017.40d	-0.22	1.7E+07
2	94003.64d	-0.41	1.9E+06	93907.98d	-0.40	5.7E+06	92054.04	-0.16	7.0E+06	91958.25	-0.29	1.1E+07
3	93957.62d	0.81	1.6E+06	93822.73d	-0.49	5.5E+06	92013.13	-0.05	7.2E+06	91879.60	0.02	9.8E+06
4	(93888.02)		1.2E+06	93716.50d	-0.48	5.5E+06	91952.63	-0.15	7.1E+06	91781.60	-0.13	9.2E+06
5	(93798.43)		8.2E+05	93590.05*	-0.30	5.6E+06	91874.77*	1.29	6.9E+06	91665.39	0.00	8.8E+06
6	(93689.34)		3.5E+05	93444.49d	0.21	5.7E+06	91776.92*	-0.02	6.4E+06	91531.64	-0.23	8.4E+06
7	(93564.70)		8.3E+03	93279.23d	-0.19	5.8E+06	91667.49d	0.89	5.3E+06	91381.28	-0.04	8.1E+06
8	(93431.62)		6.2E+05	93097.63d	-0.33	5.9E+06	91550.72d	0.63	3.1E+06	91216.34	-0.09	7.7E+06
9				92903.91*	0.03	6.1E+06				91041.21d	0.41	7.2E+06
10				92703.69d	-0.52	6.1E+06				(90861.56)		5.9E+06

			5-12						5-13			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	88524.91d	-0.59	2.4E+06				86938.78d	-0.35	2.8E+06			
1	88528.29d	-0.47	2.8E+06	88471.07d	-0.02	7.5E+06	86944.83	0.11	3.4E+06	86887.30d	0.25	8.0E+06
2	88516.34	-0.05	2.9E+06	88420.84	0.11	5.0E+06	86936.61d	-0.42	3.6E+06	86841.69d	0.32	5.1E+06
3	88488.15*	-0.30	2.8E+06	88354.93	0.08	4.4E+06	86916.23	0.12	3.6E+06	86782.74d	0.23	4.3E+06
4	88445.63d	0.05	2.6E+06	88274.28d	-0.25	4.1E+06	86882.81d	0.30	3.6E+06	86711.31	-0.15	3.8E+06
5	(88388.11)		2.5E+06	88180.07d	0.05	3.8E+06	86835.06d	-1.69	3.4E+06	86629.22d	0.56	3.4E+06
6	(88317.69)		2.1E+06	88072.49	-0.04	3.5E+06	86780.10	-0.16	3.2E+06	86535.03	-0.17	3.0E+06
7	(88237.88)		1.7E+06	87952.26d	-0.34	3.2E+06	(86204.55)		1.6E+06	86430.91d	-0.70	2.6E+06
8	(88155.99)		9.5E+05	87822.26	-0.08	2.8E+06	86654.20d	0.66	1.9E+06	86319.82	-0.06	2.1E+06
9				87686.71d	1.00	2.2E+06				(86204.55)		1.6E+06
10				(87549.76)		1.4E+06				(86091.85)		1.0E+06

			6-0						6-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	117675.26r	-0.30	1.8E+07				(114681.96)		7.0E+05			
1	117648.07r	-0.16	2.3E+07	117599.19	-0.27	4.0E+07	114656.60d	-0.14	1.0E+06	114607.97	-0.06	1.2E+06
2	117577.54r	-0.36	2.5E+07	117496.25r	-0.30	2.2E+07	114590.35	-0.28	1.2E+06	(114509.28)		5.0E+05
3	117464.78	-0.09	2.6E+07	117350.37r	-0.40	1.7E+07	114483.78d	-0.13	1.4E+06	114369.14d	-0.67	3.0E+05
4	117309.72r	0.03	2.6E+07	117162.83r	-0.44	1.5E+07	114336.62	-0.49	1.5E+06	(114190.69)		2.0E+05
5	117112.34r	-0.41	2.6E+07	116934.57	-0.47	1.3E+07	114149.49	-1.12	1.6E+06	(113972.90)		2.0E+05
6	116873.78	-0.04	2.6E+07	116666.01d	-0.94	1.2E+07	113923.94d	-0.24	1.7E+06	(113717.31)		2.0E+05
7	116594.04	0.39	2.5E+07	(116359.74)		1.2E+07	113658.05	-0.21	1.7E+06	113424.18	-0.17	3.0E+05
8	116274.31	-0.75	2.3E+07	116013.47d	-0.37	1.1E+07	113355.26d	-0.78	1.8E+06	(113094.82)		4.0E+05
9	115913.59	0.00	2.1E+07	115631.05	0.76	1.1E+07	(113012.95)		1.9E+06	(112729.65)		4.0E+05
10				115211.70d	-0.72	1.1E+07				(112331.71)		6.0E+05

			6-2						6-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	111807.85d	0.75	8.9E+06				109049.84	-0.01	2.1E+06			
1	111784.14	0.13	1.1E+07	111735.68*	0.44	2.1E+07	109028.76	-0.02	3.0E+06	108980.09	0.08	3.6E+06
2	111722.12*	0.08	1.3E+07	111640.83d	0.14	1.2E+07	108970.85d	0.05	3.5E+06	108889.45	0.00	1.6E+06
3	111621.59	-0.16	1.3E+07	(111507.65)		9.5E+06	108876.41d	0.02	3.9E+06	108763.44*	1.15	1.0E+06
4	111483.04d	-0.02	1.3E+07	111336.49d	-0.15	8.0E+06	108745.88	-0.03	4.1E+06	(108599.49)		8.1E+05
5	111306.63d	-0.10	1.3E+07	111129.00	-0.02	7.2E+06	108578.88*	-0.66	4.3E+06	(108401.83)		7.0E+05
6	111092.82	0.36	1.3E+07	110885.52d	-0.07	6.6E+06	108377.70d	0.63	4.4E+06	(108170.20)		6.8E+05
7	110840.94d	-0.16	1.2E+07	110609.07d	1.88	6.1E+06	(108139.52)		4.5E+06	(107905.61)		7.3E+05
8	110554.29d	-1.23	1.1E+07	(110294.30)		5.8E+06	107867.22*	0.01	4.6E+06	(107605.99)		8.2E+05
9	110229.46d	-0.26	1.0E+07	(109946.42)		5.4E+06	107560.91*	-1.34	4.6E+06	(107278.96)		9.8E+05
10				109569.16	0.94	5.1E+06				(106920.24)		1.2E+06

			6-4						6-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	106409.18d	1.43	5.4E+06				103879.81	-0.03	4.3E+06			
1	106388.69	-0.02	6.6E+06	106339.88d	-0.06	1.4E+07	103863.14d	0.36	6.0E+06	103812.91*	-1.10	7.9E+06
2	106334.86d	0.17	7.1E+06	106253.50	0.16	8.6E+06	103812.91*	0.08	7.0E+06	103731.16*	-0.32	3.7E+06
3	106246.46	0.09	7.3E+06	106131.80d	-0.47	7.1E+06	103731.16*	0.70	7.6E+06	103616.07*	-0.29	2.4E+06
4	106124.76d	0.90	7.3E+06	105977.38d	-0.06	6.2E+06	103616.07*	0.26	7.9E+06	103469.43*	0.04	1.8E+06
5	105967.75	0.28	7.1E+06	105789.75d	-0.01	5.5E+06	103469.43*	-0.35	8.2E+06	103290.83*	-1.24	1.5E+06
6	105776.33d	-1.22	6.8E+06	105570.49	-0.19	5.0E+06	103290.83*	-0.67	8.4E+06	103084.30	-0.33	1.4E+06
7	(105553.13)		6.4E+06	105320.26d	1.04	4.5E+06	(103081.10)		8.5E+06	(102847.19)		1.4E+06
8	(105296.23)		5.9E+06	105035.68d	0.67	4.1E+06	102837.63d	0.33	8.6E+06	102575.49d	-0.59	1.4E+06
9	105008.72	-0.52	5.3E+06	104726.33d	0.39	3.6E+06	102569.80d	-0.06	8.6E+06	102286.88d	0.32	1.5E+06
10				104386.55	0.01	3.1E+06				101965.73d	-0.64	1.7E+06

			6-6						6-7			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	101465.31d	0.02	1.9E+06				99164.05	-0.13	6.0E+06			
1	101450.16d	-0.12	2.1E+06	101401.50d	-0.01	7.4E+06	99150.90d	-0.23	7.9E+06	99103.45d	1.09	1.3E+07
2	101404.30	0.01	2.0E+06	101322.94d	0.00	5.4E+06	99108.89d	-0.29	9.0E+06	99027.65d	-0.18	7.0E+06
3	101327.97d	0.03	2.0E+06	101213.70	-0.14	5.0E+06	99038.58d	-0.21	9.7E+06	98924.41d	-0.28	5.1E+06
4	101220.32d	-1.11	1.9E+06	101074.62d	-0.39	4.8E+06	98939.99	-0.20	1.0E+07	98793.63	-0.14	4.1E+06
5	101085.38d	0.28	1.8E+06	100907.47d	0.08	4.5E+06	98813.70d	0.03	1.1E+07	98636.09d	0.13	3.5E+06
6	(100918.29)		1.6E+06	100711.35	-0.07	4.1E+06	98659.09d	0.09	1.1E+07	98451.95d	-0.18	3.1E+06
7	(100722.26)		1.4E+06	100488.24	-0.11	3.6E+06	98475.90d	-1.01	1.1E+07	98242.69d	-0.31	2.8E+06
8	(100498.90)		1.2E+06	(100237.68)		3.1E+06	98270.28d	1.24	1.1E+07	98007.37d	-0.45	2.6E+06
9	(100243.79)		1.0E+06	99960.20	-0.30	2.6E+06	98032.94d	1.60	1.1E+07	97749.14d	1.10	2.4E+06
10				99659.10d	-0.43	2.0E+06				97466.15d	-0.24	2.2E+06

			6-8						6-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(96976.69)		7.3E+03				94903.99	-0.09	3.3E+06			
1	(96965.66)		1.7E+04	96917.88d	0.99	1.4E+06	94895.38d	0.37	3.5E+06	94846.12	-0.12	1.5E+07
2	(96927.78)		8.1E+04	96846.66d	0.23	1.9E+06	94861.06d	-0.19	3.4E+06	94779.80	-0.10	1.2E+07
3	(96863.44)		1.5E+05	96748.05d	-1.29	2.6E+06	94802.99d	-0.06	3.5E+06	94688.79d	-0.16	1.2E+07
4	(96772.88)		2.2E+05	96627.04d	0.58	3.1E+06	94720.61	0.01	3.6E+06	94574.03d	-0.15	1.2E+07
5	(96656.42)		3.0E+05	96479.10d	0.39	3.3E+06	94614.73	0.44	3.7E+06	94436.66d	0.08	1.2E+07
6	(96513.79)		4.1E+05	96307.13d	0.21	3.2E+06	(94483.73)		3.7E+06	94276.51	-0.35	1.1E+07
7	(96345.21)		5.7E+05	96111.29d	-0.01	3.0E+06	94328.49d	-0.70	3.7E+06	94095.36	0.08	1.0E+07
8	(96153.52)		8.0E+05	95892.71d	-0.75	2.8E+06	94153.83d	0.26	3.5E+06	93891.60d	-0.75	9.5E+06
9	(95933.08)		1.1E+06	95649.93d	0.15	2.4E+06	93952.08d	0.41	3.2E+06	93667.54*	-0.82	8.8E+06
10				(95388.00)		2.1E+06				(93426.16)		8.1E+06

TableE.4. continue

			6-11						6-12			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	91111.32d	0.30	3.4E+06				89396.93	-0.09	2.4E+06			
1	91106.43	0.15	4.0E+06	91057.62*	0.11	9.6E+06	89394.14d	-0.37	3.0E+06	89345.78	0.05	6.8E+06
2	91081.32d	0.39	4.2E+06	90999.58d	0.00	6.1E+06	89373.51d	-0.09	3.3E+06	89291.86	-0.40	4.2E+06
3	91035.43d	0.01	4.1E+06	90921.93	0.61	5.3E+06	89334.22d	-0.47	3.5E+06	89220.68d	0.09	3.6E+06
4	90969.63	-0.30	3.9E+06	90823.46	-0.05	4.9E+06	89277.71d	-0.45	3.6E+06	89131.78	0.04	3.2E+06
5	(90884.76)		3.6E+06	90706.86d	-0.19	4.6E+06	89204.45d	0.48	3.7E+06	89026.49d	0.23	3.0E+06
6	90780.02d	0.78	3.2E+06	90572.46	0.09	4.3E+06	89111.03d	-0.95	3.8E+06	88904.60d	-0.51	2.8E+06
7	90654.12*	-0.13	2.8E+06	(90420.34)		4.1E+06	(89002.37)		3.8E+06	(88388.11)		2.4E+06
8	90511.94*	-0.09	2.3E+06	90250.84	0.03	3.8E+06	88877.53d	-0.41	3.7E+06	(88317.59)		2.1E+06
9	(90347.65)		1.8E+06	90064.36d	0.01	3.5E+06	88733.94d	0.44	3.6E+06	(88450.20)		2.4E+06
10				(89863.73)		3.1E+06				(88271.71)		2.3E+06

			6-14						6-16			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	86358.65d	0.57	9.0E+05				83887.30d	-0.65	6.0E+05			
1	86360.74d	0.39	1.1E+06	86311.84	0.26	2.8E+06	83895.28d	-0.50	8.0E+05	83847.21	0.20	2.0E+06
2	86348.74d	-0.35	1.1E+06	86267.65	-0.10	1.7E+06	83895.28d	-0.30	9.0E+05	83814.29d	0.06	1.4E+06
3	86325.28d	0.64	1.1E+06	86210.30	-0.24	1.4E+06	83887.30d	-0.43	1.0E+06	83773.62	-0.01	1.3E+06
4	86287.25	-0.03	1.0E+06	86140.11d	-0.75	1.2E+06	83871.76d	-0.91	1.1E+06	83726.29	0.04	1.4E+06
5	(86237.16)		9.0E+05	(86059.45)		1.0E+06	83850.92	0.54	1.3E+06	83672.47	-0.21	1.5E+06
6	(86174.05)		7.0E+05	(85967.18)		8.0E+05	(83820.83)		1.5E+06	83613.86	-0.10	1.7E+06
7	(86098.30)		6.0E+05	(85864.39)		6.0E+05	83785.40d	0.85	1.9E+06	83550.67d	0.03	2.0E+06
8	(86012.18)		4.0E+05	(85750.96)		4.0E+05	(83743.62)		2.3E+06	83482.06d	-0.34	2.3E+06
9	(85911.45)		2.0E+05	(85628.15)		2.0E+05	83694.07	-0.35	2.9E+06	83411.12d	0.00	2.7E+06
10				(85498.19)		1.0E+05				83338.99d	0.09	3.4E+06

			7-0						7-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	118371.04	-0.26	9.7E+06				112503.20*	0.36	5.7E+06			
1	118338.55	-0.22	1.2E+07	118297.42	-0.26	2.8E+07	112474.77d	0.22	6.8E+06	112433.92	0.46	1.6E+07
2	118260.33	0.04	1.2E+07	118191.94r	-0.35	1.9E+07	112404.42	-0.01	7.2E+06	112336.74d	0.31	1.1E+07
3	118134.75r	-0.15	1.2E+07	118041.08r	-0.23	1.6E+07	112291.90	0.12	7.1E+06	112197.96	-0.23	9.1E+06
4	117963.48r	-0.34	1.1E+07	117845.18r	-0.48	1.5E+07	112135.77d	-1.42	6.9E+06	112018.87	-0.16	8.4E+06
5	117746.37	0.25	7.7E+06	117604.90r	-0.17	1.5E+07	111939.74d	-0.36	9.2E+06	111798.91	-0.14	7.9E+06
6	117483.07	-0.16	6.3E+06	117320.65	-0.43	1.5E+07	111702.03	0.16	3.8E+06	111540.19d	0.47	7.5E+06
7	(117181.29)		1.0E+05	116993.09	-0.02	1.6E+07	(111428.74)		3.0E+05	(111240.56)		3.5E+06
8	116774.66	-0.92	1.9E+07	116623.01d	-0.24	1.7E+07	111056.75*	0.71	6.6E+06	110903.29d	-0.42	8.9E+06
9				116218.93d	1.00	2.7E+07				(110534.06)		1.3E+07
10										(110068.74)		8.0E+05

			7-4						7-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	107103.44	-0.05	4.7E+06				102161.08	0.05	3.9E+06			
1	107079.16d	-0.09	5.8E+06	107039.05*	0.89	1.3E+07	102140.88	0.06	4.9E+06	102099.64	-0.09	1.1E+07
2	107016.76d	-0.32	6.1E+06	106949.21*	0.13	8.5E+06	102086.63	-0.05	5.3E+06	102018.75	0.07	6.7E+06
3	106916.40	0.00	6.3E+06	106822.98	0.17	7.2E+06	101998.01	0.04	5.5E+06	101903.32d	-1.06	5.5E+06
4	106778.18d	0.19	6.0E+06	106660.94d	1.11	6.5E+06	101875.57d	0.01	5.4E+06	101757.20d	-0.20	4.7E+06
5	106602.16d	1.32	4.9E+06	106460.68d	0.89	6.0E+06	101718.78d	0.31	3.0E+06	101577.56d	0.14	4.1E+06
6	(106386.96)		4.5E+06	106224.72d	-0.09	5.5E+06	(101527.70)		5.9E+06	101365.08	-0.47	3.4E+06
7	(106140.77)		1.8E+06	105953.61d	1.02	5.5E+06	101309.85	-0.05	6.5E+06	(101121.72)		5.0E+06
8	105798.36d	1.61	3.9E+06	(105644.42)		4.7E+06	(100999.42)		8.0E+05	100846.75d	-0.34	1.3E+06
9				(105313.58)		4.3E+06				(100548.14)		1.0E+05
10				(104887.06)		7.0E+05				(100160.04)		2.1E+06

			7-8						7-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	97672.36	-0.07	2.7E+06				95599.94d	0.12	2.5E+06			
1	97655.96d	-0.24	3.3E+06	97615.36d	0.25	7.3E+06	95585.16d	-0.40	3.5E+06	95544.34*	-0.12	5.6E+06
2	97609.78d	-0.39	3.6E+06	97543.15d	0.98	4.4E+06	95544.34*	0.70	4.3E+06	95475.54d	-0.10	3.1E+06
3	97534.15d	0.68	3.7E+06	97440.60d	0.72	3.5E+06	95472.52d	-0.57	5.1E+06	95379.32d	-0.17	2.3E+06
4	97426.65*	-0.36	3.9E+06	97309.15	0.30	2.9E+06	95374.08	-0.65	6.2E+06	95257.01d	0.44	1.7E+06
5	97289.71d	-0.08	2.8E+06	97148.53	-0.21	2.1E+06	(95247.69)		1.0E+07	(95106.61)		1.3E+06
6	97122.18d	-1.02	5.7E+06	(96961.05)		1.4E+06	95093.43	0.29	9.9E+06	(94930.99)		9.0E+05
7	(96932.85)		1.3E+07	(96744.67)		1.1E+06	94917.17d	0.34	2.0E+07	(94728.65)		1.0E+05
8	(96654.04)		6.0E+05	(96501.71)		1.0E+05	(94654.09)		1.0E+05	(94501.76)		1.0E+05
9				96237.35d	-0.07	5.3E+06				(94256.00)		1.8E+06
10				(95888.52)		8.7E+06				93926.271	-0.41	8.8E+06

			7-10						7-11			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(93643.67)		6.6E+05				91806.61	-0.15	2.6E+06			
1	(93631.57)		5.8E+05	93590.05*	-0.44	2.9E+06	91797.72d	0.90	3.0E+06	91755.84	0.11	7.9E+06
2	(93593.80)		4.1E+05	93525.68d	-0.12	2.2E+06	91763.18d	-0.14	3.2E+06	91694.63d	-0.70	5.3E+06
3	(93529.45)		2.2E+05	93434.57d	-1.29	2.1E+06	91705.40	-0.05	3.2E+06	91611.93d	0.07	4.7E+06
4	(93439.49)		6.9E+04	93320.72d	-0.61	2.2E+06	91624.71d	0.65	3.0E+06	91505.68d	-0.22	4.4E+06
5	(93322.71)		2.1E+04	(93181.66)		2.1E+06	(91518.13)		3.7E+06	91376.73*	-0.35	4.2E+06
6	(93180.73)		3.4E+05	(93018.58)		2.1E+06	91389.19d	0.54	1.9E+06	91226.89d	0.39	4.0E+06
7	93018.92d	0.19	3.4E+06	(92830.55)		9.0E+05	(91241.89)		2.0E+05	91053.66d	-0.05	3.0E+06
8	(92772.56)		1.3E+06	92621.23d	1.00	2.3E+06	(91012.54)		2.2E+06	(90860.21)		3.6E+06
9				92392.81	-0.11	3.4E+06				(90651.99)		3.0E+06
10				(92084.03)		1.0E+05				(90364.25)		1.3E+06

			7-13						7-16			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	88506.17d	-0.22	1.9E+06				84584.11d	0.42	5.2E+05			
1	88501.68d	0.68	2.2E+06	88460.29d	0.38	5.8E+06	84586.31d	-0.01	6.3E+05	84545.38d	0.15	1.7E+06
2	88476.16d	-0.47	2.3E+06	88408.66	0.03	3.8E+06	84577.65d	-0.32	7.0E+05	84510.67d	0.70	1.3E+06
3	88432.64	0.26	2.2E+06	88339.00d	0.21	3.2E+06	84557.46	-0.30	7.8E+05	84463.85d	-0.32	1.4E+06
4	(88369.22)		1.9E+06	88251.01	-0.05	2.9E+06	(84526.80)		8.7E+05	84408.55	-0.10	1.6E+06
5	(88285.98)		1.0E+06	88145.76d	0.83	2.6E+06	(84483.75)		2.2E+05	84342.77d	0.07	1.9E+06
6	(88184.06)		1.3E+06	88022.80d	0.89	2.3E+06	(84430.24)		1.2E+06	(84268.09)		2.3E+06
7	(88069.01)		5.0E+05	87880.57d	-0.26	3.6E+06	(84372.19)		9.0E+05	(84184.01)		4.8E+06
8	(87876.01)		8.0E+05	(87723.68)		1.3E+06				(84091.81)		2.9E+06
9				(87556.68)		5.0E+05				(83998.76)		2.3E+06
10				(87314.32)		3.0E+05				(83839.43)		3.0E+06

TableE.4. continue

			7-17						7-18			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	83588.55d	0.05	3.7E+06				82773.10	-0.09	3.2E+06			
1	83594.37d	0.05	4.5E+06	83553.26	0.03	1.1E+07	82782.58	-0.02	4.1E+06	82741.45	-0.05	9.4E+06
2	83592.28d	-0.11	5.1E+06	83524.37	-0.03	7.8E+06	82787.82*	-0.02	4.8E+06	82719.75	-0.09	6.3E+06
3	83582.16	0.39	5.7E+06	83487.77d	-0.41	7.5E+06	82787.82*	-0.28	5.7E+06	82694.65d	0.14	5.9E+06
4	83563.53	-0.11	6.4E+06	83445.36	-0.12	7.8E+06	82784.80	0.23	6.8E+06	82666.69	0.28	6.1E+06
5	83536.74d	-0.05	7.7E+06	83396.37d	0.63	8.5E+06	82776.10d	-0.10	8.8E+06	82635.10d	-0.05	6.5E+06
6	(83502.86)		7.8E+06	83341.28	0.57	9.3E+06	82765.31d	0.69	1.0E+07	82602.47	0.00	7.5E+06
7	83468.08	0.09	6.5E+06	83279.54*	-0.27	7.5E+06	82756.25	0.11	1.2E+07	82568.81d	0.85	9.5E+06
8	(83367.01)		8.5E+06	83214.69d	0.11	1.3E+07	82687.07d	0.71	1.5E+07	82533.50	-0.54	1.2E+07
9				83151.86d	0.02	1.2E+07				82506.86*	-0.32	1.5E+07
10				(83027.17)		1.7E+07				82424.05d	0.284	1.9E+07

			8-0						8-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	118761.08	-0.52	2.6E+06				(112893.14)		1.6E+06			
1	118713.57	-0.63	2.9E+06	118695.00	-0.49	7.6E+06	112849.52d	-0.46	1.8E+06	112830.89d	-0.38	4.3E+06
2	118611.44d	-0.82	2.5E+06	118581.96	-0.63	4.5E+06	112756.78	0.38	1.7E+06	(112726.73)		2.5E+06
3	(118454.71)		2.0E+06	118415.88d	-0.86	3.4E+06	(112611.59)		1.4E+06	112573.81d	0.19	1.8E+06
4	(118240.82)		1.4E+06	118197.53	-0.10	2.6E+06	(112414.19)		1.1E+06	(112371.00)		1.2E+06
5	117970.52	-0.42	9.0E+05	117924.36	-0.52	1.9E+06	(112164.92)		9.0E+05	(112118.86)		8.0E+05
6	(117646.27)		6.0E+05	117597.45	-0.63	1.4E+06	(111864.91)		7.0E+05	(111816.72)		5.0E+05
7				117218.03d	0.10	1.0E+06				(111465.38)		3.0E+05
8				(116786.29)		1.8E+06				(111066.75)		3.0E+05

			8-4						8-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(107493.79)		1.3E+06				102552.41d	1.08	1.1E+06			
1	(107454.48)		1.4E+06	107436.13	0.16	3.7E+06	102515.22d	-1.03	1.2E+06	102497.24*	-0.30	3.3E+06
2	107368.96d	-0.09	1.3E+06	107338.87d	-0.51	2.2E+06	102437.95	-0.70	1.0E+06	102408.93d	-0.05	2.0E+06
3	107237.02	0.81	1.0E+06	107198.26	0.02	1.6E+06	(102317.78)		8.0E+05	(102279.81)		1.5E+06
4	107055.88	0.89	7.0E+05	107011.76*	-0.04	1.2E+06	(102152.56)		5.0E+05	(102109.37)		1.1E+06
5	(106825.66)		4.0E+05	(106779.60)		8.0E+05	(101943.29)		3.0E+05	(101897.23)		8.0E+05
6	(106550.00)		3.0E+05	(106501.81)		6.0E+05	(101690.74)		2.0E+05	(101642.55)		6.0E+05
7				(106177.41)		4.0E+05				(101346.54)		4.0E+05
8				(105807.46)		3.0E+05				(101010.13)		3.0E+05

			8-18						8-19			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	83163.18	-0.31	7.0E+06				82548.15d	0.38	2.2E+07			
1	83157.74	-0.28	7.6E+06	83139.20*	-0.11	2.3E+07	82546.28	-0.19	2.6E+07	82528.18d	0.42	6.9E+07
2	83139.20*	-0.61	6.9E+06	83109.99	-0.14	1.6E+07	82537.05d	0.40	2.8E+07	82506.86*	-0.12	4.7E+07
3	83107.91d	0.00	5.5E+06	83070.30d	0.36	1.4E+07	82517.07*	-0.36	2.7E+07	82478.95d	-0.51	4.4E+07
4	83060.23d	-1.34	3.9E+06	83017.98d	-0.40	1.2E+07	82488.79	0.56	2.5E+07	82445.05	0.01	4.4E+07
5	83001.24d	0.22	2.4E+06	82953.43d	-1.53	1.0E+07	82449.52d	0.10	2.3E+07	82403.26*	-0.10	4.4E+07
6	(82927.66)		1.1E+06	82879.31d	-0.16	7.8E+06	82403.26*	0.48	2.0E+07	82355.31d	0.72	4.5E+07
7				82792.32d	-0.47	5.6E+06				(82300.26)		4.6E+07
8				82697.19	0.12	3.6E+06				82244.16d	1.64	5.0E+07

			8-20						8-21			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	82156.68	0.26	3.1E+07				82014.93d	0.15	2.3E+06			
1	82160.70*	0.52	4.2E+07	82141.53d	0.06	8.7E+07	82025.89	0.69	3.0E+06	82007.06	0.57	3.6E+06
2	82160.70*	0.05	5.2E+07	82131.08d	0.10	6.1E+07						
3	82157.64d	0.57	6.5E+07	82119.09	-0.01	6.2E+07						
4	82148.45d	-0.69	8.1E+07	82105.92*	-0.03	7.1E+07						
5	82138.13d	-0.04	1.0E+08	82092.18d	0.07	8.4E+07						

			9-0						9-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	118842.81d	-0.51	1.4E+06				112974.96	0.10	1.6E+06			
1	(118792.73)		1.1E+06	118778.66	0.01	4.4E+06	112928.46d	-0.05	4.1E+06	112915.25d	0.82	2.5E+06
2	118685.06	0.62	2.9E+06	118664.09	-0.22	3.0E+06	112828.70d	0.12	1.0E+05	(112808.45)		1.0E+06
3	118523.88	-0.23	2.6E+06	118495.18	-0.09	3.0E+06	112681.33d	0.34	7.0E+05	(112652.15)		1.0E+05
4	118307.47d	-0.10	2.2E+06	118269.91	0.10	1.3E+06	112480.28d	-0.66	9.0E+05	112443.85d	0.67	3.7E+06
5	118034.22d	-0.97	1.6E+06	117993.96	-0.32	1.6E+06	112229.09d	-0.08	8.0E+05	(112188.26)		2.0E+06
6	(117709.87)		1.0E+06	117663.53d	-1.30	1.5E+06	(111928.51)		6.0E+05	111883.87d	0.40	1.3E+06
7				117282.65d	0.47	1.3E+06				111529.17d	-0.46	9.0E+05
8				116849.34	-0.55	1.1E+06				(111130.35)		6.0E+05

			9-18						9-19			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	83245.21	0.00	2.8E+06				(92629.49)		1.6E+06			
1	83237.33d	0.78	3.6E+06	83222.32	-0.15	8.1E+06	82624.19	-0.81	3.4E+06	82609.86d	-1.06	3.0E+06
2	83212.05d	0.06	3.7E+06	83191.62	-0.24	5.5E+06	82609.86d		3.7E+06	82588.34d	-0.36	2.3E+06
3	83177.46d	0.15	4.7E+06	83148.46d	-0.01	4.1E+06	82586.72d	-0.11	7.5E+06	82557.53d	-0.46	2.3E+06
4	83128.37	0.05	4.7E+06	83090.95d	0.39	7.7E+06	82555.82	0.84	1.1E+07	82517.07*	-0.15	5.7E+06
5	83064.63d	-0.64	3.9E+06	83022.80d	-1.56	8.5E+06	82513.62	-0.05	1.4E+07	82472.81d	0.05	9.3E+06
6	(82991.26)		2.4E+06	82946.17	-0.05	8.8E+06	82466.77d	0.39	1.5E+07	82420.99d	-0.35	1.4E+07
7				82857.12	0.09	8.0E+06				82364.10*	-0.41	1.9E+07
8				82760.75	0.08	6.1E+06				(82306.12)		2.3E+07

TableE.4. fin

			9-20						**9-21**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	82239.79*	1.65	1.1E+07				82096.51d	0.01	3.8E+07			
1	(82238.71)		1.6E+06	82224.63d	0.00	5.9E+07	82104.49	0.76	1.6E+07	82090.25	0.60	1.1E+08
2	82231.85d	-0.98	2.7E+07	82212.71	0.01	4.8E+07						
3	82226.31d	-0.16	1.3E+07	82197.50	-0.14	7.0E+07						
4	82216.55d	0.66	6.6E+06	82177.89	-0.24	1.1E+07						
5	82202.77*	0.35	4.2E+06	82162.25	0.74	2.2E+07						

			10-10						**10-11**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(94188.49)		2.2E+05				(92351.58)		8.9E+04			
1	(94155.36)		2.3E+05	94146.13d	-0.09	8.0E+05	(92320.61)		1.2E+05	(92311.47)		2.0E+05
2	(94086.47)		2.3E+05	(94070.62)		6.0E+05	(92255.99)		1.0E+05	(92240.14)		2.0E+05
3	(93981.69)		2.2E+05	93959.67	0.02	6.0E+05	(92157.69)		1.9E+05	92135.751	0.10	2.0E+05
4	(93840.64)		3.0E+05	(93814.00)		5.0E+05	(92025.21)		1.0E+05	(91998.57)		2.0E+05
5	(93664.08)		1.0E+05	(93633.90)		4.0E+05	(91859.50)		1.0E+05	(91829.32)		2.0E+05
6				(93419.73)		3.0E+05				(91627.65)		1.0E+05
7				(93171.92)		1.0E+06				(91395.08)		1.0E+05

			10-18						**10-19**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(83318.01)		1.0E+06				(82702.29)		4.3E+04			
1	83305.40d	0.98	1.4E+06	(83297.24)		2.8E+06	(82694.83)		5.9E+02	(82685.69)		4.0E+05
2	83279.57*	-0.97	1.8E+06	(83264.66)		2.0E+06	82677.22	-0.13	1.0E+05	(82661.50)		2.0E+05
3	83240.71d	0.37	2.3E+06	(83218.3)		2.1E+06	82649.80	-0.06	9.0E+05	(82627.82)		1.0E+05
4	83187.16d	1.44	2.6E+06	(83159.08)		2.6E+06	82612.36	-0.02	2.5E+06	(82585.74)		1.0E+05
5	83118.15d	0.58	2.4E+06	83086.88d	-0.51	3.2E+06				(82535.79)		2.0E+05
6				83004.89d	1.27	3.4E+06				(82478.74)		1.1E+06
7				82909.31	-0.02	4.9E+06				(82416.81)		4.1E+06

			10-20						**10-21**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(82310.94)D_α^a		1.0E+07				82169.51d	0.21	5.8E+07			
1	(82308.54)D_α		1.1E+07	(82299.40)D_α		3.2E+07	82173.52	-0.04	6.7E+07	82164.88*	0.46	1.6E+08
2	(82246.65)D_α		1.7E+07	(82285.50)D_α		2.2E+07						
3	(82289.50)D_α		7.1E+06	(82267.46)D_α		1.9E+07						
4	(82273.29)D_α		2.6E+06	(82246.65)D_α		1.7E+07						
5	(82254.72)D_α		1.1E+07	82224.63d	0.09	1.4E+07						

			11-0						**11-18**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(118969.24)		8.2E+05				83370.63d	-0.50	3.0E+05			
1	(118913.32)		1.1E+06				83357.24d	0.10	5.0E+05			
2	(118800.68)		1.1E+06	(118790.23)		1.2E+06	83328.15d	-0.09	7.0E+05	(83317.78)		7.0E+05
3	(118631.28)		1.0E+06	118615.83	-0.03	9.0E+05				83270.09d	1.03	8.0E+05
4				118386.75	0.70	8.0E+05				83208.36d	1.56	1.0E+05
5				(118101.45)		8.0E+05				83131.45	-0.08	1.4E+06

			11-20						**11-21**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	82364.10*	0.04	4.5E+06				82222.40d	-0.02	2.0E+07			
1	82358.02d	-1.28	5.5E+06				82224.63d	0.31	3.1E+07	(82218.17)		7.7E+07
2	82349.06	-0.01	5.6E+06	82338.43	-0.19	8.8E+06						
3	82333.64		5.2E+06	(82318.22)		7.9E+06						
4	(82294.37)		7.4E+06									
5	(82268.68)		7.3E+06									

[a] La raie est Cachée par la Lyman α de l'atome D I.

E.5 Le système $C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v^{'} - v^{''})$.

Table E.5 – *Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système $C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ ($v' - v''$).*

			0-0						0-1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	99425.92d	4.2E+07					96431.66d	1.5E+08				
1	99428.25d	3.6E+07	99364.47d	6.7E+07			96435.94	1.3E+08	96373.87	2.4E+08		
2	99400.50d	3.3E+07	99308.32	6.6E+07	(99246.08)	2.5E+07	96413.62	1.2E+08	96320.09	2.4E+08	96258.91d	8.5E+07
3	99346.06d	3.1E+07	99219.93d	6.6E+07	99130.20d	3.1E+07	96364.41d	1.2E+08	96239.90	2.4E+08	96148.99	1.1E+08
4	99262.25d	2.9E+07	99107.34	6.6E+07	98985.64r	3.4E+07	96289.15d	1.1E+08	96133.87	2.4E+08	96013.57d	1.2E+08
5	99150.90d	2.8E+07	98963.63d	6.6E+07	98815.30	3.6E+07	96187.87	1.1E+08	96001.98	2.4E+08	95853.37d	1.2E+08
6	99009.80d	2.9E+07	98795.38d	6.6E+07	98618.27d	3.7E+07	96061.23	1.0E+08	95845.78	2.4E+08	95669.04	1.3E+08
7	98844.10	3.6E+07	98600.42	6.6E+07	98397.13	3.8E+07	95909.31	1.1E+08	95665.58d	2.4E+08	95461.66d	1.3E+08
8	98653.74d	1.7E+07	98379.61d	6.5E+07	98150.52	3.7E+07	95735.55	8.9E+07	95461.66d	2.4E+08	95231.91d	1.3E+08
9	98438.64d	2.1E+07	98136.64d	6.5E+07	97881.13d	3.0E+07	95537.91	9.0E+07	95236.11	2.4E+08	94980.67	1.3E+08
10			97869.10d	6.5E+07	97591.17	5.1E+07			94989.07	2.4E+08	94711.14	1.4E+08

			0-2						0-3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	93556.71d	2.4E+08					90799.29	2.0E+08				
1	93562.82d	2.1E+08	93500.61	3.6E+08			90807.83	1.8E+08	90745.40	3.0E+08		
2	93544.63	2.0E+08	93451.12	3.6E+08	93389.94	1.2E+08	90793.52	1.7E+08	90699.99	3.0E+08	90638.83	1.0E+08
3	93502.57	1.9E+08	93377.32	3.6E+08	93286.00	1.5E+08	90756.87d	1.7E+08	90632.11d	3.0E+08	(90541.41)	1.2E+08
4	93434.57d	1.8E+08	93279.23d	3.6E+08	93158.53d	1.6E+08	90697.83	1.6E+08	(90542.63)	3.0E+08	90422.19d	1.3E+08
5	93343.94d	1.7E+08	93158.53d	3.6E+08	93009.12	1.7E+08	90616.76d	1.6E+08	90431.13	3.0E+08	90282.37d	1.4E+08
6	93229.11	1.7E+08	93013.77	3.6E+08	92837.25d	1.8E+08	90514.34d	1.5E+08	90299.13	3.0E+08	90122.41d	1.4E+08
7	93091.67	1.5E+08	92847.48	3.6E+08	92644.15	1.9E+08	90390.70	1.4E+08	90146.84d	3.0E+08	89943.28	1.4E+08
8	92935.63d	1.7E+08	92660.55	3.6E+08	92430.66	1.9E+08	90248.13d	1.6E+08	89972.60d	3.0E+08	89742.08d	1.5E+08
9	92753.96	1.6E+08	92453.89	3.6E+08	92197.20	2.1E+08	90086.11d	1.6E+08	89785.34	3.0E+08	89529.63	1.5E+08
10			92225.89d	3.6E+08	91947.41	1.8E+08			89577.77	3.0E+08	89299.97d	1.4E+08

			0-4						0-5			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	88157.27d	1.0E+08					85629.41d	3.2E+07				
1	88167.96d	9.2E+07	88105.51	1.5E+08			85641.89	2.8E+07	85579.39d	4.8E+07		
2	88157.27d	8.8E+07	88063.90d	1.5E+08	88002.55d	5.1E+07	85635.66	2.7E+07	85542.13d	4.8E+07	85481.36d	1.6E+07
3	88126.77d	8.7E+07	88002.55d	1.5E+08	87911.22d	6.0E+07	85610.99d	2.7E+07	85486.31d	4.8E+07	85395.42d	1.9E+07
4	88075.88	8.6E+07	87920.56	1.5E+08	87800.32d	6.4E+07	85567.81d	2.7E+07	85412.66	4.7E+07	85292.37	2.1E+07
5	88004.75d	8.6E+07	87819.25	1.5E+08	87670.46	6.6E+07	85506.83	2.7E+07	85321.39	4.7E+07	85172.94d	2.1E+07
6	87914.57d	8.7E+07	87699.04	1.5E+08	87522.28d	6.7E+07	85428.09d	2.7E+07	85213.00	4.7E+07	85036.24	2.1E+07
7	87804.59	9.2E+07	87560.61	1.5E+08	87356.96	6.7E+07	85333.39d	3.1E+07	85087.83	4.7E+07	84883.94	2.1E+07
8	87674.72d	7.7E+07	87401.20	1.5E+08	87171.68	6.5E+07	85217.21	2.2E+07	84942.25	4.7E+07	84712.44	2.0E+07
9	87532.77	8.2E+07	87232.28d	1.5E+08	86976.76d	5.8E+07	85093.35d	2.5E+07	84791.98d	4.7E+07	84536.80d	1.7E+07
10			87044.18	1.5E+08	86765.81	7.5E+07			84624.50	4.6E+07	84346.64d	2.4E+07

			0-6						1-0			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	83214.69d	6.1E+06					101085.38r*	9.6E+07				
1	83229.22d	5.5E+06	83167.09	9.1E+06			101085.38r*	8.3E+07	101026.41d	1.5E+08		
2	83227.02	5.3E+06	83133.53	9.1E+06	83072.37	2.9E+06	101055.41r	7.6E+07	100965.13r	1.5E+08	100907.47*	5.5E+07
3	83208.36	5.1E+06	83083.75	9.1E+06	82992.93	3.5E+06	100996.49	7.2E+07	100876.16	1.5E+08	100787.00d	6.8E+07
4	83173.31	4.9E+06	83017.98d	9.0E+06	82897.75	3.7E+06	100907.47*	7.0E+07	100755.29d	1.5E+08	100639.84	7.4E+07
5	83122.53	4.7E+06	82936.52	9.0E+06	82787.82d	3.9E+06	100788.90	7.1E+07	100609.32	1.5E+08	100466.04	7.8E+07
6	(83055.34)	4.4E+06	82839.70d	8.9E+06	82663.43	4.0E+06	100638.76	9.7E+07	100433.64d	1.5E+08	100263.77	8.0E+07
7	82973.14	3.2E+06	82728.90	8.8E+06	82525.11	4.2E+06	100469.32	4.2E+07	100230.86d	1.5E+08	100035.59d	7.8E+07
8	82876.58	6.2E+06	82604.34	8.7E+06	82374.81	4.5E+06	100267.23d	4.9E+07	100002.10	1.5E+08	99778.57d	4.6E+07
9	82767.01d	5.2E+06	82466.77d	8.6E+06	82210.10d	6.2E+06	100038.54d	5.2E+07	99748.23d	1.5E+08	99506.16	1.1E+08
10			82315.82d	8.5E+06	82037.70	2.4E+06			99471.13d	1.5E+08	99205.14d	1.0E+08

			1-1						1-2			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	98092.18	1.6E+08					95217.27	4.0E+07				
1	98093.42	1.4E+08	98034.04	2.4E+08			95221.49	3.7E+07	95161.36	5.9E+07		
2	98067.867r	1.3E+08	97978.25	2.4E+08	97918.96	8.4E+07	95200.00*	3.5E+07	95109.61	5.9E+07	95050.85d	1.9E+07
3	98014.68	1.2E+08	97894.57	2.4E+08	97806.69	1.0E+08	95152.70	3.4E+07	95032.21	5.9E+07	94944.64	2.2E+07
4	97933.69d	1.2E+08	97783.97	2.4E+08	97668.25	1.1E+08	95080.01c	3.3E+07	94929.95	5.9E+07	94814.18d	2.3E+07
5	97825.54d	1.1E+08	97646.68d	2.4E+08	97503.62	1.2E+08	94981.69c	3.0E+07	94802.99d	5.9E+07	94659.82d	2.4E+07
6	97688.80d	1.0E+08	(97843.79)	2.4E+08	97314.42	1.2E+08	94857.45	1.5E+07	94652.06d	5.9E+07	94482.35d	2.5E+07
7	97534.15d	1.0E+08	97296.07	2.4E+08	97100.10d	1.3E+08	94717.01	4.4E+07	94478.05	5.9E+07	94284.30d	2.7E+07
8	97348.53	1.0E+08	97084.08	2.4E+08	96860.22	1.2E+08	94549.09c	3.8E+07	94281.19	5.9E+07	94058.10d	4.1E+07
9	97140.24d	9.7E+07	96848.30	2.4E+08	96605.92	1.3E+08	94355.76	3.6E+07	94064.19d	5.9E+07	93822.73d	1.7E+07
10			96590.92	2.4E+08	96324.48	1.4E+08			93827.12	5.9E+07		

			1-3						1-4			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	92459.70d	2.0E+07					89817.70	1.5E+08				
1	92465.99	1.6E+07	92405.91	3.2E+07			89825.79d	1.3E+08	89765.90d	2.3E+08		
2	92448.48d	1.4E+07	92358.22	3.2E+07	92299.34	1.3E+07	89812.48d	1.2E+08	89721.93d	2.3E+08	89663.34d	7.9E+07
3	92407.16	1.3E+07	92287.00	3.2E+07	(92199.50)	1.6E+07	89777.41	1.2E+08	89657.08	2.3E+08	89569.49	9.6E+07
4	92342.86	1.1E+07	92192.65d	3.2E+07	92077.05	1.9E+07	89721.93d	1.1E+08	89570.91d	2.3E+08	89455.06	1.1E+08
5	92254.74	1.0E+07	92076.37d	3.2E+07	91932.97	2.0E+07	89643.06d	1.0E+08	89463.88	2.3E+08	89320.86d	1.1E+08
6	92142.79	9.0E+06	91936.73	3.2E+07	91767.38	2.2E+07	89542.07	6.9E+07	89337.11	2.3E+08	89167.43	1.2E+08
7	92015.75	7.5E+06	91776.92d	3.2E+07	91581.37	2.4E+07	89429.39d	1.2E+08	89191.08d	2.3E+08	88995.14	1.2E+08
8	(91859.81)	7.0E+06	91593.86	3.2E+07	(91371.00)	2.6E+07	(89288.83)	1.1E+08	89021.43	2.3E+08	88798.53d	1.5E+08
9	91688.16	6.3E+06	(91397.20)	3.2E+07	91156.15	2.4E+07	89135.55	1.0E+08	88844.41	2.3E+08	88601.88d	1.1E+08
10			91180.11	3.2E+07	90912.90	2.7E+07			88645.53d	2.3E+08	88378.90	1.2E+08

			1-5						1-6			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	87290.30*	1.8E+08					84874.74	9.4E+07				
1	87299.70	1.6E+08	87239.91	2.7E+08			84887.70d	8.5E+07	84827.50	1.4E+08		
2	87290.30*	1.6E+08	87200.37	2.7E+08	87141.37d	8.9E+07	84882.48	8.2E+07	84791.98d	1.4E+08	84732.99	4.6E+07
3	87261.48	1.5E+08	87141.37d	2.7E+08	87053.60	1.1E+08	84858.96d	8.1E+07	84738.75	1.4E+08	84651.09	5.5E+07
4	87212.97	1.5E+08	87062.91	2.7E+08	86947.48	1.1E+08	84818.40	8.1E+07	84668.42d	1.4E+08	84552.79d	5.9E+07
5	87145.03	1.5E+08	86965.90	2.7E+08	86822.90	1.2E+08	84760.73	8.4E+07	84581.34	1.4E+08	84438.52d	6.0E+07
6	87056.11	1.3E+08	86850.89	2.7E+08	86681.35	1.2E+08	84683.43	9.9E+07	84477.77d	1.4E+08	84308.50d	5.9E+07
7	86957.02	1.4E+08	86718.46d	2.7E+08	86522.75	1.2E+08	84598.26	6.5E+07	84359.56	1.4E+08	84163.72d	5.7E+07
8	86828.81	1.4E+08	86564.31	2.7E+08	86341.17d	1.0E+08	84492.01d	7.3E+07	84226.09	1.4E+08	84002.60	3.6E+07
9	86696.55d	1.4E+08	86404.80	2.7E+08	86162.24	1.3E+08	84370.09	7.7E+07	84078.46	1.4E+08	83836.65	7.2E+07
10			86225.86d	2.7E+08	85958.93	1.3E+08			83918.56	1.4E+08	83652.00	6.6E+07

TableE.5. continue

			1-7						2-0			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	82574.08d	2.5E+07					102679.21d	1.3E+08				
1	82588.34d	2.3E+07	82528.18d	3.8E+07			102674.92d	1.1E+08	102619.11	2.0E+08		
2	82586.72d	2.2E+07	82496.72	3.8E+07	82437.76	1.3E+07	102641.69	1.0E+08	102555.44r*	2.0E+08	102499.90	7.1E+07
3	82569.79	2.1E+07	82449.52d	3.8E+07	82361.98	1.5E+07	102579.35d	1.0E+08	102461.41d	2.0E+08	102379.12	8.7E+07
4	82537.05d	2.0E+07	82387.23	3.8E+07	(82271.41)	1.6E+07	102483.02r	1.1E+08	102340.25	2.0E+08	102229.03d	9.5E+07
5	82489.16	2.0E+07	(82309.87)	3.7E+07	82167.44d	1.7E+07	(102369.87)	6.1E+06	102187.47*	2.0E+08	102048.92d	9.7E+07
6	82424.05d	1.7E+07	82218.80d	3.7E+07	82049.23	1.7E+07	102208.15	6.3E+07	102003.56*	2.0E+08	101840.08d	9.0E+07
7	82352.05d	2.0E+07	82113.90d	3.7E+07	81918.16	1.8E+07	102024.00d	7.0E+07	101793.73d	2.0E+08	101616.14d	1.6E+08
8	(82261.64)	2.0E+07	81996.14	3.6E+07	81772.78d	2.0E+07	101813.19d	7.3E+07	101556.95	2.0E+08	101347.82d	1.3E+08
9	82157.64d	1.9E+07	81867.18	3.6E+07	81624.07d	1.5E+07	101574.36d	7.9E+07	101293.70d	2.0E+08	101060.95	1.3E+08
10			81724.61d	3.6E+07	81459.28	1.6E+07			101005.56d	1.9E+08	100750.20	1.2E+08

			2-1						2-2			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	99684.00*	7.1E+07					96810.15d	1.0E+07				
1	99684.00*	6.2E+07	99626.43	1.1E+08			96812.04	8.2E+06	96754.24	1.7E+07		
2	99655.79	5.8E+07	99568.55	1.1E+08	99511.71	3.7E+07	96787.23	7.2E+06	96700.29	1.7E+07	96643.69	6.6E+06
3	99597.08	5.4E+07	99481.11	1.1E+08	99397.09d	4.5E+07	96735.29	6.9E+06	96619.73	1.7E+07	96535.50d	8.5E+06
4	99510.61d	5.0E+07	99366.37d	1.1E+08	99255.08d	5.0E+07	96656.69	8.0E+06	96512.95	1.6E+07	96401.79	9.5E+06
5	99407.52d	4.9E+07	99223.73	1.1E+08	99086.00d	5.3E+07	96564.45	2.9E+06	96380.75d	1.6E+07	96242.83d	9.9E+06
6	99258.11d	5.4E+07	(99054.67)	1.1E+08	98892.41d	5.7E+07	96425.891d	1.4E+06	96223.34	1.6E+07	96059.26d	8.5E+06
7	99088.82d	5.1E+07	98858.14d	1.1E+08	98679.98d	1.7E+07	(96271.54)	2.1E+06	96042.53d	1.6E+07	95864.64	3.3E+07
8	98893.98d	4.9E+07	98636.09d	1.1E+08	98428.81d	5.0E+07	96094.24d	1.3E+06	95837.44	1.6E+07	95627.89	1.8E+07
9	(98673.71)	4.6E+07	98392.31	1.1E+08	98160.02d	5.4E+07	(95890.48)	3.2E+06	95609.22d	1.6E+07	95377.52d	1.7E+07
10			98124.75	1.1E+08	97869.10d	5.7E+07			95362.67d	1.6E+07	95105.98d	1.6E+07

			2-3						2-4			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	94052.09	1.0E+08					91410.14	3.0E+07				
1	94056.05d	9.1E+07	93998.15	1.6E+08			91416.39	2.8E+07	91358.31d	4.4E+07		
2	94035.32	8.3E+07	93948.32d	1.6E+08	93891.60d	5.6E+07	91399.48	2.7E+07	91312.46	4.3E+07	91255.75d	1.3E+07
3	93989.59	7.7E+07	93873.78	1.6E+08	93789.56	6.9E+07	91359.77	2.6E+07	91244.02	4.3E+07	91159.63	1.5E+07
4	93919.00	6.9E+07	93776.04	1.6E+08	93663.99	7.7E+07	91297.04d	2.3E+07	91153.39	4.3E+07	91042.12d	1.6E+07
5	93836.54	7.2E+07	93652.92	1.6E+08	93515.18	8.2E+07	91224.58d	4.8E+07	91041.21d	4.3E+07	90903.53	1.7E+07
6	93711.20	7.5E+07	93507.62	1.6E+08	93343.94d	9.0E+07	91111.32d	3.6E+07	90907.78	4.3E+07	90744.13	1.8E+07
7	93569.90	7.0E+07	93340.02	1.6E+08	93163.51	2.5E+07	90984.10	3.3E+07	90753.15	4.3E+07	(90576.34)	8.0E+05
8	93406.55	6.5E+07	93147.94	1.6E+08	92939.54d	7.7E+07	90835.04d	3.2E+07	90579.04d	4.3E+07	90370.84d	1.1E+07
9	(93223.02)	5.4E+07	92942.03	1.6E+08	92709.49	8.5E+07	90671.26	2.9E+07	90389.49	4.3E+07	90157.07d	1.2E+07
10			92712.98	1.6E+08	92458.49	9.0E+07			90178.99	4.3E+07	89923.27d	1.3E+07

			2-5						2-6			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	88882.26d	3.0E+07					86468.08	1.6E+08				
1	88890.33d	2.5E+07	88832.27	4.8E+07			86477.95d	1.4E+08	86419.80d	2.4E+08		
2	88877.53d	2.1E+07	88790.65	4.8E+07	88733.94d	1.8E+07	86469.75	1.4E+08	86382.44	2.4E+08	86325.28d	8.2E+07
3	88843.88d	1.8E+07	88727.95d	4.8E+07	88644.04d	2.3E+07	86441.63	1.3E+08	86325.28d	2.4E+08	86241.55	1.0E+08
4	88789.99	1.4E+07	88645.53d	4.8E+07	88534.37d	2.7E+07	86394.85	1.2E+08	86251.69d	2.4E+08	86140.11d	1.1E+08
5	88727.95d	2.8E+07	88543.12d	4.8E+07	88405.03	3.1E+07	86342.36	1.2E+08	86158.79	2.5E+08	86021.05	1.1E+08
6	88625.55	1.8E+07	88421.64	4.8E+07	88257.50	3.6E+07	86251.69d	1.3E+08	86049.07	2.5E+08	85885.21	1.2E+08
7	88511.98	1.5E+07	88281.82	4.9E+07	(88104.31)	2.9E+06	86152.57d	1.3E+08	85922.82	2.5E+08	85745.81	5.1E+07
8	88375.93	1.3E+07	88119.15	4.9E+07	87911.22d	2.7E+07	86036.85	1.2E+08	85780.92d	2.5E+08	85571.80	1.1E+08
9	88231.02	1.0E+07	87950.08	4.9E+07	87716.96	3.3E+07	85904.52d	1.1E+08	85623.91	2.5E+08	85390.74	1.2E+08
10			87760.15	5.0E+07	87504.56	3.7E+07			85452.77	2.5E+08	85197.52d	1.2E+08

			2-7						2-8			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	84166.81	1.5E+08					81979.26d	5.9E+07				
1	84178.70d	1.4E+08	84120.94d	2.3E+08			81993.19	5.3E+07	81935.52d	8.8E+07		
2	84174.05	1.4E+08	84086.70	2.3E+08	84030.32d	7.5E+07	81991.80d	5.1E+07	81905.63	8.8E+07	81849.08	2.9E+07
3	84152.37	1.3E+08	84036.47	2.3E+08	83952.56	8.9E+07	81977.15	5.0E+07	81861.37d	8.8E+07	81777.02d	3.5E+07
4	84113.50d	1.4E+08	83969.91	2.3E+08	83858.78d	9.3E+07	81946.28d	5.0E+07	81802.90	8.7E+07	81691.42d	3.7E+07
5	84071.25	4.1E+07	83887.30d	2.3E+08	83749.65	9.3E+07	81914.25d	1.8E+07	81730.36d	8.7E+07	81592.50d	3.8E+07
6	83993.17d	1.1E+08	83789.36	2.3E+08	83625.36	8.7E+07	81848.26d	4.3E+07	81644.29	8.6E+07	81480.18	3.7E+07
7	83907.46d	1.2E+08	83677.83	2.3E+08	83500.06	1.2E+08	81777.02d	4.5E+07	81546.18d	8.5E+07	81368.15d	3.0E+07
8	83806.94d	1.3E+08	83550.67d	2.3E+08	83341.86	1.1E+08	81691.42d	4.5E+07	81435.21	8.5E+07	81226.31d	4.0E+07
9	83691.59	1.3E+08	83411.12d	2.3E+08	83178.44	1.1E+08	81594.05	4.5E+07	81313.00	8.4E+07	81080.95d	3.9E+07
10			83259.60	2.3E+08	83004.89d	1.0E+08			81180.81d	8.3E+07	80925.84d	3.9E+07

			3-0						3-1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	104204.77	1.3E+08					101210.00d	1.1E+07				
1	104197.90d	1.2E+08	(104143.98)	2.1E+08			101207.80d	9.0E+06	101153.14d	1.6E+07		
2	104163.72	1.2E+08	104080.61	2.1E+08	104026.50d	7.1E+07	101174.90	7.2E+06	101091.89	1.6E+07	101037.27	5.7E+06
3	104089.98d	1.4E+08	103982.26	2.0E+08	103902.56	8.5E+07	101108.04	1.1E+06	101003.16*	1.6E+07	100920.69	7.2E+06
4	103999.70	6.2E+07	103855.38r	2.0E+08	103747.71r	8.5E+07	101026.41d	1.5E+07	100882.33d	1.6E+07	100774.90d	9.0E+06
5	103865.82	7.5E+07	103696.61	2.0E+08	103558.77d	3.9E+07	100904.31	1.2E+07	100736.40d	1.7E+07	100597.59d	1.8E+07
6	103704.17	7.8E+07	103509.18	2.0E+08	103355.47	1.4E+08	100754.85	1.1E+07	100558.46d	1.7E+07	100406.30r	2.6E+06
7	103512.61d	8.0E+07	103290.83d	2.0E+08	103113.61	1.3E+08	100576.87d	9.6E+06	100354.75d	1.7E+07	100177.04	4.8E+06
8	103290.83d	8.6E+07	103045.43	2.0E+08	102844.76	1.3E+08	(100371.79)	7.7E+06	100126.21	1.7E+07	(99925.20)	5.9E+06
9	103028.79	1.2E+08	102772.91d	2.0E+08	102549.80d	1.2E+08	(100128.18)	1.0E+05	99871.33d	1.7E+07	(99649.49)	6.9E+06
10			102474.24d	2.0E+08	102229.03d	1.1E+08			99594.53d	1.7E+07	99347.33d	8.7E+06

TableE.5. continue

			3-2						3-3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	98335.48*	6.4E+07					95578.58d	3.8E+07				
1	98335.48*	5.6E+07	98279.58	1.0E+08			95579.85d	3.3E+07	95524.46	5.8E+07		
2	98306.47d	5.3E+07	98223.49d	1.0E+08	98168.94d	3.6E+07	95555.49	2.8E+07	95472.52d	5.8E+07	95417.89d	2.0E+07
3	98245.70d	5.7E+07	98139.65d	9.9E+07	98058.50d	4.3E+07	95500.81	9.4E+06	95394.72	5.8E+07	95313.55	2.5E+07
4	98171.75d	3.1E+07	98028.86d	9.9E+07	97920.82	4.5E+07	95435.01d	4.3E+07	95291.71	5.8E+07	95184.04	3.0E+07
5	98059.64d	3.4E+07	98059.64d	3.4E+07	97753.07	2.8E+07	95333.13d	3.7E+07	95163.99	5.8E+07	95026.33d	4.4E+07
6	97923.52d	3.4E+07	97727.27d	9.9E+07	97574.51d	6.4E+07	95207.99	3.4E+07	95012.34d	5.8E+07	94859.58d	1.4E+07
7	97759.29d	3.4E+07	97538.29d	9.8E+07	97360.84	6.3E+07	95058.10d	3.1E+07	94837.38d	5.8E+07	94657.97	2.1E+07
8	97571.62	3.5E+07	97326.27	9.8E+07	97124.61	6.4E+07	94883.00d	2.7E+07	94636.54d	5.8E+07	94436.66d	2.3E+07
9	97344.53	4.2E+07	97089.52	9.7E+07	(96865.36)	6.4E+07	(94677.49)	2.4E+06	94420.50	5.8E+07	94198.23d	2.5E+07
10			96829.957d	9.6E+07	96584.51	6.2E+07			94180.72d	5.8E+07	93935.59	2.9E+07

			3-4						3-5			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	92935.63d	2.3E+07					90408.12	8.7E+07				
1	92939.54d	2.0E+07	92883.71	3.8E+07			90413.75d	7.5E+07	90358.38d	1.3E+08		
2	92918.84d	1.8E+07	92836.38	3.8E+07	92781.57d	1.5E+07	90397.26d	6.5E+07	90314.43d	1.3E+08	90259.80d	4.7E+07
3	92870.56	1.7E+07	92764.46d	3.8E+07	92683.94	1.9E+07	90354.68	3.0E+07	90248.74	1.3E+08	90167.60	5.8E+07
4	92812.49	9.8E+06	92669.55d	3.8E+07	92562.06	2.1E+07	90304.94	8.5E+07	90161.69d	1.3E+08	90054.03d	6.6E+07
5	92720.33d	1.0E+07	92552.01	3.8E+07	92414.13	1.7E+07	90223.09d	7.6E+07	90054.03d	1.3E+08	89916.12d	8.4E+07
6	(92607.93)	9.4E+06	92412.09	3.8E+07	92259.26	2.6E+07	90122.41d	7.0E+07	89926.01d	1.3E+08	89773.27	4.3E+07
7	(92472.07)	8.7E+06	92250.74	3.8E+07	92073.32	2.8E+07	89999.96d	6.6E+07	89778.09	1.3E+08	89600.80d	5.4E+07
8	92310.35	8.3E+06	(92066.66)	3.8E+07	91865.83d	2.9E+07	89854.07d	5.8E+07	(98607.70)	1.3E+08	89406.10d	5.9E+07
9	92123.76	8.0E+06	91868.37d	3.7E+07	91645.01d	3.1E+07	89685.40	1.2E+07	89429.39d	1.3E+08	89204.69d	6.2E+07
10			91648.99	3.7E+07	91401.99	3.2E+07			89227.05d	1.3E+08	88982.05d	6.7E+07

			3-6						3-7			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	87993.69	3.1E+06					85692.51	8.4E+07				
1	88000.56d	3.5E+06	87946.01	3.6E+06			85702.48	7.1E+07	85647.01d	1.3E+08		
2	87988.84	4.0E+06	87905.83	3.5E+06	87851.38	6.0E+05	85693.98d	6.1E+07	85610.99d	1.3E+08	85556.90d	4.7E+07
3	87952.26d	4.0E+06	87846.19	3.5E+06	87765.35d	4.0E+05	85663.15	2.8E+07	85556.90d	1.3E+08	85476.01	5.9E+07
4	87911.22d	4.6E+06	87767.09	3.4E+06	87659.46d	2.0E+05	85629.41d	7.5E+07	85486.31d	1.3E+08	85378.47	6.9E+07
5	87838.15	5.6E+06	(87669.57)	3.3E+06	(87531.76)	1.0E+05	85567.81d	6.7E+07	85398.04d	1.3E+08	85260.46	8.5E+07
6	87748.18d	6.4E+06	87552.96	3.2E+06	(87400.55)	4.0E+05	85489.71	6.2E+07	85293.81	1.3E+08	85141.21	5.0E+07
7	87640.96d	7.1E+06	87420.72	3.1E+06	(87241.98)	1.0E+05	85395.42d	5.7E+07	85174.20	1.4E+08	84996.61	6.3E+07
8	87513.73	8.0E+06	87269.59d	2.9E+06	(87068.06)	1.0E+05	85284.18d	5.0E+07	85039.13	1.4E+08	84838.13	6.9E+07
9	87359.08	7.7E+06	87102.48d	2.7E+06	(86879.44)	1.0E+05	85145.51d	1.3E+07	84890.78d	1.4E+08	84666.34d	7.4E+07
10									84728.15	1.4E+08	84482.28	8.0E+07

			3-8						3-9			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	83505.19	1.8E+08					81432.66d	1.0E+08				
1	83516.79	1.6E+08	83461.49	2.7E+08			81446.18d	9.3E+07	81390.78	1.5E+08		
2	83512.28d	1.6E+08	83429.52d	2.7E+08	83374.76	8.7E+07	81446.18d	9.2E+07	81363.14d	1.5E+08	81308.45d	4.9E+07
3	83487.77d	1.4E+08	83381.69	2.7E+08	83300.48d	1.0E+08	81427.53	9.2E+07	81321.45d	1.5E+08	81240.20d	5.7E+07
4	83461.98d	1.3E+08	(83318.71)	2.7E+08	83211.06	1.0E+08	81409.71d	6.6E+07	81266.65	1.5E+08	81158.64	5.8E+07
5	83410.05	1.4E+08	83240.71d	2.7E+08	83102.92	6.8E+07	81368.15d	7.5E+07	81198.81d	1.5E+08	81060.95	3.5E+07
6	83344.12d	1.4E+08	83148.46d	2.7E+08	82995.75d	1.3E+08	81314.49	7.7E+07	81118.85d	1.5E+08	80966.00	7.4E+07
7	83263.47	1.5E+08	83042.49	2.7E+08	82864.78	1.3E+08	81247.59	7.9E+07	81026.03	1.5E+08	80849.01	7.1E+07
8	83169.27	1.5E+08	82923.43	2.7E+08	82722.42	1.2E+08	81169.33d	8.1E+07	80924.10	1.5E+08	80722.82	6.9E+07
9	83049.11d	1.3E+08	82792.32d	2.7E+08	82568.81d	1.2E+08	81066.85	6.9E+07	80810.85	1.4E+08	80587.30	6.8E+07
10			82649.80d	2.7E+08	82403.60	1.1E+08			80688.17d	1.4E+08		

			4-0						4-1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	105661.45d	1.4E+08					102668.93*	5.3E+06				
1	105658.98d	5.8E+07	105605.16d	1.8E+08			102668.93*	4.0E+05	102612.16d	2.0E+06		
2	105619.88r	7.4E+07	105535.87	1.8E+08	105483.52r	3.1E+07	(102632.69)	1.0E+05	102549.80d	2.0E+06	102496.77d	7.0E+05
3	105546.58	7.6E+07	105437.96r	1.8E+08	105363.00r	1.1E+08	(102566.32)	1.0E+05	102456.91d	2.0E+06	102381.90d	8.0E+06
4	105440.95	7.5E+07	105306.78d	1.8E+08	105205.31r	1.0E+08	(102469.35)	1.0E+05	102333.76d	1.9E+06	102232.73	4.0E+06
5	105304.69d	7.5E+07	105142.27r	1.8E+08	105016.93d	1.0E+08	(102342.50)	1.0E+05	102179.93d	1.8E+06	102055.87d	3.1E+06
6	105134.88	7.6E+07	104947.15	1.8E+08	104799.17d	1.0E+08	(102185.30)	2.0E+05	101998.01d	1.8E+06	101849.47d	2.7E+06
7	104932.90	8.2E+07	104722.76d	1.8E+08	104552.65d	1.0E+08	(101997.55)	8.0E+05	(101787.35)	1.7E+06	(101616.24)	2.3E+06
8	104686.50	1.0E+08	104468.52d	1.8E+08	104275.00d	1.0E+08	(101767.49)	1.2E+07	(101549.19)	1.6E+06	(101355.94)	1.8E+06
9	104452.40d	4.8E+07	(104186.56)	1.8E+08	103970.37	9.5E+07	(101552.43)	5.0E+05	(101285.92)	1.5E+06	(101068.94)	9.0E+05
10			103877.63	1.8E+08	103622.64d	2.3E+07			(100996.92)	1.4E+06	(100743.16)	3.4E+06

			4-2						4-3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	99794.31d	7.0E+07					97037.025d	1.9E+06				
1	99796.07	4.9E+07	99739.84	1.1E+08			97041.266d	2.6E+06				
2	99762.98	5.2E+07	99683.36	1.1E+08	99627.61d	3.1E+07	972012.73d	8.0E+05			96876.88	2.1E+06
3	99703.87d	5.1E+07	99594.53d	1.1E+08	99519.53	4.8E+07	(96958.80)	8.0E+05			96774.74	4.9E+06
4	99615.11	4.9E+07	99478.90d	1.1E+08	99378.58	5.5E+07	(96878.15)	5.0E+05			96642.34	1.9E+06
5	99497.08d	4.7E+07	99336.22d	1.1E+08	99211.16	5.8E+07	(96771.43)	4.0E+05			96484.44	1.3E+06
6	99354.54d	4.6E+07	99166.01d	1.1E+08	99017.56d	6.0E+07	(96638.19)	3.0E+05			(96302.44)	1.1E+06
7	99180.49d	4.5E+07	98969.45	1.1E+08	98798.43	6.2E+07	(96478.81)	1.0E+05			96097.99	1.0E+06
8	98968.04d	3.3E+07	98748.06	1.1E+08	98554.93	6.4E+07	96278.39d	7.2E+06			(95867.11)	7.0E+05
9	98769.17d	3.6E+07	98502.23	1.1E+08	98285.10d	6.4E+07						
10			98233.14d	1.1E+08	97978.89d	3.8E+07						

TableE.5. continue

			4-4						4-5			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	94394.52	5.6E+07										
1	94400.59d	5.9E+07	94344.27	1.1E+08			91874.77d	1.2E+07	91818.00	7.0E+06		
2	94376.66d	5.6E+07	94294.04	1.1E+08	94240.16	4.1E+07	91854.91	9.1E+06	91772.26	6.9E+06	91718.27	6.8E+06
3	94328.49d	5.2E+07	94219.20	1.1E+08	94144.14	3.4E+07	91812.64d	8.5E+06	91703.41	6.9E+06	(91511.45)	3.0E+05
4	94255.86	4.9E+07	94119.99d	1.1E+08	94019.32	4.6E+07	91748.39	8.4E+06	91611.93d	6.9E+06	(91374.48)	5.0E+05
5	94159.40	4.5E+07	93997.31	1.1E+08	93872.19	5.1E+07	(93661.67)	8.6E+06	91499.44d	6.9E+06	(91374.48)	5.0E+05
6	94038.07	4.2E+07	93850.79	1.1E+08	93702.34	5.5E+07	91553.67	7.8E+06	91365.33d	6.8E+06	(91216.87)	6.0E+05
7	93891.60d	3.8E+07	93681.85d	1.1E+08	93510.99d	5.8E+07	91420.97	6.1E+06	91209.92d	6.8E+06	(91039.08)	4.0E+05
8	93707.22	1.4E+07	(93489.38)	1.0E+08	(93296.13)	6.1E+07	(91248.75)	1.0E+05	91029.96	6.7E+06	(90837.20)	6.0E+05
9	(93548.72)	4.0E+07	93282.93d	1.0E+08	93065.08	6.5E+07	(91109.34)	1.5E+07	90843.42d	6.7E+06	(90625.85)	8.0E+05
10			93051.34	1.0E+08	92797.33	6.0E+07			90632.11d	6.7E+06	(90377.82)	3.6E+06

			4-6						4-7			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	89452.78	4.4E+07					87151.26d	3.4E+07				
1	89462.48	6.2E+07	89406.10d	9.7E+07			87163.38	4.7E+07	87106.86	6.6E+07		
2	89446.49	5.5E+07	89363.83	9.7E+07	89310.02d	4.8E+07	87151.26d	4.6E+07	87068.62	6.6E+07	87014.75	2.4E+07
3	89410.29d	4.9E+07	89300.95	9.7E+07	89226.11	2.4E+07	87121.18	4.5E+07	87011.78	6.6E+07	86936.61d	1.5E+07
4	89353.68	4.5E+07	89217.73d	9.7E+07	89117.09	3.9E+07	87072.41	4.5E+07	86936.61d	6.5E+07	86835.81	2.0E+07
5	89277.26d	4.1E+07	89114.54d	9.8E+07	88989.77	4.5E+07	87005.28	4.5E+07	86843.22d	6.5E+07	86718.46d	2.1E+07
6	89179.07	3.7E+07	88991.83	9.8E+07	88843.88d	5.0E+07	86920.04	4.4E+07	86732.77	6.4E+07	86584.60	2.1E+07
7	89060.70d	3.1E+07	88851.17	9.8E+07	88679.96	5.4E+07	86816.35	4.2E+07	86604.96	6.4E+07	86434.58	2.1E+07
8	(88910.35)	5.1E+06	88692.42	9.8E+07	88498.97	5.8E+07	86679.77d	1.6E+07	86461.68	6.3E+07	86268.64	2.0E+07
9	88783.75	3.9E+07	88516.34d	9.8E+07	88300.53	6.5E+07	86569.63	4.9E+07	86305.35d	6.2E+07	86086.35d	1.9E+07
10			88324.86	9.8E+07	88070.90	7.3E+07			86132.64d	6.1E+07	85878.32	9.3E+06

			4-8						4-9			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	84963.80d	9.7E+06					82891.17	1.5E+08				
1	84977.75	2.6E+07	84921.52	3.3E+07			82907.23	1.3E+08	82850.91	2.5E+08		
2	84969.93d	1.9E+07	84887.70d	3.3E+07	84833.55d	2.5E+07	82903.54d	1.4E+08	82821.08	2.5E+08	82767.01d	7.0E+07
3	84945.86	1.6E+07	84836.52d	3.3E+07	84762.17	4.5E+06	82885.64	1.4E+08	82776.10d	2.5E+08	82700.85	9.4E+07
4	84905.17d	1.4E+07	84769.19d	3.4E+07	84668.42d	1.2E+07	82852.84	1.4E+08	82717.11	2.5E+08	82616.36	1.1E+08
5	84847.95	1.2E+07	84685.98d	3.5E+07	84561.13d	1.6E+07	82806.17	1.3E+08	82643.89	2.5E+08	82518.99d	1.1E+08
6	84773.36	9.6E+06	84587.36	3.6E+07	84438.52d	2.0E+07	82744.83	1.3E+08	82557.53d	2.5E+08	82409.11	1.2E+08
7	84685.98d	6.7E+06	84474.97	3.7E+07	84303.23	2.3E+07	82668.87	1.3E+08	82458.29	2.6E+08	(82287.17)	1.2E+08
8	(84564.97)	1.0E+05	84346.64d	3.8E+07	84153.21	2.7E+07	82565.06	8.9E+07	82346.69	2.6E+08	82153.50	1.2E+08
9	84473.11d	1.3E+07	84205.85d	3.9E+07	83989.79	3.2E+07	82491.27	1.2E+08	82224.63d	2.6E+08	82008.16	1.1E+08
10			84053.04	4.1E+07	83799.44	4.7E+07			82092.18d	2.6E+08	81836.88d	4.4E+07

			4-10						5-0			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	80935.20	1.5E+08					107060.52d	9.1E+07				
1	80953.66*	8.9E+07	80896.82	2.1E+08			107050.09	7.8E+07	106997.91d	1.5E+08		
2	80953.65*	1.1E+08	80871.12	2.1E+08	80817.25	4.3E+07	(107008.73)	7.2E+07	106929.01d	1.5E+08	106880.91	5.5E+07
3	80941.96	1.1E+08	80832.77d	2.1E+08	80757.68	1.0E+08	106932.54	6.8E+07	106828.15d	1.5E+08	106753.85	6.8E+07
4	80917.79d	1.1E+08	80781.84	2.1E+08	80681.26	1.0E+08	106819.99d	6.6E+07	106692.38	1.5E+08	106593.74d	7.4E+07
5	80881.25	1.1E+08	80719.03	2.1E+08	80594.21d	9.9E+07	106676.69	6.7E+07	106523.83d	1.5E+08	106402.15	7.8E+07
6	80832.77d	1.1E+08	80645.20d	2.1E+08	(80496.69)	9.8E+07	106498.81	7.2E+07	106322.02d	1.5E+08	106178.52d	7.9E+07
7	80771.62d	1.2E+08	80560.38	2.1E+08	(80389.07)	9.7E+07	106314.62d	6.8E+06	106089.56d	1.5E+08	105923.77d	7.8E+07
8	80683.33d	1.0E+08	(80465.19)	2.07E+08	(80271.94)	9.5E+08	(106060.19)	4.1E+07	105826.69	1.5E+08	105638.73d	6.9E+07
9	80627.97	9.7E+07	(80361.55)	2.05E+08	(80144.57)	8.9E+07	105789.75d	4.9E+07	105535.87d	1.4E+08	105351.02	9.9E+07
10			(80248.72)	2.03E+08	(79994.96)	3.6E+07			105216.76d	1.4E+08	104996.90	1.0E+08

			5-1						5-2			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	104065.79	1.7E+07					101191.14d	4.2E+07				
1	104059.67	1.3E+07	104007.62	2.8E+07			101187.10d	3.7E+07	101135.21d	6.4E+07		
2	104021.39d	1.2E+07	103941.97	2.8E+07	103893.06	1.2E+07	101153.14d	3.4E+07	101074.62d	6.4E+07	101023.91d	2.2E+07
3	103950.88d	1.1E+07	103846.68	2.8E+07	103772.50	1.5E+07	101088.61d	3.2E+07	100984.54d	6.4E+07	100910.34d	2.7E+07
4	103848.36d	1.1E+07	103718.96d	2.8E+07	103621.39	1.7E+07	100994.50	3.1E+07	100864.83d	6.4E+07	100767.25	3.0E+07
5	103714.55d	1.2E+07	(103560.69)	2.8E+07	103439.82	1.8E+07	100870.75d	2.9E+07	100717.54d	6.4E+07	100597.59d	3.1E+07
6	(103548.82)	1.5E+07	103371.57d	2.8E+07	103228.70d	1.7E+07	100717.54d	2.7E+07	100540.11	6.4E+07	100397.02d	3.3E+07
7	(103378.77)	1.7E+06	103154.33d	2.7E+07	102988.66	1.6E+07	100562.26d	2.0E+07	100336.55	6.4E+07	100171.40	3.4E+07
8	103141.17d	2.9E+06	102906.65d	2.7E+07	102719.48	1.2E+07	100340.46d	2.7E+07	100107.64d	6.4E+07	99917.46	3.6E+07
9	102888.06	5.3E+06	(102634.90)	2.6E+07	102449.68d	4.4E+07	100106.72d	2.6E+07	99851.61d	6.5E+07	99666.88d	1.4E+07
10									99571.35d	6.5E+07	99354.54d	3.2E+07

			5-3						5-4			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	98433.57d	2.1E+07					95791.80*	3.7E+07				
1	98431.47	1.7E+07	98379.61d	3.6E+07			95791.80*	3.3E+07	95739.73	5.4E+07		
2	98401.36d	1.5E+07	98323.02d	3.6E+07	98273.97	1.5E+07	95765.71	3.1E+07	95687.42	5.4E+07	95637.51	1.7E+07
3	98343.47d	1.3E+07	98239.24d	3.6E+07	98164.87d	1.9E+07	95713.14	3.0E+07	95609.22d	5.4E+07	95535.33	2.0E+07
4	98257.35	1.3E+07	98127.52d	3.6E+07	98028.86d	2.2E+07	95635.13	2.8E+07	95505.95	5.4E+07	95408.34	2.2E+07
5	98141.83	1.3E+07	97989.30d	3.6E+07	97869.10d	2.3E+07	95531.76	2.6E+07	95377.52d	5.4E+07	95257.01d	2.3E+07
6	98001.49	1.5E+07	97825.54d	3.5E+07	97682.33	2.4E+07	95401.76	2.1E+07	95225.22	5.4E+07	95082.57d	2.5E+07
7	(97860.03)	2.0E+05	97635.45d	3.5E+07	97470.22d	2.3E+07	(95273.63)	3.9E+07	95050.85d	5.4E+07	94883.00d	2.7E+07
8	(97652.34)	4.2E+06	97418.61d	3.5E+07	97229.89d	2.0E+07	95082.57d	3.2E+07	(94848.14)	5.4E+07	94659.82d	3.1E+07
9	97436.67d	6.1E+06	97183.13	3.4E+07	96999.51d	3.7E+07	94884.83d	2.7E+07	94632.78d	5.4E+07	(94446.45)	2.4E+06
10			96926.05d	3.4E+07	96706.02	3.3E+07			94390.99d	5.4E+07	94173.27	1.9E+07

TableE.5. continue

			5-5						5-6			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	93263.32	2.0E+07					90849.25	4.8E+07				
1	93265.16	1.6E+07	93213.18d	3.4E+07			90852.86	4.4E+07	90800.98	6.9E+07		
2	93243.17	1.4E+07	93164.94	3.4E+07	93114.88	1.4E+07	90835.04d	4.2E+07	90756.87d	6.9E+07	90706.86d	2.1E+07
3	93197.97	1.2E+07	93092.79d	3.4E+07	93018.92d	1.8E+07	90794.33	4.0E+07	90690.71d	6.9E+07	90616.76d	2.4E+07
4	93127.23	1.1E+07	92997.56d	3.4E+07	92900.00	2.1E+07	90733.01	3.8E+07	90603.15	6.9E+07	90506.23	2.6E+07
5	93032.29d	1.0E+07	92879.09	3.4E+07	92758.88d	2.2E+07	90649.07	3.5E+07	90494.78	6.8E+07	90374.22d	2.7E+07
6	(92916.14)	1.0E+07	92738.88	3.4E+07	92595.99	2.4E+07	(90542.93)	2.8E+07	90366.08	6.8E+07	90223.09d	2.8E+07
7	(92801.61)	7.0E+05	92577.77	3.4E+07	92410.92	2.5E+07	90441.91	5.7E+07	90217.71	6.8E+07	(90052.43)	3.0E+07
8	92621.23d	4.6E+06	(92389.21)	3.4E+07	92201.57	2.5E+07	90282.37d	4.6E+07	90050.73	6.8E+07	89862.14	3.4E+07
9	(92445.67)	5.1E+06	92192.65d	3.4E+07	92007.82	1.9E+07	90118.09	3.9E+07	89864.26d	6.7E+07	89680.57d	2.6E+06
10			91970.87	3.3E+07	91750.85	2.9E+07			89663.34d	6.7E+07		

			5-7						5-8			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	88547.79d	1.2E+07					86360.74d	8.0E+07				
1	88553.79d	9.4E+06	88502.08	2.0E+07			86368.46	7.3E+07	86316.50	1.2E+08		
2	88539.98d	7.7E+06	88461.83	2.0E+07	88411.81	8.2E+06	86358.66d	7.0E+07	86280.31	1.2E+08	86229.60d	3.6E+07
3	88506.17d	6.3E+06	88401.94d	2.0E+07	88327.55	1.1E+07	86330.42	6.8E+07	86225.86d	1.2E+08	86152.57d	4.2E+07
4	88452.39	5.2E+06	88322.16	2.1E+07	88224.63	1.3E+07	86284.39	6.5E+07	86154.99	1.2E+08	86057.42	4.5E+07
5	88376.43	4.1E+06	88224.19	2.1E+07	88103.30	1.5E+07	86220.78d	6.1E+07	86066.49d	1.2E+08	85945.99d	4.6E+07
6	(88283.64)	2.9E+06	88107.54d	2.1E+07	87963.70	1.7E+07	(86138.43)	5.3E+07	85961.64	1.1E+08	85818.40	4.8E+07
7	88196.78d	3.7E+06	87973.47	2.1E+07	87806.63	1.9E+07	86066.49d	6.9E+07	85840.88	1.1E+08	85675.64	4.9E+07
8	88052.67	2.8E+06	87820.12	2.2E+07	87632.39	2.3E+07	85938.69	7.0E+07	85705.91	1.1E+08	85516.24	5.0E+07
9	87907.41	2.1E+06	87653.28d	2.2E+07	87469.34	3.5E+06	85808.81	6.5E+07	85553.57	1.1E+08	85369.88	1.6E+07
10			(87740.72)	2.2E+07	87251.82	1.7E+07			85391.87	1.1E+08	85172.94d	4.0E+07

			5-10						6-0			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	82331.92	1.3E+08					108391.18	7.1E+07				
1	82343.86	1.1E+08	(82291.90)	1.9E+08			108380.02	6.2E+07	108328.00d	1.1E+08		
2	82342.17	1.1E+08	(82264.00)	1.9E+08	82214.19d	6.5E+07	108332.08d	5.7E+07	108257.14	1.1E+08	108210.34r	4.0E+07
3	82326.56	1.1E+08	82222.40d	2.0E+08	82148.45d	7.9E+07	108250.71d	5.5E+07	108154.23	1.1E+08	108081.35d	4.9E+07
4	(92296.86)	1.0E+08	82167.44d	2.0E+08	82069.89d	8.5E+07	(108135.33)	5.6E+07	108012.29	1.1E+08	107918.30r	5.4E+07
5	(92253.42)	1.0E+08	82099.61d	2.0E+08	81979.26d	9.0E+07	107980.90	6.2E+07	107837.48d	1.1E+08	107722.31d	5.5E+07
6	82195.94	9.5E+07	82019.19d	2.0E+08	81876.17d	9.4E+07	107813.99	1.8E+07	107630.88	1.1E+08	107492.43d	5.4E+07
7	82151.44	6.5E+07	81926.92	2.1E+08	81762.07d	9.6E+07	107591.76d	3.5E+07	107391.44	1.1E+08	107227.73d	4.2E+07
8	82057.63d	9.8E+07	81823.93d	2.1E+08	81635.47d	9.4E+07	(107340.94)	4.0E+07	107120.81	1.1E+08	106954.69	7.8E+07
9	81964.13d	1.0E+08	81710.63d	2.1E+08	81524.72d	7.5E+07	107060.52d	4.5E+07	106819.99d	1.1E+08	106628.26d	7.3E+07
10			81587.77	2.2E+08	81368.61	1.1E+08			106491.36d	1.1E+08	106278.11	6.9E+07

			6-1						6-2			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	105396.18	3.7E+07					102521.66	1.3E+07				
1	105387.59d	3.2E+07	105337.81	6.0E+07			102515.22d	1.1E+07	102465.55	1.9E+07		
2	105345.70d	2.9E+07	105271.32d	5.9E+07	105223.29	2.2E+07	102477.59d	1.1E+07	102403.09d	1.9E+07	102355.33d	6.3E+06
3	105271.32d	2.8E+07	105171.71	5.9E+07	105100.59	2.8E+07	102408.93d	9.8E+06	102309.52d	1.9E+07	102239.08d	7.6E+06
4	105162.67	2.9E+07	(105040.13)	5.9E+07	104945.91	3.0E+07	102309.52	8.8E+06	102187.47*	1.9E+07	(102091.90)	8.3E+06
5	105020.39d	3.8E+07	104876.22d	5.9E+07	104759.61d	3.1E+07	102174.53	5.8E+06	102032.11d	1.9E+07	101916.41d	9.1E+06
6	(104865.93)	3.0E+06	104681.55d	5.8E+07	104543.31d	2.9E+07	(102034.21)	1.4E+07	101849.47d	1.9E+07	101710.82d	1.0E+07
7	104657.43	1.3E+07	104456.28d	5.8E+07	104292.65d	1.8E+07	101840.08d	1.2E+07	101638.88d	2.0E+07	(101475.75)	1.3E+07
8	104420.94d	1.6E+07	104201.81	5.7E+07	104035.86	5.8E+07	101621.31d	1.0E+07	101401.50d	2.0E+07	(101236.05)	2.8E+06
9	104159.33d	2.1E+07	103918.58d	5.7E+07	103726.68d	4.7E+07	101375.38d	8.4E+06	101135.21d	2.0E+07	100943.29	7.0E+06
10					103398.49d	4.1E+07			100846.75d	2.0E+07	(100634.10)	8.8E+06

			6-3						6-4			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	99764.79	4.5E+07					97122.18d	2.6E+06				
1	99759.60	3.9E+07	99709.94	7.2E+07			97119.267d	2.6E+06	97070.38	3.4E+06		
2	99725.97d	3.5E+07	99651.46d	7.2E+07	99603.47d	2.7E+07	97089.52d	2.6E+06	97016.36	3.4E+06	(96967.60)	8.0E+05
3	99663.39d	3.3E+07	(99564.49)	7.2E+07	99493.11	3.3E+07	97034.05	2.4E+06	96934.78	3.5E+06	(96863.31)	8.0E+05
4	99571.35d	3.2E+07	99449.84	7.2E+07	99354.54d	3.7E+07	96948.83d	1.9E+06	96827.14	3.5E+06	(96732.70)	9.0E+05
5	99448.18	3.5E+07	99305.04d	7.1E+07	99188.92	3.9E+07	(96836.03)	2.0E+05	96692.45	3.5E+06	96577.29	1.0E+06
6	99318.67d	1.0E+07	99134.45	7.1E+07	98996.03d	3.9E+07	96719.13	1.3E+07	96535.50d	3.6E+06	(96396.32)	1.4E+06
7	99137.92	1.9E+07	98937.50d	7.1E+07	98774.21	3.2E+07	96550.59	6.8E+06	96351.32d	3.7E+06	96186.65d	3.5E+06
8	(98933.09)	2.1E+07	98711.78	7.0E+07	98548.39d	4.8E+07	(96362.11)	4.9E+06	96141.03	3.7E+06	(95976.76)	1.1E+06
9	(98708.89)	2.3E+07	98469.09	7.0E+07	(98277.21)	4.9E+07	(96155.87)	3.0E+06	95915.79d	3.8E+06	(95724.19)	1.0E+05
10			98197.58d	6.9E+07	97987.34d	4.8E+07					(95452.42)	2.0E+05

			6-5						6-7			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	94593.81*	4.9E+07					89878.39	5.6E+07				
1	94593.81*	4.2E+07	94543.95d	7.7E+07			89881.90	4.9E+07	89832.46	8.6E+07		
2	94568.06d	3.8E+07	94493.48	7.7E+07	94445.37d	2.8E+07	89864.26d	4.4E+07	89790.09	8.6E+07	89742.08d	3.0E+07
3	94517.75d	3.5E+07	94418.25	7.7E+07	94347.11d	3.5E+07	89825.79d	4.1E+07	89726.77	8.6E+07	89656.09	3.7E+07
4	94441.41	3.2E+07	94318.49d	7.7E+07	94224.67	3.8E+07	89765.90d	3.6E+07	89643.06d	8.6E+07	89549.15	4.1E+07
5	94337.77d	2.7E+07	94195.60d	7.7E+07	94078.76d	4.1E+07	89681.76d	2.5E+07	89539.16d	8.6E+07	89423.09	4.4E+07
6	94232.26	2.5E+07	94048.08	7.7E+07	93909.68d	4.4E+07	89600.80d	4.5E+07	89416.04	8.6E+07	89277.71d	4.8E+07
7	94078.76d	2.7E+07	(93878.93)	7.6E+07	93714.48	4.5E+07	89474.73d	3.9E+07	89274.29d	8.6E+07	89111.03d	5.6E+07
8	(93903.18)	2.5E+07	93681.850d	7.6E+07	93518.13	3.0E+07	89334.22d	3.4E+07	89114.54d	8.5E+07	88948.45d	2.1E+07
9	93716.50d	2.3E+07	93477.07	7.6E+07	(93284.81)	4.3E+07	89178.48d	2.8E+07	88939.15	8.5E+07	88746.39	3.8E+07
10					93032.29d	4.6E+07			88743.66d	8.5E+07	(88532.27)	4.4E+07

TableE.5. continue

			6-8						6-9			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	87690.92	2.0E+06					85618.32	6.9E+07				
1	87696.66d	2.4E+06	87646.99	2.1E+06			85626.10d	6.1E+07	85576.68	1.0E+08		
2	87683.11	2.9E+06	87608.60	2.1E+06	(87560.69)	2.0E+05	85616.89	5.6E+07	85542.13d	1.0E+08	85494.24	3.5E+07
3	87650.46	3.3E+06	(87551.54)	2.0E+06	(87480.38)	1.0E+05	85590.28	5.2E+07	85491.19	1.0E+08	85419.98d	4.3E+07
4	87598.42	3.6E+06	87475.05d	1.9E+06	(87381.72)	1.0E+05	85546.30d	4.6E+07	85423.64d	1.1E+08	85329.71	4.7E+07
5	(87524.98)	2.8E+06	(87381.98)	1.8E+06	(87265.98)	1.0E+05	85482.93	3.2E+07	85339.89	1.1E+08	85223.82	5.0E+07
6	87454.99	7.1E+06	(87270.91)	1.7E+06	(87132.56)	1.0E+05	85425.12	6.2E+07	85240.86	1.1E+08	85102.47	5.4E+07
7	87342.95	6.8E+06	(87143.04)	1.6E+06	(86979.86)	1.0E+05	85328.08d	5.4E+07	85126.78d	1.1E+08	84963.80d	6.1E+07
8	87219.74	6.8E+06	(86999.28)	1.5E+06	(86834.05)	1.0E+05	85219.26d	4.8E+07	84998.91	1.1E+08	84833.55d	2.5E+07
9	87080.54	6.6E+06	86839.10	1.3E+06	(86648.03)	3.0E+05	(85098.29)	4.1E+07	84858.96d	1.1E+08	84666.34d	4.4E+07
10					(86453.88)	6.0E+05			84704.34d	1.1E+08	84492.01d	4.9E+07

			6-10						6-11			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	83662.17	1.6E+07					81825.35d	8.4E+07				
1	83672.21	1.6E+07	83622.51	2.1E+07			81836.88*	7.4E+07	81787.82	1.3E+08		
2	83666.87	1.6E+07	83592.28d	2.1E+07	83544.34d	5.5E+06	81836.88*	6.9E+07	81762.07d	1.3E+08	81713.98	4.4E+07
3	83646.60	1.7E+07	83547.47	2.0E+07	83475.99	5.7E+06	81822.76d	6.6E+07	81723.53d	1.3E+08	81652.62d	5.5E+07
4	83611.05	1.9E+07	83487.77d	2.0E+07	83394.44	5.0E+06	81795.71d	6.2E+07	81672.94d	1.3E+08	81579.00d	6.1E+07
5	83557.63d	2.1E+07	83414.83d	1.9E+07	(83298.90)	3.9E+06	81753.37d	5.2E+07	81610.39d	1.4E+08	81494.29d	6.5E+07
6	83512.28d	9.8E+06	83328.15	1.8E+07	83189.97	2.5E+06	81720.98	6.2E+07	81536.61	1.4E+08	81398.24	6.9E+07
7	83429.52d	1.7E+07	83229.22d	1.7E+07	(83065.74)	4.0E+05	81652.62d	6.6E+07	81452.21d	1.5E+08	81288.86	7.0E+07
8	83339.00d	1.9E+07	83118.15d	1.5E+07	82953.43d	7.9E+06	81579.00d	6.5E+07	81357.95	1.5E+08	81192.67	5.9E+07
9	83235.04	2.1E+07	82995.75d	1.4E+07			81494.29d	6.4E+07	81254.16	1.6E+08	81062.56d	7.8E+07
10			82861.20d	1.2E+07					81142.07	1.7E+08	80929.15d	8.4E+07

			7-0						7-1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	109654.14	5.3E+07					106660.94d	5.1E+07				
1	109643.77d	4.7E+07	109596.34d	8.1E+07			106651.12	4.5E+07	106604.11d	7.9E+07		
2	109594.01	4.5E+07	109523.30d	8.1E+07	109476.97	2.8E+07	106605.49	4.4E+07	106535.15	7.9E+07	106489.12	2.8E+07
3	109506.96d	4.6E+07	109413.86	8.1E+07	109345.21	3.4E+07	106524.84d	4.7E+07	106432.37	7.9E+07	106364.00d	3.4E+07
4	(109371.73)	4.8E+07	109268.75d	8.1E+07	109178.10	3.6E+07	106399.09	6.1E+07	106295.64d	7.8E+07	106205.55d	3.5E+07
5	109237.70	2.3E+07	109089.92d	8.1E+07	108975.84d	3.3E+07	106277.50	1.6E+07	106126.71	7.8E+07	106012.63d	3.0E+07
6	109045.25d	2.9E+07	108876.41d	8.1E+07	108728.50d	8.7E+06	106094.81d	2.3E+07	105925.61d	7.8E+07	105778.58d	3.6E+06
7	108818.05d	3.1E+07	108627.77	8.1E+07	108484.70	5.3E+07	105883.52	2.6E+07	105692.67d	7.7E+07	105549.17	6.1E+07
8	108557.72	3.5E+07	108349.32	8.1E+07	108184.35	5.1E+07	105638.73d	3.1E+07	105430.70d	7.6E+07	105266.48d	5.4E+07
9			108039.84d	8.1E+07	107854.70d	4.9E+07			105138.96d	7.6E+07	104954.51	5.0E+07
10			107700.33	8.1E+07	107494.58	4.5E+07			104821.55d	7.5E+07	104613.48d	4.4E+07

			7-3						7-4			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	101029.81d	4.5E+07					98387.50	5.5E+06				
1	101023.27d	3.9E+07	100975.91	7.0E+07			98382.72d	4.6E+06				
2	100985.46d	3.6E+07	100915.23d	7.0E+07	100869.17d	2.5E+07	98349.61d	4.5E+06	98279.09	8.9E+06	98233.14d	3.5E+06
3	100917.01	3.5E+07	100824.69d	6.9E+07	100755.29d	3.0E+07	(98287.40)	5.7E+06	98194.63	8.9E+06	98127.52d	4.3E+06
4	100807.82	2.7E+07	100704.82d	6.9E+07	100614.23	3.3E+07	98185.68	1.5E+07	98082.84	8.8E+06	97992.33d	4.4E+06
5	100704.82d	2.3E+07	100556.15	6.9E+07	100442.70d	3.3E+07	(98092.58)	1.0E+05	97943.95	8.6E+06	(97830.79)	3.1E+06
6	100548.05d	2.5E+07	100379.27d	6.9E+07	100232.42s	1.7E+07	(97948.10)	5.0E+05	97778.41d	8.5E+06	(97632.72)	1.0E+05
7	100363.73d	2.5E+07	100173.86d	6.9E+07	100030.91	4.0E+07	(97778.14)	8.0E+05	97588.77d	8.3E+06	97444.94	1.3E+07
8	100149.24	2.5E+07	99943.19d	6.9E+07	(99776.44)	4.1E+07	(97578.95)	1.7E+06	97369.41	8.1E+06	(97205.56)	1.1E+07
9			99688.16	6.8E+07	99503.23d	4.2E+07			(97135.18)	7.9E+06	(96950.95)	9.2E+06
10			99407.52d	6.8E+07					96875.05d	7.6E+06	96668.30	7.2E+06

			7-5						7-6			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	95859.91	3.3E+07					93444.49*	1.6E+07				
1	95857.15	2.8E+07	95810.05	5.0E+07			93444.49*	1.4E+07	93397.27	2.7E+07		
2	95828.16	2.5E+07	95757.57	5.0E+07	95712.13	1.8E+07	93418.91	1.2E+07	93348.47	2.7E+07	93303.23	1.1E+07
3	95771.42	2.1E+07	95678.69	5.0E+07	95610.70	2.2E+07	93368.20	1.2E+07	93276.03	2.7E+07	93208.19	1.4E+07
4	95678.27	5.9E+06	95575.38	5.0E+07	95484.63	2.4E+07	93282.93d	1.4E+07	93179.83	2.7E+07	93089.57	1.5E+07
5	95595.02	2.8E+07	95446.58d	5.0E+07	95333.13d	2.8E+07	(93210.21)	3.8E+06	93061.11	2.7E+07	92948.24	1.5E+07
6	95461.66d	2.5E+07	95292.20	5.0E+07	95146.51d	3.0E+07	(93088.84)	4.7E+06	92918.84d	2.7E+07	92773.39	6.2E+06
7	95307.15d	2.3E+07	95114.91	5.0E+07	94971.42d	1.7E+07	(92947.27)	4.8E+06	92755.93	2.6E+07	92613.52	2.2E+07
8	95120.03d	1.9E+07	(94911.99)	5.0E+07	94747.02	2.2E+07	92781.57d	5.1E+06	92574.41d	2.6E+07	92408.99	2.3E+07
9			94696.09	5.0E+07	94512.84	2.5E+07			92370.19	2.6E+07	92185.63	2.3E+07
10			94454.84d	5.0E+07	94248.40d	2.8E+07			92149.12	2.6E+07	(91942.25)	2.3E+07

			7-7						7-8			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	91144.03	2.5E+07					88956.68d	2.6E+07				
1	91145.19	2.2E+07	91097.98	3.8E+07			88959.91d	2.2E+07	88912.82	4.3E+07		
2	91123.92	2.0E+07	91053.66d	3.7E+07	91007.65	1.2E+07	88942.79	1.8E+07	88872.34	4.3E+07	88826.41	1.7E+07
3	91079.31d	1.6E+07	90987.17	3.7E+07	90918.57	1.5E+07	88904.60d	1.5E+07	88812.01	4.3E+07	88743.66d	2.2E+07
4	(91002.23)	1.2E+06	90899.21	3.7E+07	90808.25d	1.6E+07	88834.92	5.5E+06	88731.98	4.3E+07	88641.52	2.5E+07
5	90938.66d	3.1E+07	90790.37	3.7E+07	90677.18	1.9E+07	88781.42d	1.4E+07	88633.37	4.3E+07	88519.76	2.9E+07
6	90828.74	2.6E+07	90660.69d	3.7E+07	90514.34d	2.8E+07	88684.16d	1.3E+07	88515.82	4.3E+07	88369.40d	2.9E+07
7	90702.74	2.3E+07	90511.94d	3.7E+07	90367.48	6.9E+06	88570.31	1.1E+07	88379.96	4.4E+07	88236.24	2.2E+07
8	90553.04d	1.8E+07	90343.54	3.7E+07	90177.82	1.0E+07	(88436.24)	8.8E+06	88228.59	4.4E+07	88063.90d	2.8E+07
9			90157.07d	3.6E+07	89972.60d	1.2E+07			88059.82d	4.4E+07	87874.69	3.2E+07
10			89954.59d	3.6E+07	89749.20d	1.4E+07			87875.90d	4.4E+07	87670.72	3.6E+07

TableE.5. continue

			7-9						7-10			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	86883.84	2.5E+07					84927.87	3.6E+07				
1	86889.05	2.4E+07	86841.69d	3.6E+07			84935.33d	3.0E+07	84887.7d	5.7E+07		
2	86876.06	2.2E+07	86805.76	3.6E+07	86759.72	1.1E+07	84926.57	2.5E+07	84856.03	5.8E+07	84809.97	2.2E+07
3	86843.22d	1.9E+07	86751.48	3.6E+07	86683.06	1.2E+07	84900.38	1.9E+07	84807.92	5.8E+07	84739.56	2.8E+07
4	86782.74d	4.2E+06	86679.77d	3.5E+07	86589.65	1.3E+07	(84847.40)	2.7E+06	84744.34	5.9E+07	84653.95d	3.2E+07
5	86739.42	3.2E+07	86590.63	3.5E+07	86477.95d	1.3E+07	84814.47	2.9E+07	84666.34d	5.9E+07	84552.79d	3.9E+07
6	86654.20d	2.9E+07	86485.77d	3.4E+07	86338.96d	1.3E+07	84743.30d	2.4E+07	84573.18d	6.0E+07	84426.53	4.7E+07
7	86554.08	2.8E+07	86363.84	3.4E+07	86220.78d	6.4E+06	84656.12d	2.1E+07	84466.34d	6.1E+07	84322.39	2.3E+07
8	86436.09d	2.5E+07	86229.60d	3.3E+07	(86062.90)	7.2E+06	(84554.76)	1.6E+07	84346.64d	6.2E+07	84180.90	3.1E+07
9			86077.12d	3.2E+07	85894.06d	7.0E+06			84214.49	6.4E+07	84030.32d	3.6E+07
10			85915.68d	3.1E+07	85709.55d	6.5E+06			84072.17	6.5E+07	83867.14	4.2E+07

			7-11						7-12			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	83090.95d	4.2E+07					81377.10	4.8E+07				
1	83100.55d	4.0E+07	83053.37	6.0E+07			81388.80*	4.1E+07	81341.53d	7.6E+07		
2	83096.06d	4.0E+07	83025.54	5.9E+07	82979.50	1.7E+07	81388.80*	3.7E+07	81318.34	7.7E+07	81272.21	2.8E+07
3	83076.40	4.0E+07	82983.91	5.8E+07	82915.40	1.9E+07	81375.89d	3.1E+07	81283.41	7.9E+07	81215.08d	3.5E+07
4	83031.93	2.7E+07	82928.98	5.7E+07	82838.54	1.8E+07	81339.70	9.9E+06	81237.60d	8.2E+07	81146.97	4.1E+07
5	83009.67	3.6E+07	82861.20d	5.5E+07	82748.11d	1.5E+07	81328.98d	4.0E+07	81180.81d	8.6E+07	81067.37	4.7E+07
6	82949.85	4.0E+07	82780.91d	5.4E+07	82634.50	3.5E+06	81282.29	3.8E+07	81113.75	9.1E+07	80967.24d	4.1E+07
7	82879.31d	4.1E+07	82688.28	5.2E+07	82545.20d	1.9E+07	81228.30	3.7E+07	81036.90d	9.6E+07	80893.64d	4.2E+07
8	82794.23	4.2E+07	82586.72d	4.9E+07	82420.99d	1.5E+07	81160.78	3.6E+07	80951.80d	1.0E+08	80787.23	5.3E+07
9			82473.36	4.7E+07	(82289.36)	1.2E+07			80860.37	1.1E+08	80675.29d	6.0E+07
10			82352.05d	4.3E+07	82146.92d	8.2E+06			80760.55d	1.2E+08	80554.62	6.6E+07

			8-0						8-1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	110855.33d	3.9E+07					107862.35	5.8E+07				
1	110840.94d	3.8E+07	110796.20	5.8E+07			107848.20d	5.8E+07	107805.32	8.5E+07		
2	(110801.55)	3.5E+06	110722.27	5.8E+07	110676.67d	1.8E+07	(107814.28)	1.8E+06	107734.18d	8.5E+07	107689.67d	2.6E+07
3	110703.43d	1.9E+07	110609.07d	5.8E+07	110542.22	1.8E+07	107722.31d	2.3E+07	107628.03d	8.4E+07	107560.91d	2.5E+07
4	110576.31d	2.2E+07	110459.94d	5.8E+07	110386.95	3.3E+07	107603.28d	2.8E+07	107487.42	8.4E+07	107414.15d	6.4E+07
5	110411.99d	2.3E+07	110275.46	5.8E+07	110174.43	3.6E+07	107450.65d	3.0E+07	107312.95d	8.4E+07	107212.37d	5.9E+07
6	110213.41d	2.4E+07	110055.56d	5.8E+07	109933.47d	3.5E+07	107264.08	3.2E+07	107105.67	8.3E+07	106984.01	5.5E+07
7	109977.84d	2.6E+07	109801.03	5.8E+07	109659.33d	3.4E+07	107041.21d	3.7E+07	106865.88	8.3E+07	106724.92	5.3E+07
8	109696.78d	3.1E+07	109514.22d	5.8E+07	109353.81d	3.3E+07	106778.18d	5.1E+07	106594.91	8.2E+07	106434.95d	5.0E+07
9			109194.39d	5.8E+07	109014.04d	3.0E+07	106523.83d	1.3E+07	(106293.74)	8.2E+07	106114.17	4.4E+07
10					108636.01	1.4E+07			105963.81d	8.1E+07	105755.57d	1.7E+07

			8-2						8-3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	(104987.53)	3.6E+06					102230.38	2.8E+07				
1	104975.43	4.7E+06	104932.90d	4.6E+06			102219.53d	2.4E+07	102176.85	4.4E+07		
2	104945.91d	2.4E+06	104865.42d	4.5E+06	104821.55	1.0E+06	102194.38	1.1E+07	102114.16d	4.4E+07	102069.70	1.5E+07
3	(104861.52)	1.0E+05	104765.73d	4.5E+06	146958.45	4.0E+05	102115.53	2.0E+07	102020.43	4.4E+07	101953.70d	1.8E+07
4	(104749.75)	3.0E+05	104633.08	4.4E+06	104560.04	1.5E+07	102012.57d	2.0E+07	101896.34d	4.4E+07	101823.20	9.7E+06
5	(104607.30)	6.0E+05	104468.85d	4.3E+06	104368.61	7.2E+06	101880.34d	1.9E+07	101743.07	4.4E+07	101641.64d	2.0E+07
6	(104433.64)	9.0E+05	104275.00d	4.1E+06	(104152.28)	5.2E+06	101716.88d	1.9E+07	101559.08d	4.4E+07	101437.49d	2.2E+07
7			104048.68	4.0E+06	103908.42	4.3E+06	(101523.26)	1.2E+07	101347.82d	4.4E+07	101207.80d	2.3E+07
8							101290.79	1.3E+07	(101106.38)	4.4E+07	(100946.02)	2.4E+07

			8-4						8-5			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	99588.12	2.5E+07					97060.78	6.4E+06				
1	99579.78d	2.4E+07	99537.73	3.6E+07			97055.23	3.8E+06	97011.90d	1.1E+07		
2	(99558.34)	2.0E+05	99478.90d	3.6E+07	99433.85d	1.2E+07	97037.03d	1.6E+07	96956.45	1.1E+07	96912.32	4.5E+06
3	99485.43d	7.5E+06	99390.44d	3.6E+07	99323.03d	1.1E+07	96970.77d	1.1E+07	96875.05d	1.1E+07	96807.77	7.2E+06
4	99390.44d	9.5E+06	99273.93	3.6E+07	99201.12d	3.0E+07	96883.16	9.3E+06	96764.67	1.1E+07	(96693.04)	1.0E+06
5	99267.91d	1.0E+07	99130.20d	3.6E+07	99029.57	2.8E+07	96771.95	8.2E+06	96631.84d	1.1E+07	(96531.84)	1.0E+06
6	99116.69d	1.1E+07	98959.23d	3.5E+07	98837.17	2.6E+07	96631.84d	7.0E+06	(96473.20)	1.1E+07	96351.32d	2.2E+06
7	98936.91	1.2E+07	(98760.65)	3.5E+07	98618.27d	2.6E+07	96465.52	5.1E+06	96289.15d	1.1E+07	96147.23d	3.0E+06
8	98718.25d	2.0E+07	(98535.40)	3.4E+07	(98375.04)	2.5E+07	(96259.44)	3.0E+05	96076.40d	1.2E+07	95915.79d	3.7E+06
9	98518.91	2.7E+06	98290.25d	3.4E+07	98108.58d	2.2E+07	96081.17	1.3E+07			95671.16d	5.1E+06
10			98018.81	3.3E+07	97808.36d	9.5E+06					95388.68	1.1E+07

			8-6						8-8			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	94646.10	3.6E+07					90157.07*	4.0E+07				
1	94641.39d	3.0E+07	94598.12d	5.7E+07			90157.07*	2.9E+07	90113.67	6.4E+07		
2	94627.68	1.2E+07	94547.46	5.7E+07	94503.27d	2.1E+07	90151.58	3.5E+07	90071.12d	6.4E+07	90026.78	2.5E+07
3	94568.06d	2.2E+07	94471.58d	5.7E+07	94404.86	2.5E+07	90102.46	3.8E+07	90007.45	6.4E+07	89940.70d	3.3E+07
4	94488.67	2.2E+07	94371.48d	5.7E+07	94298.23	1.4E+07	90040.38	3.4E+07	89923.27d	6.4E+07	89849.70	2.5E+06
5	94385.41	2.1E+07	94247.30	5.7E+07	94148.02	2.9E+07	89957.00	3.1E+07	89819.98	6.4E+07	89718.43d	2.0E+07
6	94258.24	1.9E+07	94099.72	5.7E+07	93977.46	3.2E+07	89854.07d	2.7E+07	89694.80	6.4E+07	89574.04d	2.6E+07
7	(94106.00)	1.8E+07	(93929.69)	5.3E+07	93789.13	3.4E+07	89728.73	2.3E+07	89552.61	6.3E+07	89411.28d	2.9E+07
8	93921.70d	1.4E+07	93736.68	5.6E+07	93577.75	3.5E+07			89391.59	6.3E+07	89231.53	3.2E+07
9	93756.01	1.3E+07	93525.68d	5.6E+07	93343.94d	3.7E+07			89212.72	6.3E+07	89033.49	3.5E+07
10					93081.70	3.2E+07			89020.37	6.2E+07	88810.70d	4.1E+07

TableE.5. continue

			8-9						8-10			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	88084.50d	2.2E+06					86128.62	4.3E+07				
1	88087.20d	1.6E+06	88043.56d	4.2E+06			86132.64d	3.3E+07	86089.24	6.9E+07		
2	(88084.90)	1.0E+05	88004.75d	4.3E+06	87959.89	2.2E+06	86135.08d	4.5E+07	86055.02	6.8E+07	86010.74	2.4E+07
3	(88042.82)	1.0E+05	87947.00d	4.3E+06	87880.24	3.1E+06	86099.37	4.8E+07	86003.71	6.8E+07	85936.62	3.2E+07
4	(87987.29)	1.0E+05	87871.02	4.4E+06	87797.49	2.2E+06	86052.57	4.4E+07	85936.15	6.8E+07	85862.38	2.0E+06
5	(87914.86)	1.0E+05	87776.54	4.6E+06	87677.68	4.7E+06	85989.87	4.1E+07	85852.18	6.7E+07	85751.21d	1.7E+07
6	(87823.76)	1.0E+05	87665.52	4.7E+06	87544.94	5.9E+06	85911.53	3.8E+07	85753.72	6.7E+07	85631.12	2.2E+07
7	(87712.93)	1.0E+05	87536.38	4.8E+06	87395.66	7.0E+06	85815.09	3.3E+07	85639.74	6.6E+07	85497.53d	2.3E+07
8	(87575.87)	1.0E+05	87392.29	5.0E+06	87232.28d	8.2E+06	85693.98d	1.3E+07	85510.57	6.5E+07	85350.83	2.4E+07
9	(87462.54)	1.0E+05	87232.28d	5.2E+06	87051.02	9.8E+06	85599.47d	4.5E+07	85369.04	6.4E+07	85190.57	2.5E+07
10			87058.17	5.5E+06	86848.98	1.1E+07			85215.12	6.3E+07	85006.10	2.4E+07

			8-11						8-12			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	84291.59d	8.2E+06					82577.52d	5.9E+07				
1	84297.56	4.6E+06	84254.60d	1.6E+07			82586.72d	5.2E+07	82542.30	8.7E+07		
2	84304.87	1.1E+07	84224.51d	1.6E+07	84179.67d	8.1E+06	82597.18	3.0E+07	82517.07d	8.6E+07	82472.81d	2.7E+07
3	84275.18	7.6E+06	84179.67d	1.7E+07	84113.50d	1.3E+07	82574.08d	5.2E+07	82478.95d	8.5E+07	82412.07	2.9E+07
4	84237.10	5.5E+06	84120.94d	1.7E+07	(84047.16)	1.0E+05	82545.20d	5.3E+07	82428.73	8.4E+07	82355.31d	1.8E+07
5	84186.06d	4.2E+06	84047.24	1.8E+07	83946.76d	6.4E+06	82504.67	5.4E+07	82366.63	8.3E+07	(82266.03)	3.0E+07
6	(84119.27)	3.1E+06	83960.94d	1.9E+07	83838.89d	1.1E+07	82451.85	5.3E+07	(82293.68)	8.1E+07	82172.21	2.9E+07
7	(84037.99)	1.9E+06	83861.63d	2.0E+07	83720.76d	1.4E+07	82385.86	5.2E+07	82210.10d	7.8E+07	(82069.03)	2.7E+07
8	(83934.16)	1.0E+05	83751.61	2.1E+07	(83590.83)	1.7E+07	(82300.09)	3.8E+07	82116.60d	7.6E+07	81956.83	2.4E+07
9	83858.78d	4.7E+06	83628.41	2.2E+07	(83448.09)	2.2E+07	82244.16d	4.8E+07	82014.93d	7.2E+07	81833.98d	2.0E+07
10			83497.33d	2.4E+07								

			8-13						9-0			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	80991.99d	2.4E+07										
1	81001.98d	1.7E+07	80958.75	4.2E+07			111976.21d	2.0E+07	111930.39d	4.1E+07		
2	81017.97	2.4E+07	80937.68	4.4E+07	80893.64d	1.8E+07	111921.56d	1.9E+07	111853.35	4.1E+07	111814.35d	1.6E+07
3	81001.98d	2.4E+07	80906.61	4.6E+07	80839.71	2.6E+07	(111826.78)	1.8E+07	111740.62d	4.1E+07	111678.79d	2.0E+07
4	80981.83	2.2E+07	80865.84	4.9E+07	80791.21d	2.7E+06	(108722.36)	3.4E+07	111586.07	4.1E+07	111505.48d	2.2E+07
5	80953.66d	2.0E+07	80815.73	5.3E+07	80714.70	2.0E+07	111524.33d	1.8E+07	111394.77d	4.1E+07	111296.96d	2.2E+07
6	80913.64	2.0E+07	80756.63	5.8E+07	80634.71	2.9E+07	111316.30d	2.0E+07	111169.22	4.1E+07	111051.56d	2.2E+07
7	80864.32d	1.8E+07	80688.60	6.5E+07	80548.54d	3.5E+07	111060.22	2.3E+07	110907.08	4.1E+07	110772.80d	2.2E+07
8	80797.50d	9.2E+06	80614.79	7.3E+07	(80454.30)	4.2E+07	(110811.28)	9.6E+06	110612.10d	4.1E+07	110455.68d	2.0E+07
9	80764.28	2.8E+07	80533.16d	8.2E+07	(80352.78)	5.0E+07	(110494.87)	1.4E+07	110282.83d	4.1E+07	(110097.35)	8.5E+06
10									109922.65d	4.1E+07	109748.52	2.8E+07

			9-1						9-2			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	108998.72	4.6E+07					106124.76d	9.1E+06				
1	108984.27d	3.8E+07	108940.32d	8.1E+07			106111.96	7.0E+06	106067.62	1.8E+07		
2	108933.10	3.5E+07	108867.07d	8.0E+07	108825.97d	3.4E+07	106065.25d	6.3E+06	105998.95d	1.8E+07	105957.62	9.4E+06
3	108846.29d	3.4E+07	108757.95	8.0E+07	108697.15d	4.2E+07	105983.59	6.1E+06	105895.89	1.8E+07	105835.62d	1.2E+07
4	108721.12d	3.4E+07	108613.01	8.0E+07	108533.35	4.5E+07	105867.58d	6.2E+06	105758.61d	1.8E+07	105679.33	1.2E+07
5	108563.38	3.4E+07	108433.35	8.0E+07	108334.84	4.6E+07	105718.02	6.7E+06	105589.80	1.8E+07	105490.93d	1.2E+07
6	108365.69d	3.8E+07	108219.97d	7.9E+07	108103.33	4.6E+07	105535.87d	8.6E+06	105387.59d	1.7E+07	105271.32d	1.2E+07
7	108125.21	4.9E+07	107973.36d	7.9E+07	107837.48d	4.4E+07	105308.54d	1.8E+07	(105156.41)	1.7E+07	105020.39d	1.1E+07
8	107892.27d	1.5E+07	107692.72	7.9E+07	107537.55d	3.9E+07	105091.84d	6.0E+05	104892.03d	1.7E+07	104737.80d	8.0E+06
9	(107594.23)	2.3E+07	107381.70	7.8E+07	107196.47d	1.3E+07	104810.28	2.6E+06	(104598.98)	1.6E+07	(104413.48)	6.0E+05
10			107041.21d	7.8E+07					104276.82d	1.6E+07	104105.53d	1.9E+07

			9-3						9-4			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	103366.74	1.3E+07					100724.50d	3.0E+07				
1	103357.47d	1.1E+07	103312.73	1.8E+07			100717.54d	2.5E+07	100672.13d	5.1E+07		
2	103313.54d	1.0E+07	103247.24	1.8E+07	103206.33d	5.6E+06	100677.39	2.2E+07	100611.31	5.1E+07	100570.28d	2.1E+07
3	103238.21	9.8E+06	103150.62	1.9E+07	103090.48d	6.8E+06	100608.14	2.1E+07	100520.38	5.1E+07	100459.71d	2.6E+07
4	103131.18	9.3E+06	103022.22	1.9E+07	102942.20d	7.6E+06	100509.36d	2.0E+07	100399.92d	5.1E+07	100320.00	2.8E+07
5	(102991.74)	8.7E+06	(102862.54)	1.9E+07	102763.77	8.3E+06	100379.27d	2.0E+07	100250.50	5.1E+07	100151.56	3.0E+07
6	102820.51	7.6E+06	102672.85d	1.9E+07	102555.44*	8.9E+06	100219.71	2.1E+07	100072.79d	5.0E+07	99955.79	3.0E+07
7	(102606.58)	3.4E+06	102454.12	1.9E+07	102318.52	9.6E+06	(100020.19)	2.4E+07	99868.60d	5.0E+07	99731.87	3.0E+07
8	102403.09d	9.5E+06	(102203.95)	1.9E+07	102048.03	1.1E+07	(99832.44)	8.6E+06	(99632.97)	5.0E+07	99478.90d	2.8E+07
9	102143.48d	8.7E+06	(101932.45)	1.9E+07	101746.03	1.1E+07	99590.09d	1.2E+07	99378.58d	4.9E+07	99193.22d	1.4E+07
10			101629.21d	2.0E+07	(101456.45)	7.0E+06			99096.95d	4.9E+07	98921.97	3.6E+07

			9-6						9-7			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	95782.39d	3.1E+07					93480.67	9.4E+06				
1	95778.40	2.7E+07	95733.88	4.6E+07			93478.17	7.0E+06	93434.57d	1.8E+07		
2	95747.22d	2.5E+07	95680.93	4.6E+07	95640.03d	1.5E+07	(93451.94)	5.8E+06	93385.38	1.8E+07	93343.94d	8.8E+06
3	95689.80d	2.3E+07	95602.29	4.6E+07	95541.94d	1.8E+07	93400.05d	5.1E+06	93312.13	1.8E+07	93251.92	1.1E+07
4	95606.78	2.1E+07	95497.41d	4.6E+07	95417.89d	2.0E+07	(93325.44)	4.4E+06	93215.91	1.8E+07	93135.54	1.3E+07
5	95497.41d	2.0E+07	95368.61	4.6E+07	95268.74d	2.2E+07	93224.93	4.4E+06	93097.63d	1.8E+07	92997.56d	1.4E+07
6	95359.21d	1.7E+07	95213.91	4.6E+07	95096.77	2.3E+07	(93101.45)	4.7E+06	(92954.75)	1.8E+07	92837.25d	1.4E+07
7	(95189.32)	8.5E+06	95037.62d	4.6E+07	94900.03	2.5E+07	92944.12	7.9E+06	92792.07d	1.8E+07	92654.47	1.5E+07
8	(95035.10)	1.9E+07	94835.51	4.6E+07	94679.94d	2.7E+07	(92805.25)	5.0E+05	92604.65	1.7E+07	92448.48d	1.4E+07
9	(94825.08)	1.7E+07	(94613.06)	4.6E+07	(94427.56)	2.7E+07	(92612.62)	1.2E+06	(92400.60)	1.7E+07	92214.97	7.7E+06
10			94369.59	4.6E+07	94195.60d	1.8E+07			92176.23	1.7E+07	92003.18	1.8E+07

TableE.5. continue

			9-8						9-9			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	91293.44*	1.9E+07					89220.68d	2.9E+07				
1	91293.44*	1.8E+07	91249.09	2.4E+07			89222.47	2.4E+07	89178.48d	4.5E+07		
2	91270.32d	1.7E+07	91204.23d	2.4E+07	91163.07	5.3E+06	89204.45d	2.2E+07	89137.82	4.5E+07	89096.21	1.6E+07
3	91224.58d	1.6E+07	91137.69	2.4E+07	91076.86	6.1E+06	89164.92d	1.9E+07	89077.16	4.5E+07	89016.42d	2.0E+07
4	(91158.13)	1.5E+07	91049.01	2.4E+07	90969.14	6.7E+06	89105.67	1.7E+07	88996.71	4.5E+07	88916.45	2.2E+07
5	(91068.62)	1.4E+07	90938.66d	2.4E+07	90841.28	7.2E+06	89026.49d	1.5E+07	88897.31	4.5E+07	88798.53d	2.5E+07
6	90956.78	1.1E+07	(90809.54)	2.3E+07	90690.71d	7.6E+06	88926.28d	1.3E+07	88779.24	4.5E+07	88661.93	2.7E+07
7	(90812.27)	1.4E+06	90660.69d	2.3E+07	90522.99	8.3E+06	88796.28	5.6E+06	88644.04d	4.5E+07	88507.15	2.9E+07
8	90688.97	2.2E+07	90491.16	2.3E+07	90334.10d	9.9E+06	(88689.78)	1.3E+07	88490.43	4.5E+07	88334.80d	3.2E+07
9	90514.34d	1.7E+07			90117.46d	1.5E+07	88534.37d	1.1E+07	(88320.92)	4.5E+07	88134.94	3.4E+07
10									88136.31d	4.5E+07	87963.30	2.2E+07

			9-10						9-11			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	87264.67	5.1E+06					85428.09d	4.9E+07				
1	87269.59d	5.7E+06	87224.81	5.4E+06			85433.82	4.4E+07	85389.94	6.9E+07		
2	87254.92	6.1E+06	87187.97d	5.3E+06	(87146.91)	7.0E+05	85423.64d	4.1E+07	85357.73	6.9E+07	85316.13	2.0E+07
3	87221.98	6.5E+06	87133.71d	5.2E+06	(87073.25)	6.0E+05	85398.04d	3.8E+07	85309.65d	6.9E+07	85249.14*	2.4E+07
4	87170.33	6.7E+06	87060.50	5.1E+06	(86981.70)	4.0E+05	85355.15	3.5E+07	85246.23	6.9E+07	85166.09d	2.7E+07
5	87102.48d	6.7E+06	86973.37	4.9E+06	(86873.54)	3.0E+05	85296.91	3.2E+07	85167.63	6.9E+07	85069.16	2.9E+07
6	(87013.77)	5.8E+06	86867.22	4.7E+06	(86749.70)	2.0E+05	85222.13	2.6E+07	85075.48	6.9E+07	84957.54	3.1E+07
7	(86898.15)	1.3E+06	86746.38	4.4E+06	(86609.38)	1.0E+05	85119.85	8.1E+06	84969.93d	6.9E+07	84833.55d	3.3E+07
8	86808.60	1.2E+07	86608.15d	4.1E+06	(86453.27)	1.0E+05	(85048.23)	3.7E+07	84849.76	6.9E+07	84692.37d	3.6E+07
9	86668.75	1.0E+07	(86457.85)	3.5E+06	(86272.35)	1.0E+05	84928.85d	3.2E+07	84716.88	6.8E+07	84530.77d	3.8E+07
10			86293.72	3.5E+06	(86119.72)	1.0E+05			84573.18d	6.8E+07	84399.19d	2.1E+07

			9-13						9-14			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	82127.56d	6.5E+07					80675.29d	1.7E+07				
1	82138.13d	6.0E+07	82094.07	9.4E+07			80688.17d	1.5E+07	80644.17	2.7E+07		
2	82137.18	5.7E+07	82070.99	9.4E+07	82029.80	2.8E+07	80690.93	1.3E+07	80625.94	2.8E+07	80584.78	8.8E+06
3	82123.25	5.6E+07	82037.01	9.3E+07	81976.39	3.3E+07	80686.79	1.2E+07	80598.97	3.1E+07	80538.59	1.2E+07
4	82100.66	5.5E+07	81991.80	9.2E+07	81911.64	3.4E+07	80672.78	1.2E+07	80563.45	3.4E+07	(80483.62)	1.6E+07
5	82065.22	5.3E+07	81935.52	9.1E+07	81836.88	3.5E+07	80649.10	1.1E+07	80520.07d	3.9E+07	(80421.36)	2.1E+07
6	82017.82	5.0E+07	81870.53	8.9E+07	81753.37	3.4E+07	80616.54	1.0E+07	(80469.80)	4.5E+07	(80352.43)	2.6E+07
7	81948.79	3.1E+07	81795.71	8.7E+07	81659.87	3.2E+07	80565.40	3.8E+06	(80413.61)	5.2E+07	(80276.59)	3.3E+07
8	81911.64d	5.1E+07	81713.25	8.4E+07	81556.74	2.8E+07	80548.54d	2.0E+07	(80348.92)	6.2E+07	(80193.41)	4.1E+07
9	81833.98d	5.1E+07	81621.60	8.2E+07	(81436.10)	1.4E+07			(80280.71)	7.5E+07	(80095.21)	4.4E+07
10			81524.72	7.7E+07	81350.87	2.7E+07			(80208.34)	9.0E+07	(80034.40)	4.6E+07

			10-0						10-1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	113062.53d	1.8E+07					110067.14	4.4E+07				
1	113042.80d	1.5E+07	113001.91	2.8E+07			(110050.17)	3.8E+07	110009.11d	7.1E+07		
2	(112982.85)	1.5E+07	(112921.14)	2.8E+07	112882.81d	1.0E+07	109995.42	3.5E+07	109933.47d	7.1E+07	109894.31	2.6E+07
3	112885.50d	1.4E+07	(112802.43)	2.8E+07	112744.20d	1.3E+07	109903.29d	3.3E+07	109821.25d	7.1E+07	109763.03d	3.3E+07
4	(112746.20)	1.4E+07	112646.48d	2.8E+07	112568.04*	1.4E+07	109773.77d	3.4E+07	109672.18d	7.0E+07	109596.34d	3.6E+07
5	112568.04*	1.5E+07	112448.98	2.8E+07	112354.27d	1.4E+07	109605.91d	3.7E+07	109486.63d	7.0E+07	109391.66	3.7E+07
6	(112338.73)	1.6E+07	112215.26	2.8E+07	112103.63d	1.4E+07	109387.77	4.4E+07	109265.82d	7.0E+07	109153.44	3.6E+07
7	112117.05	7.2E+06	111947.46	2.9E+07	111814.35d	1.3E+07	109181.88d	1.5E+07	(109012.19)	7.0E+07	108880.41	3.1E+07
8	111825.10d	9.6E+06			111479.84	4.0E+06	108907.33d	2.1E+07			108559.70	7.8E+06
9	111500.73d	1.1E+07	111303.62d	2.9E+07	(111153.52)	1.9E+07	108598.75d	2.6E+07	108404.09d	6.9E+07	(108252.88)	5.1E+07
10			110932.15d	2.9E+07	(110762.80)	1.8E+07			108051.34	6.9E+07	107883.31d	4.6E+07

			10-2						10-4			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	107191.58d	1.9E+07					101793.73d	3.0E+07				
1	107177.72	1.6E+07	107136.72d	3.2E+07			101782.14d	2.6E+07	101740.99	4.8E+07		
2	107127.26d	1.5E+07	107065.88d	3.2E+07	107026.32	1.3E+07	101739.94	2.3E+07	101677.93d	4.8E+07	101638.88d	1.8E+07
3	107041.21d	1.4E+07	106959.39d	3.2E+07	106901.15	1.6E+07	101665.98	2.2E+07	101583.83	4.8E+07	101525.45d	2.2E+07
4	106920.05d	1.5E+07	106818.25d	3.1E+07	106741.79d	1.7E+07	101559.08d	2.1E+07	101459.10	4.8E+07	101382.25d	2.4E+07
5	106762.49	1.7E+07	106643.18	3.1E+07	106548.71	1.7E+07	101423.17	2.1E+07	101305.38d	4.8E+07	101210.00d	2.5E+07
6	106557.31	2.8E+07	106434.95d	3.1E+07	106322.02d	1.6E+07	101242.44	1.9E+07	101119.92	4.7E+07	101006.38	2.6E+07
7	106364.00d	3.3E+06	106193.42d	3.0E+07	106062.11d	1.3E+07	(101076.36)	1.2E+07	100907.47d	4.7E+07	100774.90d	2.5E+07
8	106106.76	6.7E+06			(105579.21)	1.0E+06	100846.75d	1.4E+07			100499.95d	1.2E+07
9	105816.81d	9.7E+06	105620.83d	2.9E+07	105469.56d	2.8E+07	100596.44	1.6E+07	100399.92d	4.7E+07	(100249.17)	3.0E+07
10					105120.27d	2.3E+07			100106.72d	4.6E+07	99936.55d	3.0E+07

			10-5						10-6			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	99264.93d	6.9E+06					96850.95	1.3E+07				
1	99255.08d	5.4E+06	99215.44d	1.2E+07			96844.92	1.2E+07	96803.11d	1.9E+07		
2	99217.47d	4.6E+06	99155.54d	1.2E+07	99116.69d	5.2E+06	96810.15d	1.1E+07	96748.05*	1.9E+07	96708.57	5.9E+06
3	99150.90d	4.2E+06	99068.02	1.2E+07	99009.80d	6.8E+06	96748.05*	1.0E+07	96665.34	1.9E+07	96607.65	7.1E+06
4	(99052.32)	4.4E+06	98950.76	1.2E+07	98873.85d	7.5E+06	96658.56	9.2E+06	96556.87	1.9E+07	96479.78r	7.7E+06
5	98924.41d	5.6E+06	(98806.13)	1.2E+07	98710.92	7.8E+06	96539.96	7.1E+06	96421.85	1.9E+07	96327.44d	8.3E+06
6	98756.15	1.3E+07	(98633.73)	1.1E+07	98521.64	7.4E+06	(96383.20)	1.0E+06	96258.91d	1.9E+07	96147.23d	9.2E+06
7	(98604.33)	1.0E+05	98433.57d	1.1E+07	(98302.94)	5.7E+06	96245.19d	1.3E+07	96076.40d	1.9E+07	95944.17	1.1E+07
8	(98387.68)	9.0E+05			(98040.99)	3.0E+05	96049.56d	1.1E+07			95702.52	1.4E+07
9	(98156.99)	1.9E+06	97961.72d	1.0E+07	(97809.79)	1.5E+07	95831.00	8.4E+06	95634.71d	2.0E+07	95482.52	4.5E+06
10			97687.54	9.9E+06	(97516.75)	1.2E+07			95379.32d	2.0E+07		

TableE.5. continue

			10-7						10-9			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	94549.09d	2.5E+07					90289.22	3.2E+07				
1	94543.95d	2.1E+07	94503.27d	4.1E+07			90288.95	2.8E+07	90248.13d	4.8E+07		
2	94513.35	1.9E+07	94452.31	4.1E+07	94412.85d	1.6E+07	90266.18	2.6E+07	90204.47	4.7E+07	90165.22	1.6E+07
3	94457.37	1.7E+07	94376.66d	4.1E+07	94318.49d	2.0E+07	90221.87	2.3E+07	90140.47d	4.7E+07	90082.29	1.9E+07
4	94376.66d	1.6E+07	94275.12	4.1E+07	94198.23d	2.2E+07	90157.07d	2.1E+07	90055.34	4.7E+07	89979.13d	2.1E+07
5	(94269.42)	1.5E+07	(94150.02)	4.0E+07	94056.05d	2.3E+07	90071.12d	1.7E+07	89951.01d	4.7E+07	89855.48d	2.2E+07
6	94123.96	1.2E+07	94000.95d	4.0E+07	93889.19d	2.4E+07	(89948.64)	4.1E+06	89825.79d	4.7E+07	89713.35d	2.4E+07
7	(94000.14)	8.3E+06	(93830.84)	4.0E+07	93699.44d	2.5E+07	89851.83	2.4E+07	89681.76d	4.6E+07	(89551.03)	2.7E+07
8	93818.08	9.2E+06			93471.84d	1.6E+07	89703.67	2.0E+07			89357.27	2.9E+07
9	93618.46	9.3E+06	93422.70d	3.9E+07	(93271.27)	2.5E+07	89539.16d	1.6E+07	89342.77	4.6E+07	89191.08d	1.4E+07
10									89146.71d	4.5E+07	88977.17	2.0E+07

			10-10						10-11			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	88333.38	6.7E+06					86496.28	2.1E+07				
1	88334.80d	5.0E+06	88294.06	1.2E+07			86499.52	2.0E+07	86458.64	3.0E+07		
2	88315.92	3.9E+06	88254.79	1.2E+07	88215.39d	5.3E+06	86485.77d	2.0E+07	86424.17	2.9E+07		
3	88278.92	3.1E+06	88196.78d	1.2E+07	88139.24	7.2E+06	86453.98d	1.9E+07	86372.92	2.9E+07	86314.64	9.1E+06
4	(88221.87)	2.5E+06	88120.35d	1.2E+07	88043.56	8.6E+06	86406.43d	1.8E+07	86305.35d	2.9E+07	86229.60d	9.1E+06
5	(88145.09)	2.1E+06	88025.57	1.2E+07	87931.13	1.0E+07	86341.17d	1.5E+07	86220.78d	2.8E+07	86126.87	9.0E+06
6	(88036.23)	1.8E+06	87914.57d	1.2E+07	87800.32d	1.1E+07	86243.68	2.9E+06	86121.29d	2.8E+07	86009.69d	8.8E+06
7	(87954.32)	6.0E+05	(87785.02)	1.3E+07	87653.28d	1.3E+07	86176.96d	2.6E+07	86009.69d	2.7E+07	85876.60	9.0E+06
8	(87822.42)	6.0E+05			87475.05d	1.2E+07	86061.64	2.3E+07			85715.48d	9.1E+06
9	(87675.72)	5.0E+05	87479.40	1.3E+07	(87328.52)	1.1E+07	85934.46d	1.9E+07	85738.85d	2.5E+07	(85587.58)	3.7E+06
10			87303.90	1.3E+07	87133.71d	1.4E+07			85584.71	2.4E+07	85413.67	4.4E+06

			10-12						10-13			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	84782.32	3.0E+07					83195.82	4.5E+06				
1	84788.00	2.6E+07	84746.95d	4.6E+07			83204.16	4.9E+06	83162.77	5.4E+06		
2	84778.24	2.3E+07	84716.88d	4.6E+07	84677.58	1.6E+07	83199.49	5.4E+06	83137.54	5.2E+06	83097.63	1.0E+06
3	84754.06d	2.0E+07	84672.08d	4.7E+07	84613.52d	2.0E+07	83181.78d	6.0E+06	83100.55d	4.8E+06	(83041.68)	8.0E+05
4	84715.02	1.8E+07	84613.52d	4.7E+07	84536.80d	2.3E+07	83151.86d	6.6E+06	83049.11d	4.3E+06	(82973.52)	5.0E+05
5	84659.69	1.4E+07	84542.01	4.7E+07	84446.09	2.5E+07	83107.91d	7.1E+06	82988.96	3.8E+06	(82894.32)	1.0E+05
6	84577.65d	2.5E+06	84454.34	4.8E+07	84341.68	2.8E+07	83039.86	5.8E+06	82916.58d	3.1E+06	(82804.29)	1.0E+05
7	84525.86	2.0E+07	84355.71	4.8E+07	84224.51d	3.2E+07	83004.89d	5.9E+06	(82835.30)	2.5E+06	(82703.21)	2.0E+05
8	84428.23d	1.7E+07			84081.95	3.5E+07	82925.90	6.9E+06			(82579.18)	2.8E+06
9	84320.31	1.3E+07	84123.44	4.9E+07	83973.58d	1.8E+07	82839.70d	7.3E+06	(82643.47)	1.2E+06	(82492.27)	1.0E+05
10			83993.17d	5.0E+07	83822.35d	2.5E+07						

			10-14						11-0			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	81743.83*	5.8E+07					114059.81d	1.3E+07				
1	81754.17*	5.2E+07	81713.25d	8.5E+07			(114039.77)	1.1E+07	114001.83d	2.0E+07		
2	81754.17*	5.0E+07	81692.50*	8.5E+07	81653.02d	2.7E+07	113978.18d	1.1E+07	113920.09	2.0E+07	113883.15	7.0E+06
3	81743.83*	4.8E+07	81662.43	8.4E+07	81604.13	3.2E+07	113872.99	1.0E+07	113797.92d	2.0E+07	113743.50	8.5E+06
4	81723.53d	4.6E+07	81622.67d	8.4E+07	81546.18d	3.3E+07	113725.79	1.1E+07	(113635.41)	2.0E+07	113562.33	9.1E+06
5	81692.50*	4.1E+07	81573.73	8.3E+07	81479.79	3.3E+07	(113570.17)	9.0E+05	113433.91	2.0E+07	113343.47	9.1E+06
6	81638.56	2.0E+07	81515.88	8.1E+07	81404.01	3.2E+07	(113334.76)	5.4E+06	113195.20d	2.0E+07	113084.89	7.8E+06
7	81620.86d	4.6E+07	81452.21d	8.0E+07	(81320.14)	3.0E+07	(113072.68)	6.9E+06	112917.68d	2.0E+07	112817.21d	1.2E+07
8	81563.41d	4.5E+07			81215.80	1.7E+07	(112772.59)	7.9E+06	(112603.81)	2.0E+07	112474.77d	1.3E+07
9	81497.98d	4.2E+07	81302.04	7.4E+07	81151.43	2.6E+07	(112432.23)	9.6E+06	112255.72d	2.0E+07		
10			81218.60d	7.0E+07	81049.26d	2.4E+07			111872.33	2.0E+07		

			11-1						11-2			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	111067.62d	3.8E+07					108193.10d	2.6E+07				
1	111048.07	3.3E+07	111009.50d	5.9E+07			108175.74	2.3E+07	108137.40d	4.1E+07		
2	110989.73	3.1E+07	110932.15d	5.9E+07	110894.92	2.1E+07	108121.36d	2.1E+07	108063.89d	4.1E+07	108025.91d	1.5E+07
3	110892.44	3.1E+07	110816.28	5.9E+07	110760.91d	2.6E+07	108030.09d	2.1E+07	107954.19d	4.1E+07	107899.16d	1.8E+07
4	110754.89	3.4E+07	110662.30d	5.9E+07	110589.80	2.8E+07	107900.81	2.5E+07	107808.63d	4.1E+07	107736.81d	1.9E+07
5	(110608.13)	1.3E+06	110471.77	5.9E+07	110381.27d	2.7E+07	(107764.25)	1.0E+05	107628.03d	4.0E+07	107537.55d	1.9E+07
6	110385.86	1.4E+07	110244.54	5.9E+07	110134.90	2.3E+07	(107553.40)	6.7E+06	107414.15d	4.0E+07	107303.01d	1.4E+07
7	(110137.28)	1.9E+07	109980.37d	5.9E+07	109880.87d	4.0E+07	107320.49d	1.0E+07	107164.89d	3.9E+07	107065.88d	3.8E+07
8	(109853.57)	2.2E+07	109685.00	5.8E+07	109555.56	4.1E+07	107053.03	1.3E+07	106883.93	3.9E+07	106754.66	3.3E+07
9	109531.45	2.8E+07	109353.81d	5.8E+07	109207.61d	3.8E+07	106747.79	2.0E+07	106571.80d	3.8E+07	106424.89d	2.8E+07
10			108991.64d	5.8E+07	(108829.24)	3.5E+07			106228.07d	3.7E+07	106065.25d	2.4E+07

			11-4						11-5			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	102793.55d	2.2E+07					100265.21d	1.7E+07				
1	102780.17	1.9E+07					100254.11	1.4E+07	100215.53d	2.7E+07		
2	102734.01d	1.7E+07	102676.91d	3.4E+07	102639.12d	1.2E+07	100211.61	1.3E+07	100154.29d	2.7E+07	100117.14d	1.0E+07
3	102654.84r	1.7E+07	102579.35d	3.4E+07	102524.04	1.5E+07	100138.93	1.3E+07	100061.97d	2.7E+07	100006.92d	1.3E+07
4	102541.96d	1.6E+07	102449.68d	3.4E+07	102377.20d	1.6E+07	100033.43	1.4E+07	99940.52d	2.7E+07	99868.60d	1.4E+07
5	(102424.99)	4.9E+06	102288.58d	3.4E+07	102200.00	1.7E+07	(99927.30)	1.0E+05	99791.25d	2.6E+07	99701.03	1.4E+07
6	102239.08d	1.1E+07	102098.79d	3.4E+07	101988.57d	1.7E+07	(99752.44)	3.4E+06	99612.73d	2.6E+07	99503.23d	1.1E+07
7	102032.11d	1.2E+07	101875.57d	3.4E+07	101777.15d	1.1E+07	99561.78	5.2E+06	99404.44d	2.6E+07	99305.04d	2.3E+07
8	101793.73d	1.3E+07	101625.69d	3.4E+07	101495.85d	1.9E+07	99088.41	1.0E+07	99166.01d	2.5E+07	99036.16d	2.3E+07
9	101528.7d	1.2E+07	(101351.33)	3.4E+07	101203.28	2.0E+07	99088.82d	1.0E+07	98913.11	2.4E+07	98766.42d	2.1E+07
10			101047.03	3.4E+07	(100884.07)	2.0E+07			98627.39d	2.4E+07	98463.13d	1.8E+07

TableE.5. continue

			11-7						11-8			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	95549.50	2.6E+07					93361.49d	5.6E+06				
1	95543.26	2.2E+07	95504.61	4.0E+07			(93357.20)	4.3E+06	93318.14	9.7E+06		
2	95508.55	2.0E+07	95450.96	4.0E+07	95413.84d	1.5E+07	(93327.04)	3.7E+06	93268.95	9.7E+06	(93232.30)	4.2E+06
3	95446.58d	1.8E+07	95369.85d	4.0E+07	95316.14	1.8E+07	(93271.98)	3.4E+06	(93195.94)	9.6E+06	(93140.88)	5.5E+06
4	95359.21d	1.6E+07	95265.97	4.0E+07	95192.59d	2.0E+07	(93190.69)	4.1E+06	93097.63d	9.5E+06	93025.22	6.2E+06
5	(95271.19)	8.7E+06	95134.90	4.0E+07	95044.56	2.1E+07	(93113.94)	8.0E+05	(92977.62)	9.4E+06	92887.55d	6.5E+06
6	95120.03d	1.4E+07	94979.65d	4.0E+07	94869.83	2.2E+07	(92974.73).	1.0E+05	92834.30	9.2E+06	92724.23d	5.6E+06
7	94955.98d	1.4E+07	(94800.74)	4.0E+07	(94700.52)	8.1E+06	(92824.24)	4.0E+05	92669.55d	9.1E+06	(92568.82)	1.1E+07
8	(94766.57)	1.3E+07	94598.12d	3.9E+07	(94468.76)	1.5E+07	(92651.05)	7.0E+05	(92482.27)	8.8E+06	92353.83d	1.2E+07
9	94549.09d	1.1E+07	(94373.43)	3.9E+07	94226.31	2.2E+07	(92451.63)	1.8E+06	(92275.17)	8.6E+06	92128.57	1.1E+07
10			94125.99d	3.9E+07	(93963.92)	2.4E+07			92046.48	8.3E+06	91885.66	1.0E+07

			11-9						11-10			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	91290.70	1.3E+07					89333.81	2.4E+07				
1	91286.62	1.2E+07	91247.36	1.9E+07			89332.56	2.0E+07	89293.99	3.9E+07		
2	91260.34	1.1E+07	91202.65d	1.9E+07	91165.81d	5.7E+06	89310.02d	1.8E+07	89253.03	3.9E+07	89215.48	1.4E+07
3	91209.92d	9.5E+06	91135.38	1.9E+07	91081.32d	6.8E+06	89267.86	1.5E+07	89191.08d	3.8E+07	89137.41	1.8E+07
4	91139.72d	6.5E+06	91046.15	1.9E+07	90973.61	7.3E+06	89204.45d	1.2E+07	89111.03d	3.8E+07	89037.73	2.1E+07
5	91072.78d	2.0E+07	90935.22	1.8E+07	90843.42d	8.0E+06	89146.71d	1.0E+07	89010.60	3.8E+07	88920.39	2.3E+07
6	(90944.67)	1.6E+07	90803.95	1.8E+07	90694.72	9.9E+06	(89032.26)	1.2E+07	88890.33d	3.8E+07	88781.42d	2.5E+07
7	90808.25d	1.3E+07	90651.50d	1.8E+07	(90552.80)	1.0E+05	(88910.120)	1.1E+07	88755.49d	3.8E+07	88655.40	5.0E+06
8	90651.50d	1.1E+07	(90482.32)	1.8E+07	(90353.29)	2.6E+06	(88769.67)	9.4E+06	88601.88d	3.8E+07	88471.07d	1.8E+07
9	90470.68	5.3E+06	90293.66	1.8E+07	90147.90	4.3E+06	(88607.14)	6.5E+06	88430.67d	3.7E+07	88283.88d	2.2E+07
10			90086.11d	1.8E+07					88243.59d	3.7E+07	88080.02	2.5E+07

			11-12						11-13			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	85782.96d	3.1E+07					84196.38	1.2E+07				
1	85786.15	2.8E+07	85747.78d	4.7E+07			84201.40	9.3E+06	84163.72d	2.0E+07		
2	85772.98d	2.6E+07	85715.48d	4.6E+07	85678.11	1.5E+07	84193.68d	7.6E+06	84136.02	2.0E+07	84098.70	8.0E+06
3	85743.23	2.3E+07	85667.99	4.6E+07	85613.22	1.8E+07	84171.46	6.1E+06	84094.93	2.1E+07	84039.55	1.1E+07
4	85696.11d	1.8E+07	85603.86d	4.6E+07	85531.01	1.9E+07	84132.95d	3.9E+06	84040.67d	2.1E+07	83967.23	1.3E+07
5	85661.04d	3.1E+07	85524.82	4.5E+07	85433.82	2.0E+07	84111.29d	8.4E+06	83973.58d	2.2E+07	83883.61	1.5E+07
6	(85572.92)	3.0E+07	85432.55	4.5E+07	85322.20	2.2E+07	(84035.59)	6.6E+06	83895.28d	2.2E+07	83785.40d	1.9E+07
7	85481.36d	2.6E+07	85324.98d	4.4E+07	(85225.98)	1.7E+06	83960.94d	5.1E+06	83805.03	2.3E+07	(83704.98)	1.0E+06
8	85374.50	2.2E+07	85205.73	4.3E+07	(85077.67)	1.1E+07	(83873.02)	3.8E+06			(83575.21)	1.1E+07
9	85251.23	1.4E+07	85075.77	4.2E+07	84928.85d	1.3E+07	83770.88	1.8E+06	83594.37d	2.5E+07	(83448.07)	1.6E+07
10			84932.60	4.1E+07	84769.19d	1.4E+07			83474.40	2.7E+07	83310.86	2.0E+07

			11-14						11-15			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	82744.31	1.4E+07					81432.66d	4.5E+07				
1	82751.90	1.3E+07	82713.43	1.8E+07			81443.94	4.0E+07	81405.40	6.7E+07		
2	82748.11d	1.4E+07	82690.80	1.7E+07	82653.55	4.5E+06	81446.18d	3.7E+07	81388.80d	6.7E+07	81350.87d	2.2E+07
3	82733.05	1.4E+07	82657.96	1.7E+07	82602.11	4.5E+06	81439.60	3.5E+07	81363.14d	6.6E+07	81308.45d	2.6E+07
4	82705.18	1.3E+07	82612.36d	1.6E+07	82539.13d	3.7E+06	81421.17	2.9E+07	81328.98d	6.6E+07	81255.83	2.7E+07
5	82694.65d	8.1E+06	82558.60	1.5E+07	(82467.99)	2.7E+06	81422.93	2.8E+07	81286.82	6.5E+07	81197.32	2.7E+07
6	82635.10d	1.4E+07	82494.58	1.3E+07	(82384.99)	1.4E+06	81381.57	3.6E+07	81240.20*	6.3E+07	81130.29d	2.6E+07
7	82577.52d	1.4E+07	82420.99d	1.2E+07	82321.04	3.5E+06	81341.53d	3.4E+07	81185.68d	6.1E+07	81085.79d	1.0E+07
8	82509.95	1.4E+07	(82340.93)	1.0E+07	(82211.90)	1.7E+06	81294.81	3.1E+07	81126.55	5.8E+07	80997.91d	2.0E+07
9	82429.96	1.3E+07	(82253.54)	8.2E+06	(82107.18)	6.0E+05	81240.20*	2.5E+07	81062.56d	5.4E+07	80917.79d	1.9E+07
10									80995.11	4.9E+07	80832.77d	1.6E+07

			12-0						12-1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	114990.84d	9.0E+06					111997.63	3.1E+07				
1	114967.37	8.0E+06	114932.69d	1.4E+07			111976.21d	2.8E+07	111939.74d	4.8E+07		
2	114899.59	7.8E+06	114846.02d	1.4E+07	114811.70	4.7E+06	111912.94	2.7E+07	111859.98	4.8E+07	111825.10d	1.6E+07
3	(114790.07)	8.2E+06	114721.70	1.4E+07	(114669.87)	5.6E+06	111807.85d	3.0E+07	111740.62d	4.8E+07	111688.15d	2.0E+07
4	(114658.67)	1.4E+06	114554.78	1.4E+07	114486.58d	5.7E+06	111686.52d	3.5E+06	111582.19	4.8E+07	111513.48d	2.0E+07
5	(114461.18)	4.1E+06	114348.68d	1.4E+07	114260.08d	4.5E+06	111500.73d	1.3E+07	111385.14d	4.8E+07	111296.96d	1.5E+07
6	114227.03d	5.0E+06	114100.49	1.4E+07	114015.43d	8.7E+06	111279.45	1.6E+07	111151.08d	4.8E+07	111065.97	3.3E+07
7	113958.08d	5.5E+06	113815.23	1.4E+07	113708.06d	8.9E+06	111022.90	1.8E+07	110880.25	4.7E+07	110772.80d	3.2E+07
8	(113646.34)	6.4E+06			(113368.55)	8.5E+06	(110727.32)	2.2E+07			110449.75	3.0E+07
9					112995.84	8.0E+06						
10					112584.09	6.8E+06						

			12-2						12-4			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	109123.21d	2.9E+07					103723.13d	1.2E+07				
1	109103.05	2.6E+07	109067.77	4.5E+07			103707.42d	1.1E+07	103671.19	1.9E+07		
2	109045.25d	2.6E+07	108991.64d	4.5E+07	108956.85d	1.6E+07	103657.18d	9.8E+06	(103604.32)	1.9E+07	103569.20	6.7E+06
3	108946.87d	3.0E+07	108878.59d	4.5E+07	108825.97d	1.8E+07	(103571.57)	8.5E+06	103504.31d	1.9E+07	103450.58d	8.3E+06
4	(108832.04)	1.3E+06	108728.50d	4.4E+07	108659.69d	1.8E+07	(103472.84)	6.1E+06	103369.23d	1.9E+07	103300.69d	9.1E+06
5	(108655.16)	9.6E+06	108541.90	4.4E+07	108454.58d	1.3E+07	(103315.90)	8.2E+06	103203.78d	2.0E+07	(103114.96)	9.4E+06
6	(108447.17)	1.3E+07	108319.56d	4.4E+07	108234.61d	3.9E+07	103133.29d	8.3E+06	(103004.59)	2.0E+07	102918.35d	5.2E+06
7	108206.32d	1.5E+07	108063.89d	4.3E+07	107954.19d	3.4E+07	102918.35d	8.0E+06	102775.40	2.0E+07	102668.93d	9.1E+06
8	107926.76d	1.9E+07			107648.69	3.0E+07	102668.93d	7.5E+06			(102389.72)	1.0E+07
9					107312.95d	2.7E+07					102090.93d	1.1E+07
10											101757.20d	1.2E+07

TableE.5. continue

			12-5						12-7			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	101195.58d	2.2E+07					96480.46	1.6E+07				
1	101181.31d	1.9E+07	101145.94d	3.5E+07			96470.48	1.4E+07	(96434.16)	2.5E+07		
2	101135.21d	1.9E+07	101082.28	3.4E+07	101047.97	1.2E+07	96431.66d	1.2E+07	96379.39	2.5E+07	96344.15	8.8E+06
3	101055.41d	2.0E+07	100986.70d	3.4E+07	100936.68d	1.5E+07	96364.41d	9.2E+06	96296.09	2.5E+07	96242.83d	1.1E+07
4	(100964.79)	1.9E+06	100861.29d	3.4E+07	100792.85d	1.5E+07	96289.15d	1.2E+07	96184.63	2.5E+07	96115.45	1.2E+07
5	100818.24d	7.6E+06	100704.82d	3.4E+07	(100617.27)	1.2E+07	(96162.10)	1.2E+07	96049.56d	2.5E+07	95960.89	1.4E+07
6	(100646.21)	9.2E+06	100518.59	3.3E+07	100433.64d	2.3E+07	96013.57d	1.1E+07	95885.14d	2.5E+07	95801.74	3.6E+06
7	(100446.09)	1.0E+07	100303.07d	3.3E+07	100195.25d	2.4E+07	(95841.90)	1.0E+07	95698.40d	2.5E+07	95591.31	9.3E+06
8	100208.13	1.2E+07			99930.71d	2.3E+07	95640.03d	8.3E+06			95362.67d	1.1E+07
9					99651.46d	2.2E+07					(95113.03)	1.3E+07
10					99337.62d	1.9E+07					94837.38d	1.5E+07

			12-8						12-10			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0							90263.77	2.3E+07				
1	94284.30d	1.4E+07	94248.40d	2.6E+07			90259.80d	2.0E+07	90223.78	3.6E+07		
2	94249.95	1.2E+07	94196.60	2.6E+07	94161.96d	9.7E+06	90233.86	1.7E+07	90181.16	3.6E+07	90146.84d	1.3E+07
3	94187.94	1.2E+07	94119.99d	2.6E+07	94067.91d	1.2E+07	90184.00d	1.2E+07	90117.46d	3.6E+07	90064.36d	1.6E+07
4	(94121.86)	1.7E+06	(94018.17)	2.5E+07	93948.32d	1.3E+07	90133.10d	1.9E+07	90030.38	3.6E+07	89961.24	1.8E+07
5	94003.64d	5.0E+06	93891.60d	2.5E+07	93804.04	1.2E+07	(90037.77)	1.9E+07	(89924.54)	3.6E+07	89836.18	2.1E+07
6	93868.28	5.5E+06	(93740.83)	2.5E+07	93654.96	1.5E+07	89926.01d	1.6E+07	89798.23	3.6E+07	89713.35d	3.8E+06
7	(93710.20)	5.6E+06	93566.09	2.5E+07	93460.80	1.8E+07	89796.03d	1.4E+07	(89653.05)	3.5E+07	89546.10d	1.2E+07
8	(93524.80)	6.1E+06			(93247.01)	1.9E+07	89643.06d	1.1E+07			89364.57	1.5E+07
9					(93014.77)	1.9E+07					(89170.28)	1.7E+07
10					92758.88d	1.8E+07					88953.82	2.0E+07

			12-11						12-12			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	88426.52d	7.7E+06					86713.16*	8.3E+06				
1	88426.22	6.0E+06	88389.42	1.3E+07			86713.16*	7.7E+06	86677.46	1.2E+07		
2	(88403.40)	4.9E+06	88349.82d	1.3E+07	88315.64	5.6E+06	86696.55d	7.0E+06	86643.04d	1.1E+07	86608.15d	3.2E+06
3	(88360.62)	4.2E+06	88291.28	1.3E+07	88240.54d	7.5E+06	86660.65	4.6E+06	86593.19	1.1E+07	86539.47	3.5E+06
4	(88318.91)	1.0E+06	88215.39d	1.3E+07	88145.76d	8.9E+06	86626.30	1.5E+07	86523.52	1.1E+07	(86454.21)	3.6E+06
5	(88233.19)	1.8E+06	88120.35d	1.3E+07	88032.62d	9.7E+06	86552.04	1.3E+07	86438.11	1.1E+07	86351.11	4.0E+06
6	(88133.95)	1.6E+06	88007.02d	1.3E+07	(87921.35)	5.7E+06	(86466.69)	1.2E+07	86338.96d	1.0E+07	(86254.09)	1.0E+05
7	(88019.24)	1.4E+06	87875.90d	1.3E+07	87769.24	1.0E+07	86367.39	1.0E+07			(86116.89)	7.0E+05
8	(87883.30)	1.2E+06			87605.47	1.2E+07	86248.25	7.7E+06			(85971.44)	8.0E+05
9					87430.75	1.4E+07						
10					87235.42	1.5E+07						

			12-13						12-14			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	85126.78d	2.8E+07					(83674.02)	2.0E+06				
1	85129.51d	2.4E+07	85093.35	4.4E+07			(83679.45)	1.2E+06	83643.64	4.1E+06		
2	85116.87	2.0E+07	85063.54d	4.4E+07	85028.78	1.6E+07	(83671.56)	7.0E+05	83618.79d	4.3E+06	83583.75d	2.3E+06
3	85088.27	1.4E+07	85019.32d	4.4E+07	84967.43	2.0E+07	(83649.84)	2.0E+05	(83581.49)	4.6E+06	83529.41	3.6E+06
4	85063.54d	2.6E+07	84960.52	4.4E+07	84890.78d	2.2E+07	(83636.26)	1.2E+06	83533.70d	4.9E+06	(83463.33)	5.1E+06
5	85001.43	2.3E+07	84887.70d	4.3E+07	84800.06	2.6E+07	(83585.59)	5.0E+05	83472.29	5.4E+06	83384.18	7.7E+06
6	84928.85d	2.0E+07	84802.46	4.3E+07	84716.88d	4.2E+06	(83528.76)	3.0E+05	83399.86	6.0E+06	(83636.26)	1.2E+06
7	84846.09	1.8E+07	84704.34d	4.3E+07	84595.25	1.4E+07	(83463.29)	1.0E+05	(83320.26)	6.7E+06	(83585.59)	5.0E+05
8	84746.95d	1.3E+07			84470.40	1.7E+07	(83383.46)	1.0E+05			83106.41	6.8E+06
9					84333.95	1.9E+07					82993.17	9.3E+06
10					84186.06d	2.1E+07						

			12-15						12-16			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	82364.10d	2.0E+07					81203.78	2.9E+07				
1	82371.20	1.9E+07	82335.39	2.7E+07			81215.08d	2.6E+07	81179.49	4.5E+07		
2	82368.79	1.8E+07	82315.82d	2.7E+07			81218.60d	2.3E+07	81165.34	4.4E+07	81130.29d	1.5E+07
3	82355.31d	1.6E+07	(82286.53)	2.6E+07	82234.79d	7.9E+06	81212.90	1.7E+07	81144.88	4.3E+07	81092.80	1.8E+07
4	82352.05d	1.5E+07	82248.33d	2.5E+07	82178.96	7.1E+06	81220.27	2.2E+07	81118.85d	4.2E+07	81049.26d	1.8E+07
5	82315.82d	1.9E+07	82201.14d	2.3E+07	82113.90d	5.2E+06	81198.81d	2.4E+07	81085.79d	4.1E+07	80997.91d	1.8E+07
6	(82273.78)	1.9E+07	82146.92d	2.1E+07	82060.67d	4.9E+06	81174.86	2.1E+07	81047.78	3.8E+07	80964.55	6.6E+06
7	82227.32	1.8E+07	82084.80d	1.9E+07	81976.39d	4.7E+06	(81149.54)	1.9E+07	81005.59d	3.8E+07	80898.63	1.1E+07
8	82169.51d	1.7E+07			81891.40	3.3E+06	(81114.90)	1.5E+07			80837.75	1.0E+07
9											80775.28	7.5E+06

			13-0						13-1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	115848.07d	6.4E+06					112854.46	2.5E+07				
1	(115820.89)	5.9E+06	115788.30d	9.6E+06			112828.70d	2.4E+07	112796.72d	3.8E+07		
2	115747.68	6.2E+06	(115701.85)	9.6E+06			112760.75	2.5E+07	112714.40	3.8E+07	112681.33d	1.2E+07
3	115646.51	1.5E+06	115571.94	9.6E+06	115522.54	3.4E+06	(112666.24)	5.1E+06	112591.20d	3.8E+07	112542.21	1.3E+07
4	115487.04	3.1E+06	115400.38	9.6E+06	115332.62	2.4E+06	112515.50d	1.1E+07	112427.51	3.8E+07	112360.65	9.1E+06
5	(115290.02)	3.6E+06	115187.76d	9.6E+06	115116.57	6.1E+06	112326.99	1.3E+07	112224.89d	3.8E+07	112155.06d	2.6E+07
6	115050.95d	3.9E+06	114932.69d	9.7E+06	114846.02d	6.0E+06	(112100.67)	1.1E+07	111983.11	3.8E+07	111896.02	2.5E+07
7	(114768.76)	4.3E+06	114638.08d	9.7E+06	114536.15	5.8E+06	111833.88d	1.6E+07	(111703.30)	3.7E+07	111601.39	2.3E+07
8	114440.53	5.1E+06	114305.86*	9.7E+06	114191.01d	5.6E+06	(111521.91)	2.1E+07	(111387.27)	3.7E+07	(111271.31)	2.2E+07
9			113936.16	9.8E+06	113806.43d	5.1E+06			111035.53d	3.7E+07	110903.29d	2.0E+07
10			113529.83d	9.8E+06	113378.04d	3.2E+06			110646.47	3.7E+07	110497.37d	1.2E+07

TableE.5. continue

			13-2						13-3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	109980.37d	3.0E+07					107221.14d	6.0E+06				
1	109955.25	2.9E+07	109923.74	4.5E+07			107201.16	6.1E+06				
2	109892.22	3.2E+07	109845.94	4.4E+07	109813.11	1.4E+07	107140.53	8.4E+06	107094.96	8.5E+06	107060.52d	2.5E+06
3	109804.62	4.0E+06	109729.13	4.4E+07	109680.66	1.5E+07	(107058.72)	1.0E+05	106984.60	8.4E+06	(106934.95)	2.4E+06
4	109663.36d	1.1E+07	109573.77	4.4E+07	109506.96d	9.2E+06	(106924.98)	9.0E+05	106837.02d	8.2E+06	(106769.61)	7.0E+05
5	109482.83d	1.4E+07	109381.45	4.4E+07	109311.53	3.6E+07	106757.17d	1.5E+06	106655.19d	7.9E+06	106583.70d	1.2E+07
6	109268.75d	1.5E+07	109150.95d	4.3E+07	109064.59	3.1E+07	(106553.56)	2.0E+06	106434.95d	7.7E+06	106349.95d	8.3E+06
7	109016.59d	1.8E+07	108886.97	4.3E+07	108782.70	2.9E+07	106314.62d	2.8E+06	106184.45d	7.3E+06	106083.62	6.7E+06
8	108721.12d	2.5E+07	(108586.75)	4.2E+07	108469.94d	2.7E+07	106033.53	6.0E+06	105898.44	6.9E+06	105782.86d	5.6E+06
9			108250.71d	4.1E+07	108121.36d	2.3E+07			105584.55d	6.5E+06	105454.06d	4.0E+06
10			107884.99	4.0E+07	107734.18d	1.2E+07						

			13-4						13-5			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	104579.75d	5.2E+06					102052.43	2.2E+07				
1	104560.04d	4.3E+06	104528.49	8.3E+06			102035.72	2.0E+07	102003.56*	3.3E+07		
2	104503.67d	2.9E+06	104458.67	8.3E+06	104426.84d	3.0E+06	101982.78	2.0E+07	101936.73d	3.3E+07	101903.32d	1.1E+07
3	(104428.70)	4.7E+06	104355.32	8.4E+06	104304.96	3.9E+06	(101912.79)	5.4E+06	101838.29d	3.3E+07	101787.97d	1.3E+07
4	104304.10d	4.7E+06	104216.17d	8.5E+06	104147.92d	4.7E+06	101795.12d	9.8E+06	101707.95d	3.3E+07	101638.88d	1.0E+07
5	(104144.74)	4.7E+06	104041.71d	8.6E+06	(103972.09)	1.4E+06	101646.65d	1.1E+07	101543.56	3.3E+07	101473.70d	2.0E+07
6	(103954.04)	4.1E+06	103834.81	8.8E+06	(103749.75)	3.1E+06	101468.27d	1.1E+07	101349.74d	3.3E+07	101263.26	2.1E+07
7	(103728.24)	3.8E+06	(103598.47)	9.0E+06	(103496.49)	3.8E+06	101257.29d	1.2E+07	101126.43d	3.2E+07	101023.91d	2.1E+07
8	(103462.10)	2.1E+06	(103327.46)	8.9E+06	(103211.50)	4.4E+06	101003.16*	1.4E+07	100869.17d	3.2E+07	100751.45	2.0E+07
9			103032.92	9.5E+06	(102901.05)	5.1E+06			100591.15	3.1E+07		
10			102703.82d	9.8E+06	102552.41d	5.9E+06			100282.93d	3.1E+07	100131.10d	1.4E+07

			13-6						13-7			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	99637.81d	5.3E+06					97336.98d	6.0E+06				
1	99621.71d	5.2E+06	99590.09d	7.8E+06			(97323.79)	4.7E+06	97289.71d	9.7E+06		
2	99574.61d	7.3E+06	99527.85d	7.7E+06	(99495.57)	2.4E+06	97279.77	2.4E+06	97233.52d	9.7E+06	97200.75d	3.6E+06
3	(99510.27)	1.0E+05	99435.59d	7.5E+06	(99386.50)	2.4E+06	(97221.12)	8.7E+06	(97146.24)	9.8E+06	97096.12	4.9E+06
4	(99400.50)	5.0E+05	99312.09d	7.3E+06	(99245.13)	8.0E+05	97119.27d	7.2E+06	(97031.31)	9.9E+06	96964.89	6.9E+06
5	(99262.37)	9.0E+05	99157.66	7.1E+06	99089.77d	1.2E+07	96990.52	6.3E+06	96889.15	1.0E+07	(96818.29)	4.0E+05
6	(99094.78)	1.2E+06	98977.87d	6.9E+06	(98890.49)	8.4E+06	96836.28	5.5E+06	96718.63	1.0E+07	96630.37	2.3E+06
7	(98897.37)	1.7E+06	98766.42d	6.5E+06	(98665.62)	7.1E+06	96653.59	4.4E+06	96522.32d	1.0E+07	(96420.26)	3.2E+06
8	98663.41d	4.4E+06	(98530.13)	6.2E+06	98413.38d	6.2E+06	(96434.91)	1.8E+06	96301.38	1.1E+07	96184.63d	4.0E+06
9			(98266.38)	5.8E+06	98136.64d	4.9E+06			96055.63	1.1E+07	95923.51d	5.0E+06
10			97976.98	5.4E+06					95782.39d	1.1E+07	95631.98d	7.2E+06

			13-8						13-10			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	95149.35	2.0E+07					91120.50	1.1E+07				
1	95138.27	1.7E+07	95105.98d	3.1E+07			(91113.69)	8.6E+06	91081.32d	1.7E+07		
2	95097.84d	1.5E+07	95050.85d	3.1E+07	95019.97	1.1E+07	91081.72	4.5E+06	91035.43d	1.7E+07	91003.67	6.3E+06
3	95046.49	7.4E+06	94971.42d	3.1E+07	94921.34d	1.4E+07	91042.12d	1.6E+07	90966.87	1.7E+07	90918.15	8.3E+06
4	(94951.95)	1.0E+07	94863.91d	3.1E+07	94796.41	1.3E+07	90962.99	1.3E+07	90876.81d	1.7E+07	90808.25d	1.1E+07
5	94833.68	1.0E+07	94730.23	3.1E+07	94662.33	1.3E+07	90865.81	1.1E+07	(90763.49)	1.7E+07	(90693.96)	8.0E+05
6	94688.79d	9.6E+06	94574.03d	3.0E+07	94486.14	1.7E+07	(90747.81)	1.0E+07	90630.11	1.7E+07	(90543.52)	3.6E+06
7	94519.29d	9.2E+06	94390.99d	3.0E+07	94289.46	1.8E+07	90607.08d	7.9E+06	90476.34d	1.7E+07	90374.22d	4.9E+06
8	94318.49d	8.5E+06	94184.72	2.9E+07	94067.91d	1.9E+07	90437.68	3.2E+06	(90303.27)	1.7E+07	90187.27	5.8E+06
9			93955.62	2.9E+07	(93824.89)	1.9E+07			90111.14	1.7E+07	(89980.40)	6.8E+06
10									89899.63	1.7E+07	89749.20d	9.3E+06

			13-11						13-13			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	89283.58	1.8E+07					85984.00*	1.7E+07				
1	(89278.94)	1.8E+07	89246.26d	2.9E+07			85984.00*	1.4E+07	85950.85	2.7E+07		
2	89250.92	1.0E+07	89204.69d	2.9E+07	89172.66d	1.1E+07	85964.32	8.4E+06	(85918.19)	2.7E+07	85885.69	9.1E+06
3	89217.73d	1.0E+07	89142.45	2.9E+07	89094.13	1.5E+07	85945.99d	2.2E+07	85869.78	2.6E+07	85820.87d	1.1E+07
4	89148.63	1.1E+07	89060.70d	2.9E+07	88992.84	1.7E+07	85894.06d	2.0E+07	85806.22	2.6E+07	85738.85d	1.4E+07
5	89060.35	9.5E+06	88959.91d	2.9E+07	88889.36	7.9E+06	85829.25d	1.8E+07	85726.72	2.6E+07	85656.29d	2.0E+06
6	88956.68d	8.3E+06	88838.49	2.8E+07	88751.28	1.4E+07	85751.21d	1.6E+07	85633.38	2.5E+07	85546.30d	5.5E+06
7	88830.20	7.0E+06	88699.24d	2.8E+07	(88597.61)	1.6E+07	85656.29d	1.3E+07	85526.36	2.4E+07	85423.64d	6.5E+06
8	(88677.89)	4.6E+06	88543.12d	2.8E+07	88426.52d	1.8E+07	85542.13d	6.5E+06	85406.82	2.4E+07	85290.45	6.8E+06
9			88369.40d	2.7E+07	88240.54d	1.9E+07			85274.92d	2.3E+07	85145.51d	6.9E+06
10			88180.07d	2.7E+07	(88029.60)	2.1E+07			85129.51d	2.2E+07	(84979.67)	7.2E+06

			13-14						13-16			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	84530.77d	1.7E+07					82060.67d	2.1E+07				
1	84533.45d	1.3E+07	84500.47	2.9E+07			(82068.44)	1.9E+07	82037.01d	3.1E+07		
2	84519.27d	7.6E+06	84473.11d	2.9E+07	84440.07	1.1E+07	82065.59	1.5E+07	82019.19d	3.0E+07	81987.09	9.0E+06
3	84505.69	1.5E+07	84432.10	2.9E+07	84383.16	1.5E+07	82069.89d	1.8E+07	81996.14d	2.9E+07	81946.28d	9.7E+06
4	84466.34d	1.3E+07	84378.47	2.9E+07	84310.81d	2.0E+07	82051.76	2.0E+07	81964.13d	2.8E+07	81896.14	8.3E+06
5	(84414.43)	1.1E+07	84310.81d	2.9E+07	84241.65	4.5E+06	82027.75	2.0E+07	81923.57	2.7E+07	81855.27d	6.1E+06
6	84349.23	9.7E+06	84233.41	2.9E+07	84146.49	1.1E+07	81996.14d	1.9E+07	81879.48	2.5E+07	81792.20d	7.0E+06
7	84273.32	7.7E+06	84143.93	2.9E+07	84040.67d	1.4E+07	81959.68	1.8E+07	81829.58	2.3E+07	81727.90d	6.1E+06
8	84178.70d	3.6E+06	84043.28	3.0E+07	83927.35	1.6E+07	81910.42	1.4E+07	(81774.85)	2.1E+07	(81658.89)	4.8E+06
9			83934.90	3.0E+07	83804.35	1.8E+07			81717.35d	1.9E+07	81586.24d	3.3E+06
10			83814.29d	3.0E+07	(83664.06)	2.1E+07			81655.34d	1.7E+07	(81032.26)	1.1E+06

TableE.5. continue

			13-17						14-1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	81065.75	1.2E+07					113633.32	2.1E+07				
1	81077.53	9.6E+06	81043.89d	1.9E+07			113603.75	2.1E+07	113575.57	2.9E+07		
2	81081.45	5.9E+06	81034.08	1.8E+07	81000.61d	6.1E+06	113543.30	4.9E+06	113492.42	2.9E+07	113461.83	8.2E+06
3	81095.10	1.1E+07	81020.37	1.6E+07	80970.34	7.0E+06	113428.99	9.3E+06	113365.37d	2.9E+07	(113316.90)	5.5E+06
4	81088.78	9.7E+06	81000.61d	1.5E+07	80932.29	7.0E+06	113273.18d	1.1E+07	113195.20d	2.9E+07	113143.26	2.0E+07
5	81080.95d	7.8E+06	80978.19	1.2E+07	80908.43d	1.5E+06	113079.60	1.1E+07	112986.00	2.9E+07	112917.68d	1.9E+07
6	81070.01	5.9E+06	80951.80d	9.4E+06	(80865.65)	2.1E+06	112843.37d	1.2E+07	112736.71d	2.9E+07	112654.78	1.8E+07
7	81055.59	3.8E+06	80925.84d	6.1E+06	(80823.71)	1.2E+06	112562.81d	1.4E+07	112445.68d	2.9E+07	112354.27d	1.7E+07
8							(112233.20)	1.7E+07	(112119.15)	2.9E+07	112013.42d	1.6E+07
9							111908.22d	5.8E+06	111754.17d	2.9E+07	(111634.94)	1.4E+07
10									111355.28	2.9E+07	111208.88	3.8E+06

			14-2						14-3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	110759.06d	3.0E+07					108001.09	1.1E+07				
1	110731.17	3.1E+07	110703.43d	4.1E+07			107975.30	1.3E+07	107948.20	1.4E+07		
2	110674.23d	5.2E+06	110622.75	4.1E+07	110593.40d	1.1E+07	107923.05	4.0E+05	107871.67	1.4E+07	107840.51d	3.1E+06
3	110565.24d	1.2E+07	110502.49	4.1E+07	110454.46d	6.5E+06	107821.19	2.4E+06	107755.69	1.3E+07	(107709.38)	1.0E+06
4	110419.68d	1.3E+07	110341.50	4.0E+07	110289.43	3.1E+07	107683.87	3.2E+06	107603.28d	1.3E+07	107550.89d	1.5E+07
5	(110235.70)	1.1E+07	110142.04	4.0E+07	110074.76d	2.8E+07	(107508.41)	3.7E+06	107415.30	1.3E+07	107345.23d	1.2E+07
6	110009.90	1.6E+07	109903.29d	4.0E+07	109822.24	2.6E+07	(107295.16)	4.3E+06	107188.93d	1.2E+07	107107.34	1.0E+07
7	109746.23	1.9E+07	109629.19	3.9E+07	109534.50	2.5E+07	107044.59	5.9E+06	106929.01d	1.2E+07	(106834.48)	8.9E+06
8	109433.90	2.6E+07	109318.58	3.9E+07	109211.76d	2.3E+07	106745.90d	1.2E+07	(106630.32)	1.1E+07	106523.83d	7.6E+06
9	109123.21d	5.9E+06	108970.85d	3.8E+07	108852.34	1.8E+07			106304.39	1.1E+07	106184.45d	5.2E+06
10			108590.89d	3.7E+07	108445.26d	3.7E+06						

			14-5						14-6			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	102831.33d	1.8E+07					100416.56	1.1E+07				
1	102809.91d	1.6E+07	102783.75d	2.7E+07			100397.02d	1.3E+07	(100369.75)	1.5E+07		
2	102765.96d	6.5E+06	102712.83d	2.7E+07	102682.86d	8.5E+06	(100357.06)	7.0E+05	100306.39d	1.5E+07	100275.21d	3.9E+06
3	102674.92d	9.5E+06	102610.58	2.7E+07	102564.74d	7.6E+06	(100272.46)	2.6E+06	100208.13	1.5E+07	(100160.93)	1.9E+06
4	102554.11d	1.0E+07	102474.24d	2.7E+07	102422.50	1.4E+07	(100159.10)	3.2E+06	100079.67d	1.4E+07	100027.41	1.5E+07
5	102400.08	1.0E+07	(102305.10)	2.7E+07	102236.46	1.5E+07	(100013.97)	3.5E+06	99921.81d	1.4E+07	99851.61d	1.2E+07
6	102208.15d	1.0E+07	(102103.50)	2.7E+07	102024.00d	1.6E+07	(99836.38)	3.9E+06	(99730.29)	1.4E+07	99649.49	1.1E+07
7	101984.58	1.1E+07	101869.34	2.6E+07	101777.15d	1.6E+07	99627.61d	5.1E+06	99510.61d	1.3E+07	99418.20d	1.1E+07
8	(101714.66)	1.0E+07	101599.69	2.6E+07	101494.36	1.6E+07	99377.57d	9.9E+06	99262.25d	1.3E+07	99155.54d	9.6E+06
9	101465.31d	5.5E+06	101312.39d	2.6E+07	101191.14d	1.5E+07			98985.11	1.2E+07		
10									98683.54d	1.1E+07		

			14-8						14-9			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	95928.22	1.6E+07					93855.05	8.3E+06				
1	95913.14	1.2E+07	95885.14d	2.6E+07			(93842.10)	8.6E+06	93813.66	1.2E+07		
2	95881.85	9.9E+06	95828.61	2.6E+07	95798.67	9.4E+06	(93814.02)	8.0E+05	(93762.07)	1.2E+07		
3	(95807.96)	1.2E+07	95743.85	2.6E+07	95697.97	1.1E+07	(93747.57)	2.0E+06	(93683.58)	1.2E+07	93635.42	2.6E+06
4	(95710.55)	1.1E+07	95631.98d	2.6E+07	95578.58d	8.0E+06	(93658.27)	2.2E+06	93578.56	1.2E+07	(93525.95)	1.0E+07
5	95585.16d	1.0E+07	95491.36	2.6E+07	95423.32	1.2E+07	93542.22	2.1E+06	(93449.61)	1.1E+07	(93381.10)	9.8E+06
6	95431.54d	9.3E+06	(95325.79)	2.5E+07	95244.69	1.3E+07	(93401.82)	2.2E+06	(93295.73)	1.1E+07	93213.18d	9.7E+06
7	(95250.50)	8.4E+06	95133.06	2.5E+07	(95040.17)	1.4E+07	(93234.48)	2.7E+06	(93117.40)	1.1E+07	93022.82	9.7E+06
8	95030.65	4.8E+06	94917.17d	2.5E+07	94809.72	1.5E+07	93029.59	5.2E+06	(92916.68)	1.0E+07	(92810.44)	9.4E+06
9			(94675.02)	2.5E+07	94556.70	1.5E+07	(92846.05)	1.0E+05	(92693.60)	9.9E+06	92574.41d	8.5E+06
10			94412.85d	2.4E+07	94266.71	1.2E+07						

			14-11						14-12			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	90062.53	1.7E+07					88349.82d	5.7E+06				
1	90054.03d	9.8E+06	90025.86	2.8E+07			88341.63d	4.4E+06	88313.77	9.6E+06		
2	90034.27	1.5E+07	89981.77	2.8E+07	89951.01d	1.1E+07	(88326.37)	1.5E+06	88274.28d	9.6E+06	88243.59d	3.9E+06
3	89979.13d	1.5E+07	89916.12d	2.8E+07	89867.83	1.5E+07	(88279.21)	1.8E+06	88215.39d	9.5E+06	88167.96d	4.4E+06
4	89907.71	1.3E+07	89827.92	2.8E+07	(89776.28)	5.0E+06	88215.39d	1.6E+06	88136.31d	9.5E+06	88084.50d	5.0E+06
5	89812.48d	1.2E+07	89718.43d	2.7E+07	(89651.57)	8.9E+06	(88132.84)	1.3E+06	88040.54	9.4E+06	87971.38	6.8E+06
6	(89697.33)	1.0E+07	89592.29	2.7E+07	(89510.04)	1.2E+07	(88030.07)	1.1E+06	87924.19	9.3E+06	87842.69	7.8E+06
7	(89559.54)	8.0E+06	89442.38	2.7E+07	89350.13	1.3E+07	(87907.66)	1.0E+06	87790.55	9.2E+06	87696.66d	8.6E+06
8	(89389.38)	2.1E+06	89274.29d	2.7E+07	89168.84	1.4E+07	(87755.31)	1.1E+06	87640.96d	9.1E+06	(87534.82)	9.4E+06
9	(89242.04)	9.8E+06	(89089.59)	2.6E+07	88969.79d	1.6E+07	(87627.89)	1.0E+05	87475.05d	9.0E+06	87354.26d	1.0E+07
10					88742.39d	1.6E+07					87149.14	8.8E+06

			14-13						14-14			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	86761.95	3.3E+06					85309.65d	1.8E+07				
1	(86757.55)	1.6E+06	86730.51	5.5E+06			85307.54	9.7E+06	85279.83	3.1E+07		
2	86746.71	8.3E+06	86694.39	5.5E+06	86664.67	1.9E+06	85301.91d	2.1E+07	85249.53	3.1E+07	85219.26d	1.2E+07
3	(86706.87)	7.1E+06	86643.04d	5.4E+06	86596.34	3.1E+06	85269.12	1.9E+07	85205.02	3.1E+07	85156.90	1.7E+07
4	86654.20d	6.6E+06	86573.98	5.3E+06	(86521.44)	1.0E+05	85226.17	1.7E+07	85145.51d	3.0E+07	85093.35d	3.6E+06
5	86582.14d	6.2E+06	86488.75	5.1E+06	(86419.42)	2.0E+05	85166.09d	1.5E+07	85072.04	3.0E+07	(95003.97)	8.4E+06
6	86492.64d	5.6E+06	86386.53d	4.9E+06	(86305.45)	3.0E+05	85092.77d	1.3E+07	84986.79	2.9E+07	84905.17d	1.0E+07
7	86386.53d	4.2E+06	86270.41	4.7E+06	(86176.33)	2.0E+05	85001.93	1.0E+07	84887.70d	2.9E+07	84791.98d	1.1E+07
8	(86252.85)	3.0E+05	(86138.60)	4.5E+06	(86032.36)	2.0E+05	(84889.54)	1.8E+06	(84775.29)	2.8E+07	84668.42d	1.2E+07
9	86147.14	9.1E+06	85993.26	4.2E+06			84805.59	1.5E+07	84653.95d	2.7E+07	84533.45d	1.3E+07
10			85837.65	3.9E+06					84522.71	2.6E+07	(84375.55)	1.2E+07

TableE.5. continue

			14-15						14-17			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	83999.00*	6.7E+06					81843.58	2.0E+07				
1	83999.00*	3.2E+06					81850.30	1.4E+07	81822.76d	3.1E+07		
2	83999.00*	6.4E+06	83946.76d	1.3E+07	83916.75	6.3E+06	81862.79	1.8E+07	81810.78	3.0E+07	81780.04	9.6E+06
3	83973.58d	5.2E+06	83909.35	1.3E+07	(83862.67)	9.9E+06	81855.27d	2.0E+07	81792.20d	3.0E+07	81744.60d	1.0E+07
4	83940.20	4.3E+06	83861.63d	1.4E+07	83808.22	2.2E+06	81848.26d	2.0E+07	81767.89d	2.9E+07	81716.01d	6.7E+06
5	(83895.11)	3.5E+06	83801.54	1.4E+07	83732.95	5.9E+06	81832.27d	1.9E+07	81739.78d	2.8E+07	81669.82d	8.8E+06
6	(83837.16)	2.7E+06	83731.03	1.4E+07	83650.31d	7.9E+06	81811.27d	1.9E+07	81705.44d	2.8E+07	81624.07d	8.8E+06
7	(83767.33)	1.7E+06	83650.31d	1.5E+07	83557.63d	9.5E+06	81785.51	1.7E+07	81669.82d	2.7E+07	81576.02d	8.2E+06
8	(83675.20)	1.0E+05	83561.42	1.5E+07	83454.66	1.1E+07	81743.83d	8.8E+06	81630.56	2.6E+07	(81523.26)	7.5E+06
9	83615.79	3.1E+06	83464.92	1.6E+07	83344.12d	1.4E+07	81741.99d	1.9E+07			81468.97d	6.3E+06
10			83360.34	1.6E+07	83212.05d	1.5E+07			81551.30	2.7E+07		

			14-18						14-19			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	(81028.96)	1.0E+05										
1	(81039.14)	1.0E+05	(81011.52)	1.0E+05								
2	(81058.22)	3.0E+05	(81006.27)	1.0E+05	(80975.61)	1.0E+05						
3	(81062.59)	1.0E+05	(80988.60)	4.0E+05	(80951.06)	1.0E+05						
4	(81068.11)	1.0E+05	80988.76d	1.3E+06	(80936.79)	1.9E+06						
5	(81071.70)	8.0E+05	80978.19d	3.5E+06	(80909.64)	3.1E+06	80520.07d	2.4E+08				
6	(81073.30)	2.4E+06	80967.24d	7.8E+06	(80886.01)	5.9E+06	80548.54d	2.3E+08				
7	81073.72	5.6E+06	(80956.71)	1.6E+07	80864.32d	1.1E+07	80580.90	2.1E+08				
8	81062.56d	8.7E+06	80948.91	3.0E+07	80842.73	2.0E+07	80608.70d	1.0E+08				
9	81096.53d	1.5E+07	80944.81	5.2E+07	80824.81	3.2E+07	80688.17d	1.6E+08				
10			80947.29	8.7E+07	80800.44	3.3E+07						

			15-0						15-1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	(117323.16)	3.4E+06					114329.75	1.7E+07				
1	117298.12	5.0E+05	117264.90d	4.7E+06			114305.86*	1.9E+06	114272.34	2.2E+07		
2	(117216.91)	1.5E+06	117172.33d	4.7E+06	117144.71d	1.0E+06	(114229.64)	6.7E+06	114184.19d	2.2E+07	114156.36	4.6E+06
3	117093.59	1.7E+06	(117034.68)	4.7E+06	116998.89	2.7E+06	114111.70d	8.0E+06	114053.32	2.2E+07	114019.64d	1.4E+07
4	(116921.97)	1.8E+06	116851.86d	4.7E+06	116802.56	2.8E+06	113949.17d	8.5E+06	113879.00	2.2E+07	113829.93	1.4E+07
5	116707.03d	1.9E+06	116625.22d	4.7E+06	(116562.70)	2.8E+06	113745.57d	8.9E+06	113662.08	2.2E+07	113600.36	1.4E+07
6	(116447.77)	2.1E+06	(116353.96)	4.7E+06	116279.92	2.7E+06	113497.75	9.5E+06	(113404.32)	2.2E+07	113330.46	1.3E+07
7	(116134.03)	2.3E+06	(116039.89)	4.7E+06	115953.77d	2.7E+06	113207.45	1.1E+07	113104.45	2.2E+07	113018.95	1.3E+07
8							(112900.78)	7.0E+05	112763.90d	2.2E+07	112669.71d	1.2E+07
9							(112520.79)	5.1E+06	112388.27	2.2E+07	(112279.03)	9.4E+06
10											111876.51d	1.5E+07

			15-2						15-3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	111454.84	2.8E+07					108697.15d	1.4E+07				
1	111433.43d	2.1E+06	111399.96d	3.6E+07			(108678.50)	1.0E+05	108644.72	1.7E+07		
2	111361.12	9.5E+06	111316.30d	3.6E+07	111288.20	6.7E+06	108610.49d	3.1E+06	108564.11	1.7E+07	(108537.05)	2.3E+06
3	(111249.41)	1.2E+07	111192.13d	3.5E+07	111156.77	2.6E+07	108502.46d	4.3E+06	108445.26d	1.6E+07	(108412.01)	1.8E+07
4	111095.34	1.3E+07	111025.15	3.5E+07	110975.63d	2.4E+07	(108358.19)	4.8E+06	108287.77	1.6E+07	108238.05	1.4E+07
5	(110901.27)	1.3E+07	110817.84	3.5E+07	110755.71d	2.3E+07	(108174.08)	5.2E+06	108092.67d	1.6E+07	108030.09d	1.2E+07
6	110668.03d	1.4E+07	110572.38	3.4E+07	110497.37d	2.2E+07	107952.35d	5.9E+06	(107857.21)	1.5E+07	107782.48d	1.1E+07
7	(110390.48)	1.7E+07	110286.46d	3.4E+07	110200.21d	2.1E+07	107689.67d	8.0E+06	107585.81d	1.5E+07	107499.97d	1.0E+07
8	(110100.26)	3.0E+05	(109964.81)	3.3E+07	109868.45d	1.9E+07	(107411.95)	1.0E+05	(107276.50)	1.4E+07	107181.46d	8.6E+06
9	109737.08d	6.3E+06	109604.37	3.3E+07	(109495.80)	1.4E+07	(107070.10)	1.4E+06	(106936.34)	1.3E+07	106828.15d	5.5E+06
10					109113.15d	2.6E+07					106464.29d	1.6E+07

			15-5						15-6			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	103527.47	1.3E+07					101112.77	1.5E+07				
1	103512.61d	4.0E+06	103478.56d	1.9E+07			(101100.00)	7.0E+05	101065.96	1.9E+07		
2	103450.58d	7.5E+06	103406.88d	1.9E+07	103377.99d	5.6E+06	101044.18d	4.1E+06	100998.58	1.9E+07	(100970.54)	3.6E+06
3	103357.47d	7.9E+06	103300.69d	1.9E+07	103266.41d	6.5E+06	100954.53	5.1E+06	100897.58	1.8E+07	100864.83d	1.5E+07
4	103228.70d	7.8E+06	103158.05d	1.9E+07	103108.11d	9.3E+06	(100833.71)	5.3E+06	100763.39d	1.8E+07	100713.56	1.4E+07
5	(103064.32)	7.7E+06	102980.61d	1.9E+07	102918.35d	1.0E+07	100679.92d	5.4E+06	100597.59d	1.8E+07	(100535.05)	1.3E+07
6	(102865.45)	7.7E+06	102772.91d	1.9E+07	102698.51d	1.1E+07	100493.59	5.8E+06	100397.02d	1.7E+07	(100323.70)	1.3E+07
7	102629.49	7.7E+06	(102527.34)	1.9E+07	102441.23d	1.1E+07	(100272.64)	7.2E+06	100167.65d	1.7E+07	100083.79d	1.2E+07
8	102381.90d	2.1E+06	(102246.59)	1.9E+07	102149.30	1.1E+07	(100043.64)	1.0E+05	99906.49d	1.6E+07	(99811.63)	1.1E+07
9	(102077.70)	5.1E+06	(101943.93)	1.9E+07	(101835.94)	1.0E+07	(99751.64)	1.5E+06	99617.96	1.5E+07	99510.61d	8.4E+06
10					101510.46	7.7E+06					99205.14d	1.4E+07

			15-8						15-9			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	96624.85	9.0E+06					94551.14	1.2E+07				
1	96614.11d	7.6E+06	96582.21	1.7E+07			94543.95d	2.0E+06	(94510.91)	1.8E+07		
2	(96566.79)	9.0E+06	96522.32d	1.7E+07	96494.78	6.7E+06	94501.72	5.0E+06	94454.84d	1.8E+07	(94427.50)	4.9E+06
3	96492.08	8.5E+06	(96433.25)		(96399.06)	1.7E+06	94431.83	5.3E+06	(94372.86)	1.8E+07	94337.77d	9.0E+06
4	96383.62	7.9E+06	96314.20d	1.7E+07	(96265.47)	5.3E+06	94334.52	5.1E+06	(94262.73)	1.8E+07	94213.02	1.1E+07
5	96250.86	7.4E+06	96168.90	1.7E+07	96105.66d	6.7E+06	94209.66	4.8E+06	94125.99d	1.7E+07	94064.19d	1.2E+07
6	96087.09	6.7E+06	(95993.93)	1.7E+07	95919.04	7.6E+06	94058.10d	4.7E+06	(93963.87)	1.7E+07	93889.19d	1.2E+07
7	(95894.59)	5.4E+06	95791.80d	1.7E+07	95706.52	8.2E+06	(93878.57)	5.0E+06	93775.27	1.6E+07	93689.38d	1.2E+07
8	95698.40d	5.4E+06	95561.92d	1.7E+07	95465.02	9.0E+06	(93698.31)	1.0E+05	93562.82d	1.6E+07	(93466.30)	1.2E+07
9	95439.90	6.2E+06	95307.15d	1.7E+07	95200.00*	9.9E+06	(93459.50)	1.4E+06	(93325.73)	1.5E+07	(93217.74)	1.1E+07
10											92969.95	8.7E+06

TableE.5. continue

			15-11						15-12			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	90758.44	8.3E+06					89044.55*	1.0E+07				
1	90756.87d	1.3E+07	90722.20	1.7E+07			89044.55*	5.6E+06	89010.25	1.9E+07		
2	90719.26d	1.2E+07	90674.94d	1.7E+07	90647.28d	8.4E+06	(98012.61)	7.3E+06	88966.68d	1.9E+07	88940.02	7.4E+06
3	(90663.08)	1.1E+07	(90605.23)	1.7E+07	(90571.04)	1.0E+05	88961.62	6.7E+06	88904.60d	1.8E+07	88869.87d	3.5E+06
4	90582.86d	9.9E+06	90511.94d	1.7E+07	90463.34d	3.6E+06	88890.33d	5.9E+06	88820.44	1.8E+07	88771.23d	8.0E+06
5	(90479.30)	8.8E+06	90397.26d	1.7E+07	90334.10d	5.2E+06	88798.53d	5.1E+06	88715.55d	1.8E+07	88654.35d	9.7E+06
6	90352.42	7.6E+06	90259.80d	1.7E+07	90184.00d	6.1E+06	(88685.93)	4.3E+06	88593.16d	1.8E+07	88516.34d	1.1E+07
7	(90203.63)	5.2E+06	90101.56	1.7E+07	(90014.88)	6.8E+06	(88551.75)	3.5E+06	(88448.61)	1.7E+07	88362.22d	1.2E+07
8	(90056.76)	1.1E+07	89920.78	1.7E+07	89825.79d	7.6E+06	(88422.69)	1.8E+06	88287.66	1.7E+07	88191.19	1.3E+07
9	89855.48d	8.9E+06	89721.93d	1.7E+07	89613.72	9.1E+06	(88241.34)	2.4E+06	88107.54d	1.6E+07	88000.56d	1.4E+07
10											87816.64	3.7E+06

			15-14						15-15			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	86005.40	7.9E+06					84694.11	1.1E+07				
1	86009.69d	1.4E+07	85976.69	1.6E+07			84701.20	1.4E+07	84668.42d	2.3E+07		
2	85988.19	1.4E+07	85943.93	1.6E+07	85915.68d	7.5E+06	84685.98d	1.4E+07	84640.65	2.3E+07	84612.51	1.1E+07
3	85953.33	1.2E+07	85894.06d	1.6E+07	(85860.26)	1.0E+05	84656.12d	1.2E+07	84600.48	2.3E+07	84564.70	9.0E+05
4	85899.53	1.1E+07	85829.25d	1.6E+07	(85779.87)	2.5E+06	84616.86	1.1E+07	84545.38d	2.3E+07	84496.45d	6.2E+06
5	(85831.70)	1.0E+07	85747.78d	1.5E+07	(85687.11)	3.5E+06	84561.13d	9.1E+06	84477.77d	2.3E+07	84416.17	8.6E+06
6	85747.78d	9.1E+06	85654.86	1.5E+07	85579.39d	3.8E+06	(84493.02)	7.6E+06	84399.19d	2.3E+07	84324.56d	9.9E+06
7	85647.01d	6.2E+06	85544.38d	1.5E+07	85459.46	3.9E+06	84412.02	5.2E+06	84308.50d	2.2E+07	(84222.67)	1.1E+07
8	85556.90d	1.4E+07	85421.31	1.4E+07	85324.98d	3.9E+06	84342.77d	9.5E+06	84205.85d	2.2E+07	84111.29d	1.2E+07
9	85419.98d	1.2E+07	85284.18d	1.3E+07	85178.08	4.1E+06	84229.11	8.0E+06	84095.37	2.1E+07	83986.19	1.3E+07

			15-16						15-17			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	83536.74d	1.2E+06					82539.13*	2.8E+06				
1	83544.80	1.6E+06	83512.28d	3.5E+06			82553.15	2.2E+06	82518.99d	3.8E+06		
2	(83534.59)	1.2E+06	83490.63	3.6E+06	83461.98d	2.6E+06	82550.14	3.4E+06	82502.78	3.5E+06	82475.00	6.0E+05
3	(83515.39)	8.0E+05	83456.78	3.8E+06	(83423.35)	1.0E+05	82539.13*	3.7E+06	82481.72	3.1E+06	82447.67	5.0E+05
4	(83484.95)	5.0E+05	83414.83d	4.1E+06	(83365.26)	1.6E+06	(82521.79)	3.7E+06	82450.56	2.6E+06	(82402.10)	4.0E+05
5	(83444.92)	3.0E+05	83361.67	4.4E+06	83300.48d	2.8E+06	82497.43	3.6E+06	82414.10	2.0E+06		
6	(83394.78)	2.0E+05	83300.48d	4.8E+06	83225.53	3.8E+06						
7	(83333.93)	1.0E+05	83231.19	5.2E+06	83144.21	4.8E+06						
8	(83288.36)	8.0E+05	(83152.91)	5.7E+06								
9	(83202.26)	1.0E+05	83067.22	6.3E+06	82959.85	8.0E+06						

			15-18						15-19			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	81724.61d	2.2E+07					81109.33	3.8E+07				
1	81741.99d	1.7E+07	81708.09	3.7E+07			81130.29d	1.5E+07	81096.53*	6.2E+07		
2	81744.60d	2.3E+07	81699.99d	3.8E+07	81672.94d	1.2E+07	81141.11d	2.9E+07	81096.53*	6.8E+07	81068.46	2.0E+07
3	81746.93d	2.3E+07	81687.86d	3.8E+07	81653.02d	6.1E+06	81154.41	3.6E+07	81096.53*	7.8E+07	81062.56d	2.4E+07
4	81741.99d	2.4E+07	81672.94d	4.0E+07	81622.67d	1.3E+07	81169.33d	4.3E+07	81099.50	9.4E+07	81049.26d	4.2E+07
5	81736.94	2.5E+07	81655.34d	4.2E+07	81592.50d	1.5E+07	81185.68d	5.3E+07	81103.17	1.1E+08	81041.27	5.5E+07
6	81727.90d	2.6E+07	81635.47d	4.5E+07	81560.37	1.7E+07	81204.39	6.6E+07	81109.90	1.4E+08	81036.90d	7.0E+07
7	81717.35d	2.5E+07	81614.76	4.9E+07	81528.51	1.9E+07	81226.31d	7.7E+07	81122.80	1.7E+08	81036.90d	8.6E+07
8	81730.36d	2.2E+07	81595.14	5.7E+07	81497.98d	2.2E+07	81276.01	5.5E+07	81141.11d	2.1E+08	81043.89d	1.0E+08
9	81710.63d	3.8E+07	81576.02d	6.9E+07	81468.97d	2.4E+07	81301.84	1.0E+08	81167.83	2.2E+08	81059.89	1.0E+08
10					81466.87	2.6E+07						

			15-20						15-21			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	80717.21	1.7E+08					80576.68*	9.6E+06				
1	80743.95	1.0E+08	80709.69	2.7E+08			80608.70d	1.7E+07	80576.68*	1.7E+07		
2	80765.96d	1.4E+08	80720.53	2.5E+08	80692.09	7.8E+07						
3	80794.73	1.2E+08	80737.00	2.1E+08	80703.23	3.9E+07						
4	80829.28	9.8E+07	80760.55d	1.6E+08	80710.84	5.5E+07						
5	(80874.52)	6.7E+07	80791.21d	1.1E+08	80730.09	3.9E+07						

			16-0						16-1			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	117929.21	2.4E+06					114936.02d	1.2E+07				
1	117900.23	2.0E+05	117869.83	3.2E+06			(114908.74)		114879.17	1.7E+07		
2	(117815.27)	1.0E+06	117775.50	3.3E+06			114827.36	4.9E+06	114788.01	1.7E+07	114762.92	3.5E+06
3	(117684.24)	1.2E+06	117632.11	3.3E+06	117603.78	1.9E+06	114702.75d	5.9E+06	114652.27d	1.7E+07	114620.27	1.0E+07
4	(117505.54)	1.3E+06	117443.70	3.3E+06	117400.60d	2.0E+06	114533.34	6.3E+06	114471.69	1.7E+07	114427.30	1.1E+07
5	117282.09	1.3E+06	(117208.80)	3.3E+06	(117154.41)	1.9E+06	114318.48	6.6E+06	114246.39	1.6E+07	114192.17d	1.0E+07
6	(117009.70)	1.4E+06	116927.90	3.3E+06	(116862.80)	1.9E+06	114059.81d	7.1E+06	113978.18d	1.6E+07	113913.16	9.8E+06
7	116692.42	1.7E+06	116604.25d	3.3E+06	(116529.08)	1.8E+06	113753.81	8.4E+06	(113667.97)	1.6E+07	(113593.69)	9.4E+06
8	(116345.85)	3.0E+05	116233.52	3.3E+06	116149.82	1.7E+06	(113426.83)	1.2E+06	113314.63d	1.6E+07	113230.70d	8.7E+06
9	(115935.60)	1.0E+06	(115823.112)	3.3E+06	115727.57	1.3E+06	(113034.96)	4.2E+06	112923.19d	1.6E+07	(112826.98)	6.4E+06
10			115370.10	3.2E+06	(115283.21)	2.2E+06			112490.33d	1.6E+07	112402.73d	1.1E+07

TableE.5. continue

			16-2						16-3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	112061.71	2.3E+07					109305.08d	1.5E+07				
1	(112036.01)	1.4E+06	112006.64	3.0E+07			(109280.78)	1.0E+05	109250.80d	1.8E+07		
2	(111959.41)	7.7E+06	111919.84d	2.9E+07	111894.77	5.8E+06	109207.61d	3.4E+06	109168.21d	1.7E+07	109143.71d	2.8E+06
3	111841.77	9.7E+06	111790.01d	2.9E+07	(111759.65)	2.1E+07	109097.00d	4.7E+06	109045.25d	1.7E+07	109014.04d	1.7E+07
4	111678.79d	1.0E+07	111616.12d	2.9E+07	111574.01d	2.0E+07	108942.98	5.2E+06	108878.59d	1.7E+07	108837.06	1.4E+07
5	(111476.01)	1.1E+07	(111402.87)	2.9E+07	(111348.39)	1.9E+07	108748.90d	5.6E+06	(108675.59)	1.6E+07	108620.63d	1.2E+07
6	111228.33d	1.2E+07	111145.08d	2.8E+07	111081.32	1.8E+07	108512.57	6.3E+06	(108431.12)	1.6E+07	108365.69d	1.1E+07
7	110938.44	1.5E+07	110850.81	2.8E+07	110775.04d	1.7E+07	108236.52	8.5E+06	108149.88d	1.5E+07	108073.99d	1.0E+07
8	(110626.31)	1.2E+06	110512.62d	2.7E+07	110430.09	1.5E+07	(107938.00)	1.0E+05	107824.85	1.4E+07	107742.26d	8.6E+06
9	110253.13	6.0E+06	110140.86d	2.6E+07	110043.37d	1.1E+07	(107584.27)	2.2E+06	(107471.79)	1.4E+07	107375.16d	5.2E+06
10			109726.45	2.5E+07	(109639.02)	2.1E+07			107079.16d	1.3E+07	106990.14	1.5E+07

			16-5						16-6			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	(104134.21)	7.7E+06					101718.78d	1.4E+07				
1	(104114.78)	3.0E+06	(104085.56)	1.2E+07			(101702.28)	1.0E+06	101672.49d	1.9E+07		
2	104050.25	5.2E+06	104009.08d	1.2E+07	103985.00d	3.9E+06	101641.64d	4.7E+06	101602.59	1.9E+07	101577.56d	4.1E+06
3	103950.88d	5.4E+06	(103898.82)	1.2E+07	(103868.36)	3.1E+06	(101547.31)	5.6E+06	101495.85d	1.8E+07	101465.31d	1.2E+07
4	103811.26	5.3E+06	103748.41	1.2E+07	103707.42d	5.4E+06	101416.82d	5.8E+06	101355.00d	1.8E+07	101312.39d	1.3E+07
5	103637.72	5.2E+06	103565.86d	1.2E+07	103512.61d	6.1E+06	101254.11d	5.8E+06	101181.31d	1.8E+07	101126.43d	1.2E+07
6	103426.20	5.1E+06	103345.90	1.3E+07	103280.06d	6.5E+06	101054.31d	6.1E+06	100973.95	1.7E+07	100907.47d	1.2E+07
7	(103178.43)	4.9E+06	103090.48d	1.3E+07	103016.64d	6.8E+06	100818.24d	7.4E+06	(100731.97)	1.7E+07	(100657.69)	1.2E+07
8	(102908.09)	2.5E+06	102793.55d	1.3E+07	102712.83d	7.0E+06	(100569.69)	3.0E+05	100457.44	1.6E+07	(100373.56)	1.0E+07
9	(102591.88)	4.0E+06	(102479.39)	1.3E+07	(102383.89)	6.7E+06	(100265.81)	2.4E+06	100154.29d	1.5E+07	100058.23	7.8E+06
10			102124.73	1.3E+07	(102037.16)	5.1E+06			99817.61	1.5E+07	(99730.32)	1.2E+07

			16-8						16-9			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	97229.89d	4.3E+06					95158.73	1.2E+07				
1	(97217.66)	5.6E+06	(97188.44)	8.6E+06			95146.51d	3.1E+06	95116.40	1.9E+07		
2	97165.53	5.8E+06	(97125.58)	8.6E+06	97100.10d	4.0E+06	95097.84d	6.2E+06	95058.10d	1.9E+07	(95034.27)	5.7E+06
3	97081.80	5.3E+06	(97031.80)	8.7E+06	(97001.34)	1.0E+05	95023.18d	6.4E+06	94971.42d	1.8E+07	(94940.95)	6.4E+06
4	96967.85	4.8E+06	96906.38	8.8E+06	(96863.83)	1.9E+06	94917.17d	6.1E+06	94853.94	1.8E+07	94813.07d	9.5E+06
5	96824.07d	4.4E+06	96751.37	8.9E+06	(96698.08)	2.9E+06	94783.68d	5.7E+06	94711.76	1.8E+07	(94655.94)	1.0E+07
6	96649.93	3.9E+06	(96567.84)	9.0E+06	(96502.77)	3.4E+06	94619.58d	5.4E+06	94537.27	1.7E+07	94471.58d	1.1E+07
7	(96442.54)	2.7E+06	(96354.92)	9.1E+06	(96280.64)	3.9E+06	(94426.52)	5.3E+06	94337.77d	1.7E+07	(94264.62)	1.1E+06
8	(96244.31)	4.9E+06	96111.29d	9.2E+06	96028.94d	4.5E+06	(24224.36)	1.2E+06	94110.79d	1.6E+07	94028.71d	1.1E+07
9	95954.90	4.2E+06	95842.71	9.4E+06	95747.22d	5.5E+06	(93973.67)	2.6E+06	93861.45	1.6E+07	(93765.69)	1.0E+07
10									93585.17	1.5E+07	(93496.95)	8.0E+06

			16-11						16-12			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	91365.33d	3.2E+06										
1	91358.31d	8.3E+06	91328.57	7.5E+06			89646.43	7.8E+06				
2	91319.36	7.1E+06	(91278.73)	7.5E+06	(91253.95)	4.1E+06	89610.68d	9.4E+06	89570.91d	1.9E+07	89546.10d	8.1E+06
3	91255.75d	6.2E+06	91204.23d	7.5E+06	(91173.32)	1.0E+05	89554.16	8.6E+06	89503.49	1.9E+07	89471.98	1.9E+06
4	91165.81d	5.6E+06	(91104.44)	7.5E+06	(91060.88)	7.0E+05	89474.73d	7.6E+06	89411.28d	1.9E+07	89367.99	6.5E+06
5	91053.66d	5.0E+06	90980.42	7.6E+06	(90926.42)	1.5E+06	89373.51d	6.7E+06	89299.97d	1.9E+07	89246.26d	8.4E+06
6	90915.75	4.1E+06	(90833.29)	7.7E+06	(90768.22)	1.9E+06	(89247.86)	5.6E+06	89164.92d	1.8E+07	89101.33	9.3E+06
7	(90751.58)	2.3E+06	(90663.96)	7.8E+06	90590.51	2.2E+06	89100.51	4.1E+06	(89012.08)	1.8E+07	(88937.80)	1.0E+07
8	90582.86d	8.1E+06	90469.31	7.8E+06	(90386.68)	2.7E+06	88948.45d	4.3E+06	88835.51d	1.7E+07	88753.67d	1.1E+07
9	90370.84d	5.7E+06	(90257.18)	7.9E+06	90161.69d	3.8E+06	88755.49d	4.1E+06	88644.04d	1.7E+07	88547.79d	1.2E+07
10			90021.69	7.9E+06	(89934.52)	1.0E+05			88430.67d	1.6E+07	88341.63d	3.9E+06

			16-13						16-14			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	(88065.02)	2.5E+06					(86522.11)	2.1E+06				
1	(88062.46)	1.0E+05	88032.62d	4.0E+06			86611.88	6.3E+06	86582.14d	4.4E+06		
2	(88031.61)	4.0E+05	87991.98	3.9E+06	(88065.02)	2.5E+06	(86586.46)	5.6E+06	86546.55	4.4E+06	(86522.11)	2.1E+06
3	(87981.72)	4.0E+05	87929.41	3.9E+06	(87900.25)	2.3E+06	86545.07	5.1E+06	86492.64d	4.3E+06	(86462.54)	1.0E+05
4	(87910.94)	3.0E+05	87848.43	3.8E+06	87806.12	3.2E+06	86482.48	4.8E+06	86419.80d	4.3E+06	(86378.23)	1.0E+05
5	(87821.95)	2.0E+05	87748.18d	3.7E+06	87694.33	3.6E+06	86406.43d	4.5E+06	86333.93	4.2E+06	(86278.82)	3.0E+05
6	(87710.53)	1.0E+05	87627.88	3.6E+06	87562.85	4.0E+06	86310.41	3.9E+06	(86228.10)	4.0E+06	(86163.03)	3.0E+05
7	(87578.70)	2.0E+05	87492.17	3.4E+06	87417.21d	4.3E+06	86194.36	2.3E+06	(86108.01)	3.9E+06	(86033.73)	3.0E+05
8	(87446.28)	2.0E+05	87334.50	3.3E+06	87250.55	4.6E+06	86082.55	7.7E+06	(85970.75)	3.8E+06	(85886.84)	3.0E+05
9	(87274.35)	1.0E+05					85934.46d	5.8E+06	85820.87d	3.6E+06	(85725.48)	3.0E+05

			16-15						16-16			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	85301.91d	9.8E+06					84142.33d	5.7E+06				
1	85304.14	1.3E+07	85274.92d	2.0E+07			84149.14	6.3E+06	(84118.56)	1.2E+07		
2	85284.18d	1.3E+07	85244.83	2.0E+07	85219.26d	8.9E+06	84132.95d	6.1E+06	(84093.38)	1.2E+07	84068.02d	6.2E+06
3	85249.14*	1.2E+07	85197.52d	1.9E+07	(85167.58)	3.0E+05	84108.31	5.1E+06	84057.26	1.2E+07	(84025.63)	4.0E+05
4	85199.86	1.1E+07	85136.23d	1.9E+07	(85093.98)	4.1E+06	84068.02d	4.2E+06	84005.26	1.2E+07	83963.91	3.7E+06
5	85136.23d	9.4E+06	(85062.29)	1.9E+07	85007.51d	5.7E+06	84019.17	3.5E+06	83946.76d	1.2E+07	83891.54	5.4E+06
6	85054.55d	7.9E+06	84974.37	1.8E+07	84909.83	6.4E+06	83957.38	2.7E+06	83874.54	1.2E+07	83811.17	6.4E+06
7	(84959.37)	5.1E+06	(84871.75)	1.7E+07	84796.41	6.7E+06	83880.43	1.6E+06	83794.54	1.2E+07	83720.76d	7.3E+06
8	84868.64	1.0E+07	84754.06d	1.7E+07	84672.08d	7.0E+06	83814.29d	3.4E+06	83702.02	1.2E+07	83618.79d	8.2E+06
9	84743.30d	8.2E+06	(84630.81)	1.6E+07	(84535.31)	7.6E+06	(83716.43)	2.5E+06	(83603.95)	1.2E+07	83507.03	9.5E+06
10					84406.30	1.6E+06			83497.33d	1.2E+07	(83409.70)	2.1E+06

TableE.5. continue

			16-19						16-20			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	81716.01d	5.1E+07					81324.70	1.5E+08				
1	81732.67	3.2E+07	81703.22	8.6E+07			81346.59	6.8E+07	81317.04	2.3E+08		
2	81739.78d	4.9E+07	81699.99d	9.1E+07	81675.19	3.0E+07	81363.14d	1.2E+08	81324.24	2.3E+08	81299.44	7.0E+07
3	81746.93d	5.4E+07	81695.96	9.8E+07	81665.40	1.8E+07	81385.38	1.2E+08	81335.59	2.3E+08	81305.04	5.3E+07
4	81753.37d	5.9E+07	81691.42d	1.1E+08	81648.24	4.0E+07	81414.67	1.2E+08	81350.87d	2.2E+08	81308.45d	8.4E+07
5	81760.02	6.7E+07	81687.86d	1.3E+08	81633.02	5.1E+07	81449.27	1.1E+08	81375.89d	1.9E+08	81321.45d	7.8E+07
6	81767.89d	7.7E+07	81684.97d	1.5E+08	81620.86d	6.3E+07						
7	81772.78d	8.4E+07	81684.97d	1.8E+08	81610.39d	7.8E+07						
8	81801.80	8.8E+07	81688.90	2.3E+08	81605.70	9.6E+07						
9	81816.05	1.5E+08	81703.67	2.8E+08	81607.80	1.1E+08						
10												

			16-21						17-0			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	81181.82*	2.7E+06					118435.60	1.6E+06				
1	81210.46	1.7E+06	81181.82*	2.0E+06			(118394.42)	1.5E+06				
2							(118312.61)	6.0E+05			118256.75	5.0E+05
3							(118173.87)	3.0E+05			(118096.96)	2.0E+05
4							(117986.16)	9.0E+05			117897.64	1.3E+06
5							(117750.36)	2.7E+06			(117644.04)	1.3E+06
6							117463.66	9.0E+05			(117343.42)	1.2E+06
7							(117125.48)	1.2E+06			(116997.35)	1.0E+05
8							(116758.39)	1.0E+05			116604.25d	1.3E+06

			17-1						17-2			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	115443.21	8.6E+06					112568.04d	1.7E+07				
1	115403.19	8.4E+06	115387.33	1.2E+07			112530.89	1.7E+07	112515.50d	2.3E+07		
2	(115325.34)	3.0E+06	115291.42d	1.2E+07			112457.79	5.0E+06	112423.76	2.3E+07	112402.73d	5.8E+06
3	(115192.91)	4.1E+06	115150.17	1.2E+07	115116.16	1.2E+06	112332.33	7.3E+06	112287.26d	2.3E+07	(112253.84)	1.8E+06
4	115013.81	4.5E+06	114961.11	1.2E+07	114925.20	7.6E+06	112157.99	7.9E+06	112106.73	2.2E+07	112071.09d	1.6E+07
5	114788.55	4.4E+06	114728.69	1.2E+07	114682.38d	7.2E+06	(111944.34)	5.1E+06	111883.87d	2.2E+07	(111838.02)	1.4E+07
6	(114514.46)	5.2E+06	114447.82d	1.2E+07	(114393.78)	6.9E+06	111682.40d	9.8E+06	111616.12d	2.1E+07	111560.81d	1.4E+07
7	(114190.08)	6.1E+06	114122.89	1.1E+07	(114061.96)	6.7E+06	111372.54d	1.2E+07	111306.63d	2.1E+07	(111244.80)	1.7E+07
8			113756.56d	1.1E+07	113685.18	5.6E+06	(111038.85)	5.4E+06	110954.84d	2.0E+07	110885.52d	1.0E+07
9			113346.20	1.1E+07	(113261.48)	1.9E+06			(110562.37)	1.9E+07	(110478.25)	2.5E+06
10											110051.57	1.3E+07

			17-3						17-5			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	109812.26d	1.2E+07					(104641.25)	4.5E+06				
1	109775.99	1.4E+07	109759.15	1.6E+07			(104608.97)	2.8E+06	104592.98d	7.2E+06		
2	109705.78	2.5E+06	109672.18d	1.6E+07	109650.79d	3.6E+06	(104574.54)	3.2E+06	104515.57d	7.2E+06	104493.46d	2.5E+06
3	109586.54	4.3E+06	109542.60d	1.6E+07			104440.52d	3.4E+06	104396.03d	7.2E+06	104362.35	2.5E+06
4	(109422.38)	4.8E+06	109369.36	1.5E+07	109334.06	1.3E+07	104292.65d	3.3E+06	104240.22d	7.3E+06	(104204.10)	2.6E+06
5	109216.35	5.2E+06	109156.92d	1.5E+07	109110.58d	1.1E+07	(104107.39)	3.5E+06	104047.56d	7.3E+06	(104001.07)	3.3E+06
6	(108967.35)	6.1E+06	108899.76d	1.4E+07	108846.29d	9.8E+06	(103881.78)	3.0E+06	(103815.17)	7.2E+06	103761.13d	3.6E+06
7	108671.30d	9.6E+06	108605.71d	1.3E+07	108544.01	7.2E+06	(103612.93)	2.3E+06	103546.86d	7.4E+06	(103484.80)	2.6E+06
8	(108350.54)	1.5E+06	108265.18d	1.3E+07	108197.22d	7.0E+06	(103320.63)	1.9E+06	103236.16	7.5E+06	(103166.36)	4.2E+06
9			107896.48d	1.2E+07	(107810.79)	1.6E+06			102903.84d	7.5E+06	102818.65d	3.4E+06
10					107402.65d	8.9E+06					102449.68d	3.4E+06

			17-6						17-7			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	102226.50d	1.1E+07					(99925.59)	2.9E+06				
1	102197.36	1.1E+07	102179.93d	1.6E+07			(99897.32)	4.6E+06	99880.21d	3.4E+06		
2	(102139.00)	3.7E+06	102105.66d	1.6E+07	(102084.35)	4.4E+06	(99843.89)	1.0E+05	(99810.60)	3.3E+06	(99925.59)	2.9E+06
3	(102036.94)	5.0E+06	101993.84d	1.6E+07	101960.12d	2.0E+06	(99747.79)	3.0E+05	99703.87d	3.2E+06	(99897.32)	4.6E+06
4	(101897.90)	5.2E+06	(101845.14)	1.5E+07	(101809.72)	1.0E+07	(99616.66)	4.0E+05	(99563.90)	3.0E+06	99527.85d	4.5E+06
5	(101722.71)	7.7E+06	(101662.53)	1.5E+07	101616.14d	9.7E+06	(99451.28)	1.0E+05	99390.44d	2.8E+06	(99344.96)	3.3E+06
6	(101508.57)	5.3E+06	101441.13	1.5E+07	(101387.89)	9.3E+06	(99249.28)	8.0E+05	(99182.67)	2.5E+06	99128.75d	2.8E+06
7	101254.11d	6.5E+06	101187.10d	1.4E+07	101126.43d	6.5E+06	(99008.74)	2.3E+06	(98942.48)	2.2E+06	(98880.61)	3.2E+06
8	(100982.23)	2.1E+06	100898.21	1.4E+07	(100827.96)	8.2E+06	(98752.37)	1.0E+05	(98668.35)	1.8E+06	98598.08d	1.4E+06
9			100576.87d	1.2E+07	(100492.33)	3.3E+06						
10					100143.69d	1.0E+07						

			17-8						17-9			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	97738.00d	1.8E+06					95665.58d	9.6E+06				
1	(97711.85)	3.0E+05	97695.65	3.6E+06			95640.03d	6.6E+06	95624.88	1.5E+07		
2	(97662.49)	3.4E+06	97630.48	3.6E+06	97606.80d	1.7E+06	95596.01	5.4E+06	95561.92d	1.5E+07	95540.37	5.2E+06
3	(97572.44)	2.8E+06	(97529.69)	3.7E+06	(97495.53)	3.2E+06	95511.56	5.7E+06	95468.58	1.5E+07	95435.01d	4.6E+06
4	97449.15d	2.6E+06	(97396.59)	3.8E+06	(97361.17)	3.0E+05	(95397.07)	5.3E+06	(95344.31)	1.5E+07	(95308.89)	6.5E+06
5	(97294.03)	3.7E+06	97233.52d	3.9E+06	(97187.71)	8.0E+05	(95251.90)	2.4E+06	95192.59d	1.4E+07	95146.51d	7.7E+06
6	97104.07d	1.6E+06	97037.03d	4.0E+06	(96983.39)	1.2E+06	95073.81d	5.0E+06	95012.34d	1.4E+07	94954.26d	8.1E+06
7	(96877.04)	2.0E+05	96810.15d	4.2E+06	(96748.91)	1.0E+06	94861.06d	4.0E+06	94794.03	1.4E+07	(94732.89)	8.8E+06
8	(96636.85)	2.8E+06	(96552.83)	4.2E+06	96481.04	2.0E+06	(94636.90)	2.8E+06	94552.92	1.3E+07	94482.35d	8.3E+06
9			96266.95d	4.5E+06	(96181.64)	2.8E+06			94284.30d	1.2E+07	(94200.19)	6.4E+06
10					95871.07	1.8E+06					93909.68d	6.1E+06

TableE.5. continue

			17-10						17-12			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	(93709.34)	3.7E+06					90157.07d	8.4E+06				
1	93687.70	4.5E+06	93669.91	5.1E+06			90140.47d	3.6E+06	90123.85	1.5E+07		
2	(93646.12)	3.0E+05	(93612.83)	5.0E+06	93592.01d	1.3E+06	(90108.31)	8.2E+06	90075.06	1.5E+07	90054.03d	6.0E+06
3	(93568.42)	6.0E+05	93525.68d	4.8E+06	(93491.51)	3.0E+05	90042.88	7.5E+06	89999.96d	1.5E+07	89966.73d	8.0E+06
4	(93461.83)	6.0E+05	93408.72	4.6E+06	93373.77	4.9E+06	89954.59d	6.6E+06	89902.52d	1.4E+07	(89866.45)	3.5E+06
5	(93326.95)	6.0E+05	(93266.77)	4.3E+06	(93220.63)	4.4E+06	(89841.58)	5.7E+06	(89781.40)	1.4E+07	89735.33	5.4E+06
6	(93161.60)	7.0E+05	(93094.99)	3.9E+06	93040.15	4.1E+06	89701.98	4.5E+06	89635.16	1.4E+07	89581.48	6.2E+06
7	(93962.92)	1.8E+06	92896.66	3.6E+06	(92834.79)	5.0E+06	(89534.20)	1.7E+06	89468.01	1.3E+07	89406.10d	6.4E+06
8	(92755.37)	1.0E+05	92670.56	3.1E+06	92601.16d	3.1E+06	89361.94	4.0E+06	89277.26d	1.3E+07	(89207.01)	7.5E+06
9			92423.01	2.7E+06	(92337.12)	1.1E+06			89065.91	1.2E+07	88982.05d	7.9E+06
10											88755.49d	4.8E+06

			17-13						17-14			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	88572.05	4.7E+06										
1	(88556.65)	3.2E+06	88539.98d	7.9E+06			87119.54	1.0E+05				
2	88529.92	2.0E+06	(88495.99)	7.8E+06	88475.92	3.1E+06	87084.14	1.5E+06			(87029.15)	1.0E+05
3	88471.07d	1.9E+06	88428.40	7.7E+06	88393.19d	3.0E+06	(87033.64)	1.2E+06			(86956.73)	4.0E+05
4	88392.79	1.7E+06	88339.00d	7.4E+06	88303.21	3.9E+06	86963.82	1.2E+06			(86875.57)	2.0E+05
5	(88290.22)	2.0E+06	88229.31	7.2E+06	(88183.90)	4.8E+06	86874.24	1.6E+06			(86768.45)	1.0E+05
6	(88164.93)	1.0E+06	88098.50d	6.8E+06	88043.86	5.2E+06	(86764.33)	9.0E+05			(86643.65)	1.0E+05
7	(88013.20)	9.0E+05	87947.00d	6.4E+06	(87885.07)	3.9E+06	(86630.13)	1.0E+05			(86502.00)	2.0E+05
8	(87858.82)	2.0E+05	87773.87	6.0E+06	(87704.55)	6.0E+06	(86495.51)	2.0E+06			(86341.24)	1.0E+05
9			87585.00	5.4E+06	(87500.87)	5.0E+06					(86159.98)	1.0E+05
10					87296.96	4.9E+06					(85981.52)	2.0E+05

			17-15						17-16			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	85808.15	6.3E+06					84649.34d	7.6E+06				
1	85797.89	1.9E+06	85782.96d	1.1E+07			84641.95	2.8E+06	84625.00	1.4E+07		
2	85780.92d	9.1E+06	85747.78d	1.1E+07	85724.81	4.5E+06	84629.40	8.2E+06	84596.15d	1.4E+07	84575.69	6.1E+06
3	85738.85d	8.0E+06	85696.11d	1.1E+07	85661.04d	6.7E+06	84596.15d	7.0E+06	84552.79d	1.4E+07	84519.27d	8.6E+06
4	(85679.50)	7.2E+06	85626.10d	1.1E+07	(85591.32)	1.3E+06	84550.16	6.0E+06	84496.45d	1.3E+07	84462.39	3.0E+06
5	85603.86d	5.8E+06	85544.38d	1.0E+07	85497.53d	2.4E+06	84487.88	5.8E+06	84428.23d	1.3E+07	(84381.67)	4.8E+06
6	(85509.35)	5.0E+06	85444.11	1.0E+07	(85388.37)	2.7E+06	(84411.11)	3.7E+06	(84344.50)	1.3E+07	84291.59d	5.6E+06
7	(85393.87)	1.2E+06	85328.08d	9.5E+06	(85265.74)	2.9E+06	(84316.38)	1.0E+06	84249.56	1.2E+07	(84188.25)	4.1E+06
8	85281.23	6.3E+06	85197.52d	9.1E+06	85126.78d	3.0E+06	(84226.95)	3.4E+06	84142.33d	1.2E+07	84072.73	6.8E+06
9			85054.55d	8.5E+06	84969.93d	3.2E+06			(84027.07)	1.1E+07	83942.32	7.0E+06
10											83822.35d	4.5E+06

			17-17						17-19			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	83653.77d	1.8E+06					(82223.14)	1.0E+05				
1	(83649.97)	5.0E+05	83635.13	3.9E+06			(82226.69)	1.0E+05	(82210.10)	1.0E+05		
2	83645.47d	1.5E+06	83611.04d	4.0E+06	83588.55d	2.2E+06	(82237.00)	1.0E+05	(82203.71)	3.0E+05	(82182.35)	2.0E+05
3	83620.63	1.1E+06	83577.01	4.0E+06	83544.34d	3.5E+06	(82236.59)	1.0E+05	(82193.84)	9.0E+05	(82159.68)	6.0E+05
4	(83585.98)	8.0E+05	83533.70d	4.1E+06	(83497.80)	1.2E+06	82233.49d	2.0E+05	82180.88	2.3E+06	(82145.39)	1.5E+06
5	(83541.03)	1.0E+05	83481.47	4.2E+06	(83434.71)	2.3E+06	82228.89	3.0E+05	(82168.66)	5.3E+06	(82122.52)	3.8E+06
6	(83483.73)	2.0E+05	83417.26	4.3E+06	(83363.05)	3.1E+06	82220.48	2.9E+06	82153.08	1.2E+07	82099.61d	8.0E+06
7	(83412.18)	1.0E+05	(83345.92)	4.4E+06	(83284.05)	6.8E+06	82207.56d	5.4E+06	82141.53d	2.4E+07	82079.49d	1.7E+07
8	(83349.72)	8.0E+05	83265.94	4.4E+06	83195.31	3.9E+06	82214.19d	2.0E+07	82131.08d	4.9E+07	82060.67d	2.9E+07
9			83181.78d	4.4E+06	83096.06d	5.0E+06			82126.22	1.0E+08	82042.18	3.9E+07
10											82074.18	4.8E+06

			17-20						17-21			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	81832.27d	2.0E+08					(81690.15)	4.2E+06				
1	81840.02	1.3E+08	81823.93d	3.1E+08			81705.44	8.0E+06				
2	81861.37d	1.6E+08	81827.41	3.3E+08	81806.67*	1.1E+08						
3	81876.17d	1.9E+08	81832.27d	3.5E+08	81797.42	9.8E+07						
4	81894.01	2.0E+08	81841.40	3.7E+08	81806.67*	1.3E+08						
5	81916.56	2.0E+08	81858.45	3.8E+08	81811.27d	1.5E+08						

			18-0						18-1			
J	**R(J)**		**Q(J)**		**P(J)**		**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	118831.18	8.0E+05					115838.61	3.4E+06				
1	118786.37d	1.7E+06	118770.02	1.4E+06			115795.82	3.1E+06	115780.54	7.9E+06		
2	118693.36d	1.0E+05	118666.61	1.4E+06	118651.18	4.0E+05	115705.25	3.0E+06	115679.55d	7.8E+06	115666.04d	3.8E+06
3	(118546.05)	4.0E+05	(118513.38)	1.4E+06	(118488.77)	1.0E+05	115565.13	3.3E+06	115531.66	7.7E+06	115507.31	3.3E+06
4	(118345.30)	8.0E+05	118307.47d	1.3E+06	(118278.86)	1.4E+06	(115372.72)	3.6E+06	115335.16	7.6E+06	115306.07	3.9E+06
5	118098.95	1.0E+05			118017.56	8.0E+05	115137.55d	2.1E+06	(115089.66)	7.3E+06	(115054.08)	3.9E+06
6					(117702.56)	4.0E+05			114795.16d	7.1E+06	114753.13	3.2E+06
7					(117346.10)	1.0E+06					114410.74	3.8E+06

			18-2						18-3			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	112963.72	6.0E+06					110207.24d	4.5E+06				
1	112923.19d	3.9E+06	112906.81	1.6E+07			110166.73d	4.0E+06	110151.94	1.3E+07		
2	112838.62d	7.8E+06	112811.49d	1.6E+07	112796.72d	9.2E+06	110085.76d	4.5E+06	110060.29d	1.2E+07	(110045.53)	7.6E+06
3	(112702.93)	7.1E+06	112669.71d	1.6E+07	112646.48d	1.0E+07	(109957.57)	4.9E+06	109926.57	1.2E+07	(109900.29)	6.7E+06
4	(112518.67)	6.7E+06	112480.28d	1.5E+07	112452.61d	6.3E+06	109781.19	5.4E+06	109743.21d	1.2E+07	(109715.08)	6.3E+06
5	112292.72d	4.6E+06	112245.82	1.5E+07	112210.64d	7.6E+06	109564.28	2.5E+06	(109518.59)	1.1E+07	109482.83d	6.4E+06
6			111963.18d	1.4E+07	111921.56d	6.9E+06			(109247.67)	1.0E+07	109205.77d	4.9E+06
7					111593.70d	7.0E+06					108891.95d	6.3E+06

TableE.5. fin

			18-5						18-6			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	105035.68d	2.3E+06					102622.33d	5.5E+06				
1	(105000.78)	1.9E+06	104985.66d	3.8E+06			102587.58d	6.0E+06	102573.06	1.2E+07		
2	104928.83	1.8E+06	104901.99d	3.8E+06	(104887.56)	9.0E+05	(102519.88)	3.3E+06	102493.68d	1.1E+07	102477.59d	4.8E+06
3	(104811.64)	1.8E+06	104779.30	3.8E+06	104753.70	1.2E+06	102408.93d	4.3E+06	102377.20d	1.1E+07	(102351.84)	3.5E+06
4	104651.39	1.7E+06	104613.48d	3.8E+06	104584.88d	1.5E+06	(102257.04)	4.9E+06	102219.53d	1.1E+07	102189.30	6.8E+06
5	104456.28	1.4E+06	104408.71	3.8E+06	(104373.25)	1.8E+06	(102071.46)	2.2E+06	102024.00d	1.0E+07	101988.57d	6.2E+06
6									101787.97d	9.9E+06	(101747.03)	4.9E+06
7											101473.70d	6.0E+06

			18-7						18-9			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	(100320.26)	1.0E+06					96059.26d	5.6E+06				
1	(100289.13)	7.0E+05	100275.21d	4.0E+06			96033.30	3.8E+06	96017.67d	1.0E+07		
2	(100224.77)	1.2E+06	100198.44d	3.9E+06	100184.840	3.2E+06	95977.54d	5.0E+06	95950.66d	1.0E+07	95936.55d	3.2E+06
3	(100119.97)	1.1E+06	(100087.30)	3.7E+06	(100062.69)	2.6E+06	95884.33d	4.4E+06	(95851.56)	1.0E+07	(95826.95)	4.0E+06
4	(99975.80)	1.2E+06	(99938.25)	3.4E+06	(99909.36)	2.3E+06	(95756.21)	3.5E+06	95719.39d	9.7E+06	95689.80d	4.1E+06
5	(99800.03)	4.0E+05	(99752.72)	3.1E+06	(99717.14)	2.3E+06	95599.94d	3.2E+06	95552.25	9.4E+06	95516.88	4.9E+06
6			(99529.60)	2.7E+06	(99487.74)	1.6E+06			95354.33	9.0E+06	(95312.47)	5.0E+06
7					99228.170	2.2E+06					95080.01d	4.1E+06

			18-10						18-12			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	(94104.01)	1.9E+06					90553.04d	6.3E+06				
1	(94079.03)	1.1E+06	94064.19d	5.7E+06			(90532.50)	4.2E+06				
2	(94027.00)	2.0E+06	94000.95d	5.6E+06	93985.29	3.6E+06	(90489.19)	5.1E+06	90463.34d	8.8E+06	90449.23	1.6E+06
3	(93940.60)	1.6E+06	93907.98d	5.4E+06	93884.56	4.4E+06	90415.20	4.4E+06	90383.10d	8.7E+06	90358.38d	2.9E+06
4	(93820.97)	1.5E+06	(93783.42)	5.0E+06	(93940.60)	1.6E+06	90314.43d	3.3E+06	(90276.22)	8.5E+06	(90247.33)	2.5E+06
5	(93675.70)	6.0E+04	(93628.39)	4.7E+06	93593.50	3.2E+06	(90190.33)	3.6E+06	(90143.02)	8.3E+06	(90107.44)	3.5E+06
6			(93441.92)	4.2E+06	93400.05d	3.1E+06			89982.46	8.0E+06	89940.70d	4.2E+06
7					93183.54	2.8E+06					89753.56	2.5E+06

			18-13						18-15			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	88966.68d	4.7E+06					86202.45	4.5E+06				
1	88948.45d	4.2E+06	88933.10	8.2E+06			86189.32d	3.9E+06	86174.14	4.7E+06		
2	88908.51	2.4E+06	88882.26d	8.0E+06	88869.87d	2.3E+06	(86161.79)	3.0E+06	86135.08d	4.7E+06	(86120.93)	3.0E+05
3	88843.88d	2.5E+06	88810.70d	7.8E+06	(88786.25)	2.2E+06	86110.62	3.2E+06	86077.12d	4.6E+06	(86053.58)	5.0E+05
4	(88750.70)	2.2E+06	(88713.15)	7.4E+06	88684.16d	4.5E+06	(86038.64)	2.6E+06	86000.52	4.5E+06	(85972.20)	1.1E+06
5	(88638.97)	1.2E+06	(88591.66)	7.0E+06	(88556.08)	4.6E+06	85951.36	3.1E+06	85904.52d	4.3E+06	(85869.71)	1.1E+06
6			(83025.81)	7.0E+05	(88403.39)	4.4E+06			85789.63	4.1E+06	(85747.81)	1.1E+06
7					88234.64	4.0E+06					(85614.49)	6.0E+05

			18-16						18-17			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	85044.61	7.6E+06					(84048.84)	4.0E+06				
1	85032.81	5.5E+06	85019.32d	1.0E+07			(84041.78)	3.5E+06	83999.78	5.7E+06		
2	85011.13	5.4E+06	84984.47	1.0E+07	84969.93d	1.8E+06	84025.05	1.7E+06	83960.94d	5.6E+06	(83984.73)	1.0E+06
3	84969.93d	4.9E+06	84935.33d	9.9E+06	84911.64	2.8E+06	83993.17d	1.8E+06	83907.46d	5.4E+06	(83935.64)	1.0E+06
4	(84908.28)	3.6E+06	(84870.73)	9.6E+06	84840.85	3.2E+06	83945.35	1.4E+06	83841.01	5.2E+06	83877.24	3.3E+06
5	84836.52d	3.8E+06	(84789.43)	9.1E+06	84754.06d	3.8E+06	83890.46	1.1E+06	83765.09	5.0E+06	83806.94d	3.3E+06
6			84692.37d	8.6E+06	84649.34d	4.2E+06					83723.04	3.3E+06
7					84536.80d	2.6E+06						

			18-20						18-21			
J	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**	**R(J)**	**A**	**Q(J)**	**A**	**P(J)**	**A**
0	82226.31d	4.5E+07					82084.80	8.6E+07				
1	82231.85d	5.4E+07	82216.55*	8.0E+07			82096.51d	8.9E+07	82082.69d	6.9E+07		
2	(82241.88)	2.9E+07	82216.55*	9.4E+07	82201.14d	2.4E+07						
3	82248.33d	4.9E+07	82214.19	1.2E+08	82191.27d	1.9E+07						
4	(82253.62)	6.9E+07	82216.55*	1.6E+08	82188.07	1.0E+08						
5	(82266.34)	7.6E+07	82218.80d	2.2E+08	82183.91	1.2E+08						

E.6 Le système $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v^{'} - v^{''})$.

Table E.6 – *Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$.*

			10-1						10-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	96284.28	0.32	1.2E+07				93408.72	-0.38	1.6E+07			
1	96255.86	0.35	1.5E+07	96211.62	0.19	2.9E+07	93382.69	-0.09	1.8E+07	93338.49	-0.21	5.2E+07
2	96184.63d	0.05	1.7E+07	96111.29d	0.01	1.8E+07	93315.66	-0.34	1.9E+07	93242.74d	0.05	3.6E+07
3	96071.04d	0.05	1.9E+07	95968.66	0.08	1.5E+07	93208.19d	-0.64	1.9E+07	93106.18d	-0.25	3.3E+07
4	95915.79d	0.14	2.0E+07	95784.54	-0.10	1.3E+07	93061.11d	-0.49	1.9E+07	92930.54	-0.05	3.2E+07
5	95719.39d	-0.21	2.2E+07	95559.53d	-0.45	1.3E+07	92874.94	-0.78	1.8E+07	92715.91	-0.20	3.1E+07
6				95295.61	-0.24	1.2E+07				92464.12d	-0.01	3.0E+07
7				94993.29d	-0.05	1.2E+07				92176.23d	0.05	2.9E+07

			10-3						10-4			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	90651.50d	-0.35	1.6E+07				88009.50	-0.25	7.7E+06			
1	90627.45d	-0.11	1.9E+07	90582.86d	-0.62	4.7E+07	87987.51	0.03	8.8E+06	87943.14	-0.27	2.4E+07
2	90564.55	-0.20	2.1E+07	90491.16d	-0.29	3.1E+07	87928.89	0.25	8.9E+06	87855.24	-0.10	1.6E+07
3	90463.34d	-0.13	2.3E+07	90360.77	-0.29	2.8E+07	87833.40	-0.05	8.4E+06	87731.24	0.20	1.4E+07
4	90324.35	-0.10	2.5E+07	90193.29	-0.16	2.6E+07	87702.58	0.18	7.7E+06	87571.31	-0.08	1.4E+07
5	90147.90d	-0.63	2.7E+07	89988.95	0.04	2.5E+07	87536.38d	-0.08	6.9E+06	87377.09	0.25	1.3E+07
6				89749.20d	0.46	2.4E+07				87149.14d	-0.08	1.3E+07
7				89474.73d	0.13	2.4E+07				86887.30d	-0.91	1.3E+07

			10-5						10-7			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	85481.36d	-0.48	2.1E+07				80765.96d	-0.22	2.2E+07			
1	85461.56	0.01	2.6E+07	85417.44	-0.03	5.9E+07	80749.88d	-0.02	2.7E+07	80705.82	0.00	6.5E+07
2	85406.82d	0.04	2.8E+07	85333.39d	-0.09	3.8E+07	80703.23d	0.10	2.9E+07	80629.81	-0.02	4.3E+07
3	85317.38	-0.16	3.0E+07	85215.12d	-0.01	3.3E+07	80625.94d	0.07	3.1E+07	80523.50d	0.04	3.8E+07
4	85193.94d	-0.41	3.1E+07	85063.54d	0.20	3.1E+07	80518.86	0.13	3.2E+07	(80387.72)		3.6E+07
5	85038.61	-0.16	3.2E+07	84879.03	-0.12	3.0E+07						
6				84662.78d	-0.40	2.9E+07						
7				84416.17d	-0.02	2.9E+07						

			11-0						11-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(100049.25)		4.9E+07				97055.23d	-0.42	4.1E+06			
1	(100018.06)		5.9E+07	(99975.10)		1.4E+08	97026.28r	0.11	5.4E+06	96984.18	0.57	1.1E+07
2	(99941.94)		6.3E+07	99871.33d	1.09	9.2E+07	96954.85	0.18	6.3E+06	96883.16d	0.19	6.5E+06
3	99821.00	0.25	6.8E+07	99720.54r	0.34	8.1E+07	96839.46d	-0.33	7.1E+06	96740.39d	1.15	5.5E+06
4	99655.75d	-1.34	7.0E+07	99526.98r	-0.33	7.6E+07	96682.63	0.07	7.9E+06	96554.85	0.12	5.0E+06
5	(99446.57)		7.1E+07	99290.46d	-0.46	7.2E+07	96484.44d	0.01	8.5E+06	96328.56d	-0.22	4.8E+06
6				99011.83d	-0.57	7.0E+07				96062.16	-0.60	4.7E+06
7				98693.10	-0.46	6.9E+07				95757.57d	-0.59	5.0E+06

			11-2						11-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	94180.72d	-0.07	2.4E+07				91423.46	-0.08	7.1E+06			
1	94153.83d	0.39	2.8E+07	94110.79d	-0.09	7.0E+07	(91398.21)		9.3E+06	91355.65	-0.01	1.8E+07
2	94085.83d	-0.23	3.0E+07	94014.20d	-0.18	4.6E+07	91334.64d	-0.20	1.1E+07	91262.97	-0.17	1.1E+07
3	93977.10	-0.53	3.1E+07	93877.09d	0.01	4.1E+07	91232.03	-0.24	1.3E+07	91132.03	0.31	9.4E+06
4	93828.17	-0.34	3.2E+07	93700.14	-0.54	3.9E+07	91091.34	-0.02	1.4E+07	90962.99d	-0.54	8.4E+06
5	93640.77	0.22	3.3E+07	93484.63	-0.27	3.7E+07	90912.90d	-0.46	1.6E+07	90758.44d	0.73	7.7E+06
6				93230.59	-0.45	3.5E+07				90515.60	-0.05	7.1E+06
7										90239.490	0.06	6.6E+06

			11-4						11-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	88781.42d	-0.02	1.6E+07				(86253.53)		8.9E+06			
1	88758.75	0.61	1.8E+07	88715.55d	-0.04	5.0E+07	86232.55	0.34	1.1E+07	86189.32d	-0.33	2.5E+07
2	88698.74	0.01	1.9E+07	88627.08d	0.05	3.4E+07	86176.96d	0.09	1.3E+07	86105.46	0.29	1.6E+07
3	88602.24	-0.01	1.9E+07	88502.08d	-0.02	3.1E+07	86086.35d	0.01	1.4E+07	85985.80d	0.01	1.4E+07
4	88469.45	0.14	1.8E+07	88341.63d	0.15	3.0E+07	85961.19d	-0.07	1.5E+07	85833.62	0.19	1.3E+07
5	88301.27	-0.03	1.7E+07	88145.76d	0.12	3.0E+07	85804.05d	0.45	1.6E+07	85647.01d	-0.94	1.3E+07
6				87915.78	-0.35	3.0E+07				85429.93	-0.15	1.2E+07
7				87653.28d	0.24	3.0E+07				85180.83	-0.18	1.2E+07

			11-6						11-7			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	83838.89d	-0.09	1.3E+07				81537.98	0.11	1.1E+07			
1	83819.71	-0.01	1.5E+07	83777.12	-0.03	3.9E+07	81521.07	0.51	1.3E+07	81478.14	0.14	2.9E+07
2	83768.33	0.00	1.5E+07	83696.69	0.06	2.7E+07	81473.25	0.03	1.5E+07	81401.71	0.19	1.9E+07
3	83683.70	-0.12	1.5E+07	83583.75d	0.48	2.4E+07	81394.71	0.04	1.7E+07	81294.14	0.02	1.6E+07
4	83566.93	0.05	1.5E+07	83438.92	-0.13	2.3E+07	81285.89	0.25	1.8E+07	(81157.81)		1.5E+07
5	83418.99	0.07	1.4E+07	83263.08	-0.20	2.3E+07	81146.97d	-0.52	1.9E+07	80991.99d	0.15	1.4E+07
6				83056.90	0.03	2.2E+07				80797.50d	-0.08	1.3E+07
7										80576.68d	-0.14	1.3E+07

TableE.6. continue

			12-2						12-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	94937.09	0.08	2.6E+07				92178.81	-0.95	1.2E+06			
1	94909.69d	0.36	3.1E+07				92154.13	0.03	1.8E+06			
2	94840.43	-0.02	3.3E+07	94770.59	-0.01	5.1E+07	92088.99	-0.23	2.4E+06	92019.38	0.02	1.2E+06
3	94730.23d	-0.09	3.5E+07	94632.78d	-0.19	4.6E+07	91985.91	0.95	3.0E+06	(91887.61)		1.0E+06
4	94579.61	-0.10	3.6E+07	94454.84d	-0.21	4.3E+07	(91842.56)		3.6E+06	(91887.61)		9.0E+05
5				94237.41	-0.18	4.1E+07				(91717.90)		7.0E+05
6				93982.19	-0.05	4.0E+07				(91510.40)		5.0E+05

			12-4						12-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	89537.54d	-0.12	2.0E+07				87009.65d	-0.10	1.1E+06			
1	89513.94	-0.09	2.4E+07				86988.07	-0.03	1.5E+06			
2	89452.78d	-0.33	2.5E+07	89383.18	-0.07	4.4E+07	86931.30	0.06	1.8E+06	86861.18	-0.21	1.9E+06
3	89354.87	-0.07	2.6E+07	89257.57	-0.02	4.0E+07	86839.10d	0.07	2.3E+06	86741.58	-0.10	1.7E+06
4	89220.68d	0.17	2.6E+07	89095.87	0.02	3.9E+07	86713.16d	0.70	2.8E+06	86588.12	0.32	1.5E+06
5				88899.04	0.71	3.8E+07				86400.44	-0.20	1.4E+06
6				88667.04	-0.29	3.7E+07				86181.90d	0.62	1.3E+06

			12-6						13-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	84595.25d	0.05	2.0E+07				95678.27d	0.40	2.6E+07			
1	84575.69d	0.09	2.4E+07				95649.93d	0.46	3.2E+07	95609.22d	0.59	7.4E+07
2	84522.71d	0.01	2.6E+07	84452.87	0.02	3.9E+07	95579.85d	0.22	3.5E+07	95511.56d	0.10	4.8E+07
3	84436.58d	0.07	2.7E+07	84339.20d	0.04	3.5E+07	95468.58d	0.09	3.8E+07	95373.20	0.09	4.2E+07
4	84318.10	0.02	2.7E+07	84193.68d	0.26	3.3E+07	95316.14d	-0.02	4.0E+07	95194.13	-0.10	3.9E+07
5				84016.56d	0.60	3.2E+07				94975.59	-0.17	3.6E+07
6				83808.22d	0.15	3.1E+07				94718.51	-0.18	3.4E+07

			13-4						3.9E+04			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	90278.27d	-0.25	2.2E+07				(87750.61)		3.0E+05			
1	90254.21	0.04	2.7E+07	90213.00	-0.33	6.2E+07	(87728.24)		2.0E+05	87687.19d	-0.21	2.0E+06
2	90192.43	0.15	2.9E+07	90123.85d	-0.26	4.0E+07	(87670.42)		1.0E+05	87602.06d	-0.19	1.7E+06
3	90092.91	-0.20	3.2E+07	89997.63	-0.10	3.5E+07	(87577.20)		1.0E+05	87481.54d	-0.28	1.9E+06
4	89957.00d	0.04	3.4E+07	89835.01	-0.02	3.3E+07	(87448.91)		1.0E+05	87326.68d	-0.30	2.1E+06
5				89636.60	0.10	3.0E+07				87138.58d	-0.23	2.5E+06
6				89403.60	-0.18	2.8E+07				86917.08d	-0.65	3.1E+06

			13-6						13-7			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	85335.91		1.8E+07				83034.61	-0.34	1.2E+06			
1	85316.13d		2.2E+07	85274.92d	0.02	5.6E+07	(83016.59)		1.2E+06	82975.70	-0.06	4.4E+06
2	85261.81		2.3E+07	85193.94d	0.23	3.7E+07	82966.69	-0.08	1.1E+06	(82898.60)		3.1E+06
3	85174.20d		2.4E+07	85079.30d	0.00	3.4E+07	(82885.53)		1.0E+06	82789.81	-0.35	2.9E+06
4	85054.55d		2.3E+07	84932.60d	0.00	3.3E+07	82773.10d	-0.19	8.0E+05	82651.17	-0.19	2.9E+06
5				84754.06d	-0.07	3.2E+07				82482.51	-0.19	2.8E+06
6				84545.38d	0.86	3.3E+07				(82285.23)		2.7E+06

			13-8						14-0			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	80847.32	-0.14	1.7E+07				(102271.71)		4.3E+07			
1	80831.22	0.10	2.1E+07	80790.28d	0.00	4.9E+07	102239.08d	0.62	5.3E+07	102197.36d	-0.69	1.2E+08
2	80785.01	-0.36	2.3E+07	80717.21d	0.01	3.2E+07	(102159.10)		5.8E+07	(102092.70)		7.6E+07
3	80709.69d	-0.49	2.4E+07	80614.79d	-0.01	2.8E+07	(102033.83)		6.1E+07	101941.62d	0.62	6.6E+07
4	80606.16	0.18	2.6E+07				101863.44	0.10	6.4E+07	101745.00	0.53	6.1E+07
5							101647.69d	-0.64	6.6E+07	101503.90	-0.10	5.8E+07
6										101220.32d	-0.28	5.5E+07
7										100895.18	-0.14	5.4E+07

			14-2						14-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	96402.69r	-0.56	2.2E+07				(93646.00)		2.6E+06			
1	96373.87d	-0.37	2.8E+07	96334.70	0.87	6.3E+07	(93619.01)		2.8E+06	93578.56d	-0.04	1.0E+07
2	96303.58	0.34	3.1E+07	96237.35d	0.51	4.0E+07	(93552.00)		2.6E+06	(93485.60)		7.4E+06
3	96190.82	0.11	3.3E+07	96097.99	0.11	3.5E+07	(93445.35)		2.3E+06	93351.953	-0.57	7.2E+06
4	96036.84d	0.13	3.5E+07	95917.99	0.15	3.2E+07	(93299.56)		2.0E+06	(93299.56)		2.0E+06
5	95842.71d	0.40	3.6E+07	95697.97	-0.01	3.0E+07	(93115.12)		1.6E+06	93114.88d		1.6E+06
6				95439.36	0.12	2.9E+07				92724.23d	0.38	7.1E+06
7				95142.71	-0.06	2.8E+07						

			14-4						14-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	
0	91003.67d	-0.23	1.6E+07									
1	90978.80d	-0.14	2.0E+07	90938.66d	0.13	4.7E+07	88475.92d	-0.07	4.5E+06	88412.57	-0.03	1.6E+07
2	90915.75d	-0.14	2.2E+07	90849.25d	-0.24	3.0E+07	88452.86	-0.16	4.8E+06	88327.55d	-0.08	1.2E+07
3	90815.06	-0.27	2.4E+07	90722.20d	-0.30	2.7E+07	(88394.03)		4.6E+06	88206.48	-0.11	1.1E+07
4	90677.18d	-0.34	2.5E+07	90558.46d	-0.18	2.5E+07	88299.26	-0.16	4.2E+06	88050.57	-0.03	1.1E+07
5	90503.20	0.15	2.7E+07	90358.38d	-0.35	2.4E+07	(88169.46)		3.7E+06	87860.67	-0.37	1.1E+07
6				90123.85d	-0.48	2.3E+07	(88005.36)		3.1E+06	87637.83	-0.45	1.2E+07
7				89855.48d	0.68	2.2E+07				87383.35	0.58	1.2E+07

TableE.6. continue

			14-6						14-7			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	86061.64d	0.20	1.2E+07				83760.09	-0.24	8.0E+06			
1	86040.55	0.04	1.4E+07	86000.52d	0.42	3.5E+07	83741.87d	0.51	9.4E+06	(83700.95)		2.5E+07
2	85985.80d	0.31	1.6E+07	(85919.09)		2.3E+07	83690.39	0.01	9.7E+06	83623.86	-0.12	1.6E+07
3	85896.90	0.00	1.7E+07	85804.05d	-0.02	2.1E+07	83608.20	0.45	9.5E+06	83514.77	-0.15	1.5E+07
4	85775.04	-0.04	1.7E+07	85656.29d	0.08	2.0E+07	83493.72	-0.12	9.1E+06	83375.29	0.32	1.4E+07
5	85620.45	-0.23	1.8E+07	85476.01d	-0.34	1.9E+07	83349.12	-0.13	8.5E+06	83204.80	-0.12	1.4E+07
6				85265.05d	-0.02	1.9E+07				83004.89d	-0.89	1.4E+07
7				85023.83	-0.11	1.9E+07						

			14-8						15-0			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	81572.87	0.03	8.5E+06				102980.61d	-1.16	3.7E+07			
1	81555.93	0.04	1.1E+07	81515.46d	-0.02	2.3E+07	102946.95d	-1.11	4.5E+07	(102908.97)		1.0E+08
2	81509.00	0.02	1.2E+07	81442.57	-0.01	1.4E+07	(102867.92)		4.7E+07	102802.04d	-0.72	7.2E+07
3	81432.66d	0.26	1.4E+07	81339.70d	0.13	1.2E+07	102740.11d	-1.71	4.7E+07	102649.67d	-0.93	6.4E+07
4	81326.58d	0.05	1.5E+07	81207.56	-0.10	1.1E+07	102569.80d	-0.94	4.0E+07	102454.12d	0.83	6.2E+07
5				81047.78d	0.11	9.9E+06	102342.71	0.33	1.4E+08	102212.05d	0.06	6.3E+07
6				80860.37d	-0.20	9.3E+06				101927.87	-0.13	7.2E+07
7				80646.23	-0.65	8.9E+06						

			15-1						15-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	99987.98d	-0.19	4.6E+06				97113.95d	0.64	1.7E+07			
1	99955.79d	-0.78	5.6E+06	99917.46d	-0.02	1.4E+07	97084.08d	0.24	2.1E+07	97045.46	0.71	4.8E+07
2	99880.21d	-0.44	6.2E+06	99815.19d	-0.30	8.9E+06	97011.90d	-0.16	2.3E+07	96947.04	0.14	3.1E+07
3	99955.79d		5.6E+06	99669.25d	-0.39	7.6E+06	96898.53d	-0.18	2.5E+07	96807.77d	0.29	2.7E+07
4	99598.15	-0.01	9.6E+06	99481.11	0.40	6.7E+06	96744.32d	0.21	2.4E+07	96627.04d	0.38	2.5E+07
5				(99249.85)		5.6E+06	96536.22	-0.14	3.0E+07	96406.18	0.21	2.5E+07
6				98977.87d	-0.49	3.1E+06				96147.23d	0.59	2.6E+07
7				98653.74d	-0.24	4.4E+07						

			15-3						15-4			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	94355.76d	-0.30	8.0E+06				91714.18d	0.22	1.1E+07			
1	94328.49d	-0.12	9.7E+06	94289.46d	-0.07	2.4E+07	91688.16d	-0.38	1.4E+07	91648.99d	-0.46	2.7E+07
2	94260.48	-0.34	1.1E+07	94195.60d	-0.06	1.6E+07	91624.71d	0.00	1.6E+07	91559.52d	-0.03	1.7E+07
3	94153.83d	0.49	1.2E+07	94061.82	-0.30	1.4E+07	91523.09d	-0.23	1.9E+07	91432.06	-0.04	1.4E+07
4	94006.66	-0.30	1.6E+07	93889.19d	-0.32	1.2E+07	91384.85	-0.06	2.4E+07	91267.36	-0.10	1.2E+07
5	93808.96	-0.21	9.4E+06	93678.53	-0.25	1.0E+07				91066.68	-0.03	1.1E+07
6				93431.09	-0.16	6.2E+06				90831.37d	-0.36	8.4E+06
7				93135.54d	0.30	7.3E+07				90549.10d	0.25	2.5E+07

			15-5						15-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	89185.98	-0.07	1.1E+07				86770.93d	-0.57	5.6E+06			
1	89162.55	-0.06	1.3E+07	89123.50	-0.03	3.4E+07	86750.03	-0.08	7.7E+06	86711.31d	0.29	1.3E+07
2	89102.82	-0.03	1.4E+07	89037.73d	0.04	2.3E+07	86694.39d	0.08	9.8E+06	86629.22d	0.07	7.6E+06
3	89007.24	-0.17	1.4E+07	88916.45d	0.26	2.1E+07	86604.96d	0.07	1.3E+07	86513.95	0.28	5.9E+06
4	88877.53d	0.67	1.6E+07	88759.49	0.08	1.9E+07	86482.48d	0.00	2.0E+07	86365.00d	-0.03	4.6E+06
5				88568.82	-0.20	1.8E+07	86314.64d	-0.09	1.9E+07	86184.57	0.23	3.1E+06
6				88345.37	-0.31	1.4E+07				(85972.47)		8.0E+05
7				88076.73	-0.09	4.9E+07				85718.00	0.02	7.1E+07

			15-7						16-0			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	84470.40d	0.01	1.3E+07				103675.63d	-1.46	3.5E+07			
1	84451.05	0.09	1.4E+07	84412.02d	0.15	4.3E+07	(103642.61)		4.4E+07	(103604.41)		9.7E+07
2	84399.19d	-0.01	1.4E+07	84333.95d	-0.10	3.0E+07	(103561.50)		4.8E+07	(103498.08)		6.2E+07
3	84315.70d	-0.05	1.2E+07	84224.51d	-0.01	2.9E+07	103432.59	-1.02	5.1E+07	103344.33	-0.82	5.4E+07
4	84201.40d	0.16	6.6E+06	84083.89	0.10	2.9E+07	(103259.72)		5.3E+07	103146.97d	0.10	5.0E+07
5	84043.28d	-0.02	1.0E+08	83912.87	-0.04	3.1E+07	103041.69	0.01	5.5E+07	102903.84d	0.06	4.7E+07
6				83713.18	-0.01	3.9E+07				102616.91d	-0.07	4.6E+07
7				83472.29d	-0.34	5.2E+06				102288.58d	-0.09	4.5E+07

			16-1						16-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(100683.49)		7.6E+06				97808.36d	-0.27	1.2E+07			
1	100650.87d	-0.25	9.0E+06	100612.75d	-0.17	2.3E+07	97778.41d	0.02	1.6E+07	97740.31	0.12	3.2E+07
2	100574.29d	0.06	9.4E+06	100510.62d	-0.19	1.6E+07	97705.63	-0.01	1.8E+07	97642.53d	0.31	2.0E+07
3	100452.32d	-0.33	9.5E+06	100363.73d	-0.46	1.4E+07	97590.38	-0.11	1.9E+07	97502.31d	0.28	1.7E+07
4	100286.90d	-0.24	9.4E+06	100173.86d	-0.43	1.3E+07	97433.49d	0.40	2.1E+07	97320.51	0.27	1.5E+07
5	100079.67d	0.13	9.3E+06	99940.52d	-1.12	1.3E+07				97098.13	0.37	1.4E+07
6				99666.88d	-0.46	1.2E+07				96836.28d	0.66	1.4E+07
7										96536.22d	0.10	1.3E+07

TableE.6. continue

			16-3						16-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	95050.85d	-0.53	1.2E+07				89881.63	0.26	1.5E+07			
1	95023.18d	0.01	1.4E+07	94984.87	-0.09	3.7E+07	89857.08	-0.08	1.7E+07	89818.26	-0.70	4.6E+07
2	94954.26d	-0.14	1.5E+07	94890.77	-0.21	2.5E+07	89796.03d	-0.40	1.8E+07	89732.87d	-0.14	3.1E+07
3	94844.83	-0.30	1.5E+07	94756.42	-0.26	2.3E+07	89699.21	0.01	1.9E+07	89610.68d	-0.06	2.8E+07
4	94696.09d	0.15	1.5E+07	94583.82d	0.74	2.2E+07	89566.36	0.52	1.9E+07	89452.78d	-0.21	2.7E+07
5	94507.68	-0.79	1.5E+07	94370.86	0.29	2.1E+07	89398.38	-0.33	1.9E+07	89260.50	-0.31	2.7E+07
6				94119.99d	-0.25	2.0E+07				89034.65	-0.01	2.6E+07
7				93835.31	0.77	1.9E+07				88776.20	0.08	2.5E+07

			16-7						16-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	85166.09d	0.38	1.5E+07				80905.74	0.13	1.4E+07			
1	85145.51d	0.00	1.8E+07	85107.32d	0.01	4.8E+07	80889.45	0.05	1.7E+07	80851.33	0.14	3.8E+07
2	85092.77d	-0.01	1.9E+07	85029.36	-0.01	3.2E+07	80844.88d	0.03	1.9E+07	80780.52d	-0.91	2.4E+07
3	85007.51d	-0.02	1.9E+07	84919.17d	0.10	3.0E+07	80771.62d	-0.17	2.0E+07	80683.33d	-0.01	2.1E+07
4	84890.78d	0.56	1.9E+07	84777.38	0.01	2.9E+07	80670.27	-0.36	2.1E+07	80557.78	0.00	1.9E+07
5	84743.30d	0.70	1.9E+07	84604.82	0.12	2.8E+07	80542.57	-0.65	2.2E+07			
6				84402.52	0.36	2.8E+07						
7				84171.46d	-0.48	2.8E+07						

			17-0						17-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(104357.82)		2.8E+07				101363.82	-0.40	1.2E+07			
1	(104322.87)		3.1E+07	(104285.24)		8.7E+07	101331.39	0.01	1.5E+07	101293.70d	-0.05	3.3E+07
2	104240.22d	-1.39	2.8E+07	(104178.81)		5.9E+07	101254.11d	-0.23	1.7E+07	101191.14d	-0.40	2.1E+07
3	(104117.75)		2.2E+06	(104025.41)		5.6E+07	101137.43	0.82	2.3E+07	101044.18d	-0.27	1.8E+07
4	103932.05	-1.49	7.8E+07	103827.29d	0.31	6.1E+07	100960.40d	-0.56	9.0E+06	100853.98d	-0.42	1.6E+07
5	103714.55d	0.14	6.4E+07	103587.68	-0.06	1.1E+08	100751.45d	-0.82	1.2E+07	100625.18	-0.42	6.5E+06
6	103450.58d	0.01	6.0E+07	103290.83d	0.03	1.5E+07	100499.95d	-0.99	1.3E+07	100340.46d	-0.70	2.1E+07
7	103143.23	-0.01	5.9E+07	102961.41	0.01	2.6E+07	100208.13d	0.29	1.2E+07	100025.90	-0.11	1.8E+07
8				102590.58	-0.02	2.9E+07				99671.16	-0.41	1.7E+07
9				102179.93d	0.05	3.1E+07						

			17-2						17-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	98488.56d	-0.80	6.1E+06				95732.09	-0.02	1.7E+07			
1	98458.65d	0.00	7.0E+06	98421.12d	0.10	1.9E+07	95703.46	0.04	2.2E+07	95665.58d	-0.22	4.7E+07
2	98384.73d	-1.02	5.9E+06	98323.02d	0.07	1.3E+07	95634.71d	0.20	2.6E+07	95571.62	-0.08	3.0E+07
3	(98274.45)		1.0E+05	98181.95	-0.34	1.2E+07	95529.36d	0.27	4.5E+07	95437.00	0.06	2.5E+07
4	(98106.91)		2.5E+07	98000.02d	-0.33	1.4E+07	95369.85d	0.09	1.0E+07	95263.17	-0.04	2.0E+07
5	97908.11d	-0.28	1.9E+07	97781.82d	0.10	3.5E+07	95181.60	0.40	1.6E+07	95054.97d	0.43	4.7E+06
6	97669.57d	0.36	1.9E+07	(97509.44)		1.0E+06	94954.26d	0.44	1.7E+07	94794.03d	-0.02	3.4E+07
7	97389.64d	-1.05	1.9E+07	97208.68d	-0.17	3.6E+06	94688.79d	-0.32	1.8E+07	94507.68d	0.41	2.8E+07
8				96870.97	-0.09	4.5E+06				(94182.75)		2.8E+07
9										93828.17d	-0.38	2.4E+07

			17-5						17-7			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	90561.73d	-0.37	1.8E+07				85846.45d	0.01	1.5E+07			
1	90537.32	-0.10	2.4E+07	90499.64	-0.15	4.8E+07	85825.88	0.11	2.0E+07	85788.36	0.22	3.8E+07
2	90476.34d	-0.20	3.1E+07	90413.75d	0.01	3.0E+07	85772.98d	0.09	2.6E+07	85709.55d	-0.53	2.3E+07
3	90383.10d	-0.06	6.5E+07	90290.92	-0.08	2.4E+07	85690.79d	-0.70	5.6E+07	85599.47d	0.14	1.8E+07
4	90239.49d	-0.17	7.8E+06	90133.10d	-0.01	1.8E+07	85564.05	0.01	6.0E+06	85457.43	-0.05	1.3E+07
5	90071.12d	-0.32	1.5E+07	(89944.77)		9.0E+05	(85415.33)		1.2E+07	(85288.66)		1.0E+05
6	89867.83d	-0.43	1.8E+07	89707.93	-0.55	4.3E+07	85235.88	0.13	1.5E+07	85075.77d	-0.21	3.7E+07
7	89631.54d	0.85	1.9E+07	89448.95	0.10	3.3E+07	(85026.50)		1.6E+07	84844.32	-0.34	2.7E+07
8				89153.16d	0.33	2.9E+07				84584.11d	-0.46	2.4E+07
9				88835.51d	-0.64	2.7E+07				84297.56d	-0.07	2.2E+07

			17-8						17-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	83658.56	-0.38	3.1E+06				81586.24	-0.10	5.2E+06			
1	83640.29	-0.01	2.4E+06	83602.65	-0.03	1.5E+07	81569.86	0.21	5.4E+06	81532.10	0.08	1.8E+07
2	(83591.49)		5.0E+05	83528.51	-0.18	1.2E+07	81524.72d	-0.24	3.6E+06	81462.12	-0.04	1.3E+07
3	83516.79d	0.64	1.3E+07	83423.96	-0.02	1.4E+07	(81455.75)		1.8E+06	81363.14d	-0.45	1.2E+07
4	83396.37d	-0.36	2.3E+07	83289.95	-0.22	1.9E+07	81344.44	-0.01	2.7E+07	81237.60d	-0.29	1.5E+07
5	83258.65	0.57	1.1E+07	83131.45d	0.03	6.0E+07	81215.80d	-0.15	1.8E+07	81089.57	0.29	3.9E+07
6	83090.95d	0.40	7.5E+06	(82930.77)		4.0E+05	81060.95d	0.47	1.7E+07	(80900.71)		7.0E+05
7	82894.76	-0.04	5.9E+06	82713.43d	0.47	4.0E+06	80878.68	-0.10	1.6E+07	80697.24d	0.30	3.2E+06
8				82469.22	0.17	5.8E+06						

			18-0						18-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	105024.07	0.66	2.7E+07				102029.74	-0.07	1.4E+07			
1	104988.84d	0.68	3.4E+07	104952.73	1.29	7.6E+07	101996.41d	-0.26	1.7E+07	101960.12d	0.17	4.2E+07
2	104905.82d	1.01	3.7E+07	104844.52	0.12	4.9E+07	101917.44d	-0.10	1.9E+07	101856.71d	-0.42	2.7E+07
3	104775.16	0.04	4.0E+07	104690.91	0.21	4.3E+07	101793.73d	-0.43	1.9E+07	101710.82d	1.08	2.4E+07
4	104597.25d	-0.87	4.1E+07	104489.39d	-0.79	3.9E+07	101625.69d	0.15	2.0E+07	101517.26	-0.34	2.3E+07
5	104376.50	0.40	4.2E+07	104245.10d	-0.19	3.8E+07	101413.96d	0.00	2.0E+07	101282.57	-0.58	2.1E+07
6	104109.74	-0.11	4.2E+07	103955.36	-0.02	3.6E+07	101160.22	0.01	2.0E+07	101005.56d	-0.18	2.0E+07
7				103622.64d	-0.45	3.6E+07				100687.02d	-0.68	2.0E+07
8				103249.55d	-0.32	3.7E+07				100331.12	0.28	1.9E+07

TableE.6. continue

			18-2						18-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	99155.54d	0.59	3.5E+06				96398.06	0.36	1.8E+07			
1	99123.64	-0.30	4.7E+06	(99087.22)		8.7E+06	96368.71	0.00	2.1E+07	96332.43	0.44	5.0E+07
2	99048.90d	-0.05	5.5E+06	98988.48	-0.06	5.3E+06	96298.14	0.43	2.3E+07	96237.35d	0.05	3.3E+07
3	(98932.00)		6.2E+06	98846.96	-0.62	4.3E+06	96186.65d	0.01	2.5E+07	96102.12d	-0.10	2.9E+07
4	98771.29d	-0.20	6.8E+06	98663.41d	-0.14	3.9E+06	96034.77	0.43	2.6E+07	95926.63	0.23	2.7E+07
5	98570.08d	0.00	7.4E+06	98438.64d	-0.63	3.6E+06	95842.71d	-0.18	2.6E+07	95712.13d	0.05	2.5E+07
6	98328.76d	0.27	7.8E+06	98173.82	-0.20	3.5E+06	95614.06	0.96	2.7E+07	95458.49	-0.14	2.4E+07
7										95169.79d	0.82	2.3E+07

			18-5						18-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	91227.66	-0.03	1.5E+07				88812.80	-0.34	3.1E+06			
1	91202.65d	-0.06	1.8E+07	91165.81d	-0.18	4.2E+07	88789.99d	-0.23	3.3E+06	88753.67d	0.18	1.2E+07
2	91139.72d	-0.02	2.0E+07	91079.31d	-0.02	2.7E+07	88731.98d	0.78	3.0E+06	88671.52	0.73	8.5E+06
3	91041.21d	0.50	2.2E+07	90955.90d	-0.40	2.3E+07	(88638.19)		2.7E+06	88553.79d	0.02	8.3E+06
4	90904.19	-0.05	2.3E+07	90796.36	0.06	2.1E+07	88510.07	0.21	2.3E+06	88401.94d	0.02	8.4E+06
5	90733.01d	-0.12	2.4E+07	90602.12	-0.20	2.0E+07	(88348.45)		1.9E+06	88217.68	0.04	8.6E+06
6	90528.03	0.50	2.6E+07	90372.63d	-0.43	1.9E+07				88000.56d	0.71	8.8E+06
7				90111.14d	0.60	1.8E+07				87750.97	-0.74	8.9E+06
8				89812.48d	0.37	1.6E+07				87473.14	-0.56	8.9E+06

			18-7						18-8			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	86511.99	-0.04	7.9E+06				84324.56d	0.02	9.1E+06			
1	86491.07	0.01	9.9E+06	86453.98d	-0.36	2.2E+07	84305.43	-0.16	1.0E+07	84268.88	0.01	3.1E+07
2	86436.09d	0.00	1.1E+07	86375.65	-0.03	1.4E+07	84254.60d	-0.09	1.0E+07	84193.68d	-0.60	2.1E+07
3	86348.74d	-0.30	1.2E+07	(86264.62)		1.2E+07	84174.05d	0.36	9.9E+06	84088.39	-0.88	2.0E+07
4	(86226.62)		1.3E+07	86121.29d	0.61	1.1E+07	84061.52	0.21	9.3E+06	83952.56	-0.81	2.0E+07
5	86077.12d	0.10	1.5E+07	85945.99d	-0.22	9.7E+06	83919.77	-0.01	8.4E+06	83789.36d	0.40	2.0E+07
6				85741.23	0.67	9.0E+06	83749.65d	-0.17	7.3E+06	83595.34	-0.01	2.1E+07
7										83374.76d	0.11	2.2E+07
8										83128.37d	0.04	2.3E+07

			19-0						19-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(105676.40)		1.3E+06				102682.86d	0.06	1.3E+07			
1	105635.13d	-1.02	7.2E+07	105602.11	-1.53	6.6E+07	102644.59	-0.07	2.1E+07	102612.16d	0.01	4.9E+07
2	105554.76d	1.44	5.1E+07	105406.32	-1.07	7.0E+07	102566.06	0.01	2.3E+07	102510.06	-0.06	3.2E+07
3	105423.07	0.39	4.7E+07	105337.81d	-0.88	7.3E+06	102441.23d	-0.49	2.3E+07	102357.69	-0.04	2.1E+07
4	105244.55	0.00	4.6E+07	105138.96d	0.27	1.8E+07	102272.97d	1.00	2.4E+07	102165.80d	-0.31	2.4E+07
5	105020.39d	-0.46	4.5E+07	104892.03d	-0.82	2.2E+07	102058.60	-0.11	2.4E+07	101930.08d	-0.63	2.3E+07
6	104752.34	-0.02	4.5E+07	104601.53	-0.28	2.3E+07	101802.76d	0.04	2.4E+07	101651.89	-0.28	2.3E+07
7				104267.95	0.12	2.4E+07				101332.15d	-0.29	2.2E+07
8				103893.06d	0.68	2.4E+07				100973.95d	0.60	2.1E+07

			19-2						19-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	99807.72d	-0.22	2.7E+06				97050.42	-0.27	1.5E+07			
1	99771.94d	0.01	1.5E+07	99739.84d	0.42	2.6E+06	97016.99	0.29	1.9E+07	96984.18d	-0.01	4.9E+07
2	99696.67d	-0.79	6.8E+06	99641.22	-0.31	1.0E+07	96947.22d	0.82	2.2E+07	96890.79	0.50	3.0E+07
3	99579.78d	0.22	5.4E+06	99496.16d	0.59	1.7E+06	96834.18	-0.02	2.4E+07	96750.60	0.39	2.3E+07
4	99418.20d	0.28	5.0E+06	(99312.09)		1.0E+05	96681.14	0.37	2.5E+07	96575.20	0.29	2.4E+07
5	99215.44d	0.62	5.0E+06	(99086.83)		1.0E+05	96488.27	0.63	2.6E+07	96359.73	0.09	2.3E+07
6	98971.00d	0.00	5.2E+06	(98820.45)		1.0E+05	96255.86d	0.25	2.7E+07	96105.66d	0.60	2.2E+07
7										95814.47	0.76	2.2E+07
8										95484.63d	0.10	2.1E+07

			19-4						19-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	94408.35	-0.24	1.4E+07				91880.51d	-0.17	1.5E+07			
1	94376.66d	0.03	2.2E+06	94344.27d	0.15	4.9E+06	91850.54	-0.16	7.3E+06	91818.00d	-0.19	3.0E+07
2	(94310.11)		1.0E+05	(94254.18)		1.0E+05	91788.01d	-0.24	1.2E+07	91732.73	0.41	1.4E+07
3	(94204.18)		1.0E+05	94119.99d	-0.21	1.6E+07	91688.16d	-0.11	1.5E+07	91604.24d	-0.04	1.8E+07
4	(94058.72)		1.0E+05	93952.08d	-0.79	8.9E+06	91550.72d	0.05	1.6E+07	91444.79	-0.02	1.6E+07
5	(93875.57)		1.0E+05	(93747.57)		7.0E+06	91377.55	-0.33	1.8E+07	91250.53d	0.65	1.4E+07
6	(93656.09)		1.0E+05	93504.96	-0.58	6.1E+06	91169.72d	-0.32	1.9E+07	91018.98	-0.51	1.3E+07
7				(93227.32)		5.5E+06				90754.69d	-0.59	1.3E+07
8				92913.91	0.36	5.1E+06				90455.43	0.81	1.2E+07

			19-6						19-7			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	89466.10	-0.04	2.6E+07				87164.93d	-0.09	1.5E+07			
1	(89438.20)		1.0E+05	89406.10d	0.41	2.4E+07	(87139.05)		1.0E+05	87106.86d	0.32	7.3E+06
2	89379.73	0.02	3.1E+06	89323.79	0.01	3.9E+06	(87084.60)		1.3E+06	(87028.67)		3.0E+05
3	89285.55	-0.20	4.6E+06	89201.77	0.01	3.5E+07	86996.39	-0.21	2.7E+06	86912.53	-0.08	1.1E+07
4	89156.33	0.04	5.2E+06	89050.33d	-0.10	2.4E+07	(86875.05)		3.9E+06	86769.11	-0.08	6.1E+06
5	88992.84d	-0.35	5.4E+06	88864.68	-0.53	2.1E+07	(86151.10)		3.5E+06	86593.19d	-0.58	4.4E+06
6	88796.28d	-0.55	5.3E+06	88645.53d	-0.75	1.9E+07	86537.80d	0.26	6.0E+06	(86386.99)		3.5E+06
7				88396.48	0.03	1.8E+07						
8				88115.89	-0.33	1.8E+07						

TableE.6. continue

			19-8						19-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	84977.75d	0.22	2.3E+07				82904.89	-0.03	1.4E+07			
1	84953.69	0.11	4.8E+06	84921.11	0.04	3.9E+07	82882.86	-0.07	2.0E+07	(82850.42)		7.0E+05
2	84903.06	-0.14	1.1E+07	84847.27	0.68	1.4E+07	82836.61	-0.07	4.5E+06	82780.91d	0.17	1.4E+07
3	84820.82	-0.43	1.2E+07	84737.26	0.00	3.5E+07	82760.75d	-0.11	1.9E+06	82676.89	0.02	6.6E+06
4	84707.79	0.05	1.3E+07	84601.84d	-0.04	2.9E+07	(82655.46)			(82549.60)		
5	84564.30d	-0.21	1.3E+07	84436.58d	0.06	2.7E+07	(82522.39)			(82394.39)		
6	84392.71	0.38	1.3E+07	84241.65d	-0.13	2.6E+07	(82362.27)			(82211.72)		
7				84019.17d	-0.23	2.5E+07				(82003.38)		
8				83770.88d	0.04	2.5E+07				(81770.89)		

			19-10						20-0			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(80948.77)		4.7E+07				106311.25d	-0.93	2.0E+07			
1	80929.15d	0.20	5.1E+07	80896.82d	0.38	3.0E+07	(106275.47)		2.5E+07	106241.58	0.58	5.7E+07
2	80886.90	0.07	2.9E+07	80831.22d	0.32	4.7E+07	106189.69d	-1.29	2.8E+07	106134.00	0.83	3.7E+07
3	80817.25d	0.02	2.4E+07	(80733.24)		5.0E+05	(106058.72))		2.9E+07	105977.38d	-0.63	3.3E+07
4	80720.53d	0.31	2.2E+07	80614.79d	0.43	5.7E+06	(105879.41)		3.0E+07	105776.33d	-0.02	3.0E+07
5	80598.19	0.76	2.1E+07	(80469.44)		7.8E+06	105654.92	-0.01	3.0E+07	(106058.72)	-0.24	2.9E+07
6							105385.04	0.16	2.9E+07	105236.54d	-0.13	2.9E+07
7										104901.99d	0.07	3.0E+07
8										104524.79	-0.11	3.2E+07

			20-1						20-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	103318.52d	-0.06	1.9E+07				(97686.47)		1.6E+07			
1	103283.95	-0.03	2.3E+07	103249.55	0.04	5.4E+07	97655.96d	-0.06	2.0E+07	97621.55d	0.00	4.4E+07
2	103203.78d	0.07	2.5E+07	103145.56d	-0.34	3.5E+07	97582.86d	-1.02	2.7E+07	97525.80d	-0.27	2.8E+07
3	103077.81	0.05	2.6E+07	102997.04d	-0.01	3.1E+07	97470.22d	-0.02	2.3E+07	97389.64d	0.11	2.4E+07
4	102906.65d	-0.18	2.7E+07	102803.78	0.01	2.9E+07	97315.78	0.15	2.5E+07	97212.89d	0.32	2.2E+07
5	102691.84	-0.95	2.7E+07	102566.06d	-0.69	2.7E+07	97122.18d	0.46	2.6E+07	96996.33d	0.65	2.1E+07
6	102435.02d	-0.22	2.7E+07	102286.88d	-0.15	2.6E+07	96889.15d	1.02	2.7E+07	96740.39d	0.47	2.0E+07
7				101967.47	0.94	2.5E+07				96448.29	0.50	1.9E+07
8				101605.89	0.02	2.5E+07				96117.57d	0.52	1.9E+07

			20-4						20-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	95044.56d	0.19	4.0E+06				92516.10	-0.36	6.8E+06			
1	95015.28	-0.67	4.6E+06	94981.69d	0.21	1.3E+07	92489.83	-0.19	8.9E+06	92454.72d	-0.83	1.7E+07
2	94947.66	-0.11	4.7E+06	97890.77d	0.81	8.8E+06	(92425.91)		1.0E+07	92368.08	-0.02	1.1E+07
3	94840.43d	0.21	4.6E+06	94758.84d	-0.67	8.0E+06	(92324.31)		1.2E+07	92243.53d	-0.07	8.7E+06
4	94693.15	-0.43	4.6E+06	94590.35	-0.17	7.6E+06	92185.63d	0.10	1.3E+07	92082.46	-0.01	7.7E+06
5	(94509.65)		4.6E+06	94383.39	-0.22	7.3E+06	(92011.96)		1.4E+07	91885.66d	-0.27	6.9E+06
6				94140.03	-0.37	6.8E+06	91801.95	-0.61	1.6E+07	91654.30d	-0.05	6.3E+06
7				93861.45d	0.05	6.1E+06				91389.19d	-0.18	5.9E+06
8										91086.97	-0.17	5.5E+06

			20-6						20-8			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	90101.56d	-0.35	1.1E+07				85613.22d	-0.09	1.2E+07			
1	90076.89d	-0.63	1.3E+07	90042.88d	-0.17	3.4E+07	85593.06d	0.16	1.5E+07	(85558.43)		3.6E+07
2	90017.26d	-0.11	1.4E+07	89959.68	0.12	2.3E+07	(85540.86)		1.6E+07	85482.93d	-0.12	2.4E+07
3	(89921.79)		1.4E+07	89840.74	-0.34	2.0E+07	85457.43d	0.14	1.6E+07	85376.73d	0.15	2.1E+07
4	89790.52	-0.63	1.5E+07	89688.05	-0.04	1.9E+07	85342.75	0.15	1.7E+07	85239.56	0.02	2.0E+07
5	89626.65d	-0.63	1.5E+07	89500.98	-0.26	1.8E+07	85197.52d	-1.08	1.9E+07	85072.04d	-0.52	1.9E+07
6	89429.39d	0.04	1.6E+07	89281.23	0.09	1.7E+07	85024.35	-0.50	1.8E+07	84875.70	-0.94	1.8E+07
7				(89030.53)		1.6E+07				84653.95d	0.47	1.7E+07
8				88748.70	-0.04	1.4E+07						

			20-9						20-10			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	83541.03	0.33	2.3E+06				81584.60	0.05	4.7E+06			
1	83522.36	0.11	2.4E+06	83487.77d	-0.01	9.3E+06	81568.55d	0.28	5.6E+06	81533.61	-0.19	1.4E+07
2	83474.40d	0.07	2.1E+06	83416.83	0.31	7.0E+06	81524.72d	0.23	5.9E+06	81466.87d	0.19	9.4E+06
3	83396.37d	-0.53	1.7E+06	(83316.19)		7.0E+06	81453.12d	-0.15	6.0E+06	81372.90	0.34	8.5E+06
4	(83290.32)		1.2E+06	83187.16	-0.11	7.4E+06	81355.22d	0.14	6.0E+06	81252.05	0.03	8.1E+06
5	(83156.47)		7.0E+05	83030.15	-0.28	8.1E+06	(81231.52)		5.6E+06	81105.54	0.06	7.9E+06
6	(82994.79)		2.0E+05	82846.69	0.11	8.9E+06	(81082.38)		4.6E+06	(80934.17)		7.9E+06
7				82637.02	-0.44	1.0E+07				80738.75	-0.61	8.2E+06
8				82403.26d	-0.15	1.3E+07				80522.11d	0.23	9.3E+06

			21-0						21-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(106935.33)		2.1E+07				103941.97d	0.24	2.1E+07			
1	106897.87	0.00	2.7E+07	(106864.56)		4.9E+07	103906.39	0.01	2.6E+07	103872.64	-0.43	5.7E+07
2	106811.28d	-0.76	2.9E+07	106757.17d	0.85	2.9E+07	103824.73	-0.04	2.8E+07	103768.92	-0.13	3.5E+07
3	(106678.48)		3.1E+07	(106600.41)		2.3E+07	103697.64d	0.12	3.0E+07	103619.12	-0.33	3.0E+07
4	106497.26d	-0.43	3.2E+07	106396.39	-1.02	2.1E+07	(103525.11)		3.0E+07	103424.33	-0.50	2.8E+07
5	106270.92	-0.12	3.2E+07	106148.65	0.00	2.0E+07	103309.00	0.10	3.1E+07	103186.37	-0.14	2.6E+07
6	105998.95d	-0.01	3.3E+07	105854.92d	-0.03	1.9E+07	103048.93	-0.39	3.1E+07	102905.14d	-0.17	2.5E+07
7				105518.03d	0.00	1.9E+07				102582.56	-0.08	2.4E+07
8				105138.96d	-0.02	1.9E+07				102219.53d	-0.43	2.4E+07

TableE.6. continue

			21-3						21-4			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	98309.08d	-0.54	1.4E+07				(95667.52)		5.8E+06			
1	98279.09d	0.67	1.8E+07	98245.70d	0.59	3.6E+07	95637.51d	-0.84	6.6E+06	95605.01	-0.03	2.2E+07
2	98204.76d	-0.18	2.0E+07	98148.91	-0.31	2.2E+07	95569.16d	0.33	6.8E+06	95513.29d	0.18	1.6E+07
3	98090.06d	0.06	2.2E+07	(98011.93)		1.8E+07	95459.49	-0.50	6.9E+06	95381.85	-0.06	1.5E+07
4	97933.69d	-0.22	2.3E+07	97833.45d	-0.18	1.6E+07	(95311.86)		6.9E+06	95211.68	0.09	1.4E+07
5	97738.00d	0.17	2.3E+07	97615.36d	-0.08	1.5E+07	(95125.67)		6.9E+06	95002.68	-0.69	1.4E+07
6	97502.31d	0.10	2.4E+07	97358.67d	0.47	1.4E+07				94758.84d	0.16	1.3E+07
7				97065.07d	1.17	1.4E+07				94478.05d	0.54	1.3E+07

			21-5						21-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	93139.04		3.7E+06				90725.08d	0.02	1.1E+07			
1	93112.02		5.0E+06	(93079.11)		7.2E+06	90699.99d	0.07	1.3E+07	90666.25	-0.36	3.8E+07
2	93046.53		5.9E+06	92991.34	0.09	3.7E+06	90638.83d	0.40	1.4E+07	90582.86d	0.15	2.7E+07
3	92944.12d		6.7E+06	(92866.00)		2.6E+06	(90541.55)		1.4E+07	90463.34d	-0.14	2.4E+07
4	92272.77d		1.5E+06	92703.69	0.16	2.1E+06	90409.08	-0.35	1.5E+07	90309.17d	0.02	2.3E+07
5	92627.61		8.1E+06	92505.55	-0.13	1.7E+06	90243.66d	0.27	1.5E+07	(90121.00)		2.2E+07
6	(92416.64)		8.9E+06	92272.77d	0.14	1.5E+06	90042.88d	-0.55	1.6E+07	89899.63d	0.21	2.1E+07
7										89646.43d	-0.22	2.0E+07
8										89361.94d	-0.87	1.9E+07

			21-8						21-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	86236.48d	0.02	7.3E+06				84163.72d	-0.13	6.3E+06			
1	86215.18	-0.13	8.7E+06	86181.90d	-0.09	2.6E+07	84143.93d	-0.72	7.1E+06	84111.29d	-0.05	2.1E+07
2	86162.24d	0.32	9.6E+06	86106.00	-0.21	1.9E+07	84095.37d	-0.02	7.2E+06	84039.55d	-0.12	1.5E+07
3	86077.12d	0.07	1.0E+07	85998.92	-0.06	1.7E+07	84016.56d	-0.10	6.9E+06	83938.45d	-0.14	1.4E+07
4	85961.19d	0.31	1.1E+07	85860.83	0.23	1.6E+07	83908.49	-0.12	6.6E+06	83808.22d	-0.10	1.4E+07
5	85815.09d	0.38	1.2E+07	85692.51d	0.19	1.5E+07	(83772.58)		6.1E+06	83650.31d	0.12	1.5E+07
6				85495.61	0.69	1.4E+07	83608.66	-0.21	5.6E+06	83464.92d	0.06	1.5E+07
7				85269.12d	-0.47	1.3E+07				83252.88	-0.69	1.5E+07
8				85017.06	-0.38	1.3E+07				83017.31	-0.18	1.6E+07

			22-0						22-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	107545.63d	0.65	1.5E+07				104552.65	1.27	2.0E+07			
1	(107507.21)		1.8E+07	107474.31	0.07	4.2E+07	104515.57d	-0.15	2.5E+07	104483.02	0.27	5.8E+07
2	107419.73d	-1.28	2.0E+07	107367.12	1.15	2.8E+07	104433.64	-0.10	2.7E+07	104378.46d	-0.24	3.8E+07
3	(107286.72)		2.0E+07	107209.25	-0.50	2.5E+07	104304.96d	-0.80	2.8E+07	104228.56	-0.23	3.3E+07
4	107105.67d	0.65	2.0E+07	107006.20d	-0.18	2.3E+07	104132.18	-0.26	2.8E+07	104033.70d	-0.10	3.1E+07
5				106757.17d	0.28	2.3E+07				103795.00d	0.25	3.0E+07
6				106462.06	-0.22	2.4E+07				103512.61d	-0.03	3.0E+07

			22-2						22-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(101676.52)		1.0E+06				98918.87	-0.40	9.9E+06			
1	(101642.99)		1.1E+06	101610.42d	0.40	3.2E+06	98886.90	-0.86	1.2E+07	98854.36	-0.43	2.7E+07
2	101565.24d	0.09	1.2E+06	101510.46d	0.35	2.2E+06	98813.70d	-0.21	1.4E+07	98758.53d	-0.34	1.7E+07
3	101444.36d	0.76	1.2E+06	101366.50r	-0.13	1.9E+06	98697.97d	-0.27	1.5E+07	98621.77d	0.50	1.5E+07
4	101278.81	0.42	1.3E+06	101180.17d	0.42	1.7E+06	98541.22	-0.02	1.5E+07	98442.42d	-0.18	1.4E+07
5				100950.33d	-0.54	1.5E+06				98223.49d	-0.19	1.3E+07
6				100681.46d	0.54	1.2E+06				97965.82	0.29	1.3E+07

			22-4						22-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	96277.25	0.08	9.9E+06				91334.64d	-0.07	1.3E+07			
1	96247.85	0.16	1.2E+07	96214.91	0.19	2.9E+07	91309.13	-0.13	1.6E+07	91276.12	-0.17	3.6E+07
2	96178.06d	0.26	1.3E+07	96122.89	0.13	1.9E+07	91247.36d	-0.04	1.8E+07	91192.15	-0.21	2.3E+07
3	96068.45	0.23	1.4E+07	95991.53	0.28	1.7E+07	91149.80	0.01	1.9E+07	91072.78d	-0.04	1.9E+07
4	95919.04d	-0.16	1.5E+07	95820.82	0.27	1.5E+07	91016.83	0.07	2.1E+07	90918.15d	0.03	1.8E+07
5				95610.70d	-0.91	1.4E+07				90728.95	-0.29	1.6E+07
6				95365.83d	-0.18	1.3E+07				90506.23d	-0.52	1.5E+07

			22-7						22-8			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	89033.49d	-0.11	2.2E+06				86845.85	-0.27	5.7E+06			
1	89010.25d	0.14	2.4E+06	88977.17d	0.03	8.2E+06	86824.31	-0.33	7.5E+06	86791.32	-0.36	1.4E+07
2	88952.21	-0.08	2.2E+06	88897.31d	0.06	5.9E+06	86770.93d	0.04	8.9E+06	86714.89	-0.96	8.4E+06
3	88860.38	-0.26	2.0E+06	88783.75d	0.08	5.7E+06	86685.03	-0.26	1.0E+07	86608.15d	-0.17	6.7E+06
4	(88735.52)		1.8E+06	88636.78	-0.10	5.6E+06	86569.00	0.79	1.2E+07	86469.75d	0.18	5.6E+06
5				88457.98	0.17	5.6E+06				86300.31	-0.25	4.7E+06
6				88247.57	0.11	5.4E+06				86102.57	0.32	3.7E+06

			22-9						22-11			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	84773.36d	-0.14	9.2E+06				80980.90	0.46	7.2E+06			
1	84754.06d	0.07	1.1E+07	84720.87	-0.15	3.0E+07	80964.55d	-0.72	8.3E+06	80932.29d	-0.01	2.3E+07
2	84704.34d	-0.02	1.1E+07	84649.34d	0.02	2.0E+07	80924.10d	0.06	8.4E+06	80869.11	0.11	1.6E+07
3	84625.00d	0.10	1.1E+07	84547.73	-0.21	1.9E+07	80857.35	0.08	8.0E+06	80780.52d	0.22	1.5E+07
4	84516.10	0.17	1.0E+07	84417.26	-0.03	1.8E+07	80765.96d	0.70	7.1E+06	80666.74	0.12	1.4E+07
5				84258.23	-0.21	1.8E+07				80528.93	0.03	1.5E+07
6				84072.17d	-0.02	1.8E+07						

TableE.6. continue

			23-0						23-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	108141.44	0.96	1.4E+07				105146.69d	-0.19	2.1E+07			
1	108103.33d	1.33	1.8E+07	(108069.67)		3.6E+07	105110.45	-0.06	2.6E+07	105078.17d	-0.01	5.8E+07
2	(108014.69)		2.0E+07	107961.12r	-0.35	2.2E+07	105027.44d	0.02	2.9E+07	104973.89d	-0.31	3.6E+07
3	107880.02d	0.91	2.1E+07	107805.32d	0.78	1.9E+07	(104898.15)		3.1E+07	(104823.58)		3.1E+07
4	107694.76d	-0.90	2.2E+07	107600.14	0.08	1.7E+07	104722.76d	-0.32	3.2E+07	104627.44d	-0.04	2.8E+07
5	107466.75	0.91	2.3E+07	107349.28d	0.00	1.6E+07	104503.67d	-0.03	3.2E+07	104386.55d	-0.59	2.7E+07
6	107188.93d	-0.93	2.3E+07	107053.03d	0.11	1.5E+07	104240.22d	0.00	3.3E+07	104103.03d	-0.25	2.5E+07
7				106712.63d	-0.20	1.5E+07				103777.44	0.00	2.5E+07
8				106329.78d	-0.10	1.5E+07				103410.85d	-0.01	2.4E+07

			23-2						23-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(102272.02)		2.1E+06				99514.36	-0.41	7.7E+06			
1	102237.15d	-0.63	2.3E+06	(102205.45)		7.3E+06	(99482.55)		1.0E+07	99449.84d	-0.38	1.9E+07
2	(102158.83)		2.3E+06	102105.66d	0.05	5.1E+06	99407.52d	-0.07	1.2E+07	99354.54d	0.17	1.1E+07
3	102035.72d	-0.27	2.3E+06	(101961.42)		4.7E+06	99290.46d	-0.17	1.3E+07	99215.44d	-0.62	9.0E+06
4	101896.03d	0.31	2.2E+06	101773.51d	0.08	4.6E+06	99131.72	-0.16	1.4E+07	99036.16d	-0.12	7.9E+06
5	101659.96	0.14	2.1E+06	101543.56d	0.30	4.4E+06	(98932.63)		1.3E+07	98816.23	0.16	7.2E+06
6				101271.39d	-0.17	4.2E+06	98693.10d	-0.01	1.5E+07	98555.74d	-0.43	6.8E+06
7				100960.40d	0.12	4.0E+06						

			23-4						23-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	96873.04	0.37	1.1E+07				91930.27	0.06	1.1E+07			
1	96842.82	0.34	1.4E+07	96810.15d	0.00	3.4E+07	91904.02	-0.04	1.3E+07	91872.21d	0.49	2.9E+07
2	96771.96d	0.47	1.5E+07	96718.63d	0.37	2.2E+07	91841.19	0.11	1.5E+07	91788.01d	0.15	1.9E+07
3	96661.09	0.48	1.5E+07	96586.43d	0.39	2.0E+07	91742.11d	-0.08	1.6E+07	91667.49d	-0.12	1.6E+07
4	96510.36	0.53	1.6E+07	96414.03	-0.20	1.8E+07	91607.31	-0.09	1.7E+07	91511.76	-0.04	1.4E+07
5	96320.09d	-0.47	1.6E+07	96205.17	1.17	1.7E+07	91438.90d	0.71	1.8E+07	91321.36	-0.27	1.3E+07
6	96094.24d	0.65	1.6E+07	95957.01d	0.36	1.7E+07	(91234.33)		1.8E+07	91097.98d	0.59	1.2E+07
7										90841.28d	-0.17	1.2E+07
8										90553.04d	-0.68	1.1E+07

			23-7						23-8			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	89629.07	-0.03	4.5E+06				87441.03	-0.58	2.0E+06			
1	89604.79	-0.12	4.9E+06	(89572.57)		1.7E+07	(87419.43)		2.8E+06	87386.96	-0.14	4.7E+06
2	89546.10d	0.13	4.8E+06	89492.50	-0.25	1.2E+07	87364.73	0.16	3.4E+06	87311.35	0.00	2.6E+06
3	89452.78d	-0.26	4.6E+06	89378.48	0.02	1.2E+07	87278.05d	0.37	3.9E+06	87203.41	0.30	2.0E+06
4	89326.31	0.15	4.4E+06	89230.55	-0.01	1.2E+07	(87158.85)		1.5E+06	87062.91d	-0.34	1.5E+06
5	89167.43d	0.67	4.1E+06	89050.33d	0.13	1.2E+07	87009.65d	0.14	5.2E+06	86892.88	-0.07	1.2E+06
6	(88975.04)		3.9E+06	88838.49d	0.39	1.2E+07				86693.02	0.13	9.0E+05
7				88595.43	-0.66	1.2E+07						

			23-9						23-10			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	85369.04d	0.04	9.3E+06				83412.55d	-0.30	1.5E+06			
1	85348.88	0.10	1.1E+07	85316.13d	-0.32	3.1E+07	83394.44d	-0.36	1.6E+06	(83362.47)		5.5E+06
2	85298.05	0.01	1.1E+07	85244.83d	0.01	2.2E+07	83347.79	-0.41	1.5E+06	83294.88	-0.10	4.0E+06
3	85217.21d	-0.08	1.1E+07	85142.63	-0.09	2.0E+07	83273.70	0.04	1.3E+06	83199.49d	0.40	4.0E+06
4	85107.32d	0.75	1.2E+07	85011.13d	0.16	2.0E+07	83171.47d	0.14	1.0E+06	83076.40d	0.67	4.2E+06
5	84967.43d	0.05	1.2E+07	84850.72	-0.10	1.9E+07	83042.49d	0.06	8.0E+05	82925.90d	0.03	4.6E+06
6	84800.06d	0.29	1.2E+07	84662.78d	-0.06	1.9E+07	(82887.36)		4.0E+05	82750.93	0.51	5.1E+06
7				84448.59	0.22	1.8E+07				82550.14d	-0.13	5.6E+06
8				84208.60	0.21	1.8E+07				82326.56d	-0.30	6.3E+06

			23-11						24-0			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	81576.02d	0.08	3.3E+06				(108722.78)		1.0E+07			
1	81560.37d	0.32	3.9E+06	81528.51d	0.79	1.1E+07	108682.83d	-1.25	1.2E+07	108653.41	0.70	3.1E+07
2	81517.97	0.25	4.1E+06	81464.58	0.08	7.9E+06	108595.41	-1.22	1.3E+07	108544.01d	0.24	2.0E+07
3	81449.27d	-0.39	4.3E+06	81375.89d	0.80	7.4E+06	108459.43	-1.01	1.3E+07	108386.60	-0.02	1.9E+07
4	81355.22	-0.68	4.5E+06	81260.64	0.34	7.0E+06	108277.89d	0.38	1.1E+07	108181.92d	-0.08	1.8E+07
5	81237.60d	-0.25	4.6E+06	(81121.89)		6.7E+06				107930.64d	0.03	1.9E+07
6	81095.10d	-0.18	4.6E+06	80958.75d	0.41	6.4E+06						
7				80772.95	-0.48	6.1E+06						
8				80566.60	-0.25	5.8E+06						

			24-1						24-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	105729.11	-0.07	1.9E+07				(102854.32)		4.1E+06			
1	105692.67d	0.08	2.3E+07	105661.45d	0.23	5.6E+07	102820.51d	0.65	4.9E+06	102788.44d	-0.05	1.2E+07
2	105609.29d	-0.07	2.5E+07	105556.40	-0.10	3.7E+07	102740.11d	-0.66	5.4E+06	102688.19	0.28	7.8E+06
3	105479.46	-0.02	2.5E+07	105405.64	-0.02	3.3E+07	102616.91d	-0.41	5.8E+06	102543.50	0.00	6.8E+06
4	105304.69d	-0.24	2.3E+07	105209.19d	-0.23	3.2E+07	102449.68d	-1.20	6.5E+06	102355.33d	-0.04	6.1E+06
5				104968.64	0.17	3.2E+07				102124.73d	0.14	5.5E+06
6				104684.60d	-0.53	3.4E+07				101853.19d	-0.22	4.5E+06

TableE.6. continue

			24-3						24-4			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	100096.90d	-0.17	4.1E+06				97455.02d	0.05	1.3E+07			
1	100064.51	-0.12	5.1E+06	100033.43d	0.17	1.2E+07	97425.30d	0.74	1.6E+07	97393.19d	0.00	3.6E+07
2	99989.13	-0.40	5.6E+06	99936.55d	-0.12	7.5E+06	97353.37	-0.05	1.7E+07	97301.11	0.55	2.3E+07
3	99871.33d	-0.63	5.6E+06	99797.54d	-0.60	6.7E+06	97242.45	0.51	1.8E+07	97168.79d	0.67	2.0E+07
4	99713.00	-0.73	4.9E+06	99617.96d	-0.26	6.5E+06	97091.72	0.04	2.0E+07	96996.33d	0.16	1.9E+07
5				99397.09d	-0.31	6.9E+06				96784.74	-0.59	1.7E+07
6				99137.92d	-0.10	8.4E+06				96538.12	-0.39	1.6E+07

			24-5						24-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(94927.06)		6.0E+05				92512.49	-0.02	7.9E+06			
1	(94898.63)		7.0E+05	94867.61d	0.35	2.2E+06	92486.02	-0.11	1.0E+07	92454.72d	-0.04	2.1E+07
2	(94831.56)		8.0E+05	94779.13d	0.43	1.5E+06	92423.01	-0.01	1.2E+07	92370.19d	0.03	1.3E+07
3	(94726.03)		9.0E+05	94652.06d	-0.15	1.3E+06	(92323.51)		1.3E+07	(92249.69)		1.1E+07
4	(94583.63)		1.3E+06	(94488.12)		1.1E+06	92189.26	0.01	1.5E+07	92093.87	0.13	9.6E+06
5				(94287.64)		8.0E+05				91902.78d	-0.18	8.8E+06
6				(94052.45)		3.0E+05				91678.84	-0.40	8.2E+06

			24-7						24-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	90211.41	0.01	8.3E+06				85951.36d	0.06	9.9E+06			
1	90187.27d	0.29	1.0E+07	90155.50	-0.11	2.4E+07	85931.32d	0.46	1.3E+07	85899.89	0.40	2.7E+07
2	90127.77	-0.14	1.1E+07	90075.06d	0.01	1.6E+07	85880.10	0.12	1.4E+07	85827.24	0.12	1.7E+07
3	90034.27d	-0.09	1.2E+07	89961.24d	0.70	1.4E+07	85797.89d	-0.74	1.7E+07	85724.81d	0.01	1.4E+07
4	89907.71d	-0.30	1.5E+07	89812.48d	-0.02	1.2E+07	85688.46d	0.04	2.0E+07	85593.06d	0.15	1.2E+07
5				89631.54d	0.01	1.1E+07				85432.55d	0.40	1.0E+07
6				89419.68	-0.27	8.3E+06				85244.83d	0.15	7.3E+06

			24-10						24-11			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	83995.07	-0.08	3.8E+06				82158.25d	0.01	1.3E+06			
1	83976.90	0.02	4.0E+06	83945.35d	-0.16	1.4E+07	82141.94	-0.19	2.0E+06	(80110.76)		2.6E+06
2	83930.09	-0.05	3.6E+06	83877.24d	-0.04	1.0E+07	82099.61d	-0.05	2.7E+06	82047.43d	0.63	1.3E+06
3	83855.19	0.20	3.0E+06	83781.24	0.07	1.0E+07	82031.52	0.53	3.7E+06	(81957.17)		7.0E+05
4	(83753.18)		2.0E+06	83657.65	-0.02	1.1E+07	81937.33	-0.42	5.9E+06	(81842.24)		4.0E+05
5				83507.03d	-0.17	1.1E+07						
6				83332.31	0.04	1.2E+07						

			25-0						25-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	109291.93d	0.21	9.8E+06				106297.82	-0.30	2.0E+07			
1	109253.34	1.38	1.2E+07	(109221.41)		2.6E+07	106260.70d	0.23	2.5E+07	106229.92	0.00	5.4E+07
2	(1092163.55)		1.4E+07	109113.15d	0.44	1.6E+07	106176.40d	0.12	2.7E+07	106124.76d	-0.68	3.4E+07
3	(109025.85)		1.5E+07	(108954.50)		1.4E+07	106044.92d	0.03	2.9E+07	105973.50d	-0.04	2.9E+07
4	(108840.17)		1.5E+07	108748.90d	-0.02	1.3E+07	105867.58d	-0.01	3.0E+07	105776.33d	-0.01	2.7E+07
5	108607.62	-0.03	1.6E+07	108496.44d	0.42	1.2E+07	105645.49d	-0.02	3.0E+07	105533.38d	-0.50	2.5E+07
6				108197.22d	-0.21	1.2E+07				105247.57	-0.22	2.4E+07
7				107854.70d	0.06	1.2E+07				104919.17	-0.08	2.4E+07

			25-2						25-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	103423.23d	-0.03	5.6E+06				100665.76d	-0.25	2.7E+06			
1	103388.45	0.71	6.7E+06	103357.47d	0.28	1.7E+07	100632.76d	0.25	3.6E+06	(100601.96)		6.1E+06
2	(103307.69)		7.1E+06	103256.87d	0.02	1.1E+07	100556.15d	-0.30	4.2E+06	100505.14		3.5E+06
3	(103182.73)		7.2E+06	103111.34	-0.04	9.9E+06	100437.32d	-0.05	4.8E+06	100366.39		2.8E+06
4	103013.07d	-0.47	7.3E+06	102922.26	-0.03	9.2E+06	(100276.39)		5.2E+06	100184.84d		2.4E+06
5	102802.04d	0.41	7.3E+06	(102690.00)		8.7E+06						
6				102415.95d	-0.12	8.3E+06						

			25-4						25-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	98023.59d	-0.32	1.3E+07				95496.15d	0.15	1.8E+06			
1	97992.33d	-0.11	1.6E+07	97961.72d	-0.17	3.5E+07	(95466.51)		1.9E+06	(95435.96)		6.7E+06
2	97920.82d	0.48	1.7E+07	97869.10d	-0.40	2.2E+07	(95398.48)		1.9E+06	95347.55	-0.09	4.9E+06
3	97806.69d	-0.66	1.8E+07	97736.35d	0.35	1.9E+07	95291.71d	0.27	1.7E+06	(95220.09)		4.7E+06
4	97654.58	0.24	1.9E+07	97563.07	-0.02	1.8E+07	(95146.29)		1.6E+06	95054.97d	-0.07	4.6E+06
5	97462.46d	0.09	2.0E+07	(97350.74)		1.7E+07	(94964.68)		1.5E+06	94852.62	-0.43	4.6E+06
6				97100.10d	-1.07	1.6E+07				94614.73d	-0.38	4.5E+06

			25-6						25-7			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	93081.70d	0.25	5.1E+06				90780.02d	-0.32	9.3E+06			
1	93053.97	-0.04	6.7E+06	93022.82d	-0.65	1.2E+07	90754.69d	-0.17	1.1E+07	90725.08d	0.77	2.9E+07
2	92989.70	-0.24	7.9E+06	92939.54d	0.44	7.3E+06	90694.72d	-0.10	1.2E+07	90643.71	-0.28	1.9E+07
3	92889.22	0.30	8.8E+06	92817.46d	-0.11	5.9E+06	90599.67d	-0.10	1.2E+07	90528.45	0.03	1.7E+07
4	92752.03	0.12	9.7E+06	92660.55d	-0.11	5.0E+06	90470.68d	0.01	1.3E+07	90379.34	-0.07	1.6E+07
5	92579.77d	-0.23	1.1E+07	92468.15	-0.22	4.4E+06	90309.17d	0.60	1.3E+07	90196.34d	-0.60	1.6E+07
6										89982.46d	-0.15	1.5E+07
7										89737.09	-0.81	1.4E+07

TableE.6. continue

			25-9						25-10			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	86519.91	-0.33	6.6E+06				84564.30d	0.21	6.3E+06			
1	(86498.74)		8.2E+06	86468.08d	-0.11	1.9E+07	(84544.76)		7.0E+06	84514.47d	0.26	2.2E+07
2	86446.97	0.08	9.1E+06	(86396.06)		1.2E+07	84497.09	0.03	7.0E+06	84446.09d	-0.13	1.6E+07
3	86363.84d	-0.20	9.9E+06	(86292.68)		1.0E+07	84420.40	0.00	6.8E+06	84349.23d	0.18	1.5E+07
4	86251.69d	0.61	1.1E+07	86159.44	-0.39	9.1E+06	84315.70d	-0.15	6.5E+06	84224.51d	-0.08	1.5E+07
5	(86109.19)		1.1E+07	85997.95d	0.39	8.3E+06	(84184.24)		6.1E+06	84072.73d	0.12	1.5E+07
6				(85807.34)		7.5E+06				83895.28d	0.35	1.5E+07
7				85590.28d	0.10	6.7E+06				83691.59d	-0.49	1.5E+07

			25-12						26-0			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	81013.14d		5.5E+06				(109847.47)		6.9E+06			
1	80998.59		6.4E+06	80967.24d	-0.44	1.8E+07	(109808.23)		7.9E+06	(109777.55)		2.2E+07
2	80958.75d		6.7E+06	80908.43d	0.02	1.2E+07	(109719.43)		7.3E+06	(109668.64)		1.5E+07
3	(80895.67)		6.7E+06	80824.81d	0.49	1.1E+07	(109582.84)		4.5E+06	109509.55d	-1.22	1.4E+07
4	80808.93		6.6E+06	80717.21d	-0.17	1.1E+07	(109409.28)		1.6E+06	109305.08d	0.28	1.6E+07
5	(80698.87)		6.4E+06	80587.30d	0.06	1.1E+07	109153.440	0.77	2.9E+07	109052.92d	-0.09	2.0E+07
6							(108873.56)		2.0E+07	108765.76d	-0.78	4.6E+07
7										108399.33d	-0.33	1.5E+06
8										108013.01d	-0.57	4.4E+06

			26-1						26-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	106853.99d	0.12	1.7E+07				103979.32	0.31	7.3E+06			
1	106816.73	-0.01	1.9E+07	106786.07	0.01	5.1E+07	(103944.01)		8.9E+06	103913.82d	0.49	2.1E+07
2	106732.74	0.58	1.9E+07	106681.16	-0.03	3.4E+07	103863.14d	-0.43	9.7E+06	103812.91d	0.31	1.4E+07
3	106602.16d	0.28	1.5E+07	106529.50	-0.31	3.2E+07	103739.71	-0.01	1.0E+07	103667.44d	-0.21	1.2E+07
4	(106436.70)		1.0E+05	106331.98d	-0.24	3.3E+07	(103582.65)		8.4E+06	103478.56d	0.39	1.1E+07
5	106189.69d	-0.84	4.4E+07	106090.80	-0.07	3.8E+07	(103346.65)		7.6E+06	103247.24d	0.25	1.0E+07
6	105923.77d	-0.15	3.8E+07	105816.81d	-0.09	6.5E+07	(103092.20)		8.6E+06	102984.51d	-0.67	5.0E+06
7				105464.94d	0.67	7.9E+06				102647.93	0.82	9.9E+06
8										102294.54d	0.50	9.8E+06

			26-4						26-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	98579.37d	-0.29	1.1E+07				96052.12	0.37	4.4E+06			
1	98548.39d	-0.32	1.4E+07	98518.91d	0.88	3.2E+07	96023.25	0.47	5.7E+06	95991.53	-0.58	1.2E+07
2	98475.90d	-0.32	1.5E+07	98425.08	-0.17	2.1E+07	95954.90	0.54	6.8E+06	95903.23	-0.16	7.7E+06
3	98364.26	-0.08	1.4E+07	98292.31d	0.04	1.9E+07	95848.48	0.05	9.6E+06	95776.49	0.13	6.3E+06
4	98223.49d	0.04	5.0E+06	98118.66d	-0.31	1.8E+07	95715.382	-0.02	2.3E+07	95610.70	-0.22	5.0E+06
5	98007.37d	-0.02	2.1E+07	97908.11d	0.38	1.9E+07	(95509.70)		4.0E+05	(95410.04)		2.6E+06
6				97669.57d	-0.70	2.2E+07	(95291.24)		1.5E+06	(95184.22)		1.4E+06
7				97358.67d	-0.47	8.0E+06				(94887.11)		1.5E+07
8				97034.05d	-0.71	1.0E+07				(94575.82)		1.1E+07

			26-7						26-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	91336.61	0.52	1.1E+07				87075.72	-0.27	4.5E+06			
1	(91311.13)		1.4E+07	91280.367	-0.08	2.9E+07	(87055.01)		6.4E+06	87024.13d	-0.20	9.9E+06
2	91250.53d	-0.18	1.7E+07	91199.48d	-0.26	1.8E+07	87002.56d	-0.22	8.5E+06	86951.80	-0.01	5.6E+06
3	91156.15d	-0.61	2.2E+07	91084.69d	0.00	1.5E+07	86920.04d	-0.98	1.3E+07	86848.99d	0.03	4.1E+06
4	(91039.78)		3.6E+07	90935.22d	-0.08	1.3E+07	86820.12	-0.07	2.9E+07	(86715.71)		2.8E+06
5	(90853.59)		6.0E+06	90753.15d	-0.78	8.9E+06	86654.20d	-0.01	1.8E+06	86554.07d	-0.47	1.4E+06
6	90657.965	-0.78	1.0E+07	(90551.72)		1.0E+05				(86376.45)		5.0E+05
7				90282.37d	-0.55	2.0E+07				86135.08d	-0.12	5.7E+06
8				90007.45d	-0.11	1.6E+07						

			26-10						26-12			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	85119.85d	0.01	9.1E+06				81568.55d	-0.38	3.9E+06			
1	85101.13d	0.10	1.1E+07	(85070.35)		2.6E+07	81554.51	0.01	5.4E+06	(81523.82)		8.9E+06
2	85052.90	-0.04	1.3E+07	85001.93d	-0.04	1.6E+07	81515.46	0.33	7.1E+06	81464.58d	0.42	5.0E+06
3	84977.75d	0.36	1.7E+07	84905.17d	-0.15	1.4E+07	81453.12	0.46	1.1E+07	(81380.59)		3.5E+06
4	[84884.95]		3.2E+06	84780.49d	0.02	1.1E+07	81377.10d	-0.66	3.1E+07	(81273.27)		2.1E+06
5	[84729.26]		3.1E+06	84629.40d	-0.20	7.0E+06	[81243.89]		2.0E+05	(81144.23)		3.0E+05
6	[84571.06]		5.8E+06	(84464.04)		7.0E+05	[81111.72]		1.7E+06	81005.07	0.37	9.5E+06
7				84237.10d	0.00	2.7E+07				80808.93d	0.55	1.3E+07
8				84010.88d	0.32	2.1E+07				80616.54d	0.07	7.5E+06

			27-0						27-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(110398.96)		6.8E+06				107396.46	0.10	1.7E+07			
1	110350.61	1.15	8.6E+06	110322.06	1.55	1.9E+07	(107357.97)		2.1E+07	107329.02	0.00	4.8E+07
2	110261.01d	1.40	9.5E+06	110210.14	-0.81	1.2E+07	107272.33d	-0.01	2.4E+07	107223.62	-0.06	3.0E+07
3	110120.87	0.64	1.0E+07	110051.57d	-0.43	1.0E+07	107139.26	-0.01	2.5E+07	107071.00	-0.04	2.6E+07
4	109933.47d	1.32	1.1E+07	109845.94d	0.96	9.4E+06	106959.39d	-0.18	2.6E+07	106872.37	-0.03	2.4E+07
5	109696.78d	-0.06	1.1E+07	109590.40d	0.65	9.0E+06	106734.42	-0.28	2.6E+07	106628.26d	0.00	2.3E+07
6	109413.86d	-0.32	1.1E+07	109289.34	-0.07	8.9E+06	106464.29d	-0.25	2.6E+07	106339.88d	0.11	2.2E+07
7				108942.98d	-0.85	9.0E+06				106008.78d	0.34	2.2E+07
8				108554.30d	0.10	9.5E+06				105635.13	-0.05	2.3E+07

TableE.6. continue

			27-2						27-4			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	104521.35d	-0.15	8.7E+06				99121.95	-0.20	1.0E+07			
1	(104485.24)		1.1E+07	104456.28d	-0.01	2.5E+07	99089.77d	-0.17	1.3E+07	99060.46d	-0.53	2.8E+07
2	104404.20	0.45	1.2E+07	104355.32d	0.23	1.6E+07	99016.67	0.27	1.5E+07	98968.04d	0.30	1.8E+07
3	104276.82d	-0.29	1.2E+07	104208.96d	0.08	1.4E+07	98901.90d	0.17	1.6E+07	98833.55d	0.05	1.5E+07
4	104105.53d	0.01	1.2E+07	104018.48d	0.13	1.3E+07	98746.34	0.02	1.7E+07	98659.09d	-0.06	1.4E+07
5	(103890.82)		1.2E+07	103784.28	-0.10	1.3E+07	98551.51	-0.05	1.7E+07	98445.68d	0.56	1.3E+07
6	103631.96	-0.86	1.2E+07	103509.18d	1.13	1.2E+07	(98317.91)		1.8E+07	98192.32d	-0.82	1.2E+07
7				(103191.28)		1.2E+07				97903.30	-0.01	1.2E+07
8				102834.20	-0.46	1.1E+07				97574.51d	-0.86	1.2E+07

			27-5						27-7			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	96594.59	0.35	5.7E+06				(91878.58)		9.6E+06			
1	96564.45d	0.44	6.8E+06	96535.50d	0.44	1.8E+07	91852.26	-0.10	1.2E+07	91823.12	-0.29	2.7E+07
2	96494.78d	0.24	7.2E+06	96446.35	0.47	1.2E+07	91790.70	-0.19	1.3E+07	91742.11d	-0.13	1.7E+07
3	(96385.82)		7.4E+06	(96317.59)		1.0E+07	91694.41	0.26	1.4E+07	91625.62	-0.31	1.5E+07
4	96237.35d	-0.92	7.5E+06	96151.04d	-0.06	9.8E+06	91562.25d	-0.40	1.5E+07	91475.54	0.06	1.3E+07
5	(96053.87)		7.6E+06	(95947.43)		9.3E+06	(91397.76)		1.6E+07	91290.70d	-0.62	1.2E+07
6	95831.00d	-0.87	7.7E+06	95707.00	-0.10	8.8E+06	91199.48d	0.12	1.7E+07	91074.49d	-0.10	1.1E+07
7				95431.54d	0.26	8.2E+06				90827.25	0.16	1.0E+07
8				95116.40d	-0.04	7.5E+06				90549.10d	0.92	9.4E+06

			27-8						27-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	89691.23	0.14	3.2E+06				87618.90	0.42	1.7E+06			
1	89666.77	-0.12	3.5E+06	(89637.94)		1.1E+07	87595.84	-0.40	2.4E+06	(87567.29)		3.5E+06
2	(89609.49)		3.5E+06	89560.90	0.07	8.1E+06	87543.07d	0.11	3.0E+06	87494.09	-0.21	1.8E+06
3	89518.78	-0.02	3.3E+06	(89450.57)		7.7E+06	87459.15d	0.74	3.6E+06	87389.35d	-0.83	1.2E+06
4	(89395.34)		3.2E+06	(89308.17)		7.6E+06	87342.95d	-0.11	4.2E+06	87256.04d	0.15	4.0E+05
5	89240.35	-0.16	3.0E+06	89134.20	0.13	7.6E+06	(87198.38)		4.9E+06	87091.62d	-0.32	6.0E+05
6	(89054.15)		2.9E+06	88929.30	-0.08	7.5E+06	87024.13	0.04	5.8E+06	86898.78d	-0.54	4.0E+05
7				88695.33	-0.07	7.2E+06						
8				88432.64d	-0.02	6.7E+06						

			27-10						27-11			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	85663.15d	0.82	8.1E+06				83825.70	0.28	2.3E+06			
1	85641.89d	-0.37	9.7E+06	85613.22d	-0.09	2.5E+07	83806.94d	-0.57	2.4E+06	83778.06	-0.50	9.3E+06
2	85593.06d	-0.06	1.0E+07	85544.38d	-0.08	1.6E+07	83762.83	0.19	2.2E+06	83713.59	-0.39	7.0E+06
3	85514.40	-0.38	1.1E+07	85446.77	0.22	1.5E+07	83690.39d	-0.39	2.0E+06	83622.51d	-0.04	7.1E+06
4	85407.50	-0.33	1.1E+07	85321.39d	0.74	1.4E+07	83592.28d	-0.11	1.7E+06	83505.19d	-0.03	7.5E+06
5	85273.15	-0.28	1.2E+07	85167.63d	0.64	1.3E+07	(83468.85)		1.3E+06	83361.67d	-0.74	8.0E+06
6	85111.44d	-0.24	1.2E+07	84986.79d	-0.12	1.2E+07	(93319.60)		9.0E+05	83195.31d	0.48	8.6E+06
7				84780.49d	-0.78	1.1E+07				83004.89d	0.46	9.2E+06

			28-0						28-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	110921.21d	0.82	3.5E+06				107926.76d	-0.03	1.1E+07			
1	110880.25d	-0.89	1.9E+06	110850.81d	0.29	1.6E+07	107890.69	1.04	8.0E+06	107859.03d	0.00	4.4E+07
2	110775.04d	-1.39	3.4E+07	110742.17d	0.79	1.3E+07	107789.46d	0.30	6.2E+07	107754.05	-0.06	3.3E+07
3	(110643.40)		1.8E+07	110583.11d	-0.57	1.6E+07	107662.39	-0.05	4.0E+07	107603.28d	0.56	3.8E+07
4	110455.68d	0.03	1.4E+07	110360.90d	-0.90	2.9E+06	107483.00	-0.07	3.4E+07	107388.82	-0.40	1.4E+06
5				(110113.57)		1.3E+06				107151.47	0.04	6.9E+06
6				109813.11d	0.20	3.2E+06				106863.14d	-0.13	1.1E+07

			28-2						28-4			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	105052.07	0.14	8.9E+06				99651.46d	-1.12	6.3E+06			
1	105016.93d	0.01	9.3E+06	104985.66d	-0.64	2.9E+07	99621.71d	0.09	5.0E+06	99590.09d	-0.91	2.3E+07
2	104920.87d	0.30	1.2E+07	104885.86d	0.34	1.9E+07	99533.21	-0.01	2.8E+07	99497.08d	-1.09	1.7E+07
3	104799.17d	-1.11	1.5E+07	104740.49	-0.07	1.8E+07	99425.92d	1.02	2.0E+07	99364.47d	-0.71	1.9E+07
4	(104629.02)		1.5E+07	104535.08	-0.09	2.5E+06	(99269.82)		1.8E+07	(99175.97)		5.0E+05
5				104307.55d	0.00	1.0E+07				98968.04d	-0.25	3.4E+06
6				104030.80d	-0.75	1.1E+07				98715.60	-1.04	5.4E+06

			28-5						28-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	97124.61d	-0.06	8.6E+06				(94710.12)		1.0E+05			
1	97096.12d	0.43	1.2E+07	97065.07d	0.00	2.2E+07	(94683.19)		1.0E+05	(94652.57)		1.0E+05
2	(97011.36)		1.0E+05	96976.56	0.25	1.3E+07	94602.76	-0.06	1.6E+07	(94567.77)		1.0E+05
3	96909.45	0.46	5.2E+06	96848.30d	-0.97	9.3E+06	(94506.47)		3.8E+06	(94446.75)		1.1E+06
4	96762.28	0.51	7.2E+06	96668.30d	0.38	1.5E+07	94366.77	-0.62	2.1E+06	94273.28	-0.26	1.5E+07
5				96470.48d	-0.13	1.4E+07				94085.85	-0.07	2.8E+06
6				96230.65	0.06	1.3E+07				(93875.38)		1.2E+06

TableE.6. continue

			28-7						28-8			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	92408.99d	-0.02	8.1E+06				90221.87d	0.35	8.0E+06			
1	92383.08	-0.96	1.0E+07	92353.83d	0.42	2.2E+07	90198.45	-0.12	1.4E+07	90167.87	-0.08	1.7E+07
2	92307.54	-0.17	3.5E+06	92272.77	0.11	1.4E+07	90126.00	-0.31	5.3E+06	90091.16d	-0.11	9.1E+06
3	92217.39	0.07	9.8E+06	(92157.60)		1.1E+07	(90041.97)		7.0E+05	89982.46d	0.21	4.2E+06
4	92085.97	-0.18	1.2E+07	91992.09	-0.21	4.2E+06	89919.26	0.42	2.5E+06	89825.79d	0.80	3.7E+07
5										89657.08d	-0.16	2.1E+07
6										89452.78d	-0.11	1.6E+07

			28-10						28-11			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	86192.75	-0.01	1.0E+07				84355.71d	-0.14	5.6E+06			
1	86173.58	-0.36	1.9E+07	86143.12d	-0.20	2.0E+07	84339.20d	0.01	7.8E+06	84308.50d	-0.07	1.6E+07
2	86110.62d	0.68	5.1E+06	86075.87	0.98	1.0E+07	(84279.46)		1.0E+05	84243.87d	-0.54	9.6E+06
3	(96037.95)		1.8E+06	(85978.23)		4.6E+06	(84213.95)		2.3E+06	(84154.23)		6.3E+06
4	85931.32d	-0.01	5.0E+06	85837.65d	0.18	3.5E+07	84115.52	-0.38	3.3E+06	84021.97	-0.07	2.1E+07
5				85690.79d	0.63	1.9E+07				83886.04	0.46	1.7E+07
6				85510.57d	0.16	1.4E+07				83718.40	0.07	1.5E+07

			28-12						28-13			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(82641.65)		8.0E+05				81055.59d	0.11	6.5E+06			
1	82627.37	-0.04	3.6E+06	(82596.79)		1.0E+05	81043.89d	0.52	1.1E+07	81013.14d	0.39	1.4E+07
2	82572.28	0.15	2.4E+07	(82537.08)		1.0E+05	(80992.77)		2.1E+06	(80957.72)		7.1E+06
3	82613.62d	0.40	2.3E+06	82453.69	0.19	2.0E+06	(80940.88)		1.3E+06	80881.25d	0.09	3.0E+06
4	(82424.12)		3.0E+05	82330.32	0.05	1.4E+07	80861.54d	0.49	3.0E+06	80767.30	0.10	3.0E+07
5				82204.97	0.18	1.0E+06				80653.66	0.23	1.6E+07
6				(82051.07)		1.0E+05						

			29-0						29-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	111436.22d	-0.66	4.8E+06				108442.37d	-0.91	1.4E+07			
1	111394.77d	-0.85	5.9E+06	111368.36	0.01	1.3E+07	108404.09d	-0.04	1.8E+07	108376.37	-0.49	4.0E+07
2	111303.62d	-0.74	6.5E+06	111258.38d	0.51	8.6E+06	108316.97d	-0.12	2.0E+07	108270.53	-0.07	2.6E+07
3	111162.11d	-1.05	6.8E+06	111097.92	-0.24	7.5E+06	108181.92d	-0.28	2.1E+07	108117.17d	-0.03	2.3E+07
4				110889.69	-0.04	7.0E+06	108000.31d	0.00	2.1E+07	107917.31	0.16	2.1E+07
5				110633.03	-0.30	6.8E+06				107670.86	-0.33	2.0E+07
6				110329.15d	-1.00	6.9E+06				107380.51	0.00	2.0E+07

			29-2						29-4			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	105568.82	0.40	1.1E+07				100169.00	-0.07	6.6E+06			
1	105531.90	0.50	1.3E+07	105504.14	0.01	3.1E+07	100136.03	-0.07	8.4E+06	100107.64d	-1.19	1.8E+07
2	105448.75	0.25	1.4E+07	105402.08	0.07	2.0E+07	100061.97d	0.82	9.5E+06	100014.66d	0.00	1.1E+07
3	105320.26d	0.22	1.5E+07	105255.16	0.12	1.8E+07	99944.35	-0.31	1.0E+07	99880.21d	0.55	9.5E+06
4	105146.69d	0.43	1.5E+07	105063.19d	0.09	1.6E+07	99787.12d	0.06	1.1E+07	99703.87d	-0.03	8.6E+06
5				(104827.31)		1.6E+07				99488.03d	-0.02	8.1E+06
6				104548.66d	-0.13	1.5E+07						

			29-5						29-7			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(97641.16)		8.6E+06				92926.20	0.70	6.1E+06			
1	97609.78d	-0.39	1.1E+07	97582.86d	-0.04	2.5E+07	(92898.52)		7.9E+06	92870.56d	-0.69	1.6E+07
2	97538.29d	-1.00	1.1E+07	97492.23	-0.57	1.6E+07	92836.38d	0.74	6.1E+06	92789.21	0.06	9.7E+06
3	97428.67	-0.08	1.2E+07	97364.57	0.82	1.4E+07	92736.27	-0.81	1.0E+07	(92672.08)		8.0E+06
4	97279.77d	0.76	1.3E+07	97196.55	0.70	1.3E+07	92603.17	-0.22	1.1E+07	92520.29	0.06	7.1E+06
5				96990.52d	0.16	1.2E+07						
6				96748.05d	0.22	1.1E+07						

			29-8						29-10			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	90738.03	0.02	7.0E+06				86709.17	-0.08	5.3E+06			
1	90713.99d	0.94	8.4E+06	90685.48d	-0.30	2.1E+07	86688.51	0.09	6.9E+06	86660.65d	-0.50	1.4E+07
2	90654.12d	-0.12	9.1E+06	90607.08d	-0.68	1.4E+07	86637.84	-0.03	7.9E+06	86590.63d	-0.75	8.4E+06
3	90561.73d	-0.01	9.5E+06	90497.64	0.91	1.2E+07	86558.69	0.98	8.8E+06	86492.64d	-0.07	6.9E+06
4	90435.98	-0.10	9.9E+06	90352.42d	-0.51	1.2E+07	86449.04	0.48	9.8E+06	86365.00d	-0.40	5.9E+06
5				90177.82d	0.82	1.1E+07				86210.30d	0.38	5.0E+06
6				89969.80d	-0.23	1.0E+07				86027.76	0.11	4.2E+06

TableE.6. continue

			29-11						30-0			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(84872.34)		6.1E+06				111939.74d	-1.22	6.4E+06			
1	84853.86		7.1E+06	(84826.40)		2.0E+07	111897.88d	-1.04	7.8E+06	111872.33d	-0.11	1.1E+07
2	84807.92d		7.3E+06	84760.733d	-0.17	1.4E+07	111807.85d	1.33	8.1E+06	111762.23d	0.28	5.2E+06
3	84732.99d		7.3E+06	84668.42d	-0.29	1.3E+07	111663.49	-0.16	8.2E+06	111601.39d	-0.07	4.0E+06
4	(84633.13)		7.3E+06	84550.163d	0.19	1.2E+07	111471.04	-1.20	8.2E+06	111391.91d	0.02	3.6E+06
5				84405.33	-0.01	1.2E+07				111133.83d	0.01	3.6E+06
6				84235.50	-0.07	1.2E+07				110829.26	-0.24	3.7E+06

			30-1						30-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	108946.87d	-0.49	1.9E+07				106072.54	0.04	1.4E+07			
1	108907.33d	-0.10	2.3E+07	108880.41d	89m	3.7E+07	106034.67	-0.03	1.7E+07	106008.78d	0.56	3.3E+07
2	108818.05d	-1.20	2.4E+07	108774.45d	90m	1.8E+07	105950.63	-0.03	1.8E+07	105905.61	-0.48	1.9E+07
3	108682.83d	0.14	2.4E+07	108620.63d	88m	1.5E+07	105820.43d	-0.10	1.8E+07	105758.61d	0.27	1.5E+07
4	108499.52	-0.14	2.5E+07	108418.92d	86m	1.3E+07	105645.49d	-0.12	1.8E+07	105565.12d	-0.14	1.4E+07
5				108171.58	80.00	1.3E+07				105327.51	-0.29	1.4E+07
6				107880.02d	83m	1.3E+07				105048.20d	0.06	1.3E+07

			30-4						30-5				
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	
0	100672.13d	-1.02	7.7E+06				98145.26d	0.02	9.2E+06				
1	100639.84	0.44	9.6E+06	100612.75d	-0.17	1.3E+07	98113.12	-0.35	1.1E+07	98086.97d	-0.02	2.6E+07	
2	100562.95d	-0.36	1.0E+07	100518.59d	-0.15	5.6E+06	98041.56	0.11	1.2E+07	97996.61	-0.27	1.6E+07	
3	100445.28	0.13	1.1E+07	100382.71	-0.25	4.1E+06	97928.17	-1.07	1.3E+07	97866.65	-0.40	1.4E+07	
4	100286.90d	0.49	1.1E+07	100205.77	-0.29	3.6E+06	97778.41d	0.05	1.3E+07	97697.93	-0.08	1.3E+07	
5				99987.98d	-0.56	3.5E+06				(97490.85)		1.2E+07	+HI
6										97247.56	0.38	1.2E+07	

			30-6						30-7			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(95730.69)		1.0E+05				93429.18	-0.40	5.5E+06			
1	(95700.97)		1.0E+05	95673.91d	-0.58	2.8E+06	(93401.82)		6.9E+06	(93375.35)		1.0E+07
2	(95632.91)		1.0E+05	95588.28d	-0.06	3.4E+06	93337.77d	-0.03	7.6E+06	93293.48	0.25	4.8E+06
3	(95526.72)		1.0E+05	95465.02d	0.49	3.7E+06	(93237.57)		8.1E+06	(93175.38)		3.5E+06
4	(95383.98)		1.0E+05	95303.62d	-0.01	3.6E+06	93102.00	-0.74	8.6E+06	93022.82d	0.43	2.9E+06
5				95105.98d	-0.19	3.4E+06				92834.30d	-0.44	2.6E+06
6										92614.49	-0.19	2.4E+06

			30-8						30-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	91242.13	0.04	5.6E+06				(89169.48)		1.0E+05			
1	91216.34d	-0.01	6.8E+06	(91189.87)		2.3E+06	(89145.70)		1.0E+05	(89119.22)		3.0E+06
2	91156.15d	-0.25	7.7E+06	91111.32d	-0.51	1.7E+07	(89089.87)		1.0E+05	89044.55d	-0.75	3.8E+06
3	91062.89d	0.67	8.4E+06	90999.58d	-0.45	1.6E+07	(89001.83)		1.0E+05	88940.02d	0.38	4.3E+06
4	90935.22d	-0.21	9.0E+06	90854.52	-0.56	1.5E+07	(88883.15)		1.0E+05	88802.94	0.14	4.5E+06
5				90677.18d	-0.32	1.4E+07				88635.27	-0.10	4.5E+06
6				90469.31	-0.16	1.3E+07				88439.56	0.15	4.5E+06

			30-10						30-11			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	87212.97d	-0.36	4.2E+06				85376.73d	0.31	3.7E+06			
1	87191.61	-0.11	3.1E+06	87164.93d	-0.31	7.7E+06	85357.72d	0.76	4.4E+06	85329.71d	-0.78	2.1E+07
2	(87140.03)		3.8E+06	87095.01	-0.45	4.9E+06	85309.65	0.10	5.1E+06	85265.05d	0.07	1.8E+07
3	87058.17d	-0.03	4.4E+06	86995.69	-0.32	3.9E+06	(85234.20)		5.8E+06	85172.94d	0.93	1.7E+07
4	86947.48d	-0.43	5.1E+06	86867.22d	-0.34	3.2E+06	85132.60	0.12	6.3E+06	85052.10	-0.03	1.6E+07
5										84905.17d	-0.66	1.5E+07
6										84734.48	-0.44	1.4E+07

			30-12						30-14			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	83662.17d	-0.25	1.4E+06				80623.96d	0.47	3.2E+06			
1	83645.47d	0.28	1.5E+06	83618.79d	0.08	6.0E+06	80610.99	-0.05	3.8E+06	80584.78d	0.22	1.5E+07
2	83602.65d	0.43	1.4E+06	83557.63d	-0.02	4.7E+06	(80577.71)		4.2E+06	80533.16d	0.02	1.2E+07
3	83533.70d	0.23	1.3E+06	83471.42	0.14	5.0E+06	80523.50d	0.08	4.4E+06	(80461.23)		1.2E+07
4	(83440.71)		1.1E+06	83360.34d	-0.02	5.4E+06	(80449.83)		4.5E+06	(80369.48)		1.2E+07
5				83223.97	-1.07	5.9E+06				(80258.23)		1.2E+07
6				83067.22d	-0.44	6.4E+06				(80129.73)		1.1E+07

TableE.6. continue

			31-0						**31-1**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	112433.92d	0.55	3.3E+06				109440.23	0.46	1.2E+07			
1	112391.85d	0.41	4.1E+06	112365.89d	0.84	9.5E+06	109399.85d	-0.10	1.4E+07	109373.45d	-0.11	3.3E+07
2	(112298.74)		4.4E+06	112255.72d	1.36	6.2E+06	109311.53d	0.06	1.6E+07	109265.82d	-1.27	2.2E+07
3	112155.06d	-0.64	4.5E+06	112093.96	-0.02	5.5E+06	109174.67	-0.07	1.6E+07	109113.15d	0.13	1.9E+07
4	111963.18d	-0.42	4.5E+06	111883.87d	-0.24	5.2E+06	108991.64d	0.62	1.6E+07	108910.11d	-1.42	1.8E+07
5				(111625.87)		5.5E+06				108663.76d	0.03	1.8E+07
6				111320.84	-0.02	5.5E+06				108371.56d	0.34	1.8E+07

			31-2						**31-4**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	106564.98d	0.07	1.2E+07				101165.58d	0.02	3.2E+06			
1	(106527.22)		1.4E+07	106500.91d	0.08	3.4E+07	101131.65d	-0.27	4.1E+06	101104.35	-0.01	8.7E+06
2	106443.13	0.25	1.5E+07	106399.09d	0.59	2.8E+07	101055.41d	-0.12	4.6E+06	101011.14	0.68	5.5E+06
3	106311.25d	-1.33	1.6E+07	106250.88	0.02	1.9E+07	100936.68d	-0.52	4.9E+06	100876.16d	-0.08	4.7E+06
4	106136.98	0.01	1.6E+07	106057.34d	-0.14	1.8E+07	(100777.77)		5.1E+06	100698.20		4.4E+06
5				105820.43d	0.58	1.7E+07				(100480.59)	-0.40	4.3E+06
6				105539.66d	0.16	1.7E+07				100224.19d		4.5E+06

			31-5						**31-6**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	98637.62	-0.03	9.2E+06				96223.34d	0.24	1.9E+06			
1	98605.68	-0.31	1.1E+07	98579.37d	-0.23	2.6E+07	(96193.49)		2.2E+06	(96167.10)		6.0E+06
2	98533.30d	-0.37	1.3E+07	98488.56d	-0.73	1.7E+07	96125.05	-0.08	2.3E+06	96081.17d	0.42	4.0E+06
3	98421.12d	-0.17	1.3E+07	98359.08d	-0.49	1.5E+07	(96018.77)		2.4E+06	95957.01d	-0.04	3.6E+06
4	98270.28d	0.56	1.4E+07	98190.09	-0.14	1.3E+07	95875.11	-0.23	2.5E+06	95795.58	-0.27	3.4E+06
5				97981.93	-0.97	1.3E+07				(95598.22)		3.1E+06
6				97738.00d	-0.54	1.2E+07				95365.83d	0.50	2.7E+06

			31-7						**31-8**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	93921.70d	-0.29	2.3E+06				(91734.50)		8.2E+06			
1	(93894.34)		3.0E+06	93868.28d	0.33	5.5E+06	(91708.87)		1.0E+07	91681.29	-1.22	2.3E+07
2	(93830.02)		3.6E+06	93785.26	-0.38	3.3E+06	91648.99d	0.37	1.1E+07	91604.24d	0.00	1.4E+07
3	93729.28d	-0.34	4.0E+06	93667.54d	-0.36	2.6E+06	91553.67d	-0.60	1.2E+07	91492.31	-0.24	1.2E+07
4	93593.50d	-0.60	4.4E+06	93513.97	-0.64	2.3E+06	91426.67	-0.13	1.3E+07	91346.97	-0.33	1.1E+07
5				(93326.79)		2.1E+06				91169.72d	0.18	1.0E+07
6				93106.18d	0.14	2.0E+06						

			31-9						**31-10**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	89661.07	-0.82	2.0E+06				(87705.74)		1.5E+06			
1	(89638.22)		2.3E+06	89612.58	0.75	7.0E+06	87684.51d	0.27	2.1E+06	(87657.85)		3.0E+06
2	89581.48d	-0.61	2.3E+06	89537.54d	-0.17	4.9E+06	87632.39d	0.14	2.7E+06	87587.990	0.12	1.5E+06
3	89493.82	-0.06	2.3E+06	89432.56	0.40	4.6E+06	(87550.25)		3.2E+06	87489.40d	0.87	1.0E+06
4	(89374.51)		2.3E+06	(89295.02)		4.4E+06	87439.34d	0.07	3.9E+06	87360.41d	0.63	7.0E+05
5				89126.86	-0.55	4.3E+06				(87202.46)		5.0E+05
6				88931.74	0.97	3.9E+06				87018.39d	0.03	3.0E+05

			31-11						**31-12**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	85869.35	0.52	6.9E+06				(84154.83)		3.0E+06			
1	85849.49	0.00	8.5E+06	85823.14d	0.04	1.9E+07	(84137.71)		3.2E+06	84111.29d	-0.03	1.1E+07
2	85801.99	0.22	9.5E+06	85756.99	-0.40	1.2E+07	84094.93d	0.49	3.1E+06	84050.11	0.05	7.8E+06
3	85726.72d	0.47	1.0E+07	85664.26	-0.27	1.1E+07	84025.05d	-0.47	2.9E+06	83963.91d	0.11	7.6E+06
4	85623.91d	0.07	1.1E+07	85544.38d	0.03	9.3E+06	83931.68	-0.39	2.7E+06	83852.60	0.02	7.7E+06
5				85398.04d	0.16	8.2E+06				83717.58	0.49	7.8E+06
6				85226.17d	-0.11	7.1E+06				83559.51d	0.49	7.9E+06

			31-14						**32-0**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	81116.21d	0.31	3.5E+06				112911.59d	-1.37	4.3E+06			
1	81103.17d	-0.39	4.2E+06	81077.53d	0.36	1.0E+07	(112870.03)		4.3E+06	112843.37d	-1.05	8.0E+06
2	81070.01d	0.08	4.6E+06	81026.03d	0.48	6.4E+06	(112776.01)		4.9E+06	(112733.96)		4.7E+06
3	81015.89	0.42	4.9E+06	80953.66d	-0.10	5.4E+06	(112631.50)		5.2E+06	(112572.57)		3.6E+06
4	80941.96d	0.77	5.3E+06	80861.54d	-0.16	4.7E+06	112437.70d	-0.24	5.3E+06	112360.65d	-0.73	3.4E+06
5				80749.88d	-0.40	3.9E+06						
6				80620.72	-0.37	3.0E+06						

			32-1						**32-2**			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	109918.17d	-1.19	1.2E+07				107044.59d	0.09	1.3E+07			
1	109878.20	-0.34	1.6E+07	(109852.93)		3.0E+07	107006.20d	0.39	1.6E+07	106980.61	0.41	3.4E+07
2	109788.66	-0.08	1.7E+07	109746.23d	-0.45	1.8E+07	106920.05d	-0.10	1.8E+07	106878.13	0.04	2.1E+07
3	109650.79d	0.25	1.8E+07	109591.05d	-0.56	1.5E+07	106787.36d	-1.02	1.9E+07	106729.43	-0.02	1.8E+07
4	109465.12	-0.24	1.9E+07	109387.77d	-1.03	1.3E+07	106611.42d	0.11	1.9E+07	106535.15d	0.40	1.6E+07
5				109139.55	0.02	1.2E+07				106295.64d	-0.01	1.5E+07
6				108846.29d	0.73	1.2E+07				106012.63d	-1.21	1.4E+07

TableE.6. continue

			32-3						32-4			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(104287.25)		2.0E+06				101645.47d	0.32	2.6E+06			
1	104250.25d	-0.33	2.3E+06	(104224.97)		6.6E+06	101610.42d	-0.09	3.6E+06	(101584.90)		5.3E+06
2	(104168.91)		2.4E+06	104126.55d	-0.30	4.5E+06	(101532.80)		3.2E+06	101490.07d	-0.67	2.8E+06
3	(104043.02)		2.4E+06	(103984.09)		4.1E+06	101413.96d	0.96	4.7E+06	101355.00d	0.93	2.0E+06
4	103873.71d	-0.45	2.3E+06	103797.21d	-0.39	3.9E+06	(101252.11)		5.0E+06	101174.90d	-0.65	1.6E+06

			32-5						32-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	99116.69d	-0.55	9.3E+06				96702.94	0.25	2.6E+06			
1	99084.57d	-0.01	1.2E+07	99058.82d	-0.15	2.5E+07	96671.47	-0.61	2.9E+06	(96646.47)		9.5E+06
2	99011.83d	0.89	1.3E+07	98969.45d	0.57	1.5E+07	96602.06	-0.34	3.0E+06	96560.95d	0.61	6.8E+06
3	98897.61d	0.52	1.4E+07	98839.34	1.18	1.3E+07	96494.78d	0.21	3.0E+06	96435.94d	0.30	6.4E+06
4	98744.07d	0.01	1.4E+07	98667.52	0.02	1.1E+07	96349.72	0.04	3.0E+06	96273.65	0.53	6.2E+06
5				98458.65d	-0.05	1.1E+07				96074.34	0.32	6.0E+06
6				98212.43d	-0.45	1.0E+07				95840.54d	0.87	5.7E+06

			32-7						32-8			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(94401.58)		1.4E+06				92214.96d		7.6E+06			
1	(94372.93)		2.0E+06	94347.11d	-0.21	2.2E+06	(92187.46)		9.1E+06	(92161.85)		2.1E+07
2	(94307.29)		2.5E+06	(93265.23)		9.0E+05	92126.21	0.32	1.0E+07	92083.07	-0.76	1.3E+07
3	94205.23d	-0.20	2.9E+06	94146.13d	-0.36	5.0E+05	(92030.07)		1.1E+07	91970.87d	-0.27	1.1E+07
4	94067.91d	-0.53	3.2E+06	(93991.88)		3.0E+05	(91901.10)		1.1E+07	91824.59	0.02	9.9E+06
5										91645.01d	-0.33	9.1E+06

			32-9						32-11			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(90141.48)		2.8E+06				86348.74d		4.9E+06			
1	90117.46	0.65	3.0E+06	90091.16d	-0.05	1.1E+07	(86328.08)		5.9E+06	86302.39	-0.08	1.5E+07
2	90059.88d	0.52	3.0E+06	90017.26d	-0.04	8.4E+06	(86279.04)		6.5E+06	86236.48d	-0.51	1.0E+07
3	89969.90d	0.22	2.9E+06	(89910.75)		8.3E+06	86201.23		7.0E+06	86143.12d	0.00	9.1E+06
4							86098.13		7.5E+06	86021.05d	-0.60	8.2E+06

			32-12						32-14			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	84634.93	0.51	3.7E+06				81595.14d	-0.35	1.4E+06			
1	84616.39d		4.0E+06	84590.76	0.07	1.5E+07	81581.90d	-0.26	1.3E+06	81556.74d	0.20	5.0E+06
2	84572.17	0.46	4.0E+06	84529.54	-0.11	1.1E+07	(81547.20)		1.4E+06	81505.06d	-0.08	3.6E+06
3	(84501.32)		4.0E+06	84442.18	-0.21	1.1E+07	(81491.27)		1.2E+06	81432.66d	0.32	3.3E+06
4	84406.30d	-0.11	3.9E+06	(84329.85)		1.1E+07	(81415.53)			(81338.97)		2.90E+06
5				84193.68d	0.79	1.1E+07				(81226.08)		2.40E+06
6				84033.77	0.41	1.1E+07				(81095.43)		1.90E+06

			33-0						33-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(113379.92)		2.3E+06				110385.86d	-0.46	9.2E+06			
1	113337.14d	0.04	2.7E+06	113311.30d	-0.61	6.8E+06	110345.86d	0.25	1.1E+07	(110320.42)		2.7E+07
2	113243.28	-0.02	2.9E+06	113200.95	0.04	4.5E+06	110256.50d	0.47	1.2E+07	110213.41d	-0.23	1.8E+07
3	113099.72d	0.87	2.9E+06	113039.50d	-0.14	4.1E+06	(110117.95)		1.2E+07	(110058.68)		1.6E+07
4	112905.470	0.30	2.5E+06	112828.70d	0.03	4.0E+06	109933.47d	0.88	1.1E+07	109855.54d	-0.55	1.6E+07
5	(112663.64)		1.5E+06	112568.42d	-1.04	4.2E+06	(109701.50)		7.3E+06	109605.91d	-1.03	1.6E+07
6				112261.760	-0.67	4.7E+06				(109312.79)		1.7E+07
7										108975.84d	0.60	2.3E+07

			33-2						33-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	107511.52d	0.06	1.2E+07				104753.70d	-0.51	3.0E+06			
1	(107472.88)		1.4E+07	107448.20d	0.51	3.4E+07	104717.73d	0.08	3.7E+06	(104692.46)		9.0E+06
2	107387.67d	0.23	1.5E+07	107345.23d	0.18	2.2E+07	(104636.20)		4.0E+06	104592.98d	-0.83	5.9E+06
3	107256.13d	0.34	1.5E+07	107196.47d	-0.05	2.0E+07	(104510.43)		4.2E+06	(104451.16)		5.2E+06
4	107079.16d	0.62	1.5E+07	107002.07	0.03	1.9E+07	104341.68	0.29	4.4E+06	104264.99	0.10	4.7E+06
5	106857.49	-0.13	1.2E+07	106762.49d	-0.57	1.8E+07	104130.43	0.00	4.9E+06	104035.863d	-0.01	4.4E+06
6				106481.01	-0.06	1.9E+07						

			33-5						33-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	99583.82d	-0.38	8.0E+06				97168.79d	-0.86	4.4E+06			
1	(99551.65)		9.8E+06	99526.14	-0.32	2.2E+07	(97139.15)		5.3E+06	97113.95d	-0.01	1.3E+07
2	99478.90d	0.67	1.1E+07	99435.59d	-0.25	1.4E+07	97070.38d	0.69	5.8E+06	97026.75	-0.55	8.3E+06
3	99364.47d	-0.03	1.1E+07	99305.04d	-0.19	1.3E+07	96963.01	1.03	6.3E+06	96903.07	0.36	7.2E+06
4	99211.16d	-0.13	1.1E+07	99134.45d	-0.34	1.2E+07	96817.12	0.21	6.9E+06	96740.39d	-0.02	6.5E+06
5				[98926.11]		1.1E+07	96635.64d	-0.35	8.5E+06	96541.74	0.31	5.9E+06
6				98679.98d	-0.13	1.2E+07				96307.13d	0.23	5.0E+06
7				98398.04d	-0.04	1.3E+07						

TableE.6. continue

			33-8						33-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(92681.05)		6.4E+06				90609.08	0.64	5.0E+06			
1	92654.47d	-0.06	8.2E+06	(92692.34)		1.7E+07	90582.85d	-1.03	6.1E+06	90558.46d	-0.23	1.5E+07
2	92592.99	-0.19	9.3E+06	92550.77	-0.02	1.1E+07	90526.60	-0.06	6.8E+06	90484.36	0.10	9.6E+06
3	92592.99d		9.3E+06	(92438.21)		9.0E+06	90437.68d	0.59	7.4E+06	90377.83	0.01	8.3E+06
4	92368.08d	-0.28	1.1E+07	92291.78	-0.09	8.1E+06	90316.82d	0.74	8.4E+06	90239.49d	-0.09	7.5E+06
5	(92207.31)		1.2E+07	92112.06	-0.69	7.4E+06	90165.22d	0.04	1.1E+07	90071.12d	0.50	6.7E+06
6				91902.78d	0.38	6.9E+06				89871.94	-0.40	5.4E+06
7										89646.43d	0.26	2.9E+06

			33-11						33-12			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	86815.19d	-0.19	4.4E+06				85101.13d	-0.25	5.6E+06			
1	86794.77d	-0.38	5.8E+06	86769.11d	-0.85	1.1E+07	85083.26	-0.11	6.8E+06	85058.23	0.05	1.7E+07
2	86746.38d	0.05	6.9E+06	86703.83	-0.11	6.4E+06	85039.13d	0.13	7.5E+06	84996.61d	0.00	1.1E+07
3	86668.75d	-0.71	8.1E+06	86610.63	0.44	5.0E+06	(84698.73)		8.1E+06	84909.83	0.37	9.7E+06
4	86566.37d	0.96	9.7E+06	86488.75d	-0.16	4.1E+06	84873.78	0.14	9.1E+06	84796.41d	-0.73	8.8E+06
5	86436.09d	0.44	1.3E+07	86341.17d	0.08	3.2E+06	84754.06d	-0.80	1.2E+07	84660.42	0.12	7.8E+06
6				86167.71	-0.14	2.4E+06				84500.47d	-0.12	6.3E+06

			33-13						33-15			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(83515.01)		8.0E+05				80751.59	0.00	3.7E+06			
1	(83499.33)		7.0E+05	83474.40d	0.26	3.7E+06	80740.25	-0.75	4.5E+06	(80715.81)		1.1E+07
2	(83459.64)		5.0E+05	83417.26d	0.01	3.0E+06	80710.84d	-0.77	4.9E+06	(80669.21)		7.0E+06
3	(83396.39)		4.0E+05	83336.67	-0.45	3.2E+06	80663.72	0.00	5.3E+06	80604.52	0.07	5.9E+06
4	(83310.57)		2.0E+05	83234.24	0.17	3.5E+06	80598.19d	-0.32	5.9E+06	80522.11d	0.10	5.0E+06
5	(83203.50)		1.0E+05	(83108.94)		3.9E+06	(80517.13)		7.6E+06	(80422.57)		4.0E+06
6				82963.23	-0.03	4.3E+06				(80307.68)		2.6E+06
7				82798.56	0.21	4.4E+06				(80179.02)		5.0E+05

			34-0						34-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(113843.38)		2.2E+06				110840.94d	0.16	9.3E+06			
1	113791.09d	0.33	2.9E+06	113766.74	0.05	5.8E+06	110799.28	0.01	1.2E+07	110775.04d	-0.16	2.4E+07
2	113696.73	0.72	3.2E+06	113655.30	-0.07	3.5E+06	110708.51	-0.23	1.3E+07	110668.03d	-0.07	1.5E+07
3	113550.47	0.49	3.4E+06	113492.42d	-0.88	2.9E+06	110569.63	0.61	1.4E+07	110512.62	0.28	1.3E+07
4	(113353.86)		3.6E+06	113280.78d	-0.60	2.6E+06	110381.27d	-0.01	1.5E+07	110308.76d	-0.04	1.1E+07
5	113108.43	-0.28	3.7E+06	(113020.15)		2.5E+06	110146.68	0.11	1.5E+07	(110058.01)		1.1E+07
6				112711.39	0.27	2.4E+06				(109761.48)		1.0E+07
7										109420.16d	-0.15	1.0E+07

			34-2						34-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	107966.27d	0.35	1.2E+07				105209.19d	0.52	3.8E+06			
1	107926.76d	0.22	1.5E+07	107902.59	0.12	3.3E+07	105171.71d	0.40	4.6E+06	105146.69d	-0.55	1.1E+07
2	107840.51d	0.36	1.7E+07	107799.88	0.37	2.1E+07	(105088.91)		4.9E+06	105048.20d	-0.07	7.4E+06
3	107706.84	-0.02	1.8E+07	107650.07d	-0.11	1.7E+07	104961.53	0.03	5.0E+06	104905.82d	1.00	6.5E+06
4	107527.54	0.31	1.8E+07	107465.08d		1.6E+07	104789.90d	-0.18	5.1E+06	104717.73d	0.13	6.1E+06
5	107303.01d	0.32	1.9E+07	107213.83	-0.30	1.5E+07	104575.49d	-0.01	5.1E+06	104486.86d	-0.08	5.7E+06
6				106929.01d	-0.75	1.4E+07				(104214.37)		5.5E+06
7				106602.16d	-0.99	1.4E+07				103900.93	-0.64	5.2E+06

			34-5						34-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	100038.54d	-0.12	7.6E+06				97622.88d	-1.23	5.1E+06			
1	(100005.31)		9.6E+06	99981.91d	0.67	2.0E+07	(97592.81)		6.1E+06	97568.67d	-0.07	1.5E+07
2	99930.71d	-0.23	1.1E+07	99890.22	-0.08	1.2E+07	(97522.40)		6.5E+06	(97481.76)		1.0E+07
3	99815.19d	-0.38	1.2E+07	99759.60d	0.71	1.0E+07	97412.96d	-0.09	6.7E+06	97356.76	0.39	9.0E+06
4	99659.92d	-0.06	1.2E+07	99588.12d	0.62	8.9E+06	(97265.60)		6.9E+06	97193.77	0.65	8.4E+06
5	(99465.74)		1.3E+07	99377.57d	0.39	8.2E+06	97081.80d	0.74	7.0E+06	(96992.50)		8.0E+06
6				99128.75d	-0.05	7.7E+06				(96755.59)		7.6E+06
7				98844.10d	0.95	7.4E+06				96484.44d	0.12	7.2E+06

			34-8						34-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	93135.54d	0.03	5.3E+06				91062.89d	-0.01	5.4E+06			
1	93108.48	0.29	6.8E+06	(93084.12)		1.3E+07	(91037.54)		6.4E+06	91012.89d	-0.58	1.7E+07
2	93045.93	0.04	7.8E+06	(93005.25)		7.9E+06	90978.80d	-0.56	6.8E+06	90938.66d	-0.06	1.2E+07
3	92948.2d	-0.31	8.5E+06	92891.11d	-0.76	6.4E+06	(90888.16)		7.0E+06	90831.37d	-0.11	1.0E+07
4	92817.46d	0.41	9.1E+06	(92744.57)		5.5E+06	(90764.77)		7.0E+06	(90692.29)		9.8E+06
5	92651.09	-1.29	9.7E+06	(92563.82)		4.9E+06	(90610.25)	-1.17	7.4E+06	(90521.69)		9.3E+06
6				(92351.09)		4.4E+06				90319.91	-1.12	8.8E+06
7				92106.97d	-0.29	4.0E+06				90091.16d	-0.09	8.3E+06

TableE.6. continue

			34-11						34-12			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	87269.59d	-0.25	2.6E+06				(85555.84)		5.2E+06			
1	87248.56	-0.25	3.5E+06	87224.81d	0.07	6.4E+06	85537.27	0.24	6.0E+06	85512.22	-0.74	1.7E+07
2	(87199.07)		4.1E+06	(87158.40)		3.7E+06	85491.19d	-0.52	6.4E+06	85451.34	0.27	1.2E+07
3	87119.54	-0.99	4.6E+06	(87063.85)		2.8E+06	85419.98d	0.18	6.6E+06	85362.98	-0.14	1.1E+07
4	87014.75d	0.65	5.1E+06	86940.97d	-0.65	2.2E+06	85322.20d	-0.13	6.8E+06	85249.85	-0.32	9.9E+06
5							85199.86d	-0.07	7.0E+06	85111.44d	0.07	9.4E+06
6										84949.10	-0.18	8.8E+06
7										84765.51	1.09	8.1E+06

			34-13						34-15			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	83969.91d	0.44	1.7E+06				(81206.05)		2.1E+06			
1	83952.56d	-0.43	1.8E+06	(83928.92)		7.3E+06	(81194.66)		2.4E+06	(81170.59)		6.9E+06
2	83912.87d	0.52	1.7E+06	83871.76d	0.05	5.6E+06	81163.99	-0.32	2.5E+06	81122.80d	-0.87	4.7E+06
3	83847.21d	-0.25	1.5E+06	(83790.78)		5.8E+06	(81114.79)		2.6E+06	81057.46	-0.65	4.2E+06
4	(83759.26)		1.4E+06	83686.77	-0.01	6.1E+06	81047.78d	0.58	2.7E+06	80974.03	-0.69	3.7E+06
5	83648.07	-0.50	1.2E+06	83559.51d	-0.51	6.5E+06				(80873.64)		3.2E+06
6				83412.55d	0.60	6.9E+06				80756.63d	0.26	2.6E+06
7				83243.35	-0.07	7.2E+06				80623.96d	-0.13	1.9E+06

			35-0						35-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	114278.02	1.02	1.5E+06				111283.37	-0.03	7.0E+06			
1	114234.46	0.80	1.8E+06	(114209.15)		4.9E+06	111243.01d	0.84	8.3E+06			
2	(114138.33)		1.8E+06	114097.49	-0.50	3.3E+06	111151.08d	0.02	8.4E+06	111110.51	-0.21	1.5E+07
3				113936.16d	-0.04	3.1E+06				110954.84d	-0.40	1.3E+07
4				113724.33d	0.63	3.2E+06				110750.78	-0.34	1.4E+07

			35-2						35-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(108408.54)		1.1E+07				105651.48		4.6E+06			
1	108369.48	0.04	1.3E+07	108344.94d	0.01	3.2E+07	105613.16d		5.5E+06	105589.80d	0.10	1.4E+07
2	108282.51	0.04	1.3E+07	108242.22	0.09	2.1E+07	105531.90d		5.9E+06	105490.93d	0.04	8.8E+06
3				108092.67d	-0.41	1.9E+07				105347.98d	0.26	7.8E+06
4				107896.48d	-0.59	1.9E+07				105159.90	-0.02	7.3E+06

			35-5						35-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**		**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(100481.28)		5.7E+06			**A**	98067.29	0.56	6.1E+06			
1	100449.16	0.95	6.9E+06	(100423.70)		1.7E+07	(98035.71)		7.1E+06	(98011.20)		1.7E+07
2	(100373.26)		7.3E+06	100332.67d	-0.25	1.1E+07	97964.68d	-0.04	8.3E+06	97923.52d	-0.86	1.1E+07
3				100201.04	-0.75	9.7E+06				(97799.27)		9.7E+06
4				100030.03d	0.21	9.5E+06				97635.45d	0.01	8.8E+06

			35-8						35-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	93577.75d	-0.38	3.5E+06				91505.68d	0.16	6.6E+06			
1	93551.62d	0.53	4.5E+06	(93526.58)		9.4E+06	(91480.48)		8.3E+06	(91455.93)		1.8E+07
2	(93186.89)		4.7E+06	(93447.87)		5.9E+06	91420.97d	-0.71	9.6E+06	91381.28d	-0.06	1.1E+07
3				93334.72	-0.05	5.0E+06				(91274.38)		9.6E+06
4										91134.42	-0.19	8.3E+06

			35-12						35-13			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	85997.95d	-0.51	5.8E+06				84412.02d	-0.07	3.3E+06			
1	85979.82	-0.11	7.6E+06	(85955.42)		1.5E+07	84395.80d	-0.10	3.9E+06	(84371.38)		1.1E+07
2	85934.46d	0.43	9.0E+06	85894.06d	0.37	9.1E+06	(84354.67)		4.2E+06	84313.47	-0.86	7.2E+06
3				85806.22d	0.20	7.3E+06				84233.41d	-0.28	6.4E+06
4				85692.51d	0.34	6.0E+06				84129.03	-0.07	5.9E+06

			36-1						36-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(111712.69)		7.2E+06				108837.83	0.00	1.1E+07			
1	111671.40d	0.81	9.0E+06	111647.38d	0.17	1.9E+07	108797.90	0.04	1.4E+07	108774.45d	-0.03	3.0E+07
2	111578.45	-0.15	1.0E+07	111540.19d	0.18	1.2E+07	108709.97d	-0.04	1.5E+07	108671.30d	-0.12	1.9E+07
3	111436.22d	-0.27	1.1E+07	111383.85d	0.19	1.0E+07	108574.36	0.03	1.6E+07	108520.30d	-1.20	1.6E+07
4	111247.19	-0.12	1.1E+07	111179.07d	0.41	9.3E+06	108393.26d	0.00	1.7E+07	108324.35	-0.26	1.5E+07
5				110925.84d	0.36	8.8E+06				108081.35d	-0.25	1.4E+07
6				110627.02	-0.49	8.6E+06				107795.79d	0.00	1.4E+07

			36-3						36-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	106081.05	0.47	5.3E+06				100910.34d	-0.23	5.2E+06			
1	(106042.63)		6.5E+06	106018.98d	-0.27	1.5E+07	100876.16d	-0.47	6.7E+06	100853.11d	-0.14	1.4E+07
2	105958.74	-0.03	7.0E+06	105920.80d	0.62	9.9E+06	100800.71d	-0.09	7.6E+06	100762.53	0.32	8.2E+06
3	(105828.97)		7.3E+06	105776.33d	0.19	8.6E+06	(100683.04)		8.3E+06	100629.68d	-0.53	6.8E+06
4	(105656.11)		7.4E+06	105587.17	-0.29	7.9E+06	(100526.01)		8.7E+06	100457.44d	0.08	6.1E+06
5				105354.96	0.55	7.5E+06						
6				105080.06	-0.34	7.2E+06						

TableE.6. continue

			36-6						36-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	98495.33d	-0.69	6.5E+06				(91934.81)		6.2E+06			
1	(98464.13)		8.0E+06	(98440.75)		1.9E+07	91908.69d	-0.17	7.7E+06	91885.66d	0.18	1.8E+07
2	98392.31d	0.05	8.7E+06	98353.73d	0.06	1.2E+07	91848.92	-0.30	8.4E+06	91810.39d	-0.25	1.1E+07
3	98279.58d	-0.94	9.2E+06	98227.47d	-0.22	1.0E+07	91755.84d	0.21	9.0E+06	91703.41d	0.61	9.7E+06
4	98131.53	-0.10	9.5E+06	98062.64	-0.31	9.4E+06	(91630.80)		9.5E+06	91562.25d	0.10	8.8E+06
5				(97859.97)		8.8E+06				91389.19d	0.03	8.1E+06
6				97621.55d	-0.07	8.4E+06						

			36-10						36-12			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	89979.13d	0.47	1.8E+06				86427.75	0.00	4.4E+06			
1	89954.19d	-0.29	1.9E+06	(89931.51)		6.6E+06	86408.47	0.12	5.4E+06	(86384.97)		1.2E+07
2	89899.63d	0.25	1.9E+06	(89860.79)		1.8E+06	86360.74d	-0.83	6.1E+06	(86322.98)		7.9E+06
3	89812.48d	0.48	1.9E+06	89759.83d	0.66	4.6E+06	86287.25d	-0.02	6.6E+06	86234.70	0.26	6.4E+06
4	89694.80d	-0.76	1.7E+06	89626.65d	-0.26	4.6E+06	86188.44	0.08	7.0E+06	(96119.71)		5.6E+06
5				89463.88d	-0.34	4.6E+06				(95978.84)		4.8E+06
6				89274.29d	-0.36	4.6E+06				85815.09d	-0.22	4.2E+06

			36-13						36-16			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	84840.85d	-0.54	3.7E+06				80918.16	-0.52	2.3E+06			
1	84824.29	-0.03	4.2E+06	84800.06d	-0.87	1.3E+07	80910.01	0.38	2.7E+06	(80886.25)		7.2E+06
2	84782.32d	0.11	4.3E+06	84743.30d	-0.32	9.0E+06	80883.63	0.08	2.8E+06	80844.88d	-0.08	4.8E+06
3	84715.02d	0.09	4.3E+06	84662.78d	0.68	8.5E+06	(80840.31)		2.9E+06	80787.23d	-0.26	4.1E+06
4	84625.00d	-0.30	4.3E+06	84556.67	0.03	8.3E+06	(80782.87)		3.0E+06	80714.70d	0.48	3.6E+06
5				(84427.48)		8.1E+06						
6				84277.67	-0.31	7.9E+06						

			37-1						37-2			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	112130.05	-0.11	5.2E+06				109255.30	0.00	9.1E+06			
1	112086.93	-0.72	5.7E+06				(109214.92)		1.0E+07			
2	(111996.16)		4.9E+06	111957.30d	-0.18	1.2E+07	(109127.57)		9.4E+06	109089.92d	1.03	1.9E+07
3	111856.32	-1.01	1.9E+06	111800.46d	-0.26	1.2E+07	(108995.17)		5.1E+06	(108938.56)		1.9E+07
4	111647.38d	-1.12	8.0E+05	111595.78	-0.44	1.3E+07	108794.45d	0.00	3.3E+07	108742.16	-0.01	2.0E+07
5	111417.34d	0.00	1.8E+07	111346.31	-0.01	1.8E+07	108572.79d	-0.67	2.7E+07	108502.46d	0.02	2.6E+07
6										(106198.96)		1.0E+05
7										107873.07	-0.85	4.6E+06

			37-3						37-5			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	106497.26d	-0.79	5.6E+06				101327.97d	-0.07	3.3E+06			
1	(106459.69)		6.6E+06				101293.70d	0.01	3.8E+06			
2	106376.55	0.23	6.7E+06	106337.80d	0.15	1.1E+07	101218.38d	0.03	3.4E+06	101180.17d	0.49	7.2E+06
3	(106249.81)		5.6E+06	106193.42d	0.22	1.0E+07	101104.35d	0.47	1.4E+06	101047.03d	-0.24	6.9E+06
4	106057.34d	0.04	8.1E+06	106005.01	-0.01	9.8E+06	100927.18	-0.02	1.9E+07	100874.19d	-0.73	7.8E+06
5	105845.74d	-0.53	9.0E+06	105774.28	-0.97	1.0E+07	100736.40d	-0.11	1.3E+07	100665.76d	0.27	1.2E+07
6				(105481.59)		2.0E+06						
7				105171.71d	-0.63	5.2E+06						

			37-6						37-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	98913.11d	-0.38	6.5E+06				(92352.28)		6.0E+06			
1	98881.88d	0.69	7.9E+06				92326.62	0.70	7.7E+06			
2	98810.14d	0.33	8.4E+06	98771.29d	0.15	1.2E+07	92267.19	0.41	8.9E+06	(92228.10)		1.0E+07
3	98701.87	0.51	8.0E+06	98644.87	0.12	1.1E+07	92176.23d	-0.25	1.0E+07	92119.72	-0.14	8.6E+06
4	98533.30d	0.48	7.0E+06	98480.48d	-0.06	1.0E+07	(92314.42)		4.5E+06	91980.42	0.72	7.5E+06
5							91880.51d	-0.51	6.9E+06	91810.39d	0.38	6.3E+06

			37-10						37-11			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(90396.13)		3.5E+06				(88559.22)		1.0E+05			
1	90372.63d	0.69	4.6E+06				(88537.19)		1.0E+05			
2	90316.82	-0.11	5.9E+06	90278.27d	0.01	5.7E+06	(88486.57)		1.0E+05	(88447.78)		1.0E+05
3	(90232.84)		9.4E+06	(90176.23)		4.5E+06	(88408.84)		1.0E+05	(88352.23)		1.0E+05
4	(90096.75)		9.0E+05	(90044.47)		3.2E+06	88281.82d		2.5E+06	(88229.04)		1.0E+05
5				(89885.05)		9.0E+05	88151.13d		1.3E+06	(88080.47)		3.0E+05
6				89675.92	0.08	1.9E+07				87884.02		5.5E+06
7				89463.88d	-0.04	1.1E+07				87687.19		2.1E+06

TableE.6. continue

			37-12						37-13			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(86845.22)		3.8E+06				(85258.85)		5.2E+06			
1	(86825.41)		5.3E+06				85240.86d	-0.51	7.0E+06			
2	(86779.13)		6.9E+06	(86740.47)		5.0E+06	85199.86d	0.10	8.9E+06	85161.49	0.40	8.3E+06
3	86708.77	0.65	1.0E+07	(86651.50)		3.8E+06	85136.23d	0.45	1.4E+07	85079.30d	0.14	6.5E+06
4	(86216.50)		4.6E+06	86537.80d	0.53	2.7E+06	(85026.48)		6.0E+05	84974.37d	0.18	4.6E+06
5							84919.17d	-0.17	1.3E+06	(84848.32)		1.4E+06
6										84679.36	0.19	2.3E+07
7										84514.47d	0.28	1.4E+07

			37-14						37-16			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(83806.29)		1.3E+06				(81336.15)		2.1E+06			
1	(83791.26)		1.4E+06				81326.58d	-0.11	3.2E+06			
2	83755.10d	0.48	1.4E+06	(83715.94)		3.5E+06	81301.84d	0.74	4.6E+06	(81262.43)		2.2E+06
3	(83698.06)		1.5E+06	83641.46	0.01	3.2E+06	81260.98d	-0.18	8.7E+06	81204.39d	-0.15	1.3E+06
4	(83598.67)		1.0E+05	(83546.39)		2.9E+06	(81184.06)		2.5E+06	(81131.78)		5.0E+05
5				(83432.87)		1.5E+06	(81117.11)		1.0E+05	(81046.09)		1.0E+05
6				83278.64	0.07	1.0E+07				80925.84d	0.49	9.6E+06
7				83131.45d	0.33	8.0E+06				80817.25d	-0.13	2.8E+06

			38-0						38-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	115527.06	-0.64	1.1E+06				112533.80	-0.30	5.5E+06			
1	115483.07	0.43	1.4E+06	(115460.56)		3.0E+06	112490.33d	-0.82	6.9E+06	112469.14d	0.07	1.5E+07
2	115385.26d	0.41	1.5E+06	115348.34d	-0.35	1.9E+06	112397.60d	0.02	7.7E+06	112360.65d	-0.77	9.5E+06
3	115236.24d	0.68	1.6E+06	115184.72	-0.46	1.6E+06	112255.72d	1.12	8.1E+06	112204.13	-0.09	8.2E+06
4	115035.40	0.51	1.7E+06	114970.00	-0.22	1.5E+06	112063.46d	1.15	8.3E+06	111997.63d	-0.01	7.6E+06
5				114705.59	-0.14	1.4E+06				(111743.59)		7.2E+06
6				114391.45	-0.70	1.4E+06				111442.44	-0.07	7.2E+06

			38-2						38-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	109659.33d	0.09	9.9E+06				106901.15d	-0.84	6.3E+06			
1	109618.36	-0.06	1.2E+07	109596.34d	0.00	2.7E+07	106863.14d	-0.05	7.7E+06	106841.61d	0.50	1.8E+07
2	109528.79	-0.20	1.4E+07	109492.82	-0.01	1.7E+07	106778.18d	0.43	8.4E+06	106741.79d	0.20	1.2E+07
3	109391.66d	-0.78	1.4E+07	109341.71d	-0.35	1.5E+07	106646.27d	-0.81	8.7E+06	106596.73	0.03	1.0E+07
4	109207.61d	-0.65	1.5E+07	109143.71d	0.12	1.4E+07	106471.18	0.07	8.9E+06	(106406.44)		9.3E+06
5				108899.76d	0.05	1.3E+07				106171.26d	-1.26	8.8E+06
6				108610.49d	-0.30	1.3E+07				105895.89d	0.49	8.4E+06

			38-5						38-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	101731.73	-0.25	3.1E+06				(99317.43)		6.7E+06			
1	101697.35	0.16	4.0E+06	101674.90d	-0.21	7.9E+06	99284.12	-0.57	8.3E+06	99262.25d	-0.36	1.8E+07
2	101620.20d	0.42	4.6E+06	101583.79d	0.17	4.8E+06	99211.16d	-0.08	9.1E+06	99174.15d	-0.93	1.2E+07
3	101500.96	-0.19	5.0E+06	101450.16d	-0.61	4.0E+06	99099.11d	0.48	9.7E+06	99048.90d	0.65	1.0E+07
4							98946.26	-0.37	1.0E+07	98881.88d	-0.08	9.2E+06

			38-9						38-10			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	92755.93d	-0.29	5.3E+06				(90800.07)		3.6E+06			
1	92728.76	-0.66	6.7E+06	92706.24d	-1.10	1.4E+07	90775.72	0.28	4.3E+06	90753.15d	-0.21	1.1E+07
2	(92668.20)		7.1E+06	(92632.04)		8.7E+06	(90718.36)		4.5E+06	(90682.20)		7.7E+06
3	92574.41d	0.67	8.2E+06	(92523.36)		7.3E+06	90630.11d	0.00	4.7E+06	90579.04d	-0.69	6.9E+06
4	(92445.80)		8.8E+06	(92381.13)		6.5E+06	90509.70	-0.86	4.8E+06	(90445.89)		6.6E+06
5				(92207.27)		5.8E+06				90282.37d	0.05	6.2E+06
6				(92002.06)		5.3E+06				90089.80	0.15	5.9E+06

			38-12						38-13			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(87249.16)		2.4E+06				85663.15d	0.36	4.4E+06			
1	87228.93	0.02	3.1E+06	87206.14	-0.69	5.6E+06	85645.16	0.29	5.3E+06	(85622.79)		1.3E+07
2	87180.56	0.01	3.7E+06	(87144.39)		3.2E+06	(85601.19)		5.7E+06	85564.77d	-0.26	8.6E+06
3	(87105.38)			(87055.00)		2.4E+06	(85533.04)		6.0E+06	85482.93d	0.27	7.6E+06
4	87002.56d	-0.80	4.7E+06	86938.78d	0.09	1.9E+06	85440.51	0.22	6.3E+06	(85375.62)		6.9E+06
5				86796.72	-0.23	1.5E+06				85244.83d	-0.76	6.3E+06
6										85092.77d	-0.21	5.7E+06

TableE.6. continue

			38-14						38-17			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	84210.64d	0.41	1.9E+06				(80744.90)		2.1E+06			
1	(84194.76)		2.1E+06	(84172.68)		7.3E+06	80738.21	0.02	2.5E+06	(80716.11)		6.6E+06
2	84155.88	-0.17	2.0E+06	(84119.88)		5.4E+06	80717.21d	0.26	2.8E+06	80681.26d	0.47	4.0E+06
3	84095.37d	0.04	1.9E+06	(84044.95)		5.3E+06	(80682.43)		2.9E+06	80631.47	-0.58	3.3E+06
4	(84012.48)		1.8E+06	(83947.81)		5.4E+06	80634.71d	0.00	3.1E+06	80569.98	-0.06	2.7E+06
5				83830.48	0.34	5.5E+06						

			39-0						39-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	115919.23d	0.02	9.0E+05				112926.08d	0.47	3.5E+06			
1	115874.02	-0.17	5.0E+05	(115852.17)		2.5E+06	112882.81d	0.11	3.0E+06	(112860.68)		1.3E+07
2	(115779.09)		1.0E+05	115739.39	-0.81	1.9E+06	(112791.82)		5.0E+05	112752.97	0.04	9.9E+06
3	115615.30	-0.72	4.5E+06	115575.87	-0.86	2.2E+06	112634.06d	-1.00	2.0E+07	112595.50d	-0.27	1.1E+07
4	115419.22	1.20	2.9E+06	(115364.46)		3.5E+06	112445.68d	0.24	1.4E+07	112391.85d	-0.03	1.6E+07
5				(115086.19)		1.0E+05				(112124.05)		1.0E+05
6										111825.10d	-0.54	1.6E+06

			39-2						39-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	110051.57d	0.82	7.1E+06				(107293.50)		5.7E+06			
1	110009.90d	-0.07	6.7E+06	109987.90	-0.05	2.6E+07	(107254.74)		6.2E+06	107232.15	-0.57	1.9E+07
2	109923.74d	0.51	2.3E+06	109884.16	-0.18	1.9E+07	(107171.99)		4.0E+06	107132.99	-0.11	1.3E+07
3	109773.77d	0.87	3.0E+07	109733.30	-0.31	1.9E+07	(107027.54)		1.3E+07	106988.25	0.00	1.2E+07
4	109591.05d	-0.34	2.2E+07	109537.83	0.00	2.6E+07	106853.99d	-0.25	1.2E+07	106800.40d	-0.28	1.4E+07
5										(106552.98)		2.1E+06
6										106278.11d	-0.42	5.3E+06

			39-5						39-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(102123.49)		1.4E+06				(99708.94)		5.6E+06			
1	(102088.74)		1.1E+06	(102066.72)		5.7E+06	(99676.24)		6.2E+06	99653.80d	-0.42	1.8E+07
2	(102014.02)		1.0E+05	(101975.13)		4.4E+06	(99605.48)		4.3E+06	99567.57	0.98	1.2E+07
3	101881.60	-0.01	1.3E+07	(101842.32)		5.1E+06	99478.90d	-0.19	1.2E+07	99438.84	-0.96	1.1E+07
4	101724.31	0.17	8.2E+06	(101670.58)		9.2E+06	99329.75d	-0.01	1.1E+07	(99276.20)		1.3E+07
5										99058.82d	0.28	1.6E+06
6										98819.65d	-0.10	4.4E+06

			39-7						39-9			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	97408.25d	0.43	3.1E+06				93147.94d	0.21	4.0E+06			
1	(97377.09)		4.3E+06	(97355.07)		7.9E+06	(93120.97)		4.8E+06	93099.68d	0.73	1.2E+07
2	(97310.37)		6.5E+06	(97271.48)		4.7E+06	93062.65d	0.21	4.1E+06	93022.82d	-0.74	7.6E+06
3	(97189.94)		1.0E+05	97151.10	0.45	3.4E+06	(92954.20)		6.8E+06	(92914.91)		6.9E+06
4	(97048.52)		1.0E+05	(96994.69)		1.4E+06	92828.93	0.00	7.7E+06	(92775.35)		7.4E+06
5				96787.23d	0.12	7.9E+06						
6				96560.95d	0.49	6.1E+06						

			39-10						39-11			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	91192.45d	0.57	5.3E+06				89354.87d	0.20	7.0E+05			
1	(91166.99)		7.5E+06	91145.19d	0.22	1.3E+07	89332.56d	0.32	1.2E+06	89310.02d	-0.20	1.5E+06
2	(91112.60)		1.2E+07	91074.49	0.78	7.6E+06	89281.23d	-0.89	3.3E+06	(89243.23)		8.0E+05
3	(91010.57)		1.0E+05	(90971.28)		5.4E+06	89185.98d	-0.59	1.9E+06	(89174.28)		3.0E+05
4	(90893.69)		2.4E+06	90839.11	-1.02	2.2E+06	(89078.26)		2.0E+05	(89024.70)		1.0E+05
5										88858.65	0.45	9.9E+06
6										88679.96d	-0.74	5.2E+06

			39-12						39-13			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	87640.45	-0.22	1.3E+06				85055.02d	0.72	5.3E+06			
1	87620.67	0.21	1.9E+06	87598.42d	-0.02	3.0E+06	86036.43	0.01	8.1E+06			
2	87574.36	-0.44	2.2E+06	87536.38d	0.48	1.7E+06	85995.66	0.23	1.4E+07	85956.54	0.00	6.4E+06
3	87486.77	0.93	1.4E+06	(87446.55)		1.4E+06	(85913.50)		1.0E+05	85874.34	0.13	4.1E+06
4	87386.41	-0.08	2.3E+06	(87332.93)		1.4E+06	85823.14d	-0.28	2.0E+06	(85769.86)		1.1E+06
5										85626.10d	0.05	1.2E+07
6										85476.01d	-0.10	7.9E+06

			39-14						39-16			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	84601.84d	0.10	3.7E+06				82131.84	-0.52	7.0E+05			
1	84586.31d	0.00	5.4E+06	84564.30d	0.01	9.2E+06	82121.42	-0.32	1.8E+06	82099.61d	-0.11	5.0E+05
2	84550.16d	-0.12	9.1E+06	84510.67d	-0.72	5.4E+06	82096.51d	-0.26	5.6E+06	(82057.88)		1.0E+05
3	(84475.79)		1.0E+05	84436.58d	0.08	3.5E+06	(82039.56)	0.68	2.5E+06	(81999.59)		1.0E+05
4	84395.80d	0.19	7.0E+05	84341.68d	-0.37	6.0E+05	(81981.00)		1.0E+05	81926.92d	-0.52	9.0E+05
5				84210.64d	0.04	1.7E+07				81823.93d	0.11	2.2E+06
6				84075.81	0.30	1.1E+07						

TableE.6. fin

			39-17						40-1			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	81136.41	0.00	2.1E+06				113302.25	-0.02	4.2E+06			
1	81130.29d	0.55	3.4E+06	81107.95	0.23	4.1E+06	113257.34	-0.69	5.3E+06	113237.01	-0.31	1.2E+07
2	(81111.19)		6.3E+06	81072.24	-0.06	2.0E+06	(113163.55)		5.8E+06	113128.62d	-0.97	7.5E+06
3	(81062.89)		1.0E+05	81023.00	-0.60	1.0E+06	113018.95d	0.43	6.1E+06	112970.01	-1.09	6.5E+06
4	81017.97d	0.13	5.0E+05	(80964.54)		1.0E+05				112763.90d	0.29	6.0E+06
5				80876.72	-0.14	4.1E+06				112506.85	-0.66	5.9E+06
6				80794.73d	-0.18	1.7E+06						

			40-2						40-3			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	110427.77	0.36	8.5E+06				107670.86d	0.70	6.7E+06			
1	110385.86d	0.56	1.1E+07	(110364.09)		2.4E+07	107630.88d	0.81	8.3E+06	107608.83	-0.53	1.9E+07
2	110294.81	-0.15	1.2E+07	110261.01d	0.01	1.5E+07	107543.50d	-0.22	9.0E+06	107510.04	0.28	1.2E+07
3	110157.37d	1.01	1.2E+07	110108.82	-0.12	1.3E+07	(107411.00)		9.4E+06	107363.49d	-0.09	1.1E+07
4				109908.90	-0.66	1.2E+07				(107172.41)		9.9E+06
5				109663.36d	-0.27	1.2E+07				106936.93	0.49	9.4E+06

			40-5						40-6			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	102499.90d	-0.25	1.5E+06				(100085.60)		5.9E+06			
1	102464.13	0.06	2.0E+06	(102442.86)		3.9E+06	(100051.57)		7.4E+06	100030.91d	0.05	1.6E+07
2	102385.70d	-0.05	2.3E+06	(102351.79)		2.3E+06	99977.02	-0.19	8.2E+06	99943.19d	-0.06	1.0E+07
3	102265.68d	0.61	2.5E+06	(102217.65)		1.9E+06	99863.53	0.98	8.7E+06	99815.19d	0.06	8.7E+06
4				(102042.31)		1.7E+06				99647.18d	-0.75	7.9E+06
5				(101826.68)		1.6E+06				99441.90	-0.10	7.4E+06

			40-7						40-10			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	97783.97	-0.52	3.2E+06				91567.60d	-0.64	4.6E+06			
1	97753.07d	0.65	3.8E+06	97730.88	0.22	9.5E+06	(91542.32)		5.7E+06	91520.98d	-0.63	1.4E+07
2	97682.33d	0.23	4.1E+06	97649.26	1.12	6.2E+06	(91848.33)		6.2E+06	91450.02	-0.35	8.7E+06
3	97574.51d	1.11	4.1E+06	97525.80d	-0.18	5.5E+06	91394.47	0.44	6.6E+06	91346.29	-0.32	7.6E+06
4				97366.67d	-0.02	5.1E+06				(91211.86)		6.9E+06
5				97170.56	-0.01	4.8E+06				91046.15d	-0.09	6.4E+06

			40-13						40-14			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	86430.91d	-0.06	3.6E+06				84977.75d	-0.65	3.2E+06			
1	(86411.75)		4.5E+06	86391.08	0.04	9.6E+06	(84961.64)		3.7E+06	84939.30d	-1.63	1.0E+07
2	86367.39d	0.23	5.1E+06	86333.93d	0.73	5.9E+06	84921.52d	-0.49	3.9E+06	84887.70d	-0.35	7.0E+06
3	86296.70	-0.26	5.6E+06	(86249.54)		4.9E+06	84858.96d	-0.29	4.0E+06	84812.35	0.52	6.4E+06
4				(86141.59)		4.2E+06				(84713.78)		6.0E+06
5				86009.69d	0.18	3.6E+06				84593.51	-0.55	5.7E+06

			40-15						40-18			
J	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**R(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**	**P(J)**	**(obs-Ritz)**	**A**
0	(83667.54)		7.0E+05				80697.24d	-0.52	1.8E+06			
1	(83653.42)		7.0E+05	(83632.21)		3.1E+06	(80693.34)		2.3E+06	80672.78d	0.15	4.6E+06
2	(83619.12)		6.0E+05	(83585.16)		2.5E+06	(80678.37)		2.6E+06	80644.17d	-0.24	2.6E+06
3	(83564.29)		5.0E+05	83516.79d	-0.08	2.6E+06	80652.23	-0.45	3.0E+06	(80605.26)		1.9E+06
4				83429.52d	-0.01	2.9E+06				(80556.94)		1.4E+06

Table des figures

Figure 1 Détection des raies de la bande de Fulcher (3p $^3\Pi_u$ - 2s $^3\Sigma_g$) dans le visible des molécules H_2, HD et D_2 dans le plasma de bord (2). x

Figure 1.1 Les énergies potentielles adiabatiques des molécules H_2^-,H_2 et H_2^+ (14). . . . 6

Figure 2.1 Différentes courbes de potentiel de H_2 et ses isotopes. 11
Figure 2.2 Le couplage radial $B_{12}(R)$ entre les états électroniques de même symétrie ($^1\Sigma_u^+ -^1 \Sigma_u^+$;$^1 \Pi_u^+ -^1 \Pi_u^+$) en fonction de la distance R (16). 16
Figure 2.3 Le couplage rotationnel $A_{12}(R)$ entre les états électroniques ($^1\Sigma_u^+ -^1 \Pi_u^+$) en fonction de la distance R (16). 17
Figure 2.4 La variation des corrections adiabatiques des quatre états électroniques $B^1\Sigma_u^+, B'^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u^+$ et $D^1\Pi_u$ en fonction de la distance R (16). 18
Figure 2.5 Les moments de transition des états électroniques $(B, B')^1\Sigma_u^+$ et $(C, D)^1\Pi_u$ de la molécule H_2 vers l'état fondamental. 22
Figure 2.6 Comparaison entre les probabilités de transition A mesurées (50) et calculées, avec et sans couplages non adiabatiques, des niveaux d'énergie v', J' appartenant aux états électroniques $D'^1\Pi_u^-$ (a) et $D''^1\Pi_u^-$ (b) vers les niveaux $v'', J'' = J'$ de l'état fondamental $X^1\Sigma_g^+$ pour la raie Q(1) ($J' = J'' = 1$). . . 24

Figure 3.1 Les courbes de potentiels éléctroniques $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $EF^1\Sigma_g^+$, $B'^1\Sigma_u^+$ et $D^1\Pi_u$. 28
Figure 3.2 Différentes parties du couplage g-u entre l'état électronique EF et (B, C) de la molécule HD : noir : $\langle\Psi_{C^+}|P^+|\Psi_{EF}\rangle$, bleu : $\langle\Psi_B|\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial R}|\Psi_{EF})\rangle$, rouge : $\langle\Psi_B|\frac{\partial}{\partial z}|\Psi_{EF}\rangle$ et violet : $\langle\Psi_B|i(P^+L^- - P^-L^+)|\Psi_{EF}\rangle$ 29
Figure 3.3 Les coordonnées des électrons (1) et (2) exprimées par rapport au centre géométrique de la molécule HD et par rapport aux atomes H et D. 30

Figure 4.1 Photo du spectrographe/spectromètre de 10.7 m de l'Observatoire de Meudon. 38
Figure 4.2 Le montage Eagle in plane d'un réseau concave, montrant la position de la fente S et du porte plaque P sur le cercle de Rowland. La figure montre aussi comment le réseau concave G et le porte plaque doivent être tournés et déplacés quand la gamme de longueurs d'onde est changée. 38
Figure 4.3 Principe du système photoélectrique de pointé sur le comparateur 40
Figure 4.4 Principe général du fonctionnement et de lecture des écrans phosphostimulables 43
Figure 4.5 Schéma d'un détecteur photostimulable vu en coupe. La couche protectrice doit être absente pour une utilisation dans l'UV 43
Figure 4.6 Le lecteur Cyclone de Perkin Elmer 44
Figure 4.7 Comparaison entre la réponse en intensité du détecteur photostimulable et de la plaque photographique. En abscisse la dose de radiation issus de l'atome ^{32}P (rayonnement β de 1.7 MeV). l'ordonnée à droite représente la quantité de luminescence du détecteur photostomulable, et l'ordonnée à droite représente la densité du noircissement de la plaque photographique (62). 46

Figure 5.1 Programme de visualisation IDEN1 50

Figure 5.2 La recherche du niveau supérieur à partir de l'image du spectrogramme . . 51

Figure 6.1 Différences d'énergie $o-c1$ et $o-o'$ de l'état électronique $D'^1\Pi_u^-(v'=0)$ en fonction de J 57
Figure 6.2 Différences d'énergie $o-c1$ et $o-o'$ de l'état électronique $D'^1\Pi_u^-(v'=1)$ en fonction de J 57
Figure 6.3 Différences d'énergie $o-c1$, $o-c2$ et $o-o'$ de l'état électronique $D^1\Pi_u^+(v'=0)$ en fonction de J 59
Figure 6.4 Différences d'énergie $o-c1$, $o-c2$ et $o-o'$ de l'état électronique $D^1\Pi_u^+(v'=1)$ en fonction de J 59
Figure 6.5 Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $D^1\Pi_u^+(v'=0)$ en fonction de $J(J+1)$ 60
Figure 6.6 Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $D^1\Pi_u^+(v'=1)$ en fonction de $J(J+1)$ 60
Figure 6.7 Λ-doubling observé en fonction de $J(J+1)$ pour $D^1\Pi_u^+(v'=0)$ 60
Figure 6.8 Λ-doubling observé en fonction de $J(J+1)$ pour $D^1\Pi_u^+(v'=1)$ 60
Figure 6.9 Différences d'énergie $o-c1$, $o-c2$ et $o-o'$ de l'état électronique $B'^1\Sigma_u^+(v'=0)$ en fonction de J. 63
Figure 6.10 Différences d'énergie $o-c1$, $o-c2$ et $o-o'$ de l'état électronique $B'^1\Sigma_u^+(v'=1)$ en fonction de J. 63
Figure 6.11 Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $B'^1\Sigma_u^+(v'=2)$ en fonction de $J(J+1)$ 64
Figure 6.12 Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $B'^1\Sigma_u^+(v'=5)$ en fonction de $J(J+1)$ 64
Figure 6.13 Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $B'^1\Sigma_u^+(v'=7)$ en fonction de $J(J+1)$ 64
Figure 6.14 Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $B'^1\Sigma_u^+(v'=8)$ en fonction de $J(J+1)$ 64
Figure 6.15 Variation de l'intervalle d'énergie vibrationnelle $\Delta G(v+1/2)$ de l'état $B'^1\Sigma_u^+(J=0)$ en fonction de v' 65
Figure 6.16 Différence d'énergie $o-c1$, $o-o2$ et $o-o'$ de l'état électronique $C^1\Pi_u^+(v'=0)$ en fonction de J. 67
Figure 6.17 Différence d'énergie $o-c1$, $o-o2$ et $o-o'$ de l'état électronique $C^1\Pi_u^+(v'=1)$ en fonction de J. 67
Figure 6.18 Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $C^1\Pi_u^+(v'=0)$ en fonction de $J(J+1)$. 67
Figure 6.19 Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $C^1\Pi_u^+(v'=1)$ en fonction de $J(J+1)$. 67
Figure 6.20 Λ-doubling observé en fonction de $J(J+1)$ pour $C^1\Pi_u^+(v'=0)$. 68
Figure 6.21 Λ-doubling observé en fonction de $J(J+1)$ pour $C^1\Pi_u^+(v'=1)$. 68
Figure 6.22 Λ-doubling observé en fonction de $J(J+1)$ pour $C^1\Pi_u^+(v'=2)$. 68
Figure 6.23 Λ-doubling observé en fonction de $J(J+1)$ pour $C^1\Pi_u^+(v'=3)$. 68
Figure 6.24 Différence d'énergie $o-c1$, $o-c2$ et $o-o'$ de l'état électronique $B^1\Sigma_u^+(v'=10)$ en fonction de J 70
Figure 6.25 Différence d'énergie $o-c1$, $o-c2$ et $o-o'$ de l'état électronique $B^1\Sigma_u^+(v'=17)$ en fonction de J 70
Figure 6.26 Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $B^1\Sigma_u^+(v'=26)$ en fonction de J 70
Figure 6.27 Variation de l'énergie observée et de l'énergie calculée (Fit) de l'état électronique $B^1\Sigma_u^+(v'=28)$ en fonction de J 70

Figure 6.28 Variation de l'intervalle d'énergie vibrationnelle $\Delta G(v+1/2)$ de l'état $B^1\Sigma_u^+(J = 0)$ en fonction de v' . . . 71
Figure 6.29 Diagramme des niveaux d'énergie ro-vibrationnels observés pour les états électroniques $B'^1\Sigma_u^+$ (cercle ouvert) et $D^1\Pi_u^+$ (cercle fermé) en fonction de $J(J+1)$. Les perturbations locales importantes sont entourées par un cercle rouge. . . . 72
Figure 6.30 Diagramme des niveaux d'énergie ro-vibrationnels observés pour les états électroniques $B^1\Sigma_u^+$ (cercle ouvert) et $C^1\Pi_u^+$ (cercle fermé) en fonction de $J(J+1)$. Les perturbations locales importantes sont entourées par un cercle rouge. . . . 73
Figure 6.31 Mise en évidence des perturbations entre deux bandes à partir de la variation de la probabilité de transition en fonction de J" . . . 74
Figure 6.32 Mise en évidence des perturbations entre deux bandes à partir de la variation de la probabilité de transition en fonction de J" . . . 74
Figure 6.33 (a) Photo du spectre de la molécule D_2 enregistré sur une plaque photographique dans la région spectrale 840-900 Å. (b) Photo du spectre de la molécule D_2 enregistré sur l'écran phosphore dans la même region spectrale. 77
Figure 6.34 Les intensité des raies moléculaire de D_2 identifiées sur le détecteur écran phosphore photostimulable et sur une plaque photo Kodak SWR. . . . 78
Figure 6.35 Détermination des intensités des raies mélangées à partir de leurs profils. 1 pixel = 25 μm sur la plaque, ce qui correspond à 6.25 m Å en longueur d'onde. . . . 79

Figure 7.1 Schéma d'ionisation à deux photons (1XUV+1UV). . . . 84
Figure 7.2 (a) : Spectre d'ionisation 1 XUV +1 UV, (b) : Enregistrement simultané du spectre d'absorption saturée de la molécule I_2. La raie marquée par un astérix est la composante hyperfine "t" de la raie P(52) de la bande B-X(11-2) de I_2 à 16546.92662 cm^{-1}. (c) : L'enregistrement simultané des franges de l'étalonnage. . . . 84
Figure 7.3 Schéma des différentes parties du laser XVU du centre laser LCVU d'Amsterdam . . . 85
Figure 7.4 Différentes composantes du laser à colorant en anneau. . . . 85
Figure 7.5 Photo du laser à colorant en anneau 380 D Spectra Physics de LCVU. . . . 86
Figure 7.6 Formule chimique du colorant Rhodamine B. . . . 86
Figure 7.7 Spectre de fluorescence (visible) du colorant Rhodamine B. . . . 86
Figure 7.8 Photo de l'amplificateur à colorant pulsé (PDA) de LCVU. . . . 87
Figure 7.9 Enregistrement simultané du signal de l'ion moléculaire H_2^+ et de l'ion atomique H^+. La première figure représente l'enregistrement de deux signaux de l'ion moleculaire H_2^+ correspondant à deux raies, la deuxième figure represente l'enregistrement du signal de l'ion atomique H^+. . . . 89
Figure 7.10 Photo du dispositif expérimental de LCVU pour la génération de la sixième harmonique et la photo-ionisation des molécules. . . . 90

Figure 8.1 Variation de l'amplitude du signal de l'ion moléculaire (à gauche en unité arbitraire) et de la largeur de la raie (à droite en MHz) en fonction du temps de retard introduit entre le faisceau moléculaire et les faisceaux UV et XUV. 93
Figure 8.2 Principe de combinaison entre les raies R(1) et P(3) des bandes de Lyman et de Werner de la molécule D_2. . . . 93
Figure 8.3 Principe de combinaison entre les raies R(0) et P(2) des bandes de Lyman et de Werner de la molécule D_2. . . . 95

Figure 8.4 Principe de combinaison entre les raies R(0) et P(2) des bandes de Lyman et de Werner de la molécule HD. 95
Figure 8.5 Différence entre nos mesures expérimentales de longueurs d'onde des raies des bandes de Lyman et Werner avec les anciennes données (57) pour la molécule D_2. 96
Figure 8.6 Différence entre nos mesures expérimentales de longueurs d'onde des raies des bandes de Lyman et Werner avec les anciennes données (57) pour la molécule HD. 96

Figure 9.1 Variation de la longueur d'onde en fonction du rapport des masses m_p/m_e : détermination de la pente $d\lambda_i/d\mu$ pour la bande de Lyman (L(v'-v")) de la molécule H_2. 110
Figure 9.2 Variation de la longueur d'onde en fonction du rapport des masses m_p/m_e : détermination de la pente $d\lambda_i/d\mu$ pour la bande de Lyman (L(v'-v")) et de Werner (W(v'-v")) la molécule HD. 111
Figure 9.3 Variation du coefficient de sensibilité K_i de chaque raie des bandes de Lyman et de Werner de H_2 en fonction de la longueur d'onde λ_0 112
Figure 9.4 Variation du coefficient de sensibilité K_i de chaque raie des bandes de Lyman et de Werner de HD en fonction de la longueur d'onde λ_0 112
Figure 9.5 Variation du coefficient de sensibilité K_i de la raie R(0) dans les bandes de Lyman de H_2 en fonction du nombre vibrationnel v' de l'état excité B : l'effet des couplages non adiabatiques et des corrections adiabatiques sur la valeur du coefficient K_i. 113
Figure 9.6 Variation du coefficient de sensibilité K_i de la raie R(1) dans les bandes de Werner de HD en fonction du nombre vibrationnel v' de l'état excité C : l'effet des couplages non adiabatiques et des corrections adiabatiques sur la valeur du coefficient K_i. 113
Figure 9.7 Ajustement des valeurs du déplacement vers le rouge réduit ξ comme fonction linéaire des coefficients de sensibilité K_i. Cercles fermés : données du système de quasar Q 0347-383, $z = 3.0248970(5)$. Cercles ouverts : données du système de quasar Q0405-443, $z = 2.594732\ 5(4)$. L'interpolation pondérée est donné par le trait plein, et l'interpolation non pondérée est donnée par le trait en pointillés (124). 115

Figure 10.1 Les naines blanches DA observée par IUE (159). 126
Figure 10.2 La différence de potentiel ΔV(R) en cm^{-1} et le moment de transition correspondant M(R) entre les états électroniques $B''\overline{B}^1\Sigma_u^+ \rightleftarrows X^1\Sigma_u^+$, responsables du satellite Lymanβ. 127
Figure 10.3 Convergence de la section efficace σ de transition radiative en fonction du moment cinétique J pour une énergies $\epsilon_i = 0.06$ a.u. et une longueur d'onde $\lambda = 1120$ Å. 129
Figure 10.4 Convergence de la section efficace σ de transition radiative en fonction de l'énergie ϵ_i pour une valeur de $J = 10000$ et une longueur d'onde $\lambda = 1150$ Å. 129
Figure 10.5 Variation de la contribution d'états libres-libres, au coefficient d'absorption du satellite de la Lymanβ, en fonction de la température. 130
Figure 10.6 Conparaison entres la contribution des transitions libres-libres (en rouge) et des transitions libres-liées (en noir) au coefficient d'absorption pour diverses températures. 131
Figure 10.7 Variation du coefficient d'absorption total du satellite de la Lymanβ en fonction de la température. 132

Figure A.1 Variation des courbes de potentiels $1^2\Sigma$ et $2^2\Sigma$ de l'ion moléculaire NH^{3+} en fonctions de R dans la représentation adiabatique et la représentation diabatique. Un agrandissement de la région du croisement évité est donné sur cette figure. 148

Figure A.2 Variation du couplage radial entre les courbes de potentiels $1^2\Sigma$ et $2^2\Sigma$ de l'ion moléculaire NH^{3+} en fonctions de R dans la représentation adiabatique et la représentation diabatique.. 148

Liste des tableaux

Table 2.1 Comparaison des énergies ro-vibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $B^1\Sigma_u^+$ de la molécule H_2, obtenues dans l'approximation de Born-Oppenheimer, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=0. 15

Table 2.2 Comparaison des énergies ro-vibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $C^1\Pi_u$ de la molécule H_2, obtenues dans l'approximation de Born-Oppenheimer, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=1. 15

Table 2.3 Comparaison des énergies ro-vibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $B^1\Sigma_u^+$ de la molécule H_2, obtenus en tenant en compte du couplage radial, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=0. 16

Table 2.4 Comparaison des énergies rovibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $C^1\Pi_u$ de la molécule H_2, obtenues en tenant compte du couplage radial, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=1. 16

Table 2.5 Comparaison des énergies ro-vibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $B^1\Sigma_u^+$ de la molécule H_2, obtenues avec le couplage rotationel, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=1. 17

Table 2.6 Comparaison des énergies rovibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $C^1\Pi_u^+$ de la molécule H_2, obtenues avec le couplage rotationnel, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=1. 17

Table 2.7 Comparaison des énergies ro-vibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $B^1\Sigma_u^+$ de la molécule H_2, obtenues en incluant les corrections adiabatiques, avec les valeurs expérimentales (26) pour J=0. 18

Table 2.8 Comparaison des énergies rovibrationnelles E_{cal} (cm^{-1}) de l'état $C^1\Pi_u^+$ de la molécule H_2, obtenues en incluant les corrections adiabatiques, avec les valeurs expérimentales (26) pour $J = 1$. 18

Table 2.9 Les énergies ro-vibrationelles et les pourcentages de caractères électroniques de la molécule H_2, obtenus par la résolution du système d'équations couplées pour les états $(B^1\Sigma_u^+, B'\Sigma_u^+, C^1\Pi_u^+, D^1\Pi_u^+)$ pour $J = 1$. 20

Table 2.10 Les énergies ro-vibrationelles et les pourcentages de caractères électroniques de la molécule H_2, obtenus lors de la résolution du système d'équations couplées pour les états $C^1\Pi_u^-$ et $D^1\Pi_u^-$ pour $J = 1$.Le symbole * désigne les énergies libres de l'état électronique $C^1\Pi_u^-$ 21

Table 3.1 Les données *Ab initio* utilisées dans nos calculs théoriques. 32

Table 3.2 Les énergies ro-vibrationelles et les pourcentages de caractère des états électroniques de la molécule HD, obtenus par la résolution du système d'équations couplées pour les états $(B^1\Sigma_u^+, B'\Sigma_u^+, EF^1\Sigma_g^+, C^1\Pi_u^+, D^1\Pi_u^+)$ pour $J = 1$. . . 33

Table 3.3 Nombres d'onde et probabilités de transition de l'état EF vers l'état fondamental X de la molecule HD. 34

Table 4.1 Différentes tailles de détecteur photostimulable 43

Table 6.1 Variation du pourcentage de mélange en fonction de J pour les niveaux d'énergie $B'(v' = 3)$ et $D(v' = 1)$ 74

Table 6.2 Intensités et probabilités de transition des raies appartenant aux bandes $D - X(1-1)$ et $B' - X(3-1)$. 77

Table 6.3 Comparaison entres les deux rapports T^{exp} et T^{theo} pour les deux bandes choisies. 79

Table 8.1 Le bilan des incertitudes sur la position des raies. 95
Table 8.2 Une raie de HD enregistrée. 96
Table 8.3 Une raie de D_2 enregistrée. 96
Table 8.4 Nombres d'onde et longueurs d'onde des raies mesurées de D_2. σ_0 est le nombre d'onde mesuré et λ la longueur d'onde associée. Δ_{o-h} est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et ceux de la référence (57). Δ_{o-m} est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et nos valeurs du spectrographe de 10 m de Meudon. $\sigma_o - \sigma_{cal}$ est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et nos prédictions théoriques. 97
Table 8.5 Nombres d'onde et longueurs d'onde des raies mesurées de HD.σ_0 est le nombre d'onde mesuré et λ la longueur d'onde associée. Δ_{o-h} est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et ceux de la référence (57). $\sigma_o - \sigma_{cal1}$ est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et nos prédictions théoriques sans tenir compte de la brisure de symétrie $g-u$. $\sigma_o - \sigma_{cal2}$ est la différence entre les nouveaux nombres d'onde et nos prédictions théoriques en tenant compte de la brisure de symétrie $g-u$. 98
Table 8.6 Comparaison entres les niveaux d'énergie (cm^{-1}) de la molécule D_2 obtenue par spectroscopie laser et par spectroscopie classique. 99

Table 9.1 Variation du rapport de masse proton-à-électron. 108
Table 9.2 Les coefficients de sensibilités de raies des bandes de Lyman " L" et de Werner "W" de H_2. 117
Table 9.3 Les coefficients de sensibilités de raies des bandes de Lyman " L" et de Werner "W" de HD. 122

Table D.1 Niveaux d'énergie expérimentales (cm^{-1}) de D_2 pour l'état $C^1\Pi_u^+$. La référence des énergies E est le niveau $X^1\Sigma_g^+(v=0, J=0)$. 184
Table D.2 Niveaux d'énergie expérimentales (cm^{-1}) de D_2 pour l'état $C^1\Pi_u^-$. La référence des énergies E est le niveau $X^1\Sigma_g^+(v=0, J=0)$. 187
Table D.3 Niveaux d'énergie expérimentales (cm^{-1}) de D_2 pour l'état $B^1\Sigma_u^+$. La référence des énergies E est le niveau $X^1\Sigma_g^+(v=0, J=0)$. 191

Table E.1 Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système $D^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. $v' = 0-3$. 195
Table E.2 Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système $D^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. $v' = 4-19$. 199
Table E.3 Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système $D'^1\Pi_u^- \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$. 206
Table E.4 Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système $B'^1\Sigma_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$.211
Table E.5 Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système $C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$.220
Table E.6 Nombres d'onde (cm^{-1}) et probabilités d'émission A (s^{-1}) du système $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ $(v' - v'')$.241