

# **Thèse en cotutelle**

**Pour obtenir le grade de Docteur délivré par**

**L'Université des Sciences et Technologies Lille1**

**Et**

**L'Université Libanaise**

**Ecole Doctorale des Sciences et Technologie**

**Spécialité : Sciences Physiques**

**Présentée et soutenue publiquement le 18 novembre 2015**

**EL ROMH Jamila**

**Spectroscopie Laser des isotopologues de la molécule d'ammoniac dans le  
proche infrarouge**

## **Membres de Jury**

M. Patrice Cacciani	Université Lille1	Directeur de thèse
Mme Fadia Taher	Université Libanaise	Directeur de thèse
M. Jean Vander Auwera	Université Libre de Bruxelles	Rapporteur
M. Farah Wehbeh	Université Saint Joseph	Rapporteur
M. Alain Campargue	Université Grenoble Alpes	Examineur
M. Michel Kazan	Université Américaine Beyrouth	Examineur



# Table des matières

<b>Table des matières</b>	<b>3</b>
<b>Table des figures</b>	<b>7</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>11</b>
<b>Introduction</b>	<b>13</b>
<b>1 Généralités sur la spectroscopie</b>	<b>17</b>
1.1 Introduction . . . . .	17
1.2 Spectroscopie . . . . .	18
1.2.1 Spectroscopie d'absorption . . . . .	18
1.2.1.1 Loi de Beer-Lambert . . . . .	19
1.2.1.2 Profils de raie . . . . .	24
1.2.2 Techniques spectroscopiques . . . . .	29
1.2.2.1 Spectroscopie Infrarouge . . . . .	30
1.2.2.2 Spectroscopie Infrarouge à Transformé de Fourier (IRTF) . . . . .	30
1.2.2.3 Spectroscopie d'absorption par diode accordable (TDLS) . . . . .	32

<b>2</b>	<b>Vibration et Rotation d'une molécule</b>	<b>35</b>
2.1	Modes propres de vibration . . . . .	35
2.1.1	Modes vibrationnels de $\text{NH}_3$ . . . . .	36
2.1.2	Bandes vibrationnelles . . . . .	37
2.2	Énergie rotationnelle . . . . .	38
2.3	Énergie vibrationnelle . . . . .	42
2.4	Énergie ro-vibrationnelle . . . . .	44
2.5	Symétrie de la molécule . . . . .	45
<b>3</b>	<b>La molécule d'ammoniac : état de l'art</b>	<b>61</b>
3.1	Introduction . . . . .	61
3.2	Une particularité : l'inversion . . . . .	62
3.3	Spectroscopie infrarouge . . . . .	64
<b>4</b>	<b>Techniques expérimentales</b>	<b>69</b>
4.1	Diode Laser à cavité étendue (ECDL) . . . . .	70
4.2	Interféromètre de Fabry-Perot . . . . .	75
4.3	Isolateur optique . . . . .	81
4.4	Cellules multi-passages . . . . .	82
	Cellule Herriott . . . . .	83
4.5	Le détecteur : une photo-diode . . . . .	86
<b>5</b>	<b>Analyse des données expérimentales</b>	<b>93</b>
5.1	Traitement du signal brut . . . . .	94
5.2	Calibration du spectre . . . . .	100
5.2.1	Calibration relative . . . . .	100
5.2.2	Calibration absolue . . . . .	103
5.3	Procédé d'ajustement du spectre . . . . .	107

<b>6 Résultats</b>	<b>113</b>
6.1 Spectres de $^{14}\text{NH}_3$ et $^{15}\text{NH}_3$ à plusieurs températures . . . . .	114
6.2 Distinction entre les 2 isotopologues . . . . .	118
6.3 Nombre d'onde, force de raie . . . . .	122
6.3.1 Nombre d'onde absolu de $^{14}\text{NH}_3$ . . . . .	124
6.3.2 Nombre d'onde absolu $^{15}\text{NH}_3$ . . . . .	129
6.3.3 Forces de raie à T=296 K pour $^{14}\text{NH}_3$ . . . . .	132
6.3.4 Forces de raie à T=296 K pour $^{15}\text{NH}_3$ . . . . .	135
6.4 Energie de l'état initial de chaque transition pour $^{14}\text{NH}_3$ . . . . .	141
6.5 Comparaison Expérience-Théorie . . . . .	151
6.5.1 Isotopologue $^{14}\text{NH}_3$ . . . . .	151
6.5.2 Isotopologue $^{15}\text{NH}_3$ . . . . .	152
6.6 Perspectives . . . . .	153
<b>A Etude théorique d'un dimère alcalin <math>\text{Rb}_2</math></b>	<b>157</b>
A.0.1 Cadre général . . . . .	158
Approximation de Born et Oppenheimer . . . . .	158
A.0.2 Méthodes utilisées pour les calculs d'énergies potentielles	159
Méthode Hartre-Fock . . . . .	159
Fonctions de bases atomiques . . . . .	160
Méthode de Pseudo-potentiel . . . . .	160
Méthodes de Post Hartree-Fock . . . . .	160
A.1 Energie potentielle de $\text{Rb}_2$ . . . . .	162
<b>Bibliographie</b>	<b>165</b>



# Table des figures

1.1	Loi de Beer Lambert. . . . .	19
1.2	Profils de raies. . . . .	28
1.3	Interferomètre de Michelson . . . . .	30
1.4	Exemple d'un Interférogramme . . . . .	31
1.5	Système de spectroscopie par diode accordable (TDLAS). . . . .	33
2.1	Modes vibrationnels de la molécule d'ammoniac. . . . .	37
2.2	Diagramme de niveaux d'énergie rotationnels pour une molécule diatomique. . . . .	41
2.3	Comparaison entre les courbes d'énergie potentielle correspondant à l'oscillateur harmonique (tracé vert) et anharmonique (tracé bleu) d'une molécule diatomique. L'énergie potentielle est présentée en fonction de la distance internucléaire $r$ . $D_e$ est la différence entre la limite de dissociation et le minimum du potentiel et $D_0$ constante de dissociation chimique correspond à la différence entre l'énergie de point zéro et la limite de dissociation. . . . .	44
2.4	Les composantes des opérations de symétrie de la molécule d'ammoniac. Les trois plans verticaux passent par l'axe de rotation principal $C_3$ , chaque plan contient un atome d'hydrogène. . . . .	49
3.1	Géométrie de molécule d'ammoniac. . . . .	61

3.2	Forme de potentiel de l'inversion de la molécule d'ammoniac. . .	63
3.3	Présentation des niveaux d'énergie de l'inversion de l'ammoniac.	64
3.4	Bandes vibrationnelles de l'isotopologue principal. . . . .	67
4.1	Montage expérimental . . . . .	70
4.2	Diode laser à cavité étendue. . . . .	71
4.3	Configuration de Littman-Metcalf. . . . .	72
4.4	Configuration Littrow . . . . .	73
4.5	Interféromètre de Fabry-Perot. . . . .	76
4.6	Transmittance de l'interféromètre de Fabry-Perot . . . . .	77
4.7	Exemple d'un spectre brut. . . . .	80
4.8	Pics de Fabry-Perot . . . . .	81
4.9	Isolateur optique. . . . .	82
4.10	Cellule multi-passage de type Herriott. . . . .	83
4.11	Un exemple de taches lumineuses formées sur chaque miroir. . .	84
4.12	Structure d'une photo-diode. . . . .	87
5.1	Un signal d'absorption brut. . . . .	94
5.2	Pointage de l'ensemble des raies d'absorption. . . . .	96
5.3	Extraction de la ligne de base. . . . .	96
5.4	Absorbance. . . . .	97
5.5	Ligne de base. . . . .	99
5.6	Exemple d'extraction incorrecte de la ligne de base. . . . .	99
5.7	Signal de l'étalon Fabry-Perot. . . . .	101
5.8	Signal Fabry-Perot linéarisé . . . . .	102
5.9	Le spectre de l'acétylène dans la gamme 6300-6800 $\text{cm}^{-1}$ . . . . .	104
5.10	Exemple de calibration absolue du spectre de $^{14}\text{NH}_3$ . . . . .	105



5.11 Un exemple de calibration d'un spectre de $^{15}\text{NH}_3$ par rapport au spectre de référence d'absorption de $^{14}\text{NH}_3$ . . . . .	106
5.12 Ajustement d'un spectre expérimental. . . . .	110
5.13 Signal parasite d'interférences. . . . .	111
5.14 Traitement des oscillations par trois fonctions sinus. . . . .	112
6.1 Spectres de $^{14}\text{NH}_3$ à 4 températures $T= 155 \text{ K}, 180 \text{ K}, 215 \text{ K}$ et $296 \text{ K}$ . . . . .	116
6.2 Spectre de $^{15}\text{NH}_3$ à 4 températures $150 \text{ K}, 180 \text{ K}, 220 \text{ K}$ et $296 \text{ K}$ . . . . .	117
6.3 Traitement utilisée pour extraire des spectres leur composantes $^{14}\text{NH}_3$ et $^{15}\text{NH}_3$ . . . . .	120
6.4 Evolution du spectre autour de la transition $6495.4769 \text{ cm}^{-1}$ en fonction de la température. . . . .	125
6.5 Dispersion des valeurs de $\sigma_{fit}$ pour les transitions de l'isotopologue $^{14}\text{NH}_3$ . . . . .	127
6.6 Différence $\sigma_{fit} - \sigma_{SUNG}$ pour l'isotopologue $^{14}\text{NH}_3$ . . . . .	128
6.7 Ecart-type pour les transitions non présentes dans Sung <i>et al</i> . . . . .	129
6.8 Différence $\sigma_{fit} - \sigma_{LX}$ pour l'isotopologue $^{15}\text{NH}_3$ . . . . .	131
6.9 Comparaison entre les intensités obtenues dans ce travail et celles de la liste Sung <i>et al</i> . . . . .	134
6.10 Spectres $\{15\}^*$ et $\{14\}^*$ dans la gamme $6448.2 - 6549.2 \text{ cm}^{-1}$ . . . . .	137
6.11 Analogue à la figure 6.10 dans la gamme $6448.2 - 6549.3 \text{ cm}^{-1}$ . . . . .	139
6.12 Forces de raie S pour les transitions de $^{15}\text{NH}_3$ . . . . .	141
6.13 Dépendance du rapport des intensités en fonction de la température. . . . .	144
6.14 Exemple de vérification des attributions de la liste SL. . . . .	147
6.15 Exemple de détermination de l'énergie des états initiaux. . . . .	148
6.16 Résultats obtenus sur une gamme à $20 \text{ cm}^{-1}$ entre $6490$ et $6510 \text{ cm}^{-1}$ . . . . .	149

6.17	Comparaison entre le spectre expérimental et le spectre calculé pour $^{15}\text{NH}_3$ sur l'ensemble de notre gamme. . . . .	153
6.18	Comparaison entre le spectre expérimental et le spectre calculé pour $^{15}\text{NH}_3$ dans la gamme $6436\text{-}6448\text{ cm}^{-1}$ . . . . .	154
6.19	Comparaison entre le spectre expérimental et le spectre calculé pour $^{15}\text{NH}_3$ dans la gamme $6400\text{-}6412\text{ cm}^{-1}$ . . . . .	155
A.1	Courbe d'énergie potentielle d'une molécule diatomique AB, où $E_d = D_e$ est l'énergie de dissociation. . . . .	159

# Liste des tableaux

2.1	Table de multiplication du groupe $D_{3h}$ .	53
2.2	Éléments conjugués de $\sigma'$ .	54
2.3	Table de multiplication simplifiée.	54
2.4	Table de caractères du groupe $D_{3h}$ .	56
2.5	Trace des matrices des opérations de symétries.	57
2.6	Caractères de la représentation d'une translation pour les opérations de symétrie de la molécule d'ammoniac.	58
2.7	Caractères de la représentation d'une rotation R de la molécule pour les opérations de symétrie	58
2.8	Caractères de la représentation décrivant les déplacements possibles de tous les atomes.	60
6.1	Nombres de mesures pour l'isotopologue $^{14}\text{NH}_3$ dans la gamme 1520-1570 nm	115
6.2	Nombres de mesures pour l'isotopologue $^{15}\text{NH}_3$ dans la gamme 1520-1540 nm	115
6.3	Nombres de mesures pour l'isotopologue $^{15}\text{NH}_3$ dans la gamme 1520-1570 nm à T=296K	116
6.4	Exemple d'analyse autour de $6497\text{ cm}^{-1}$ à T=296 K sans et avec contrainte	118

6.5	Exemple d'analyse de 2 transitions de $^{15}\text{NH}_3$ au voisinage de 6577 $\text{cm}^{-1}$ . . . . .	122
6.6	Détail d'une ligne du fichier . . . . .	123
6.7	Valeurs d'absorbance en fonction de la température pour 3 transitions autour de 6495.47 $\text{cm}^{-1}$ . . . . .	126
6.8	Extrait du tableau de comparaison $\sigma_{fit}$ avec $\sigma_{Sung}$ pour l'isotopologue $^{14}\text{NH}_3$ . . . . .	130
6.9	Forces de raies $^{14}\text{NH}_3$ . Difference entre notre travail et les données de Sung <i>et al.</i> . . . . .	136
6.10	Transitions présentes dans la liste Lins <i>et al.</i> . . . . .	140
6.11	Extrait des informations obtenues sur les valeurs de l'état initial des transitions pour l'isotopologue $^{14}\text{NH}_3$ . . . . .	150

# Introduction

Depuis la révolution industrielle la composition chimique de l'atmosphère a changé à un rythme sans précédent. L'augmentation notable du taux des gaz polluants dans l'atmosphère tels que  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NO}_2$  est une des raisons principales du réchauffement climatique de la planète [1]. Les activités humaines tels que l'utilisation de combustibles fossiles et les changements d'affectation de l'agriculture, sont à l'origine de l'augmentation du taux de gaz polluants et ont des conséquences néfastes sur l'environnement : augmentation des températures de l'atmosphère et des océans, élévation de niveaux des mers, événements climatiques extrêmes.

Une grande partie des molécules constituant les atmosphères planétaires et cométaires de notre système solaire peut être identifiée grâce aux observations atmosphériques et astronomiques complétées par des études spectroscopiques réalisées en laboratoires. L'analyse de notre atmosphère a pour but de surveiller l'environnement et de contrôler les émissions de gaz polluants.

Dans le domaine infrarouge, la spectroscopie laser est très intéressante car il existe plusieurs gaz polluants qui présentent de fortes raies d'absorptions tels que  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{HF}$ , etc. Dans cette région spectrale existent plusieurs types de sources lasers à émission mono-fréquence fonctionnant en continu à température ambiante, des détecteurs commerciaux performants et une optique adéquate qui est également à faible coût.

Les progrès des technologies à base semi-conducteur servent à l'apparition de plusieurs sources lasers telles que les diodes Lasers type DFB (Distribute Feed-Back) à cavité verticale émettant par la surface [2], les VCSELs ( Vertical Cavity Surface Emitting Laser) à émission verticale en cavité externe [3] et les VECSELs ( Vertical External Cavity Diode Lasers) en cavité externe [4] et les ECDLs (External Cavity Diode Lasers) qui sont des diodes lasers à cavité étendue. Celles-ci présentent des caractéristiques favorables pour le développement d'appareils portables pour l'analyse de traces gazeuses[5] et ainsi dans le développement de nouvelles méthodes de spectroscopie d'absorption à haute sensibilité.

Dans mon travail de thèse, l'intérêt est porté sur l'étude spectroscopie de la molécule d'ammoniac pour ces deux isotopologues ( $^{14}\text{NH}_3$ ,  $^{15}\text{NH}_3$ ) dans le domaine infrarouge. Notre étude s'est placée dans le cadre d'une étude de la conversion de spin nucléaire de la molécule d'ammoniac et de la nécessité de connaître pour chaque transition sa fonction de spin nucléaire [6]. Cette connaissance permet de suivre la population de différents isomères de spin par l'enregistrement des spectres de la molécule.

Dans le premier chapitre, nous présentons les bases de la spectroscopie utile au développement des instruments permettant la détection et l'étude des composés gazeux dans l'atmosphère. Puis nous détaillons les techniques spectroscopiques d'absorptions qui permettent de déterminer la composition chimique et la structure d'une telle molécule. Nous intéressons spécifiquement aux techniques utilisés dans le domaine infrarouge : la spectroscopie d'absorption à l'aide d'un système laser accordable et la spectroscopie par transformée de Fourier.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons les notions théoriques concernant la symétrie moléculaire et les modes de vibration. Nous décrirons les types de mouvements effectués par les atomes constituant une molécule notamment l'ammoniac. Ainsi nous présentons l'énergie du mouvement rovibrationnel qui nous

intéresse dans notre domaine spectral. De plus, nous décrivons les propriétés de symétrie des molécules qui permettent de prédire les caractères essentiels des spectres vibrationnels en se basant sur la théorie de groupe.

Le troisième chapitre présente l'intérêt de l'étude spectroscopique de l'ammoniac en indiquant les études bibliographiques concernant cette molécule.

Le quatrième chapitre détaille les expériences utilisées pour l'ensemble de ce travail de thèse. Nous allons présenter les sources lasers, l'étalon de Fabry-Perot qui sert à la calibration absolue, la cellule d'absorption de type Herriott et la photodiode utilisée pour la détection de signaux.

Dans le chapitre cinq, nous décrivons l'analyse de données expérimentales effectuée à l'aide de logiciels spécifiques (Labview, Fityk). Puis nous détaillons l'estimation de la ligne de base, l'obtention du signal d'absorption, la calibration relative des spectres grâce aux franges de Fabry-Perot, son ajustement par une somme de profils de voigt et la calibration absolue en utilisant une cellule de référence.

Le chapitre six présente les résultats obtenus à la fin de notre travail. Nous présentons l'évolution des spectres de l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$  et  $^{15}\text{NH}_3$  dans la gamme 1520-1570 nm ( 6367-6578  $\text{cm}^{-1}$ ) à plusieurs températures. Ensuite, nous décrivons notre méthode qui consiste à étudier l'évolution de l'intensité d'une transition en fonction de la température pour déduire l'énergie de l'état de départ. De plus nous décrivons la procédure utilisée pour attribuer les transitions à l'un ou l'autre des isotopologues. Ensuite, nous montrerons la liste des transitions (position, intensité et énergie de l'état de départ) obtenue pour l'isotopologue principal et une autre liste à température ambiante pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  comportant la position et l'intensité de chaque transition.

Le dernier chapitre présente les conclusions tirées de ce travail de thèse. Ensuite, nous présentons les étapes qui vont suivre afin d'attribuer toutes les transitions

de chaque isotopologue de la molécule d'ammoniac dans la gamme 1490-1570 nm.

Parallèlement à l'étude expérimentale des isotopologues de la molécule d'ammoniac, nous avons entrepris une étude théorique du dimère alcalin  $\text{Rb}_2$ , présentée dans l'annexe A. Ce travail se place dans le cadre d'une étude possible de la conversion de spin nucléaire dans les dimères alcalins. Elle permet de prédire la structure des états électroniques de haute énergie et de l'état fondamental de la molécule  $\text{Rb}_2$  afin d'interpréter son spectre d'émission. Nous décrivons dans cette annexe les méthodes ab-initio utilisées pour calculer les courbes d'énergie potentielle de la molécule du Rubidium. Nous présentons les résultats préliminaires de notre calcul.



# Généralités sur la spectroscopie

## 1.1 Introduction

La planète subit des transformations considérables sur sa surface ainsi dans son atmosphère. Son climat dépend de l'énergie provenant du soleil, de la teneur en gaz à effet de serre et en aérosols de l'atmosphère qui conditionnent la quantité d'énergie solaire qui sera absorbée ou réfléchi dans l'espace [7]. Les concentrations atmosphériques de gaz à effet de serre tels que le dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ), le méthane ( $\text{CH}_4$ ) et l'oxyde nitreux ( $\text{NO}_2$ ) ont crû de façon notable depuis le début de la révolution industrielle. De même il existe un certain nombre de polluants atmosphériques ( $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{HF}$ ) qui ont vu leur quantité augmenter et dont on souhaite pouvoir surveiller la concentration. La spectroscopie est une voie explorée pour y parvenir.

En effet, chaque molécule gazeuse portant sa propre signature spectrale, une détection optique est bien adaptée pour l'identification de chaque espèce. Les méthodes optiques sont caractérisées par une grande sélectivité. En outre elles possèdent une grande sensibilité. La spectroscopie s'étend sur tous les domaines d'énergie : spectroscopie nucléaire (Gamma-X), électronique (X-UV-Visible),

atomique (UV-Visible) et moléculaire (Visible-IR).

La spectroscopie d'absorption sera détaillée dans ce chapitre avec ses techniques de mesure. Nous allons notamment y présenter deux techniques spectroscopiques qui sont utilisées généralement pour l'étude des molécules en phase gazeuse en infrarouge : la spectroscopie d'absorption à l'aide d'un système laser accordable et la spectroscopie par transformée de Fourier.

## 1.2 Spectroscopie

La spectroscopie ou spectrométrie est l'étude expérimentale de l'interaction de la matière et de la lumière en fonction de son énergie. Ce terme s'applique en particulier à la sélection de la lumière émise (spectrométrie d'émission) ou absorbée (spectrométrie d'absorption) par l'objet à étudier. La spectroscopie est très répandue dans les domaines de l'astronomie, la biophysique, la physique atomique, la physique nucléaire, etc.

La spectroscopie laser est considérée comme un moyen performant pour la détection et l'étude des atomes et des molécules, elle est particulièrement intéressante dans le domaine de l'infrarouge. Dans cette gamme, les principaux polluants atmosphériques ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{HF}$ ) y présentent des fortes raies d'absorption.

### 1.2.1 Spectroscopie d'absorption

La spectroscopie d'absorption est basée sur l'absorption par un milieu (gazeux dans notre travail) du rayonnement émis par une source lumineuse. L'absorption de la lumière à la longueur d'onde de la lumière est spécifique de la molécule étudiée.

La spectroscopie d'absorption est exploitée pour quantifier la concentration d'atomes et de molécules dans les milieux atmosphérique et astrophysique.

### 1.2.1.1 Loi de Beer-Lambert

Les techniques de mesures spectroscopiques et les méthodes d'analyse de traces de gaz dans l'atmosphère et dans le laboratoire sont basées sur la loi de Beer-Lambert. (ou Beer-Lambert-Bouguer)[8].

Elle relie l'absorption de la lumière traversant un milieu donné à la concentration des espèces présentes. Un faisceau lumineux monochromatique de longueur d'onde  $\lambda$ , de fréquence  $\nu$  et d'intensité  $I_0$  traverse un milieu homogène et isotrope de longueur  $L$  (voir Figure 1.1). L'intensité transmise après la traversée du milieu est  $I_t$ .

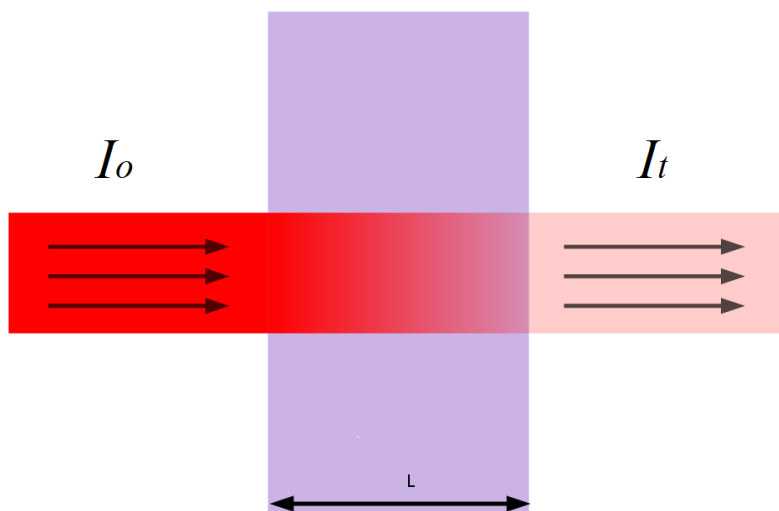


FIGURE 1.1 – La Loi de Beer Lambert exprime l'atténuation de l'intensité incidente de la lumière traversant un milieu de longueur  $L$ .

L'atténuation de la lumière est exprimée par l'équation suivante :

$$I_t(\nu) = I_0(\nu) \exp(-\alpha(\nu)L) \quad (1.1)$$

la fréquence  $\nu$  est exprimée en Hz, on utilise aussi le nombre d'onde  $\sigma = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$  grandeur exprimée en  $\text{cm}^{-1}$ , où  $\lambda$  est exprimée en cm. L'équation 1.1 se réécrit :

$$I_t(\sigma) = I_0(\sigma) \exp(-\alpha(\sigma)L) \quad (1.2)$$

$\alpha(\sigma)$  est le coefficient d'absorption exprimée en  $\text{cm}^{-1}$ . Comme nous allons le voir, l'absorption se présente sous la forme d'un profil dépendant des conditions expérimentales comme la pression et la température. La donnée pertinente que nous allons mesurer est l'intégrale de l'absorption en fonction du nombre d'onde. L'intégration de  $\alpha(\sigma)$  sur le profil de la transition moléculaire s'appelle le coefficient d'absorption intégré et se mesure en  $\text{cm}^{-2}$  :

$$\alpha = \int \alpha(\sigma) d\sigma$$

Cette mesure est caractéristique d'une transition de la molécule qui absorbe le rayonnement et passe de l'état initial  $a$  à l'état final  $b$ . La fréquence centrale du profil est  $\nu_{ab} = (E_b - E_a)/h$ . Le coefficient  $\alpha_{ab}$  dépendant linéairement du nombre de molécules traversées, on définit la force de raie  $S$  de la transition  $ab$  par :

$$\alpha_{ab} = S_{ab}N \quad (1.3)$$

$N$  étant est la densité volumique de molécules exprimée en  $\text{cm}^{-3}$ .

Expérimentalement on mesure l'intensité  $I_t(\sigma)$  transmise à travers l'échantillon de longueur  $L$  puis on considère  $I_0(\sigma)$  intensité avant la traversée du milieu en fonction du nombre d'ondes  $\sigma$ . Cette intensité  $I_0$  correspond à ce que l'on appelle la ligne de base. La transition étant élargie par effet Doppler (profil gaussien) ou par collision (profil lorentzien), l'intégration sur le profil de raie

donne :

$$\alpha_{ab} = \frac{1}{L} \int_{ab} -\ln\left(\frac{I_t(\nu)}{I_0(\nu)}\right) d\nu$$

puis

$$S_{ab} = \frac{\alpha_{ab}}{N} = \frac{1}{NL} \int_{ab} -\ln\left(\frac{I_t(\nu)}{I_0(\nu)}\right) d\nu \quad (1.4)$$

Grâce à la théorie de l'interaction matière rayonnement, on peut calculer le coefficient d'absorption  $\alpha_{ab}$  et la force de raie correspondante  $S_{ab}$ . Leurs expressions respectives sont :

$$\alpha_{ab} = \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sigma_{ab} |\mu_{ab}|^2 (N_a - N_b) \quad (1.5)$$

et

$$S_{ab} = \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sigma_{ab} |\mu_{ab}|^2 \frac{(N_a - N_b)}{N} \quad (1.6)$$

où  $\mu_{ab}$  est l'élément de matrice du moment dipolaire entre l'état initial  $a$  et l'état final  $b$  et  $\sigma_{ab}$  le nombre d'ondes de la transition de  $a$  vers  $b$ .

La force de raie  $S_{ab}$  ne dépend que des propriétés internes à la molécule et sa dépendance en température est liée à la différence de fraction de population de l'état initial et de l'état final. On peut encore simplifier cette expression 1.5 si la transition est loin de la saturation. On peut alors négliger  $N_b$  devant  $N_a$  et exprimer celle-ci en fonction de la fonction de partition  $Q(T)$  à l'équilibre thermique à la température  $T$  :

$$Q(T) = \sum_a g_a \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (1.7)$$

La population de l'état  $a$  s'écrit :

$$N_a(T) = N \frac{g_a \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right)}{Q(T)} \quad (1.8)$$

Et finalement on peut écrire la force de raie  $S_{ab}$  en isolant sa dépendance spécifique en fonction de la température

$$S_{ab}(T) = \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sigma_{ab} |\mu_{ab}|^2 \times \frac{g_a \exp(-\frac{E_a}{kT})}{Q(T)} \quad (1.9)$$

Cette expression permet d'écrire la force de raie  $S_{ab}(T)$  en fonction de celle obtenue pour une température de référence  $T_0$ .

$$S_{ab}(T) = S_{ab}(T_0) \times \frac{Q(T_0)}{Q(T)} \exp(-E_a(\frac{1}{kT} - \frac{1}{kT_0})) \quad (1.10)$$

Pour les besoins de l'étude de l'atmosphère, ces données sont collectées pour un grand nombre de molécules à  $T_0=296K$  dans des bases de données tels que HITRAN ou GEISA.

L'unité dans laquelle on exprime la force de raie se déduit de la formule 1.9, la densité de molécules étant exprimée en nombre de molécules par  $cm^3$ ,  $S$  s'exprime en  $[cm^{-2}/(mol/cm^3)]$  soit en  $[cm/mol]$ . Cette unité est celle utilisée dans les bases de données.

Dans l'expérience on mesure la pression en atmosphère en mbar ou en Torr et la loi des gaz parfaits est exprimée en unités du système international, soit le Pascal (Pa) pour la pression et en molécules par  $m^3$  pour le nombre de molécules par unité de volume. Il vient :

$$\begin{aligned} N \left[ \frac{mol}{cm^3} \right] &= 10^{-6} N \left[ \frac{mol}{m^3} \right] = 10^{-6} \frac{P [Pa]}{kT} \\ &= 10^{-6} 1.01325 \cdot 10^5 \frac{P [atm]}{kT} = \left( \frac{10^{-6} \cdot 1.01325 \cdot 10^5}{1.3806 \cdot 10^{-23}} \right) \frac{P [atm]}{T} \\ &= 7.339 \cdot 10^{21} \frac{P [atm]}{T} \end{aligned}$$

On obtient pour une pression de 1 atm

$N=2.6867805 \times 10^{19}$  mol  $\text{cm}^{-3}$  à  $T=273.15\text{K}$  (nombre de Loschmidt)

et  $N=2.479 \times 10^{19}$  mol  $\text{cm}^{-3}$  à la température ambiante de  $T=296\text{K}$ .

Écrivons enfin la conversion en mbar qui nous sera utile dans nos applications numériques :

$$N \left[ \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3} \right] = 7.339 \cdot 10^{18} \frac{P [\text{mbar}]}{T}$$

Une dernière remarque, utile d'un point de vue expérimental, porte sur l'incertitude sur la mesure de l'absorbance et la force de raie. La mesure d'intensité de rayonnement est accompagné d'un bruit dû [9] à la source de rayonnement, aux fluctuations du nombre d'espèces absorbantes, au bruit du détecteur et de la chaîne d'amplification. Le bruit sur la mesure des intensités va se répercuter sur la valeur de  $\alpha$  et de  $S$ . Si les mesures d'intensité  $I_0$  et  $I_t$  sont indépendantes, il vient :

$$\Delta\alpha \propto \Delta\left(-\ln\left(\frac{I_t(\nu)}{I_0(\nu)}\right)\right) \propto \sqrt{\left(\frac{\Delta I_t}{I_t}\right)^2 + \left(\frac{\Delta I_0}{I_0}\right)^2}$$

Pour des absorptions faibles, ( $I_t \approx I_0$ ) l'incertitude dépend du rapport signal à bruit, mais dans le cas de fortes absorptions ( $I_t \approx 0$ ), l'influence du terme  $\frac{\Delta I_t}{I_t}$  devient prépondérante, c'est pourquoi il est préférable d'éviter les absorbances très fortes. Expérimentalement, on travaille fréquemment avec plusieurs conditions expérimentales, à faible absorbance où les raies les plus intenses sont mesurées, puis avec des absorbances plus fortes où l'on s'intéresse alors aux raies moyennes ou plus faibles. On retrouve cela dans les expériences utilisant la spectroscopie à transformée de Fourier ou de spectroscopie laser.

### 1.2.1.2 Profils de raie

L'interaction lumière- matière pour une molécule se traduit par le passage d'un état énergétique à un autre. Cette transition est limitée dans le temps (temps d'interaction, temps entre collisions ou durée de vie finie de l'état supérieur) il s'en suit que la forme de la raie d'absorption s'étale sur une largeur spectrale non nulle, on parle d'un élargissement homogène car il est propre à la molécule.

L'écart d'énergie entre les deux niveaux définit la fréquence centrale  $\nu_0$  mais la vitesse de la molécule par rapport au rayonnement lui fait percevoir une fréquence différente, c'est l'Effet Doppler. On parle alors d'un élargissement inhomogène car les molécules appartiennent à des classes de vitesse différentes qui leur font percevoir différemment leur environnement.

La raie d'absorption possède donc un profil  $g(\nu - \nu_0)$  dont la forme va dépendre de plusieurs phénomènes que nous allons décrire : la probabilité d'émission spontanée, l'élargissement collisionnel et l'effet Doppler [10].

Ce profil est normalisé selon la condition suivante :

$$\int_0^{\infty} g(\nu - \nu_0) d\nu = 1 \quad (1.11)$$

#### Largeur naturelle :

Cette largeur est liée au temps durant lequel la molécule peut rester dans un état excité. En physique moléculaire, les processus dominants sont l'émission spontanée (la molécule retombe dans les états inférieurs permis par les règles de sélection) ou la dissociation (le niveau est couplé à une voie de dissociation de la molécule).

Dans le cas de notre étude sur l'ammoniac, cette largeur est très faible et sera considérée comme négligeable devant l'effet Doppler ou l'élargissement collisionnel.



Profil collisionnel :

L'élargissement collisionnel est lié aux collisions entre les particules, qui provoquent une interruption dans le couplage du rayonnement avec la molécule. Lors d'une collision, la molécule peut changer son état interne, et/ou changer de vitesse, et elle ne se trouve plus en résonance avec la radiation à la fréquence  $\nu_0$ . Dans une description classique, l'émission par la molécule d'un train d'ondes se traduit par une décroissance exponentielle dans le temps de son énergie avec une constante de temps  $\tau$ . Dans l'espace des fréquences, la transformée de Fourier de l'exponentielle décroissante est une fonction de Lorentz de largeur  $\Delta\nu_L = 1/2\pi\tau$  avec un profil normalisé que l'on peut écrire sous la forme :

$$g_L(\nu - \nu_0) = \frac{1}{\pi} \left( \frac{\Delta\nu_L}{(\nu_0 - \nu)^2 + (\Delta\nu_L)^2} \right) \quad (1.12)$$

Plus la densité de particules augmente, plus le temps moyen entre deux collisions diminue. En première approximation, la largeur collisionnelle dépend linéairement de la pression  $p$ . Le coefficient de proportionnalité  $\gamma$  reporté dans les bases de données [11] dépend aussi de la température  $T$ . On écrit :

$$\Delta\nu_L = 2p\gamma(T) \quad (1.13)$$

Le facteur 2 s'explique par le fait  $\gamma p$  est une mesure de la demi-largeur à mi-hauteur (HWHM Half Width at Half Maximum).  $\gamma(T)$  est reporté en  $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ . Une valeur typique pour l'ammoniac à  $5000\text{cm}^{-1}$  [11] est de  $0.5 \text{ cm}^{-1}/\text{atm}$  soit un ordre de grandeur de  $5 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$  pour une pression de 10 mbar.

Profil Doppler :

L'effet Doppler est le décalage de fréquence lié au mouvement des molécules dans le référentiel de l'observateur (donc du détecteur). L'onde émise par la

molécule à la fréquence  $\nu_0$  dans son référentiel est mesurée à une fréquence  $\nu$  dans le référentiel du laboratoire telle que

$$\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0} = \frac{v_z}{c}$$

valable au 1<sup>er</sup> ordre en  $v_z/c$ , où  $v_z$  est la projection de la vitesse  $\vec{v}$  sur l'axe molécule-observateur.

Dans un gaz à température T, les vitesses des molécules sont distribuées selon la loi de Maxwell-Boltzman, il en résulte un profil de la transition centrée sur la fréquence  $\nu_0$  qui s'écrit sous la forme suivante :

$$g_D(\nu - \nu_0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\nu_0} \sqrt{\frac{mc^2}{2kT}} \exp\left[-\frac{mc^2}{2kT} \left(\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0}\right)^2\right]$$

qui peut s'exprimer en fonction de sa largeur à mi-hauteur  $\Delta\nu_D$  appelée largeur Doppler :

$$g_D(\nu - \nu_0) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\Delta\nu_D \sqrt{\pi}} \exp\left(-\left(\frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_D}\right)^2 \ln 2\right) \quad (1.14)$$

avec

$$\Delta\nu_D = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{8kT \ln 2}{m}} \quad (1.15)$$

m étant la masse de la molécule en Kg, c est la célérité de la lumière dans le vide en m/s. On utilise aussi l'expression suivante qui utilise la masse molaire de la molécule considérée.

$$\Delta\nu_D = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{8RT \ln 2}{M}}$$

M étant la masse molaire et R est la constante universelle des gaz parfaits produit du Nombre d'Avogadro ( $N_A$ ) et de la constante de Boltzmann ( $k_B$ ).

A.N. Pour l'ammoniac,  $^{14}\text{NH}_3$ ,  $M=17.031 \cdot 10^{-3}$  kg/mol,  $T=296\text{K}$ ,  $\nu_0 = 6579 \text{ cm}^{-1}$  (1520 nm) donne  $\Delta\nu_D = 0.0196445 \text{ cm}^{-1}$  et dans les mêmes conditions

pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ ,  $M=18.02 \cdot 10^{-3}$  kg/mol,  $\Delta\nu_D = 0.0190978$  cm $^{-1}$ .

### Profil de Voigt :

Comme nous l'avons vu précédemment, le profil d'une raie peut dépendre de phénomènes homogènes ou inhomogènes, la forme finale étant la prise en compte de l'ensemble de ces phénomènes. Il est clair que ceux-ci ne sont souvent pas indépendants. Ainsi une collision qui change la vitesse de la molécule modifie son appartenance à sa classe de vitesse. L'étude des profils de raies fait l'objet d'un secteur entier de la spectroscopie avec des profils définis comme les profils de Rautian, de Galatry, des sections efficaces de collisions dépendant des vitesses. Pour notre étude qui s'intéresse à la position et à l'intensité des transitions, nous nous contenterons de considérer l'effet Doppler et l'élargissement collisionnel comme indépendants l'un de l'autre et nous décrirons les transitions observées grâce au profil de Voigt (du nom de Woldemar Voigt) convolution d'un profil gaussien (effet Doppler) et d'un profil lorentzien (élargissement collisionnel) [10]. Ces trois profils de raies sont illustrés dans la figure 1.2.

Soit en posant  $x = \nu - \nu_0$

$$g_V(x) = (g_L * g_D)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g_L(x-t)g_D(t)dt$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\pi} \left( \frac{\gamma_L}{(x-t)^2 + \gamma_L^2} \right) \frac{\sqrt{\ln 2}}{\gamma_D \sqrt{\pi}} \exp \left[ - \left( \frac{t\sqrt{\ln 2}}{\gamma_D} \right)^2 \right] dt$$

Après simplification et un changement de variable, on peut écrire le profil de Voigt sous une forme plus compacte en considérant la variable  $X = 2\sqrt{\ln 2} \frac{x}{\gamma_G} = 2\sqrt{\ln 2} \frac{\nu - \nu_0}{\gamma_G}$  représentant la fréquence en unité de largeur Doppler et un paramètre  $sh = \sqrt{\ln 2} \frac{\gamma_L}{\gamma_G}$  rapport de la largeur lorentzienne sur la largeur Doppler :

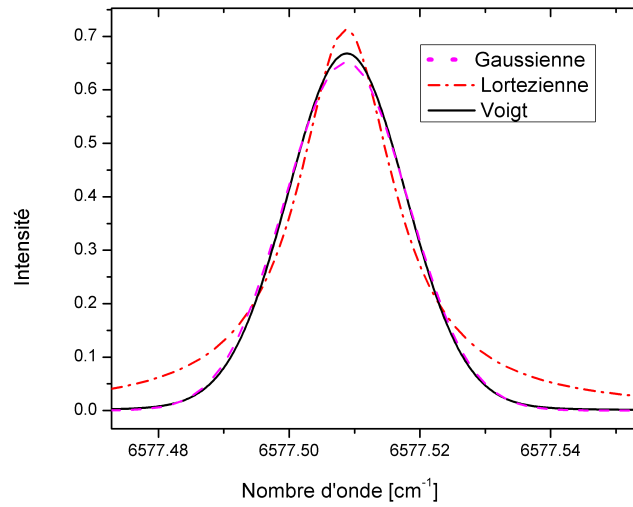


FIGURE 1.2 – Profils de raies. Un exemple illustre les trois types de profils (Gaussienne, Lorentzienne et Voigt) de la molécule d’ammoniac.

$$g_V(X, sh) = \frac{2}{\gamma_G} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{sh}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-t^2)}{(X-t)^2 + sh^2} dt \quad (1.16)$$

Cette fonction (appelée VoigtA) implémentée dans le logiciel libre Fityk que nous avons utilisé, décrit le profil avec 4 paramètres  $a_0, a_1, a_2, a_3$  où  $a_0$  représente l’aire du profil,  $a_1$  la fréquence centrale,  $a_2$  la largeur gaussienne avec la correspondance  $\gamma_D = 2\sqrt{\ln(2)}|a_2|$ , et  $a_3$  le rapport entre largeur lorentzienne et gaussienne avec  $\gamma_L = 2|a_2|a_3$ .

La largeur à mi-hauteur du profil FWHM est estimée par une approximation appelée Whiting modifié (Olivero and Longbothum, 1977, JQSRT 17, 233) par :  $0.5346\gamma_L + \sqrt{0.2169\gamma_L^2 + \gamma_G^2}$ . Cette approximation est bien adaptée dans notre cas où nous verrons que la largeur lorentzienne est au plus de même ordre de grandeur que la largeur Doppler.

### 1.2.2 Techniques spectroscopiques

Les techniques spectroscopiques permettent de déterminer la composition chimique et la structure de la molécule. En effet chaque molécule est caractérisée par sa structure interne qui donne lieu à des transitions électroniques (rayonnements UV-Visible) ou des mouvements de vibration- élongation des atomes (rayonnements IR) par absorption du rayonnement. Ainsi de nombreux constituants atmosphériques sont mesurés par spectroscopie en utilisant des appareils au sol, des satellites et des instruments au bord de plates-forme embarquées.

Ces mesures de concentrations des molécules atmosphériques reposent sur la connaissance des caractéristiques précises de ces molécules obtenues grâce aux spectres de laboratoire. Parmi ces données, on peut citer la fréquence, la force de raie  $S$ , le coefficient d'auto-élargissement par pression, l'élargissement collisionnel par les molécules d'azote et d'oxygène et leur dépendance en température lorsqu'on s'intéresse à l'atmosphère terrestre. D'autres caractéristiques sont nécessaires lorsque l'on étudie les atmosphères de satellites de nos planètes dépendant bien sûr de leur constituants principaux.

Ces données spectroscopiques sont disponibles et sont regroupées dans des bases de données comme (HITRAN :(High resolution TRANsmission molecular absorption) [11] ou GEISA :(Gestion et Étude des informations Spectroscopiques Atmosphériques) [12], etc). Ces bases de données permettent de simuler le spectre et facilite l'identification des composés moléculaires. HITRAN est la base de données la plus utilisée pour la détection des composés gazeux dans l'atmosphère.

Nous allons nous intéresser plus spécifiquement aux différentes méthodes utilisées dans le domaine infrarouge.

### 1.2.2.1 Spectroscopie Infrarouge

Le spectre électromagnétique peut se diviser en différentes parties, plus ou moins spécifiques des transitions moléculaires que l'on peut observer ; Ainsi, le domaine infrarouge est le lieu privilégié de l'observation des transitions de vibration-rotation [13], le domaine de l'infrarouge lointain, radio-fréquence et TéraHertz est plutôt spécifique des transitions purement rotationnelles et lorsque l'on augmente l'énergie (visible -UV) on explore soit les transitions de vibration-rotation élevées (en restant à l'intérieur de l'état électronique fondamental), soit les transitions électroniques.

### 1.2.2.2 Spectroscopie Infrarouge à Transformé de Fourier (IRTF)

La spectroscopie à transformée de Fourier, apparue en 1950, est encore la plus utilisée dans le domaine infrarouge pour obtenir le spectre d'un échantillon solide, liquide ou gazeux.

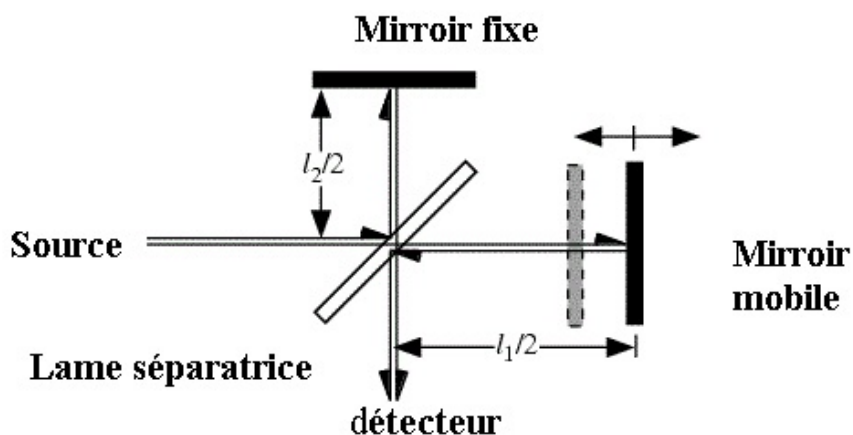


FIGURE 1.3 – Interferomètre de Michelson

Un spectromètre à transformée de Fourier est un interféromètre de Michelson dont un des miroirs est mobile et peut créer une différence de marche  $\delta$  entre les 2 composantes d'un faisceau principal scindé par une séparatrice que l'on fait

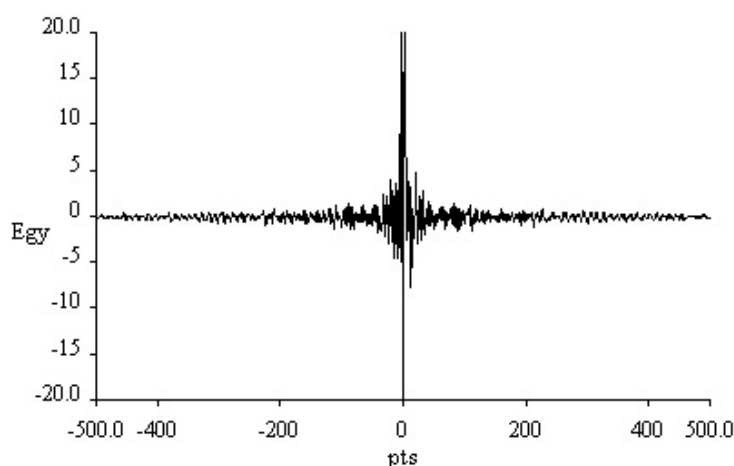


FIGURE 1.4 – Exemple d'un Interférogramme donné par un spectromètre à transformée de Fourier. L'appareil mesure directement l'intensité lumineuse au détecteur en fonction de la position du miroir mobile.

interférer [14]. Si le faisceau est monochromatique, le résultat est l'obtention de franges d'interférences, c'est à dire une fonction de la forme  $f(\delta) = 1 + \cos\left(\frac{2\pi\nu}{c}\delta\right)$ . Les faisceaux interfèrent de manière constructive ou destructive selon la longueur d'onde de la lumière et de la différence de chemin optique entre les miroirs.

Le rayonnement contient en fait toute les fréquences caractéristiques que l'on désire mesurer  $I(\nu)$  et le résultat, appelé interférogramme (voir Figure 1.4) est la somme de toutes leurs contributions à savoir  $F(\delta) = \int I(\nu) \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi\nu}{c}\delta\right)\right] d\nu$ . On voit que l'instrument réalise la transformée de Fourier cosinus du spectre  $S(\nu)$  dans le domaine spatial. L'obtention du spectre s'obtient alors en calculant la transformée de Fourier inverse de l'interférogramme  $F(\delta)$  de retour dans le domaine des fréquences.

Un traitement par ordinateur est requis pour cette opération de conversion des données brutes (l'interférogramme) en données exploitables (spectre de la lumière absorbée ou émise. Les opérations mathématiques de transformation de Fourier directe puis inverse donnent son nom à cette technique.

La spectrométrie à transformée de Fourier dans le domaine infrarouge possède plusieurs avantages [15]. Le premier avantage est sa bonne résolution spectrale qui est inversement proportionnelle à la longueur maximale possible de la différence de marche. Le rapport entre la fréquence optique mesurée et la limite de résolution peut atteindre plusieurs millions. Le second avantage est celui de l'analyse d'un spectre étendu spectralement par un seul détecteur. Cette propriété a été utilisée pour les observations astrophysiques où l'on ne disposait souvent que d'un outil de détection performant. Le troisième avantage est la précision, le spectromètre assurant un étalonnage uniforme de l'échelle de nombres d'ondes. Enfin cette technique permet d'avoir accès au spectre sur un domaine de longueur d'ondes limité par la capacité de la source utilisée (en absorption), des propriétés de la lame séparatrice et de la réponse du détecteur utilisé. Les inconvénients sont le temps d'acquisition qui peut être long si on cherche un spectre à haute résolution, et aussi le maintien de conditions expérimentales stables durant l'acquisition de l'ensemble de l'interférogramme. Il existe maintenant des instruments commerciaux de très bonne qualité.

### 1.2.2.3 Spectroscopie d'absorption par diode accordable (TDLS)

Des progrès ont été faits sur la résolution des dispositifs expérimentaux par l'utilisation de lasers monomodes, et aussi sur la sensibilité grâce à des cellules de long chemin optique (cellules multi-passage) ou encore des techniques comme la CRDS (Cavity Ring Down Spectroscopy) où l'on mesure le temps de décroissance du rayonnement sortant d'une cavité.

Le développement des diodes laser dans le domaine infrarouge est lié à leur utilisation dans le domaine des télécommunications. La spectroscopie d'absorption par diode accordable existe depuis trente ans et a bénéficié de ce développement. Elle permet de mesurer la concentration des certains espèces comme



le méthane, la vapeur d'eau, l'ammoniac et beaucoup d'autres molécules plus complexes [16].

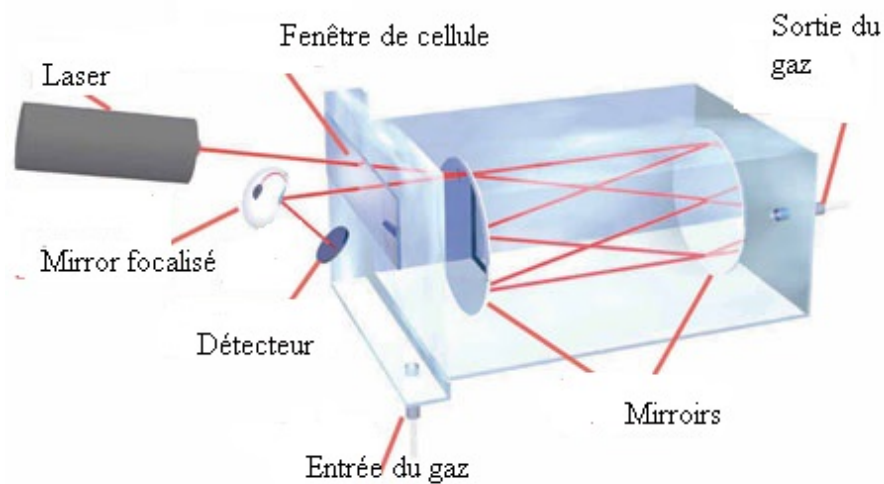


FIGURE 1.5 – Système de spectroscopie par diode accordable (TDLAS).

Nous allons décrire schématiquement les éléments constitutifs d'un système de spectroscopie d'absorption par laser diode accordable (TDLAS tunable diode laser absorption spectroscopy) :

1. Un système diode laser accordable sélectionnée dans la région spectrale désirée.
2. Un système de contrôle de la diode laser
3. Un système optique.
4. Une cellule contenant le gaz.
5. Un détecteur.
6. Un système de mesure de pression.
7. Un ordinateur pour le contrôle et l'acquisition de données.

Il existe plusieurs types de sources diode laser accordables selon des procédés divers, ainsi avons nous utilisé une source VECSEL (Vertically External Cavity Surface Emitting Laser) prototype fonctionnant de 4275 à 4356  $\text{cm}^{-1}$  et un laser commercial de type ECDL (External cavity diode Laser) de 6370 à 6800  $\text{cm}^{-1}$ . Mais il existe d'autres systèmes comme les diodes DFB (Distributed Feedback) qui sont accordables sur des gammes plus restreintes mais qui ne possèdent pas d'espace en champ libre et sont complètement fibrables.

Chaque système possède des caractéristiques d'accordabilité diverses, dont une plus ou moins grande rapidité de balayage. Les possibilités d'agir sur le système peuvent être le courant, la température, la longueur de cavité externe, variable par l'élongation d'une céramique piézo électrique ou un moteur. La plage d'accordabilité dépend de la technologie employée. En ce qui concerne le détecteur, différents types de photodiodes sont utilisées dépendant de la gamme de longueur d'onde (InAs, InGaAs et InSb).

Les systèmes que nous avons utilisés sont monomodes, de largeur spectrale faible devant la largeur Doppler. Nous avons donc considéré la fonction d'appareil comme négligeable. Ils ont aussi l'avantage d'avoir une vitesse de balayage élevée environ 4nm par seconde pour le système ECDL et jusqu'à 20 nm/s pour le système VECSEL ce qui permet d'enregistrer un spectre très rapidement et de pouvoir mesurer l'évolution d'une population en temps réel pour certains types d'expériences (Conversion de spin nucléaire)[6]. L'avantage de la spectroscopie laser est la résolution [17] et aussi la sensibilité lorsqu'elle est couplée à un système CRDS (mesure d'intensité possible jusque  $10^{-31}$  cm/mol[18]).

# Vibration et Rotation d'une molécule

La description du mouvement des atomes qui constituent une molécule peut se décomposer en une translation du centre de gravité, en une rotation globale de la molécule et enfin en modes de vibration (déplacement relatif des atomes à l'intérieur de la molécule).

## 2.1 Modes propres de vibration

Le nombre de degrés de liberté est le nombre de variables requises pour décrire le mouvement d'une particule. Pour un atome se déplaçant dans l'espace à trois dimensions, trois coordonnées sont nécessaires de sorte que son degré de liberté est de trois. Une molécule constituée de  $N$  atomes possède donc  $3N$  degrés de liberté, chaque atome pouvant se déplacer dans les 3 directions de l'espace. Parmi ces déplacements, si les atomes vont dans la même direction, cela correspond à la translation globale de la molécule (mouvement du centre de gravité possible dans les 3 directions de l'espace). Il reste donc  $3N-3$  degrés de liberté. De la même façon, si les déplacements des atomes sont tels qu'ils décrivent une rotation de la molécule, 3 degrés de liberté vont être attribuer à ce

mouvement (2 dans le cas d'une molécule linéaire [19]).

Dans le cas général, il reste donc  $3N-6$  degrés de liberté pour les mouvements relatifs des atomes à l'intérieur de la molécule, que l'on appelle vibrations moléculaires. Un mouvement de ce type peut se décomposer sur un ensemble de vibrations caractéristiques que l'on appelle modes propres ou modes normaux. Un mode normal de vibration est un mode dans lequel tous les atomes de la molécule vibrent collectivement à la même fréquence autour de leur position d'équilibre et selon différentes directions. Le centre de gravité de la molécule ne change pas au cours de la vibration.

### 2.1.1 Modes vibrationnels de $\text{NH}_3$

L'ammoniac ( $\text{NH}_3$ ) possède ainsi 6 modes vibrationnels : 2 modes symétriques non dégénérés  $\nu_1$  et  $\nu_2$ , et deux modes antisymétriques  $\nu_3$  et  $\nu_4$  doublement dégénérés. Les modes vibrationnels de cette molécule sont présentés sur la figure 2.1 :

- Le mode  $\nu_1$  correspond à l'élongation symétrique des liaisons NH (de symétrie  $A_1$  dans  $D_3h$ ).
- Le mode  $\nu_2$  correspond à la déformation angulaire (pliage) symétrique (symétrie  $A_1$ ) des liaisons NH.  $\nu_2$  s'appelle aussi le mode d'inversion.
- Le mode  $\nu_3$  correspond à l'élongation antisymétrique doublement dégénérés des liaisons NH (de symétrie E dans  $D_3h$ ).
- Le mode  $\nu_4$  correspond à la déformation angulaire doublement dégénéré entre les liaisons NH (symétrie E).

A chacun des  $3N-6$  mode normaux  $K$  est associé une coordonnée normale  $Q_K$  décrivant l'oscillation correspondante [20] :

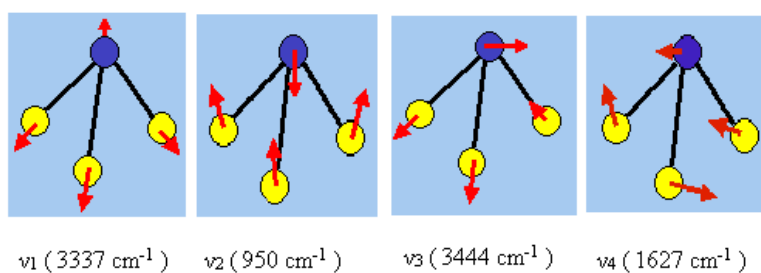


FIGURE 2.1 – Modes vibrationnels de la molécule d’ammoniac.

$$Q_K = \sum_{i=1}^{3N} l_{Ki} q_i \quad (2.1)$$

Où  $q_i$  avec  $i=1,2,\dots,3N$  sont les déplacements élémentaires des atomes.

### 2.1.2 Bandes vibrationnelles

La molécule diatomique est l'exemple le plus simple où il n'y a qu'une seule coordonnée de vibration. Le potentiel décrivant l'énergie de liaison en fonction de la distance interatomique peut être décrit en première approximation comme un potentiel harmonique de fréquence  $\omega$ . Les énergies s'écrivent  $E = (v + 1/2)\hbar\omega$  et la vibration fondamentale correspond à la transition du niveau vibrationnel  $v=0$  à  $v=1$ .

Plus généralement, lorsque l'on considère  $3N-6$  degrés de libertés, les modes normaux peuvent être vus comme  $3N-6$  oscillateurs harmoniques, indépendants dans un premier temps puis couplés dans un second temps. Dans le spectre infrarouge, on peut avoir les fréquences fondamentales de chaque mode, ses harmoniques et toute combinaison de modes fondamentaux et harmoniques.

Comme exemple, pour l'ammoniac, le mode de pliage antisymétrique ( $\nu_4$ ) a une fréquence fondamentale de  $1627 \text{ cm}^{-1}$ . La seconde harmonique peut être

cherchée au voisinage de  $2 \times 1627 = 3254 \text{ cm}^{-1}$ . Elle se trouve effectivement à  $3228.4 \text{ cm}^{-1}$ . Dans l'exemple de la bande de combinaison où l'énergie est répartie en une excitation du mode d'élongation symétrique  $\nu_1$  et deux excitations du mode de pliage antisymétrique  $\nu_4$ , on calcule simplement  $3337 + 2 \times 1627 = 7031 \text{ cm}^{-1}$ . Cette bande de combinaison est observée à  $6975.627 \text{ cm}^{-1}$ .

Nous avons considéré les excitations possibles à partir de l'état fondamental de vibration, mais on peut aussi s'intéresser aux transitions entre états excités. De telles bandes sont appelées "chaudes", car elles deviennent importantes lorsque l'état excité de départ est suffisamment peuplé, par exemple lorsque l'on augmente la température. En général d'intensité faible, elles se trouvent énergétiquement au voisinage de la bande considérée avec une excitation de moins sur l'état de départ et l'état d'arrivée. Ainsi, les transitions de la bande chaude partant du niveau  $\nu_4$  vers le niveau  $\nu_2 + \nu_4$  (désigné par convention par  $\nu_2 + \nu_4 - \nu_4$ ) se trouve au même niveau que les transitions partant du niveau fondamental vers le niveau  $\nu_2$ . Cette bande chaude est trouvée à  $914.3 \text{ cm}^{-1}$  comparé à  $950 \text{ cm}^{-1}$ .

## 2.2 Énergie rotationnelle

La rotation d'un système ou d'une molécule s'appuie sur le modèle appelé rotateur rigide (le corps n'est pas déformé pendant la rotation).

Dans ce paragraphe nous allons parler de l'énergie rotationnelle d'une molécule polyatomique. Le moment d'inertie d'une molécule qui tourne autour d'un axe fixe  $\Delta$  s'écrit :

$$I = \sum_i m_i r_i^2 \quad (2.2)$$

Avec  $m_i$  sont les masses atomiques et  $r_i = (x_i, y_i, z_i)$  la distance de la masse  $m_i$  à l'axe  $\Delta$ .

D'une manière générale, considérant un repère cartésien (x,y,z), le moment d'inertie de la molécule peut être écrit sous la forme d'un tenseur avec :

$$I_{xx} = \sum_i m_i (y_i^2 + z_i^2) \quad (2.3)$$

$I_{yy}$  et  $I_{zz}$  sont formés par la permutation de x, y et z. Les éléments non diagonaux appelés les produits d'inertie sont écrit :

$$I_{xy} = - \sum_i m_i (x_i y_i) \quad (2.4)$$

On peut montrer que ce tenseur peut être exprimé sous une forme diagonale dans un système d'axes appelés axes principaux du tenseur. Les éléments diagonaux deviennent les moments d'inertie principaux. Ces moments s'obtiennent en faisant la diagonalisation du tenseur d'inertie :

$$\begin{vmatrix} I_{xx} - \lambda & I_{xy} & I_{xz} \\ I_{yx} & I_{yy} - \lambda & I_{yz} \\ I_{zx} & I_{zy} & I_{zz} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (2.5)$$

Les racines de  $\lambda$  sont les moments d'inertie principaux.

A partir des moments d'inertie on peut classifier les molécules en quatre types :

- Molécule linéaire avec  $I_x = I_y$  ;  $I_z = 0$ , par exemple CO.
- Toupie sphérique avec  $I_x = I_y = I_z$ , par exemple :  $\text{CH}_4$ ,  $\text{SF}_6$ .
- Toupie symétrique avec  $I_x = I_y \neq I_z$ , par exemple  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CH}_3$ .
- Toupie asymétrique avec  $I_x \neq I_y \neq I_z$ , par exemple  $\text{H}_2\text{O}$ .

L'hamiltonien d'un rotateur rigide s'écrit [21] :

$$H = \hbar^{-2}(A\hat{J}_z^2 + B\hat{J}_x^2 + C\hat{J}_y^2) \quad (2.6)$$

Où  $\hat{J}$  est l'opérateur de moment angulaire. Les constantes de rotation s'expriment en  $\text{cm}^{-1}$  tels que :

$$A = \frac{\hbar^2}{2hcI_{zz}}; B = \frac{\hbar^2}{2hcI_{xx}}; C = \frac{\hbar^2}{2hcI_{yy}} \quad (2.7)$$

Notre travail consiste à étudier la molécule d'ammoniac, cette dernière est une toupie symétrique avec  $A > B = C$  (aplatie aux pôles, en anglais oblate). H s'écrit sous la forme :

$$H = \hbar^{-2}(B\hat{J}^2 + (A - B)\hat{J}_z^2) \quad (2.8)$$

L'énergie rotationnelle d'une molécule est obtenue en résolvant l'équation de Schrodinger :

$$H\psi = E\psi \quad (2.9)$$

L'hamiltonien H exprime en coordonnées sphériques ( $r$ ,  $\theta$  et  $\phi$ ) :

$$H = \frac{-\hbar^2}{8\pi^2\mu} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + V(r, \theta, \phi) \quad (2.10)$$

Dans le cas d'un rotateur rigide symétrique l'énergie potentielle V est nulle, alors l'équation de Schrodinger s'écrit :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{8\pi^2\mu r^2}{\hbar^2} E\psi = 0 \quad (2.11)$$

Avec  $\psi$  est la fonction d'onde, E est l'énergie du rotateur. La solution de l'équation 2.11 permet de déduire les niveaux d'énergies de rotation de la molécule qui s'écrivent [22] :

$$E_R = BJ(J + 1) + (A - B)K^2 \quad (2.12)$$



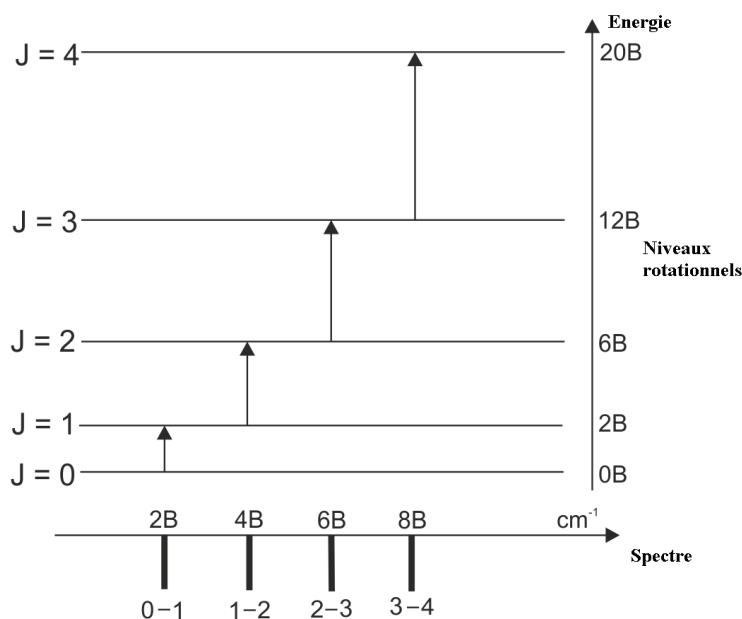


FIGURE 2.2 – Diagramme de niveaux d'énergie rotationnels pour une molécule diatomique.

Avec  $J$  est le nombre quantique représente le moment angulaire total de rotation.  $K$  est la projection de  $J$  sur l'axe de rotation moléculaire tel que  $K = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm J$ .

La différence d'énergie entre les niveaux  $J$  et  $J+1$  de même valeur de  $K$  est :

$$\Delta E = E_{J+1} - E_J = 2B(J + 1) = 2B(J + 1) \quad (2.13)$$

Alors dans le cas de transitions purement rotationnelles, chaque raie est distante de sa voisine par  $2B$  ( figure 2.2). Les règles de sélection imposent  $\Delta J = \pm 1$ . La partie du spectre correspondant à  $\Delta J=1$  est appelée branche R, celle à  $\Delta J=-1$  est appelée branche P .

Les molécules réelles ne se comportent pas comme des rotateurs rigides, la rotation pouvant déformer le système et par exemple allonger les distances entre atomes. Dans ce cas, une correction à l'énergie de rotation peut s'écrire au

premier ordre :

$$E_R = BJ(J+1) + (A-B)K^2 - D_J J^2(J+1)^2 - D_K K^4 - D_{JK} J(J+1)K^2 - \dots \quad (2.14)$$

Où  $D_J$ ,  $D_{JK}$  et  $D_K$  sont les constantes de distorsion centrifuge (du 1er ordre) et tiennent compte de l'augmentation de la longueur de la liaison atomique pendant la rotation de la molécule.

## 2.3 Énergie vibrationnelle

Pour expliquer la vibration moléculaire nous utilisons le modèle d'un oscillateur harmonique où les atomes constituant la molécule sont liés par des liaisons chimiques. La liaison entre les noyaux des atomes est considérée comme un ressort qui obéit à la loi de Hooke :

$$F = - \sum_{i=1}^{3N-6} k_i Q_i \quad (2.15)$$

$F$  est la force de rappel exprimée en Newton (N),  $k_i$  constante de rappel en N/m pour la coordonnée généralisée  $Q_i$  propre à chaque mode normal. La force de rappel  $F$  est liée à l'énergie potentielle  $V$  dépendant des  $Q_i$  par la relation suivante :

$$F(V) = - \sum_{i=1}^{3N-6} \left( \frac{\partial V(Q)}{\partial Q_i} \right) \quad (2.16)$$

L'équation de Schrodinger d'un oscillateur harmonique est écrit comme [23] :

$$H_{vib} \Psi = \frac{1}{2} \sum_{i=1} \left( -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial^2}{\partial Q_i^2} + \omega_i^2 Q_i^2 \right) \Psi \quad (2.17)$$

L'énergie vibrationnelle de la molécule est obtenue en résolvant l'équation de Schrodinger 2.17 pour une molécule polyatomique. Alors cette énergie peut s'écrire en première approximation comme [19] :

$$E_v = \sum_{i=1}^{3N-6} (v_i + \frac{1}{2}) \hbar \omega_i \quad (2.18)$$

Où le nombre quantique vibrationnel  $v_i$  peut prendre les valeurs  $0, 1, 2, \dots$ ,  $\omega_i$  représente la fréquence angulaire de l'oscillateur exprimée en rad/s.

Si l'on revient au cas le plus simple de la molécule diatomique, on sait que le potentiel quadratique de l'oscillateur harmonique doit être remplacé par un modèle de type Morse qui tient compte du fait qu'on ne peut pas allonger une molécule à l'infini ni imbriquer les noyaux l'un dans l'autre [24]. Le potentiel de type Morse s'écrit :

$$V = D_e (1 - \exp^{-\beta r})^2 \quad (2.19)$$

Où  $D_e$  est la profondeur du puit de potentiel,  $\beta$  mesure la courbure du fond du puit. Ce potentiel est plus réaliste que le potentiel harmonique en tenant compte de l'anharmonicité (voir figure 2.3).  $V$  est introduit ensuite dans l'équation de Schrodinger, et l'énergie vibrationnelle de la molécule s'écrit avec des termes correctifs sous la forme :

$$E_v = h\omega_e \sum_i (v_i + \frac{1}{2}) - \sum_i (v_i + \frac{1}{2})^2 h\omega_e x_e + \dots \quad (2.20)$$

Avec  $\omega_e x_e$  est la constante d'anharmonicité.

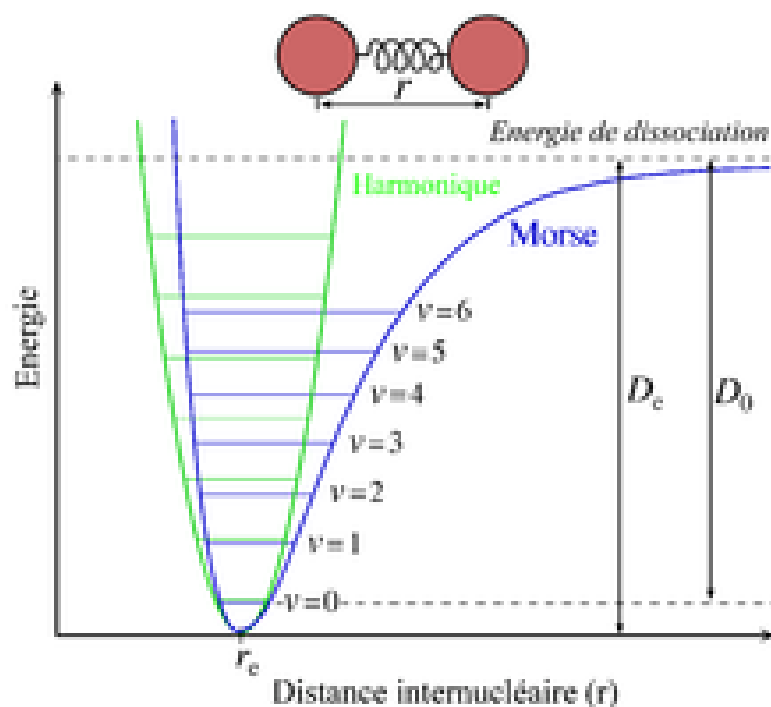


FIGURE 2.3 – Comparaison entre les courbes d'énergie potentielle correspondant à l'oscillateur harmonique (tracé vert) et anharmonique (tracé bleu) d'une molécule diatomique. L'énergie potentielle est présentée en fonction de la distance internucléaire  $r$ .  $D_e$  est la différence entre la limite de dissociation et le minimum du potentiel et  $D_0$  constante de dissociation chimique correspond à la différence entre l'énergie de point zéro et la limite de dissociation.

## 2.4 Énergie ro-vibrationnelle

Lorsque l'on combine la vibration et la rotation de la molécule, on parle d'énergie rovibrationnelle. Pour une toupie symétrique, considérant un niveau vibrationnel  $v$ , elle s'écrit [22] :

$$E_{J,K}(v) = E_0(v) + B_v J(J+1) + (A_v - B_v)K^2 - D_{v,J}J^2(J+1)^2 - D_{v,K}K^4 - D_{v,J,K}J(J+1)K^2 \quad (2.21)$$

$A_v, B_v, D_{v,J}, D_{v,K}, D_{v,J,K}$  sont les constantes spécifiques de l'état vibrationnel  $v$ .

Un autre terme que les termes de distorsion peut perturber les niveaux rovibrationnels d'une molécule, du à la force de Coriolis. Cette dernière est présente lorsque les atomes vibrent à l'intérieur du référentiel tournant lié à la molécule. Lorsque les deux mouvements (rotation et vibration) sont totalement séparés (approximation de Born-Oppenheimer), son effet est intégré dans les constantes rotationnelles.

La force de Coriolis est définie comme suit [21] :

$$F_{\xi} = 2mv\omega \quad (2.22)$$

Avec  $v$  est la vitesse relative de l'atome dans sa vibration,  $\omega$  est la vitesse angulaire instantanée de rotation.

L'interaction de Coriolis du 1er ordre apparait pour les états vibrationnels dégénérés [25] comme par exemple les modes  $\nu_3$  et  $\nu_4$  de l'ammoniac.

La correction de Coriolis [26] sur l'énergie rovibrationnelle s'écrit

$$E(v, J, K) = E_{vib} + E_{rot} - 2C\xi lK \quad (2.23)$$

Où  $\xi$  est la constante de Coriolis,  $l$  est la constante de dédoublement du niveau dégénéré.

L'interaction de Coriolis peut se manifester au 2ème ordre de perturbation entre un mode non dégénéré et un mode dégénéré mais ne devient significatif que de manière accidentelle.

## 2.5 Symétrie de la molécule

Les propriétés physiques dépendent beaucoup de leur symétrie. La symétrie d'une molécule est déterminée par l'ensemble des déplacements ou des

opérations qui amènent cette molécule en coïncidence avec elle même. Ces déplacements représentent les transformations de symétrie dans l'espace à trois dimensions. Les propriétés de symétrie des molécules permettent de prédire les caractères essentiels des spectres vibrationnels en se basant sur la théorie des groupes. Pour cette raison il faut :

- Décrire la molécule en coordonnées normales en choisissant bien une base.
- Déterminer le groupe ponctuel pour la molécule considérée.
- Construire une représentation réductible ( $\Gamma$ ) de modes de vibration pour la base choisie et finalement réduire cette représentation en ses représentations irréductibles.

#### Éléments de symétrie :

Le premier élément à considérer est la présence d'atomes identiques dans des positions symétriques dont la conséquence est qu'une solution de l'équation de Schrodinger doit se transformer en elle-même ou son opposé lorsque l'on procède à une permutation de deux noyaux identiques. On considère alors ce que l'on appelle le groupe complet des permutations possibles des noyaux (CNP Complete Nuclear Permutation Group). pour l'ammoniac qui contient 3 atomes d'hydrogène (notés 1, 2 et 3) , on trouve l'ensemble {E, (12), (23), (13), (123), (132)} groupe de 6 éléments que l'on appelle  $S_3$ .

Lorsque l'on considère une permutation comme (12), on s'aperçoit que la structure de la molécule passe dans une position différente, non superposable. En effet, autour de l'axe de la molécule, l'ordre des atomes d'hydrogène n'est plus le même. On doit alors introduire l'opération d'inversion où l'on inverse l'ensemble des coordonnées spatiales de toutes les particules (électrons et noyaux). On décrit alors un groupe plus important constitué des opérations du groupe CNP et de l'inversion  $E^*$ . L'opération d'inversion commutant avec tous les éléments du groupe CNP, on écrit simplement les éléments du groupe avec une étoile :

$\{E, (12), (23), (13), (123), (132), E^*, (12)^*, (23)^*, (13)^*, (123)^*, (132)^*\}$

Ce groupe est appelé CNPI pour Complete Nuclear Permutation Inversion. Comme nous l'avons évoqué, dans ce groupe il existe un sous groupe qui n'intervertit pas l'ordre 123, 132 des atomes d'hydrogène pour la molécule  $\text{NH}_3$ . Ce sous-groupe est  $\{E, (123), (132), (12)^*, (23)^*, (13)^*\}$  appelé  $C_{3v}$ . Nous allons voir qu'il existe des molécules rigides comme  $\text{NF}_3$  où le passage d'une configuration à l'autre (ordre des 3 atomes) n'est pas physiquement possible, et des molécules dite semi-rigides comme  $\text{NH}_3$ , où ce passage est très peu probable, mais néanmoins possible, quantiquement par ce que l'on appelle l'effet tunnel. Dans ce cas on maintiendra une description avec le groupe complet des 12 opérations.

Si il semble satisfaisant de considérer le groupe complet CNPI pour une molécule donnée dont chaque élément commute avec son hamiltonien, ce groupe comprend souvent un grand nombre d'éléments et il est utile de chercher si les propriétés de symétrie de la molécule ne peuvent pas être décrite par un sous-groupe réduit appelé groupe de symétrie de la molécule. En effet, notre but est de pouvoir décrire les niveaux d'énergie et les fonctions d'ondes en utilisant un label caractéristique du comportement de celle-ci lors des opérations de symétrie. Nous n'avons considéré jusqu'à présent que les échanges de noyaux ou l'inversion des coordonnées des noyaux et des électrons, mais il est clair qu'ils sont aussi intimement liés aux transformations géométriques susceptibles de transformer la molécule en elle-même. Pour l'ammoniac, la permutation des atomes 1 et 2 peut être vue comme l'opération de réflexion par rapport au plan qui contient l'axe principal de rotation et l'hydrogène 3. Cette description va donner ce que l'on appelle le groupe ponctuel de symétrie de la molécule.

Pour déterminer ce groupe ponctuel d'une molécule, il faut déterminer ses éléments de symétrie.

1. L'identité E, cette opération consiste à ne rien faire. Toutes les molécules

ont cet élément.

$$2. C_n = C_n^k \left( \frac{2\pi k}{n} \right), k=1, \dots, n$$

$C_n$  est l'ensemble des rotations d'un angle de  $\pi/n$  autour d'un axe d'ordre  $n$ .

3. Le plan de symétrie  $\sigma$ , pour lequel la réflexion à travers ce plan laisse la molécule invariante. Si le plan de réflexion est perpendiculaire à l'axe de rotation de la molécule il est noté  $\sigma_h$ , si ce plan contient l'axe de rotation il sera noté  $\sigma_v$ .

4. Le centre d'inversion  $i$ . L'inversion consiste à faire passer chaque point à travers le centre d'inversion.

5.  $S_{2n} = S_{2n}^k = C_{2n}^k \left( \frac{\pi k}{n} \right) \sigma_h^k, k=1, \dots, 2n$ .  $S_{2n}$  est la rotation impropre d'ordre  $2n$ . Cette opération consiste en une rotation autour d'un axe de  $2n$ -aire suivie d'une réflexion dans un plan perpendiculaire à l'axe de rotation.

**Représentations d'un groupe** L'ensemble des opérations de symétrie d'une molécule forme un groupe appelée groupe ponctuel. D'un point de vue mathématique, l'idée générale de la théorie des représentations est d'étudier un groupe  $G$  en le faisant agir sur un espace vectoriel  $V$  [27] d'une manière linéaire. Le groupe  $G$  va être représenté sous forme de matrices.

Une telle représentation est noté généralement  $\Gamma$ , c'est un ensemble d'éléments pouvant être substitués aux éléments du groupe. Elle revient à étudier le groupe comme étant un ensemble de symétries d'un espace euclidien (espace à trois dimensions). Tout point  $M$  de cet espace, défini par les coordonnées  $(x,y,z)$  dans un repère  $R(i,j,k)$  donné, se transforme en un point  $M'$  dont les coordonnées  $(x',y',z')$  sont les combinaisons linéaires de  $x, y$  et  $z$ . L'opération de symétrie qui



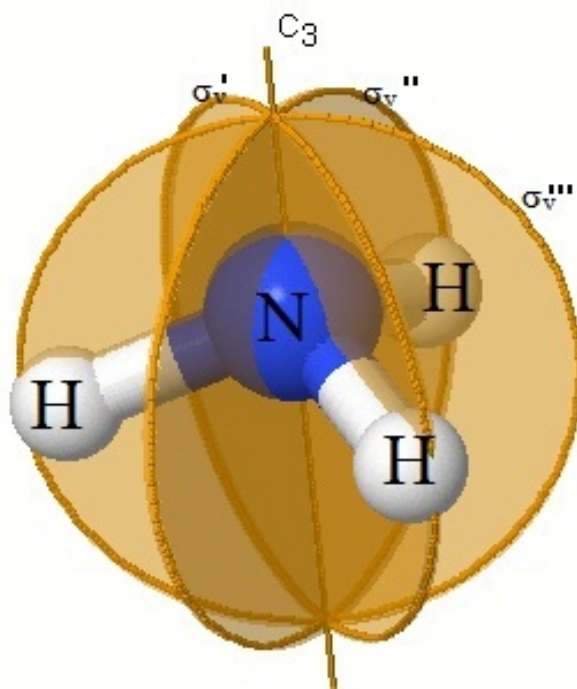


FIGURE 2.4 – Les composantes des opérations de symétrie de la molécule d’ammoniac. Les trois plans verticaux passent par l’axe de rotation principal  $C_3$ , chaque plan contient un atome d’hydrogène.

transforme  $M$  en  $M'$  peut être écrit sous la forme d’une matrice

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = (O_i) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

Où la matrice  $3 \times 3$   $(O_i)$  représente l’opération  $\hat{O}_i$ , ainsi toutes les opérations de symétrie d’un groupe peuvent être écrites sous la forme de matrice de transformations, une pour chaque opération. Chaque matrice est appelée représentation de l’opération correspondante, et l’ensemble des représentations s’appelle la représentation matricielle  $\Gamma$  du groupe.

Une représentation (D) du groupe G est dite réductible s'il l'on peut trouver des sous-groupes de G autre que l'identité et le groupe G lui-même. En revanche, si c'est pas le cas cette représentation est dite irréductible [28]. En général, une représentation peut apparaitre d'une manière complexe, alors notre objectif est de la réduire par la recherche de sous-représentations. Pour cette raison, les représentations réductibles ( $\Gamma_R$ ) sont décomposées en représentations irréductibles simples.

Pour mieux comprendre les notions précédentes, prenons l'exemple de la molécule d'ammoniac. Nous allons voir comment les opérations géométriques agissent par rapport aux permutations des atomes d'hydrogènes, en considérant aussi les 2 ordres possibles de ceux-ci.

NH<sub>3</sub> possède un axe de rotation d'ordre 3 (C<sub>3</sub>) et trois plans de réflexion verticaux (voir la figure 2.4). Les rotations d'un angle de ( $2\frac{\pi}{3} = 120^\circ$ ) et d'un angle de ( $4\frac{\pi}{3} = 240^\circ$ ) autour de l'axe principal laisse la molécule invariante. Les trois plans verticaux passant respectivement par H<sub>1</sub> H<sub>2</sub> et H<sub>3</sub> et contenant l'axe de rotation C<sub>3</sub> sont désignés par ( $\sigma'$   $\sigma''$ ,  $\sigma'''$ ). La réflexion dans chaque plan de symétrie vertical fait coïncider la molécule d'ammoniac avec elle même.

La molécule d'ammoniac possède 2 configurations d'équilibre symétriques par rapport au plan horizontal, miroir l'une de l'autre correspondant à ce que l'on appelle le retournement du parapluie. Une possibilité existe de passage d'une configuration à l'autre, quantiquement par effet tunnel. Pour tenir compte de cette possibilité, l'ammoniac est décrit avec le groupe de symétrie D<sub>3h</sub> qui inclut la réflexion dans le plan horizontal.

On désigne par 123 l'orientation des trois atomes d'hydrogène dans le sens opposé des aiguilles de montre et nous allons considérer les 2 positions d'équilibre possible de la molécule P1 et P2, miroir l'une de l'autre. Nous notons différemment cette position pour ne pas confondre avec la permutation circu-

laire (123) opération qui fait passer respectivement l'atome 1 sur le 2, le 2 sur le 3 et enfin 3 sur le 1.

Les 6 ordres possibles à considérer sont 123, 132, 213, 231, 312, 321.

Partant de la configuration P1, la rotation d'un angle  $2\frac{\pi}{3}$  autour de l'axe de rotation  $C_3^1$  change l'orientation en 312 en restant dans la position P1. Cette opération est analogue à l'effet de la permutation circulaire (132). La deuxième rotation autour de l'axe  $C_3^2$  d'un angle  $4\frac{\pi}{3}$  change l'orientation en 231 (P1) analogue à l'effet de la permutation circulaire (123).

Les trois réflexions verticales ( $\sigma'$ ,  $\sigma''$ ,  $\sigma'''$ ) sont appliquées à la configuration P1 123 en produisant les orientations 132, 321 et 213 respectivement, la configuration de la molécule correspond à la 2ème position d'équilibre possible P2. Ces transformations sont analogues ont le même effet que respectivement les transpositions (23), (13) et (12)

L'application d'une réflexion horizontale  $\sigma_h$  à la configuration P1 (123) produit l'orientation 132, l'ordre des atomes d'hydrogène est changé et la molécule se trouve la position d'équilibre P2.

L'application d'une rotation de  $\pi$  autour d'un axe  $C_2^1$  (intersection du plan horizontal et d'un plan perpendiculaire passant par N et H<sub>1</sub>) produit sur la configuration P1 (123) l'orientation 123.

L'application d'une rotation d'un angle  $2\frac{\pi}{3}$  et  $4\frac{\pi}{3}$  autour de l'axe impropre  $S_3$  ( $= \sigma_h C_3$ ) produise les orientations 321 et 213 dans la position P2.

Les effets de ces douze opérations de symétrie du groupe de symétrie sont résumés comme suit :

$$E [\underline{123}] = \underline{123} \text{ (P1)}; \quad C_3 [\underline{123}] = \underline{312} \text{ (P1)}; \quad C_3^2 (1,2,3) = \underline{231} \text{ (P1)}$$

$$\sigma' [\underline{123}] = \underline{132} \text{ (P2)}; \quad \sigma'' [\underline{123}] = \underline{321} \text{ (P2)}; \quad \sigma''' [\underline{123}] = \underline{213} \text{ (P2)}$$

$$\sigma_h [\underline{123}] = \underline{132} \text{ (P2)};$$

$$S_3 \underline{123} = \underline{321} \text{ (P2)}; \quad S_3^2 \underline{123} = \underline{213} \text{ (P2)}$$

$$C_2^{H1} [\underline{123}] = \underline{123} \text{ (P1)}; C_2^{H2} [\underline{123}] = \underline{312} \text{ (P1)}; C_2^{H3} [\underline{123}] = \underline{231} \text{ (P1)}$$

Nous établissons ici une connection entre le groupe CNPI et le groupe des symétries ponctuelles de  $\text{NH}_3$ .

Chaque élément de symétrie peut être aussi représenté sous forme matricielle décrivant la transformation du point  $M(x,y,z)$  en  $M'(x',y',z')$  :

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, C_2^{H1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, C_2^{H2} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, C_2^{H3} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

$$C_3 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, C_3^2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_h = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

$$\sigma' = \sigma_v^{H1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma'' = \sigma_v^{H2} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma''' = \sigma_v^{H3} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

$$S_3 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, S_3^{(2)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

Attention, ici  $S_3^{(2)} = C_3^2 \sigma_h$  différent de  $S_3^2 = S_3 * S_3 = C_3^2$ .

La multiplication entre les éléments de symétrie correspondants aux opérations  $E, C_3^1, C_3^2, C_2^1, C_2^2, C_2^3, \sigma_h, S_3, S_3^{(2)}, \sigma', \sigma'', \sigma'''$  permet de construire la table de multiplication du groupe  $D_{3h}$  [29]. Celle-ci est présentée dans le tableau 2.1.

$D_{3h}$	E	$C_3$	$C_3^2$	$C_2^{H_1}$	$C_2^{H_2}$	$C_2^{H_3}$	$\sigma'$	$\sigma''$	$\sigma'''$	$\sigma_h$	$S_3$	$S_3^5$
E	E	$C_3$	$C_3^2$	$C_2^{H_1}$	$C_2^{H_2}$	$C_2^{H_3}$	$\sigma'$	$\sigma''$	$\sigma'''$	$\sigma_h$	$S_3$	$S_3^5$
$C_3$	$C_3$	$C_3^2$	E	$C_2^{H_3}$	$C_2^{H_1}$	$C_2^{H_2}$	$\sigma'''$	$\sigma'$	$\sigma''$	$S_3$	$S_3^5$	$\sigma_h$
$C_3^2$	$C_3^2$	E	$C_3$	$C_2^{H_2}$	$C_2^{H_3}$	$C_2^{H_1}$	$\sigma''$	$\sigma'''$	$\sigma'$	$S_3^5$	$\sigma_h$	$S_3$
$C_2^{H_1}$	$C_2^{H_1}$	$C_2^{H_2}$	$C_2^{H_3}$	E	$C_3$	$C_3^2$	$\sigma_h$	$S_3$	$S_3^5$	$\sigma'$	$\sigma''$	$\sigma'''$
$C_2^{H_2}$	$C_2^{H_2}$	$C_2^{H_3}$	$C_2^{H_1}$	$C_3^2$	E	$C_3$	$S_3^5$	$\sigma_h$	$S_3$	$\sigma''$	$\sigma'''$	$\sigma'$
$C_2^{H_3}$	$C_2^{H_3}$	$C_2^{H_1}$	$C_2^{H_2}$	$C_3$	$C_3^2$	E	$S_3$	$S_3^5$	$\sigma_h$	$\sigma'''$	$\sigma'$	$\sigma''$
$\sigma'$	$\sigma'$	$\sigma''$	$\sigma'''$	$\sigma_h$	$S_3$	$S_3^5$	E	$C_3$	$C_3^2$	$C_2^{H_1}$	$C_2^{H_2}$	$C_2^{H_3}$
$\sigma''$	$\sigma''$	$\sigma'''$	$\sigma'$	$S_3^5$	$\sigma_h$	$S_3$	$C_3^2$	E	$C_3$	$C_2^{H_2}$	$C_2^{H_3}$	$C_2^{H_1}$
$\sigma'''$	$\sigma'''$	$\sigma'$	$\sigma''$	$S_3$	$S_3^5$	$\sigma_h$	$C_3$	$C_3^2$	E	$C_2^{H_2}$	$C_2^{H_1}$	$C_2^{H_1}$
$\sigma_h$	$\sigma_h$	$S_3$	$S_3^5$	$\sigma'$	$\sigma''$	$\sigma'''$	$C_2^{H_1}$	$C_2^{H_2}$	$C_2^{H_3}$	E	$C_3$	$C_3^2$
$S_3$	$S_3$	$S_3^5$	$\sigma_h$	$\sigma'''$	$\sigma'$	$\sigma''$	$C_2^{H_3}$	$C_2^{H_1}$	$C_2^{H_2}$	$C_3$	$C_3^2$	E
$S_3^5$	$S_3^5$	$\sigma_h$	$S_3$	$\sigma''$	$\sigma'''$	$\sigma'$	$C_2^{H_2}$	$C_2^{H_3}$	$C_2^{H_1}$	$C_3^2$	E	$C_3$

TABLE 2.1 – Table de multiplication du groupe  $D_{3h}$ .

Il est possible de ranger les éléments de symétrie de ce groupe par classes (sous ensembles d'éléments) d'équivalence à l'aide d'une procédure mathématique dite transformation de similitude. Considérant une opération de symétrie A, un élément B est dit conjugué de A, si il existe une opération X du groupe tel que

$$B = X^{-1}AX$$

Par exemple considérons la transformation  $\sigma'$ , nous allons déterminer sa classe en construisant les produits  $X^{-1}\sigma'X$  possibles avec X appartenant au groupe.

Il est clair que l'ensemble ( $\sigma', \sigma'', \sigma'''$ ) constitue une classe. De même on peut montrer que le groupe de symétrie  $D_{3h}$  contient 6 classes respectivement

{E},  $\{C_3, C_3^2\}$ ,  $\{C_2^{H_1}, C_2^{H_2}, C_2^{H_3}\}$ ,  $\{\sigma_h\}$ ,  $\{S_3, S_3^5\}$ ,  $\{\sigma', \sigma'', \sigma'''\}$ . Nous remarquons

$X \sigma' X^{-1}$	=val
$E \sigma' E$	$=\sigma'$
$C_3 \sigma' C_3^2$	$=\sigma''$
$C_3^2 \sigma' C_3$	$=\sigma''$
$C_2^{H_1} \sigma' C_2^{H_1}$	$=\sigma'$
$C_2^{H_2} \sigma' C_2^{H_2}$	$=\sigma'''$
$C_2^{H_3} \sigma' C_2^{H_3}$	$=\sigma''$
$\sigma_h \sigma' \sigma_h$	$=\sigma'$
$S_3 \sigma' S_3^5$	$=\sigma''$
$S_3^5 \sigma' S_3$	$=\sigma'''$
$\sigma' \sigma' \sigma'$	$=\sigma'$
$\sigma'' \sigma' \sigma''$	$=\sigma'''$
$\sigma''' \sigma' \sigma'''$	$=\sigma''$

TABLE 2.2 – Éléments conjugués de  $\sigma'$ .

que chaque matrice d'éléments appartenant à la même classe possède la même trace définie comme la somme des éléments diagonaux de la matrice. Les traces  $\chi_i$  des 6 classes présentées précédemment sont respectivement 3, 0, -1, 1, -2, 1. Il est aisé de démontrer que la trace vérifiant  $\chi(AB) = \chi(BA)$ , la trace de deux éléments conjugués est la même. En effet,  $\chi(B) = \chi(X^{-1}AX) = \chi(X^{-1}XA) = \chi(A)$ .

Les ordres (1, 2, 3, 1, 2, 3) des 6 classes sont bien des diviseurs de l'ordre du groupe égal à (12). Désignant ces 6 classes respectivement par E,  $2C_3$ ,  $3C_2$ ,  $\sigma_h$ ,  $2S_3$  et  $3\sigma$ , on peut simplifier le tableau de multiplication en considérant les différents blocs :

	E	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_3$	$3\sigma$
E	E	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_3$	$3\sigma$
$2C_3$	$2C_3$	$2C_3$	E, $3C_2$	$2S_3$	$\sigma_h, 2S_3$	$3\sigma$
$3C_2$	$3C_2$	$3C_2$	E, $2C_3$	$3\sigma$	$3\sigma$	$\sigma_h, 2S_3$
$\sigma_h$	$\sigma_h$	$2S_3$	$3\sigma$	E	$2C_3$	$3C_2$
$2S_3$	$2S_3$	$\sigma_h, 2S_3$	$3\sigma$	$2C_3$	E, $2C_3$	$3C_2$
$3\sigma$	$3\sigma$	$3\sigma$	$\sigma_h, 2S_3$	$3C_2$	$3C_2$	E, $2C_3$

TABLE 2.3 – Table de multiplication simplifiée.

A partir de la table de multiplication spécifique pour chaque classe, on peut établir qu'il existe un nombre de représentations dites irréductibles, dont le nombre est égal au nombre de classes du groupe sur lesquels on pourra toujours réduire n'importe quelle représentation du groupe. Ces représentations irréductibles seront précieuses pour spécifier les propriétés d'une fonction d'onde en représentant son comportement par rapport aux 12 symétries du groupe. En effet, le potentiel reste inchangé par les opérations du groupe  $O_k$ , et de ce fait commute avec l'Hamiltonien du système :  $O_k H \Psi = H O_k \Psi$ , on peut trouver un ensemble de fonctions d'ondes  $\Psi$  tel que  $H \Psi = E \Psi$  aussi fonctions propres de l'opérateur  $O_k$  et donc classées par rapport à l'ensemble des opérations de symétries  $\{O_k\}$ .

Le groupe  $D_{3h}$  se décompose en 6 Représentations Irréductibles. On peut démontrer qu'il est possible de décomposer n'importe quelle représentation du groupe à l'aide de la table de caractères. Le caractère représente la trace de la matrice exprimant la transformation de symétrie pour chaque représentation irréductible. Cette table de caractères est présentée dans le tableau 2.4, ce dernier ne comporte que six colonnes [30].

La première colonne de la table de caractères indique les symboles de Mulliken pour des représentations irréductibles du groupe,  $A'_1, A'_2, A''_1, A''_2$  étant des R.I uni-dimensionnelles et  $E', E''$  des R.I bidimensionnelles.

- Les lettres  $A_i$  sont utilisées pour les espèces symétriques ou antisymétriques dans la rotation autour de l'axe qui possède l'ordre le plus grand :  
 $\chi(E) = 1$  et  $\chi(C_n) = 1$  représentation  $A_1$  (symétrique)  
 $\chi(E) = 1$  et  $\chi(C_n) = -1$  représentation  $A_2$  (antisymétrique)
- La lettre E est utilisée pour les espèces doublement dégénérées.
- La lettre F est utilisée pour les espèces triplement dégénérées.
- Les indices 1 et 2 indiquent un caractère positif ou négatif respectivement

par rapport au plan de réflexion verticale  $\sigma_v$  ou par rapport à un axe de rotation  $C_2$  perpendiculaire à l'axe principal :

$$\chi(C_2) = 1 \text{ ou } \chi(\sigma) = 1 \text{ indice 1, } \quad \chi(C_2) = -1 \text{ ou } \chi(\sigma) = -1 \text{ indice 2}$$

- Le prime ou les deux primes indiquent si la RI est symétrique ou antisymétrique par rapport au plan de réflexion  $\sigma_h$  horizontal :

$$\chi(\sigma_h) = 1 \text{ (')}, \quad \chi(\sigma_h) = -1 \text{ (")}$$

$D_{3h}$	E	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_3$	$3\sigma$
$A'_1$	1	1	1	1	1	1
$A'_2$	1	1	-1	1	1	-1
$E'$	2	-1	0	2	-1	0
$A''_1$	1	1	1	-1	-1	-1
$A''_2$	1	1	-1	-1	-1	1
$E''$	2	-1	0	-2	1	0
$\Gamma_R$	12	0	-2	4	-2	2

TABLE 2.4 – Table de caractères du groupe  $D_{3h}$ .

Des théorèmes généraux existent sur les propriétés des représentations irréductibles d'un groupe ainsi que sur les méthodes afin de trouver la décomposition d'une représentation quelconque sur les représentations irréductibles. Si l'on désigne par  $h$  l'ordre du groupe à savoir sa dimension,  $l_i$  la dimension des matrices de la représentation irréductible  $\Gamma_i$  et  $\{O_k\}$  l'ensemble des opérations du groupe de symétrie, on a

1.  $\sum_i (l_i)^2 = h$
2.  $\sum_k [\chi^{(\Gamma_i)}(O_k)]^2 = h$
3.  $\sum_k \chi^{(\Gamma_i)}(O_k) \chi^{(\Gamma_j)}(O_k) = 0$  si  $i \neq j$

Enfin, lorsque l'on veut procéder à la réduction d'une représentation réductible  $R$ , on applique la formule suivante où  $n_i$  est le nombre de fois où la  $i^{\text{ème}}$



représentation irréductible  $\Gamma_i$  apparaît) [31] :

$$n_i = \frac{1}{h} \sum_k g_k \chi^{(\Gamma_i)}(O_k) \chi^{(R)}(O_k) \quad (2.29)$$

$\chi^{(\Gamma_i)}(O_k)$  et  $\chi^{(R)}(O_k)$  sont respectivement les traces de l'opération de symétrie  $O_k$  pour les représentations R et  $\Gamma_i$ , et  $g_k$  l'ordre de la  $k^{\text{ième}}$  classe d'opérations.

Prenons l'exemple de la représentation matricielle des opérations de symétrie dans l'espace à 3 dimensions où l'on transforme le point M (x,y,z) en M' (x',y',z'). Les traces des matrices écrites précédemment sont résumés dans le tableau suivant :

$O_k$	E	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_3$	$3\sigma$
$g_k$	1	2	3	1	2	3
$\chi^{(R)}(O_k)$	3	0	-1	1	-2	1

TABLE 2.5 – Trace des matrices des opérations de symétries.

Appliquant la formule 2.29, on trouve  $R=0A'_1 \oplus 0A'_2 \oplus 1E' \oplus 0A''_1 \oplus 1A''_2 \oplus 0E''$ .

La molécule d'ammoniac a  $3N=12$  degrés de liberté, soit 12 mouvements réparties en : 3 translations, 3 rotations et 6 vibrations internes. On peut chercher la matrice représentant une représentation pour chaque opération de symétrie et en prendre la trace. On va ainsi déduire le tableau  $\chi^{(R)}(O_k)$  et pouvoir établir la composition de la représentation R sur les représentations irréductibles. Prenons l'exemple de la translation, et cherchons à établir le comportement de celle-ci pour chaque opération de symétrie : pour un déplacement  $\Delta z$  de tous les atomes, l'identité E, les rotations  $C_3$  et  $C_3^2$ , les symétries verticales  $\sigma$  ne changent pas le déplacement  $\Delta z$ , les autres opérations changent  $\Delta z$  en  $-\Delta z$ . Pour les déplacements  $\Delta x$ , on voit par exemple que pour l'opération  $C_3$ ,  $\Delta x$  se transforme en un déplacement suivant x et y tel que  $\Delta x' = -\frac{1}{2}\Delta x$  et  $\Delta y' = -\frac{\sqrt{3}}{2}\Delta x$ . En fait, on retrouve la représentation matricielle décrite précédemment pour la

transformation d'un point  $(x,y,z)$  en  $(x',y',z')$  et on trouve que la représentation de la translation est  $1E' \oplus 1A_2''$ .

$D_{3h}$	E	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_3$	$3\sigma$
Translation $x,y,z$	3	0	-1	1	-2	1

TABLE 2.6 – Caractères de la représentation d'une translation pour les opérations de symétrie de la molécule d'ammoniac.

Pour la rotation, on trouve

$D_{3h}$	E	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_3$	$3\sigma$
Rotation $R_x, R_y, R_z$	3	0	-1	-1	2	-1

TABLE 2.7 – Caractères de la représentation d'une rotation R de la molécule pour les opérations de symétrie

$$\text{et } \Gamma_R = A_2' \oplus E''$$

Pour déduire la représentation de la vibration de la molécule, on peut établir d'abord les matrices  $12 \times 12$  décrivant les transformations des mouvements de l'ensemble des coordonnées des atomes de la molécule :  $x_N, y_N, z_N, x_{H_1}, y_{H_1}, z_{H_1}, x_{H_2}, y_{H_2}, z_{H_2}, x_{H_3}, y_{H_3}, z_{H_3}$  sous l'effet des opérations de symétries. Des exemples sont données pour les opérations  $C_3, \sigma'$  et  $\sigma_h$  :

$$Mat(C_3) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

$$\text{Mat}(\sigma') = \begin{pmatrix}
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0
 \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

$$\text{Mat}(\sigma_h) = \begin{pmatrix}
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1
 \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

en ayant pris l'axe  $C_3$  comme axe  $z$ , les axes  $x_H$  dans le prolongement des liaisons N-H, et les axes  $y_H$  comme il faut pour faire des trièdres directs (non orthogonaux); l'axe  $x_N$  dans le plan  $\sigma'$ .

On en déduit les traces, par exemple  $\chi^{(Tot)}(E)=12$ ,  $\chi^{(Tot)}(C_3)=0$ ,  $\chi^{(Tot)}(\sigma')=2$  et  $\chi^{(Tot)}(\sigma_h)=4$ .

Le tableau complet des traces s'écrit :

$D_{3h}$	E	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_3$	$3\sigma$
Déplacement tous les atomes	12	0	-2	4	-2	2

TABLE 2.8 – Caractères de la représentation décrivant les déplacements possibles de tous les atomes.

puis la décomposition en représentations irréductibles :

$$\Gamma_{Totale} = 2A_2'' \oplus A_1' \oplus A_2' \oplus 3E' \oplus E'' \quad (2.33)$$

La représentation décrivant la vibration s'obtient par soustraction de la translation et de la rotation :

$$\Gamma_{R.Vib} = A_1' \oplus A_2'' \oplus 2E'$$

Nous verrons que ces représentations irréductibles sont utilisées pour classer les niveaux d'énergie, en particulier les niveaux vibrationnels, rotationnels et aussi les fonctions d'ondes de spin nucléaire.

# La molécule d'ammoniac : état de l'art

## 3.1 Introduction

L'ammoniac est un composé chimique, de formule  $\text{NH}_3$ . C'est une molécule pyramidale (l'azote est au centre tandis que l'hydrogène occupe trois de quatre sommets), le quatrième étant occupé par deux électrons (figure 3.1). La distance de l'atome d'azote au plan de trois atomes d'hydrogène est  $0.38 \times 10^{-8}$  cm et la longueur de la liaison N-H vaut  $1.02 \times 10^{-8}$  cm [32]. Cette molécule est de symétrie  $D_{3h}$ .

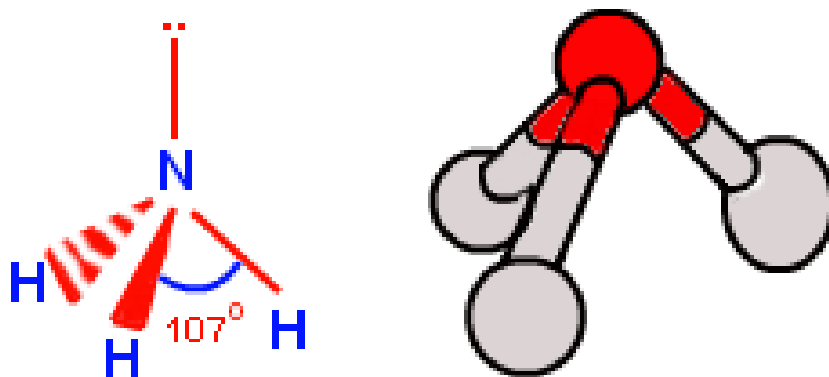


FIGURE 3.1 – Géométrie de molécule d'ammoniac.

## 3.2 Une particularité : l'inversion

L'inversion est le nom donné à une vibration de grande amplitude produit dans certains molécules, typiquement de forme pyramidale comme la molécule d'ammoniac.

Le phénomène d'inversion dans la molécule d'ammoniac provoque un dédoublement de niveaux d'énergie. On parle du mouvement des atomes de cette molécule, dans lequel l'azote se rapproche du plan des atomes d'hydrogène et ainsi peut le traverser pour arriver à une position nouvelle d'équilibre symétrique de la précédente. Pendant la transition d'un état à un autre la molécule devient plane et présentée par la symétrie  $D_{3h}$ . On sait que pour une molécule bien isolée le centre de masse supposé fixe et les autres atomes sont mobiles, mais dans le cas d'une molécule d'ammoniac on considère que seulement l'atome d'azote est mobile et les hydrogènes sont immobiles. Alors, seulement le mouvement de l'azote est pris en compte pour décrire la molécule. La forme d'énergie de potentielle qui détermine ce mouvement est présentée dans la figure 3.2. en fonction de la distance au plan des atomes d'hydrogène. Cette fonction présente deux minimums correspondant à deux positions d'équilibre en  $z=\pm a$ , c'est une fonction symétrique tel que  $V(z)=V(-z)$ . Une barrière de potentiel de  $2023 \text{ cm}^{-1}$  environ sépare les deux minimums.

En physique classique, l'azote est localisé dans l'un de deux puits et il ne possède pas d'énergie suffisante pour s'affranchir de la barrière de potentiel. Mais en mécanique quantique, après un certain temps l'atome azote peut se trouver dans l'autre puit. Ceci est possible en traversant la barrière par l'effet tunnel qui est représenté par les recouvrements des fonctions d'ondes localisées dans chacun des deux puits [25].

Si la hauteur de la barrière est infiniment grande, chaque niveau d'énergie serait deux fois dégénéré. L'atome d'azote peut être localisé autour de  $Z=a$  (appelé état

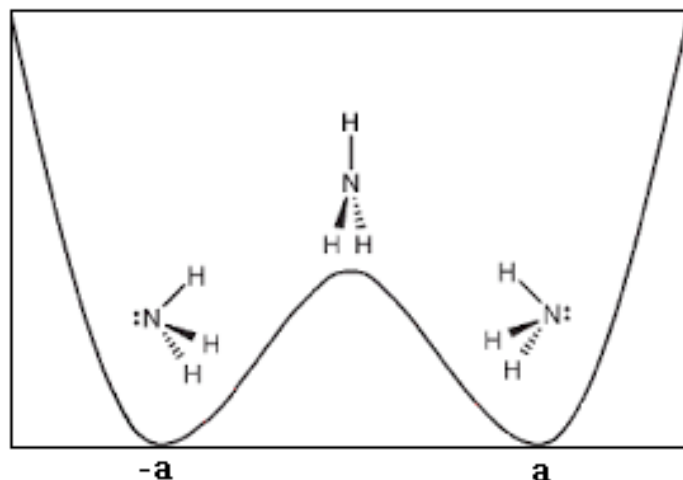


FIGURE 3.2 – Forme de potentiel de l'inversion de la molécule d'ammoniac.

du haut) ou bien autour de  $Z=-a$  (appelé état du bas). Dans ce cas, les fonctions d'ondes peuvent s'écrire :

$$\psi_b(z) = \phi(z + a) ; \psi_h(z) = \phi(z - a) \quad (3.1)$$

$\psi_b(z)$  peut s'annuler pour  $z \leq 0$  et  $\psi_h(z)$  pour  $z \geq 0$ , dans ce cas la molécule se ressemble d'un oscillateur harmonique de fonction propre centré à une valeur  $z=a$ .

Pour une hauteur faible de barrière, la particule d'azote pourra traverser cette barrière par l'effet tunnel. La dégénérescence est alors levée et chaque niveau d'énergie donne naissance à un doublet. Comme le potentiel est symétrique alors les fonctions d'onde doivent être soit symétriques soit antisymétriques. Il est trouvé que le niveau antisymétrique de chaque doublet à une supérieure à celle de niveau symétrique. Nous présentons les niveaux d'énergie d'inversion de l'ammoniac dans la figure 3.3. Les composants de doublet sont distants de  $0.8 \text{ cm}^{-1}$ , celles du deuxième de  $36 \text{ cm}^{-1}$  alors que ces deux doublets sont séparés

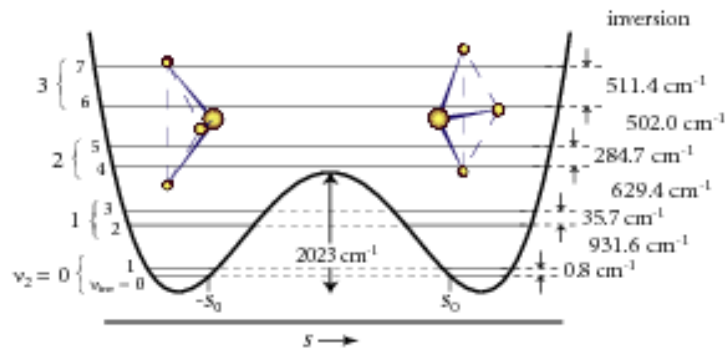


FIGURE 3.3 – Présentation des niveaux d'énergie de l'inversion de l'ammoniac. Double puit de potentiel en fonction de la distance entre l'atome d'azote et le plan des hydrogènes ( $s$ ).

de  $950\text{ cm}^{-1}$ . Ce dernier présente la fréquence de pliage symétrique ( $\nu_2$ ) de N-H.

### 3.3 Spectroscopie infrarouge

$\text{NH}_3$  est la molécule la plus observable dans les environnements astrophysiques. Elle est présentée dans l'atmosphère des planètes solaires [33], en effet elle est l'un des composés les plus abondants dans l'atmosphère de Jupiter et Saturne [34] : elle représente le quatrième composant par son abondance après  $\text{H}_2$ , He,  $\text{CH}_4$  dans l'atmosphère de Jupiter. L'étude du rapport isotopique  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  de la molécule d'ammoniac est très utile dans bien des domaines (écologie, biologie, les processus de biogéochimiques, etc).

$\text{NH}_3$  affecte tout le spectre infrarouge de la planète avec des bandes d'absorption situées vers  $10\text{ }\mu\text{m}$ ,  $5,5\text{ }\mu\text{m}$ ,  $4\text{ }\mu\text{m}$ ,  $3\text{ }\mu\text{m}$  et  $1,6\text{ }\mu\text{m}$ . Donc l'analyse de son spectre apporte des informations importantes. De nombreuses études expérimentales et théoriques ont été réalisées dans le domaine d'infrarouge pour mesurer le spectre d'absorption des deux isotopologues de l'ammoniac.

Un grand nombre de raies d'absorption ont été mesurées pour cette molécule par Lundsberg-Nielsen *et al*[35]. Dans ce travail, une liste de transitions avec



leurs intensités et quelques attributions sont proposées dans la gamme 6402 à 6898  $cm^{-1}$ . Ces attributions ont été effectuées en utilisant la technique GSCD (ground state combinaison difference), dont les transitions de même niveau supérieur sont considérées. Elles sont séparées par la différence d'énergie précise des niveaux fondamentaux obtenue à partir de la référence [36].

Ce travail a été complété par Berden *et al* [37]. Ceci s'est fait par une spectroscopie à diode laser accordable de jet froid de l'isotopologue principal dont 9 transitions sont attribuées à la bande vibrationnelle ( $\nu_1 + \nu_4$ ).

La spectroscopie de l'ammoniac était mentionnée dans la base de données HITRAN 2008 jusqu'à une énergie de 5600  $cm^{-1}$ , comprenant les bandes vibrationnelles ( $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4$ ) et plusieurs combinaisons de celles-ci. La version récente de la base de données HITRAN [11] contient une liste de transitions de  $NH_3$  mise à jour. Cette liste est basée sur la ré-analyse des spectres de l'ammoniac effectués par Down *et al* [38] en utilisant les données obtenues par Sung *et al* [39] grâce à une étude de spectroscopie en transformée de Fourier dans la gamme (6300-7000  $cm^{-1}$ ). A partir de ce travail Sung *et al* ont proposé une liste de transitions pour l'isotopologue principal  $^{14}NH_3$  comprenant position, intensité et quelques attributions.

En ce qui concerne l'isotopologue le moins abondant  $^{15}NH_3$  quelques informations sont disponibles. 1090 raies ont été signalées de 4944 à 5179  $cm^{-1}$  dans la base de données HITRAN. Dans les études récentes le spectre de  $^{15}NH_3$  dans la proche infrarouge a été étudié par Lees *et al* [40, 41, 42], dont un certain nombre des transitions ont été attribuées aux états vibrationnels ( $\nu_1 + \nu_3, \nu_1 + 2\nu_4, \nu_3 + 2\nu_4$ ). De plus, Lins *et al* [43] a proposé une liste de positions et intensités pour l'isotopologue  $^{15}NH_3$  dans le but de trouver les candidats du rapport isotopique de l'ammoniac.

Actuellement, les efforts sont focalisés pour préciser les identifications des tran-

sitions à  $J'$  (niveau du haut) faible dans la gamme  $6300-7000\text{ cm}^{-1}$  pour les deux isotopologues. Ce but peut se faire en utilisant la méthode de GSCD ou bien en analysant de spectres sont enregistrés par (cold-jet) [44].

La dépendance des intensités de transitions avec la température a été utilisée pour déterminer l'énergie de l'état de départ [45, 46, 47]. Nous avons développé dans notre travail une méthode pour exploiter les données expérimentales à différentes températures dans le but de déduire l'énergie de l'état de départ de chaque transition. Cette méthode est différente de la méthode à deux températures où elle permet de s'affranchir la connaissance précise de la pression. L'application de cette méthode permet d'identifier de nouvelles transitions et de confirmer des transitions attribuées par Sung *et al* pour l'isotopologue principal et Lees *et al* pour  $^{15}\text{NH}_3$ . L'information obtenue dans ce travail sur l'énergie de l'état de départ de chaque transition dans notre gamme spectral considéré représente un point de départ très important pour déterminer de l'énergie de l'état du haut et par suit d'attribuer toutes les transitions. L'attribution peut se faire en effectuant une connexion entre nos résultats et des calculs variationnel (calculs de spectres rovibrationnel en se basant sur la surface de potentiel et des méthodes ab-initio) [33, 48, 49, 50].

Une liste de transitions de l'isotopologue principal a été effectuée par Yurchenko *et al*[33]. Cette liste comporte la fréquence, les coefficients d'Einstein, les niveaux d'énergie et le nombre quantique pour chaque transition. Les énergies rovibrationnels et les fonctions d'ondes ont été calculées en utilisant une nouvelle spectroscopie de la surface d'énergie potentielle (PES) de  $\text{NH}_3$ . Les coefficients d'Einstein sont calculés par une méthode ab-initio à partir de la surface du moment dipolaire.

Nous présentons sur la figure 3.4, quelques bandes vibrationnelles obtenues par ce travail en fonction de  $J+K/J+1$ . Nous avons choisir de présenter les bandes

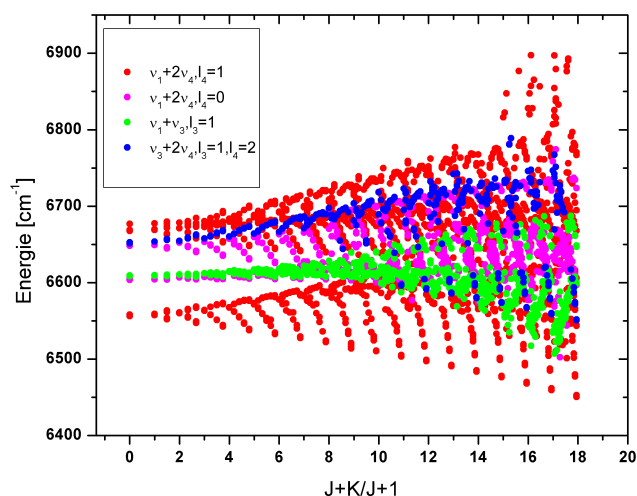


FIGURE 3.4 – Les bandes vibrationnelles de l’isotopologue principal en fonction de nombre quantique  $J+K/J+1$  existantes dans notre gamme spectrale.

observées dans notre gamme spectrale. Il est clair de cette présentation que la spectroscopie de l’ammoniac est très complexe. Nous remarquons que pour  $J \geq 12$  il ya de croisement entre les bandes ce qui provoque une difficulté pour étudier et identifier des transitions. Pour l’isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ , une liste de transitions à température ambiante est proposée par Yurchenko *et al* [50]. Cette liste est effectuée grâce aux calculs variationnels basées sur la même procédure utilisée pour l’isotopologue principal pour le même auteur. La liste obtenue comporte une information sur la fréquence, l’intensité et l’énergie de l’état de départ et de l’état du haut de chaque transition.

Récemment, Al Derzi *et al* collecte toutes les données expérimentales et théoriques existants pour la molécule et ainsi vérifie ses calculs suite aux résultats obtenues par les autres, les confirme et parfois les infirme . Ceci se fait pour effectuer une base données s’appelle Marvel [51] contenant tous les informations possibles de cette molécule.



## Techniques expérimentales

Dans ce chapitre, nous présentons les techniques expérimentales utilisées pour enregistrer les spectres de deux isotopologues de la molécule d'ammoniac. La gamme spectrale étudiée correspond à la moitié de la gamme accessible par notre source Diode Laser à cavité étendue (ECDLS) dans le proche infrarouge de 1520 nm à 1548 nm. Une étude complémentaire a pu être faite grâce à une source que nous avons eu en prêt concernant la gamme 1520-1570 nm.

Le montage expérimental est illustré dans la figure 4.1. Le faisceau issu de la diode laser est envoyé à travers une cellule multi-passage de type Herriot contenant le gaz. Cette cellule peut être refroidie grâce à un système cryogénique permettant l'enregistrement de spectres à des températures variables de 120 à 296 K. Quelques signaux de contrôle ( Fabry-Perot (F.P), cellule de référence, intensité laser) sont utiles pour l'analyse des données. Dans ce but, on a prélevé deux réflexions du faisceau principal grâce à une lame épaisse. Le premier faisceau est envoyé sur un étalon de Fabry-Perot permettant la calibration relative des spectres. Le second faisceau est divisé en deux par une lame séparatrice (50/50). Les deux faisceaux sont dirigés vers deux cellules d'absorption qui selon la gamme spectrale contiennent de l'acétylène (1510-1540 nm), l'isotopologue

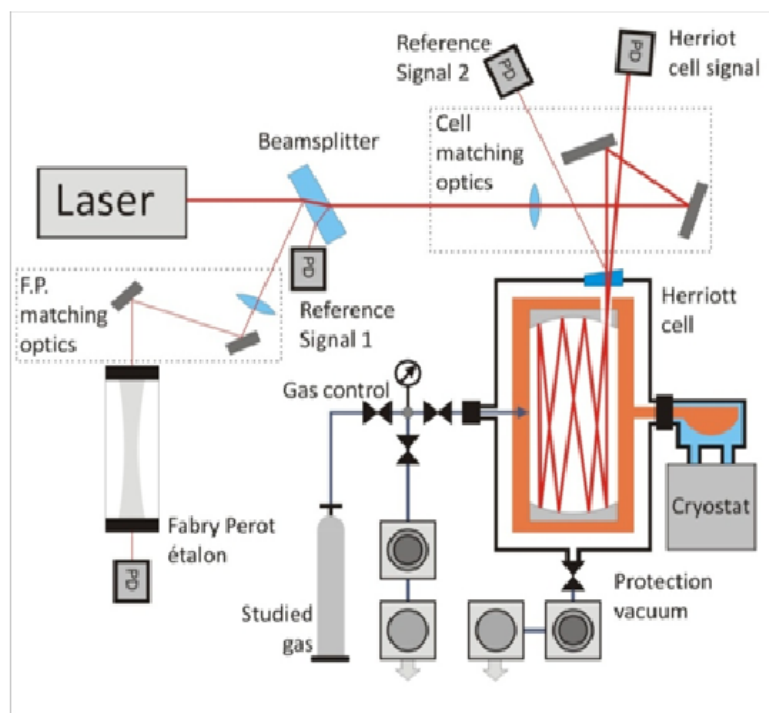


FIGURE 4.1 – Montage expérimental

principal de l'ammoniac ( pour la calibration de  $^{15}\text{NH}_3$ ) ou servent tout simplement à mesurer la fluctuation d'intensité du laser. Les signaux acquis par les différentes photodiodes sont numérisés grâce à une carte A/D, et tous traités simultanément par un programme de pilotage développé sous (Labview). Les principaux éléments du montage expérimental (Source laser, Cellule Herriot, étalon de Fabry-Perot, Photo-diodes) sont détaillés dans les paragraphes suivants.

## 4.1 Diode Laser à cavité étendue (ECDL)

Les diodes lasers sont devenues une technologie très répandue dans de nombreux domaines : physique expérimentale, ingénierie et industrie en raison de leur petite taille, de leur faible coût et de leur haute fiabilité. Elles ont des

intérêts considérables dans le domaine de la télécommunication optique mais aussi en spectroscopie atomique et moléculaire.

La diode laser à cavité étendue présente une accordabilité large et continue. L'ajout d'un élément sélectif en longueur d'onde comme un réseau permet d'améliorer les caractéristiques de diodes lasers particulièrement importantes pour notre domaine de spectroscopie haute résolution. En effet, cela permet d'augmenter la plage d'accordabilité de la diode laser, d'en diminuer la largeur spectrale, de la rendre monomode, et enfin suite à des progrès de l'ingénierie d'obtenir une source continuant sans saut de mode sur toute la plage d'accordabilité.

La figure 4.2 schématise un système diode laser à cavité étendue. Le système

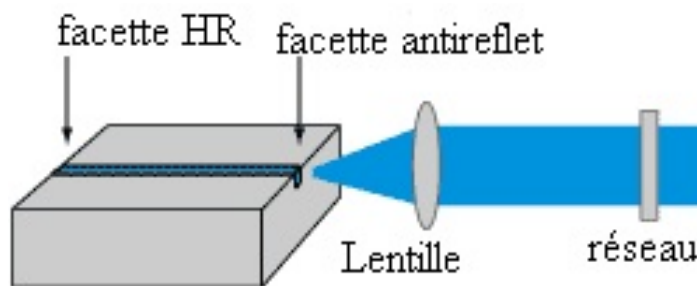


FIGURE 4.2 – Diode laser à cavité étendue. Elle se compose d'une diode munie d'une couche anti-reflet, une lentille et un réseau de diffraction.

est constitué d'une diode laser à semi-conducteur[52] dont la face arrière a été traitée d'une façon à augmenter sa réflectivité (traitement haute réflexion HR) et la face avant d'une façon à la réduire le plus possible (traitement antireflet).

Ainsi la diode laser configurée n'émet pas mais constitue un miroir et un milieu amplificateur. Un réseau de diffraction va être ajouté d'une manière à renvoyer la fluorescence de la diode sur elle-même en utilisant l'ordre 1 de la réflexion (configuration Littman). Ce réseau se comporte alors comme un miroir qui ferme la cavité, permettant l'effet laser d'où l'appellation "à cavité étendue". L'orientation du réseau (angle) permet de sélectionner une longueur d'onde dans la

courbe de gain du milieu amplificateur accessible par le système. Ce qui permet d'étendre la gamme de longueur d'onde.

L'augmentation de la réflectivité de la face arrière de la diode et l'ordre 1 du réseau permet d'affiner la largeur spectrale du système. Le dispositif comprend aussi une lentille qui permet de corriger la divergence par diffraction du milieu actif de la diode laser, et ainsi d'attaquer le réseau par un faisceau parallèle couvrant si possible l'ensemble de traits de celui-ci.

Les éléments sélectifs en longueur d'onde du système par ordre décroissant de sélectivité sont : la courbe de milieu amplificateur, la sélectivité angulaire du réseau, les modes de la cavité longue créée par la face arrière de la diode et le réseau. Un défaut d'alignement crée des pertes, qui ont pour conséquence une augmentation du courant de seuil et un dysfonctionnement (comportement multimode, sauts de mode).

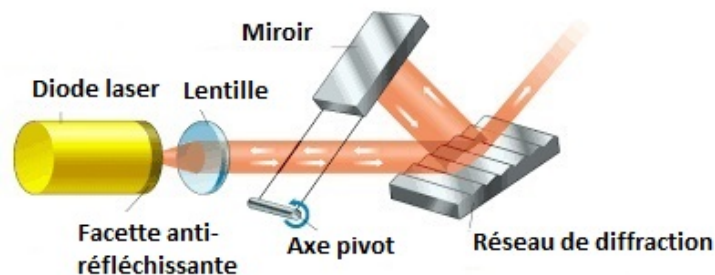


FIGURE 4.3 – Diode laser à cavité étendue en configuration de Littman-Metcalf. Le réseau de diffraction est fixé et le miroir utilisé pour renvoyer une partie de faisceau émis dans la diode laser. La longueur d'onde peut être réglée en faisant tourner le miroir.

Il existe deux types d'architectures d'ECDL utilisant un réseau, celles en configuration Littman-Metcalf [53] et celles en configuration Littrow [54]. L'ECDL en configuration Littman-Metcalf est illustré sur la figure 4.3.



Dans cette autre configuration, le laser diode est positionné pour éclairer le réseau de diffraction et le miroir mobile est positionné pour réfléchir l'ordre 1 diffracté par le réseau, ce qui permet de choisir la longueur d'onde par l'effet laser. Ce miroir est monté sur un pivot disposé d'une façon à fournir une rotation combinée avec une translation linéaire. Le balayage en longueur d'onde de laser est obtenu en combinant la rotation du miroir et l'allongement de la cavité. Le développement technologique a constitué à obtenir un balayage continu sans saut de mode sur la gamme complète accessible lié à la courbe de gain de la diode. L'ECDL en configuration Littrow est illustré sur la figure 4.4. Cette configuration ressemble en général au principe de celui de Littman-Metcalf à la différence près que le réseau de diffraction tourne autour d'un point au lieu de son axe central. L'avantage de la configuration de Littman-Metcalf sur l'autre configuration est

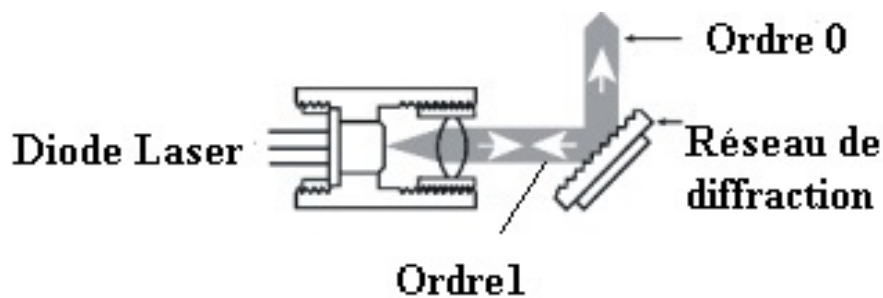


FIGURE 4.4 – Diode laser à cavité en configuration de Littrow. Le faisceau d'ordre 1 est diffracté en fournissant une rétroaction optique vers la couche active de la diode laser. La longueur d'onde peut être réglée en tournant le réseau de diffraction.

présenté par la possibilité de faire un accord continu à partir de la rotation d'un élément autour d'un point fixe. Cette configuration présente une grande sélectivité en longueur d'onde.

Les caractéristiques de diode laser à cavité étendue dépendent de la longueur de cavité externe, la rétroaction (feedback), la puissance optique et les paramètres

de diode laser. Le fonctionnement de la diode laser est réalisé par un système de contrôle qui comprend plusieurs modules des mesures :

1. Module de température

La température de la diode est contrôlée par un capteur thermo-électrique. Ceci permet de stabiliser la température pour une longueur d'onde choisie.

2. Module de courant

L'intensité du courant injecté dans la diode est contrôlée par un module de courant afin de modifier la longueur d'onde et la puissance laser émise par la diode.

3. Module de balayage

Ce module permet d'appliquer un signal périodique de type rampe sur la diode dans le but de varier (balayer) la longueur d'onde dans un intervalle déterminé. Cette variation est effectuée par une rotation simultanée du miroir autour de l'axe pivot. Ceci est effectué par un moteur à courant continu (Dc) pour changer d'une manière grossière la longueur d'onde de laser et un piézoélectrique (PZT) pour une variation fine. Ce dernier permet de contrôler précisément la longueur d'onde de laser et peut être utilisé aussi pour moduler sa fréquence pendant le balayage.

Les sources laser utilisées dans notre travail sont deux systèmes Newfocus[55] de diode laser à une cavité étendue (TLB-6328 et TLB 6728-P) avec une accessibilité de longueur d'onde de 1470 nm à 1548 nm ( $6460\text{-}6800\text{ cm}^{-1}$ ) et de 1520 nm à 1570 nm ( $6367\text{-}6578\text{ cm}^{-1}$ ) respectivement. Les deux systèmes (ECDL) utilisés sont de type de Littman-Metcalf (figure 4.3).

Un balayage continu et fin est effectué avec un saut de 0.27 nm ( $1.2\text{ cm}^{-1}$ ) en utilisant une cale piézoélectrique, par suite une rampe de tension de fréquence 10 Hz lui est appliquée pour obtenir une vitesse de balayage de  $0.2\text{ cm}^{-1}/\text{s}$ .

Nous choisissons d'enregistrer des parties de 5 nm couverts par un saut successive de 0.2 nm du moteur, ceci correspond à  $0.86 \text{ cm}^{-1}$  et par suite assure un recouvrement entre 25 spectres consécutifs.

Dans quelques zones spectrale, le balayage fin est mauvais avec présence non linéarité. En appliquant la même tension, le balayage piézo a été réduit dans certains cas. Pour cette raison, le saut du moteur diminue de 0.2 nm à 0.14 nm et par suite la plage de 5 nm a été couverte par 35 spectres. Malgré cette précaution et après l'analyse des spectres des deux isotopologues, quelques trous ont été trouvés dans les spectres de l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  dans la gamme comprise entre 1548 nm à 1550 nm . Cela a conduit à un manque d'information pour certaines transitions.

Pour couvrir les trous présentés nous avons servis des été effectués des enregistrements d'une façon manuelle par la deuxième source laser (source TLB 6728-P a été prête pour une semaine seulement). Néanmoins, nous avons confronté à une difficulté dans la calibration absolue de spectres puisque les enregistrements sont vite fait sans cellule de référence.

## 4.2 Interféromètre de Fabry-Perot

**Théorie de Fabry-Perot** L'interféromètre ou étalon de Fabry-Perot est un instrument optique qui utilise le principe d'interférence multiple de faisceaux lumineux [56]. Son spectre de transmission en fonction de la longueur d'onde présente de pics correspondant aux interférences constructives. Il est largement utilisé dans la spectroscopie pour une calibration relative des spectres dans tous les domaines de longueur d'onde mais aussi dans la réalisation de filtre interférentiels sélectifs.

Un schéma de l'interféromètre FP est présenté sur la figure 4.5. Il est constitué

de deux lames semi-réfléchissantes parallèles séparées par une distance  $L$ . Un dispositif permet d'orienter les lames pour régler leur parallélisme. Une de deux lames peut être montée sur une céramique piézoélectrique ce qui permet de faire varier la distance  $L$  et de visualiser par exemple le mode d'un laser monochromatique. Une autre possibilité est la réalisation d'un FP à épaisseur constante en utilisant des cales entre les deux miroirs.

La lumière provenant d'une source monochromatique et étendue entre dans la cavité et effectue des réflexions multiples cumulent un déphasage. Pour chaque aller-retour à l'intérieur de cavité, la valeur du déphasage dépend de la longueur d'onde, de l'angle d'incidence de réfraction du milieu trouvé entre les deux miroirs. Les faisceaux sortants de la cavité subissent des réflexions multiples en formant des interférences constructives ou destructives. L'image d'interférence est observé dans le plan focale d'une lentille de focalisation. Cette phénomène dépend de la différence de marche ( $\delta=2nL$ ) entre deux rayons consécutifs. Les

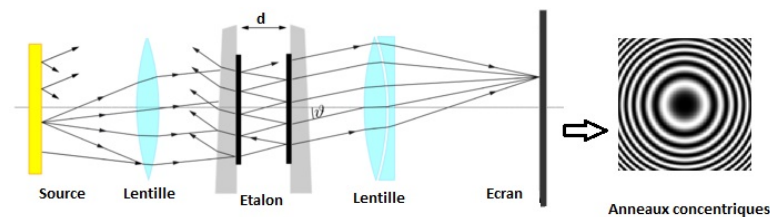


FIGURE 4.5 – Interféromètre de Fabry-Perot.

ondes transmises de la deuxième surface du système présentent une différence de phase  $\phi$  définie [57] par :

$$\phi = \frac{2\pi}{\lambda} 2nL \cos \theta \quad (4.1)$$

Où  $\lambda$  est la longueur d'onde,  $n$  est l'indice de réfraction du milieu entre les deux miroirs et  $L$  est la distance entre ceux derniers.

L'intensité relative transmise par l'interféromètre est calculée en faisant la

somme de différentes ondes transmises tenu compte de leurs déphasages et ainsi leurs amplitudes. Par suite l'intensité transmise s'écrit :

$$I = \frac{I_0}{1 + m \sin^2\left(\frac{\phi}{2}\right)} ; m = \frac{4R}{(1 - R)^2} \quad (4.2)$$

R étant le coefficient de réflexion.

La transmittance T de l'interféromètre est alors :

$$T(\phi) = \frac{I}{I_0} = \frac{1}{1 + m \sin^2\left(\frac{\phi}{2}\right)} \quad (4.3)$$

La variation de transmittance en fonction de longueur d'onde est illustré sur la figure 4.6, dans laquelle des franges brillantes (pics) très fines et bien espacés sont observés.

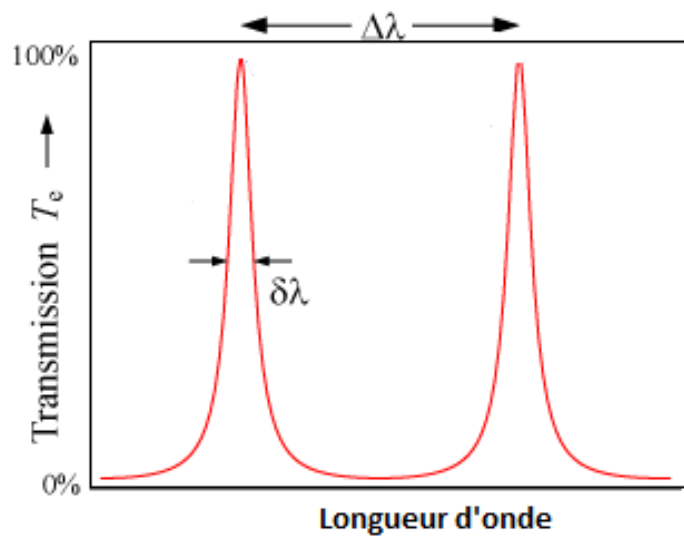


FIGURE 4.6 – L'allure de transmittance de l'interféromètre de Fabry-Perot en fonction de la longueur d'onde.

Les caractéristiques de cet interféromètre dépendent de l'épaisseur séparant les

miroirs ainsi la réflectivité des ceux-ci. La figure de l'interférence 4.5 présente les anneaux concentriques, leur taille dépend de la distance entre les surfaces réfléchissantes et la longueur d'onde de la lumière utilisée.

La finesse d'un interféromètre est d'autant plus importante que les anneaux sont fins. Celle-ci est défini comme étant le rapport de largeur des franges brillantes à l'écart entre deux franges successives. Alors, la finesse  $F$  de Fabry-Perot s'écrit :

$$F = \frac{\delta\phi}{\Delta\phi} = \frac{\pi\sqrt{R}}{1-R} \quad (4.4)$$

Où  $\Delta\phi$  et  $\delta\phi$  représentent respectivement l'écart entre deux pics successifs et la largeur à mi-hauteur d'une frange brillante (Full wWidth at Half Maximuim FWHM).

En se référant à l'équation 4.4 , la finesse dépend du coefficient de réflexion  $R$ , donc à l'augmentation de  $R$  les pics deviennent plus en plus étroites ce qui permet d'une meilleure résolution spectrale. La résolution de l'interférence Fabry-Perot est améliorée en augmentant  $\delta$  la différence de chemin optique entre les deux surfaces et ainsi l'ordre d'interférence entre les ondes transmises.

L'interféromètre à ondes multiples permet de bien visualiser les anneaux provenant de deux longueurs d'onde proches  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$ . Dans le but de mesurer l'écart spectral  $\Delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_2$  entre deux ondes transmises ou réfléchies, il suffit d'écarter les miroirs ( changer la distance  $L$ ) et par suite il est possible de repérer plusieurs interférences constructives et destructives des anneaux. L'interférence constructive est produit entre les faisceaux transmises qui sont en phase ce qui correspond à un pic d'étalon de haute transmission. Si les faisceaux sont en opposition de phase, l'interférence destructive se produit en correspondant à un minimum de transmission.

Lors du changement de la distance  $L$ , il y a  $K$  anneaux ont défilé pour  $\lambda_1$  et

$K+1$  anneaux pour  $\lambda_2$ . Alors la différence de marche optique entre deux ondes transmises consécutives s'écrit :

$$\delta = 2nL = K\lambda_1 = (K + 1)\lambda_2 \quad (4.5)$$

Alors, l'écart entre deux pics de transmission consécutifs est appelé l'intervalle spectral libre (Free spectral range ) de l'étalon, il s'écrit :

$$FSR = \Delta\lambda = (\lambda_2 - \lambda_1) = \frac{\lambda^2}{2nL} \quad (4.6)$$

Le réglage de l'étalon Fabry-Perot peut s'effectuer par plusieurs méthodes : inclinaison de l'ensemble d'étalon, déplacement des miroirs et changement de milieu entre les deux miroirs. Ceci consiste à rendre les miroirs parallèles d'une manière d'obtenir des interférences à ondes multiples. Dans ce paragraphe, nous faisons une description de l'étalon Fabry-Perot qui a été utilisé dans notre travail ainsi la méthode pour régler cet étalon.

Nous avons construit une cavité de Fabry-Perot à deux lames plan concaves semi-réfléchissantes distants de 15 cm. Les faces arrières de deux lames ont un traitement anti-reflet pour empêcher ces dernières de produire des interférences. Nous avons vu dans l'introduction de ce chapitre que deux réflexions sont prélevées du faisceau laser principal. L'une de deux réflexions va envoyer vers une cavité de Fabry-Perot. Avant de l'arrivée à la cavité FP, il est collimaté à travers une lentille convergente. Pour assurer la superposition optique entre le laser et l'étalon deux miroirs plans sont utilisés. Ce faisceau se réfléchit sur chaque miroir afin d'entrer dans la cavité, à la sortie un signal est détecté par une photo-diode.

Pour obtenir la phénomène des interférences il faut régler l'étalon de FP. Dans ce travail, le réglage est effectué par plusieurs étapes. Dans la première étape nous

avons enlevé les deux lames de FP et nous avons fait un alignement optique entre l'axe de cavité du laser et celui de la photo-diode. Ceci est effectué en tournant les miroirs plans qui sont fixés sur des montures, la rotation se fait à l'aide de deux vis où on a donc procédé par itération en jouant successivement sur ces deux vis pour trouver l'alignement. Dans la deuxième étape, les deux lames sont mises l'une après l'autre. Une lame est positionnée près de la photo-diode de façon à obtenir la détection d'un signal. Une deuxième lame est mise de façon à assurer le parallélisme avec la première lame. Puisque la face arrière de chaque lame est traitée anti-reflet, alors la lumière réfléchie sur la deuxième face de chaque lame peut être renvoyée dans la cavité laser. Ceci entraîne une perturbation dans le fonctionnement du laser qui se traduit par la présence des oscillations dans les spectres (voir figure 4.7). C'est pourquoi nous avons placé un isolateur optique avant l'entrée dans le Fabry-Perot dont nous décrivons le fonctionnement dans la section suivante. La figure 4.8 présente montre les

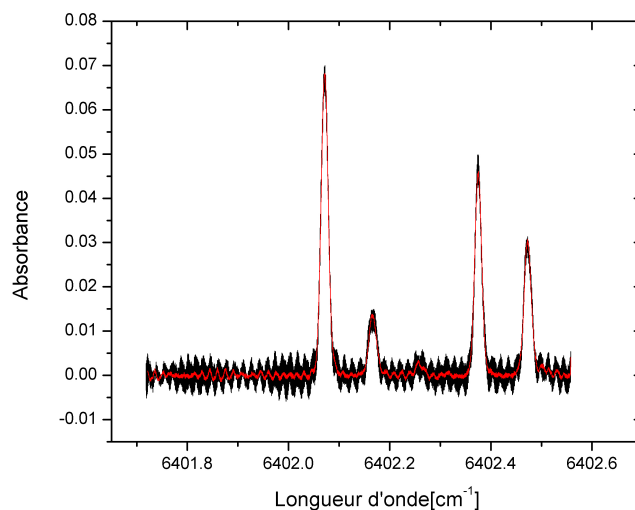


FIGURE 4.7 – Exemple d'un spectre avec bruit. Des oscillations se présentent dans le spectre noir. Le spectre rouge est le spectre traité en éliminant les oscillations (Le traitement sera détaillé dans le chapitre suivant.)



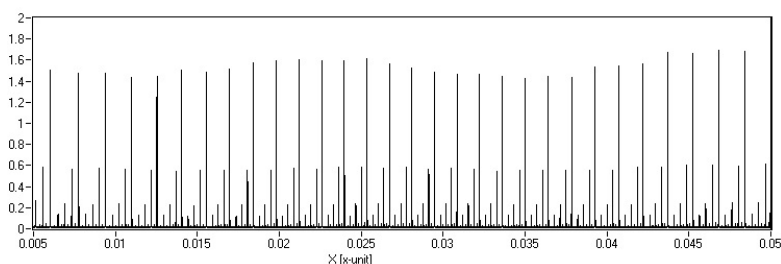


FIGURE 4.8 – Un exemple des pics de Fabry-Perot obtenues dans ce travail.

pics d'interférence enregistrés une fois le réglage de la cavité FP effectuée. Nous pouvons distinguer deux types de pics : pics principaux et pics secondaires (ont d'intensités décroissantes). Ceci traduit que le réglage optique de FP n'est pas parfait mais dans notre travail nous sommes servi seulement des pics principaux pour la calibration relative puisque ils sont séparés par la même distance (FSR) et chacun correspond à une position dans le spectre d'absorption de l'ammoniac. La calibration relative des spectres de la molécule d'ammoniac grâce à ce signal sera détaillée dans le chapitre suivante.

### 4.3 Isolateur optique

Nous présentons le principe d'un isolateur optique brièvement dans cette partie. C'est un composant permettant de protéger les composants optiques des réflexions parasites en utilisant l'effet de Faraday [58]. En général, il est utilisé pour protéger les systèmes lasers de retours optiques qui provoquent des instabilités à l'intérieur de cavité. L'isolateur optique est constitué : d'un polariseur d'entrée (polarisé verticalement), d'un rotateur de Faraday et polariseur de sortie (polarisé de  $45^\circ$ ) (fig. 4.9). La lumière qui traverse le premier polariseur à gauche s'est polarisée verticalement. Ensuite, la polarisation subit une rotation de  $45^\circ$  dans le rotateur ce qui lui permet d'être orienté selon l'axe passant du deuxième polariseur (à droite). Alors, un signal a pu traverser le dispositif de gauche à

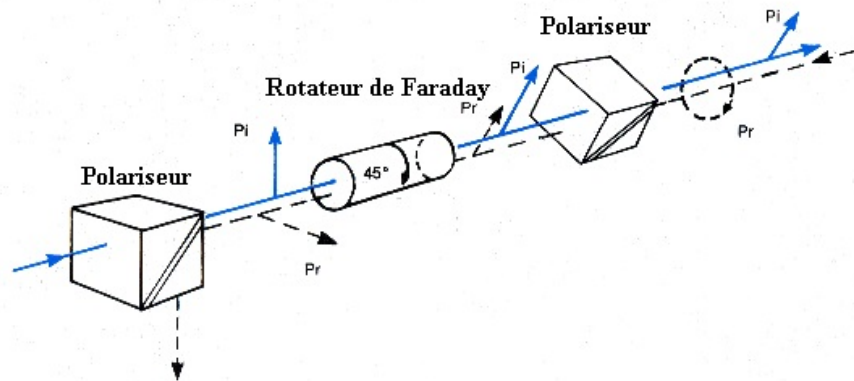


FIGURE 4.9 – Isolateur optique.

droite, c'est le sens passant.

En revanche, la lumière entrante en sens inverse ( de droite à gauche) est polarisée grâce au polariseur de sortie à  $45^\circ$ . Sa polarisation subit une rotation de même angle donc elle est orienté horizontalement. Cela la rend polarisée orthogonalement au polariseur d'entrée. Par suite, la lumière est totalement absorbée et aucun signal n'a pu traverser le dispositif dans ce sens, c'est le sens bloquant.

## 4.4 Cellules multi-passages

Les cellules multi-passages sont des systèmes optiques utilisés couramment dans le domaine de spectroscopie pour étudier les composantes gazeux d'intérêt atmosphérique ou astrophysique [59].

Ces dispositifs sont utilisés pour leur long chemin optique qui permet d'augmenter la sensibilité de détection mais aussi pour leur compacité qui peut permettre de les chauffer ou de les refroidir afin d'étudier le comportement des spectres à température variable.

Ceci permet par exemple de simuler les spectres de molécules existantes dans

les atmosphères froides de planètes.

Nous pouvons distinguer en gros deux types de cellules multi-passages comme : cellules de White [60] lorsque deux miroirs font face à un troisième, et cellules de Herriott [59] lorsque deux miroirs sphériques sont en vis à vis. Dans cette partie nous allons parler de la cellule Herriott seulement puisqu'elle est utilisée dans notre expérience.

### Cellule Herriott

La cellule multi-passage de Herriott inventée par Donald R. Herriott and Harry J. Schulte en 1965 [61], a été utilisée pour l'amplification de masers optiques ( amplification de la lumière par émission stimulée de rayonnement dans le domaine de micro-onde). La cellule Herriott de long chemin optique permet de mesurer les traces gazeuses avec une haute sensibilité [62]. De plus, ce type de cellules a été utilisé pour étudier la spectroscopie d'absorption moléculaire à une température inférieure à 15 K dans le domaine infrarouge en utilisant une diode laser accordable [63]

Cette cellule est composée de deux miroirs concaves ( $M_1$ ,  $M_2$ ) de rayon de courbure identiques séparés par une distance  $d$  comme montre la figure 4.10. Un orifice est réalisé sur l'un de deux miroirs par ce trou. Le faisceau laser

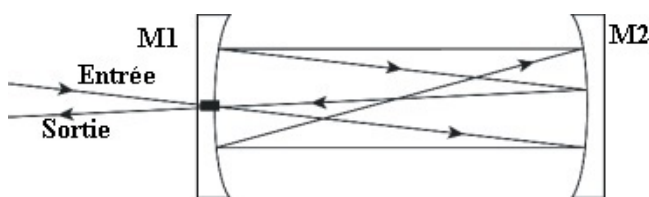


FIGURE 4.10 – Cellule multi-passage de type Herriott.

entrant dans la cavité effectue  $N$  aller-retour en décrivant un ensemble de taches lumineuses concentriques sur chaque surface des deux miroirs avant de sortir par le même orifice d'entrée. La longueur du trajet optique est principalement

déterminée par la distance  $d$  entre les miroirs et le nombre de réflexions. Le faisceau entre dans la cellule avec une angle d'incidence  $i$  et en sort avec un angle plus grand pour assurer une séparation entre l'entrée et la sortie permettant des mesures précises des absorptions. La connaissance de ces angles permet d'obtenir une information sur la longueur d'absorption optique.

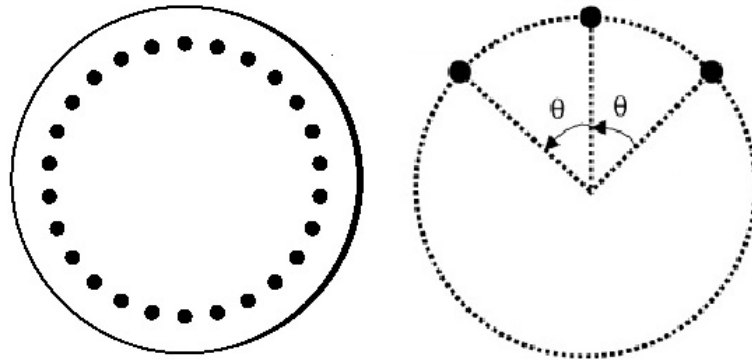


FIGURE 4.11 – Un exemple de taches lumineuses formées sur chaque miroir. Deux réflexions consécutives sont séparés par l'angle  $\theta$ .

Les spots lumineux observés sur chaque miroir (figure 4.11) [64] forment des ellipses et le délai du système est déterminé par les rayons des miroirs et la distance entre eux. On peut écrire le nombre de spots par l'équation suivante [65] :

$$\cos\left(\frac{K\pi}{N}\right) = \sqrt{g_1 g_2} ; g_1 = 1 - \frac{d}{R_1} ; g_2 = 1 - \frac{d}{R_2} \quad (4.7)$$

Avec  $N$  est le nombre d'aller-retour sur chaque miroir,  $K$  le nombre de tours effectué par le faisceau lumineux autour de l'axe optique (axe passant par les centres de deux miroirs).  $d$  est la distance entre les deux miroirs,  $R_1$  et  $R_2$  rayons de  $M_1$  respectivement  $M_2$ . Si  $R_1 = R_2 = R$  donc  $g_1 = g_2$  et par suite la distance entre les deux miroirs peut s'écrire :

$$d = R(1 - \cos \theta) ; \theta = \frac{K\pi}{N} \quad (4.8)$$

Un changement de la distance  $d$  correspond à un changement de l'angle  $\theta$  (angle entre deux réflexions ou taches consécutives). Les taches lumineuses répètent elles mêmes après effectués  $K$  tours sur chaque miroir donc  $2K$  tours en total pour les deux miroirs. Alors le faisceau entre et sort de la cellule de même endroit effectue une distance de  $2Kd$ .

Dans l'expérience, nous avons utilisé une cellule Herriott (HC) construite par Mondelain *et al* [59] pour effectuer des mesures d'absorption moléculaire à des températures faibles. Cette cellule est fabriquée entièrement de cuivre et constituée des deux miroirs concaves de rayon de courbure de 15 cm chacun. La surface concave de chaque miroir est revêtue par une couche d'or ( traitement haute réflexion). Deux orifices sont réalisés sur l'un de deux miroirs dont chacun a un diamètre de 5 mm : un est situé au centre et un autre se trouve à 16 mm de centre. Les deux miroirs sont distants de 14.039 cm et chacun d'eux est monté sur une bride effectuée sur chaque extrémité du corps de la cellule dont les miroirs sont fixés au moyen d'un métal Indium. Enfin, le système est enfermé par des fenêtres de  $\text{CaF}_2$  pour protéger la cellule lors de variation de la température.

Un faisceau laser (ECDL) est envoyé à travers la cellule contenant le gaz d'ammoniac. La largeur de faisceau laser peut être plus grand que la largeur de l'orifice percée sur l'un de deux miroir de la cellule. C'est pourquoi nous avons utilisé une lentille convergente devant l'entrée de la HC.

Le faisceau entrant à la cavité effectue  $N$  passages avant de sortir de l'orifice au centre. L'angle entre les rayons entrant et sortant dépend de nombre du passages effectué par le faisceau dans la cavité. La mesure de cette angle permet de déterminer la longueur d'absorption  $L$ . Chaque passage de la lumière effectue une tache lumineuse ( spot), le nombre de spots permet de calculer la longueur d'absorption  $L$  du gaz à l'intérieur de la cellule. La longueur d'absorption du gaz dans la cellule Herriott utilisée dans ce travail est 6.92 m.

La température du gaz d'ammoniac est contrôlé par la stabilisation de la température de la HC. Ceci se fait grâce à un circuit automatisé pour contrôler le système de refroidissement et le réchauffement. Ceux-ci sont effectués grâce à un système (CTI-Cryogenics Model 22 C Cryodyne cooler) et deux résistances de  $25\Omega$ . Les deux systèmes sont couplés par un contrôleur de la température (Lake Shore cryogenic Model 331). Ceci offre une haute précision de la température (variation absolue de la température de HC au dessous de 0.5 K) et une uniformité de la température du gaz ( $\leq 0.02$  K) de 12 à 300 K.

Dans ce travail, nous avons effectués des enregistrements de spectres à des températures variables de 150 K à 296 K grâce au système de refroidissement et de réchauffement de la HC.

Un petit changement de l'angle d'incidence du faisceau lumineux permet parfois de créer une interférence à l'intérieur de la cellule. Ceci provoque une présence des oscillations dans le spectre d'absorption du gaz considéré. Celles-ci duent des interférences entre les différents passages à l'intérieur de la cellule. Ces oscillations sont prises en compte dans notre travail afin de les éliminer des spectres. Cette étape sera détaillée dans la partie suivante.

## 4.5 Le détecteur : une photo-diode

Une photo-diode est un semi-conducteur ayant la capacité de détecter un rayonnement et de le transformer en un signal électrique [66]. Elle est constituée d'une jonction PN, configuration de base qui fut améliorée par l'introduction d'une couche (non dopé) intrinsèque (I) entre les couches (électrons) n et p (trous) pour constituer la photo-diode PIN (figure 4.12). Le photo-diode PIN est l'une de formes le plus utilisé aujourd'hui, ce type recueille les photons de la lumière plus efficacement que la photo-diode de type PN et offre une capacité

inférieur [67]. On peut distinguer deux autres types de photo-diode, une photo-diode d'Avalanche et de Schottky. La première type est utilisée pour la lumière faible, elle offre des niveaux de gain très élevés mais avec des niveaux de bruit ainsi élevés. La deuxième, compte tenu de sa faible capacité est utilisé dans les systèmes de communication à large bande passante.

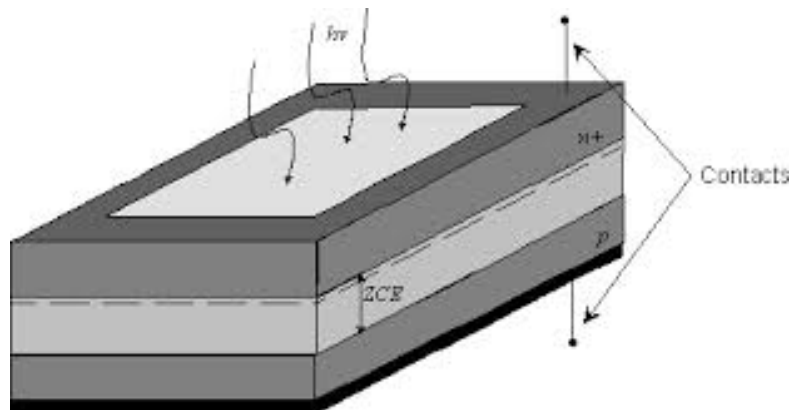


FIGURE 4.12 – Structure d'une photo-diode.

La lumière absorbée dans la région de déplétion ou la région intrinsèque (Zone de charges d'espace ZCE) de la photo-diode génère des paires électron-trou, dont la plupart contribuent à un photo-courant [68]. Les électrons et les trous libres ou les électrons peuvent se combiner avec des trous pour former des atomes complets. Il est possible que les paires électron-trou restent libres et être tirées à l'extérieur de ZCE par un champ externe ce qui produit un courant photo-électrique.

les Photo-diodes peuvent avoir de grandes ou de petites surfaces, elles ont un temps de réponse plus lent quand leur surface augmente. Les photo-diodes PIN sont couramment utilisées à la place de jonction p-n pour augmenter la vitesse de réponse. La photo-diode peut être utilisée pour détecter le rayonnement ultra-violet à vide ou de rayons X et elle peut être connectée à une fibre optique pour permettre à la lumière d'atteindre la partie sensible de l'appareil.

La photo-diode peut être exploitée en deux modes :

- Mode photo-voltaïque ou mode de polarisation nulle : quand la photo-diode est éclairée par une source lumineuse génère une tension mesurable. Ce mode exploite l'effet photo-voltaïque qui représente la base des cellules solaires.
- Mode photo-conductrice : dans ce mode la diode est polarisée en inverse cela permet de réduire le temps de réponse puisque la polarisation inverse supplémentaire augmente la largeur de la couche ZCE ce qui provoque une diminution de la capacité de jonction .

Une photo-diode peut être représentée par une source de courant en parallèle avec la capacité de jonction  $C_j$  (due de la zone de charge et elle est inversement proportionnelle à la largeur de cette zone), l'ensemble est connecté en série avec une résistance interne (due de la résistance de substrat et aux résistances de contacts).

**4.5.0.0.1 Caractéristiques d'une photo-diode** Une photo-diode est caractérisée par la vitesse de réponse, photo-sensibilité (rapport de courant photo-électrique sur la puissance de la lumière incidente), rendement quantique ( rapport du nombre de charges traversant la jonction sur le nombre de photons incidents), courant d'obscurité ( courant traversant la photo-diode en l'absence de la lumière lorsqu'il fonctionne en mode photo-conducteur) et la largeur de la bande passante .

- Vitesse de réponse de la photo-diode : Le temps de réponse de la photo-diode est défini comme le temps nécessaire pour atteindre 90 % du courant final. Ce temps dépend de la durée de la diffusion de porteurs dans la zone ZCE, le temps de passage à travers la zone de déplétion s'appelle temps transit et la capacité de la jonction. La diffusion est un processus lent,



dans le but d'augmenter la vitesse de réponse de la photo-diode la zone de déplétion construite doit être proche de la surface irradiée du dispositif. Cependant la zone de déplétion ne peut être trop épaisse puisque ceci provoque un allongement du temps de passage des porteurs de charge et par suite le temps de réponse [69] en fréquence. Le temps de passage est déterminé par la vitesse de la saturation des porteur de charge.

La réponse d'une photo-diode est optimisée dans une bande spectrale étroite correspondant au signal optique à détecter. La taille de la photo-diode est petite et maintient une capacité compatible avec un temps de réponse court.

- photosensibilité : Une des caractéristiques principales des photo-diodes est appelée la sensibilité du photo-diode. Elle caractérise la conversion optique-électrique du ce dernier. Elle définie comme le rapport du courant photo-généré sur la puissance optique incident en court-circuitant la sortie.
- Rendement quantique : Il représente le nombre de porteurs générés par les photons incident ou absorbés dans une photo-diode. On peut distinguer deux types de rendement, un rendement interne (le rapport de nombre de paires électrons-trou et le nombre de photons absorbées) et un rendement externe (le rapport de nombre de paires électrons-trou et le nombre de photons incidents). Si le rendement externe est supérieur à 1, alors le courant généré est amplifié et que la photo-diode possède une mécanisme de gain [70].
- Bande passante : La bande passante d'une photo-diode est limitée généralement par des paramètres électriques (résistances externes et capacité) ou par effet interne tels que la vitesse de porteurs de charge. Cette bande est reliée de temps de réponse de la photo-diode et la capacité, on peut la

représenter par la fréquence de coupure et s'écrit :

$$f_c = \frac{1}{2\pi R_L C_j} \quad (4.9)$$

Cette fréquence est exprimée en dB.

La photo-diode peut être composée de différents matériaux suivants les applications souhaitées. Pour l'application dans le visible le Silicium (Si) est principalement utilisé en raison de son faible coût de production. Pour des applications dans la domaine infrarouge le Germanium (Ge) est utilisé du fait de sa grande sensibilité dans les grandes longueurs d'ondes. Il existe aussi des photo-diodes fabriquées de : Arséniure de Gallium Indium (InGaAs) et Phosphure Arséniure de Gallium Indium (InGaAsP). Elles sont aussi appliquées dans le domaine infrarouge.

Le choix des matériaux utilisés est imposé par le seuil de détection  $\lambda_s$  qui est défini comme la longueur d'onde dans laquelle l'absorption de la lumière devient faible. Le seuil de détection s'écrit [70] :

$$\lambda_s = \frac{1.24}{E_g} \quad (4.10)$$

Avec  $\lambda_s$  est exprimée en  $\mu\text{m}$  ,  $E_g$  est la largeur de bande interdite exprimée en eV .

Dans ce travail, nous avons bénéficié des photo-diode à base de (InGaAs) pour détecter le signal d'absorption du gaz de l'ammoniac, le signal de Fabry Perot et le signal d'une cellule de référence. Ce type de photo-diode possède une vitesse de réponse élevée et une bonne sensibilité dans la gamme (900-1700 nm). La photo-diode utilisée provient de la série G8376 de technologie InGaAs PIN du Fabrican Hammastu. Elle est de modèle G8379-03 qui est monté dans une boîtier métallique. Elle présente une surface active de diamètre 0,3 mm, la

photo-sensibilité est de 0.7 A/W à  $\lambda=1064$  nm. La bande passante à -3 dB peut atteindre 470 MHz.



## Analyse des données expérimentales

Dans notre travail, les spectres des isotopologues  $^{14}\text{NH}_3$  et  $^{15}\text{NH}_3$  ont été enregistrés dans la gamme 1520-1570 nm ( $6367\text{-}6578\text{ cm}^{-1}$ ) à quatre températures (155 K, 180 K, 220 K et 296 K) à l'aide d'un spectromètre (ECDLS : spectromètre à cavité étendue). La pression utilisée dans l'expérience est comprise entre 0.5 et 12 Torr. L'augmentation de pression se justifie pour augmenter le signal d'absorption dans la gamme 1550-1570 nm où les transitions deviennent faibles. Il convient cependant de rester dans une limite où la largeur collisionnelle n'augmente pas trop, afin de préserver la résolution. A une température de 180 K, la pression de vapeur saturante est de 15 mbar environ. Pour des températures inférieures, cette pression chute rapidement et ainsi limite de fait la valeur que l'on peut obtenir dans la cellule multi-passage.

L'analyse de données expérimentales (signaux acquis par les photo-diodes) a été réalisée à l'aide de logiciels spécifiques (Labview, Fityk). Nous décrivons dans ce chapitre les étapes du traitement de données telles que : l'estimation de la ligne de base, l'obtention du signal d'absorption, la calibration relative des spectres grâce aux franges de Fabry-Perot, son ajustement par une somme de profil de Voigt et la calibration absolue en utilisant les raies de référence.

Nous présentons aussi d'absorbance les difficultés rencontrées, en particulier la présence des oscillations plus ou moins importantes dans le spectre et les méthodes utilisées pour le traitement. Enfin, nous montrerons qu'il est possible en présence de signaux faibles, de reconsidérer notre estimation de la ligne de base dans le but d'obtenir des résultats plus fiables.

## 5.1 Traitement du signal brut

Un exemple de signal d'absorption brut est présenté sur la figure 5.1. Il représente le signal acquis par le photo-diode qui reçoit le faisceau laser après son passage dans la cellule Herriott. L'application de la loi de Beer-Lambert

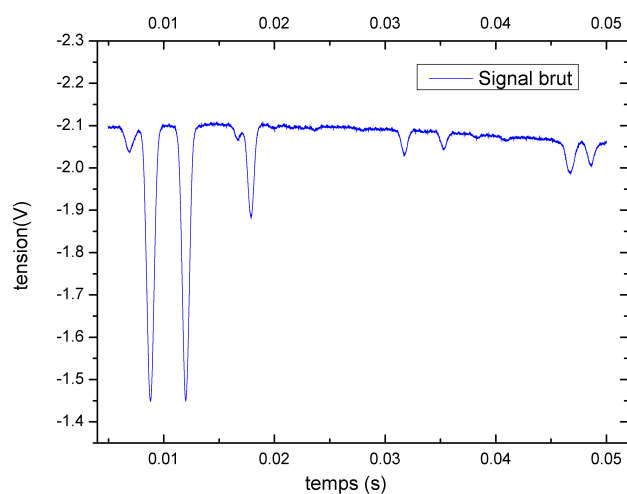


FIGURE 5.1 – Un signal d'absorption brut.

pour obtenir l'absorbance  $\alpha$  est :

$$I = I_0 \exp^{-\alpha L} \quad (5.1)$$

Nous devons donc considérer le signal  $I_0$  en l'absence de gaz dans la cellule. Plusieurs techniques sont possibles pour obtenir ce signal. La première et peut-être la plus exacte consiste à enregistrer pour chaque spectre un signal avec gaz et un signal en l'absence de gaz. Mais cette technique n'est pas possible dans notre cas, puisque nous devons enregistrer successivement un grand nombre de spectres de  $1.2 \text{ cm}^{-1}$ . La seconde consiste à prélever une partie de faisceau avant son entrée dans la cellule et ainsi à enregistrer sur une photo-diode la variation de l'intensité laser. Dans ce cas, il faut être sûr que l'on collecte la totalité de l'intensité incidente, et on ne tient pas compte de la déformation que peut subir le faisceau à l'intérieur de la cellule Herriot, indépendamment de la présence du gaz. Nous avons choisi une troisième solution pour obtenir cette ligne de base en utilisant le signal lui-même.

La ligne de base peut être facilement estimée pour des raies isolées que celles non isolées. Dans ce travail, les transitions peuvent être considérées comme isolées. Ceci dépend de la gamme de pression que nous avons utilisée dans l'expérience et ainsi de la densité de raie qui dépend du nombre des raies par  $\text{cm}^{-1}$ . La propagation de faisceau lumineux peut être perturbée à l'entrée de la cellule Herriot par l'absorption du gaz. Ceci est vrai s'il y a un changement d'indice  $n$  de milieu. Mais on peut considérer que cette cellule est vide puisqu'on a mis une petite quantité de gaz.

Nous allons alors extraire les parties sans absorption puis procéder à une interpolation entre ces parties. De la qualité de ce procédé dépend l'erreur que l'on peut commettre sur la valeur de l'absorbance.

Un exemple de ce procédé est illustré dans les figures 5.2 et 5.3. Ce processus a été développé avec une interface Labview. La loi de Beer-Lambert impose que le signal doit être nul lorsque l'absorption est totale, la première étape est donc de considérer le zéro de la photodiode, à savoir le signal reçu lorsque l'on

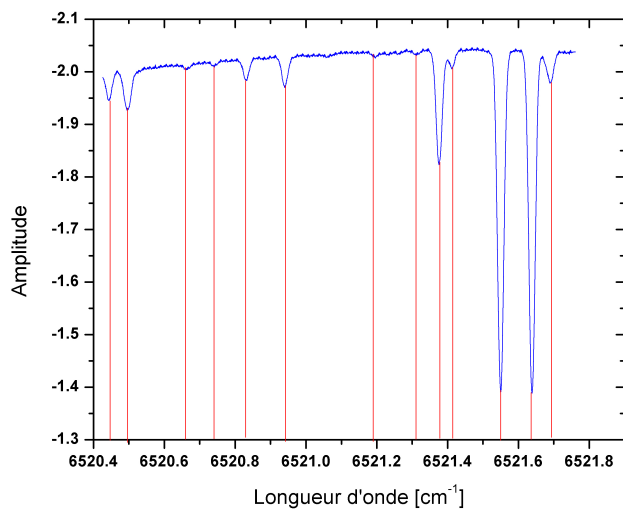


FIGURE 5.2 – Pointage de l'ensemble des raies d'absorption (bâtons rouges) visibles en utilisant un programme peak-find sous un logiciel Labview.

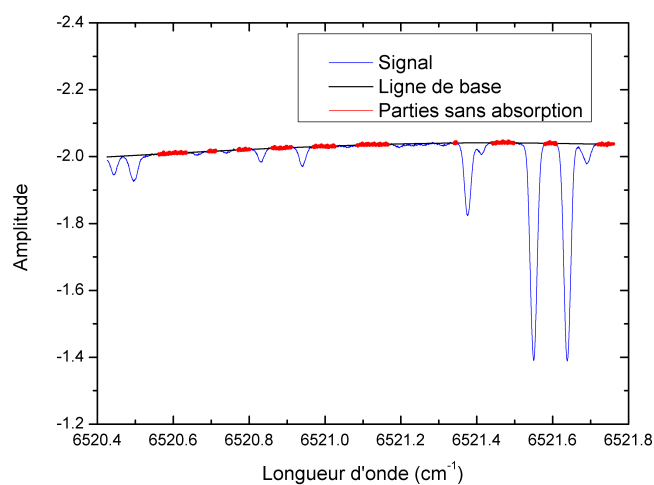


FIGURE 5.3 – Extraction de la ligne de base (tracé noir). Les parties sans absorptions sont considérées (tracé rouge) et une interpolation spline est appliquée par continuité pour déduire la ligne de base.

bloque le faisceau laser. Cette valeur d'environ 6 mV, est mesurée régulièrement pendant les phases d'enregistrement. Ce zéro est soustrait au signal brut avant



d'extraire la ligne de base et de calculer le rapport logarithmique  $I/I_0$ . Lors de

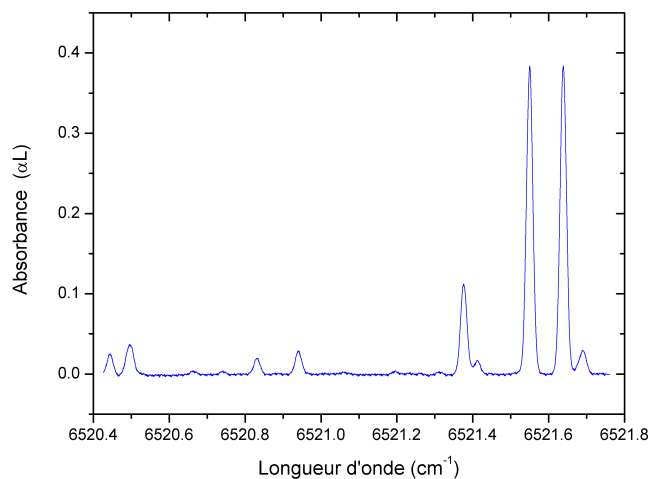


FIGURE 5.4 – L'absorbance obtenue après l'opération  $-\ln(I/I_0)$  en fonction de la longueur d'onde de Laser.

certaines enregistrements à pression plus élevée, nous avons observé la saturation de certaines raies intenses avec un plateau caractéristique mode du zéro de la photodiode correspondant à l'absorption totale par le gaz de la lumière à la longueur d'onde de la transition. Cependant cette valeur ne correspondait pas exactement au zéro de la photo-diode : mais il subsistait donc un peu de lumière sur celle-ci. Nous pouvons penser que la totalité de la lumière laser ne se trouve pas concentrée sur le mode longitudinal de la cavité mais qu'il subsiste des photons sous forme des plateaux réparties sur la courbe de gain du milieu amplificateur de la diode laser. Cette faible contribution est difficile à estimer dans tous les cas et nous avons considéré et évalué que sa non prise en compte occasionnait une erreur importante seulement sur les raies voisines de la saturation et une erreur faible dans les autres cas ( absorption inférieure à 90 %,  $\alpha L \leq 2.3$  ). En tenant compte du fait que nous avons un grand nombre de spectres à traiter, un processus automatique a été développé pour extraire

la ligne de base. Le programme commence par un pointage des raies visibles (fig.5.2) (programme peak-find sous Labview), contrôlé par un certain nombre de paramètres ( largeur typique de la raie, critère de seuil par rapport au bruit). Ensuite, un autre paramètre est la largeur que l'on enlève autour de chaque raie, celle-ci peut varier légèrement suivant la température et l'effet Doppler). Un dernier paramètre est la raideur de la fonction spline que l'on fait passer par les points que nous avons considérés sans absorption (fig.5.3). L'interpolation spline est une généralisation de l'interpolation linéaire par morceaux qui produit une fonction  $g$  continue sur un intervalle  $I$  et polynomiale de degré 1 sur chaque sous intervalle  $I_j = [x_j ; x_{j+1}]$ . Dans ce type d'interpolation la fonction interpolante est polynomial de degré  $n$  sur chaque sous intervalle et continument différentiable d'ordre  $n-1$  sur toute l'intervalle  $I$ . L'ordre le plus souvent utilisée est l'ordre 3 correspondant à l'interpolation par spline cubique. Celle-ci est utilisée dans notre travail.

Une fois la ligne de base estimée, l'absorbance  $\alpha L$  est calculée en faisant le rapport logarithmique ( $\frac{I}{I_0}$ ). Un exemple d'absorbance  $\alpha L$  obtenue après cette opération est présentée en fonction de longueur d'onde sur la figure 5.4. Ce procédé s'avère efficace dans la plupart des cas, d'autant plus que l'on peut visualiser le résultat en temps réel lorsque l'on modifie un paramètre. Alors, on s'assure que le résultat  $\alpha L$  a une forme cohérente à savoir proche de zéro en l'absence d'absorption. Dans le cas où les raies sont saturées, nous avons effectué notre procédé manuellement dans le but d'estimer correctement la ligne de base. La figure 5.6 présente l'extraction de la ligne de base dans un spectre possédant des raies proche de la saturation. La méthode automatique ne convient pas parfaitement pour ce type des raies et conduit à une grosse erreur sur la ligne de base puisque l'interpolation n'est plus correcte puisque la fonction spline passe par des points avec absorptions entre  $6528.8 \text{ cm}^{-1}$  et  $6528.85 \text{ cm}^{-1}$  (voir

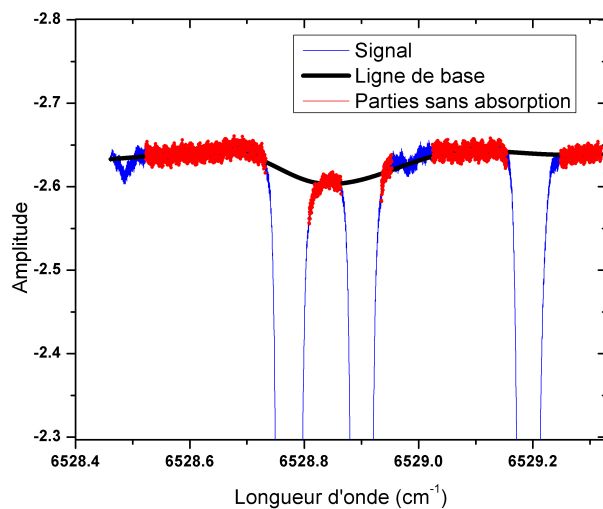


FIGURE 5.5 – Ligne de base estimée d'une façon incorrecte. L'interpolation spline en considérant les parties sans absorption ( tracé rouge) n'est pas correcte.

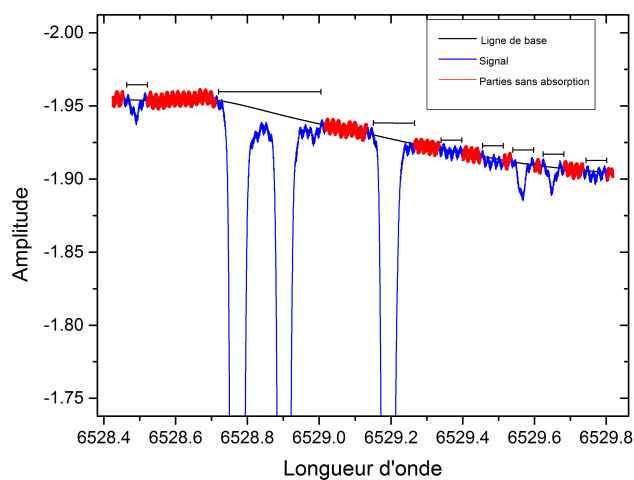


FIGURE 5.6 – Exemple d'extraction incorrecte de la ligne de base dans un spectre contenant de raies saturées

figure 5.5). C'est pourquoi, nous avons élargi manuellement les positions des parties d'absorptions (tracé bleu) pour les raies saturées et interpolé les parties

sans absorptions (tracé rouge) d'une manière pertinente pour mieux estimer la ligne de base.

## 5.2 Calibration du spectre

La deuxième étape de traitement des données expérimentales est la calibration des spectres qui se fait en deux étapes : une première étape où l'on calibre le spectre d'une manière relative grâce à un signal de franges de Fabry-Perot, une seconde étape où l'on positionne le spectre de manière absolue grâce à des raies de référence. Nous avons vu dans la partie expérimentale que l'on prélevait du faisceau principal deux signaux( voir figure 4.1), l'un envoyé dans une cavité Fabry-Perot (FP) et l'autre à travers une cellule de référence.

### 5.2.1 Calibration relative

Commençons ce paragraphe par deux remarques expérimentales sur la manière de varier la fréquence du système laser. Le déplacement appliqué grâce à la cale piézoélectrique provoque une variation (linéaire) de la longueur de la cavité étendue du système laser. Si le laser correspond à un mode  $k$  de cette cavité ( $L=k\frac{\lambda}{2}$ ), une balayage linéaire de la longueur de la cavité entraîne une variation linéaire sur la longueur d'onde. Cette variation ne se répercute pas exactement sur le spectre qui est représenté en fonction de la fréquence ou de l'énergie inversement proportionnel à la longueur d'onde ( $\frac{1}{\lambda}$ ). Ceci est à prendre en compte sur des gammes importantes mais est négligeable sur des variations de quelques  $\text{cm}^{-1}$  au voisinage de 1500 nm.

D'autre part, le déplacement de la cale piézoélectrique ne suit pas parfaitement la tension appliquée, des phénomènes de non linéarité et d'hystérésis peuvent exister. C'est pourquoi la calibration relative à l'aide du signal de Fabry Perot est

essentielle, car chaque pic est distant de son voisin de soit un écart constant  $\frac{C_c}{2nL}$  (appelé FSR Free Spectral range). Nous avons constaté lors de nos analyses que la variation observée lors du balayage possédait une faible composante quadratique dont nous avons tenu compte.

Un exemple d'un tel signal est montré sur la figure 5.7, où nous présentons le signal acquis par la photo-diode lorsque le faisceau lumineux passe à travers la cellule de FP. Le panneau supérieur montre la tension appliquée sur le contrôleur de la céramique piézo-électrique en fonction du temps.

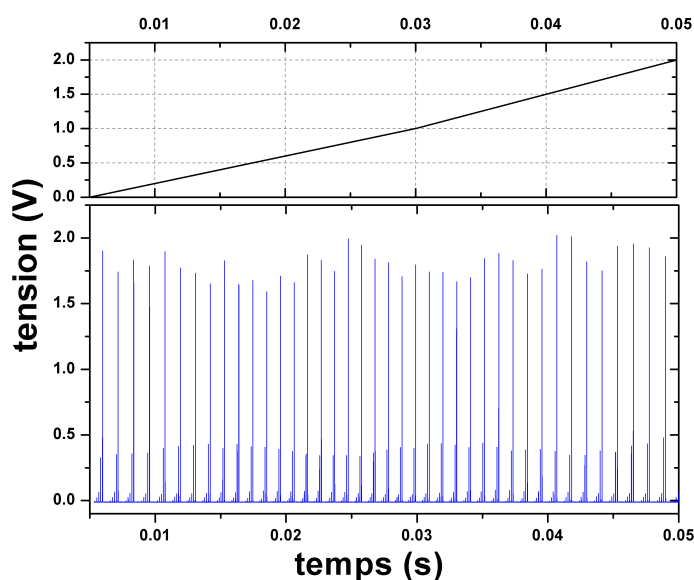


FIGURE 5.7 – Exemple de signal  $U(t)$  transmis par la cavité de FP pendant le balayage du laser.

Nous remarquons sur le signal la présence de plusieurs séries de pics, pics principaux et pics secondaires d'intensités décroissantes. Ces pics situés entre les pics principaux correspondent à des modes transversaux de la cavité FP. Nous n'avons cependant pas cherché un meilleur réglage dans la mesure où les pics principaux nous permettent de réaliser la calibration que nous désirons. L'échelle des temps est ensuite transformée en une échelle d'énergie en utilisant la règle

que constitue les pics du Fabry-Perot. Ici encore, on pointe les sommets grâce au "sous-vi programme Labview" Peak-Find et on associe les temps correspondants à des indices entiers croissants du pic de Fabry-Perot  $FP(i)$  ( avec  $i=0, 1, 2 \dots 44$  le nombre de pics). Nous connaissons donc les points  $t_i, i$ . En utilisant une interpolation Spline entre les points, nous allons faire correspondre chaque valeur de  $t$  à un indice de FP (avec une partie décimale)  $t=F(i)$ . Le spectre  $Y(t)$  est donc transformée en  $Y=Y(F(i))$ .

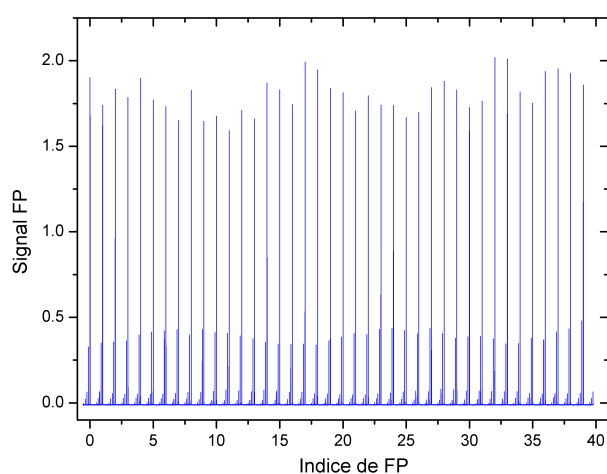


FIGURE 5.8 – Exemple du signal de FP linéarisé et exprimé en fonction de l'indice de celui-ci. Chaque pic principal se trouve à une valeur entière de l'indice.

Nous avons enregistré le même spectre 16 fois en 1.6 s avec une acquisition de chaque spectre de 100 ms (10Hz). Une hypothèse raisonnable est que la longueur de la cavité de FP ne change pas pendant chacun 16 balayages et par suite les pics sont supposés stables pour les 16 spectres. Les pics n° 0, 1,... sont donc à la même position en nombre d'ondes dans les 16 spectres. Cependant il peut se produire qu'il n'arrive pas exactement au même endroit en fonction du temps 0 de déclenchement, c'est pourquoi il est nécessaire de faire la transformation du temps en indice FP avant de faire une moyenne des 16 spectres. Cette moyenne

a bien sûr le rôle de réduire le bruit La valeur du FSR peut être déduite à partir de la distance entre les 2 miroirs de sa cavité, mais nous allons voir que la spectroscopie nous donne aisément une valeur plus précise que la mesure de cette longueur.

### 5.2.2 Calibration absolue

Si l'on connaît de façon précise l'écart spectral libre du Fabry-Perot, la calibration relative du spectre est alors immédiate et l'on peut donner de manière très précise par exemple la largeur spectrale ou l'écart entre 2 transitions à l'intérieur d'un spectre. Il nous faut maintenant disposer d'une référence afin de calibrer le spectre de manière absolue.

Dans ce travail, nous avons utilisé deux signaux de références permettant de la calibration absolue. Le premier signal est le spectre de l'acétylène, celui-ci possédant une bande assez forte dans la gamme 1510-1540 nm (voir figure 5.9) avec une série de transitions P et R espacées de  $2\text{ cm}^{-1}$  environ dont les positions sont disponibles dans la base de données HITRAN. Certaines de ces transitions ont fait l'objet de mesures métrologiques par le NIST [71]. Nous avons la possibilité dans cette gamme spectrale de calibrer les spectres de deux isotopologues ( $^{14}\text{NH}_3$  et  $^{15}\text{NH}_3$ ) de l'ammoniac en utilisant ces raies de l'acétylène.

La deuxième possibilité est d'utiliser le spectre d'absorption de l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$  dont les transitions sont maintenant présentes dans la base de données HITRAN 2012 dans la gamme  $6300\text{-}6800\text{ cm}^{-1}$  [39]. Nous pouvons donc calibrer nos spectres de  $^{14}\text{NH}_3$  grâce à ces valeurs mais aussi en enregistrant simultanément ce signal dans une cellule de référence pour calibrer les spectres de  $^{15}\text{NH}_3$ . Pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ , nous avons confronté nos résultats à ceux présents dans 3 publications par Lees *et al* [40, 41, 42] qui présentent des attributions de certaines transitions des bandes  $\nu_1+\nu_3$ ,  $\nu_1+2\nu_4$ ,  $\nu_3+2\nu_4$  respectivement. Dans

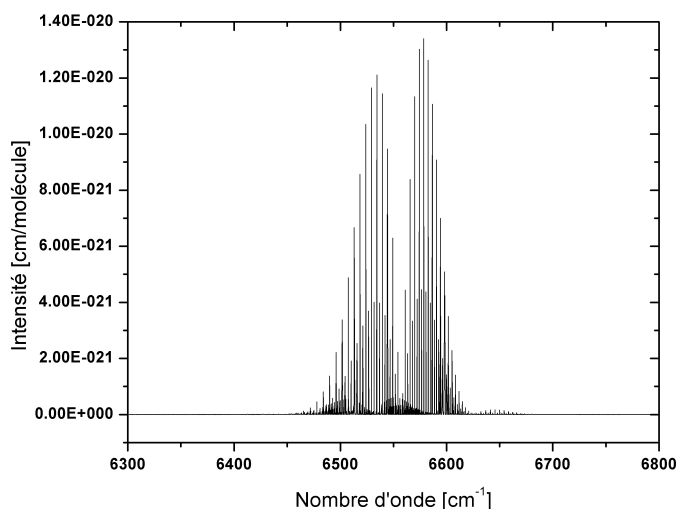


FIGURE 5.9 – Le spectre de l'acétylène dans la gamme  $6300\text{-}6800\text{ cm}^{-1}$  dont la bande la plus forte se présente entre  $6493\text{ cm}^{-1}$  et  $6622\text{ cm}^{-1}$  [71].

la suite nous désignerons la liste de la référence Sung *et al* par SL, et la liste des références Lees *et al* par LX du nom du premier et du dernier auteur (Sung Lehmann et Lees Xu) respectivement. A noter que la première liste a été obtenue à partir d'une étude par transformée de Fourier ce qui assure une cohérence globale des nombre d'ondes sur l'ensemble de la gamme  $6300\text{-}7000\text{ cm}^{-1}$ . Par contre les études sur  $^{15}\text{NH}_3$  sont extraites d'études de spectroscopie par diode laser, analogues à ce que nous faisons en laboratoire. De cette liste, nous avons sélectionné les raies isolées et les plus intenses pour effectuer la calibration. Un exemple calibration pour un spectre de  $^{14}\text{NH}_3$  est présenté sur la figure 5.10 où le spectre expérimental (tracé rouge) est ajusté grâce aux trois transitions de la liste SL. Dans un premier temps, à partir d'une valeur de la distance entre les 2 miroirs du Faby-Perot, nous avons ajusté la valeur du FSR et de l'origine de chaque spectre pour correspondre au mieux à la liste SL (2 paramètres). Ceci a été fait sur un grand nombre de spectres et une valeur moyenne du FSR a été



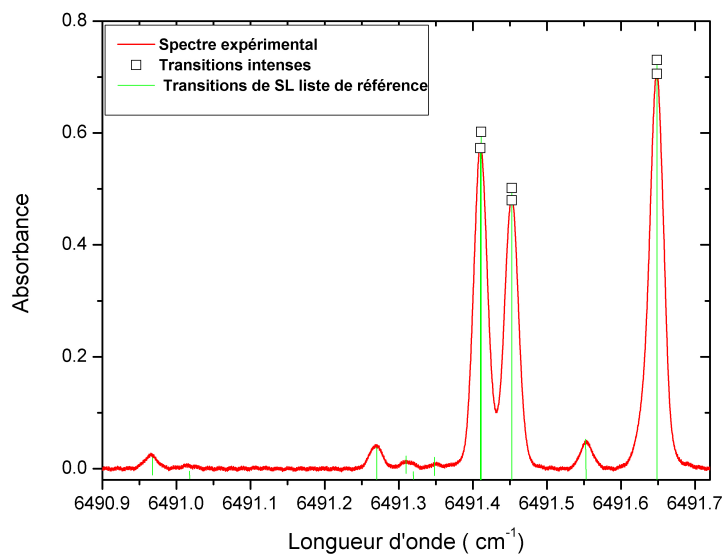


FIGURE 5.10 – Exemple de calibration absolue du spectre de  $^{14}\text{NH}_3$  par rapport aux transitions les plus intenses ( carrés noirs) de la liste de référence SL.

considérée et fixée pour l'ensemble des spectres. Dans un second temps, nous avons procédé à l'ajustement de l'origine spectrale de chaque spectre seulement (1 seul paramètre) en maintenant le FSR à sa valeur fixée. Pour la calibration de  $^{15}\text{NH}_3$  la liste de référence LX a été obtenue en spectroscopie laser en asservissant celui-ci sur chaque transition et en mesurant la fréquence à l'aide d'un lambda-mètre. La liste s'étend de 6412 à 6819  $\text{cm}^{-1}$  et ne couvre pas la totalité de notre gamme spectrale (6367 à 6578  $\text{cm}^{-1}$ ). Nous avons donc utilisé le spectre de  $^{14}\text{NH}_3$  comme référence pour la partie manquante 6367-6412  $\text{cm}^{-1}$ . La partie de 6367 à 6412  $\text{cm}^{-1}$  a été analysée en calibrant le spectre d'absorption enregistré simultanément à travers une cellule de référence contenant l'isotopologue principal à une pression d'environ 30 mbar. Dans cette région spectrale, le signal d'absorption est faible et la cellule d'absorption ne mesurait que 20 cm, c'est pourquoi nous avons choisi de mettre une pression plus élevée pour

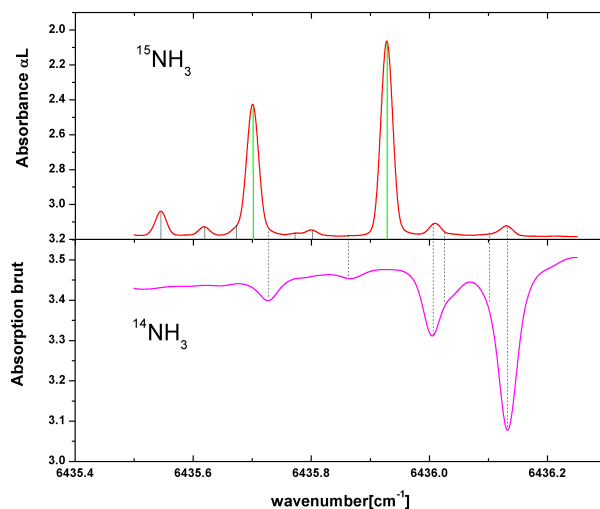


FIGURE 5.11 – Un exemple de calibration d'un spectre de  $^{15}\text{NH}_3$  par rapport au spectre de référence d'absorption de  $^{14}\text{NH}_3$ . Le spectre expérimentale (tracé rouge) de  $^{15}\text{NH}_3$  est présenté dans la partie haute avec les positions des transitions (trait noir : notre travail, trait vert : proposé par LX liste). Le spectre de  $^{14}\text{NH}_3$  est présenté dans la partie basse ( tracé magenta) avec des positions des transitions proposés par la liste SL .

bénéficier d'un signal d'absorption plus important. Une conséquence est bien sûr un élargissement des transitions ainsi qu'un faible décalage, c'est pourquoi la précision sur la position absolue des transitions est probablement moins bonne dans cette gamme que dans celle où sont présentes des transitions LX.

Nous montrons sur la figure 5.11 un exemple de calibration d'un spectre  $^{15}\text{NH}_3$  grâce à la référence de  $^{14}\text{NH}_3$ . Le spectre d'absorption brut  $^{14}\text{NH}_3$  est ajusté grâce aux transitions présentées dans la liste SL ( trait pointillé). Cette calibration absolue est ensuite reportée sur le spectre de l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ . Ce dernier est ajusté par 13 profils de Voigt, dont 7 appartiennent à l'espèce  $^{15}\text{NH}_3$ . Les 6 autres sont des transitions de l'isotopologue principal montrant que celui-ci subsiste dans l'échantillon. Parmi les 7 transitions de  $^{15}\text{NH}_3$ , 2 sont présentées

dans la liste LX et 4 nouvelles transitions sont rapportées.

Lorsque nous dressons la liste de transitions de  $^{15}\text{NH}_3$ , nous devons bien sûr éliminer les transitions appartenant à l'isotopologue principal qui subsiste à l'état de trace. Suite à des contacts avec les auteurs de l'article R. Lees, L.Li, Z.Liu, L.-H. Xu nous avons bénéficié de leur fichier de travail dans lequel figurent plus d'information (raies mesurées mais non attribuées) que dans les articles publiés. En particulier, 8 raies d'énergies inférieures à  $6412\text{ cm}^{-1}$  sont présentées, la première raie mesurée étant  $6385.7284\text{ cm}^{-1}$ . Nous nous sommes servis de cette information supplémentaire pour compléter notre calibration.

### 5.3 Procédé d'ajustement du spectre

Cette étape de traitement consiste à ajuster les points expérimentaux qui décrivent les différentes raies d'absorption contenues dans un spectre par une forme mathématique appropriée. Différents types de fonctions peuvent être utilisés et dépendent des formes naturelles spécifiques (Gaussienne, Lorentzienne ou bien Voigt) pour chaque raie traitée.

La forme d'une raie d'absorption ou profil de raie dépend des conditions expérimentales (pression, température, etc). Comme nous avons vu dans le premier chapitre, trois phénomènes distincts peuvent intervenir dans la forme de la raie : la probabilité d'émission spontanée (élargissement naturel), l'effet Doppler et l'élargissement collisionnel. La distribution des vitesses des molécules dans la cellule dépend uniquement de la température. Elle conduit à une largeur inhomogène de la raie spectrale appelée largeur Doppler. L'élargissement collisionnel correspond à une interruption du couplage de la molécule avec le champ laser et donne un élargissement homogène de forme lorentzienne dont la largeur dépend du taux de collision et de la transition considérée de la molécule.

Nous travaillons dans le domaine d'infrarouge alors l'élargissement naturel est supposé négligeable devant les autres facteurs d'élargissement. La forme générale est une combinaison des deux principaux phénomènes qui peut s'avérer complexe et est l'objet d'un champ spécifique de la spectroscopie moléculaire.

Dans notre étude, nous nous sommes restreints à la description où les deux phénomènes sont considérés comme indépendants et le profil est décrit comme la convolution des deux formes gaussienne et lorentzienne appelée profil de Voigt. Nous avons bénéficié d'un logiciel d'accès libre appelé Fityk [72] qui permet l'ajustement d'un signal par une somme de fonctions paramétrables  $F[x]$  par la méthode de moindres carrés basée sur l'algorithme de Levenberg-Marquardt. Le profil de Voigt est l'une des fonctions disponibles et il est possible de choisir d'ajuster individuellement chaque composante avec les 4 paramètres suivants : position du centre, aire intégrée, largeur gaussienne, largeur lorentzienne.

Le choix des paramètres est un des points clefs de la convergence de l'ajustement. Dans l'exemple précédent où nous avons trouvé et ajusté 12 transitions, cela correspond à 48 paramètres, nous allons voir comment réduire avec des arguments physiques le nombre de ces paramètres.

La largeur gaussienne (Doppler) est fixe pour une température donnée. Elle représente la largeur à mi-hauteur :

$$\Delta\nu_D = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{8RT \ln 2}{M}}$$

. Dans notre cas où sont présentes à la fois des transitions de  $^{14}\text{NH}_3$  et de  $^{15}\text{NH}_3$  on devrait considérer deux largeurs Doppler correspondant aux deux masses 17 kg et 18 kg. A  $T=296$  K, la largeur Doppler à la longueur d'onde de  $6500 \text{ cm}^{-1}$  est de  $0.01942 \text{ cm}^{-1}$  pour l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$  et  $0.01887 \text{ cm}^{-1}$  pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  soit une différence de  $0.00055 \text{ cm}^{-1}$ .

La largeur Doppler est proportionnelle à la longueur d'onde et varie donc selon la position dans le spectre. Ainsi pour l'isotopologue principal la largeur Doppler varie de  $0.01849 \text{ cm}^{-1}$  à  $0.01909 \text{ cm}^{-1}$  lorsque l'on passe de  $6376$  à  $6578 \text{ cm}^{-1}$  ( $1520$  à  $1570 \text{ nm}$ ) soit une différence de  $0.0006 \text{ cm}^{-1}$ . Pour ce paramètre nous avons choisi de contraindre la largeur gaussienne de toutes les transitions à l'intérieur d'un même spectre à une valeur commune dont on autorise la variation. Dans notre exemple précédent, on passe ainsi de  $48$  paramètres à  $3 \times 12 + 1 = 37$  paramètres. Nous donnons un autre exemple d'ajustement d'un spectre sur la figure 5.12. Chaque raie d'absorption isolée est ajustée par un profil de Voigt. Mais un ajustement multi-raies est nécessaire dans le cas où les raies sont trop proches pour être résolues comme autour de ( $6491.3681$  et  $6491.6378 \text{ cm}^{-1}$ ). Dans ce cas nous avons choisi de fixer aussi la valeur de la largeur lorentzienne à une valeur unique pour l'ensemble des transitions du spectre (dans notre exemple premier cela fait passer le nombre de paramètres de  $37$  à  $2 \times 12 + 2 = 26$ ). En principe cette hypothèse n'est pas correcte car l'élargissement collisionnel dépend de la transition considérée, mais ici nous sommes restés dans une gamme de pression où l'élargissement reste faible et cette contribution est faible devant la largeur Doppler. A titre d'exemple, si l'on considère une valeur de  $0.5 \text{ cm}^{-1}/\text{atm}$  (valeur présente dans HITRAN vers  $5000 \text{ cm}^{-1}$ ), cela correspond à  $5 \text{ mK}$  pour une pression de  $10 \text{ mbar}$ , valeur que nous avons très rarement atteinte. De l'ajustement par des profils de Voigt nous extrayons pour chaque spectre une liste de transitions, l'intensité (l'aire de la raie), les largeurs gaussienne et lorentzienne ainsi que les erreurs propres au processus d'ajustement. Nous avons remarqués la présence des petites oscillations dans les spectres avant l'ajustement. Celles-ci ont été interprétées par des effets d'interférence entre les différents passages dans la cellule Herriott. Une autre cause d'oscillation est un retour dans la cavité de diode laser. Les systèmes ECDL sont très sensibles à un

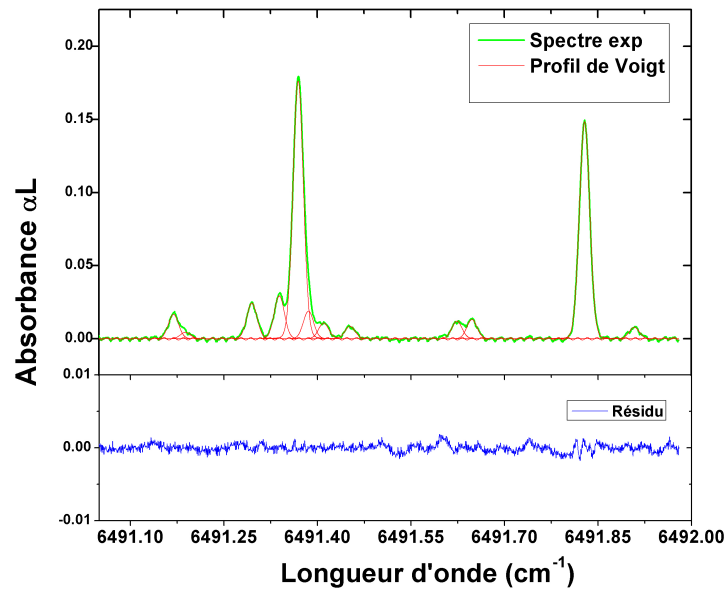


FIGURE 5.12 – Ajustement d'un spectre expérimental. Le spectre ( tracé vert) dans la partie haute du graphe est ajusté par 12 profils de Voigt ( tracé rouge). Le résidus de l'ajustement est tracé dans la partie bas du graphe.

retour de lumière dans la cavité, c'est pourquoi les systèmes commerciaux sont équipés d'isolateur optique avant d'être fibré. Le système laser que nous avons utilisé de 1540 à 1570 nm était conçu de cette manière. Cependant le fait de vouloir envoyer une partie du faisceau dans un étalon Fabry-Perot conduit par nature à un retour dans la direction inverse et dans la cavité ECDL. L'isolateur optique intégré dans le système n'était pas suffisant pour éviter ces perturbations. N'ayant disposé de cette source laser que pour une durée de 3 semaines, les spectres ont été enregistrés avec ces oscillations. Plus tard avec un dispositif analogue dans un autre domaine de longueur d'onde, nous avons pu corriger ce problème par l'ajout d'un second isolateur optique. Nous présentons sur la figure 5.13 un spectre présentant au moins deux types d'oscillation à des fréquences différentes. Dans le but de traiter ces oscillations, nous avons introduit dans

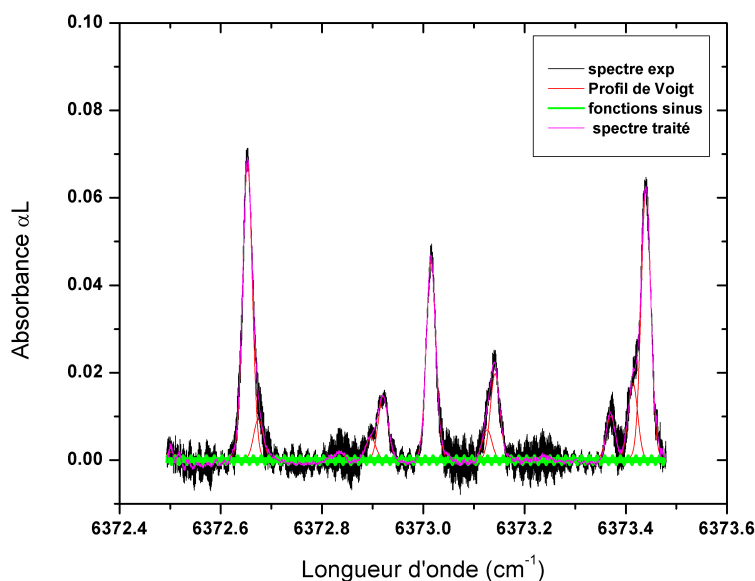


FIGURE 5.13 – Signal parasite d’interférences. Le spectre ( tracé noir) est ajusté par des profils de Voigt ( tracé rouge) et les oscillations sont traitées en introduisant des fonctions sinus ( tracé vert).

l’ajustement trois fonctions de type sinus. Le premier constat est la présence d’une perturbation se répétant avec une période de  $0.0154 \text{ cm}^{-1}$  correspondant à une longueur de  $64 \text{ cm}$ . Cette perturbation n’étant pas sinusoïdale, nous avons choisi de la décrire par 2 sinus avec une fréquence fondamentale et sa seconde harmonique.

$$F_1[x] + F_2[x] = a \sin(\omega x + b) + a_1 \sin(2\omega x + b_1) \quad (5.2)$$

avec  $\omega$  est la fréquence à une valeur de  $407.399 \text{ cm}^{-1}$ .

Une seconde oscillation à une fréquence plus rapide ( $\omega=3865 \text{ cm}^{-1}$ ) est parfois présente et correspond plutôt à ce problème de retour de lumière dans la cavité. Nous pouvons la traiter en incluant une troisième fonction sinus ou encore en procédant à un lissage sans trop perdre de résolution. Plus précisément cela est

obtenu par une opération de moyenne ( eq.5.3) sur 2 points consécutifs répétée autant que nécessaire. La figure 5.14 présente le traitement des oscillations par de fonctions sinus.

$$x = (x[n] + x[n + 1])/2; y = (y[n] + y[n + 1])/2 \quad (5.3)$$

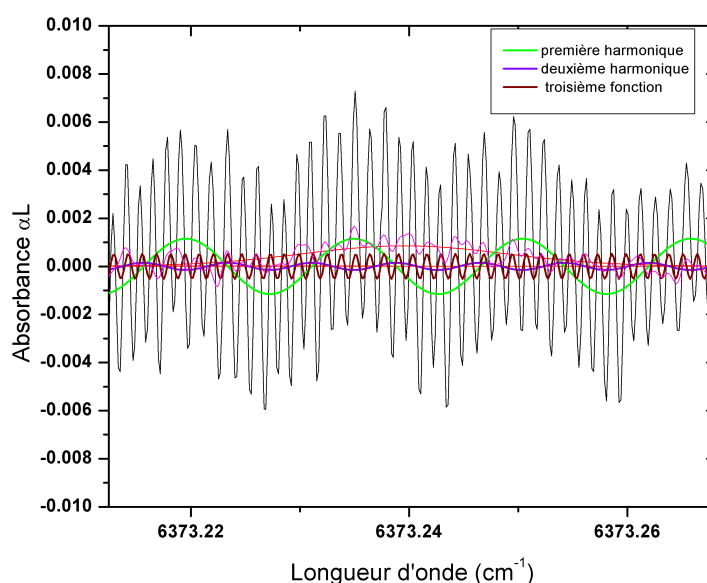


FIGURE 5.14 – Traitement des oscillations par trois fonctions sinus. La première (tracé vert) et la seconde (tracé violet) harmonique permettent de traiter le premier type des oscillations. L'oscillation rapide est traité par une troisième fonction sinus (tracé bordeaux) mais l'amplitude est clairement plus faible dans l'ajustement à cause de variation locale de la phase (lié sans doute au processus de calibration). C'est pourquoi un lissage est aussi utilisé pour réduire cette oscillation.



## Résultats

Dans ce chapitre nous présentons les résultats obtenus pour les deux isotopologues de l'ammoniac. Dans une première partie, nous étudions l'évolution des spectres de l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$  en fonction de la température  $T$  dans la gamme de longueur d'onde 1520-1570 nm. Nous montrons que la force de raie  $S(T)$  d'une transition permet de remonter à la valeur de l'énergie de l'état de départ de la transition. Cette information est une aide précieuse pour tenter d'attribuer la transition c'est à dire d'en connaître à la fois les états de départ et d'arrivée.

Une étude similaire a été menée expérimentalement sur l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  mais l'étude en température n'a été menée pour l'instant que dans la gamme 1520-1540 nm. Nous ne présentons alors que l'étude de la zone complète 1520-1570 nm à température ambiante et une liste position-intensité pour cet isotopologue.

Comme nous l'avons expliqué dans la partie expérimentale, il est difficile d'étudier un échantillon parfaitement pur d'un isotopologue à cause de la propension de l'ammoniac à s'adsorber puis à se désorber des parois. Nous présentons dans une deuxième partie une procédure afin d'attribuer avec toute

confiance une transition même très faible à l'un ou l'autre des isotopologues. Les deux résultats de notre étude sont donc pour l'isotopologue principal  $^{14}\text{NH}_3$  une liste position, intensité, énergie de l'état de départ et pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  une liste position intensité à  $T=296$  K.

Ces résultats sont comparés avec ceux obtenus dans les études expérimentales précédentes Sung *et al* [39] pour l'isotopologue principal et Lees *et al* [40, 41, 42], Lins *et al* [43] pour l'autre isotopologue. Dans une dernière partie, nous comparons les spectres expérimentaux avec des spectres calculés utilisant la surface de potentiel et des calculs variationnels [52]. La précision du calcul théorique ne permet pas une identification raie par raie, mais nous avons constaté qu'elle peut guider l'attribution des transitions les plus intenses. Ce travail d'identification est encore balbutiant et n'a été que très peu abordé. Il est bien sûr l'objectif final de cette étude.

## 6.1 Spectres de $^{14}\text{NH}_3$ et $^{15}\text{NH}_3$ à plusieurs températures

Nous avons enregistré les spectres des deux isotopologues de l'ammoniac à différentes températures et différentes pressions dans la gamme 6369-6578  $\text{cm}^{-1}$  grâce à un système laser ECDTL (External Cavity Diode Tunable Laser) [Chapitre X]. Le nombre de données analysées et leur conditions expérimentales sont présentées dans les tables 6.1, 6.2 et 6.3.

Nous présentons dans ces tableaux le nombre de mesures, c'est à dire le nombre de lignes présentes dans un fichier global qui contient toutes les informations des analyses. Certaines transitions apparaissent plusieurs fois dans la mesure où elles peuvent provenir de spectres consécutifs se recouvrant ou aussi de plusieurs spectres enregistrés dans différentes conditions de pression.

Température K	Gamme de Pression (mbar)	Nb mesures	Nb. transitions Total	Nb transitions $^{14}\text{NH}_3$
134 K	0.04-0.12	320	219	205
155 K	0.255-1.565	1348	982	846
180 K	0.853-5.274	2243	1752	1467
220 K	0.24-4.83	2371	1873	1666
296K	1.297-5.225	2892	2233	2206
	Total	9174		

TABLE 6.1 – Nombres de mesures pour l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$  dans la gamme 1520-1570 nm ( $6369\text{-}6578\text{ cm}^{-1}$ ). Sont distingués le nombre de mesures, le nombre de transitions totales analysées, et le nombre de transitions appartenant à l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$ .

Température K	Gamme de Pression (mbar)	Nb mesures	Nb Transitions Total	Nb transitions $^{15}\text{NH}_3$
150 K	0.19	974	664	565
180 K	0.44-8.45	110	757	659
220 K	0.5-0.55	1408	936	800
296K	1.30-2.12	1766	1146	1012
	Total	5255		

TABLE 6.2 – Nombres de mesures pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  dans la gamme 1520-1540 nm ( $6493\text{-}6578\text{ cm}^{-1}$ ). De manière analogue au tableau 6.1, un certain nombre de transitions de l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$  présent comme impureté est détecté.

Pour chaque température, nous donnons dans la 4ème colonne des tableaux 6.1 et 6.2 le nombre de transitions mesurées, et dans la 5ème le nombre de transitions de l'isotopologue étudié. La différence représente les transitions de l'autre isotopologue présent comme impureté.

Nous présentons dans la figure 6.1 un exemple de l'évolution d'une partie du spectre de l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$  en fonction de la température. Les conditions de pression montrent qu'à une température de 155 K, la pression de vapeur saturante limite la gamme de pression accessible, le signal va donc être plus faible pour cette température.

Pression (mbar)	Nombres données	Nb transitions
1.329-8.841	4144	2602

TABLE 6.3 – Nombres de mesures pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  dans la gamme 1520-1570 nm ( $6369\text{-}6578\text{ cm}^{-1}$ ) à  $T=296\text{K}$

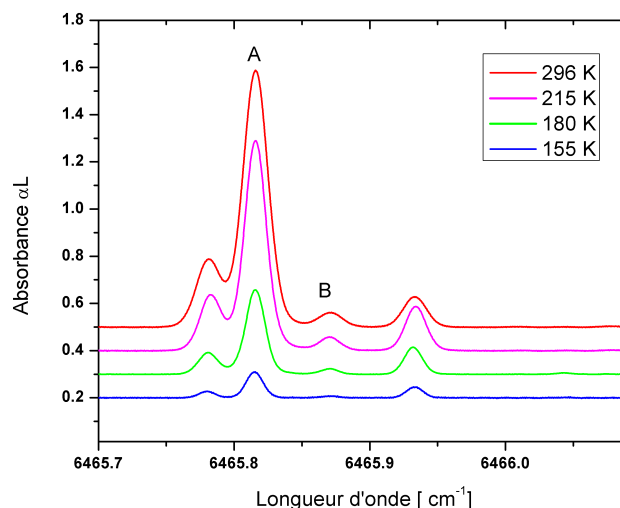


FIGURE 6.1 – Spectres de  $^{14}\text{NH}_3$  à 4 températures  $T= 155\text{ K}$ ,  $180\text{ K}$ ,  $215\text{ K}$  et  $296\text{ K}$  à des pressions respectives de 1.453, 3.216, 3.123 et 3.105 mbar.

L'intensité de la transition  $6485.8159\text{ cm}^{-1}$  notée A croît relativement plus vite quand  $T$  augmente que celle de la raie notée B à  $6465.8708\text{ cm}^{-1}$ , l'énergie de l'état de départ de la transition A est donc plus élevée que celle de la transition B, sa population relative croissant plus vite avec la température.

On peut aussi remarquer sur cet exemple l'importance de la résolution et l'augmentation de la largeur Doppler lorsque la température augmente. Ainsi, la raie A et sa voisine à  $6465.7812\text{ cm}^{-1}$  sont complètement résolues à  $T=155\text{ K}$  et le sont beaucoup moins à  $T=296\text{K}$ . Cela a son importance pour déterminer avec précision la position des transitions lorsque celles-ci sont très proches. Dans cet exemple, les transitions sont encore suffisamment distinctes pour être bien

traitées par la procédure d'ajustement même à 296K.

Un autre exemple d'évolution d'un spectre en fonction de la température est présenté pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  sur la figure 6.2. La gamme d'énergie est de  $6496.8$  à  $6497.3 \text{ cm}^{-1}$ .

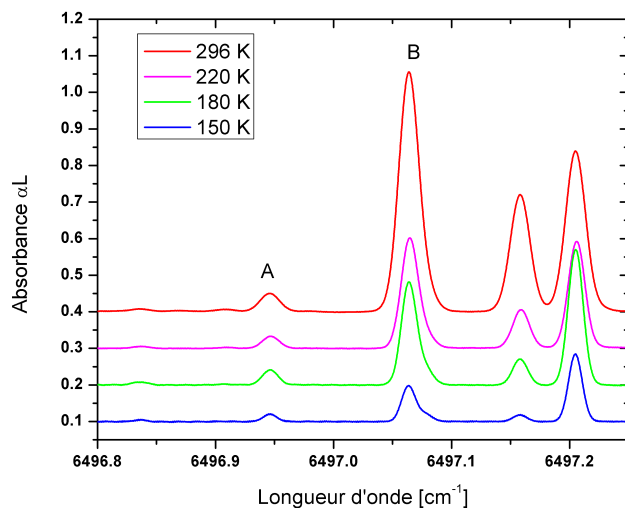


FIGURE 6.2 – Spectre de  $^{15}\text{NH}_3$  à 4 températures 150 K, 180 K, 220 K et 296 K à des pressions de 1.192, 0.453, 0.515 et 1.339 mbar.

Deux transitions (B) autour de  $6497.05 \text{ cm}^{-1}$  se distinguent à faible température ( $T=150 \text{ K}$ ), et sont de plus en plus difficiles à distinguer lorsque la température et donc l'effet Doppler augmentent. On comprend ainsi l'intérêt des spectres basse température : il est possible de maintenir fixe la différence d'énergie entre les deux transitions mesurées à  $T=150\text{K}$  pour les autres températures. On obtient alors des valeurs d'intensité plus pertinentes.

Ceci est illustré sur le tableau 6.4 où, après avoir analysé le spectre à 155 K, on a déduit une valeur précise de l'écart d'énergie entre les 2 composantes de (B) appelées  $B_1$  et  $B_2$ . Cet écart est de  $B_2 - B_1 = 0.014264 \text{ cm}^{-1}$ . Lorsque l'on fait l'analyse du spectre à température ambiante où les 2 composantes sont très

	$\sigma$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	Absorbance ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	Absorbance ( $\text{cm}^{-1}$ )
	sans contrainte		avec contrainte	
$(B_1)$	6497.063675(6)	0.013856(15)	6497.063603(4)	0.013767(12)
$(B_2)$	6497.079207(100)	0.000875(9)	6497.077867(4)	0.000970(7)
$B_2 - B_1$	0.015532(104)		0.014264	

TABLE 6.4 – Exemple d’analyse autour de  $6497 \text{ cm}^{-1}$  à  $T=296 \text{ K}$  sans et avec la contrainte issue de l’analyse du spectre à basse température :  $B_2 - B_1=0.014264 \text{ cm}^{-1}$

difficilement visibles, on peut soit ne pas contraindre, soit contraindre l’écart d’énergie à cette valeur. Sans contrainte, l’écart se positionne à  $0.0155 \text{ cm}^{-1}$ , soit une différence de  $0.0013 \text{ cm}^{-1}$ , ce qui est beaucoup si l’on considère la précision de la calibration relative de l’ordre de  $2 \cdot 10^{-4}$  pour des transitions proches situées entre 2 pics de Fabry-Perot. Lorsque l’on met en place la contrainte, l’ajustement ne montre pas de différence significative, mais le résultat sur les absorbances diffère significativement, surtout sur la transition de plus faible intensité, avec une précision légèrement meilleure.

Sur ce spectre, l’intensité de la raie (A) décroît de manière relative moins vite en fonction de la température que celles en (B), l’énergie de l’état de départ de la transition (A) est donc plus faible que celle des transitions (B).

## 6.2 Distinction entre les 2 isotopologues

Nous avons remarqué systématiquement la présence d’une petite quantité de  $^{14}\text{NH}_3$  dans le spectre de  $^{15}\text{NH}_3$  (respectivement  $^{15}\text{NH}_3$  dans les spectres de  $^{14}\text{NH}_3$ ) en excès par rapport à l’abondance isotopique annoncée, malgré la pureté du gaz introduit dans la cellule. Ce phénomène est connu pour la molécule d’ammoniac car celle-ci a une tendance naturelle à s’adsorber sur les parois de la cellule, puis à être relâchée. Comme nous avons utilisé la même cellule pour

effectuer les enregistrements, la pureté de la composition à l'intérieur de la cellule s'est trouvée systématiquement dégradée par rapport à celle du gaz que nous introduisons.

Après quelques essais, il apparaît qu'il ne faut pas se contenter de pomper la cellule même en vide secondaire, mais qu'il est plus favorable de remplir la cellule en excès du gaz que l'on désire étudier, de laisser faire les échanges avec les parois pendant une nuit, puis de procéder alors au pompage.

Dans tous les cas, il est crucial de distinguer si chaque raie de faible intensité est une raie faible de l'isotopologue étudié ou une raie plus intense de l'autre isotopologue présent comme impureté.

C'est pourquoi nous avons établi une procédure pour déterminer dans chaque spectre la partie correspondant à l'isotopologue étudié et celle correspondant à l'autre espèce considéré comme impureté.

Ce traitement repose sur l'enregistrement d'une part du spectre obtenu lorsque la cellule est remplie avec  $^{14}\text{NH}_3$  et d'autre part lorsqu'elle est remplie avec l'espèce  $^{15}\text{NH}_3$ . Nous désignons dans la suite ces deux spectres par  $\{14\}^*$  et  $\{15\}^*$ , l'astérisque mettant l'accent sur le fait que les deux spectres ne sont purs ni l'un, ni l'autre. Notre but est d'extraire pour chaque spectre, ses deux composantes  $\{^{14}\text{NH}_3\}$  et  $\{^{15}\text{NH}_3\}$ , et surtout la composante majoritaire qui nous intéresse.

Prenons l'exemple du spectre  $\{15\}^*$ , il est clair que si une contribution de l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$  est présente, il faut la chercher sur les raies les plus intenses de  $\{14\}^*$ . Si une de ces raies est bien isolée, il est facile de déterminer un coefficient multiplicatif  $\alpha$  ( $\ll 1$ ) rapport entre les absorbances dans  $\{15\}^*$  et  $\{14\}^*$  et mesurant la proportion ou la pression partielle de l'impureté.

Une raie de ce type est clairement visible sur l'exemple de la figure 6.3 à  $6577.0076 \text{ cm}^{-1}$ . La combinaison linéaire  $\{15\}^* - \alpha \{14\}^*$  permet en principe

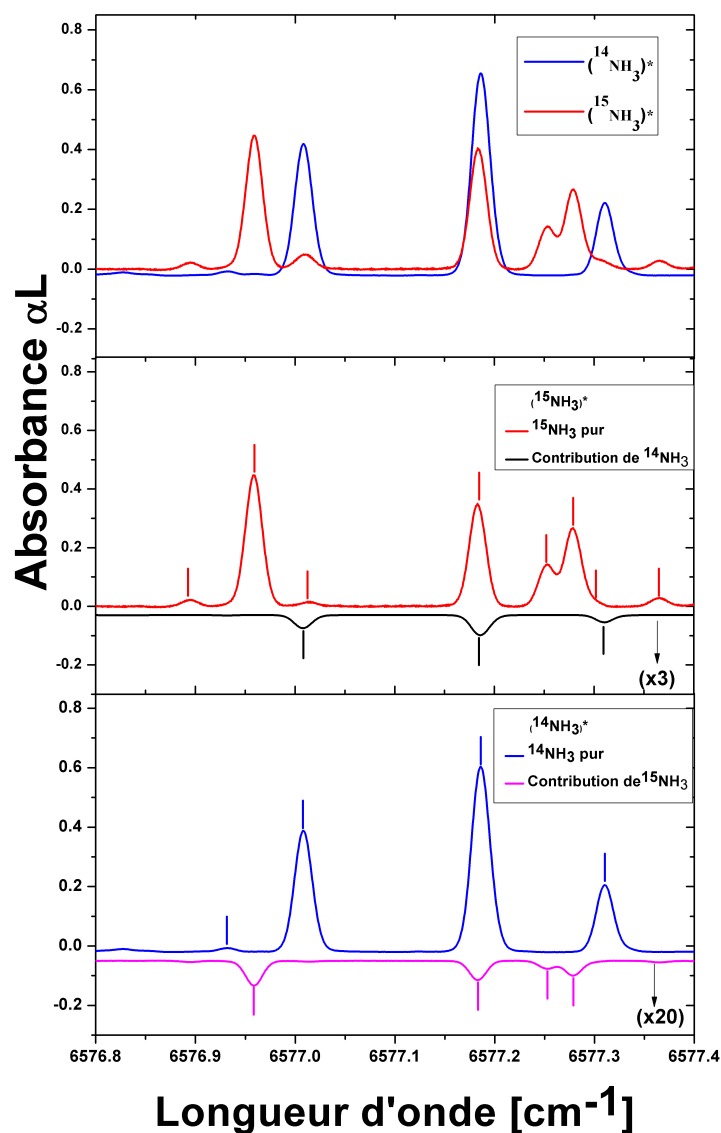


FIGURE 6.3 – Traitement utilisée pour extraire des spectres leur composantes  $^{14}\text{NH}_3$  et  $^{15}\text{NH}_3$ . Le cadran du haut montre les 2 spectres  $\{14\}^*$  (tracé bleu) et  $\{15\}^*$  (tracé rouge) mesurés indépendemment. Le cadran du milieu présente la décomposition du spectre  $\{15\}^*$  :  $\{15\}$  spectre pur de  $^{15}\text{NH}_3$  (tracé rouge) et la contribution de  $^{14}\text{NH}_3$  (tracé noir en miroir et multiplié par 3). Le cadran du bas montre la décomposition du spectre  $\{14\}^*$  :  $\{14\}$  spectre pur de  $^{14}\text{NH}_3$  (tracé bleu) et la contribution de  $^{15}\text{NH}_3$  (tracé magenta en miroir multiplié par 20).



d'éliminer la contribution de  $^{14}\text{NH}_3$ . Ceci n'est pas complètement exact si le spectre  $\{14\}^*$  contient lui-même une contribution de  $^{15}\text{NH}_3$  comme impureté. Le traitement correct repose sur les équations 6.1 et 6.2 :

$$\{15\}^* - \alpha \{14\}^* = \{^{15}\text{NH}_3\} \quad (6.1)$$

$$\{14\}^* - \beta \{15\}^* = \{^{14}\text{NH}_3\} \quad (6.2)$$

Le coefficient  $\beta$  est de manière analogue à  $\alpha$  ajusté pour éliminer une éventuelle contribution de  $^{15}\text{NH}_3$  dans  $\{14\}^*$ .

On procède alors simultanément à un ajustement manuel des paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  et aussi d'un paramètre  $\delta$  représentant un décalage ( $< 3\text{mK}$ ) si la calibration des spectres n'est pas identique. En résolvant le système des 2 équations 6.1 et 6.2, on obtient leur écriture qui distingue clairement les composantes pures :

$$\{15\}^* = \frac{1}{(1 - \alpha\beta)} \{^{15}\text{NH}_3\} + \frac{\alpha}{(1 - \alpha\beta)} \{^{14}\text{NH}_3\} \quad (6.3)$$

$$\{14\}^* = \frac{1}{(1 - \alpha\beta)} \{^{14}\text{NH}_3\} + \frac{\beta}{(1 - \alpha\beta)} \{^{15}\text{NH}_3\} \quad (6.4)$$

Ainsi, on peut écrire et analyser les spectres débarrassés de leur impureté :

$$\{15\} = \frac{1}{(1 - \alpha\beta)} (\{15\}^* - \alpha \{14\}^*)$$

$$\{14\} = \frac{1}{(1 - \alpha\beta)} (\{14\}^* - \beta \{15\}^*)$$

Le traitement peut paraître complexe lorsque les transitions sont isolées et aisément distinguables, mais il s'avère particulièrement sensible et efficace lorsque des transitions des 2 isotopologues sont presque confondues. La non prise en compte de l'impureté peut dans ce cas conduire à une valeur erronée

	Mode	$\sigma$ (cm <sup>-1</sup> )	$\alpha L$ (cm <sup>-1</sup> )
transition 1	sans traitement	6577.1834	0.007022
	avec traitement	6577.1829	0.005912
transition 2	sans traitement	6577.0095	0.000882
	avec traitement	6577.0156	0.000246

TABLE 6.5 – Exemple d’analyse de 2 transitions de <sup>15</sup>NH<sub>3</sub> au voisinage de 6577 cm<sup>-1</sup>. La mesure de la position et de la force de raie est perturbée par la présence de transitions de <sup>14</sup>NH<sub>3</sub> présent comme impureté (voir le cadran du milieu de la figure 6.3).

de l’absorbance et donc de la force de raie.

Nous présentons un exemple du traitement utilisé sur la figure 6.3. Il se révèle nécessaire pour extraire la valeur d’absorbance correcte pour la transition de <sup>15</sup>NH<sub>3</sub> située à 6577.1830 cm<sup>-1</sup>. Dans le tableau 6.5, les valeurs obtenues pour cette transition 1 montre une différence de 20% si l’on ne tient pas compte de l’impureté . De plus, il permet de confirmer la présence d’une transition très faible située à 6577.0156 cm<sup>-1</sup> attribuée à l’isotope <sup>15</sup>NH<sub>3</sub> (transition 2), très proche d’une composante de <sup>14</sup>NH<sub>3</sub> à 6577.0080 cm<sup>-1</sup>. Sans ce traitement, comme le montre les valeurs du tableau 6.5 pour la transition 2, on aurait surestimé l’intensité de cette transition d’un facteur 3. Nous pouvons remarquer que cette transition n’est pas distinguable dans le 3ème cadran de la figure 6.3.

Lors de notre étude de la gamme 1520-1570 nm pour l’isotopologue <sup>15</sup>NH<sub>3</sub>, 2939 transitions ont été observées à température ambiante. Parmi ces transitions 337 ont été éliminées de notre liste puisqu’il s’agit de transitions de l’isotopologue principal.

### 6.3 Nombre d’onde, force de raie

A l’issue de notre travail, nous avons construit une liste des transitions de <sup>14</sup>NH<sub>3</sub> dans la gamme 1520-1570 nm qui comporte la position, la force de raie

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$		
6577.1857	6577.1865		
A	$a_2\{\gamma_D\}$	$a_3(\gamma_L)$	
0.000048	0.000014	0.008662	
$\delta A$	$\delta\sigma$	$\delta a_3(\gamma_L)$	
7.884523E-5	7.774977E-7	3.151837E-2	
T	$P_1$	$P_2 t_{abs}$	
134.09	0.092	0.400	3450674186
Nom du fichier avec son répertoire			
06may2013-14NH3-6328-133K-10_36_22\CAL\134&09-10_36_22-1-6578&0.dat			

TABLE 6.6 – Détail d'une ligne du fichier

et l'énergie de l'état de départ ainsi que l'incertitude respective sur ces valeurs. Dans le cas de  $^{15}\text{NH}_3$ , la liste construite ne comporte que la position et la force de raie de chaque transition puisque, rappelons-le, l'étude en fonction de la température n'a été que partiellement abordée dans la zone 1520-1540 nm. Nous allons donner dans les paragraphes suivants les méthodes utilisées pour déterminer ces informations.

Nous avons vu dans le chapitre précédent les outils de calibration et d'ajustement. Notre stratégie a été de construire un fichier unique rassemblant toutes les informations issues des analyses.

Voici un exemple d'une ligne de ce fichier :

La première colonne, appelée  $\sigma_{label}$ , est une manière de repérer la transition, en particulier lorsqu'elle apparait dans les spectres à températures différentes. Elle est représentée par un nombre avec 4 décimales (ex :6577.1852). Lorsque la transition a été déjà observée dans des références précédentes [39], nous avons choisi cette valeur pour désigner la transition. La seconde colonne est le résultat de l'ajustement  $\sigma_{fit}$  dépendant de notre calibration, ce chiffre est maintenu avec 4 décimales car on considère que la calibration relative donnée par les pics de Fabry-Perot le permet. Les colonnes suivantes sont l'absorbance

intégrée  $\alpha L$ , la largeur gaussienne  $\Delta\nu_D/2\sqrt{\ln 2}$  et la largeur lorentzienne par l'intermédiaire de son rapport avec la largeur gaussienne ( $a_3 = \gamma_L/\gamma_g$ ). Viennent ensuite les incertitudes respectives sur ces quantités issues de l'ajustement. Enfin sont rassemblées les données relatives à l'enregistrement : la pression, la température, le temps absolu (donné par Labview : date d'enregistrement du spectre) et le répertoire du spectre. Toute modification d'une analyse peut alors être efficacement traitée.

### 6.3.1 Nombre d'onde absolu de $^{14}\text{NH}_3$

La valeur de l'erreur donnée par l'ajustement des raies à un profil de Voigt est de l'ordre de  $2 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ . La valeur moyenne de ces erreurs présentes dans le fichier de données est de  $1.2 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$  avec un écart type de  $1.7 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ . Cette valeur est négligeable devant l'erreur que l'on peut estimer sur la calibration relative et surtout la calibration absolue. Rappelons que nous dépendons pour la calibration des données existantes. En effet, nous avons déterminé dans un premier temps la valeur fixée du FSR du Fabry-Pérot en prenant une moyenne sur un ensemble d'analyse de nos spectres où l'origine et le FSR étaient ajustés pour correspondre au mieux aux valeurs de Sung *et al* [39]. Puis, dans un second temps, un second ajustement est effectué en variant seulement l'origine, le FSR étant fixé. Cette valeur commune de FSR est de  $0.03337 \text{ cm}^{-1}$ . Considérant un spectre typique de  $1.4 \text{ cm}^{-1}$  de large, il comporte 42 pics de Fabry-Pérot, une erreur sur le dernier chiffre significatif du FSR de  $2 \cdot 10^{-5}$  donne une différence de  $1 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$  entre les deux extrémités du spectre. Il est certain qu'il y a aussi certainement des erreurs sur les positions de Sung *et al* [39] liées aux profils des transitions plus larges en Transformée de Fourier. Cette erreur sur la position est reportée entre  $2 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$  et  $1 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ .

Illustrons cette difficulté par un exemple : une partie de spectre entre 6495.3

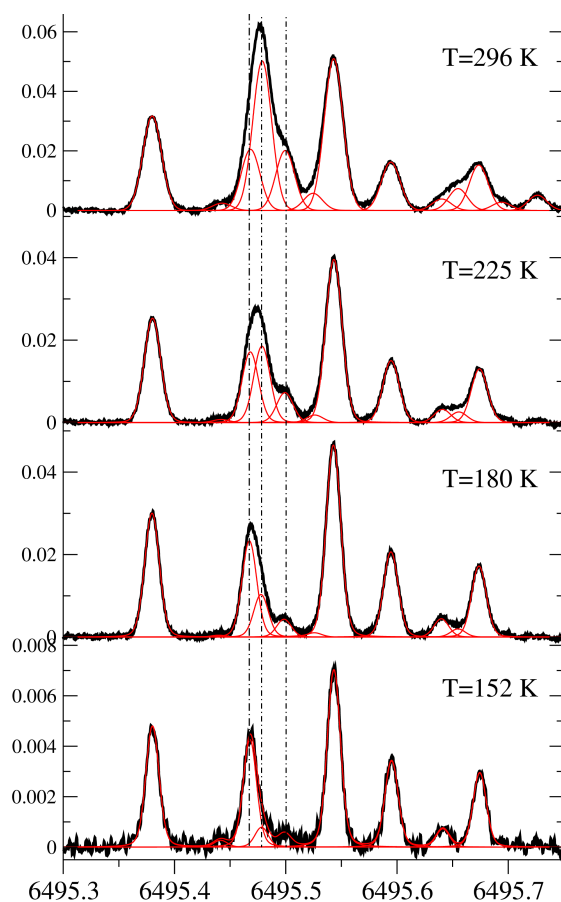


FIGURE 6.4 – Evolution du spectre autour de la transition  $6495.4769 \text{ cm}^{-1}$  en fonction de la température. Chaque spectre a été ajusté par des profils de Voigt (lignes rouges). Les lignes pointillées montrent la position des 3 transitions maintenue fixe lors de l'ajustement pour garantir une analyse correcte.

et  $6495.75 \text{ cm}^{-1}$  en fonction de la température est présenté sur la figure 6.4. Notre attention porte sur la zone autour de  $6495.47 \text{ cm}^{-1}$ . Dans la liste de Sung *et al* ne figure que 2 transitions  $6495.4769$  et  $6495.4999 \text{ cm}^{-1}$ , avec des intensités respectivement de  $0.680\text{E-}22$  et  $0.244\text{E-}22 \text{ cm/mol}$  et des énergies de l'état initial de  $532.9$  et  $790.7 \text{ cm}^{-1}$  respectivement. Sur la figure 6.4, il apparait que la transition pointée à  $6495.4769 \text{ cm}^{-1}$  contient en fait 2 composantes distinguables en particulier à  $T=152 \text{ K}$  et  $180 \text{ K}$ . En effet, un épaulement est présent dans le pied de la transition à  $T=152\text{K}$  et à  $T=180 \text{ K}$  la transition ne peut être ajustée

par une seule composante si l'on considère un profil commun à l'ensemble des transitions. Les 2 transitions sont positionnées respectivement à 6495.4704 et 6495.4790  $\text{cm}^{-1}$ . Leur évolution est représentée sur la figure 6.4 par les tracés des composantes individuelles de l'ajustement en rouge. Leurs intensités relatives s'inversent en fonction de la température. Nous avons soigneusement analysé cette partie en maintenant constant l'écart relatif entre les 2 composantes précédentes et celle à 6495.4998  $\text{cm}^{-1}$ . Le résultat est résumé sur le tableau 6.7 suivant et reporté dans le fichier de données principal :

$\sigma$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	152 K	180 K	225 K	296 K
	$\alpha L$ ( $10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ )			
6495.4704	66	407	324	526
6495.4790	12	171	355	1086
6495.4998	7	67	128	425

TABLE 6.7 – Valeurs d'absorbance en fonction de la température pour 3 transitions autour de 6495.47 $\text{cm}^{-1}$ .

Cet exemple montre que la valeur donnée par Sung *et al* de 6495.4769  $\text{cm}^{-1}$  est une valeur *moyenne* des deux composantes 6495.4704 $\text{cm}^{-1}$  et 6495.4790  $\text{cm}^{-1}$  et que son énergie d'état de départ trouvée à 532.9  $\text{cm}^{-1}$  trouvée en ne considérant qu'une transition est probablement erronée.

Puisque nous dépendons de cette liste pour notre calibration, il peut sembler inutile de vouloir comparer nos valeurs, cependant on peut tout de même comparer la cohérence des valeurs de Sung *et al* avec notre calibration relative, sachant que la résolution de la spectroscopie laser est ici plus performante et que nous bénéficions aussi des spectres à basse température comme nous venons de le montrer. Nous avons procédé comme suit. Chaque spectre a été repositionné en ajustant la position de la transition de plus grande intensité sur la valeur correspondante de Sung *et al* par un décalage du spectre en maintenant l'intervalle spectral libre constant. Ceci a été fait pour l'ensemble des spectres

incluant toutes les températures.

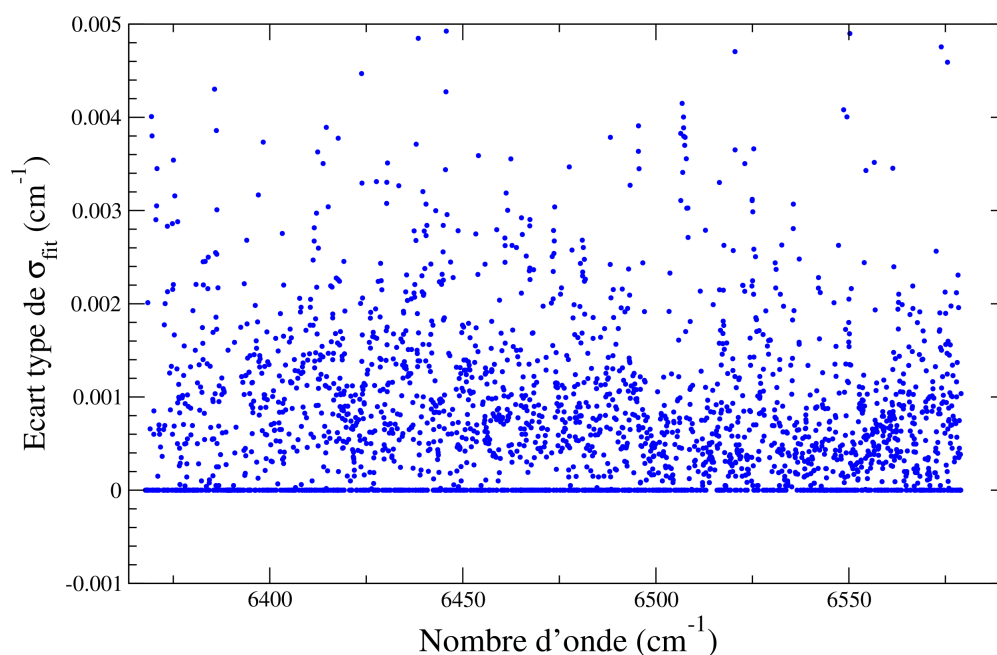


FIGURE 6.5 – Dispersion des valeurs de  $\sigma_{fit}$  pour les transitions de l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$ . L'écart-type vaut 0 si la transition n'est mesurée qu'une seule fois.

La figure 6.5 montre l'écart-type des valeurs de  $\sigma_{fit}$  pour toutes les transitions mesurées (2617). Nous considérons ensuite les valeurs moyennes de  $\sigma_{fit}$  pour 3 catégories de transitions : les transitions présentes dans la liste Sung *et al* ayant servi comme référence dans le processus de re-calibration (1), celles présentes dans cette même liste mais n'ayant pas été utilisée comme référence (2) et enfin les autres transitions (3) n'apparaissant pas dans la liste Sung *et al*. La figure 6.6 montre la différence entre cette valeur  $\langle \sigma_{fit} \rangle$  et la position de la raie reportée dans la liste de Sung *et al* pour les catégories (1) et (2) (417 et 1212 valeurs respectivement). Enfin la figure 6.7 montre l'écart-type de  $\lambda_{fit}$  pour les transitions observées non présentes dans la liste Sung *et al* (incluant des raies de l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  présent comme impureté).

Dans la gamme spectrale 1520-1570 nm incluant toutes les données, 2206

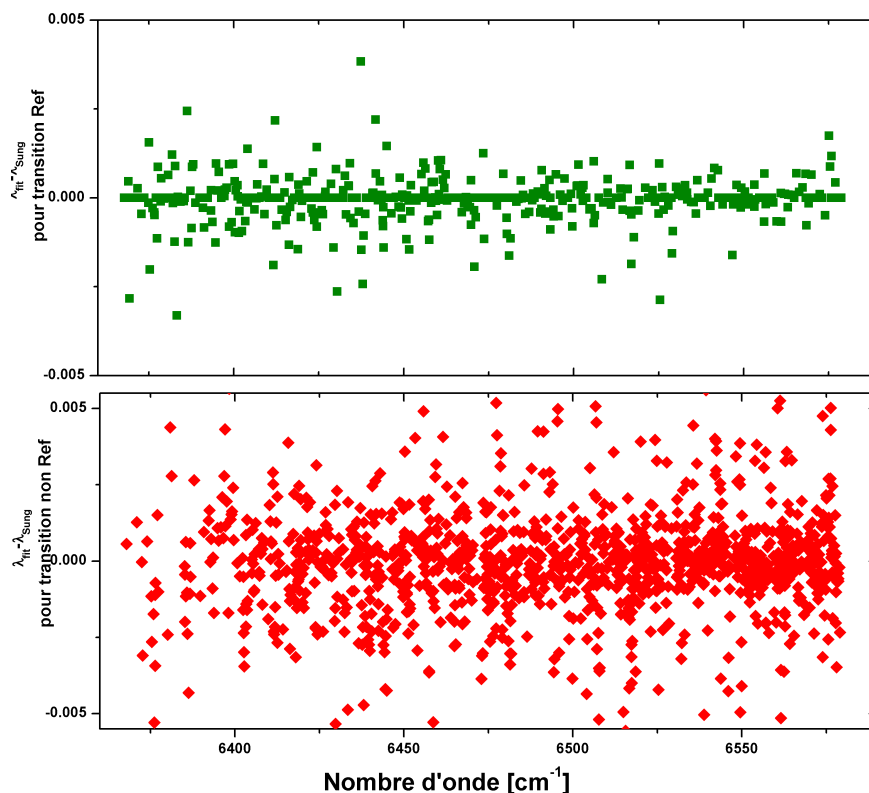


FIGURE 6.6 – Différence  $\sigma_{fit} - \sigma_{SUNG}$  entre l'énergie des transitions de l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$  mesurée dans notre travail et celle de la référence Sung *et al.* Dans le cadran du haut, la valeur 0 est normale, puisque ces raies ont été prises comme référence et donc positionnées à leur valeur exacte de la liste Sung *et al.*

transitions ont été attribuées à l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$  parmi les 2617 transitions observées. 1662 valeurs sont présentes dans la liste de Sung *et al.* [39] et nous avons pu faire une comparaison pour 1629 d'entre elles. La différence (31) correspond à des transitions de  $^{15}\text{NH}_3$  ou à des transitions pour lesquelles une différence sur la position supérieure à  $7 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$  est observée. Par exemple, une raie manquante à  $6578.4245 \text{ cm}^{-1}$  est attribuée à  $^{15}\text{NH}_3$  et celle à  $6573.3727 \text{ cm}^{-1}$  existe mais est masquée par une raie de l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  à  $6573.3883 \text{ cm}^{-1}$ .

Nous remarquons que grâce à la recalibration que nous avons effectuée l'écart



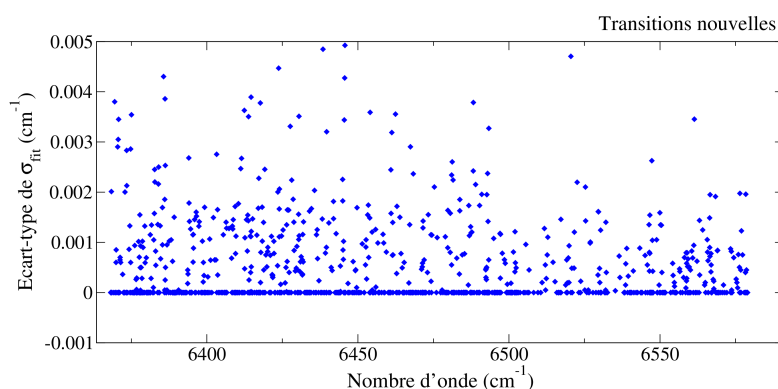


FIGURE 6.7 – Ecart-type pour les transitions non présentes dans Sung *et al* . L'écart-type vaut 0 si la transition n'est mesurée qu'une seule fois.

$\sigma_{fit} - \sigma_{SUNG}$  est inférieur à  $\pm 1 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$  pour les raies prises comme référence et que cet écart reste inférieur à  $\pm 3 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$  pour les autres transitions. Compte tenu de la confiance que l'on peut avoir sur la cohérence globale des valeurs de la liste de Sung *et al* obtenue dans une expérience de spectroscopie par Transformée de Fourier, nous retiendrons ce chiffre de  $\pm 3 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$  pour l'incertitude absolue du nombre d'onde mais une précision relative locale inférieure de  $1 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ . Nous présentons dans le tableau 6.8 un extrait de l'ensemble des données reportées dans un fichier joint en annexe du manuscrit. Ce tableau fait apparaître la valeur de  $\sigma_{fit}$ , l'écart-type sur ces mesures et l'écart à la valeur  $\sigma_{Sung}$  lorsque celle-ci est présente dans la liste Sung *et al* .

### 6.3.2 Nombre d'onde absolu $^{15}\text{NH}_3$

Pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ , les données existantes sont reportées dans les référence suivantes [40, 41, 42] que l'on désignera par Lees *et al* ou liste LX du nom des auteurs Lees, R et Xu, L.-H. Cette liste ne couvrant qu'une partie de ( $6412\text{-}6578 \text{ cm}^{-1}$ ) de notre gamme spectrale ( $6367\text{-}6578 \text{ cm}^{-1}$ ), nous avons utilisé le spectre d'absorption de l'isotopologue principal enregistré simultanément dans le but de pouvoir calibrer la partie manquante ( $6367\text{-}6412 \text{ cm}^{-1}$ ). Cepen-

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
367.7608	6367.7608	0	1	0	1
6367.9655	6367.96494	0	2	0.00056	1
6368.1687	6368.16968	0	3		1
6368.2891	6368.2833	0	3		1
6368.36	6368.36	0	3		1
6368.414	6368.4166	0.00201	3		3
6368.5994	6368.5994	0	3		1
6369.0115	6369.01104	0.00066	1	0.00046	3
...	...	...	...	...	...
6578.4112	6578.41304	0.00196	3		3
6578.4453	6578.44569	0.00035	2	-0.00039	4
6578.5553	6578.55587	0.00036	2	-0.00057	4
6578.6089	6578.60956	0.00075	2	-0.00066	4
6578.6324	6578.63241	0.00045	3		2
6578.671	6578.67171	0	3		1
6578.7484	6578.7484	0	1	0	5
6578.8055	6578.80637	0	3		1
6578.8752	6578.8754	0.00038	2	-0.0002	4
6578.9267	6578.92771	0	3		1
6578.9699	6578.97096	0	3		1

TABLE 6.8 – Extrait du tableau des résultats  $\sigma_{fit}$  avec comparaison avec  $\sigma_{Sung}$  pour l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$ . La 3ème colonne donne l'écart-type des valeurs de  $\sigma_{fit}$  et vaut 0 lorsque la transition n'est mesurée qu'une seule fois. La 4ème colonne est un indicateur de la catégorie (cf texte) 1 : transitions Sung *et al.* prises comme référence, 2 : autres transitions Sung *et al.*, 3 : nouvelles transitions. La 5ème colonne représente la différence  $\Delta\sigma = \sigma_{fit} - \sigma_{Sung}$ . La 6ème colonne est le nombre de mesures différentes pour une transition.

dant, comme il est expliqué dans le chapitre précédent, la cellule de référence d'une quarantaine de centimètres est remplie avec du gaz à pression d'environ 50 mbar afin d'obtenir un signal suffisant. Ceci a pour effet d'élargir les raies d'absorption et de réduire la précision de la calibration.

Les transitions de la liste LX ont été obtenues dans une expérience de spectroscopie laser. Les positions absolues ont été mesurées en stabilisant le laser sur chaque composante et en effectuant la mesure à l'aide d'un lambda-mètre. Les auteurs précisent que cette mesure peut être perturbée par la pente de la ligne de base. 239 composantes sont présentes dans notre gamme 6412-6578  $\text{cm}^{-1}$ .

Nous avons comparé ces valeurs  $\sigma_{LX}$  avec celle obtenues dans notre travail  $\sigma_{fit}$ . La différence  $\sigma_{fit} - \sigma_{LX}$  est présentée sur la figure 6.8. On constate que cette différence reste majoritairement inférieure à  $2 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$  ce qui confirme la précision de la calibration absolue de nos mesures.

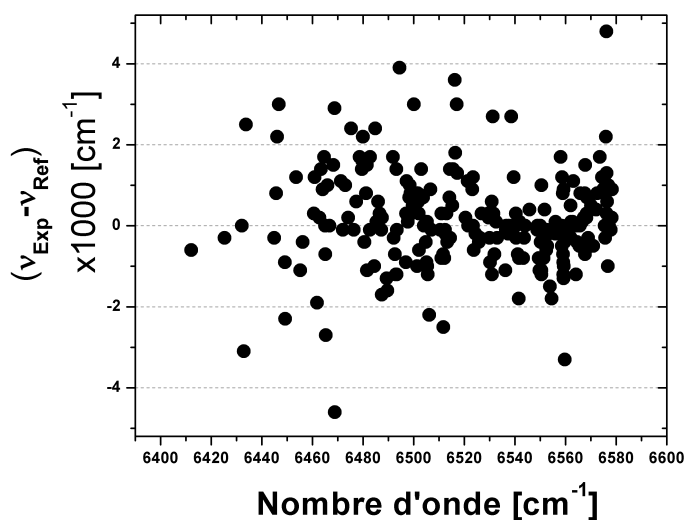


FIGURE 6.8 – Différence  $\sigma_{fit} - \sigma_{LX}$  pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ .

Pour la zone inférieure à 6412  $\text{cm}^{-1}$ , nous avons pu comparer nos mesures avec quelques données de Lees *et al* non publiées, l'écart reste aussi inférieur à

$2 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ .

Concernant la précision sur les nombres d'onde des transitions des deux isotopologues  $^{14}\text{NH}_3$  et  $^{15}\text{NH}_3$  un dernier outil est l'utilisation de notre méthode d'extraction des spectres décrite dans la partie 6.2. Dans ce processus, on peut agir sur la position relative des deux spectres  $\{14\}^*$  et  $\{15\}^*$  pour parvenir à une élimination la plus parfaite possible du spectre de l'impureté. Tenant compte d'un éventuel décalage (en général inférieur à  $2 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ ), il est possible de positionner de manière précise les transitions d'un isotopologue par rapport à l'autre. Nous n'avons pas poussé plus avant cette piste, mais elle se place dans la même optique que de considérer que la calibration relative a une précision meilleure que la calibration absolue.

### 6.3.3 Forces de raie à T=296 K pour $^{14}\text{NH}_3$

Rappelons l'équation 1.9 qui permet de déduire la force de raie à partir de l'intégrale sur le profil de l'absorbance, de la densité de molécules N et de la longueur d'absorption L :

$$S_{ab} = \frac{\alpha_{ab}}{N} = \frac{1}{NL} \int_{ab} -\ln\left(\frac{I_t(\sigma)}{I_0(\sigma)}\right) d\sigma = \frac{1}{NL} A_{ab} \quad (6.5)$$

L'aire  $A_{ab}$  est obtenue à partir du programme d'ajustement. N se calcule à partir de la pression p :

$$N \left[ \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3} \right] = 7.339 \cdot 10^{18} \frac{P [\text{mbar}]}{T}$$

La pression  $P_{tot}$  mesurée par la jauge dans l'expérience est la pression totale de gaz dans la cellule et nous savons que le gaz peut contenir une plus ou moins grande quantité d'impureté selon les enregistrements et l'historique de ceux-ci.

Dériver la force de raie nécessite la connaissance précise de la pression partielle de l'isotopologue étudié dans la cellule. Nous avons constaté rapidement que diviser l'absorbance par la pression  $P_{mes}$  dans le cas de deux spectres enregistrés à des pressions différentes ne conduisait pas au même résultat mais à des spectres homothétiques. Par contre, après une correction variant de 1 à 10% une superposition presque parfaite des 2 spectres était possible.

Nous avons donc décidé de procéder différemment pour dériver les forces de raies de l'ensemble des transitions observées à  $T=296$  K en exploitant les aires relatives à l'intérieur d'un même spectre. En effet, si l'on fait le rapport entre les absorbances de deux transitions 1 et 2, la pression et la longueur d'absorption n'apparaissent plus et on a l'équation :

$$R_{12} = \frac{A_1}{A_2} = \frac{S_1}{S_2} \quad (6.6)$$

Comme nous l'avons fait pour obtenir des positions absolues des transitions, nous allons nous servir de forces de raies de référence. Celles-ci vont être prises dans la liste de référence Sung *et al* pour l'isotopologue principal et dans la liste Lins *et al* pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ .

Pour l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$ , nous avons choisi de privilégier les transitions isolées, de force de raies ni trop faible ni trop forte afin d'éviter les problèmes de saturation. Nous considérons pour le moment les paires de transitions impliquant uniquement les transitions choisies comme référence. Pour une transition expérimentale donnée (a), sa force de raie  $S_i(a)$  est calculée en exploitant la force de raie de la transition de référence (i) et du rapport expérimental mesuré  $\frac{A(a)}{A(i)}$ .

$$S_i(a) = S(i) \times \frac{A(a)}{A(i)}$$

Une moyenne des valeurs de  $S_i(a)$  est faite sur les transitions de référence  $i$  voisines de la transition  $a$ . Cette valeur  $\langle S_i(a) \rangle_i$  devient la nouvelle valeur de  $S(a)$ . Après itération de ce procédé, on converge vers une liste dont les forces de raies sont issues de la liste de référence et compatible avec l'ensemble des spectres expérimentaux.

Le procédé est ensuite appliquée une seconde fois en considérant cette fois-ci les paires avec une raie appartenant à liste de référence, la seconde étant à déterminer. Le procédé est efficace et permet de corriger par exemple une transition dont la force de raie n'est pas correcte dans la liste Sung *et al*, le résultat final étant la cohérence complète de la liste avec les intensités relatives des spectres expérimentaux.

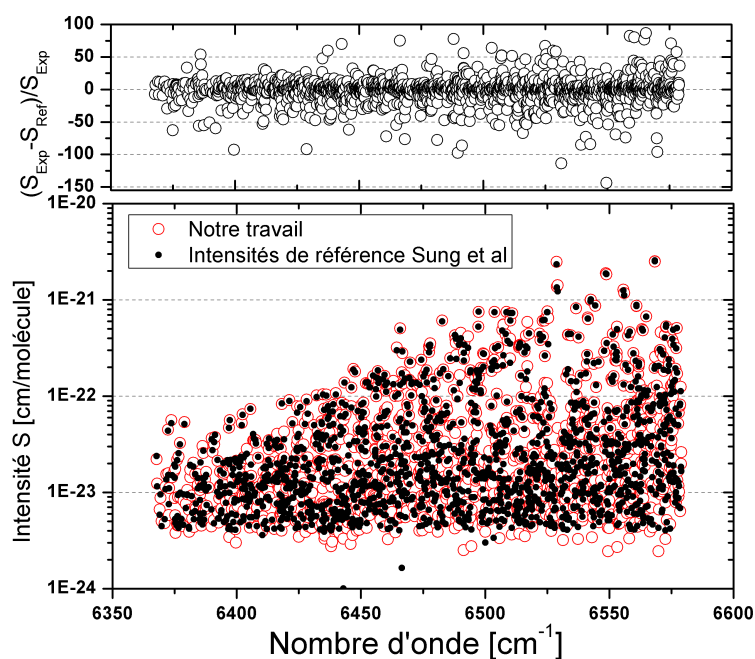


FIGURE 6.9 – Comparaison entre les intensités obtenues dans ce travail et celles de la liste Sung *et al*. Les intensités sont représentées en fonction de nombre d'onde en échelle logarithmique. Le cadre du haut représente la différence d'intensité relative.

La comparaison entre nos résultats et les forces de raie de la liste SL est

présentée sur la figure 6.9 en échelle logarithmique. Dans ce travail où 2288 transitions sont observées dans notre gamme spectrale, nous n'avons conservé que les transitions que nous avons attribuées de manière certaine à  $^{14}\text{NH}_3$  grâce à la méthode que nous avons décrite précédemment. 2206 valeurs de forces de raie ont été ainsi déterminées, les autres transitions étant attribuées à  $^{15}\text{NH}_3$  ou fortement perturbées par elles. Il ne serait en effet pas correct de conserver ces dernières transitions, puisque leur intensité relative peut varier suivant les enregistrements en fonction de la quantité d'impureté présente.

Le tableau 6.9 donne un extrait du tableau représentant la comparaison entre les forces de raies déduites de notre travail et la liste de Sung *et al.*

#### 6.3.4 Forces de raie à T=296 K pour $^{15}\text{NH}_3$

Les forces de raies pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  sont obtenues en utilisant la liste de référence de Lins *et al.* Cette liste ne comporte que 24 transitions limitées à la gamme 6468-6578  $\text{cm}^{-1}$ . Comme nous allons le voir, cinq valeurs ont été exclues : deux appartiennent à  $^{14}\text{NH}_3$  (6548.608 et 6548.793  $\text{cm}^{-1}$ ), les 3 autres (6528.775, 6548.917 et 6555.988  $\text{cm}^{-1}$ ) voient leur intensités perturbées par des transitions de  $^{14}\text{NH}_3$ . Détaillons maintenant les raisons de ces éliminations.

La figure 6.10 montre la région spectrale {15}\* des transitions (6548.608 et 6548.793  $\text{cm}^{-1}$ ). L'enregistrement de la même région pour  $^{14}\text{NH}_3$  que l'on désigne par {14}\* montre clairement que ces 2 raies y sont intenses et appartiennent à un doublet *s - a* de  $^{14}\text{NH}_3$  repertorié dans la liste de Sung *et al.* (6548.611 et 6548.7983  $\text{cm}^{-1}$  respectivement) soit la transition  $^P P_3(4)$  de la bande  $\nu_1 + \nu_3$ .

Il est intéressant de remarquer que le doublet principal (6548.861 et 6548917  $\text{cm}^{-1}$ ) présent dans le spectre {15}\* et identifié par Lees *et al.* comme les transitions *a* et *s* de  $^P P_2(3)$  pour la bande  $\nu_1 + \nu_3$  de  $^{15}\text{NH}_3$  possède des intensités comparables dans notre enregistrement. Or, ce doublet est donné dans la liste de Lins *et al.* avec

$\sigma_{label}$	$S$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff $S$ (%)
6367.7608	2.2343E-023	0.0095	6367.7608	2.38E-023	-6.5
6367.9655	1.1617E-023	0.0104	6367.9655	1.15E-023	1.0
6368.1687	2.6785E-024	0.0077	0	0	0.0
6368.2891	9.8952E-025	0.0121	0	0	0.0
6368.36	3.2696E-025	0.0336	0	0	0.0
6368.414	2.8999E-024	0.0101	0	0	0.0
6368.5994	8.1028E-025	0.0168	0	0	0.0
6369.0115	6.5391E-024	0.0071	6369.0115	5.85E-024	10.5
6369.1823	2.8004E-024	0.0093	0	0	0.0
6369.3461	8.643E-024	0.0071	6369.3461	9.48E-024	-9.7
6369.6171	6.8632E-025	0.0187	0	0	0.0
6369.7288	2.199E-024	0.0085	0	0	0.0
6369.8121	4.9023E-024	0.0071	6369.8121	4.44E-024	9.4
...	...	...	...	...	...
6575.907	1.5232E-023	0.0033	6575.907	1.9E-023	-24.7
6576.0076	1.2276E-023	0.0041	6576.0076	1.28E-023	-4.3
6576.1651	1.8971E-022	0.0018	6576.1651	1.11E-022	41.5
6576.2651	7.8013E-023	0.0018	6576.2651	5.12E-023	34.4
6576.3976	1.4984E-022	0.0025	6576.3976	1.47E-022	1.9
6576.5278	8.0286E-024	0.0081	6576.5278	7.82E-024	2.6
6576.5638	1.1812E-023	0.0061	0	0	0.0
6576.641	1.1106E-023	0.0049	6576.641	1.41E-023	-27.0
6576.7029	1.9088E-022	0.0019	6576.7029	1.94E-022	-1.6
6576.7463	1.1989E-022	0.002	6576.7463	7.4E-023	38.3
6576.8277	7.8234E-024	0.0086	6576.8277	1E-023	-27.8
6576.9307	8.6414E-024	0.0083	6576.9307	9.07E-024	-5.0

TABLE 6.9 – Forces de raies  $^{14}\text{NH}_3$ . Différence entre notre travail et les données de Sung *et al.*  $S$  et  $\delta S$  représentent nos forces de raies avec leur incertitude en %, Diff  $S$  est la différence relative en % entre notre valeur et celle de Sung *et al.*



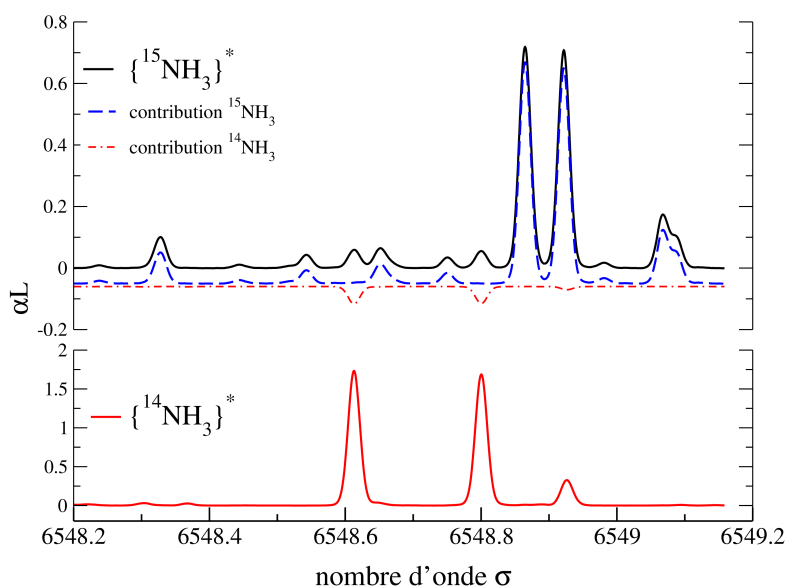


FIGURE 6.10 – Spectres  $\{15\}^*$  et  $\{14\}^*$  dans la gamme  $6448.2 - 6549.2 \text{ cm}^{-1}$  montrant que les 2 transitions  $6548.608$  et  $6548.793 \text{ cm}^{-1}$  appartiennent à  $^{14}\text{NH}_3$ . La décomposition du spectre  $\{15\}^*$  est présentée dans la partie haute.

des intensités différentes, à savoir  $5.23\text{E-}022 \text{ cm/mol}$  pour  $6548.861 \text{ cm}^{-1}$  et  $5.86\text{E-}022 \text{ cm/mol}$  pour  $6548.917 \text{ cm}^{-1}$ . L'explication est claire sur la figure 6.11 montrant que cette différence est liée à l'influence d'une transition de  $^{14}\text{NH}_3$  localisée à  $6548.9247 \text{ cm}^{-1}$  et répertoriée par Sung *et al* comme la transition  $^R Q_0(2)$  de la bande  $\nu_1 + 2\nu_4$ . De la même manière, la transition située à  $6528.775 \text{ cm}^{-1}$  non illustrée dans ce manuscrit présente dans la liste de Lins *et al* est perturbée par une transitions de  $^{14}\text{NH}_3$  située à  $6528.7732 \text{ cm}^{-1}$  ( $^P P_3(5)$ ) de la bande  $\nu_1 + \nu_3$ ).

Nous avons donc conservé comme forces de raie de référence 16 composantes dans la liste de Lins *et al*.

Cette remarque attire notre attention sur le fait que dans les spectres enregistrés par Lins *et al*, la quantité d'impureté  $^{14}\text{NH}_3$  est plus importante que dans nos spectres. Cela remet en question la valeur des intensités absolues données

par Lins. En effet, dans son article, Lins *et al* utilise la relation suivante

$$S = \frac{1}{c} \frac{AkT}{Lp}$$

pour extraire la force de raie  $S$  en fonction de l'intégrale de l'absorbance  $A$  de la pression  $p$ , de la température  $T$  et de la fraction molaire  $c$  de la molécule absorbante. Il s'avère que si l'on suppose que la valeur donnée  $S_{Lins} = 4.59 \times 10^{-22}$  cm/mol de la transition à  $6548.793 \text{ cm}^{-1}$  indûment attribué à  $^{15}\text{NH}_3$  appartient en fait à  $^{14}\text{NH}_3$ , dont on connaît la force de raie  $S_{HIT} = 1.847 \times 10^{-21}$  cm/mol grâce à HITRAN2012 ou à Sung *et al*, on déduit alors  $c_{14} = 0.98 * S_{Lins}/S_{HIT} = 0.244$  (la valeur de 0.98 vient du fait que la pureté de l'échantillon de  $^{15}\text{NH}_3$  dans le travail de Lins est donnée à 98%). De cette valeur on déduit ensuite  $c_{15} = 1 - c_{14} = 0.756$  au lieu de 0.98. Dans l'expérience réalisée par Lins *et al*, la valeur correcte de  $c_{15}$  n'est pas celle qu'il croyait, il faut donc corriger l'ensemble des valeurs de forces de raies données par le facteur  $0.98/0.756=1.2955$ . Nous effectuerons donc cette correction dans l'analyse de nos données.

Dans la gamme 1520-1540 nm ( $6493\text{-}6578 \text{ cm}^{-1}$ ), les spectres ont été enregistrés le même jour avec les mêmes conditions expérimentales (P,T). Le même procédé que décrit précédemment pour  $^{14}\text{NH}_3$  a été mené utilisant les 19 transitions de référence. Pour la gamme 1540-1570 nm ( $6367\text{-}6493 \text{ cm}^{-1}$ ), les spectres ont été enregistrés à pression croissante, tentant de compenser la baisse du signal en fonction de la longueur d'onde croissante. Nous avons constaté là aussi que la division par la pression mesurée n'est pas suffisante pour obtenir un recouvrement parfait lorsque la même partie est enregistrée à deux pressions différentes. C'est pourquoi nous avons appliqué un facteur correctif permettant de rectifier ce désaccord et de proposer une continuité optimale lors de ces changements de pression. La partie  $6367\text{-}6493 \text{ cm}^{-1}$  reconstruite de cette manière a été référencée

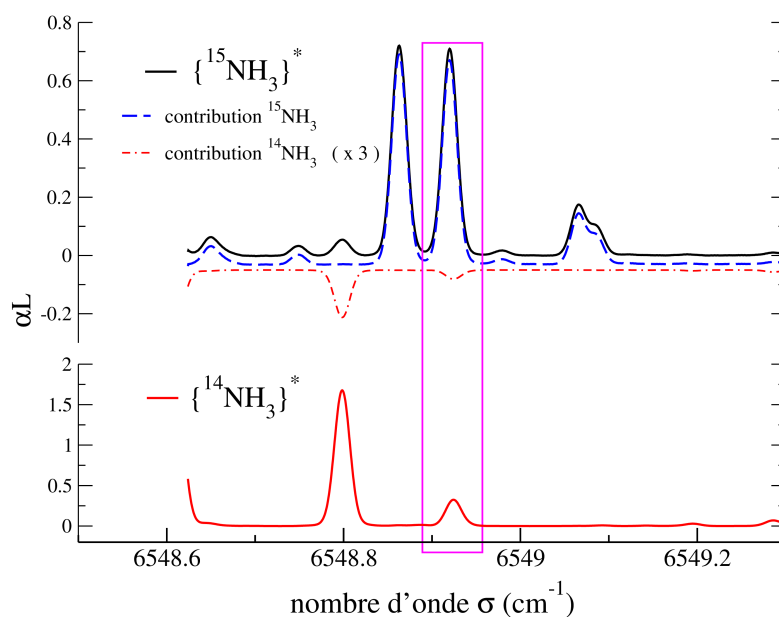


FIGURE 6.11 – Analogue à la figure 6.10 dans la gamme 6448.2 - 6549.3  $\text{cm}^{-1}$ . L'intensité de la deuxième composante du doublet fut surévaluée dans le spectre de Lins *et al* dû à la présence de  $^{14}\text{NH}_3$  comme impureté.

à la première transition de la liste Lins *et al* située à  $6468.335 \text{ cm}^{-1}$  de force de raie  $5.38\text{E}-22 \text{ cm/mol}$ .

2939 transitions sont observées dans les spectres. La valeur de la force de raies  $S$  est déterminée pour les 2602 transitions appartenant à l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ . 337 transitions sont éliminées appartenant à  $^{14}\text{NH}_3$  présent comme impureté. Une liste des forces de raies avec l'erreur respective à température ambiante est construite.

Sur le tableau 6.10, nous résumons la comparaison entre nos valeurs et celles de Lins/

Nous présentons le résultat obtenu pour les 2602 transitions sur la figure 6.12. Y figurent les 19 forces de raies de la liste Lins *et al*. Nous y avons fait figurer aussi les transitions présentes dans les références Lees *et al* (239 positions) en leur attribuant notre valeur expérimentale de la force de raie puisque cette

$\sigma$ cm <sup>-1</sup>	S cm/mol	$\delta S$ %	$\sigma_{Lins}$ cm <sup>-1</sup>	$S_{Lins}$ cm/mol	$S_{Linscorr}$ cm/mol	$\delta S_{Lins}$ %	$\Delta\sigma$ 10 <sup>-3</sup> cm <sup>-1</sup>	$\Delta S$ %
6468.338	6.79E-22	1.39	6468.335	5.38E-22	6.97E-22	1.92	3	-2.7
6471.3153	4.75E-22	1.31	6471.311	3.59E-22	4.65E-22	0.29	4.3	2.3
6487.4900	7.32E-22	1.3	6487.482	5.75E-22	7.45E-22	0.47	8	-1.7
6492.6043	6.49E-22	1.33	6492.600	5.09E-22	6.59E-22	0.13	4.3	-1.6
6512.3712	8.49E-22	1.3	6512.371	6.31E-22	8.17E-22	0.24	0.2	3.7
6516.2879	1.00E-21	1.32	6516.288	7.82E-22	1.01E-21	0.24	-0.1	-1.1
6516.4212**	9.86E-22	0.29	6516.42	8.35E-22	1.08E-21	0.24	1.2	-9.7**
6517.0205*	8.38E-22	0.41	6517.023	6.96E-22	9.02E-22	0.23	-2.5	-7.6*
6517.2036	9.90E-22	1.26	6517.205	7.58E-22	9.82E-22	0.26	-1.4	0.8
6528.7905*	3.24E-23	0.43	6528.775	7.07E-22	9.16E-22	0.08	15.5	-2729.8*
6529.9849*	7.63E-22	0.29	6529.985	6.53E-22	8.46E-22	0.31	-0.1	-10.8*
6530.1834	7.76E-22	1.21	6530.182	6.16E-22	7.98E-22	0.26	1.4	-2.9
6532.6007	9.39E-22	1.22	6532.600	7.48E-22	9.69E-22	0.2	0.7	-3.1
6536.4759	1.53E-21	1.23	6536.477	1.14E-21	1.48E-21	0.1	-1.1	3.4
6536.6318*	1.45E-21	0.29	6536.631	1.06E-21	1.37E-21	0.11	0.8	5*
6541.1622	8.39E-22	1.23	6541.159	6.30E-22	8.16E-22	0.46	3.2	2.8
6543.3056	1.01E-21	1.23	6543.304	7.48E-22	9.69E-22	0.48	1.6	3.6
6543.6680*	8.72E-22	0.29	6543.668	6.37E-22	8.25E-22	0.37	0	5.3*
			6548.608	4.82E-22			<sup>14</sup> NH <sub>3</sub>	
			6548.793	4.59E-22			<sup>14</sup> NH <sub>3</sub>	
6548.8634	6.76E-22	1.23	6548.861	5.23E-22	6.78E-22	0.12	2.4	-0.2
6548.9206*	6.56E-22	0.29	6548.917	5.86E-22	7.59E-22	0.25	3.6	-15.8*
6555.9936*	2.00E-21	0.29	6555.988	1.87E-21	2.42E-21	0.14	5.6	-21.8*
6556.1050	1.96E-21	1.71	6556.096	1.55E-21	2.01E-21	0.17	9	-2.5

TABLE 6.10 – Transitions présentes dans la liste Lins *et al.* L'astérisque \* indique les transitions subissant la perturbation d'une composante de <sup>14</sup>NH<sub>3</sub>. Pour la valeur \*\*, il n'y a pas de transitions de <sup>14</sup>NH<sub>3</sub> en coincidence mais la transtion a été exclus de la liste de référence. Les trois premières colonnes sont nos résultats comparés aux données de Lins *et al.* (quatre colonnes suivantes). Nous avons fait figuré la valeur de la force de raie original et la valeur corrigée par le facteur 1.2955.  $\Delta\sigma$  représente la différence des deux nombres d'ondes,  $\Delta S$  la différence relative entre les deux forces de raies. La surévaluation de la force de raie est très claire pour les transitions perturbées.

#### 6.4. ENERGIE DE L'ÉTAT INITIAL DE CHAQUE TRANSITION POUR $^{14}\text{NH}_3$

donnée n'était pas présente dans ces références [40, 41, 42].

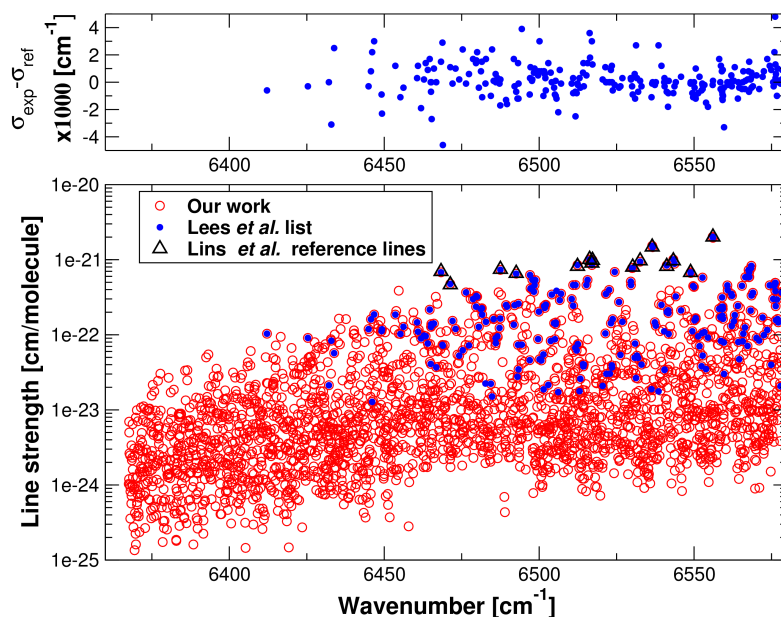


FIGURE 6.12 – Forces de raie  $S$  pour les transitions de  $^{15}\text{NH}_3$  en fonction de nombre d'onde présentées en échelle logarithmique : (cercles rouges : notre travail ; cercles bleus : positions de Lees *et al* affectées de notre valeur de  $S$  ; triangles bleus : force de raies de référence (19) de la liste Lins *et al*).

Nous mesurons ainsi notre apport à la spectroscopie de  $^{15}\text{NH}_3$ . L'ensemble de ces transitions dont la force de raie s'étend désormais sur quatre ordres de grandeurs avec la certitude de leur appartenance à cet isotopologue même pour les transitions les plus faibles.

### 6.4 Energie de l'état initial de chaque transition pour $^{14}\text{NH}_3$

La mesure de la variation de la force de raie  $S(T)$  d'une transition avec la température permet de déduire une information sur l'énergie de l'état de départ de celle-ci. Cette approche a été développée par de nombreux auteurs

en utilisant deux températures  $T_a$  et  $T_b$ . Rappelons son principe basée sur les relations établies au chapitre premier. La mesure expérimentale de  $S$  s'obtient à partir de la formule 6.5 que l'on rappelle ici :

$$S_{ab} = \frac{1}{NL} \int_{ab} -\ln\left(\frac{I_t(\sigma)}{I_0(\sigma)}\right) d\sigma = \frac{1}{NL} A_{ab}$$

Avec  $S_{ab}$  la force de raie ou intensité exprimée en  $\text{cm}^{-1}/(\text{molécule cm}^{-2})$ ,  $N$  le nombre de molécules par  $\text{cm}^3$ ,  $L$  la longueur d'absorption en  $\text{cm}$ ,  $\sigma$  exprimé en  $\text{cm}^{-1}$  et  $A_{ab}$  l'intégrale de l'absorbance  $\alpha_{ab}L$ . D'un point de vue théorique,  $S$  et surtout sa dépendance en fonction de la température  $S(T)$  s'écrit en se référant à l'équation (1.6) du premier chapitre :

$$S_{ab}(T) = \frac{8\pi^3}{3hc} \frac{2}{4\pi\epsilon_0} \sigma_{ab} |\mu_{ab}|^2 \frac{g_a \exp\left(\frac{-E_a}{kT}\right)}{Q(T)} \quad (6.7)$$

la dépendance en température étant réduite à la fraction de population présente dans l'état de départ  $\frac{1}{Q(T)} g_a \exp\left(\frac{-E_a}{kT}\right)$ .

Considérant la température  $T$  et une température de référence  $T_0$  (prise en général à  $T=296\text{K}$ ), on peut écrire :

$$S_{ab}(T) = S_{ab}(T_0) \frac{Q(T_0)}{Q(T)} \exp\left(-E_a\left(\frac{1}{kT} - \frac{1}{kT_0}\right)\right) \quad (6.8)$$

Cette approche a été suivie par plusieurs auteurs : Kassi *et al* [73] et Votava *et al* (25, 81 et 296 K)[47] sur la molécule de méthane, Webber *et al* (300 et 700 K) sur la molécule d'ammoniac [45].

Pour le méthane, la fonction de partition est correctement décrite dans la gamme 50-296 K par une dépendance en  $T^{\frac{3}{2}}$ . Il vient :

$$A_{ab}(T) = S_{ab}(T)NL = S_{ab}(T_0) \frac{Q(T_0)}{Q(T)} \exp\left(-E_a\left(\frac{1}{kT} - \frac{1}{kT_0}\right)\right) \frac{P}{kT} L \quad (6.9)$$

#### 6.4. ENERGIE DE L'ÉTAT INITIAL DE CHAQUE TRANSITION POUR $^{14}\text{NH}_3$ 143

soit une dépendance en  $T$  :

$$A_{ab} \propto PT^{-\frac{5}{2}} \exp \frac{-E_a}{kT} \quad (6.10)$$

L'ajustement de la valeur  $-\ln(I_{ab}(T)T^{\frac{5}{2}/P})$  en fonction de  $\frac{1}{T}$  est une droite de pente  $\frac{E_a}{k}$  et donne ainsi l'énergie de l'état de départ de la transition.

L'application de cette méthode requiert la connaissance des paramètres ( $p$ ,  $L$ ,  $T$ ) dans le but d'obtenir une valeur précise de l'énergie.

Comme nous l'avons vu dans notre étude des forces de raie, nous avons une confiance relative dans la valeur de la pression mesurée. Si le capteur donne une indication précise, cette mesure ne représente pas de manière exacte la pression partielle de l'isotopologue que l'on veut étudier. Nous avons choisi une autre approche qui repose sur la grande précision des intensités relatives que l'on peut mesurer à l'intérieur d'un même spectre ou dans des spectres enregistrés avec des conditions expérimentales identiques. Notre seul souci est de considérer les transitions d'un même isotopologue. En effet, une telle comparaison n'est possible qu'à l'intérieur d'une même espèce et bien entendu la quantité d'impureté peut varier d'un jour à l'autre et il serait incorrect de considérer le rapport de l'intensité d'une transition de  $^{14}\text{NH}_3$  avec celle d'une transition de  $^{15}\text{NH}_3$ .

Notre méthode consiste à considérer uniquement le rapport entre deux transitions 1 et 2. Compte tenu de l'expression de  $S_1(T)$  et  $S_2(T)$ , le rapport des 2 absorbances s'écrit :

$$R_{12}(T) = \frac{A_1(T)}{A_2(T)} = \frac{S_1(T)}{S_2(T)} = \frac{\nu_1 |\nu_1|^2 g_1}{\nu_2 |\mu_2|^2 g_2} \exp \frac{E_1 - E_2}{kT} \quad (6.11)$$

$E_1$  et  $E_2$  sont les énergies de l'état de départ des transitions 1 et 2 respectivement. Tracer la dépendance de  $-\ln(R_{12}(T))$  en fonction de  $\frac{1}{T}$  donne accès à la différence

$\Delta E_{12} = E_1 - E_2$  des énergies des états de départ des deux transitions. Surtout, la connaissance exacte de la pression n'est plus nécessaire.

La figure 6.13 présente un exemple du rapport des absorbances intégrées pour quatre températures ( 296 K, 220 K, 180 K et 150 K ) pour le couple des transitions à  $6455.689 \text{ cm}^{-1}$  et  $6455.858 \text{ cm}^{-1}$ .

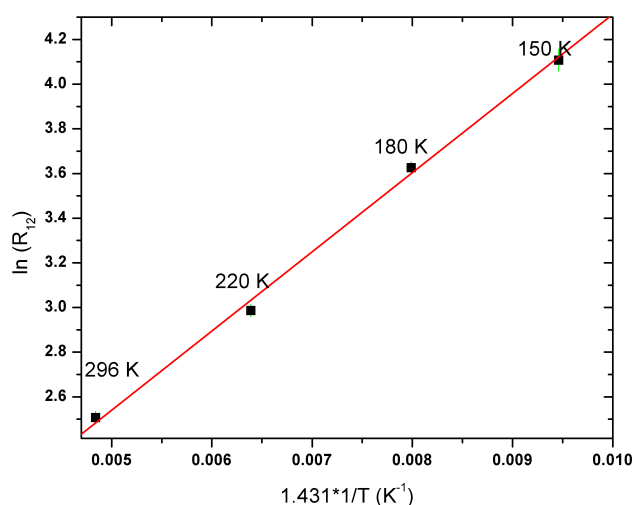


FIGURE 6.13 – Dépendance du rapport des intensités en fonction de la température.

L'inconvénient principal de notre méthode est qu'elle ne donne accès qu'à la différence des énergies des états de départ des deux transitions, alors que la méthode dite à deux températures et dans laquelle  $S(T)$  et  $S(T_0)$  sont explicitement obtenues pour chaque transition donne accès individuellement à l'énergie de départ de chaque transition.

Il nous faut donc compter sur les informations présentes dans les études précédentes en prenant soin de choisir dans la formation des paires de transitions, une transition déjà attribuée, dont on connaît donc l'état de départ.

Dans notre cas, pour étudier les 2 isotopologues de l'ammoniac, nous for-



#### 6.4. ENERGIE DE L'ÉTAT INITIAL DE CHAQUE TRANSITION POUR $^{14}\text{NH}_3$ 145

mons des paires de transitions dont au moins une composante est attribuée par Sung *et al* [39] pour l'isotopologue principal et par Lees *et al* [40, 41, 42] pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ ).

Comme nous l'avons présenté en introduction de ce manuscrit, nous n'avons pu traiter que l'étude de l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$ , sur la gamme complète 1520-1570 nm. Pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ , nous avons analysé les spectres à quatre températures dans la gamme 1520-1540 nm mais nous n'avons pas encore exploité ces informations.

Compte tenu du grand nombre de transitions mesurées et donc de paires potentielles à former, il nous a fallu développer une approche systématique pour l'application du procédé. Le premier choix possible est de former des paires à l'intérieur d'un même spectre ( $1.4 \text{ cm}^{-1}$ ) ou, moins contraignant, de définir un seuil sur l'écart spectral acceptable pour la paire dans le but de considérer des conditions expérimentales aussi voisines que possible. De fait, notre procédé expérimental consistant à enregistrer de manière automatique des plages de 5 nm, par pas de 0.2 nm, nous avons aussi utilisé un critère sur le temps absolu d'enregistrement d'un spectre, ce qui nous permet d'utiliser des transitions appartenant à des spectres successifs.

Pour une transition donnée (2), plusieurs paires (1, 2) peuvent être formées, la transition 1 étant choisie dans l'ensemble des transitions de référence, conduisant à plusieurs déterminations de l'énergie de l'état de départ  $E_2$ . Il est possible alors de faire la moyenne de ces valeurs ainsi que de déduire un écart type  $\delta E_2$ . Cette moyenne n'a de sens que si les valeurs déduites de  $E_2$  ne sont pas trop dispersées. Si ce n'est pas le cas il convient alors de s'interroger sur la liste des transitions de référence et peut-être de remettre en cause certaines d'entre elles.

Les premières tentatives d'application de notre méthode nous ont montré qu'il pouvait exister des erreurs dans les attributions de la liste Sung *et al*. C'est

pourquoi nous avons procédé à la vérification systématique de ces attributions en appliquant notre méthode dans un premier temps aux seules transitions attribuées. Nous allons considérer une transition (i) déjà attribuée comme inconnue et nous allons former les paires avec les paires des transitions attribuées voisines j. Chaque paire de transitions est analysée et donne la pente correspondant à la différence  $\Delta E_{ij} = E_i - E_j$  (équation 6.11). Par suite la valeur de l'énergie  $E_i$  de l'état de départ de transition i est calculée à partir de la formule suivante en utilisant la valeur de  $E_j^{ref}$  présentée dans la liste Sung *et al* :

$$E_i^{(jref)} = E_j^{(ref)} + \Delta E_{ij} \quad (6.12)$$

Une moyenne pondérée  $E_i^{(moy)} = \langle E_i^{(jref)} \rangle_{ref}$  sur toutes les valeurs disponibles de  $E_i^{(jref)}$  pour la transition i est effectuée. Le traitement statistique permet de déduire une incertitude  $\delta$  sur la valeur de  $E_i$  et l'attribution de la transition i est validée à savoir si  $E_i(ref)$  se situe dans la gamme  $[E_i^{(moy)} - \delta, E_i^{(moy)} + \delta]$ .

La figure 6.14 illustre l'étape de vérification des attributions, l'énergie de l'état de départ de chaque transition connue k est déduite par rapport à ces voisines par l'analyse du rapport de leur intensités (cercles pleins rouges). La ligne pointillée matérialise la paire considérée d'où est issue cette valeur. La valeur de l'énergie de l'état de départ issue de la liste de référence est représentée par un carré bleu. Sur cette figure, nous remarquons que l'attribution de la transition encadrée ( $6506.0748 \text{ cm}^{-1}$ ) est attribuée dans liste Sung *et al* à la transition de l'état fondamental  $J=7 \text{ K}=2 \text{ a}$  vers l'état de la bande de combinaison  $\nu_3 + 2\nu_4$ ,  $J=8$ ,  $K=1$ , *a* soit avec une énergie de l'état de départ de  $708.74671 \text{ cm}^{-1}$ . Nos déterminations expérimentales conduisent plutôt à une valeur de  $608 \text{ cm}^{-1}$  soit un écart de  $100 \text{ cm}^{-1}$ . Cette valeur suggère que l'état de départ de la transition soit plutôt le niveau  $J=9$ ,  $K=9$  ou le niveau  $J=8$ ,  $K=5$  situés

#### 6.4. ENERGIE DE L'ÉTAT INITIAL DE CHAQUE TRANSITION POUR $^{14}\text{NH}_3$ 147

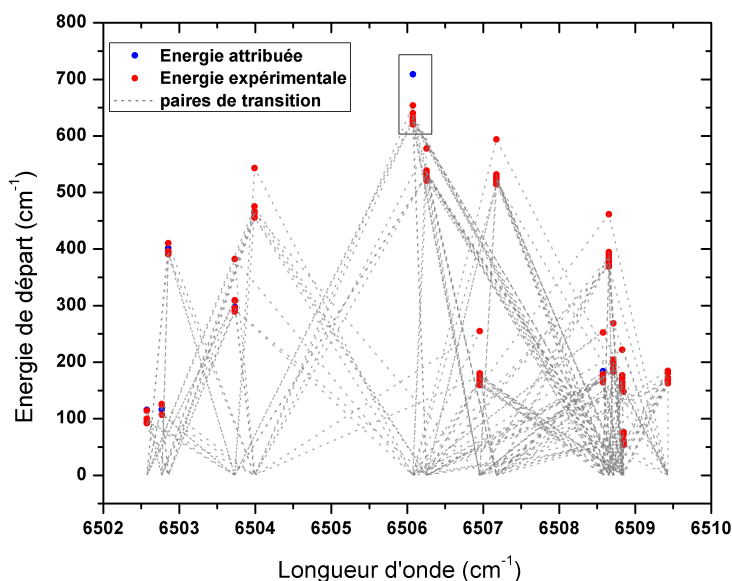


FIGURE 6.14 – Exemple de vérification des attributions de la liste SL . Une transition à  $6506.0748 \text{ cm}^{-1}$  est invalidée par notre procédé.

respectivement à  $595 \text{ cm}^{-1}$  et  $621 \text{ cm}^{-1}$  respectivement. Un désaccord s'observe aussi sur les autres transitions par l'apparition d'un point systématiquement décalé d'environ  $100 \text{ cm}^{-1}$  vers le haut lorsque la transition invalide est prise comme référence. Alors, il est clair que cette attribution est certainement fautive et ne peut être pas validée. Il convient de l'éliminer de la liste de référence pour que nos résultats redeviennent cohérents.

Durant cette première phase, sur les 329 transitions attribuées par Sung *et al*, nous avons retiré 130 transitions de la liste et nous en avons validé 199 cohérentes avec nos observations expérimentales. Dans une majorité des cas, il s'agit d'une réelle invalidation, mais il existe aussi une autre source possible de désaccord lorsque la transition impliquée est perturbée par une autre transition presque à la même énergie. L'analyse de la variation de la force de raie avec la température se trouve faussée alors que l'attribution initiale peut être correcte.

Après cette première phase de vérification des transitions de référence, nous pouvons passer à une seconde phase, où nous appliquons notre méthode aux transitions nouvelles ou non attribuées par Sung *et al.*

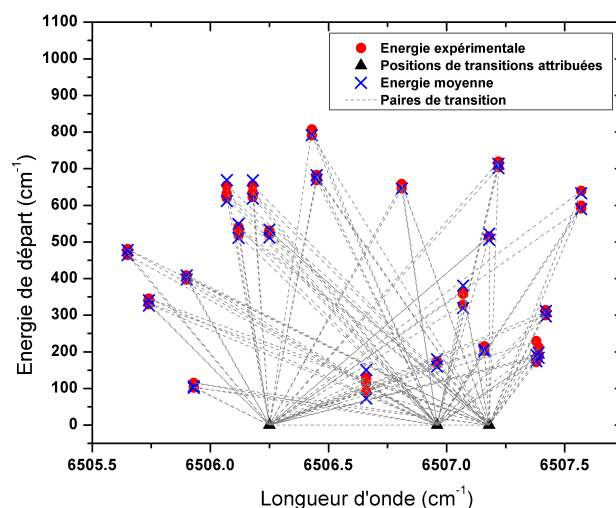


FIGURE 6.15 – Exemple de détermination de l'énergie des états initiaux de 17 transitions non attribuées à partir de 3 transitions déjà attribuées.

L'énergie de l'état de départ d'une transition inconnue est déterminée à partir des transitions attribuées voisines avec un critère de proximité que l'on peut varier entre  $0.5 \text{ cm}^{-1}$  et  $3 \text{ cm}^{-1}$ . Un exemple de ce procédé est illustré sur la figure 6.15. Pour une transition inconnu  $k$ , plusieurs paires peuvent être formées avec des transitions connues  $i$ .

Cette transition est reliée avec plusieurs positions des transitions attribuées (triangles noirs), les cercles rouges représentent les énergies de l'état de départ déduites de la paire inconnue-connue (visualisation par le trait pointillé gris). La moyenne et l'écart-type des résultats est ensuite considérée (croix bleue). Les résultats sur une gamme d'énergie plus large [ $6490\text{-}6510 \text{ cm}^{-1}$ ] sont présentés sur la figure 6.16 avec ses incertitudes (croix noirs), pour laquelle seules ces

#### 6.4. ENERGIE DE L'ÉTAT INITIAL DE CHAQUE TRANSITION POUR $^{14}\text{NH}_3$

valeurs ainsi que les valeurs des transitions attribuées (carrés bleus) ont été conservées pour une plus grande clarté. Cet exemple couvre une gamme de  $20\text{ cm}^{-1}$  parmi les  $209\text{ cm}^{-1}$  étudiés, en remarquant que nos résultats sont cohérents avec les attributions (cercles rouges proches des cercles bleus). On dénombre 132 valeurs nouvelles de l'énergie de l'état de départ parmi les 156 étudiées.

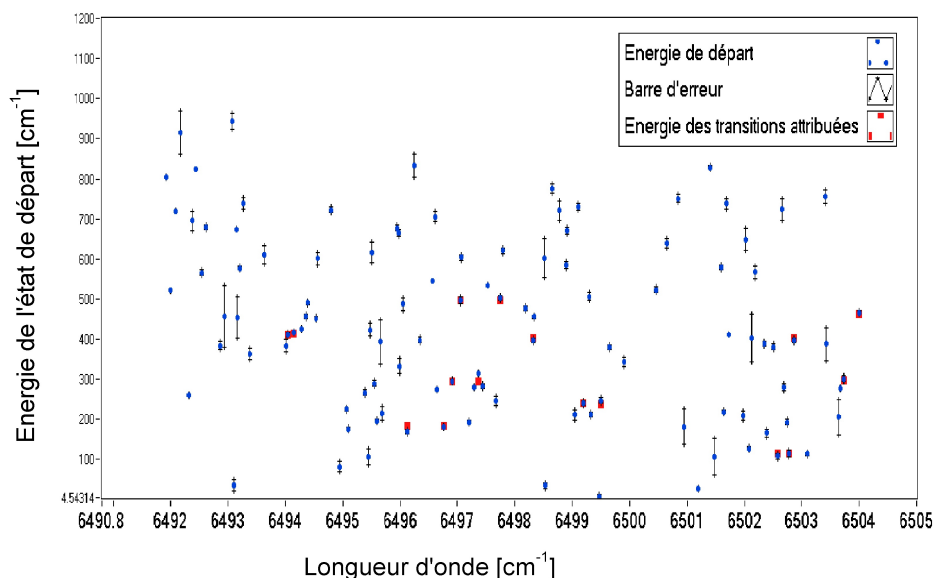


FIGURE 6.16 – Résultats obtenus sur une gamme à  $20\text{ cm}^{-1}$  entre  $6490$  et  $6510\text{ cm}^{-1}$ . Les valeurs des énergies des états de départ des transitions expérimentales avec les erreurs sur celles-ci sont présentées ainsi que les valeurs des énergies des transitions déjà attribuées.

Parmi les 2195 transitions observées dans la gamme  $1520$  à  $1570\text{ nm}$  appartenant à  $^{14}\text{NH}_3$ , nous avons déterminé une valeur d'énergie de l'état de départ pour 1697 transitions. Cette information n'a pu être obtenue pour 498 transitions, observées à  $T=296\text{ K}$  seulement. Un exemple du fichier de résultat est présenté dans le tableau 6.11.

Un travail similaire est en cours sur l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ , dont les spectres

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6373.4617	6373.4589	1.0854E-24	-22.9631	19.3152	0
6373.4971	6373.4996	3.1994E-24	924.869	19.4663	0
6373.6811	6373.6811	5.7214E-23	146.5025	7.121	0
6374.0432	6374.0439	1.4591E-23	1105.349	7.9574	0
6374.2469	6374.2478	1.3352E-24	708.1234	19.3485	0
6374.4996	6374.5005	1.2594E-24	377.5082	5.0123	0
6374.7700	6374.7731	2.8439E-24	1101.4751	19.5133	0
6374.8624	6374.8623	1.7685E-23	743.3457	2.243	759.0024
6375.0229	6375.0245	9.2607E-24	272.1746	7.5195	0
6375.0414	6375.04	4.364E-24	1099.6026	16.7911	0
6375.2262	6375.2251	6.113E-24	1042.8246	16.7202	0
6375.2603	6375.2583	1.8628E-23	772.4715	0.9988	758.3853
...	...	...	...	...	...
6578.0609	6578.0575	1.0019E-23	422.6117	14.8541	0
6578.2616	6578.261	4.7539E-24	0.9408	12.5223	
6578.4130	6578.4112	4.4268E-23	715.5055	38.3612	0
6578.4456	6578.4453	7.8164E-23	373.049	7.7875	0
6578.5558	6578.5553	8.0765E-23	406.5013	13.6874	0
6578.6095	6578.6089	6.2872E-24	8.856	3.8601	0
6578.6324	6578.6324	2.9135E-23	563.8088	4.1706	0
6578.7484	6578.7484	1.2318E-22	197.6515	4.1736	183.8291
6578.8754	6578.8752	1.9576E-23	342.0763	6.8812	0

TABLE 6.11 – Extraits du fichier donnant les informations obtenues sur les valeurs de l'état initial des transitions pour l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$ . Lorsque la transition est attribuée par Sung *et al* figure l'énergie de l'état initial  $J, K$  *a/s* correspondant.

ont été enregistrés dans la gamme 1520-1540 nm à quatre températures de 220 K, 180 K et 150 K.

## 6.5 Comparaison de nos résultats avec des calculs variationnels

### 6.5.1 Isotopologue $^{14}\text{NH}_3$

Dans ce travail, nous présentons une liste de transitions pour l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$  avec une information importante sur la position de l'état de départ pour 1697 d'entre elles. Si la précision de l'information le permettait, nous pourrions attribuer cet état de départ de manière sûre, en se référant aux énergies possibles pour les niveaux  $J$ ,  $K$ ,  $a$  ou  $s$  de l'état fondamental de vibration. Pour des valeurs élevées, il est aussi possible que l'état de départ soit le premier état excité vibrationnellement du mode d'inversion  $\nu_2$  situé à  $900\text{ cm}^{-1}$ . Notre situation pour l'ammoniac est moins favorable que pour le méthane, toupie sphérique pour laquelle les niveaux de rotation de l'état fondamental sont suffisamment éloignés pour permettre de déduire le nombre de rotation  $J$  à partir de l'énergie  $E_{\text{depart}}$ . Pour l'ammoniac, toupie symétrique, la dépendance en  $J$  et  $K$  complique le travail et l'information sur l'état de départ permet de proposer 2 voir 3 niveaux  $J$ ,  $K$  possibles.

Il est alors possible d'émettre certaines hypothèses que l'on peut tenter de vérifier en utilisant par exemple les différences d'énergies dans l'état fondamental et de trouver une autre transition aboutissant au même état final (Ground State Combination Difference).

Une autre approche est de considérer les calculs théoriques disponibles. En effet, des calculs ab initio de la surface de potentiel couplés à des calculs va-

riationnels permettent de proposer une liste des transitions et de leur force de raies dans une gamme donnée [33]. Ces données sont disponibles via une base de données appelée EXOMOL accessible librement. La chaîne de programmes permettant ce calcul s'appelle TROVE et la liste BYTe du nom de leur concepteurs (Barber, Yurchenko, Tennyson). Nous avons juste commencé à comparer nos résultats expérimentaux avec cette liste théorique avec l'idée de valider une attribution en utilisant bien sûr la position et la force de raie mais aussi en utilisant l'information que constitue l'énergie de l'état initial de la transition. Cet axe est très prometteur et commence à porter ses fruits dans une étude que le groupe a mené dans une autre gamme d'énergie (4275-4356  $\text{cm}^{-1}$ ).

### 6.5.2 Isotopologue $^{15}\text{NH}_3$

Pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$ , nous avons construit une liste de transitions à  $T=296$  K. Les spectres à différentes températures ont été enregistrés et analysés pour la gamme 1520-1540 nm. Mais nous n'avons pu terminer l'analyse et déduire les énergies des états de départ.

Cependant nous pouvons présenter ici une première comparaison avec les calculs variationnels. Ceux-ci sont disponibles récemment pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  [50].

La figure 6.17 montre une comparaison globale de la zone 1520-1570 nm où il apparaît un accord tout à fait satisfaisant entre le spectre expérimental et le spectre calculé. Cependant, cet accord devient beaucoup moins satisfaisant lorsque l'on considère le spectre de plus près en particulier si l'on cherche un accord raie par raie. Deux exemples sont présentés sur les figures 6.18 et 6.19. Certaines ressemblances sont cependant présentes par la présence de paquets de transitions communes. Nous avons choisi de présenter cette gamme, car quatre transitions y ont été attribuées par Lees *et al* [40, 41, 42]. Ainsi, il est aisé de



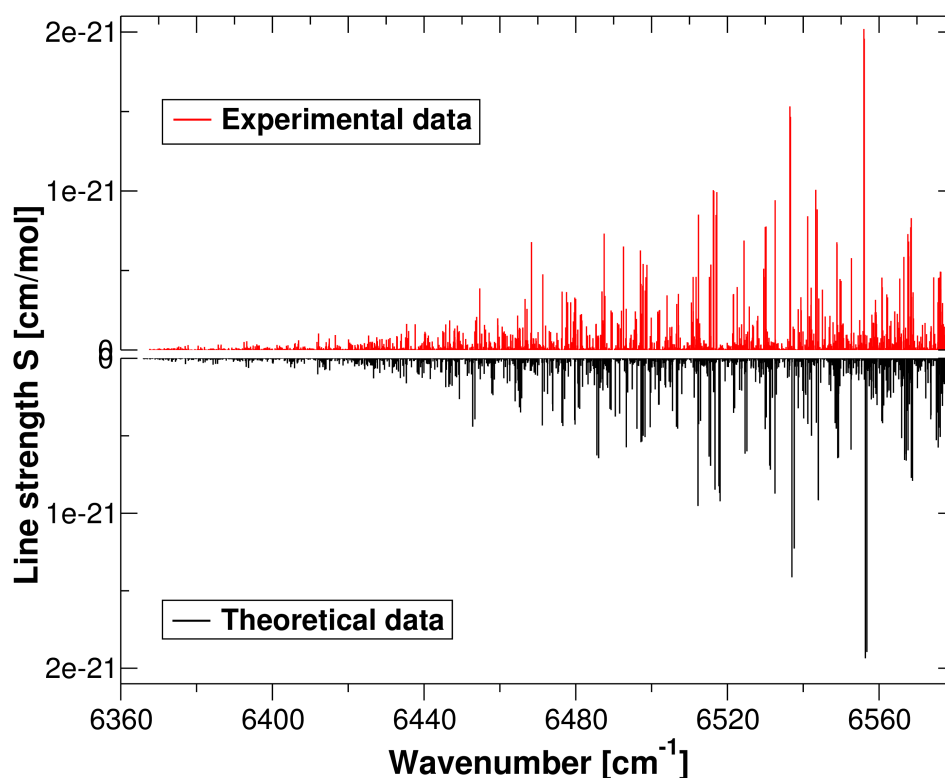


FIGURE 6.17 – L'ensemble de nos spectres expérimentaux (tracé rouge) de  $^{15}\text{NH}_3$  dans la gamme  $6367\text{-}6578\text{ cm}^{-1}$  en fonction de nombre d'ondes comparés au spectre calculé (trace noire) en position miroir.

chercher dans la liste théorique, quels sont les correspondants de ces transitions. C'est ce qu'illustre les flèches sur la figure, une des transitions (?) n'a pas sa correspondance.

Ceci montre la difficulté d'identifier les transitions et suggère que la donnée de l'énergie de l'état de départ sera une précieuse aide pour poursuivre les identifications. Le travail est loin d'être terminé.

## 6.6 Perspectives

Dans ce travail, nous avons obtenu des informations nouvelles qui vont permettre de poursuivre l'identification des transitions dans la gamme  $1520\text{-}1570$

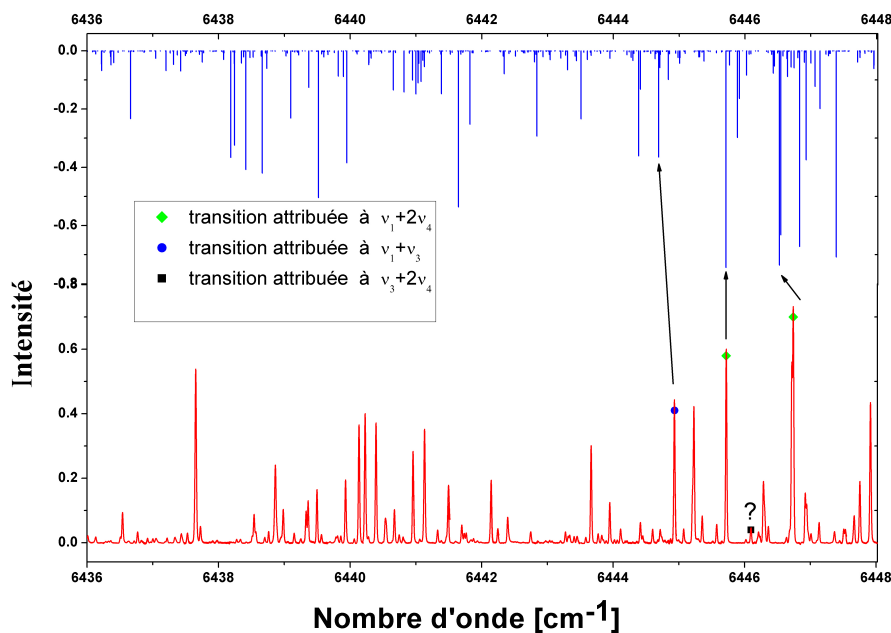


FIGURE 6.18 – Exemple de comparaison entre nos spectres (tracé rouge) avec les spectres théoriques (tracé bleus) dans la gamme 6436-6448  $\text{cm}^{-1}$ . Dans cette gamme quatre transitions sont attribuées par Lees *et al* [40, 41, 42] : deux transitions à l'état vibrationnel  $\nu_1+2\nu_4$  (losange vert), une à  $\nu_1+\nu_3$  (cercle bleu) et une à  $\nu_3+2\nu_4$  (carré noir). Chaque transition attribuée est connectée (flèche noir) à sa correspondante dans le spectre théorique ( batons bleus). La transition attribuée à  $\nu_3+2\nu_4$  ne possède pas de correspondance dans le spectre simulé, cette transition est représentée par un point d'interrogation (?).

nm. La gamme accessible par notre système laser va nous permettre de compléter l'étude dans la gamme 1470-1520 nm. Notons que le travail d'obtention de l'énergie de l'état initial a déjà été réalisé dans notre groupe dans la gamme 1470-1510 nm [74]. Une première identification d'une composante d'une nouvelle bande jamais attribuée y est proposée ( transition appartenant à la bande  $\nu_2 + 3\nu_4$  issu du niveau fondamental rotationnel  $J = 0, K = 0$ ).

Notre objectif final est bien sûr l'identification de toutes les transitions observées dans notre gamme spectrale pour les deux isotopologues de la molécule d'ammoniac. Pour cela nous allons continuer à collecter le maximum d'informa-

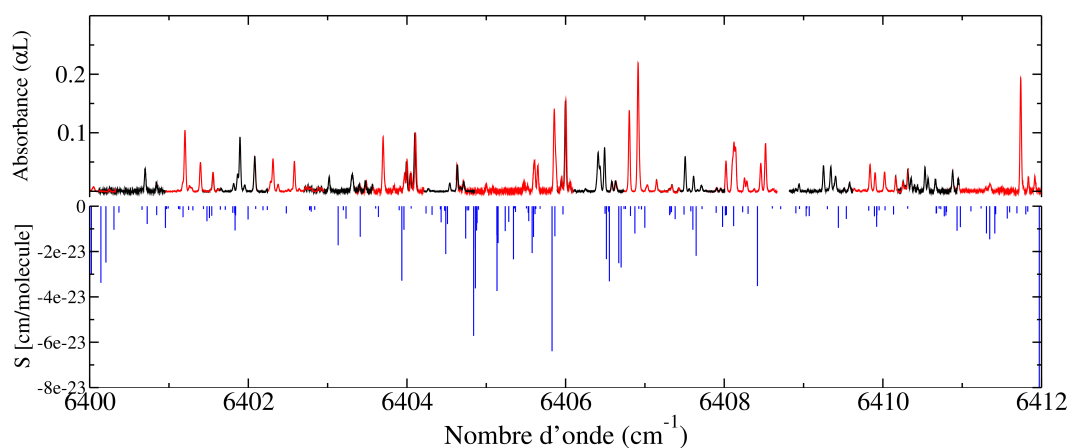


FIGURE 6.19 – Autre exemple de comparaison entre nos spectres et le spectre théorique (tracé bleu) dans la gamme 6400-6412  $\text{cm}^{-1}$ . L'alternance noir /rouge du spectre expérimental a pour but de montrer que celui-ci est le recollement de plusieurs spectres de 1.2  $\text{cm}^{-1}$  environ.

tions. L'analyse de l'évolution des spectres en fonction de la température sera analysée pour l'isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  dans la gamme 1520 à 1570 nm.

Les spectres ont déjà été enregistrés dans la gamme 1470-1520 nm pour les deux isotopologues pour quatre températures. L'analyse a été faite pour  $^{14}\text{NH}_3$  mais reste à faire pour  $^{15}\text{NH}_3$ .

Le travail d'identification peut maintenant être commencé avec comme fils directeurs, la méthode GSCD, l'information sur l'état initial des transitions et la comparaison aux spectres calculés [33, 50]. Un premier travail a été effectué dans une zone plus basse en énergie [4275-4357 $\text{cm}^{-1}$ ] où le spectre est moins dense et moins riche en interactions.

Mon travail est une pierre pour parvenir à construire l'édifice qu'est l'analyse complète de la bande infrarouge de l'ammoniac à 1.5  $\mu\text{m}$ .



# Etude théorique d'un dimère alcalin

## Rb<sub>2</sub>

Actuellement, les récentes avancées dans le domaine de spectroscopie de haute résolution dans des environnements froids, ont mis en évidence des perturbations dues à l'interaction spin-orbite dans des spectres rovibrationnels des petites molécules diatomiques comme les dimères alcalins [75] ou les hydrures d'alcalin, et ont ainsi permis la caractérisation de quelques états triplets difficilement accessibles [76]. Dans le cas des molécules homonucléaires formées de noyaux identiques, les mécanismes de la modification interne du spin nucléaire appelée la conversion du spin à l'intérieur de la molécule doivent aussi être pris en compte. L'étude de l'ensemble de ces effets de spin (électronique et nucléaire) a non seulement pour objectif l'obtention d'informations très précises sur la spectroscopie de ces molécules mais aussi de participer à l'élaboration de scénarii possibles sur la formation de petites molécules dans le milieu interstellaire. Dans ce travail, nous nous intéressons à la prédiction de la structure électronique de hautes énergies et de l'état fondamental de la molécule Rb<sub>2</sub>. Ceci a pour but de mettre en place les éléments théoriques nécessaires à l'observation des spectres d'émission et à l'interprétation de la conversion de spin nucléaire de cette molécule dans la structure hyperfine.

Des bas états excités de dimères alcalins ont été utilisés comme intermédiaire pour la production des molécules ultrafroides telles que RbCs[77], LiCs[78], KRb[79], NaCs[80], Rb<sub>2</sub>[81] et Cs<sub>2</sub>[82]. Plusieurs efforts ont été accomplis pour obtenir et analyser le spectre de dimères alcalins. Néanmoins, les interactions spin-orbite entre les états comme le cas de Rb<sub>2</sub> rendent l'interprétation des raies compliquée. Normalement pour Rb<sub>2</sub>, il s'agit d'une molécule lourde classée dans le cas c de Hund, c'est pourquoi plusieurs études ont été réalisées pour caractériser l'effet du spin-orbite qui est très important [83].

Récemment, les courbes d'énergie potentielle et les moments de transition dipolaire sont calculés pour les états  $\Omega_{gu}^{+/-}$  en fonction de la distance internucléaire R [84]. Suite au travail effectué par allouche *et al* [84], qui a pu prédire un grand ensemble des états électroniques, on a repris le calcul par les méthodes ab initio pour pouvoir étendre les informations sur les structures fines et hyperfines afin de caractériser l'effet du spin électronique et le spin du noyau.

### A.0.1 Cadre général

#### Approximation de Born et Oppenheimer

L'approximation de Born et Oppenheimer (B.O) est l'approximation la plus citée en Physique Moléculaire. Cela revient au fait que même pour la molécule la plus simple, qui ne contient que deux atomes, l'équation de Schrödinger n'a pas de solution exacte. Alors, cette approximation est basée sur la différence de masses significatives entre les électrons et les nucléons. Ainsi, au lieu de résoudre l'équation de Schrödinger pour une collection d'électrons et de nucléons mobiles, on considère les noyaux comme étant fixes et l'équation sera résolue pour la partie électronique :

$$H_{el}\psi_{el} = E_{el}\psi_{el} \quad (\text{A.1})$$

L'hamiltonien peut s'écrire :

$$H_{el} = T_e + V_{eN} + V_{NN} + V_{ee} \quad (\text{A.2})$$

Où  $T_e$  est l'énergie cinétique électronique,  $V_{eN}$  l'interaction électron-noyau,  $V_{NN}$  l'interaction noyau-noyau,  $V_{ee}$  l'interaction électron-électron. En résolvant l'équation A.1, on obtient l'énergie électronique  $E_{el}$  correspondante à la fonction d'onde  $\psi_{el}$  [85]. L'hamiltonien électronique de l'approximation de BO pour une molécule contenant n électrons, ayant une masse  $m_e$  et N noyaux est défini comme :

$$H_{el}^{BO} = - \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2 \Delta^2}{8\pi^2 m_e} - \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{i\alpha}} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (\text{A.3})$$

Le premier terme de l'équation A.3 représente l'énergie cinétique des électrons, le deuxième terme montre l'interaction noyau-électron et le dernier terme l'interaction électron-électron.  $r_{i\alpha}$  est la distance entre l'électron i et le noyau  $\alpha$ ,  $r_{ij}$  est la distance entre les électrons i et j.

Dans le cas d'une molécule diatomique, l'énergie électronique ne dépend que de la distance internucléaire R. L'évolution des énergies en fonction de la distance internucléaire est illustrée dans des courbes d'énergie potentielle (CEPs), FigureA.1.

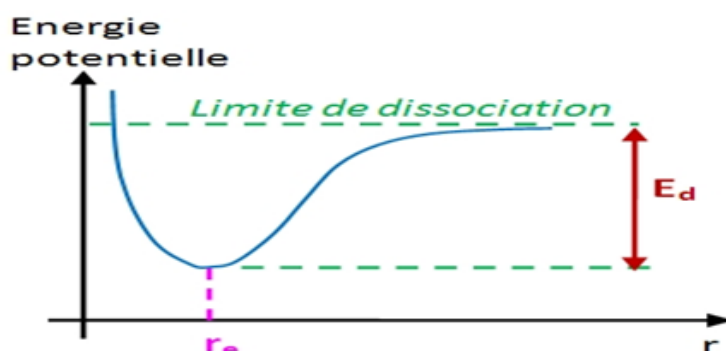


FIGURE A.1 – Courbe d'énergie potentielle d'une molécule diatomique AB, où  $E_d = D_e$  est l'énergie de dissociation.

## A.0.2 Méthodes utilisées pour les calculs d'énergies potentielles

Plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour traiter ce sujet. On peut les classer en deux catégories principales : les méthodes dites de potentiels effectifs et les méthodes ab initio à tous électrons.

La méthode de potentiel effectif vise à représenter le potentiel d'interaction coulombienne du noyau et les effets des électrons les plus internes dits "électrons de cœur", par des potentiels spécifiques appelés potentiels effectifs. Parmi ces méthodes, on distingue la méthode de pseudo-potentiel et la méthode de potentiel modèle.

Les méthodes ab-initio issues de la chimie quantique, sont basées sur des calculs multi-configurations où tous les électrons sont en général considérés. Il existe plusieurs types de méthodes qui sont utilisés pour calculer l'énergie potentielle et la fonction d'onde d'un système moléculaire.

### Méthode Hartre-Fock

La méthode ab-initio la plus simple de calcul de structure électronique est la méthode de Hartree-Fock. Cette méthode consiste à définir la fonction d'onde électronique  $\psi_e$  d'un système comme un produit de spin-orbitales moléculaires  $\phi_i(r_i, \xi)$ . Ce dernier est un produit d'une fonction d'onde spatiale  $\psi_i(r_i)$  et d'une fonction de spin  $\alpha(\xi)$  et  $\beta(\xi)$ . En assurant l'indiscernabilité des électrons et l'antisymétrisation de la fonction d'onde électronique selon le principe de Pauli, Hartree-Fock et Slater ont proposé une fonction d'onde sous forme de détermi-

$$\text{nant du Slater : } \psi_e = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_2(1) & \dots & \phi_N(1) \\ \phi_1(2) & \phi_2(2) & \dots & \phi_N(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_1(N) & \phi_2(N) & \dots & \phi_N(N) \end{vmatrix}$$

Avec  $\frac{1}{\sqrt{N!}}$  est le facteur de normalisation. L'énergie électronique d'un système à  $n$  électrons est associée au déterminant de Slater et peut être calculée par la méthode HF d'une manière approchée qui tend vers une valeur limite appelée limite HF. Alors cette énergie s'écrit :

$$E = \sum_{i=1}^n I_i + \sum_{j>i}^n (J_{ij} - K_{ij}) \quad (\text{A.4})$$

Où  $I_i$  est l'intégrale monoélectronique,  $J_{ij}$  est l'intégrale biélectronique coulombienne et  $K_{ij}$  est l'intégrale biélectronique d'échange.

### Fonctions de bases atomiques

Roothan, dans son formalisme standard [?], a développé linéairement les orbitales moléculaires  $\phi_i$  sur une base de fonctions atomiques  $X_p$  tel que :

$$\phi_i = \sum_{p=1}^n C_{ip} X_p \quad (\text{A.5})$$

$i$  est un entier ;  $p$  est le nombre des fonctions de bases atomiques,  $C_{ip}$  sont les coefficients d'expansion des orbitales moléculaires développées sur les fonctions des bases atomiques  $X_p$ .

En utilisant l'approximation LCAO-MO (Linear Combination of Atomic Orbitals-Molecular Orbitals), et pour résoudre les équations de Hartree-Fock, Roothaan et Hall ont pu transformer les équations intégral-différentielles à un système d'équation algébrique. Ces équations peuvent être résolues en utilisant la méthode matricielle habituelle de résolution des problèmes aux valeurs propres.

On peut utiliser deux types de fonction de bases atomiques pour exprimer les orbitales moléculaires : Il s'agit des fonctions de type de Slater, STO (Slater Type Orbital) et les fonctions Gaussiennes appelées GTO ( Gaussian Type Orbital).

### Méthode de Pseudo-potentiel

Cette méthode vise à substituer le potentiel d'interaction coulombienne du noyau et les effets des électrons dits "de cœur", considérée comme un grand intérêt dans le calcul théorique de la structure électronique de la matière.

### Méthodes de Post Hartree-Fock

Des nombreux types de calculs sont connus sous le nom de méthodes Post Hartree-Fock. Chaque méthode consiste à faire tout d'abord un calcul Hartree-



Fock (HF) et ensuite à effectuer une correction en ajoutant l'effet de la répulsion électron-électron, aussi connue par la corrélation électronique. On peut distinguer en gros deux types de méthodes : La méthode d'interaction de configuration (CI) et méthode MCSCF( multi-configuartion self consistent field).

La méthode CI consiste à optimiser une fonction d'onde formée d'une combinaison linéaire de plusieurs déterminants de Slater. La fonction d'onde multi-électronique est prise sous la forme d'une combinaison linéaire de déterminants en incluant la configuration de référence et d'autres éléments :

$$\psi_e = \sum c_i \psi_i = C_0 \psi_0 + \sum_{ar} C_{ar} \psi_{ar} + \sum_{(as)(rs)} C_{rs}^{ab} \psi_{rs}^{ab} \quad (\text{A.6})$$

Où (ab) et (rs) représentent des ensembles de spin-orbitales respectivement occupées et virtuelles inoccupées initialement (vacantes) [22]. Les coefficients  $C_i$  peuvent être déterminés par la méthode variationnelle, ils sont la solution d'un système linéaire homogène dont le déterminant est :

$$\text{Det} = | \langle \psi_i | H_{ij} | \psi_j \rangle - E \delta_{ij} | = 0 \quad (\text{A.7})$$

Ceci est réalisé en prenant en compte la spécification de l'occupation des orbitales et les interactions de différentes configurations électroniques. En raison des temps des calculs nécessaires et du matériel requis pour des calculs CI, cette méthode est utile seulement pour des systèmes petits. Il existe une méthode CI complète (Full CI) où toutes les configurations possibles dans l'expression de la fonction d'onde son incluses. Parfois on peut se limiter au calcul à simple excitation ( déplacement à un seul électron) cela connu par CIS . De plus des excitations doubles sont possibles ( déplacements à de deux électrons vers des orbitales virtuelles). La précision et la complexité du calcul augmentent avec le degré d'excitation considéré. L'énergie est obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger en utilisant la méthode (Full CI), en incluant toutes les configurations et des excitations possibles avec une base finie.

Pour des systèmes plus compliqués, on peut avoir recours à des méthodes d'interaction de configuration (CI) tronquées.

La méthode MCSCF conduit à une fonction d'onde qui prend en compte la corrélation électronique, elle englobe un calcul SCF et un calcul CI en une seule étape. Ceci est lié aux systèmes multi-configurations qui sont mieux traités par la méthode CI que par la seule étape SCF.

## A.1 Energie potentielle de Rb<sub>2</sub>

La configuration électronique de chaque atome de Rb<sub>2</sub> s'écrit :  ${}_{37}\text{Rb} : 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 5s^1$ .

Nous avons choisi dans notre calcul la base Ecp28 [86] dans le but de déterminer les énergies potentielles à plusieurs distances internucléaires pour l'état fondamental, en utilisant le progiciel Molpro [87]. Dans notre calcul, 18 électrons libres sont considérés dans le calcul. Ce choix de base était un essai pour atteindre la même qualité des résultats obtenus par Allouche *et al* [84] qui ont pris que deux électrons libres, ainsi on pourra étendre le domaine du calcul. Cet essai était pour vérifier si le nombre élevé des électrons de valence peut influencer le calcul surtout les constantes spectroscopiques de l'état fondamental. Les orbitales actives dans notre calcul sont  $(4,2,2,0)$ ,  $4\sigma$ , et  $2\pi$  dans la symétrie  $C_{2v}$ . Le calcul de l'état fondamental et du premier état excité a été effectué dans un intervalle de distance internucléaire de 4,0 Å à 5,4 Å. Les résultats obtenus sur l'état fondamental qui est de type  $(1)^1 \Sigma_g^+$  et le premier état excité  $(2)^1 \Sigma_g^+$  sont représentés dans le tableau A.1. La comparaison avec l'expérience [88] et avec les résultats donnés par Allouche *et al* [84], montre un bon accord pour l'état fondamental pour la majorité des constantes spectroscopiques, mais un pourcentage d'erreur assez important pour la distance internucléaire à l'équilibre pour le  $(2)^1 \Sigma_g^+$ . Pour améliorer les résultats du premier état on a eu recours à gelé un certain nombre des électrons. Ceci a pu améliorer légèrement les constantes spectroscopiques mais les valeurs de l'état fondamental ont perdu certaines précisions.

Les résultats préliminaires obtenus par notre calcul ne semblent pas très satisfaisants pour les états excités. On vise actuellement à utiliser la base atomique proposée par Allouche *et al* en travaillant avec une marge des électrons de valence plus large.

	Te (cm <sup>-1</sup> )	Re ( Å)	$\omega_e$ (cm <sup>-1</sup> )	Be(cm <sup>-1</sup> )
(1) <sup>1</sup> $\Sigma_g^+$	0 <sup>a</sup>	4.22 <sup>a</sup>	56.7 <sup>a</sup>	0.02223 <sup>a</sup>
	0 <sup>b</sup>	4.21 <sup>b</sup>	58.4 <sup>b</sup>	0.22226 <sup>b</sup>
	0 <sup>c</sup>	4.21 <sup>c</sup>	58 <sup>c</sup>	0.02236 <sup>c</sup>
(2) <sup>1</sup> $\Sigma_g^+$	14103 <sup>a</sup>	4.88 <sup>a</sup>	42.1 <sup>a</sup>	
	13559 <sup>b</sup>	5.38 <sup>b</sup>	31.2 <sup>b</sup>	
	13602 <sup>c</sup>	5.44 <sup>c</sup>	32 <sup>c</sup>	

TABLE A.1 – Les résultats obtenus pour l'état fondamental (1)<sup>1</sup>  $\Sigma_g^+$  et le premier excité (2)<sup>1</sup>  $\Sigma_g^+$ . Nos résultats (a) sont comparés par rapport aux résultats théoriques [84](b) et expérimentaux [88](c). Te l'énergie de transition, Re distance internucléaire à l'équilibre,  $\omega_e$  la fréquence harmonique et Be la constante de rotation.



# Bibliographie

- [1] G. P. Brasseur and S. Solomon, *Aeronomy of the middle atmosphere : chemistry and physics of the stratosphere and mesosphere*, vol. 32. Springer Science & Business Media, 2006.
- [2] A. Salhi, D. Barat, D. Romanini, Y. Rouillard, A. Ouvrard, R. Werner, J. Seufert, J. Koeth, A. Vicet, and A. Garnache, "Single-frequency sb-based distributed-feedback lasers emitting at 2.3  $\mu\text{m}$  above room temperature for application in tunable diode laser absorption spectroscopy," *Applied optics*, vol. 45, no. 20, pp. 4957–4965, 2006.
- [3] H. Soda, K.-i. Iga, C. Kitahara, and Y. Suematsu, "Gainasp/inp surface emitting injection lasers," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 18, no. 12, p. 2329, 1979.
- [4] J. Sandusky and S. Brueck, "A cw external-cavity surface-emitting laser," *Photonics Technology Letters, IEEE*, vol. 8, no. 3, pp. 313–315, 1996.
- [5] A. Garnache, A. Ouvrard, L. Cerutti, D. Barat, A. Vicet, F. Genty, Y. Rouillard, D. Romanini, and E. Cerda-Mendez, "2-2.7  $\mu\text{m}$  single frequency tunable sb-based lasers operating in cw at rt : microcavity and external cavity vcsels, dfb," in *Photonics Europe*, pp. 61840N–61840N, International Society for Optics and Photonics, 2006.
- [6] P. Cacciani, J. Cosléou, M. Khelkhal, M. Tudorie, C. Puzzarini, and P. Pracna, "Nuclear spin conversion in  $\text{NH}_3$ ," *Physical Review A*, vol. 80, no. 4, p. 042507, 2009.
- [7] E. Bryant, *Climate process and change*. Cambridge University Press, 1997.
- [8] J. W. Robinson, *Atomic spectroscopy*. CRC Press, 1996.
- [9] F. M. Mirabella, *Modern techniques in applied molecular spectroscopy*, vol. 14. John Wiley & Sons, 1998.
- [10] R. D. Cowan, *The theory of atomic structure and spectra*, vol. 3. Univ of California Press, 1981.
- [11] L. Rothman, I. Gordon, Y. Babikov, A. Barbe, D. Chris Benner, P. Bernath, M. Birk, L. Bizzocchi, V. Boudon, L. Brown, *et al.*, "The hitran2012 molecular

- spectroscopic database,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 130, pp. 4–50, 2013.
- [12] N. Jacquinet-Husson, N. Scott, A. Chedin, B. Bonnet, A. Barbe, V. G. Tyuterev, J. Champion, M. Winnewisser, L. Brown, R. Gamache, *et al.*, “The geisa system in 1996 : Towards an operational tool for the second generation vertical sounders radiance simulation,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 59, no. 3, pp. 511–527, 1998.
- [13] D. Pavia, G. Lampman, G. Kriz, and J. Vyvyan, *Introduction to spectroscopy*. Cengage Learning, 2008.
- [14] M. Low, “Fourier transform spectroscopy,” *Naturwissenschaften*, vol. 57, no. 6, pp. 280–287, 1970.
- [15] B. C. Smith, *Fundamentals of Fourier transform infrared spectroscopy*. CRC press, 2011.
- [16] K. Herrmann, “Tunable diode laser spectroscopy,”
- [17] W. Demtröder, *Laser Spectroscopy : Vol. 2 : Experimental Techniques*, vol. 2. Springer, 2008.
- [18] D. Romanini, A. Kachanov, and F. Stoeckel, “Diode laser cavity ring down spectroscopy,” *Chemical Physics Letters*, vol. 270, no. 5, pp. 538–545, 1997.
- [19] M. P. W. Atkins, *Éléments de chimie physique*. De Boeck Supérieur, 1998.
- [20] E. B. Wilson, J. C. Decius, and P. C. Cross, *Molecular vibrations : the theory of infrared and Raman vibrational spectra*. Courier Corporation, 2012.
- [21] J. E. Wollrab, *Rotational Spectra and Molecular Structure : Physical Chemistry : a Series of Monographs*. Academic Press, 2013.
- [22] D. C. Harris and M. D. Bertolucci, *Symmetry and spectroscopy : an introduction to vibrational and electronic spectroscopy*. Courier Corporation, 1978.
- [23] C. Piron, *Mécanique quantique : Bases et applications*. PPUR presses polytechniques, 1998.
- [24] É. Biémont, *Spectroscopie moléculaire : structures moléculaires et analyse spectrale*. De Boeck Supérieur, 2008.
- [25] N. L. Alpert, W. E. Keiser, and H. A. Szymanski, *IR : theory and practice of infrared spectroscopy*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [26] P. R. Bunker and P. Jensen, *Molecular symmetry and spectroscopy*, vol. 2. NRC Research Press, 1998.
- [27] D. Renard and L. Schwartz, *Groupes et représentations*. Éd. de l’Ecole polytechnique, 2010.
- [28] D. KAO, “Representations of the symmetric group,” 2010.

- 
- [29] D. E. Sands, *Introduction to crystallography*. Courier Corporation, 2012.
- [30] S. F. Kettle, *Symmetry and structure : readable group theory for chemists*. John Wiley & Sons, 2008.
- [31] J. E. Huheey, E. A. Keiter, and R. L. Keiter, *Chimie inorganique*. De Boeck Supérieur, 2000.
- [32] W. S. Benedict and K. Plyler, "Vibration-rotation bands of ammonia : 1 1. the combination bands 112+(111, 113),"
- [33] S. Yurchenko, R. Barber, and J. Tennyson, "A variationally computed line list for hot NH<sub>3</sub>," *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 413, no. 3, pp. 1828–1834, 2011.
- [34] I. Kleiner, G. Tarrago, C. Cottaz, L. Sagui, L. R. Brown, R. Poynter, H. Pickett, P. Chen, J. Pearson, R. L. Sams, *et al.*, "NH<sub>3</sub> and PH<sub>3</sub> line parameters : the 2000 hitran update and new results," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 82, no. 1, pp. 293–312, 2003.
- [35] L. Lundsbergnielsen, F. Hegelund, and F. Nicolaisen, "Analysis of the high-resolution spectrum of ammonia (<sup>14</sup>NH<sub>3</sub> in the near-infrared region, 6400–6900 cm<sup>-1</sup>," *Journal of molecular spectroscopy*, vol. 162, no. 1, pp. 230–245, 1993.
- [36] Š. Urban, R. D'cunha, K. N. Rao, and D. Papoušek, "The  $\delta k=\pm 2$ " forbidden band" and inversion-rotation energy levels of ammonia," *Canadian journal of physics*, vol. 62, no. 12, pp. 1775–1791, 1984.
- [37] G. Berden, R. Peeters, and G. Meijer, "Cavity-enhanced absorption spectroscopy of the 1.5  $\mu\text{m}$  band system of jet-cooled ammonia," *Chemical physics letters*, vol. 307, no. 3, pp. 131–138, 1999.
- [38] M. J. Down, C. Hill, S. N. Yurchenko, J. Tennyson, L. R. Brown, and I. Kleiner, "Re-analysis of ammonia spectra : updating the hitran 14 nh 3 database," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 130, pp. 260–272, 2013.
- [39] K. Sung, L. R. Brown, X. Huang, D. W. Schwenke, T. J. Lee, S. L. Coy, and K. K. Lehmann, "Extended line positions, intensities, empirical lower state energies and quantum assignments of <sup>14</sup>NH<sub>3</sub> from 6300 to 7000 cm<sup>-1</sup>," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 113, no. 11, pp. 1066–1083, 2012.
- [40] R. Lees, L. Li, Z. Liu, and L.-H. Xu, "External cavity tunable diode laser spectrum of the  $\nu_1 + \nu_3$  N–H stretching combination band of <sup>15</sup>NH<sub>3</sub>," *Journal of molecular structure*, vol. 795, no. 1, pp. 134–142, 2006.

- [41] L. Li, R. Lees, and L.-H. Xu, "External cavity tunable diode laser spectra of the  $\nu_1 + 2\nu_4$  stretch-bend combination bands  $^{14}\text{NH}_3$  and  $^{15}\text{NH}_3$ ," *Journal of Molecular Spectroscopy*, vol. 243, no. 2, pp. 219–226, 2007.
- [42] R. Lees, L. Li, and L.-H. Xu, "New vista on ammonia in the  $1.5\mu\text{m}$  region : Assignments for the  $\nu_3 + 2\nu_4$  bands of  $^{14}\text{NH}_3$  and  $^{15}\text{NH}_3$  by isotopic shift labeling," *Journal of Molecular Spectroscopy*, vol. 251, no. 1-2, pp. 241–251, 2008.
- [43] B. Lins, F. Pflaum, R. Engelbrecht, and B. Schmauss, "Absorption line strengths of  $^{15}\text{NH}_3$  in the near infrared spectral region," *Applied Physics B*, vol. 102, no. 2, pp. 293–301, 2011.
- [44] T. Földes, D. Golebiowski, M. Herman, T. Softley, G. Di Lonardo, and L. Fusina, "Low-temperature high-resolution absorption spectrum of  $^{14}\text{NH}_3$  in the  $\nu_1 + \nu_3$  band region ( $1.51\mu\text{m}$ )," *Molecular physics*, vol. 112, no. 18, pp. 2407–2418, 2014.
- [45] M. E. Webber, D. S. Baer, and R. K. Hanson, "Ammonia monitoring near  $1.5\mu\text{m}$  with diode-laser absorption sensors," *Applied Optics*, vol. 40, no. 12, pp. 2031–2042, 2001.
- [46] A. Campargue, O. Leshchishina, L. Wang, D. Mondelain, and S. Kassi, "Methane spectroscopy and its applications to planetary atmospheres, including the earth's," *Journal of Molecular Spectroscopy*, vol. 291, pp. 16–22, 2013.
- [47] O. Votava, M. Mašát, P. Pracna, S. Kassi, and A. Campargue, "Accurate determination of low state rotational quantum numbers ( $j < 4$ ) from planar-jet and liquid nitrogen cell absorption spectra of methane near 1.4 micron," *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 12, no. 13, pp. 3145–3155, 2010.
- [48] X. Huang, D. W. Schwenke, and T. J. Lee, "Rovibrational spectra of ammonia. i. unprecedented accuracy of a potential energy surface used with nonadiabatic corrections," *The Journal of chemical physics*, vol. 134, no. 4, p. 044320, 2011.
- [49] X. Huang, D. W. Schwenke, and T. J. Lee, "Rovibrational spectra of ammonia. ii. detailed analysis, comparison, and prediction of spectroscopic assignments for  $^{14}\text{NH}_3$ ,  $^{15}\text{NH}_3$ , and  $^{14}\text{ND}_3$ ," *The Journal of chemical physics*, vol. 134, no. 4, p. 044321, 2011.
- [50] S. N. Yurchenko, "A theoretical room-temperature line list for  $^{15}\text{NH}_3$ ," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 152, pp. 28–36, 2015.
- [51] A. R. Al Derzi, T. Furtenbacher, J. Tennyson, S. N. Yurchenko, and A. G. Császár, "Marvel analysis of the measured high-resolution spectra of  $^{14}\text{NH}_3$ ," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 161, pp. 117–130, 2015.



- 
- [52] C. Ye and T. K. Wei, *Tunable external cavity diode lasers*. World Scientific, 2004.
- [53] M. G. Littman and H. J. Metcalf, "Spectrally narrow pulsed dye laser without beam expander," *Applied optics*, vol. 17, no. 14, pp. 2224–2227, 1978.
- [54] C. Hawthorn, K. Weber, and R. Scholten, "Littrow configuration tunable external cavity diode laser with fixed direction output beam," *Review of scientific instruments*, vol. 72, no. 12, pp. 4477–4479, 2001.
- [55] B. Shine and T. Day, "Tunable diode lasers," *Lasers and Optronics*, 1998.
- [56] G. Hernández, *Fabry-Perot Interferometers*, vol. 3. Cambridge University Press, 1988.
- [57] M. Vaughan, *The Fabry-Perot interferometer : history, theory, practice and applications*. CRC press, 1989.
- [58] S. Kawakami, K. Shiraishi, K. Baba, and S. Hattori, "Optical isolator," Aug. 20 1991. US Patent 5,040,863.
- [59] D. Mondelain, C. Camy-Peyret, A. W. Mantz, E. Tang, and A. Valentin *Journal of Molecular Spectroscopy*, vol. 241, no. 1, pp. 18–25, 2007.
- [60] R. G. Pilston and J. U. White, "A long path gas absorption cell," *JOSA*, vol. 44, no. 7, pp. 572–572, 1954.
- [61] D. R. Herriott and H. J. Schulte, "Folded optical delay lines," *Applied Optics*, vol. 4, no. 8, pp. 883–889, 1965.
- [62] G. Moreau and C. Robert, "Beam variations in a multiple-pass cavity," *Journal of Optics*, vol. 16, no. 4, p. 177, 1985.
- [63] D. R. Willey, D. Bittner, and F. C. De Lucia, "Very low temperature spectroscopy : The helium pressure broadening coefficients below 4.3 k for the higher lying states of ch 3 f," *Journal of Molecular Spectroscopy*, vol. 133, no. 1, pp. 182–192, 1989.
- [64] A. Sennaroglu and J. Fujimoto, "Design criteria for herriott-type multi-pass cavities for ultrashort pulse lasers," *Optics Express*, vol. 11, no. 9, pp. 1106–1113, 2003.
- [65] C. Robert, "Simple, stable, and compact multiple-reflection optical cell for very long optical paths," *Applied Optics*, vol. 46, no. 22, pp. 5408–5418, 2007.
- [66] Y. Singh, *Semiconductor devices*. IK International Pvt Ltd, 2009.
- [67] S. S. Li, *Semiconductor physical electronics*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [68] A. Rogalski, K. Adamiec, and J. Rutkowski, *Narrow-gap semiconductor photodiodes*, vol. 77. SPIE Press, 2000.

- [69] F. Lévy, *Physique et technologie des semiconducteurs*, vol. 18. PPUR presses polytechniques, 1995.
- [70] H. Venghaus and N. Grote, *Fibre Optic Communication : Key Devices*, vol. 161. Springer Science & Business Media, 2012.
- [71] S. L. Gilbert and W. C. Swann *NIST special publication*, vol. 260, p. 133, 2001.
- [72] M. Wojdyr, “Fityk : a general-purpose peak fitting program,” *Journal of Applied Crystallography*, vol. 43, no. 5, pp. 1126–1128, 2010.
- [73] S. Kassi, B. Gao, D. Romanini, and A. Campargue, “The near-infrared (1.30–1.70  $\mu\text{m}$ ) absorption spectrum of methane down to 77 k,” *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 10, no. 30, pp. 4410–4419, 2008.
- [74] P. Cacciani, P. Čermák, J. Cosléou, J. E. Romh, J. Hovorka, and M. Khelkhal, “Spectroscopy of ammonia in the range 6626–6805  $\text{cm}^{-1}$  : using temperature dependence towards a complete list of lower state energy transitions,” *Molecular Physics*, vol. 112, no. 18, pp. 2476–2485, 2014.
- [75] S. Kotochigova, E. Tiesinga, and P. Julienne, “Relativistic ab initio treatment of the second-order spin-orbit splitting of the a  $3\sigma$  u+ potential of rubidium and cesium dimers,” *Physical Review A*, vol. 63, no. 1, p. 012517, 2000.
- [76] F. Bruhl, R. Miron, and W. Ernst, “Triplet states of rubidium dimers on helium nanodroplets,” *Journal of Chemical Physics*, vol. 115, no. 22, pp. 10275–10281, 2001.
- [77] J. M. Sage, S. Sainis, T. Bergeman, and D. DeMille, “Optical production of ultracold polar molecules,” *Physical review letters*, vol. 94, no. 20, p. 203001, 2005.
- [78] J. Deiglmayr, A. Grochola, M. Repp, K. Mörtlbauer, C. Glück, J. Lange, O. Dulieu, R. Wester, and M. Weidemüller, “Formation of ultracold polar molecules in the rovibrational ground state,” *Physical review letters*, vol. 101, no. 13, p. 133004, 2008.
- [79] K. Aikawa, D. Akamatsu, M. Hayashi, K. Oasa, J. Kobayashi, P. Naidon, T. Kishimoto, M. Ueda, and S. Inouye, “Coherent transfer of photoassociated molecules into the rovibrational ground state,” *Physical review letters*, vol. 105, no. 20, p. 203001, 2010.
- [80] C. Haimberger, J. Kleinert, P. Zabawa, A. Wakim, and N. Bigelow, “Formation of ultracold, highly polar  $x1\sigma^+$  nacs molecules,” *New Journal of Physics*, vol. 11, no. 5, p. 055042, 2009.
- [81] F. Lang, K. Winkler, C. Strauss, R. Grimm, and J. H. Denschlag, “Ultracold triplet molecules in the rovibrational ground state,” *Physical review letters*, vol. 101, no. 13, p. 133005, 2008.

- 
- [82] C. Dion, C. Drag, O. Dulieu, B. L. Tolra, F. Masnou-Seeuws, and P. Pillet, "Resonant coupling in the formation of ultracold ground state molecules via photoassociation," *Physical Review Letters*, vol. 86, no. 11, p. 2253, 2001.
- [83] H. Salami, T. Bergeman, B. Beser, J. Bai, E. Ahmed, S. Kotochigova, A. Lyyra, J. Huennekens, C. Lisdat, A. Stolyarov, *et al.*, "Spectroscopic observations, spin-orbit functions, and coupled-channel deperturbation analysis of data on the  $a \sigma 1 u+$  and  $b \pi 3 u$  states of  $rb 2$ ," *Physical Review A*, vol. 80, no. 2, p. 022515, 2009.
- [84] A.-R. Allouche and M. Aubert-Frécon, "Transition dipole moments between the low-lying  $\omega g, u (+/-)$  states of the  $rb2$  and  $cs2$  molecules," *The Journal of chemical physics*, vol. 136, no. 11, p. 114302, 2012.
- [85] J.-L. Rivail, *Eléments de chimie quantique à l'usage des chimistes*. L'Editeur : EDP Sciences, 1999.
- [86] I. S. Lim, P. Schwerdtfeger, B. Metz, and H. Stoll, "All-electron and relativistic pseudopotential studies for the group 1 element polarizabilities from k to element 119," *The Journal of chemical physics*, vol. 122, no. 10, p. 104103, 2005.
- [87] H.-J. Werner, P. J. Knowles, G. Knizia, F. R. Manby, and M. Schütz, "Molpro : a general-purpose quantum chemistry program package," *Wiley Interdisciplinary Reviews : Computational Molecular Science*, vol. 2, no. 2, pp. 242–253, 2012.
- [88] C. Amiot, P. Crozet, and J. Verges, "Laser-induced fluorescence of the  $rb 2$  molecule the  $x 1 \sigma g+$  electronic state up to  $v=72$ ," *Chemical physics letters*, vol. 121, no. 4, pp. 390–394, 1985.

# Annexe 1

TABLE 1 – Tableau des résultats  $\sigma_{fit}$  avec comparaison avec  $\sigma_{Sung}$  pour l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$ . La 3ème colonne donne l'écart-type des valeurs de  $\sigma_{fit}$  et vaut 0 lorsque la transition n'est mesurée qu'une seule fois. La 4ème colonne est un indicateur de la catégorie (cf texte) 1 : transitions Sung *et al.* prises comme référence, 2 : autres transitions Sung *et al.*, 3 : nouvelles transitions. La 5ème colonne représente la différence  $\Delta\sigma = \sigma_{fit} - \sigma_{Sung}$ . La 6ème colonne est le nombre de mesures différentes pour une transition.

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6367.7608	6367.7608	0	1	0	1
6367.9655	6367.96494	0	2	0.00056	1
6368.1687	6368.16968	0	3		1
6368.2891	6368.2833	0	3		1
6368.36	6368.36	0	3		1
6368.414	6368.4166	0.00201	3		3
6368.5994	6368.5994	0	3		1
6369.0115	6369.01104	0.00066	1	0.00046	3
6369.1823	6369.18081	0	3		1
6369.3461	6369.34893	0.00401	1	-0.00283	3
6369.4923	6369.48656	0.0038	3		2
6369.6171	6369.61877	0	3		1
6369.7288	6369.7307	0	3		1
6369.8121	6369.8121	0	1	0	3
6369.9501	6369.95156	0.0006	3		2
6369.9774	6369.97824	0.00085	3		2
6370.4943	6370.4924	0.0029	3		3
6370.6711	6370.66805	0.00305	3		2
6370.6982	6370.6982	0	3		1
6370.9817	6370.98043	0.00015	2	0.00127	2
6371.1537	6371.15418	0	3		1
6371.2656	6371.26556	0.00065	3		2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6371.296	6371.29735	0.0007	3		2
6371.3381	6371.3381	0	1	0	2
6371.4663	6371.46495	0.0006	3		2
6371.7009	6371.70063	0.00046	1	0.00027	4
6372.1275	6372.12761	0.00036	3		3
6372.3557	6372.3557	0	1	0	4
6372.5049	6372.50493	0.00065	2	-0.00003	2
6372.6891	6372.69219	0.00177	2	-0.00309	3
6372.8139	6372.81435	0.00069	1	-0.00045	4
6372.8981	6372.9001	0.002	3		2
6373.3006	6373.30197	0	3		1
6373.4589	6373.46173	0.00283	3		2
6373.4996	6373.49716	0.00213	3		3
6373.6811	6373.6811	0	1	0	4
6373.7945	6373.79383	0	3		1
6374.0439	6374.04326	0.00126	2	0.00064	3
6374.2478	6374.24694	0.00086	3		2
6374.5005	6374.49965	0.00133	3		3
6374.5675	6374.5675	0	3		1
6374.7731	6374.77007	0.00286	3		3
6374.8623	6374.86244	0.00215	1	-0.00014	4
6374.8801	6374.87785	0	3		1
6375.0245	6375.02294	0.00221	1	0.00156	3
6375.04	6375.04148	0.00354	3		2
6375.2251	6375.22625	0.00069	2	-0.00115	2
6375.2583	6375.26032	0.00167	1	-0.00202	3
6375.3442	6375.3425	0	3		1
6375.3949	6375.39755	0.00316	2	-0.00265	3
6375.9356	6375.93734	0.0013	2	-0.00174	2
6376.0041	6376.00532	0	3		1
6376.0764	6376.07669	0.0005	1	-0.00029	4
6376.1286	6376.12955	0.00094	3		3
6376.1419	6376.14718	0.00288	2	-0.00528	5
6376.4021	6376.40553	0.00113	2	-0.00343	4
6376.426	6376.4271	0.001	2	-0.0011	4
6376.5342	6376.53492	0.00098	2	-0.00072	3
6376.6292	6376.62961	0.00045	1	-0.00041	4
6376.6487	6376.64919	0.00083	1	-0.00049	4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6376.7189	6376.72926	0.00006	3		2
6377.1258	6377.1258	0	1	0	3
6377.2182	6377.21831	0	3		1
6377.3003	6377.30131	0.00099	2	-0.00101	3
6377.4007	6377.3999	0.00102	3		3
6377.4303	6377.43144	0.00101	1	-0.00114	3
6377.6493	6377.64626	0.00071	3		2
6377.6786	6377.67773	0.00123	1	0.00087	3
6377.8424	6377.84264	0.00155	3		2
6377.9605	6377.95983	0.0005	3		2
6378.0285	6378.02746	0.00005	3		2
6378.0944	6378.0922	0.00093	3		2
6378.2157	6378.22018	0	3		1
6378.2777	6378.26844	0	3		1
6378.4911	6378.4912	0.00014	1	-0.0001	3
6378.5105	6378.51533	0.00028	3		3
6378.5925	6378.59002	0	3		1
6378.662	6378.66145	0.00055	1	0.00055	2
6378.684	6378.6892	0.00102	3		3
6378.8808	6378.88172	0.0009	3		3
6379.0063	6379.0063	0	1	0	3
6379.0821	6379.08219	0	3		1
6379.3712	6379.37003	0	3		1
6379.4559	6379.45761	0.00132	3		4
6379.5113	6379.51132	0.00088	1	-0.00002	4
6379.9212	6379.91758	0	3		1
6379.9602	6379.96166	0.00069	3		3
6380.0796	6380.08201	0.00193	2	-0.00241	4
6380.115	6380.115	0	1	0	4
6380.2138	6380.21472	0	3		1
6380.4462	6380.44739	0	3		1
6380.5968	6380.59817	0	3		1
6380.7147	6380.71406	0.0015	1	0.00064	4
6380.7949	6380.79461	0	3		1
6380.8919	6380.88752	0.00221	2	0.00438	3
6381.201	6381.20119	0	3		1
6381.2536	6381.25081	0.0005	2	0.00279	3
6381.2738	6381.27292	0.00115	3		2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6381.2972	6381.2972	0	1	0	3
6381.3991	6381.40218	0	3		1
6381.5512	6381.55417	0.00028	3		2
6381.6866	6381.68553	0.00134	3		3
6381.8461	6381.84489	0.00086	1	0.00121	3
6382.0731	6382.07325	0.00111	1	-0.00015	4
6382.2853	6382.28509	0.0001	3		2
6382.4397	6382.43977	0	3		1
6382.547	6382.54823	0.00174	1	-0.00123	3
6382.6369	6382.63727	0.00158	3		4
6382.7205	6382.71961	0.0014	1	0.00089	5
6382.7913	6382.79753	0.0022	3		4
6383.0468	6383.0468	0.00082	3		3
6383.1053	6383.10997	0.00054	3		3
6383.255	6383.25831	0.00245	1	-0.00331	3
6383.3734	6383.3734	0	1	0	3
6383.5563	6383.55627	0.00004	1	0.00003	3
6383.704	6383.70459	0	3		1
6383.7794	6383.7814	0.00136	3		3
6383.9617	6383.96411	0.00216	3		4
6384.0532	6384.05715	0.0025	3		5
6384.132	6384.13247	0	3		1
6384.286	6384.28665	0	3		1
6384.3258	6384.32591	0.00008	1	-0.00011	3
6384.3551	6384.35518	0.00011	1	-0.00008	3
6384.5545	6384.55735	0.00133	3		3
6384.705	6384.70535	0.00067	3		3
6385.1056	6385.10576	0.00054	2	-0.00016	3
6385.1865	6385.18694	0.00055	2	-0.00044	2
6385.2379	6385.23989	0.00098	2	-0.00199	3
6385.2779	6385.27799	0.00015	1	-0.00009	4
6385.3022	6385.29961	0.00169	3		4
6385.3169	6385.3214	0.00095	3		2
6385.4443	6385.44545	0	2	-0.00115	1
6385.486	6385.486	0	1	0	3
6385.505	6385.50437	0.00055	2	0.00063	2
6385.676	6385.68176	0.0043	3		3
6385.8285	6385.82954	0.00104	2	-0.00104	3

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6385.9473	6385.94968	0.00255	2	-0.00238	3
6386.0739	6386.07195	0.00186	3		2
6386.1732	6386.16937	0.00386	3		2
6386.2365	6386.23406	0.00173	1	0.00244	3
6386.2563	6386.25775	0.00253	3		3
6386.2787	6386.28302	0.00301	2	-0.00432	3
6386.3179	6386.31739	0.0005	3		3
6386.4895	6386.4899	0	3		1
6386.5842	6386.58545	0.00217	1	-0.00125	4
6386.6153	6386.61323	0	3		1
6386.6822	6386.68327	0.00025	2	-0.00107	2
6386.7693	6386.76871	0.00069	2	0.00059	3
6386.8824	6386.88291	0.00112	2	-0.00051	3
6387.2327	6387.2325	0.00038	1	0.0002	4
6387.3919	6387.39103	0	3		1
6387.5682	6387.56651	0.00103	3		2
6387.5812	6387.58205	0.0012	1	-0.00085	3
6387.709	6387.70813	0.00061	1	0.00087	3
6387.9388	6387.93615	0.00109	2	0.00265	4
6387.9615	6387.96073	0	3		1
6388.1034	6388.10246	0.00107	1	0.00094	4
6388.1884	6388.18858	0.00105	3		4
6388.5321	6388.52921	0.00069	3		2
6388.6874	6388.68754	0.00027	1	-0.00014	5
6389.4719	6389.47126	0	3		1
6389.7945	6389.79564	0	2	-0.00114	1
6389.9342	6389.9342	0	1	0	4
6390.0497	6390.04891	0	3		1
6390.1093	6390.10858	0	3		1
6390.2972	6390.2972	0	1	0	3
6390.622	6390.62123	0.00005	3		2
6390.7742	6390.76983	0	3		1
6390.8629	6390.86195	0.00159	2	0.00095	4
6390.8798	6390.87906	0	3		1
6390.954	6390.95428	0.0004	1	-0.00028	3
6391.2545	6391.25534	0.00068	1	-0.00084	3
6391.5468	6391.5468	0	3		1
6391.6338	6391.6338	0	3		1



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6391.6796	6391.6796	0	3		1
6391.7813	6391.7813	0	3		1
6392.2216	6392.22027	0	2	0.00133	1
6392.2407	6392.2409	0	3		1
6392.3279	6392.3279	0	1	0	3
6392.4721	6392.47043	0.00175	2	0.00167	3
6392.533	6392.53354	0	3		1
6392.7025	6392.70253	0.00122	2	-0.00003	5
6392.9253	6392.9247	0	3		1
6393.0099	6393.00917	0.00116	2	0.00073	4
6393.0516	6393.05115	0	3		1
6393.2944	6393.29419	0.00043	1	0.00021	5
6393.3296	6393.32948	0	3		1
6393.3504	6393.35076	0.00103	1	-0.00036	5
6393.3918	6393.39269	0.00222	2	-0.00089	3
6393.5266	6393.52648	0.00016	2	0.00012	3
6393.7239	6393.72458	0.00123	1	-0.00068	3
6393.7682	6393.76782	0.00037	3		2
6393.8289	6393.83059	0.00123	2	-0.00169	2
6394.0158	6394.02031	0.00268	3		3
6394.2377	6394.24098	0.00142	3		3
6394.6189	6394.61269	0.00127	3		3
6394.6306	6394.63186	0.00126	1	-0.00126	5
6394.7378	6394.73845	0	3		1
6394.7825	6394.78154	0.00104	1	0.00096	4
6394.8306	6394.83136	0	3		1
6394.8974	6394.89632	0.00144	2	0.00108	3
6394.9901	6394.99104	0	3		1
6395.0391	6395.0401	0	3		1
6395.186	6395.18533	0.00092	2	0.00067	3
6395.2672	6395.26699	0.00041	1	0.00021	5
6395.3734	6395.37428	0.00115	3		2
6395.5691	6395.57172	0.00088	3		3
6395.617	6395.61627	0.00083	1	0.00073	3
6395.8215	6395.82039	0.00096	2	0.00111	2
6395.9357	6395.93765	0.00145	3		5
6396.2309	6396.2288	0.00198	2	0.0021	3
6396.2942	6396.29318	0	3		1

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6396.3123	6396.3123	0	1	0	3
6396.3795	6396.37858	0	3		1
6396.5739	6396.5765	0.00152	3		5
6396.6127	6396.61195	0.0003	2	0.00075	3
6396.8408	6396.83801	0.00181	2	0.00279	3
6396.9484	6396.94831	0.00013	1	0.00009	3
6397.0526	6397.04828	0.00317	2	0.00432	2
6397.162	6397.16085	0.00138	2	0.00115	3
6397.266	6397.26595	0.00081	1	0.00005	4
6397.3065	6397.30755	0	3		1
6397.3674	6397.36463	0.00132	3		4
6397.3967	6397.39647	0.00144	1	0.00023	4
6397.4888	6397.48799	0.00141	3		3
6397.5877	6397.58574	0.00088	2	0.00196	3
6397.9161	6397.91582	0.00125	1	0.00028	4
6398.0479	6398.0496	0.00064	2	-0.0017	3
6398.0886	6398.0879	0	3		1
6398.304	6398.29835	0.00373	2	0.00565	3
6398.5255	6398.52669	0.00102	3		3
6398.6003	6398.60111	0.00099	1	-0.00081	4
6398.6731	6398.67216	0.00133	1	0.00094	3
6398.7043	6398.70293	0.00102	2	0.00137	4
6398.8039	6398.80245	0.00021	3		2
6398.8569	6398.85798	0.0006	3		3
6398.992	6398.99047	0.00089	2	0.00153	2
6399.0564	6399.058	0.00034	3		2
6399.1884	6399.18677	0.00059	2	0.00163	3
6399.254	6399.25523	0.0017	3		4
6399.2946	6399.29389	0	3		1
6399.347	6399.34769	0.00097	1	-0.00069	3
6399.4014	6399.40082	0	3		1
6399.4589	6399.4565	0.00138	2	0.0024	3
6399.6521	6399.65141	0	2	0.00069	1
6399.6764	6399.67614	0	3		1
6399.8104	6399.80945	0.00135	1	0.00095	3
6400.123	6400.12255	0	3		1
6400.2496	6400.24913	0.00049	1	0.00047	3
6400.3664	6400.36737	0.0007	1	-0.00097	3

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6400.458	6400.45794	0	3		1
6400.6424	6400.64218	0.00031	1	0.00022	3
6400.739	6400.73906	0.00101	2	-0.00006	2
6400.9532	6400.95323	0.00107	3		3
6401.1091	6401.10875	0.00072	1	0.00035	3
6401.2012	6401.20116	0.00064	1	0.00004	5
6401.244	6401.24481	0.00065	3		2
6401.4353	6401.43579	0	2	-0.00049	1
6401.5254	6401.52639	0.00163	1	-0.00099	3
6401.6286	6401.62897	0.00053	1	-0.00037	3
6401.6469	6401.64634	0	3		1
6402.0718	6402.07185	0.00007	1	-0.00005	3
6402.1662	6402.16583	0.00149	3		3
6402.2574	6402.2573	0.00094	2	0.0001	3
6402.3745	6402.37544	0.00072	1	-0.00094	3
6402.4714	6402.473	0.00123	2	-0.0016	4
6402.5044	6402.50491	0.00084	2	-0.00051	3
6402.6384	6402.64075	0.00052	2	-0.00235	3
6402.6904	6402.69339	0.00041	2	-0.00299	4
6402.7523	6402.75574	0.00189	2	-0.00344	3
6402.7756	6402.7756	0	1	0	3
6403.0053	6403.00572	0.00065	3		2
6403.2438	6403.24191	0.00275	3		4
6403.2706	6403.27274	0.00117	2	-0.00214	4
6403.3021	6403.30125	0.00033	2	0.00085	4
6403.3245	6403.3237	0	3		1
6403.3537	6403.35511	0.00084	2	-0.00141	4
6403.3869	6403.38756	0.00093	1	-0.00066	3
6403.5653	6403.5669	0.00029	2	-0.0016	2
6403.6013	6403.59994	0.0022	2	0.00136	3
6403.7508	6403.75092	0.00041	1	-0.00012	4
6403.78	6403.78131	0.00098	2	-0.00131	5
6403.9313	6403.93139	0	3		1
6404.0728	6404.07142	0.00134	1	0.00138	3
6404.1113	6404.11143	0.00086	1	-0.00013	3
6404.3375	6404.33807	0	3		1
6404.6659	6404.6659	0	1	0	4
6404.8829	6404.88376	0	3		1

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6404.9888	6404.98875	0.0006	2	0.00005	3
6405.0773	6405.0777	0.00159	2	-0.0004	4
6405.2622	6405.26117	0.00173	2	0.00103	2
6405.3697	6405.36979	0.00116	2	-0.00009	4
6405.4774	6405.4774	0	1	0	3
6405.5674	6405.56841	0.00163	2	-0.00101	3
6405.7222	6405.72315	0.00115	2	-0.00095	4
6405.8126	6405.81238	0.00088	2	0.00022	3
6406.1169	6406.11723	0.00046	1	-0.00033	3
6406.1659	6406.16466	0	2	0.00124	1
6406.2929	6406.29341	0	3		1
6406.361	6406.36129	0.0014	3		2
6406.4983	6406.49905	0	3		1
6406.5382	6406.53704	0.00128	3		4
6406.6235	6406.62314	0	3		1
6406.6483	6406.64832	0.00003	1	-0.00002	4
6406.9329	6406.93252	0.0011	1	0.00038	3
6407.0351	6407.03471	0.00042	2	0.00039	3
6407.247	6407.24736	0.0012	2	-0.00036	3
6407.3084	6407.30887	0.00054	2	-0.00047	4
6407.347	6407.34809	0.00128	3		3
6407.5575	6407.5575	0	1	0	3
6407.7214	6407.72115	0.00206	2	0.00025	3
6407.9439	6407.94314	0.00191	2	0.00076	3
6408.108	6408.1076	0.00196	2	0.0004	3
6408.1317	6408.13313	0.00125	2	-0.00143	3
6408.1662	6408.16617	0.00006	1	0.00003	4
6408.1932	6408.19302	0.00068	3		3
6408.3197	6408.32078	0	3		1
6408.367	6408.36814	0	3		1
6408.4171	6408.41659	0	3		1
6408.446	6408.44786	0.00132	3		4
6408.5771	6408.57763	0.00127	3		3
6408.6051	6408.60449	0.00136	2	0.00061	3
6408.622	6408.62104	0.00089	1	0.00096	5
6408.7314	6408.73118	0.00145	3		2
6408.9822	6408.98152	0	3		1
6409.0509	6409.05136	0.00083	1	-0.00046	5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6409.1617	6409.16053	0	3		1
6409.3552	6409.35564	0.00172	3		4
6409.4659	6409.46583	0	3		1
6409.5126	6409.51663	0.00078	3		3
6409.6401	6409.64418	0.00112	3		4
6409.6937	6409.69347	0.00046	1	0.00023	5
6409.8185	6409.8204	0.0014	2	-0.0019	4
6409.988	6409.98487	0	3		1
6410.2925	6410.29066	0.00146	2	0.00184	3
6410.341	6410.33698	0	3		1
6410.3526	6410.3526	0	1	0	3
6410.461	6410.45892	0.00177	3		3
6410.4984	6410.4971	0.00196	2	0.0013	3
6410.5705	6410.57043	0.00205	2	0.00007	3
6410.6649	6410.66425	0.0006	2	0.00065	4
6410.8278	6410.82808	0	3		1
6410.8458	6410.8458	0	1	0	3
6410.8664	6410.86672	0	3		1
6410.9497	6410.94912	0.0001	2	0.00058	2
6411.2168	6411.2139	0.00177	2	0.0029	4
6411.2288	6411.22898	0.00247	3		2
6411.3153	6411.31278	0.00057	2	0.00252	2
6411.4983	6411.49962	0.00267	3		3
6411.5146	6411.51691	0.00281	2	-0.00231	3
6411.5692	6411.56782	0	3		1
6411.6196	6411.622	0.00131	2	-0.0024	3
6411.6401	6411.64199	0.00139	1	-0.00189	3
6411.8642	6411.86635	0.00184	2	-0.00215	3
6411.8909	6411.89241	0.00147	2	-0.00151	4
6411.9976	6411.99708	0.00091	1	0.00052	4
6412.0118	6412.01212	0	3		1
6412.0994	6412.09987	0.00297	2	-0.00047	3
6412.1629	6412.16072	0.00218	1	0.00218	2
6412.2609	6412.25964	0.00168	2	0.00126	2
6412.4103	6412.41037	0.00363	3		2
6412.5147	6412.51403	0	3		1
6412.5454	6412.54617	0.00091	1	-0.00077	3
6412.5588	6412.56148	0.00119	2	-0.00268	2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6412.5896	6412.58749	0.0026	2	0.00211	3
6412.6126	6412.61314	0.00109	3		2
6412.8537	6412.85346	0.00119	2	0.00024	3
6412.9232	6412.92364	0.0014	2	-0.00044	3
6413	6413	0	1	0	3
6413.1252	6413.12349	0.00145	3		2
6413.2728	6413.27288	0.00124	2	-0.00008	3
6413.4008	6413.40055	0.00083	3		5
6413.5361	6413.53486	0.00154	3		3
6413.5521	6413.55222	0	3		1
6413.6239	6413.6239	0	1	0	3
6413.7558	6413.75312	0.00143	3		3
6413.8067	6413.80391	0.0035	3		2
6414.0839	6414.08424	0.00058	1	-0.00034	4
6414.1416	6414.14137	0	3		1
6414.1636	6414.16339	0	3		1
6414.2239	6414.22613	0.00069	2	-0.00223	3
6414.3554	6414.35472	0.00112	3		3
6414.4852	6414.48427	0.0004	3		2
6414.5874	6414.5873	0.00112	3		3
6414.6423	6414.63596	0.00389	3		2
6414.7001	6414.70034	0.00051	3		2
6414.9665	6414.96635	0.00021	1	0.00015	3
6415.1297	6415.13005	0.00304	2	-0.00035	3
6415.1621	6415.16093	0.00147	3		3
6415.2563	6415.25692	0.00062	1	-0.00062	4
6415.4149	6415.41521	0.0011	2	-0.00031	4
6415.5796	6415.57999	0.00056	1	-0.00039	3
6415.7781	6415.77422	0.00219	2	0.00388	2
6415.9306	6415.92995	0.00159	2	0.00065	4
6416.1345	6416.13542	0.00218	2	-0.00092	3
6416.2822	6416.28352	0.00185	1	-0.00132	3
6416.2927	6416.29557	0.0014	2	-0.00287	3
6416.3237	6416.325	0.00189	2	-0.0013	3
6416.3406	6416.34002	0.00082	1	0.00058	3
6416.3512	6416.35288	0	3		1
6416.4685	6416.47032	0	3		1
6416.4932	6416.4943	0.00147	2	-0.0011	3

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6416.5257	6416.52596	0.00097	1	-0.00026	4
6416.5462	6416.54967	0.00114	3		2
6416.9774	6416.97763	0	3		1
6417.0244	6417.02532	0.00168	3		3
6417.2108	6417.21083	0.00228	3		2
6417.2417	6417.24176	0.00102	1	-0.00006	4
6417.2855	6417.28461	0.00052	2	0.00089	3
6417.3621	6417.36163	0	3		1
6417.4995	6417.49729	0.00062	2	0.00221	3
6417.5527	6417.55396	0.00158	2	-0.00126	3
6417.6751	6417.67597	0.00226	2	-0.00087	3
6417.7116	6417.70917	0.00378	3		4
6417.7582	6417.7582	0	1	0	4
6417.8561	6417.85527	0.0008	3		4
6417.8803	6417.88065	0.00109	2	-0.00035	4
6417.9815	6417.98188	0.00055	2	-0.00038	4
6418.0522	6418.05535	0.00224	2	-0.00315	5
6418.0895	6418.08921	0.00156	2	0.00029	4
6418.1654	6418.16551	0.0012	2	-0.00011	2
6418.1992	6418.19932	0.0009	2	-0.00012	3
6418.2394	6418.2394	0	1	0	3
6418.3226	6418.32413	0.00104	2	-0.00153	3
6418.3558	6418.35464	0.00102	3		3
6418.525	6418.5241	0	3		1
6418.5694	6418.56898	0.00089	2	0.00042	4
6418.6556	6418.65627	0.00086	2	-0.00067	4
6418.7241	6418.72419	0.00144	2	-0.00009	4
6418.77	6418.76839	0.0014	3		4
6418.8178	6418.81841	0.00077	2	-0.00061	3
6418.8527	6418.85183	0.00045	3		2
6418.8767	6418.87814	0.00163	1	-0.00144	3
6418.9068	6418.90635	0	3		1
6419.017	6419.01454	0.00046	2	0.00246	3
6419.0372	6419.03683	0.00052	1	0.00037	3
6419.0891	6419.08916	0.00085	2	-0.00006	3
6419.1279	6419.12887	0.00103	2	-0.00097	3
6419.1804	6419.17729	0.00245	3		3
6419.2473	6419.24725	0	3		1

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6419.2477	6419.24627	0	3		1
6419.2718	6419.27168	0.00106	1	0.00012	4
6419.3439	6419.34367	0.00146	2	0.00023	4
6419.4599	6419.45921	0.00192	2	0.00069	3
6419.5022	6419.50017	0.0009	2	0.00203	2
6419.5395	6419.53846	0.00075	3		2
6419.7837	6419.78424	0.00067	1	-0.00054	4
6419.8649	6419.86505	0.00051	3		3
6419.9755	6419.97593	0.00112	2	-0.00043	4
6420.0016	6420.00295	0.00081	2	-0.00135	5
6420.0825	6420.08259	0.00015	1	-0.00009	4
6420.1334	6420.13526	0.00082	3		3
6420.3028	6420.30303	0.00082	2	-0.00023	3
6420.4222	6420.42373	0.00054	2	-0.00153	3
6420.8887	6420.8884	0.0001	2	0.0003	2
6420.9795	6420.98054	0.00101	2	-0.00104	3
6421.018	6421.01648	0.00074	3		3
6421.1385	6421.13642	0.00066	2	0.00208	3
6421.2207	6421.21248	0	3		1
6421.2325	6421.2325	0	1	0	4
6421.3861	6421.38572	0.00112	3		4
6421.4347	6421.43292	0.00043	2	0.00178	3
6421.5012	6421.50074	0.00065	1	0.00046	3
6421.5224	6421.52146	0.00069	2	0.00094	3
6421.5834	6421.58317	0.00095	2	0.00023	3
6421.6285	6421.63021	0.00036	3		2
6421.6811	6421.68038	0.00041	2	0.00072	3
6421.7502	6421.75137	0.00033	3		3
6421.8852	6421.88515	0.00021	2	0.00005	3
6421.9034	6421.90302	0.00015	2	0.00038	2
6422.1926	6422.19214	0.00102	3		3
6422.2222	6422.22027	0.0007	2	0.00193	3
6422.2381	6422.23656	0.00078	3		3
6422.442	6422.442	0	1	0	3
6422.4635	6422.46333	0	3		1
6422.5417	6422.54153	0.00073	2	0.00017	3
6422.605	6422.60473	0	3		1
6422.639	6422.63877	0	3		1



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6422.8354	6422.83571	0.00043	1	-0.00031	3
6423.0163	6423.01595	0.00076	2	0.00035	3
6423.2541	6423.25451	0.00058	1	-0.00041	3
6423.2854	6423.28469	0.00098	1	0.00071	4
6423.4045	6423.40344	0.00053	3		3
6423.4359	6423.43507	0.00086	2	0.00083	3
6423.4484	6423.44656	0	3		1
6423.6114	6423.61211	0.00025	2	-0.00071	3
6423.7138	6423.71443	0.00083	1	-0.00063	3
6423.7351	6423.73551	0.00041	1	-0.00041	2
6423.7697	6423.766	0.00447	3		2
6423.8372	6423.8394	0.00138	2	-0.0022	3
6423.8821	6423.88426	0.00329	2	-0.00216	3
6423.963	6423.95988	0.00111	3		2
6423.9959	6423.99562	0.00103	2	0.00028	4
6424.1472	6424.14406	0.00108	2	0.00314	3
6424.2163	6424.21565	0.00077	2	0.00065	3
6424.4107	6424.41151	0.00115	1	-0.00081	3
6424.4268	6424.4292	0.00094	2	-0.0024	3
6424.4731	6424.47167	0.00092	1	0.00143	4
6424.4844	6424.48819	0	3		1
6424.5568	6424.55684	0.00055	2	-0.00004	3
6424.7347	6424.73393	0.00113	3		3
6424.9383	6424.9383	0	1	0	3
6425.027	6425.0261	0.0005	2	0.0009	2
6425.2336	6425.23238	0.00125	3		3
6425.3639	6425.36408	0.00129	2	-0.00018	4
6425.5869	6425.58667	0	3		1
6425.6108	6425.6108	0	1	0	3
6425.792	6425.79217	0.00159	2	-0.00017	3
6425.883	6425.88335	0.00062	1	-0.00035	3
6425.927	6425.92703	0.00019	3		4
6426.0501	6426.0524	0.00185	2	-0.0023	5
6426.0724	6426.0724	0.00152	2	0	4
6426.131	6426.13127	0.00191	2	-0.00027	4
6426.1877	6426.18886	0.0005	3		4
6426.2502	6426.25066	0.00079	1	-0.00046	4
6426.4239	6426.42384	0.00135	3		4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6426.594	6426.59454	0.00062	3		3
6426.6517	6426.65225	0.0017	3		5
6426.7914	6426.78997	0.00203	2	0.00143	3
6426.8078	6426.81106	0	3		1
6426.9331	6426.9331	0	1	0	3
6426.9468	6426.94578	0.00052	2	0.00102	3
6427.0984	6427.09955	0.00195	3		3
6427.155	6427.1549	0.00136	2	0.0001	4
6427.1826	6427.18114	0	3		1
6427.2035	6427.20407	0.00068	2	-0.00057	3
6427.2421	6427.24544	0.00073	3		2
6427.4122	6427.41115	0.00195	2	0.00105	3
6427.4862	6427.4862	0	1	0	3
6427.6224	6427.61832	0.00331	3		3
6427.8636	6427.86278	0.0009	2	0.00082	3
6428.0822	6428.0779	0.00224	3		3
6428.164	6428.164	0	1	0	3
6428.5359	6428.53628	0.00141	2	-0.00038	4
6428.6015	6428.60111	0.00107	1	0.00039	4
6428.6136	6428.61409	0.00132	2	-0.00049	3
6428.6932	6428.69314	0.00243	2	0.00006	4
6428.8106	6428.80831	0.0014	3		3
6428.8691	6428.86191	0.00225	2	0.00719	3
6428.8819	6428.87936	0.00084	3		3
6429.023	6429.02306	0.00215	2	-0.00006	3
6429.2797	6429.27897	0.00043	3		2
6429.3649	6429.3663	0.00108	1	-0.0014	5
6429.5482	6429.55016	0.00078	2	-0.00196	4
6429.5845	6429.5845	0	1	0	4
6429.6095	6429.60765	0.00033	2	0.00185	4
6429.6241	6429.62392	0.00049	3		4
6429.6866	6429.68815	0.00065	2	-0.00155	4
6429.7981	6429.79932	0.00092	3		3
6429.8171	6429.82243	0.00071	2	-0.00533	4
6429.8458	6429.84666	0.00045	3		2
6430.1211	6430.1203	0.00139	1	0.0008	4
6430.1655	6430.1632	0.00171	2	0.0023	4
6430.2694	6430.26932	0.00308	2	0.00008	4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6430.3072	6430.30837	0.0033	2	-0.00117	4
6430.3693	6430.37299	0.00156	3		4
6430.3875	6430.39014	0.00175	1	-0.00264	4
6430.4154	6430.41779	0.00106	3		2
6430.5016	6430.50665	0.00351	3		2
6430.5298	6430.53117	0	3		1
6430.6949	6430.69462	0.0007	2	0.00028	3
6430.7951	6430.79435	0.00115	2	0.00075	4
6430.9814	6430.98105	0.00061	3		3
6431.2055	6431.20502	0.00071	3		3
6431.2484	6431.2484	0	1	0	5
6431.6577	6431.65841	0.00037	3		3
6431.7715	6431.77135	0.00116	3		3
6431.8857	6431.88443	0.00061	3		4
6431.9095	6431.90911	0.00085	2	0.00039	4
6431.9864	6431.98558	0.00141	3		4
6431.9997	6432.00096	0.00044	2	-0.00126	4
6432.0431	6432.04271	0.00168	2	0.00039	2
6432.1867	6432.18649	0.00031	1	0.00021	4
6432.2293	6432.2293	0	1	0	3
6432.3506	6432.35074	0	3		1
6432.4108	6432.41312	0	2	-0.00232	1
6432.4781	6432.47979	0.00071	2	-0.00169	3
6432.6819	6432.68128	0.00135	1	0.00062	3
6432.8618	6432.86191	0.00153	2	-0.00011	3
6432.8837	6432.88444	0	3		1
6433.0215	6433.02197	0.00066	1	-0.00047	3
6433.0613	6433.06281	0.00082	2	-0.00151	3
6433.4081	6433.41297	0.00327	2	-0.00487	3
6433.5155	6433.51357	0.00054	2	0.00193	3
6433.5531	6433.55255	0	3		1
6433.7812	6433.78085	0.00081	1	0.00035	3
6433.8504	6433.85007	0.00025	1	0.00033	3
6433.9727	6433.97102	0.00162	3		2
6434.1768	6434.17583	0.00101	1	0.00097	4
6434.2688	6434.26851	0	3		1
6434.31	6434.31057	0.00058	1	-0.00057	3
6434.3846	6434.38355	0.00159	2	0.00105	3

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6434.4143	6434.41422	0.00134	2	0.00008	3
6434.46	6434.46038	0.00061	2	-0.00038	3
6434.4994	6434.49945	0.0012	2	-0.00005	3
6434.6274	6434.62838	0.00192	2	-0.00098	4
6434.6675	6434.66664	0.0019	2	0.00086	4
6434.7865	6434.7865	0	1	0	4
6434.865	6434.86489	0.00138	2	0.00011	4
6434.8847	6434.88361	0.00132	2	0.00109	3
6435.1957	6435.19555	0.00213	2	0.00015	3
6435.2258	6435.22651	0.00133	1	-0.00071	5
6435.2561	6435.25496	0.00171	2	0.00114	5
6435.337	6435.33798	0.0013	2	-0.00098	3
6435.4438	6435.4431	0.00231	2	0.0007	3
6435.6443	6435.64586	0.00204	3		2
6435.7306	6435.72977	0.00122	2	0.00083	3
6435.87	6435.86972	0.00151	2	0.00028	4
6436.0052	6436.00508	0.00125	2	0.00012	3
6436.0413	6436.04092	0.00123	2	0.00038	3
6436.0964	6436.0951	0.00065	2	0.0013	2
6436.1336	6436.1336	0	1	0	4
6436.2146	6436.2147	0	3		1
6436.6363	6436.63899	0.00205	2	-0.00269	5
6436.6519	6436.65263	0.00068	3		2
6436.7206	6436.72045	0.00151	2	0.00015	3
6436.7737	6436.77409	0.00067	1	-0.00039	4
6436.9737	6436.97414	0	3		1
6437.0549	6437.05436	0.00094	2	0.00054	3
6437.087	6437.08527	0.0007	2	0.00173	3
6437.109	6437.10943	0.00024	3		3
6437.1877	6437.18752	0.00054	2	0.00018	3
6437.3486	6437.34818	0.00212	2	0.00042	3
6437.3654	6437.36156	0.00278	1	0.00384	3
6437.5242	6437.52566	0.00207	1	-0.00146	3
6437.5606	6437.56204	0.00221	2	-0.00144	3
6437.6918	6437.6921	0	3		1
6437.7266	6437.72934	0	2	-0.00274	1
6437.8638	6437.86596	0.00268	2	-0.00216	4
6437.9149	6437.91732	0.00371	1	-0.00242	5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6437.9269	6437.92747	0	3		1
6438.082	6438.08672	0.00101	2	-0.00472	4
6438.1456	6438.14666	0.0015	1	-0.00106	4
6438.1994	6438.19925	0.00147	3		4
6438.2264	6438.22513	0.00189	2	0.00127	3
6438.2857	6438.28584	0.00133	2	-0.00014	3
6438.4208	6438.42033	0.00139	2	0.00047	3
6438.4496	6438.45367	0.00485	3		3
6438.5052	6438.507	0.00169	2	-0.0018	3
6438.7047	6438.70515	0.00038	1	-0.00045	3
6438.7329	6438.73335	0.0005	2	-0.00045	3
6438.8246	6438.82381	0.00139	2	0.00079	4
6438.8982	6438.90035	0.00062	2	-0.00215	3
6438.9265	6438.92638	0.00016	2	0.00012	3
6438.9395	6438.9395	0	1	0	3
6438.9717	6438.96853	0	3		1
6439.1012	6439.10159	0	2	-0.00039	1
6439.1669	6439.16647	0.00022	2	0.00043	3
6439.2586	6439.25869	0.00079	3		2
6439.4008	6439.40093	0.0023	2	-0.00013	3
6439.4742	6439.47678	0.00213	2	-0.00258	4
6439.5664	6439.56556	0.0009	3		2
6439.6502	6439.64576	0.0032	3		2
6439.6607	6439.66047	0	3		1
6439.6842	6439.68694	0.00156	2	-0.00274	3
6439.8014	6439.80237	0.00209	2	-0.00097	3
6439.8998	6439.90274	0.00211	2	-0.00294	5
6439.938	6439.938	0	1	0	5
6440.0108	6440.01205	0.00278	2	-0.00125	3
6440.1467	6440.14518	0.00238	2	0.00152	4
6440.4635	6440.46523	0.00307	2	-0.00173	3
6440.4949	6440.4972	0.00273	2	-0.0023	3
6440.6839	6440.68145	0.00284	2	0.00245	3
6440.7651	6440.76496	0.00072	1	0.00014	4
6441.0611	6441.0608	0.00042	2	0.0003	3
6441.0805	6441.08036	0.0002	1	0.00014	3
6441.1576	6441.15819	0.0005	3		2
6441.2396	6441.24007	0.00156	2	-0.00047	4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6441.2572	6441.25596	0.00133	2	0.00124	4
6441.4882	6441.48534	0.00044	3		3
6441.5927	6441.59006	0.00127	2	0.00264	3
6441.708	6441.7058	0.00167	1	0.0022	3
6441.7256	6441.7262	0.00243	2	-0.0006	2
6441.8323	6441.83161	0.00097	1	0.00069	3
6441.8485	6441.84696	0.00087	2	0.00154	4
6441.9163	6441.91475	0.00182	3		3
6441.9443	6441.94362	0.00147	3		5
6442.2243	6442.22444	0.00076	2	-0.00014	3
6442.2609	6442.26041	0.00177	2	0.00049	3
6442.3162	6442.31665	0.00094	2	-0.00045	4
6442.3513	6442.35212	0	2	-0.00082	1
6442.4215	6442.42157	0.00012	1	-0.00007	4
6442.4474	6442.44968	0.00065	2	-0.00228	2
6442.4709	6442.4723	0.00052	2	-0.0014	4
6442.569	6442.56935	0.00083	2	-0.00035	6
6442.7917	6442.79152	0.00117	3		5
6442.8531	6442.85281	0.00091	2	0.00029	5
6442.9754	6442.97253	0	2	0.00287	1
6442.9819	6442.98815	0.003	2	-0.00625	2
6443.0363	6443.03584	0.00084	1	0.00046	6
6443.069	6443.06953	0.0009	2	-0.00053	5
6443.2383	6443.23894	0	3		1
6443.4542	6443.45425	0.00033	1	-0.00005	5
6443.4776	6443.47743	0	3		1
6443.5033	6443.50174	0.00043	2	0.00156	4
6443.614	6443.61392	0.0004	1	0.00008	5
6443.7918	6443.7925	0	3		1
6443.8514	6443.85203	0.00083	1	-0.00063	4
6443.8909	6443.8917	0.00068	1	-0.0008	6
6443.9409	6443.94364	0.00224	2	-0.00274	6
6443.9807	6443.98096	0.00097	1	-0.00026	4
6444.0202	6444.02095	0	3		1
6444.113	6444.1144	0.00094	1	-0.0014	5
6444.2001	6444.21022	0.00053	3		3
6444.2402	6444.24123	0.00002	3		2
6444.2585	6444.26148	0.00098	2	-0.00298	3

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6444.4963	6444.50049	0.00221	2	-0.00419	3
6444.6265	6444.62896	0.00232	2	-0.00246	5
6444.7288	6444.72864	0.00095	2	0.00016	3
6444.8907	6444.8926	0.00256	2	-0.0019	2
6444.9203	6444.92454	0.00284	2	-0.00424	4
6444.9534	6444.95532	0.00225	3		5
6445.0221	6445.02064	0.00183	1	0.00146	5
6445.0702	6445.06861	0.00085	3		2
6445.1866	6445.18723	0.00066	3		3
6445.2207	6445.2223	0.00185	2	-0.0016	5
6445.2633	6445.26122	0.00102	3		3
6445.358	6445.358	0	1	0	4
6445.3741	6445.37402	0	3		1
6445.5044	6445.50832	0.00344	3		3
6445.6151	6445.61958	0.00427	3		2
6445.9228	6445.91739	0.00296	1	0.00541	5
6446.1921	6446.19072	0.0006	2	0.00138	4
6446.2347	6446.2347	0	1	0	4
6446.3592	6446.35964	0.00147	1	-0.00044	4
6446.5695	6446.56977	0.00081	2	-0.00027	4
6446.6399	6446.6383	0.00144	2	0.0016	3
6446.6831	6446.68292	0	2	0.00018	1
6446.8257	6446.82788	0.00245	2	-0.00218	5
6446.8775	6446.87714	0	3		1
6447.0098	6447.0098	0	1	0	4
6447.0902	6447.0908	0.0006	2	-0.0006	4
6447.317	6447.3166	0	3		1
6447.3447	6447.34439	0.00087	2	0.00031	4
6447.3671	6447.36672	0.00071	2	0.00038	4
6447.4998	6447.50186	0.00228	2	-0.00206	4
6447.6532	6447.65317	0.00006	1	0.00003	5
6448.2866	6448.28681	0.00108	2	-0.00021	5
6448.3392	6448.33951	0.00132	2	-0.00031	4
6448.4241	6448.42327	0.00062	3		3
6448.4616	6448.46168	0.00021	2	-0.00008	3
6448.5364	6448.53665	0.00046	1	-0.00025	5
6448.7593	6448.76004	0.00049	2	-0.00074	2
6448.772	6448.77008	0.00278	2	0.00192	5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6448.8189	6448.81834	0.00073	1	0.00056	4
6448.8793	6448.87883	0.00004	2	0.00047	2
6449.0593	6449.05935	0.0012	2	-0.00005	4
6449.1013	6449.101	0.00101	2	0.0003	4
6449.1389	6449.13917	0.00047	1	-0.00027	4
6449.1746	6449.17508	0.00044	3		2
6449.3149	6449.31302	0.00132	2	0.00188	2
6449.3874	6449.39112	0	3		1
6449.4549	6449.4541	0	3		1
6449.483	6449.48358	0.00125	1	-0.00058	4
6449.5419	6449.54181	0.00025	1	0.00009	3
6449.7191	6449.71836	0.00169	3		4
6449.7916	6449.79259	0.00109	2	-0.00099	4
6449.8324	6449.83358	0.00057	2	-0.00118	2
6449.899	6449.89729	0.00177	2	0.00171	5
6450.0057	6450.0053	0	3		1
6450.1165	6450.1157	0.00106	2	0.0008	6
6450.2035	6450.20256	0.00175	2	0.00094	5
6450.2577	6450.2577	0	1	0	5
6450.2913	6450.28771	0.0014	2	0.00359	6
6450.4345	6450.43378	0.00129	2	0.00072	5
6450.4845	6450.48467	0	3		1
6450.5677	6450.56749	0.00042	2	0.00021	6
6450.5877	6450.58837	0.00065	2	-0.00067	6
6450.6235	6450.62347	0.00128	2	0.00003	3
6450.6896	6450.68941	0.00129	2	0.00019	5
6450.8116	6450.81276	0.0014	1	-0.00116	5
6450.8545	6450.85559	0.00055	2	-0.00109	2
6450.8993	6450.90097	0.00124	2	-0.00167	5
6450.9215	6450.92254	0.00116	2	-0.00104	5
6450.9957	6450.99563	0.0003	1	0.00007	6
6451.1864	6451.18718	0.00081	2	-0.00078	5
6451.311	6451.31337	0.00072	2	-0.00237	4
6451.4329	6451.43298	0.00138	1	-0.00008	5
6451.4431	6451.44179	0.00097	3		2
6451.4919	6451.49354	0.00179	2	-0.00164	4
6451.5935	6451.59496	0.0013	1	-0.00146	5
6451.6483	6451.64645	0.00134	2	0.00185	5



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6451.7239	6451.72531	0.00107	2	-0.00141	3
6451.8277	6451.82821	0.00129	2	-0.00051	4
6451.8653	6451.86685	0.00164	2	-0.00155	4
6451.9741	6451.97448	0.00066	1	-0.00038	5
6452.0567	6452.05668	0	3		1
6452.0711	6452.07075	0.00104	1	0.00035	5
6452.088	6452.08642	0	3		1
6452.2102	6452.20937	0.00047	2	0.00083	3
6452.368	6452.36732	0.00121	2	0.00068	4
6452.5203	6452.51972	0.00055	3		4
6452.6354	6452.63579	0.00091	3		5
6452.7093	6452.70973	0.00105	3		2
6452.8136	6452.8136	0	1	0	5
6452.8606	6452.86269	0.00064	2	-0.00209	5
6452.8925	6452.89151	0.00027	3		3
6453.0819	6453.08127	0.00137	2	0.00063	3
6453.2487	6453.24679	0.00155	3		3
6453.3724	6453.36837	0.00275	2	0.00403	4
6453.4475	6453.44585	0.00174	3		4
6453.5079	6453.50727	0.00052	2	0.00063	4
6453.535	6453.535	0	1	0	4
6453.5854	6453.58526	0.0007	3		2
6453.7647	6453.76478	0.00062	1	-0.00008	3
6453.9092	6453.90885	0.00231	2	0.00035	3
6453.9324	6453.93168	0.00149	3		2
6454.0274	6454.02599	0.00141	1	0.00141	2
6454.039	6454.0347	0.00359	3		2
6454.9097	6454.9097	0	1	0	4
6454.936	6454.93603	0	3		1
6455.1308	6455.13019	0.00092	2	0.00061	4
6455.2356	6455.23494	0.00095	1	0.00066	4
6455.5238	6455.52324	0.00072	2	0.00056	4
6455.6718	6455.66985	0.00075	2	0.00195	4
6455.6886	6455.68847	0.00054	2	0.00013	4
6455.7212	6455.71923	0.00063	2	0.00197	4
6455.7388	6455.738	0.00079	2	0.0008	4
6455.7739	6455.77341	0.00242	2	0.00049	3
6455.7844	6455.78386	0	3		1

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6455.833	6455.83201	0.00124	1	0.00099	4
6455.8588	6455.85389	0.00131	2	0.00491	4
6455.8781	6455.87701	0.00126	3		4
6455.9515	6455.95168	0.00051	2	-0.00018	4
6456.0738	6456.0736	0.00067	1	0.0002	5
6456.1595	6456.15906	0.00127	2	0.00044	5
6456.2484	6456.24824	0.00114	2	0.00016	5
6456.355	6456.35329	0.00062	2	0.00171	3
6456.4031	6456.40228	0.00057	1	0.00082	4
6456.502	6456.50239	0.0005	2	-0.00039	2
6456.6137	6456.61442	0	2	-0.00072	1
6456.7298	6456.72974	0.0005	2	0.00006	5
6456.7668	6456.7668	0	1	0	5
6456.7794	6456.78612	0	3		1
6456.9658	6456.96665	0.00054	2	-0.00085	6
6456.9909	6456.99078	0.00042	2	0.00012	6
6457.2037	6457.20436	0.00075	1	-0.00066	4
6457.3629	6457.36089	0.00152	2	0.00201	4
6457.4308	6457.43142	0.00127	1	-0.00062	5
6457.4663	6457.4699	0.00181	2	-0.0036	5
6457.4828	6457.48644	0.00129	2	-0.00364	5
6457.5344	6457.53558	0.00098	1	-0.00118	4
6457.5693	6457.56831	0.00128	2	0.00099	5
6457.7961	6457.7959	0.00037	2	0.0002	3
6457.8197	6457.81835	0.00082	2	0.00135	4
6457.8572	6457.8568	0	3		1
6457.9505	6457.95016	0.0004	2	0.00034	4
6458.1195	6458.11964	0.00079	1	-0.00014	5
6458.1851	6458.18615	0.00135	2	-0.00105	4
6458.2606	6458.26016	0.00037	1	0.00044	5
6458.2956	6458.29847	0.00116	3		6
6458.5358	6458.53578	0.00099	3		4
6458.6096	6458.60994	0.00035	2	-0.00034	4
6458.6499	6458.65126	0	3		1
6458.7328	6458.73378	0.00076	2	-0.00098	3
6458.7489	6458.75418	0	2	-0.00528	1
6458.7679	6458.76922	0.00279	2	-0.00132	3
6458.7945	6458.79405	0.00077	1	0.00045	4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6458.9333	6458.93317	0.00086	2	0.00013	4
6459.1519	6459.15344	0.0001	2	-0.00154	2
6459.268	6459.26524	0.00088	2	0.00276	4
6459.2907	6459.29069	0.00043	1	0.00001	4
6459.4636	6459.46368	0.00019	1	-0.00008	6
6459.5038	6459.50063	0.00204	2	0.00317	6
6459.6643	6459.66323	0.00075	2	0.00107	5
6459.7211	6459.72066	0.00034	2	0.00044	2
6459.7879	6459.78838	0.00073	1	-0.00048	5
6459.9167	6459.91579	0.00168	2	0.00091	5
6459.9675	6459.96727	0.00077	2	0.00023	6
6460.0308	6460.03257	0	3		1
6460.1199	6460.12021	0.0015	2	-0.00031	5
6460.1668	6460.16575	0.00077	1	0.00105	4
6460.2409	6460.2411	0.00127	2	-0.0002	5
6460.2789	6460.27752	0.00078	2	0.00138	5
6460.4197	6460.4196	0.0011	1	0.0001	4
6460.4334	6460.44037	0	3		1
6460.5478	6460.54783	0.00071	1	-0.00003	4
6460.6096	6460.60977	0.00108	2	-0.00017	5
6460.6644	6460.66359	0.00101	1	0.00081	5
6460.6764	6460.67755	0	3		1
6460.8835	6460.8855	0.00271	2	-0.002	5
6460.9165	6460.9174	0.00244	3		3
6460.9576	6460.95655	0.00262	1	0.00105	4
6460.968	6460.96898	0.00158	3		3
6461.2293	6461.23109	0.00319	3		4
6461.4229	6461.42415	0.00074	3		2
6461.5028	6461.50229	0.00087	1	0.00051	5
6461.5276	6461.52568	0.0014	3		3
6461.5861	6461.58829	0	3		1
6461.6236	6461.61953	0.003	2	0.00407	6
6461.7144	6461.71438	0.00079	2	0.00002	4
6461.7749	6461.77568	0.001	2	-0.00078	4
6461.8561	6461.85615	0.00078	1	-0.00005	4
6461.9405	6461.94022	0.00048	1	0.00028	4
6462.2406	6462.24002	0.00082	2	0.00058	4
6462.3505	6462.34984	0.00041	1	0.00066	4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6462.4367	6462.44001	0.00355	3		2
6462.5646	6462.56532	0.00103	2	-0.00072	4
6462.6104	6462.6092	0.00049	2	0.0012	4
6462.6932	6462.69186	0	3		1
6462.7271	6462.72718	0.0003	1	-0.00008	5
6462.7483	6462.74586	0.00263	2	0.00244	5
6462.9247	6462.92232	0.00172	3		3
6462.9893	6462.98915	0	3		1
6463.0326	6463.0326	0	1	0	4
6463.0749	6463.07583	0.00154	2	-0.00093	4
6463.5454	6463.54385	0	3		1
6463.6717	6463.67085	0.00092	2	0.00085	4
6463.7529	6463.7529	0	1	0	4
6463.7707	6463.76982	0	3		1
6463.8776	6463.87945	0.0026	2	-0.00185	2
6463.9	6463.90157	0.0015	3		4
6464.0135	6464.01358	0.00042	2	-0.00008	5
6464.2201	6464.22036	0.00143	2	-0.00026	4
6464.3942	6464.3942	0	1	0	4
6464.5435	6464.54343	0.00135	2	0.00007	2
6464.849	6464.84894	0.00035	2	0.00006	5
6464.9164	6464.91635	0	3		1
6464.9352	6464.93798	0.0015	2	-0.00278	5
6464.9949	6464.99688	0.00066	2	-0.00198	3
6465.0422	6465.0422	0	1	0	4
6465.0596	6465.05922	0	3		1
6465.0837	6465.08447	0.00091	2	-0.00077	4
6465.1824	6465.18029	0.00292	2	0.00211	4
6465.2943	6465.2952	0.00101	2	-0.0009	4
6465.3248	6465.32533	0	3		1
6465.3371	6465.34333	0.00109	2	-0.00623	5
6465.4044	6465.40663	0	3		1
6465.4222	6465.42493	0.00274	2	-0.00273	5
6465.6239	6465.62402	0.00122	2	-0.00012	5
6465.6555	6465.65409	0.00099	2	0.00141	4
6465.7814	6465.78156	0.00089	2	-0.00016	4
6465.8159	6465.8159	0	1	0	4
6465.8715	6465.87084	0.00048	2	0.00066	4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6465.9335	6465.93339	0.00066	2	0.00011	5
6466.245	6466.24526	0.0006	2	-0.00026	5
6466.2728	6466.27361	0.00102	2	-0.00081	3
6466.3254	6466.3238	0.0009	2	0.0016	3
6466.4218	6466.42269	0.00054	2	-0.00089	4
6466.442	6466.44189	0.00251	2	0.00011	4
6466.4953	6466.49533	0.00072	2	-0.00003	4
6466.5568	6466.55652	0.0003	2	0.00028	5
6466.6223	6466.6223	0	1	0	5
6466.6355	6466.63528	0.00085	2	0.00022	5
6466.6762	6466.67676	0	3		1
6466.8749	6466.87589	0.00019	3		2
6467.0412	6467.04229	0	3		1
6467.0626	6467.063	0.0007	1	-0.0004	4
6467.2096	6467.21095	0.00235	2	-0.00135	4
6467.3347	6467.33214	0.00097	2	0.00256	5
6467.347	6467.34618	0.00284	2	0.00082	5
6467.3679	6467.36997	0.00238	2	-0.00207	5
6467.3961	6467.39603	0.00226	2	0.00007	3
6467.4514	6467.45147	0	3		1
6467.6973	6467.69554	0.00067	2	0.00176	4
6467.732	6467.73216	0.00027	1	-0.00016	4
6467.7801	6467.78136	0	3		1
6467.9466	6467.94713	0.00074	2	-0.00053	5
6467.9969	6467.99771	0	3		1
6468.0079	6468.00988	0.00168	2	-0.00198	5
6468.1662	6468.16555	0.00169	2	0.00065	4
6468.3076	6468.30758	0.00082	1	0.00002	6
6468.3796	6468.37916	0.00104	2	0.00044	4
6468.4145	6468.41443	0.00122	2	0.00007	4
6468.4416	6468.44001	0.00113	2	0.00159	4
6468.4914	6468.48999	0.0009	2	0.00141	4
6468.5249	6468.52438	0.00035	2	0.00052	4
6468.6016	6468.6016	0	1	0	5
6468.7921	6468.79232	0.00051	1	-0.00022	4
6469.1099	6469.11049	0.00116	2	-0.00059	4
6469.355	6469.35525	0.00139	2	-0.00025	5
6469.4405	6469.44159	0.00045	2	-0.00109	4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6469.5032	6469.50346	0.00058	1	-0.00026	4
6469.5801	6469.58019	0	3		1
6469.6123	6469.61212	0.00091	2	0.00018	6
6469.7556	6469.75511	0.00073	1	0.00049	4
6469.7978	6469.79856	0.0008	1	-0.00076	4
6470.1007	6470.10199	0.00045	2	-0.00129	2
6470.2083	6470.20794	0.00041	2	0.00036	4
6470.3231	6470.3231	0	1	0	5
6470.4092	6470.40868	0.00066	2	0.00052	4
6470.5035	6470.50419	0.00079	2	-0.00069	4
6470.6714	6470.67178	0	3		1
6470.6868	6470.68715	0.00067	1	-0.00035	6
6470.7089	6470.70933	0	3		1
6470.7962	6470.79814	0.00197	1	-0.00194	6
6471.0704	6471.07079	0.00046	3		2
6471.1844	6471.18495	0.00088	1	-0.00055	3
6471.3799	6471.37609	0.00059	3		2
6471.5469	6471.54487	0.00129	3		2
6471.5786	6471.57709	0.00143	3		3
6471.6597	6471.66029	0.00036	2	-0.00059	3
6471.755	6471.755	0	1	0	4
6472.2382	6472.23793	0	3		1
6472.3801	6472.3801	0	1	0	4
6472.3986	6472.39862	0	3		1
6472.9532	6472.95705	0.00201	2	-0.00385	3
6473.1407	6473.1438	0.00251	2	-0.0031	4
6473.2988	6473.29991	0.00155	3		2
6473.3911	6473.39412	0.00205	2	-0.00302	4
6473.4231	6473.42184	0.00235	1	0.00126	6
6473.5086	6473.50669	0.00279	2	0.00191	5
6473.6076	6473.60876	0.00254	1	-0.00116	5
6473.6784	6473.67928	0.00267	2	-0.00088	5
6473.7879	6473.78781	0.00304	2	0.00009	5
6473.9089	6473.90972	0.00078	2	-0.00082	4
6473.9967	6473.99727	0.00115	2	-0.00057	4
6474.0824	6474.08218	0.00127	2	0.00022	6
6474.1729	6474.17199	0.00148	2	0.00091	7
6474.22	6474.2201	0.00022	3		2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6474.329	6474.329	0	1	0	5
6474.351	6474.35283	0	3		1
6474.3806	6474.3801	0.00093	2	0.0005	5
6474.4128	6474.4112	0.0011	2	0.0016	2
6474.5261	6474.52598	0.0011	2	0.00012	4
6474.57	6474.57018	0.00085	2	-0.00018	4
6474.6372	6474.63739	0.00048	2	-0.00019	4
6474.7286	6474.72985	0.00059	2	-0.00125	4
6474.8073	6474.80774	0.001	2	-0.00044	7
6474.8593	6474.86091	0.0009	2	-0.00161	2
6475.1965	6475.1965	0	1	0	4
6475.253	6475.25367	0	2	-0.00067	1
6475.3468	6475.3478	0.00042	2	-0.001	4
6475.4834	6475.48327	0.00092	2	0.00013	7
6475.5503	6475.55294	0.00217	2	-0.00264	8
6475.718	6475.71697	0.00113	2	0.00103	6
6475.7614	6475.75964	0.00045	2	0.00176	3
6475.7957	6475.79515	0.00076	2	0.00055	5
6475.8712	6475.8712	0	1	0	5
6476.0089	6476.0089	0.00054	2	0	5
6476.0262	6476.02632	0.00063	2	-0.00012	5
6476.1182	6476.11818	0.00063	2	0.00002	8
6476.232	6476.23226	0.00084	2	-0.00026	3
6476.4047	6476.40715	0.00067	2	-0.00245	7
6476.4586	6476.4586	0	1	0	5
6476.5219	6476.52324	0.00073	2	-0.00134	5
6476.5897	6476.59108	0.00066	2	-0.00138	5
6476.6566	6476.65759	0.00099	2	-0.00099	5
6476.7495	6476.75039	0.00052	2	-0.00089	6
6476.9194	6476.9198	0.00144	2	-0.0004	6
6477.1456	6477.1449	0.00048	2	0.0007	4
6477.3321	6477.32691	0.0014	2	0.00519	4
6477.344	6477.34621	0.00048	2	-0.00221	4
6477.3967	6477.39706	0	3		1
6477.4117	6477.41191	0.00022	1	-0.00021	4
6477.4309	6477.43091	0.00014	1	-0.00001	4
6477.4452	6477.44562	0	3		1
6477.4598	6477.46454	0	3		1

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6477.5734	6477.56927	0.00347	2	0.00413	6
6477.6261	6477.62602	0.00058	2	0.00008	5
6477.683	6477.68385	0.00045	2	-0.00085	5
6477.7135	6477.71383	0.00077	2	-0.00033	5
6477.9111	6477.9111	0	1	0	4
6478.1513	6478.15051	0	3		2
6478.2769	6478.27459	0.00258	2	0.00231	6
6478.5498	6478.5467	0.00185	2	0.0031	4
6478.6263	6478.62531	0.00025	2	0.00099	2
6478.6572	6478.6572	0	1	0	4
6478.6664	6478.66621	0	2	0.00019	1
6478.7193	6478.71577	0.00103	2	0.00353	4
6478.7953	6478.79516	0	3		1
6478.8181	6478.81862	0.00199	2	-0.00052	6
6478.9453	6478.94594	0	3		1
6478.9815	6478.98068	0.00167	2	0.00082	6
6479.1034	6479.1025	0.00078	2	0.0009	5
6479.1302	6479.1327	0.00057	2	-0.0025	4
6479.145	6479.14725	0.00124	2	-0.00225	4
6479.2561	6479.25542	0.00084	1	0.00068	4
6479.2882	6479.28669	0.00073	2	0.00151	4
6479.3285	6479.33169	0	3		1
6479.3575	6479.35747	0.00015	2	0.00003	3
6479.433	6479.43151	0.00054	2	0.00149	4
6479.546	6479.54652	0.00078	2	-0.00052	6
6479.6399	6479.6399	0	1	0	6
6479.7604	6479.76062	0.00114	2	-0.00022	5
6479.7947	6479.79645	0.00164	3		3
6479.9572	6479.95832	0.00053	2	-0.00112	4
6480.1625	6480.16262	0.00093	2	-0.00012	6
6480.2163	6480.21713	0.0008	2	-0.00083	5
6480.2514	6480.25196	0.00073	1	-0.00056	6
6480.3339	6480.33537	0.00197	2	-0.00147	5
6480.3897	6480.39071	0.00089	1	-0.00101	5
6480.4451	6480.45148	0.00243	2	-0.00638	3
6480.6008	6480.60142	0.00158	3		3
6480.6834	6480.68512	0.0008	2	-0.00172	4
6480.8774	6480.87751	0.00169	2	-0.00011	7



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6480.9385	6480.94111	0.00268	2	-0.00261	6
6481.0285	6481.03013	0.0023	1	-0.00163	3
6481.0684	6481.06624	0	2	0.00216	1
6481.3704	6481.3706	0	3		1
6481.3952	6481.39634	0.00116	1	-0.00114	4
6481.409	6481.41239	0.00037	2	-0.00339	4
6481.4847	6481.48772	0.00248	2	-0.00302	4
6481.5637	6481.56566	0.00189	2	-0.00196	5
6481.7523	6481.75534	0.00226	2	-0.00304	4
6481.8029	6481.8029	0	1	0	3
6481.8202	6481.81962	0	3		1
6481.8854	6481.88049	0	3		1
6481.9401	6481.94153	0.00094	2	-0.00143	3
6481.9679	6481.9691	0	3		1
6482.0341	6482.03474	0.00045	2	-0.00064	3
6482.1207	6482.12161	0.00025	2	-0.00091	3
6482.3704	6482.37004	0.00147	2	0.00036	4
6482.3972	6482.39712	0.0012	2	0.00008	4
6482.4367	6482.43662	0.00048	2	0.00008	4
6482.5081	6482.50712	0.0009	2	0.00098	4
6482.5224	6482.52259	0	3		1
6482.6994	6482.6994	0	1	0	4
6482.7191	6482.71949	0.00069	3		3
6482.7738	6482.77219	0	2	0.00161	1
6482.8848	6482.8859	0.00043	2	-0.0011	3
6483.1092	6483.11	0.00059	2	-0.0008	5
6483.1439	6483.144	0.00021	1	-0.0001	5
6483.1729	6483.17263	0	3		1
6483.3155	6483.31595	0.00131	2	-0.00045	4
6483.3348	6483.33512	0	3		1
6483.4873	6483.48738	0.00047	2	-0.00008	4
6483.5868	6483.58805	0.00037	3		2
6483.6868	6483.68683	0.00015	1	-0.00003	6
6483.7065	6483.70548	0.00077	2	0.00102	6
6483.7254	6483.72405	0.00163	3		4
6483.7495	6483.74882	0.00185	3		2
6483.9726	6483.97229	0.00065	2	0.00031	4
6484.1053	6484.10652	0.0004	2	-0.00122	4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6484.2527	6484.25229	0	3		1
6484.3365	6484.33558	0.00059	2	0.00092	4
6484.397	6484.39636	0	3		1
6484.4291	6484.42862	0.00115	1	0.00048	5
6484.6241	6484.62393	0.00109	2	0.00017	4
6484.7145	6484.71426	0.0009	2	0.00024	4
6484.7387	6484.73872	0.00003	1	-0.00002	4
6484.7587	6484.75831	0.0012	2	0.00039	3
6484.8646	6484.86381	0	3		1
6484.9752	6484.97502	0.0006	2	0.00018	6
6485.1123	6485.11216	0	3		1
6485.1421	6485.14202	0.00014	1	0.00008	4
6485.4645	6485.46355	0.00062	2	0.00095	4
6485.5493	6485.55048	0.0008	2	-0.00118	5
6485.5652	6485.56621	0.00065	2	-0.00101	7
6485.6669	6485.66442	0.00164	2	0.00248	6
6485.7632	6485.76365	0.00113	1	-0.00045	5
6485.8283	6485.82812	0	3		1
6485.9832	6485.9832	0	1	0	4
6486.105	6486.10594	0	3		1
6486.5079	6486.50968	0.00124	2	-0.00178	4
6486.5522	6486.5516	0.00015	3		2
6486.6773	6486.6773	0	1	0	4
6486.7168	6486.71617	0.00121	3		4
6486.953	6486.95359	0.00084	2	-0.00059	7
6487.0189	6487.01917	0.001	2	-0.00027	6
6487.0592	6487.05965	0.00125	2	-0.00045	6
6487.2155	6487.2099	0	3		1
6487.2675	6487.26757	0.00068	2	-0.00007	4
6487.3235	6487.32397	0.00131	3		3
6487.3914	6487.39187	0.00103	2	-0.00047	4
6487.4621	6487.4621	0	1	0	4
6487.5326	6487.53226	0.00029	2	0.00034	4
6487.5951	6487.59486	0	3		1
6487.7731	6487.77402	0	2	-0.00092	1
6487.8225	6487.81947	0	2	0.00303	1
6487.8449	6487.84497	0.00091	1	-0.00007	4
6488.0293	6488.03556	0.00103	2	-0.00626	2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6488.0471	6488.04698	0.0002	1	0.00012	4
6488.1799	6488.18488	0.00242	3		2
6488.199	6488.19946	0.00066	2	-0.00046	4
6488.2246	6488.22676	0.00379	3		3
6488.2886	6488.28766	0.00014	2	0.00094	2
6488.3655	6488.36464	0.00206	2	0.00086	6
6488.4533	6488.4533	0.00001	1	0	5
6488.4757	6488.47583	0	3		1
6488.6266	6488.6253	0	2	0.0013	1
6488.8184	6488.81893	0.00097	2	-0.00053	4
6488.8502	6488.84944	0.0013	2	0.00076	4
6488.8765	6488.8772	0.00144	2	-0.0007	5
6488.9803	6488.98142	0	2	-0.00112	1
6489.0636	6489.0634	0.00185	2	0.0002	6
6489.2695	6489.26838	0.00078	2	0.00112	4
6489.3942	6489.3939	0	2	0.0003	1
6489.4759	6489.47572	0.00023	1	0.00018	4
6489.4947	6489.49272	0	3		1
6489.6087	6489.60892	0.00089	2	-0.00022	6
6489.639	6489.63475	0.00157	2	0.00425	4
6489.7062	6489.69642	0	2	0.00978	1
6489.7197	6489.71878	0.00076	2	0.00092	6
6489.7787	6489.7786	0.00022	1	0.0001	6
6489.8429	6489.84403	0.00087	2	-0.00113	4
6490.1889	6490.18931	0.00052	1	-0.00041	4
6490.2771	6490.27932	0.00173	3		2
6490.3029	6490.30431	0.00061	2	-0.00141	7
6490.3248	6490.32581	0	3		1
6490.4224	6490.42233	0.00106	2	0.00007	6
6490.4899	6490.49021	0.00061	1	-0.00031	5
6490.5704	6490.56962	0.00107	1	0.00078	4
6490.5933	6490.59312	0.00128	2	0.00018	4
6490.9658	6490.96511	0.00044	2	0.00069	5
6491.268	6491.26869	0.00067	2	-0.00069	4
6491.3122	6491.30795	0.00216	2	0.00425	3
6491.3518	6491.34894	0.00131	2	0.00286	2
6491.4113	6491.41103	0.00047	1	0.00027	4
6491.4525	6491.45303	0.00067	2	-0.00053	4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6491.5528	6491.5537	0.00046	2	-0.0009	4
6491.6289	6491.62934	0.00118	1	-0.00044	7
6491.6484	6491.64879	0.00057	1	-0.00039	6
6491.8282	6491.82888	0	3		1
6491.927	6491.92694	0.00031	1	0.00006	6
6491.9931	6491.9924	0.00191	2	0.0007	6
6492.0764	6492.07503	0.00083	2	0.00137	6
6492.1646	6492.16379	0.00114	2	0.00081	4
6492.2679	6492.265	0	3		1
6492.3193	6492.31761	0.00045	3		4
6492.3829	6492.38213	0.0003	3		2
6492.435	6492.43484	0.00048	3		5
6492.5421	6492.54137	0.00026	3		4
6492.6424	6492.63994	0	3		1
6492.691	6492.69275	0.00195	3		2
6492.8609	6492.8604	0.00106	1	0.0005	8
6492.938	6492.93829	0.00237	3		3
6493.0723	6493.07003	0.00075	2	0.00227	3
6493.1475	6493.1475	0	1	0	5
6493.2051	6493.20219	0.00209	2	0.00291	4
6493.262	6493.26245	0.00137	2	-0.00045	5
6493.3164	6493.31745	0.00065	3		2
6493.3791	6493.37871	0.00099	2	0.00039	5
6493.4965	6493.49594	0	3		1
6493.626	6493.6274	0.00112	2	-0.0014	4
6494.0109	6494.00838	0.00081	2	0.00252	4
6494.0491	6494.04943	0.00123	1	-0.00033	6
6494.1472	6494.14772	0.00105	1	-0.00052	5
6494.2846	6494.28476	0.00019	2	-0.00016	4
6494.3566	6494.36024	0.00125	2	-0.00364	5
6494.3767	6494.37724	0.00108	2	-0.00054	6
6494.4409	6494.44355	0	3		1
6494.5033	6494.50282	0	2	0.00048	1
6494.5342	6494.53422	0.00114	2	-0.00002	8
6494.558	6494.56121	0.0008	2	-0.00321	6
6494.7892	6494.78854	0.00098	1	0.00066	6
6494.9473	6494.94577	0.00108	3		4
6495.0589	6495.05895	0.00098	2	-0.00005	4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6495.0921	6495.09191	0.00095	2	0.00019	4
6495.2167	6495.218	0	3		1
6495.3809	6495.38072	0.00078	2	0.00018	9
6495.4704	6495.47015	0.00129	3		4
6495.4769	6495.47253	0.00332	2	0.00437	4
6495.4999	6495.49883	0.00391	2	0.00107	5
6495.5433	6495.54381	0.00069	1	-0.00051	9
6495.595	6495.59566	0.00065	2	-0.00066	8
6495.651	6495.64602	0.00345	2	0.00498	5
6495.6747	6495.67462	0.00068	2	0.00008	6
6495.9482	6495.95113	0.00135	2	-0.00293	4
6495.9807	6495.98152	0.00008	2	-0.00082	5
6495.9974	6495.99815	0.00108	2	-0.00075	6
6496.0429	6496.04281	0.00009	1	0.00009	5
6496.1158	6496.11571	0.00048	1	0.00009	10
6496.2427	6496.243	0.00057	2	-0.0003	5
6496.3467	6496.34659	0.00047	2	0.00011	9
6496.5633	6496.56395	0.00087	2	-0.00065	3
6496.6151	6496.61364	0.00244	2	0.00146	3
6496.6339	6496.63414	0.00067	2	-0.00024	5
6496.758	6496.75808	0.00037	1	-0.00008	5
6496.9085	6496.90867	0.00081	2	-0.00017	8
6497.0465	6497.04712	0.00192	2	-0.00062	8
6497.0608	6497.06332	0.00118	3		6
6497.287	6497.28646	0.0005	1	0.00054	9
6497.3616	6497.36086	0.00075	2	0.00074	7
6497.436	6497.436	0	1	0	5
6497.5242	6497.52398	0.00011	2	0.00022	4
6497.6788	6497.67999	0.00062	2	-0.00119	4
6497.7503	6497.75011	0.00056	2	0.00019	6
6498.1922	6498.19199	0.00033	2	0.00021	6
6498.3209	6498.3209	0	1	0	5
6498.3346	6498.33432	0.00019	2	0.00028	4
6498.527	6498.52714	0.00031	2	-0.00014	6
6498.644	6498.64501	0.00042	2	-0.00101	3
6498.891	6498.8928	0.00016	2	-0.0018	3
6498.9073	6498.90985	0.00048	2	-0.00255	3
6499.0422	6499.04272	0.00049	2	-0.00052	5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6499.0953	6499.09584	0.00045	2	-0.00054	2
6499.118	6499.11762	0	2	0.00038	1
6499.1894	6499.18929	0.00023	1	0.00011	5
6499.2992	6499.29948	0.00051	2	-0.00028	5
6499.3296	6499.32865	0.00036	2	0.00095	4
6499.502	6499.5023	0.00037	1	-0.0003	9
6499.5834	6499.5831	0	3		1
6499.6507	6499.6515	0.00046	1	-0.0008	8
6499.9027	6499.90655	0.00049	2	-0.00385	4
6500.1354	6500.13364	0	2	0.00176	1
6500.1608	6500.16268	0	2	-0.00188	1
6500.2233	6500.22372	0	3		1
6500.4544	6500.45541	0.00106	2	-0.00101	5
6500.5244	6500.52518	0	3		1
6500.6281	6500.629	0	3		1
6500.6562	6500.65509	0.00019	3		3
6500.8361	6500.83614	0.00039	2	-0.00004	3
6500.9402	6500.93987	0.00051	1	0.00033	4
6500.9577	6500.95898	0	3		1
6501.1894	6501.18905	0.00076	1	0.00035	5
6501.3981	6501.39717	0.00082	1	0.00093	6
6501.4812	6501.48382	0.00081	3		4
6501.5988	6501.59888	0.00062	2	-0.00008	4
6501.6355	6501.63612	0.00037	2	-0.00062	3
6501.6812	6501.68014	0.0001	2	0.00106	2
6501.7286	6501.72726	0.00038	2	0.00134	3
6501.9768	6501.97618	0.00041	3		5
6502.0752	6502.0751	0.00038	1	0.0001	8
6502.1301	6502.12993	0.00059	3		6
6502.1765	6502.17593	0.00091	2	0.00057	5
6502.33	6502.3314	0	3		1
6502.3469	6502.34878	0.00079	2	-0.00188	7
6502.3903	6502.38979	0.00049	3		4
6502.5009	6502.50067	0.00026	2	0.00023	5
6502.5758	6502.57551	0.00024	1	0.00029	5
6502.6558	6502.65521	0.00077	2	0.00059	4
6502.6882	6502.68829	0.00015	1	-0.00009	5
6502.7388	6502.73808	0.00035	2	0.00072	4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6502.7724	6502.77218	0.00069	2	0.00022	6
6502.8582	6502.85784	0.00062	1	0.00036	8
6503.0991	6503.09952	0.00073	2	-0.00042	8
6503.1309	6503.13142	0	3		1
6503.4145	6503.41368	0.00025	2	0.00082	2
6503.4266	6503.42571	0.00192	2	0.00089	3
6503.6482	6503.64692	0.00233	2	0.00128	5
6503.6752	6503.67483	0.00013	2	0.00037	8
6503.732	6503.732	0	1	0	10
6503.9935	6503.99381	0.00023	2	-0.00031	10
6504.2131	6504.21402	0.00015	2	-0.00092	4
6504.2834	6504.28595	0.00062	2	-0.00255	4
6504.3947	6504.3963	0.00016	2	-0.0016	4
6504.4325	6504.43272	0.00008	2	-0.00022	3
6504.5026	6504.50348	0.00011	2	-0.00088	4
6504.6143	6504.61419	0.00084	2	0.00011	8
6504.6315	6504.6319	0.00074	2	-0.0004	10
6504.7017	6504.70203	0.00072	1	-0.00033	10
6504.9367	6504.93787	0.00049	2	-0.00117	4
6505.0552	6505.05215	0	2	0.00305	1
6505.2673	6505.2676	0.00034	1	-0.0003	6
6505.5202	6505.52054	0.00058	2	-0.00034	5
6505.5953	6505.59624	0.00096	3		6
6505.6477	6505.64844	0.00063	2	-0.00074	7
6505.7367	6505.73665	0.00098	2	0.00005	7
6505.7729	6505.77419	0	2	-0.00129	1
6505.9007	6505.89967	0.00161	1	0.00103	4
6505.9272	6505.92791	0.00122	1	-0.00071	4
6506.0748	6506.07531	0.00046	2	-0.00051	3
6506.1249	6506.12566	0.00077	2	-0.00076	4
6506.1843	6506.18574	0.00073	2	-0.00144	3
6506.2538	6506.25429	0.00099	1	-0.00049	4
6506.428	6506.42582	0.00383	2	0.00218	3
6506.4511	6506.45056	0.00311	2	0.00054	7
6506.6602	6506.65642	0.00045	3		3
6506.7217	6506.71662	0	2	0.00508	1
6506.8059	6506.80496	0.00415	2	0.00094	3
6506.9561	6506.95402	0.00341	2	0.00208	5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6507.0052	6507.00066	0	2	0.00454	1
6507.0737	6507.06792	0.00581	2	0.00578	6
6507.1562	6507.157	0.004	2	-0.0008	10
6507.1755	6507.17839	0.00389	2	-0.00289	8
6507.2188	6507.22033	0.0038	2	-0.00153	6
6507.377	6507.377	0	1	0	5
6507.385	6507.385	0	1	0	5
6507.422	6507.42222	0.00508	2	-0.00022	8
6507.4685	6507.4678	0.0037	2	0.0007	2
6507.57	6507.57236	0.00379	2	-0.00236	3
6507.7135	6507.71869	0	2	-0.00519	1
6507.7321	6507.73561	0.0017	2	-0.00351	2
6507.8922	6507.8958	0.00356	2	-0.0036	5
6507.9549	6507.9613	0.00078	2	-0.0064	4
6508.0098	6508.01329	0.00302	2	-0.00349	7
6508.2041	6508.20616	0	3		1
6508.301	6508.30329	0.00303	1	-0.00229	8
6508.3437	6508.34542	0.00271	2	-0.00172	5
6508.5768	6508.57704	0.00024	2	-0.00024	5
6508.6557	6508.65583	0.00012	1	-0.00013	5
6508.7138	6508.71444	0.00044	2	-0.00064	5
6508.7478	6508.74627	0.00076	2	0.00153	3
6508.8288	6508.82942	0.00108	2	-0.00062	9
6508.8498	6508.84993	0.00092	1	-0.00013	10
6508.8864	6508.88536	0.00181	2	0.00104	3
6509.0177	6509.01744	0.0011	2	0.00026	9
6509.1313	6509.13185	0	2	-0.00055	1
6509.173	6509.17255	0.00065	2	0.00045	2
6509.2834	6509.28154	0.00001	2	0.00186	2
6509.4317	6509.43089	0.00071	2	0.00081	5
6509.5145	6509.51358	0.00113	2	0.00092	3
6509.5514	6509.55093	0.00063	2	0.00047	4
6509.6125	6509.61041	0	3		1
6510.0064	6510.00587	0.00047	1	0.00053	9
6510.0249	6510.02476	0.00031	1	0.00014	9
6510.0954	6510.09552	0.00026	1	-0.00012	6
6510.2246	6510.22483	0.00032	2	-0.00023	5
6510.51	6510.51049	0	3		1



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6510.5523	6510.55307	0.00053	2	-0.00077	4
6510.7148	6510.71483	0	2	-0.00003	1
6510.9926	6510.99279	0.00043	1	-0.00019	6
6511.5091	6511.50733	0.00214	2	0.00177	8
6511.5225	6511.51632	0	2	0.00618	1
6511.835	6511.83495	0.00075	2	0.00005	5
6512.0509	6512.04929	0.00055	3		2
6512.0761	6512.07587	0.00008	2	0.00023	3
6512.1105	6512.10693	0.00039	2	0.00357	5
6512.1238	6512.12368	0.00005	3		2
6512.2581	6512.25752	0.00045	2	0.00058	8
6512.3185	6512.31768	0.00027	2	0.00082	4
6512.4285	6512.42784	0.00017	2	0.00066	6
6512.5252	6512.5252	0	1	0	10
6512.8398	6512.83314	0.00279	2	0.00666	4
6512.8587	6512.86116	0.0011	3		3
6512.8978	6512.89674	0.0003	2	0.00106	2
6512.9289	6512.92887	0.00019	2	0.00003	4
6512.9707	6512.97102	0	2	-0.00032	2
6513.0147	6513.01558	0.00046	2	-0.00088	3
6513.209	6513.20944	0.00077	2	-0.00044	8
6513.3299	6513.32974	0.00088	2	0.00016	7
6513.4169	6513.416	0.00097	2	0.0009	3
6513.5413	6513.54036	0.00041	2	0.00094	8
6513.6557	6513.65534	0.00041	2	0.00036	10
6513.7231	6513.72274	0.00015	2	0.00036	2
6513.7725	6513.77224	0.00033	1	0.00026	10
6513.8352	6513.83587	0.0005	2	-0.00067	4
6513.8694	6513.86906	0.00008	2	0.00034	3
6513.9324	6513.93224	0.00049	2	0.00016	13
6514.0272	6514.02858	0.00022	2	-0.00138	6
6514.073	6514.07299	0.00036	1	0.00001	15
6514.1288	6514.12832	0.00023	2	0.00048	7
6514.2036	6514.20534	0.00084	2	-0.00174	12
6514.2469	6514.24742	0.00041	2	-0.00052	15
6514.4141	6514.41444	0.00036	1	-0.00034	10
6514.5245	6514.5247	0.00051	2	-0.0002	4
6514.5853	6514.57809	0.0003	2	0.00721	2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6514.6029	6514.60312	0.0006	3		4
6514.6286	6514.62925	0.00034	2	-0.00065	5
6514.7434	6514.74318	0.00107	2	0.00022	3
6514.8645	6514.86429	0.00199	2	0.00021	8
6514.9624	6514.96734	0.0003	2	-0.00494	2
6514.9817	6514.98166	0.00084	2	0.00004	9
6515.7036	6515.70338	0.00064	2	0.00022	8
6515.7472	6515.74695	0.00059	1	0.00025	9
6515.8681	6515.86785	0.00048	1	0.00025	8
6515.9619	6515.96185	0.00114	2	0.00005	7
6515.9781	6515.97978	0.00045	2	-0.00168	2
6516.0547	6516.05449	0.00068	2	0.00021	2
6516.2014	6516.20835	0	2	-0.00695	1
6516.4922	6516.49128	0.00215	1	0.00092	8
6516.5066	6516.50696	0.0005	1	-0.00036	7
6516.5608	6516.56234	0.00077	2	-0.00154	6
6516.6192	6516.61978	0	2	-0.00058	1
6516.7374	6516.74157	0.00172	2	-0.00417	7
6516.8517	6516.85362	0.00083	2	-0.00192	5
6516.9365	6516.93867	0.0012	2	-0.00217	6
6516.9777	6516.9777	0	1	0	5
6517.0195	6517.02093	0.00086	2	-0.00143	4
6517.228	6517.2299	0	3		1
6517.3427	6517.34584	0.00157	2	-0.00314	3
6517.3735	6517.37624	0.00168	2	-0.00274	3
6517.4277	6517.43169	0.00181	2	-0.00399	6
6517.4881	6517.48976	0.00215	2	-0.00166	2
6517.5799	6517.58252	0.00177	2	-0.00262	8
6517.6175	6517.61818	0.00263	2	-0.00068	5
6517.7324	6517.73351	0.00151	1	-0.00111	8
6517.8179	6517.81653	0.0004	2	0.00137	3
6517.9146	6517.91446	0.00005	2	0.00014	2
6518.0403	6518.04161	0.00005	2	-0.00131	2
6518.1329	6518.1332	0.00004	2	-0.0003	4
6518.2511	6518.25197	0.00066	2	-0.00087	7
6518.3365	6518.33581	0.00158	2	0.00069	4
6518.3935	6518.3933	0.00089	2	0.0002	8
6518.5956	6518.59922	0.00125	2	-0.00362	2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6518.7069	6518.70655	0.00085	2	0.00035	2
6518.7401	6518.73904	0	2	0.00106	2
6518.7814	6518.78064	0.00015	3		2
6518.921	6518.92151	0.0003	2	-0.00051	4
6519.0473	6519.04766	0.00037	1	-0.00036	6
6519.0813	6519.08205	0.00085	2	-0.00075	7
6519.1346	6519.13435	0.00065	3		2
6519.1692	6519.16945	0.00031	2	-0.00025	6
6519.1926	6519.19235	0.0003	2	0.00025	8
6519.2201	6519.22013	0.00038	2	-0.00003	8
6519.2598	6519.26035	0	3		1
6519.3019	6519.30203	0.00019	3		5
6519.3708	6519.37087	0.00029	1	-0.00007	9
6519.5126	6519.51346	0.00034	2	-0.00086	6
6519.6535	6519.65382	0.00069	3		2
6519.7022	6519.70358	0.00058	2	-0.00138	3
6519.7619	6519.7628	0.00026	2	-0.0009	2
6519.9141	6519.91339	0.00093	3		2
6519.9267	6519.93296	0.00141	2	-0.00626	7
6519.9702	6519.97021	0.00128	2	-0.00001	6
6520.0504	6520.04649	0.00257	2	0.00391	8
6520.4714	6520.47058	0.00122	2	0.00082	4
6520.4975	6520.50125	0.00471	3		2
6520.5207	6520.51977	0.00365	2	0.00093	4
6520.6351	6520.6351	0.0003	2	0	2
6520.6583	6520.65778	0.00015	2	0.00052	2
6520.6839	6520.6832	0.00029	2	0.0007	5
6520.8217	6520.82279	0.0011	2	-0.00109	7
6520.9495	6520.94907	0	3		1
6521.007	6521.00677	0.00042	2	0.00023	8
6521.0319	6521.0311	0.00048	2	0.0008	8
6521.0593	6521.05902	0.00043	1	0.00028	10
6521.1543	6521.15401	0.0004	2	0.00029	2
6521.2167	6521.21748	0.00073	2	-0.00078	5
6521.2609	6521.26029	0.00058	2	0.00061	5
6521.3531	6521.35232	0.00078	2	0.00078	4
6521.495	6521.49352	0.00119	2	0.00148	2
6521.5183	6521.5185	0.00038	2	-0.0002	5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6521.7152	6521.71399	0.00042	2	0.00121	4
6521.795	6521.79529	0.00034	2	-0.00029	8
6521.8777	6521.87757	0.00035	2	0.00013	10
6521.9711	6521.9711	0	1	0	8
6522.0234	6522.02285	0.00036	2	0.00055	7
6522.1886	6522.18914	0.00043	2	-0.00054	5
6522.2337	6522.23399	0.00023	2	-0.00029	5
6522.3605	6522.36121	0.00015	2	-0.00071	4
6522.4904	6522.49065	0.0022	2	-0.00025	7
6522.7741	6522.77369	0.00085	2	0.00041	4
6522.9597	6522.95996	0.00057	2	-0.00026	3
6523.0294	6523.03171	0.00213	2	-0.00231	4
6523.2084	6523.20819	0.00016	1	0.00021	6
6523.3096	6523.3096	0.00016	1	0	7
6523.4762	6523.47598	0.00035	2	0.00022	9
6523.5548	6523.555	0.00038	2	-0.0002	4
6523.6067	6523.60488	0.00008	2	0.00182	2
6523.6554	6523.65713	0	3		1
6523.693	6523.69324	0.00033	2	-0.00024	8
6523.9486	6523.94871	0.00022	1	-0.00011	5
6523.9682	6523.96819	0.00018	2	0.00001	5
6524.0212	6524.02126	0.00036	2	-0.00006	5
6524.2338	6524.23408	0.00065	2	-0.00028	3
6524.3059	6524.30591	0.00085	2	-0.00001	6
6524.3613	6524.36111	0.00104	2	0.00019	7
6524.3991	6524.39433	0.00264	2	0.00477	7
6524.4994	6524.50036	0.00084	2	-0.00096	4
6524.5323	6524.53289	0.00138	2	-0.00059	6
6524.7698	6524.76928	0.0001	2	0.00052	2
6524.8384	6524.83511	0.00035	2	0.00329	2
6524.8909	6524.89047	0.00042	2	0.00043	4
6524.9373	6524.9481	0.00311	2	-0.0108	2
6524.9553	6524.95462	0.00179	1	0.00068	5
6525.0526	6525.05147	0.00225	2	0.00113	4
6525.1223	6525.12064	0.00217	1	0.00166	8
6525.2285	6525.22907	0.00026	2	-0.00057	4
6525.2944	6525.295	0.0007	2	-0.0006	2
6525.3196	6525.31891	0.0021	3		6

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6525.3534	6525.35691	0.00299	2	-0.00351	8
6525.3729	6525.37577	0.00259	1	-0.00287	9
6525.3942	6525.39629	0.00143	3		3
6525.7778	6525.77897	0	3		1
6525.8125	6525.81129	0.00251	2	0.00121	5
6525.8989	6525.89903	0.00185	2	-0.00013	5
6525.9442	6525.94504	0.0007	2	-0.00084	5
6526.0626	6526.0623	0.00183	1	0.0003	6
6526.124	6526.1225	0.0017	2	0.0015	3
6526.2643	6526.26489	0.00005	3		2
6526.3972	6526.39659	0.00101	2	0.00061	3
6526.4285	6526.42893	0	3		1
6526.466	6526.46682	0.00005	2	-0.00082	2
6526.4987	6526.49903	0.00033	1	-0.00033	4
6526.5301	6526.53085	0	3		1
6526.6663	6526.66856	0.00042	2	-0.00226	3
6526.6959	6526.69467	0.00033	2	0.00123	4
6526.7416	6526.74128	0.00171	2	0.00032	4
6526.7968	6526.79677	0.00082	1	0.00003	6
6526.8776	6526.87777	0.00099	3		8
6526.9343	6526.93399	0.00122	2	0.00031	8
6526.9633	6526.96223	0.00101	3		3
6527.0029	6527.003	0.00105	2	-0.0001	8
6527.1423	6527.14252	0.00115	2	-0.00022	5
6527.3226	6527.32147	0.00083	2	0.00113	3
6527.6259	6527.62727	0.00053	2	-0.00137	3
6527.7663	6527.7666	0.00167	2	-0.0003	3
6527.8171	6527.8187	0	3		1
6527.8523	6527.84906	0.00106	2	0.00324	4
6527.8721	6527.87232	0.0013	1	-0.00022	9
6527.9243	6527.92641	0.00086	2	-0.00211	6
6528.0249	6528.02455	0.00058	2	0.00035	3
6528.0588	6528.05842	0.0008	2	0.00038	2
6528.2357	6528.23653	0	2	-0.00083	1
6528.4877	6528.48975	0.00192	2	-0.00205	2
6528.7732	6528.7732	0	1	0	4
6528.7974	6528.79769	0	3		1
6528.8998	6528.90136	0.00155	1	-0.00156	8

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6529.1901	6529.19104	0.00146	1	-0.00094	6
6529.2131	6529.21203	0.00161	2	0.00107	6
6530.3522	6530.35361	0.00179	3		5
6530.3871	6530.38658	0	3		1
6530.5448	6530.54447	0	3		1
6530.6009	6530.60069	0.00059	2	0.00021	4
6530.705	6530.70386	0.00026	2	0.00114	3
6530.7221	6530.72176	0.00038	1	0.00034	4
6530.7581	6530.75863	0.00086	2	-0.00053	3
6530.8616	6530.86243	0.00066	2	-0.00083	4
6530.8989	6530.89677	0.00262	2	0.00213	4
6531.0542	6531.05253	0.00231	2	0.00167	6
6531.0989	6531.09857	0.00077	2	0.00033	6
6531.1489	6531.14936	0.00237	2	-0.00046	5
6531.1703	6531.17015	0.00069	1	0.00015	8
6531.3384	6531.33849	0.00111	2	-0.00009	7
6531.4154	6531.41479	0.00094	2	0.00061	5
6531.5073	6531.50776	0.00042	2	-0.00046	3
6531.6307	6531.631	0	2	-0.0003	1
6531.6833	6531.68406	0	3		1
6531.8005	6531.80024	0.00019	1	0.00026	3
6531.8456	6531.84655	0	3		1
6531.9195	6531.91945	0.00044	1	0.00005	5
6531.9649	6531.96483	0.00072	2	0.00007	7
6532.075	6532.07577	0.0013	2	-0.00077	5
6532.0943	6532.09214	0.0014	3		2
6532.179	6532.18035	0	3		1
6532.2059	6532.20584	0.00069	1	0.00006	8
6532.2493	6532.25198	0.0021	2	-0.00268	4
6532.6122	6532.60987	0.00263	2	0.00233	4
6532.6404	6532.6399	0.0002	2	0.0005	3
6532.6747	6532.67475	0.00038	2	-0.00005	2
6532.7386	6532.73824	0.00048	1	0.00036	8
6532.8354	6532.8363	0.0009	2	-0.0009	8
6532.9307	6532.93052	0.00063	2	0.00018	5
6532.9661	6532.96546	0.00044	2	0.00064	4
6533.0267	6533.02574	0	2	0.00096	1
6533.0724	6533.07481	0.00197	2	-0.00241	8

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6533.3446	6533.34448	0.00011	2	0.00012	5
6533.3861	6533.38596	0.00015	1	0.00014	6
6533.4331	6533.43193	0.00026	2	0.00117	6
6533.4615	6533.46155	0.00011	1	-0.00005	6
6533.5968	6533.59423	0.00005	2	0.00257	2
6533.7201	6533.71982	0	2	0.00028	2
6533.8138	6533.81362	0.00063	2	0.00018	8
6533.8728	6533.87279	0.00062	2	0.00001	5
6534.039	6534.03993	0.00061	2	-0.00093	3
6534.122	6534.12199	0.0001	2	0.00001	2
6534.1767	6534.17606	0.00007	2	0.00064	4
6534.2059	6534.20524	0.00005	2	0.00066	2
6534.256	6534.25535	0.0004	2	0.00065	2
6534.5523	6534.55242	0.00037	1	-0.00012	11
6534.6179	6534.61874	0.00077	2	-0.00084	9
6534.6623	6534.66272	0.0002	2	-0.00042	9
6534.9376	6534.93698	0.00134	2	0.00062	5
6535.1878	6535.18765	0.00103	2	0.00015	10
6535.3152	6535.31533	0.00117	1	-0.00013	12
6535.3893	6535.38995	0.00141	2	-0.00065	6
6535.4033	6535.40216	0.00183	2	0.00114	12
6535.5912	6535.58869	0.00281	2	0.00251	5
6535.6102	6535.60576	0.00307	2	0.00444	4
6535.7815	6535.78201	0.00193	2	-0.00051	5
6535.9739	6535.97434	0.0007	1	-0.00044	8
6535.9977	6535.9966	0.00056	2	0.0011	8
6536.0269	6536.02537	0.00038	2	0.00153	5
6536.105	6536.1049	0.00035	2	0.0001	5
6536.1465	6536.14667	0.00019	2	-0.00017	5
6536.1967	6536.19602	0.00043	2	0.00068	8
6536.2553	6536.25568	0.00018	2	-0.00038	2
6536.3791	6536.37861	0.0004	1	0.00049	10
6536.593	6536.593	0	1	0	8
6536.7143	6536.71111	0.00552	2	0.00319	3
6536.7508	6536.75101	0.00017	2	-0.00021	5
6536.8758	6536.87635	0.0005	2	-0.00055	6
6537.0219	6537.02203	0.00065	2	-0.00013	6
6537.1024	6537.10377	0.00159	2	-0.00137	7

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6537.116	6537.11636	0.00157	2	-0.00036	6
6537.1461	6537.14476	0.00248	2	0.00134	3
6537.4635	6537.46174	0	2	0.00176	1
6537.4895	6537.48917	0.00049	2	0.00033	6
6537.6806	6537.6806	0	1	0	5
6537.8037	6537.80379	0.00035	2	-0.00009	2
6537.9956	6537.99573	0.0004	2	-0.00013	8
6538.0619	6538.06189	0.00056	2	0.00001	8
6538.0945	6538.09408	0	3		1
6538.2083	6538.20801	0	3		1
6538.3592	6538.35909	0	3		1
6538.411	6538.41065	0.00014	2	0.00035	4
6538.5055	6538.50539	0.00031	2	0.00011	3
6538.541	6538.541	0	1	0	5
6538.5836	6538.5837	0.00023	2	-0.0001	4
6538.71	6538.71077	0.00066	2	-0.00077	5
6538.8138	6538.81451	0.00066	2	-0.00071	7
6538.8366	6538.84164	0.00081	2	-0.00504	8
6538.8566	6538.8569	0.00076	2	-0.0003	8
6538.9163	6538.91631	0.00073	2	-0.00001	2
6538.9869	6538.98744	0.00088	3		2
6539.2171	6539.21734	0.00016	2	-0.00024	3
6539.2926	6539.29262	0	3		1
6539.3625	6539.36191	0	2	0.00059	1
6539.405	6539.3994	0.00134	2	0.0056	4
6539.5277	6539.52755	0.00029	1	0.00015	5
6539.5863	6539.58623	0.00057	2	0.00007	7
6539.6598	6539.65954	0.00041	2	0.00026	2
6539.9733	6539.97558	0.00102	2	-0.00228	7
6540.1157	6540.11561	0.00005	2	0.00009	2
6540.1431	6540.14236	0.00018	2	0.00074	5
6540.2288	6540.22859	0	3		1
6540.2486	6540.24883	0.00028	1	-0.00023	5
6540.3543	6540.35424	0	3		1
6540.4251	6540.42529	0.00036	2	-0.00019	5
6540.4871	6540.48684	0.00034	2	0.00026	6
6540.5151	6540.51545	0.00048	2	-0.00035	2
6540.5737	6540.57316	0.00033	1	0.00054	10



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6540.6183	6540.61855	0	3		1
6540.887	6540.8868	0.00021	2	0.0002	4
6540.967	6540.96719	0.00007	2	-0.00019	5
6541.0064	6541.00623	0.00021	2	0.00017	5
6541.0642	6541.0642	0.00007	2	0	5
6541.3027	6541.3028	0	2	-0.0001	1
6541.3873	6541.38646	0.00088	1	0.00084	10
6541.4045	6541.40356	0.00089	2	0.00094	10
6541.4363	6541.43566	0.00064	2	0.00064	8
6541.5167	6541.51635	0.0005	2	0.00035	3
6541.5458	6541.54623	0.00046	2	-0.00043	2
6541.6787	6541.67727	0.00107	2	0.00143	5
6541.736	6541.73562	0.00089	2	0.00038	3
6542.0382	6542.03918	0.00023	2	-0.00098	2
6542.1054	6542.1014	0.00217	2	0.004	4
6542.1239	6542.12108	0.00228	2	0.00282	5
6542.2935	6542.29282	0.00071	2	0.00068	8
6542.3737	6542.36977	0.00162	2	0.00393	8
6542.4244	6542.42362	0.00043	1	0.00078	10
6542.5582	6542.55752	0	2	0.00068	1
6542.5807	6542.57708	0.00212	2	0.00362	3
6542.6237	6542.6237	0	1	0	8
6542.8489	6542.84799	0.00004	2	0.00091	4
6543.0164	6543.01613	0.00047	2	0.00027	4
6543.0624	6543.06098	0	2	0.00142	1
6543.0973	6543.09684	0.00052	2	0.00046	2
6543.1322	6543.13188	0.00092	2	0.00032	8
6543.2085	6543.20898	0.00126	2	-0.00048	8
6543.39	6543.38997	0	2	0.00003	1
6543.483	6543.48268	0	2	0.00032	1
6543.5242	6543.5247	0.00097	2	-0.0005	2
6543.5501	6543.55016	0	2	-0.00006	1
6543.6067	6543.60642	0	3		1
6543.6389	6543.63656	0	2	0.00234	1
6543.7918	6543.79565	0	2	-0.00385	1
6543.8413	6543.84148	0.00087	1	-0.00018	5
6543.8737	6543.87184	0.00055	2	0.00186	5
6543.9077	6543.9075	0.00044	2	0.0002	7

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6544.0082	6544.00736	0.00023	2	0.00084	2
6544.1478	6544.14793	0.00023	2	-0.00013	2
6544.2016	6544.20089	0.00013	2	0.00071	2
6544.3215	6544.3215	0	1	0	7
6544.4655	6544.46437	0	2	0.00113	1
6544.5463	6544.5455	0.00088	2	0.0008	5
6544.7563	6544.75644	0.00053	2	-0.00014	4
6544.9175	6544.91701	0.00073	2	0.00049	8
6544.9571	6544.95727	0.00066	2	-0.00017	9
6545.0647	6545.06501	0.00074	3		3
6545.2323	6545.23197	0	3		1
6545.258	6545.2577	0	3		1
6545.3068	6545.30656	0	2	0.00024	1
6545.4158	6545.41519	0	2	0.00061	1
6545.6808	6545.6808	0	1	0	10
6545.8024	6545.80319	0.00055	3		2
6545.8855	6545.88584	0.0002	2	-0.00034	2
6545.9352	6545.9356	0	3		1
6546.0675	6546.07176	0	2	-0.00426	1
6546.1001	6546.10024	0.00035	2	-0.00014	2
6546.1308	6546.13397	0.00201	2	-0.00317	6
6546.4423	6546.44322	0.00038	2	-0.00092	2
6546.507	6546.50854	0.00043	3		2
6546.5496	6546.55076	0	3		1
6546.563	6546.56482	0.00062	2	-0.00182	3
6546.6168	6546.61722	0.00078	3		2
6546.666	6546.66761	0.00122	1	-0.00161	3
6546.8645	6546.86603	0	3		1
6546.9674	6546.96759	0.00033	1	-0.00019	4
6547.1463	6547.14817	0	3		1
6547.2185	6547.22045	0	3		1
6547.3114	6547.30848	0.00263	3		2
6547.4962	6547.49848	0	3		1
6547.6568	6547.65927	0	3		1
6547.7409	6547.74346	0	3		1
6547.7945	6547.79439	0.00047	2	0.00011	3
6547.9469	6547.94653	0.00037	1	0.00037	4
6547.9725	6547.97239	0.00016	2	0.00011	2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6548.2206	6548.21717	0	2	0.00343	1
6548.3015	6548.30171	0.00049	2	-0.00021	3
6548.3655	6548.36503	0.00018	2	0.00047	2
6548.611	6548.611	0	1	0	5
6548.6453	6548.64269	0.00408	2	0.00261	2
6548.7983	6548.79882	0.00008	2	-0.00052	3
6548.9247	6548.9248	0.00014	1	-0.0001	5
6549.093	6549.09268	0.00059	2	0.00032	2
6549.1417	6549.14197	0.00172	1	-0.00027	4
6549.1773	6549.17787	0	3		1
6549.1944	6549.19459	0.00135	2	-0.00019	5
6549.287	6549.28672	0.0008	1	0.00028	8
6549.307	6549.30432	0.0004	2	0.00268	2
6549.4596	6549.4571	0	2	0.0025	1
6549.4908	6549.48693	0.004	2	0.00387	2
6549.5794	6549.58435	0	2	-0.00495	1
6549.6317	6549.63273	0.00117	2	-0.00103	3
6549.862	6549.86338	0	3		1
6549.8772	6549.87986	0.00115	2	-0.00266	3
6549.9575	6549.95739	0.0018	2	0.00011	2
6549.9742	6549.97481	0.00159	3		3
6549.9983	6550.00239	0.00205	2	-0.00409	2
6550.0372	6550.0357	0.00154	2	0.0015	7
6550.1264	6550.12645	0.00168	2	-0.00005	5
6550.1665	6550.16689	0.00135	3		2
6550.2462	6550.24803	0	3		1
6550.2566	6550.25719	0.0049	2	-0.00059	4
6550.4054	6550.40522	0.00029	1	0.00018	6
6550.4791	6550.48015	0.00134	3		2
6550.6192	6550.61862	0.00216	2	0.00058	5
6550.8155	6550.81556	0.00026	1	-0.00006	5
6550.9626	6550.9624	0.00061	2	0.0002	5
6550.9976	6550.99717	0.00052	2	0.00043	10
6551.0202	6551.01921	0.00023	2	0.00099	2
6551.0606	6551.06054	0.00044	2	0.00006	6
6551.1224	6551.12286	0	3		1
6551.1835	6551.18382	0.00041	2	-0.00032	8
6551.315	6551.31429	0.00017	2	0.00071	3

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6551.3356	6551.33592	0.00049	2	-0.00032	4
6551.4642	6551.4642	0	1	0	5
6551.5952	6551.59433	0.00041	2	0.00087	5
6551.7179	6551.71809	0.00027	1	-0.00019	10
6551.8107	6551.81145	0.00038	2	-0.00075	10
6552.1159	6552.11668	0.00022	2	-0.00078	6
6552.1863	6552.18685	0	2	-0.00055	1
6552.2178	6552.21831	0.0003	2	-0.00051	4
6552.3095	6552.31042	0.00011	2	-0.00092	4
6552.3544	6552.35575	0.0002	2	-0.00135	2
6552.3933	6552.39419	0.00012	2	-0.00089	4
6552.4692	6552.47031	0.00074	2	-0.00111	4
6552.6169	6552.61685	0.00088	2	0.00005	10
6552.6912	6552.69199	0.00111	2	-0.00079	8
6552.8037	6552.80447	0.00093	2	-0.00077	8
6552.8642	6552.86477	0.00087	2	-0.00057	8
6552.9558	6552.95551	0.00093	2	0.00029	8
6553.03	6553.03037	0.00051	2	-0.00037	5
6553.1383	6553.13855	0.00032	1	-0.00025	5
6553.1554	6553.15503	0.0003	1	0.00037	5
6553.2364	6553.2365	0	2	-0.0001	1
6553.2828	6553.28286	0.00025	2	-0.00006	4
6553.3826	6553.38265	0.00085	1	-0.00005	5
6553.4524	6553.45232	0.00097	2	0.00008	6
6553.5046	6553.50478	0.00083	2	-0.00018	7
6553.5303	6553.53028	0.0011	2	0.00002	7
6553.5489	6553.54869	0	3		1
6553.5769	6553.57673	0	3		1
6553.6625	6553.66237	0.00086	2	0.00013	8
6553.7081	6553.70858	0.00096	2	-0.00048	6
6553.8059	6553.80591	0.0009	2	-0.00001	7
6553.8308	6553.8299	0.00123	2	0.0009	3
6553.896	6553.89585	0.00057	2	0.00015	3
6553.9789	6553.97561	0.00244	2	0.00329	4
6554.0535	6554.0532	0.0009	2	0.0003	3
6554.136	6554.1378	0.00065	2	-0.0018	3
6554.1998	6554.19957	0.00058	3		3
6554.3012	6554.30049	0.00001	3		2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6554.3331	6554.33277	0.00034	3		2
6554.3967	6554.39289	0.00343	2	0.00381	7
6554.4396	6554.4404	0.00054	2	-0.0008	2
6554.6469	6554.6469	0	1	0	8
6554.6677	6554.66662	0.00059	2	0.00108	5
6554.7527	6554.75112	0.0002	3		2
6554.767	6554.76904	0.00103	2	-0.00204	4
6554.8072	6554.80722	0.00012	3		3
6554.8423	6554.84291	0.00037	2	-0.00061	4
6554.9711	6554.97138	0.00042	2	-0.00028	5
6555.0019	6555.00199	0.00058	2	-0.00009	4
6555.0781	6555.07831	0	3		1
6555.2217	6555.22208	0	3		1
6555.2485	6555.24961	0.00039	2	-0.00111	4
6555.4439	6555.44454	0	3		1
6555.568	6555.56879	0.00038	2	-0.00079	5
6555.6105	6555.61031	0.00024	2	0.00019	5
6555.685	6555.685	0	1	0	5
6555.7511	6555.75105	0.00029	2	0.00005	4
6555.9964	6555.99707	0.00032	1	-0.00067	6
6556.0607	6556.06089	0.0006	2	-0.00019	8
6556.2022	6556.20287	0.0005	2	-0.00067	6
6556.2745	6556.27472	0.00061	2	-0.00022	12
6556.3231	6556.32338	0.00063	2	-0.00028	13
6556.412	6556.41226	0.00044	2	-0.00026	10
6556.5444	6556.54445	0.00016	1	-0.00005	10
6556.5696	6556.56637	0.00325	2	0.00323	7
6556.7679	6556.76786	0	3		1
6556.8064	6556.80514	0.00205	2	0.00126	7
6557.037	6557.03325	0.00092	2	0.00375	7
6557.0471	6557.04905	0.00059	2	-0.00195	12
6557.0897	6557.09021	0.00053	2	-0.00051	12
6557.1805	6557.18191	0.00054	2	-0.00141	2
6557.2756	6557.27555	0.00074	2	0.00005	12
6557.3158	6557.31639	0.00062	2	-0.00059	9
6557.3676	6557.36663	0.0007	2	0.00097	4
6557.4292	6557.42906	0	3		1
6557.5516	6557.5516	0	1	0	5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6557.5793	6557.57953	0.00044	2	-0.00023	6
6557.6272	6557.62769	0	2	-0.00049	1
6557.6719	6557.67144	0.00037	2	0.00046	4
6557.7013	6557.70143	0.00045	2	-0.00013	2
6557.7296	6557.73021	0.00047	2	-0.00061	4
6557.8021	6557.80209	0.0003	3		2
6558.0225	6558.02486	0	2	-0.00236	1
6558.1024	6558.10285	0.0007	3		3
6558.3195	6558.3195	0	1	0	5
6558.3775	6558.3769	0.00069	2	0.0006	3
6558.5627	6558.5603	0	2	0.0024	1
6558.7158	6558.71593	0.00068	1	-0.00013	10
6558.7795	6558.7776	0.00084	2	0.0019	2
6558.9218	6558.92218	0.00065	2	-0.00038	9
6559.0414	6559.04868	0.00118	2	-0.00728	4
6559.0857	6559.08473	0.00063	2	0.00097	5
6559.4562	6559.45604	0.00098	2	0.00016	5
6559.5902	6559.59188	0.0003	2	-0.00168	6
6559.7546	6559.75526	0.00111	1	-0.00066	9
6559.787	6559.78761	0.00074	2	-0.00061	8
6559.9277	6559.9283	0	2	-0.0006	1
6560.0875	6560.08824	0.00045	3		2
6560.1613	6560.16168	0	3		1
6560.1841	6560.18611	0	2	-0.00201	1
6560.2817	6560.28201	0.00054	2	-0.00031	6
6560.3939	6560.39392	0.00067	2	-0.00002	7
6560.5752	6560.57019	0.00078	2	0.00501	8
6560.594	6560.59427	0.00083	2	-0.00027	7
6560.6146	6560.61549	0.00059	2	-0.00089	8
6560.6697	6560.6702	0.00066	2	-0.0005	8
6560.7539	6560.7538	0.00075	2	0.0001	7
6560.8257	6560.82543	0.00042	2	0.00027	5
6560.9411	6560.94097	0.00026	1	0.00013	5
6560.9919	6560.99257	0.00037	1	-0.00067	5
6561.0199	6561.01993	0	3		1
6561.2045	6561.20368	0.00094	3		3
6561.2644	6561.2646	0.00083	2	-0.0002	10
6561.2861	6561.287	0.00091	2	-0.0009	8

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6561.317	6561.31175	0.00026	2	0.00525	3
6561.3665	6561.36695	0.00129	2	-0.00045	2
6561.4136	6561.41273	0.00063	2	0.00087	3
6561.449	6561.44964	0.00084	2	-0.00064	8
6561.4748	6561.47535	0.0008	2	-0.00055	9
6561.564	6561.56915	0.00079	2	-0.00515	5
6561.5831	6561.5831	0.00148	2	0	7
6561.6383	6561.64187	0.0024	2	-0.00357	5
6561.7211	6561.71977	0	3		1
6561.8011	6561.80114	0.00032	2	-0.00004	5
6561.8397	6561.83862	0.00077	2	0.00108	4
6561.9304	6561.93029	0.00009	1	0.00011	5
6561.9572	6561.95791	0.00056	2	-0.00071	4
6562.0144	6562.01466	0.00037	2	-0.00026	6
6562.0408	6562.03951	0.00141	2	0.00129	4
6562.1738	6562.17369	0.00037	1	0.00011	11
6562.2265	6562.22695	0.00103	2	-0.00045	7
6562.2915	6562.29089	0.00065	2	0.00061	9
6562.3414	6562.34182	0.00044	2	-0.00042	11
6562.4324	6562.43277	0.00069	2	-0.00037	7
6562.4935	6562.49712	0	2	-0.00362	1
6562.515	6562.51534	0	2	-0.00034	1
6562.5744	6562.57501	0.00054	2	-0.00061	4
6562.608	6562.60787	0.0004	2	0.00013	3
6562.6549	6562.65521	0.00054	2	-0.00031	4
6562.6862	6562.68788	0.00194	2	-0.00168	3
6562.7418	6562.7426	0	2	-0.0008	1
6562.8089	6562.81104	0.00173	2	-0.00214	3
6562.8361	6562.83787	0.00201	2	-0.00177	3
6562.906	6562.90272	0.0021	2	0.00328	5
6562.9305	6562.93042	0	3		2
6563.0193	6563.01956	0.00092	1	-0.00026	10
6563.0738	6563.07442	0.00144	3		2
6563.1651	6563.16501	0.00117	1	0.00009	10
6563.3355	6563.33505	0.00106	2	0.00045	9
6563.3539	6563.35032	0	2	0.00358	1
6563.4458	6563.44596	0.00041	2	-0.00016	3
6563.4876	6563.48767	0.00063	2	-0.00007	5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6563.5833	6563.58229	0.0009	2	0.00101	2
6563.6208	6563.61893	0	2	0.00187	1
6563.6592	6563.65891	0.00078	2	0.00029	3
6563.7916	6563.79081	0.00199	2	0.00079	4
6563.9896	6563.98955	0.00105	2	0.00005	8
6564.0889	6564.08949	0.00115	2	-0.00059	8
6564.1084	6564.10832	0.00087	1	0.00008	9
6564.2135	6564.21328	0.00091	2	0.00022	6
6564.2704	6564.27311	0.0001	2	-0.00271	2
6564.3103	6564.30869	0.00032	2	0.00161	5
6564.3705	6564.36952	0.0002	2	0.00098	2
6564.7805	6564.78106	0.00015	3		2
6564.8161	6564.81279	0.00005	2	0.00331	2
6564.862	6564.862	0	1	0	10
6564.9522	6564.95241	0.00018	2	-0.00021	9
6565.1081	6565.10919	0	3		1
6565.1334	6565.13289	0.00042	2	0.00051	4
6565.4619	6565.46434	0.00103	2	-0.00244	4
6565.5003	6565.49961	0.00134	1	0.00069	7
6565.5509	6565.55063	0.00154	2	0.00027	3
6565.6425	6565.64268	0.00105	3		5
6565.6986	6565.69895	0.00095	2	-0.00035	8
6565.8153	6565.81535	0.00188	2	-0.00005	9
6566.3665	6566.3656	0.00058	2	0.0009	3
6566.3938	6566.39364	0.00088	1	0.00016	10
6566.4621	6566.46173	0.0009	3		2
6566.5817	6566.58082	0.00195	3		2
6566.6872	6566.68806	0.00103	2	-0.00086	6
6566.8	6566.80113	0.0005	2	-0.00113	4
6566.8331	6566.83274	0.00023	2	0.00036	4
6566.8604	6566.86014	0.00041	3		3
6566.8819	6566.88109	0.00078	3		3
6566.9228	6566.92225	0.00004	2	0.00055	4
6566.9442	6566.94245	0.00055	3		2
6566.9638	6566.9651	0.00071	2	-0.0013	4
6566.987	6566.98635	0	3		1
6567.0505	6567.05023	0	3		1
6567.1993	6567.19957	0.00019	2	-0.00027	5



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6567.2712	6567.27061	0.00041	2	0.00059	6
6567.3287	6567.32805	0.00111	2	0.00065	4
6567.3696	6567.36931	0.00049	1	0.00029	10
6567.4508	6567.452	0	2	-0.0012	1
6567.747	6567.74503	0.0018	2	0.00197	5
6567.799	6567.79217	0.00023	3		2
6567.8237	6567.82256	0.00008	3		2
6568.2661	6568.26542	0.00145	1	0.00068	8
6568.307	6568.307	0	1	0	6
6568.3729	6568.36485	0.00191	3		3
6568.4086	6568.41036	0.00015	2	-0.00176	5
6568.47	6568.47077	0.00063	1	-0.00077	8
6568.4804	6568.47414	0	3		1
6568.5468	6568.54329	0	3		1
6568.8547	6568.85423	0	2	0.00047	1
6568.9018	6568.90058	0	3		1
6568.9165	6568.91796	0.0014	2	-0.00146	5
6568.9807	6568.97882	0.00083	3		3
6569.0794	6569.07755	0.00084	3		2
6569.156	6569.15615	0.00141	1	-0.00015	10
6569.2059	6569.20535	0.00171	2	0.00055	7
6569.2178	6569.21726	0	3		1
6569.5407	6569.54094	0.0016	2	-0.00024	4
6569.5537	6569.55475	0	3		1
6569.7565	6569.75537	0.00034	2	0.00113	4
6569.8669	6569.86618	0.00053	2	0.00072	2
6569.8957	6569.89518	0.00095	2	0.00052	8
6569.9371	6569.93645	0.00089	1	0.00065	10
6570.0088	6570.00882	0.00077	2	-0.00002	8
6570.0468	6570.04833	0.00128	2	-0.00153	6
6570.2493	6570.24922	0.00085	2	0.00008	5
6570.3583	6570.35775	0.00011	2	0.00055	4
6570.392	6570.39109	0.00017	2	0.00091	5
6570.4395	6570.4392	0.00033	2	0.0003	5
6570.544	6570.54437	0.00098	2	-0.00037	4
6570.5827	6570.58244	0.00035	2	0.00026	2
6570.6372	6570.63712	0.00023	2	0.00008	8
6570.7316	6570.73229	0.0002	2	-0.00069	8

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6570.7593	6570.7593	0	1	0	10
6570.7787	6570.77872	0	3		1
6570.8484	6570.84872	0.00018	2	-0.00032	10
6570.8856	6570.88527	0.00012	2	0.00033	8
6570.9306	6570.92934	0.001	2	0.00126	8
6570.9668	6570.96649	0.00005	2	0.00031	2
6571.1591	6571.15867	0	2	0.00043	1
6571.4174	6571.41978	0	2	-0.00238	1
6571.452	6571.45271	0	3		1
6571.5207	6571.52145	0.00085	2	-0.00075	6
6571.5722	6571.57134	0.00101	2	0.00086	2
6571.7197	6571.71973	0.00116	2	-0.00003	10
6571.7804	6571.78104	0.00109	2	-0.00064	8
6571.8641	6571.86393	0.0009	2	0.00017	8
6571.9711	6571.97079	0.00099	2	0.00031	7
6572.0051	6572.00477	0.00099	2	0.00033	4
6572.2568	6572.25514	0.00019	2	0.00166	4
6572.3957	6572.39559	0.00019	1	0.00011	8
6572.4096	6572.41065	0.00133	2	-0.00105	4
6572.4482	6572.4482	0.00042	2	0	7
6572.5196	6572.51904	0.00045	2	0.00056	8
6572.606	6572.60725	0.00256	2	-0.00125	3
6572.6446	6572.6447	0.00031	2	-0.0001	10
6572.6734	6572.6734	0.00063	2	0	2
6572.8538	6572.85358	0.00014	2	0.00022	5
6572.952	6572.952	0	1	0	5
6573.0186	6573.01895	0.0004	2	-0.00035	4
6573.0388	6573.03934	0.00051	2	-0.00054	5
6573.2182	6573.21919	0.00082	2	-0.00099	2
6573.3556	6573.3556	0.00087	3		2
6573.417	6573.41621	0	3		1
6573.4366	6573.43736	0.00171	2	-0.00076	7
6573.5301	6573.53013	0.00172	2	-0.00003	7
6573.5591	6573.55787	0.0019	2	0.00123	10
6573.7021	6573.69859	0.00005	3		2
6573.7319	6573.73077	0.00153	2	0.00113	6
6573.7711	6573.77072	0	3		1
6573.8478	6573.84751	0	3		1

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6573.9236	6573.91885	0.00476	2	0.00475	2
6573.9817	6573.98485	0.0015	2	-0.00315	4
6574.0071	6574.00759	0.0011	1	-0.00049	6
6574.0886	6574.08709	0.00093	2	0.00151	4
6574.2547	6574.25404	0.00122	2	0.00066	10
6574.4604	6574.46092	0.00102	2	-0.00052	8
6574.4796	6574.48005	0.00095	2	-0.00045	8
6574.5615	6574.56328	0	2	-0.00178	1
6574.6818	6574.68222	0	2	-0.00042	1
6574.8759	6574.87683	0.00061	2	-0.00093	5
6574.9124	6574.91024	0.00213	2	0.00216	4
6575.0689	6575.06685	0.0019	2	0.00205	3
6575.0824	6575.08065	0.00156	1	0.00175	10
6575.2079	6575.20777	0.00027	3		2
6575.2352	6575.23576	0.00094	2	-0.00056	7
6575.4322	6575.43133	0.00147	1	0.00087	9
6575.455	6575.45239	0.0002	3		2
6575.4849	6575.4841	0.00125	2	0.0008	6
6575.5381	6575.53682	0.00459	2	0.00128	3
6575.5994	6575.60196	0	2	-0.00256	1
6575.6225	6575.62141	0.00066	2	0.00109	5
6575.6801	6575.6774	0.0016	2	0.0027	4
6575.6959	6575.69691	0.00009	3		3
6575.7189	6575.7189	0	1	0	6
6575.8143	6575.81288	0.00074	2	0.00142	3
6575.8538	6575.85262	0.00088	1	0.00118	8
6575.907	6575.90484	0.00002	2	0.00216	2
6576.0076	6576.00648	0.00145	2	0.00112	5
6576.1651	6576.16439	0.00104	2	0.00071	10
6576.2651	6576.26239	0.00156	2	0.00271	7
6576.3388	6576.3345	0	2	0.0043	1
6576.3752	6576.37018	0.0007	2	0.00502	3
6576.3976	6576.39685	0.00058	2	0.00075	5
6576.5278	6576.52768	0.00101	2	0.00012	3
6576.5638	6576.56473	0	3		1
6576.641	6576.64065	0.0009	2	0.00035	5
6576.7029	6576.70266	0.0007	2	0.00024	6
6576.7463	6576.74667	0.001	2	-0.00037	8

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	Ecart-type	Cat.	$\Delta\sigma$	Nombre
6576.8068	6576.80495	0	3		1
6576.8277	6576.82524	0.00134	2	0.00246	4
6576.9307	6576.93257	0	2	-0.00187	1
6576.9589	6576.95847	0.00123	3		4
6577.008	6577.00757	0.00079	1	0.00043	9
6577.1857	6577.1857	0	1	0	7
6577.3103	6577.3098	0.0003	2	0.0005	4
6577.3362	6577.33422	0.00075	3		2
6577.4817	6577.48155	0.00035	2	0.00015	4
6577.6936	6577.69209	0	2	0.00151	2
6577.7227	6577.72276	0.00071	2	-0.00006	6
6577.8502	6577.85223	0.00212	2	-0.00203	5
6577.8713	6577.87232	0.00116	2	-0.00102	3
6577.8831	6577.88212	0	3		1
6577.8996	6577.9002	0.001	2	-0.0006	2
6577.949	6577.94875	0.00057	2	0.00025	8
6578.0575	6578.06098	0.00137	2	-0.00348	4
6578.261	6578.26168	0.00231	2	-0.00068	4
6578.4112	6578.41304	0.00196	3		3
6578.4453	6578.44569	0.00035	2	-0.00039	4
6578.5553	6578.55587	0.00036	2	-0.00057	4
6578.6089	6578.60956	0.00075	2	-0.00066	4
6578.6324	6578.63241	0.00045	3		2
6578.671	6578.67171	0	3		1
6578.7484	6578.7484	0	1	0	5
6578.8055	6578.80637	0	3		1
6578.8752	6578.8754	0.00038	2	-0.0002	4
6578.9267	6578.92771	0	3		1
6578.9699	6578.97096	0	3		1

TABLE 1 – Forces de raies  $^{14}\text{NH}_3$ . Difference entre notre travail et les données de Sung.

## Annexe 2

TABLE 1 – Forces de raies pour l'isotopologue  $^{14}\text{NH}_3$ . Difference entre notre travail et les données de Sung *et al.*

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6367.7608	2.2343E-023	0.0095	6367.7608	2.38E-023	-6.5
6367.9655	1.1617E-023	0.0104	6367.9655	1.15E-023	1.0
6368.1687	2.6785E-024	0.0077	0	0	0.0
6368.2891	9.8952E-025	0.0121	0	0	0.0
6368.36	3.2696E-025	0.0336	0	0	0.0
6368.414	2.8999E-024	0.0101	0	0	0.0
6368.5994	8.1028E-025	0.0168	0	0	0.0
6369.0115	6.5391E-024	0.0071	6369.0115	5.85E-024	10.5
6369.1823	2.8004E-024	0.0093	0	0	0.0
6369.3461	8.643E-024	0.0071	6369.3461	9.48E-024	-9.7
6369.6171	6.8632E-025	0.0187	0	0	0.0
6369.7288	2.199E-024	0.0085	0	0	0.0
6369.8121	4.9023E-024	0.0071	6369.8121	4.44E-024	9.4
6369.9501	2.073E-024	0.0088	0	0	0.0
6369.9774	1.9469E-024	0.0092	0	0	0.0
6370.4943	4.1192E-024	0.0133	0	0	0.0
6370.6711	4.6997E-025	0.0359	0	0	0.0
6370.6982	1.5205E-024	0.0148	0	0	0.0
6370.9817	4.6306E-024	0.0133	6370.9817	5.24E-024	-13.2
6371.1537	1.3823E-024	0.0133	0	0	0.0
6371.2656	4.368E-024	0.0133	0	0	0.0
6371.296	1.6173E-024	0.0133	0	0	0.0
6371.3381	1.1072E-023	0.0133	6371.3381	1.08E-023	2.5
6371.4663	2.0181E-024	0.0133	0	0	0.0
6371.7009	1.5245E-023	0.0086	6371.7009	1.36E-023	10.8
6372.1275	2.5432E-024	0.0086	0	0	0.0
6372.3557	4.4412E-023	0.0058	6372.3557	4.36E-023	1.8

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6372.5049	1.5675E-023	0.0058	6372.5049	1.51E-023	3.7
6372.6891	5.7787E-024	0.0058	6372.6891	7.54E-024	-30.5
6372.8139	1.1013E-023	0.0041	6372.8139	1.1E-023	0.1
6372.8981	2.6136E-024	0.0076	0	0	0.0
6373.3006	8.8547E-025	0.0101	0	0	0.0
6373.4589	1.0854E-024	0.0086	0	0	0.0
6373.4996	3.1994E-024	0.0308	0	0	0.0
6373.6811	5.7214E-023	0.0222	6373.6811	5.24E-023	8.4
6373.7945	1.4431E-024	0.0222	0	0	0.0
6374.0439	1.4591E-023	0.0222	6374.0439	1.5E-023	-2.8
6374.2478	1.3352E-024	0.0102	0	0	0.0
6374.5005	1.2594E-024	0.0103	0	0	0.0
6374.5675	8.6483E-025	0.0136	0	0	0.0
6374.7731	2.8439E-024	0.0079	0	0	0.0
6374.8623	1.7685E-023	0.0057	6374.8623	1.94E-023	-9.7
6374.8801	3.3602E-024	0.0078	0	0	0.0
6375.0245	9.2607E-024	0.0057	6375.0245	1.42E-023	-53.3
6375.04	4.364E-024	0.0064	0	0	0.0
6375.2251	6.113E-024	0.0057	6375.2251	5.28E-024	13.6
6375.2583	1.8628E-023	0.0057	6375.2583	1.85E-023	0.7
6375.3442	1.5964E-024	0.0085	0	0	0.0
6375.3949	4.0297E-024	0.0057	6375.3949	4.8E-024	-19.1
6375.9356	5.0547E-024	0.0088	6375.9356	4.52E-024	10.6
6376.0041	1.2752E-024	0.013	0	0	0.0
6376.0764	2.3572E-023	0.0082	6376.0764	2.15E-023	8.8
6376.1286	2.9131E-024	0.0075	0	0	0.0
6376.1419	4.8903E-024	0.0077	6376.1419	5.65E-024	-15.5
6376.4021	5.2713E-024	0.01	6376.4021	4.48E-024	15.0
6376.426	9.7054E-024	0.01	6376.426	9.4E-024	3.1
6376.5342	5.1938E-024	0.01	6376.5342	4.48E-024	13.7
6376.6292	2.5426E-023	0.01	6376.6292	2.54E-023	0.1
6376.6487	4.8992E-024	0.01	6376.6487	4.28E-024	12.6
6376.7189	1.876E-024	0.0099	0	0	0.0
6377.1258	3.5499E-023	0.005	6377.1258	3.16E-023	11.0
6377.2182	2.1415E-024	0.0103	0	0	0.0
6377.3003	9.6914E-024	0.005	6377.3003	9.88E-024	-1.9
6377.4007	2.3577E-024	0.0044	0	0	0.0
6377.4303	5.3049E-024	0.0041	6377.4303	4.8E-024	9.5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6377.6493	4.58E-024	0.005	0	0	0.0
6377.6786	4.9238E-024	0.005	6377.6786	5.28E-024	-7.2
6377.8424	4.7206E-024	0.005	0	0	0.0
6377.9605	5.9399E-025	0.0097	0	0	0.0
6378.0285	1.3287E-024	0.0058	0	0	0.0
6378.0944	1.3223E-024	0.0097	0	0	0.0
6378.2157	1.1269E-024	0.0128	0	0	0.0
6378.2777	1.6121E-024	0.0128	0	0	0.0
6378.4911	4.8519E-024	0.0128	6378.4911	4.6E-024	5.2
6378.5105	1.6747E-024	0.0128	0	0	0.0
6378.5925	2.3477E-025	0.0235	0	0	0.0
6378.662	8.89E-024	0.0128	6378.662	9.48E-024	-6.6
6378.684	2.1912E-024	0.0128	0	0	0.0
6378.8808	3.8789E-024	0.0327	0	0	0.0
6379.0063	5.5256E-023	0.0327	6379.0063	5.12E-023	7.3
6379.0821	2.0955E-024	0.0327	0	0	0.0
6379.3712	1.9004E-024	0.0188	0	0	0.0
6379.4559	3.5084E-024	0.0188	0	0	0.0
6379.5113	7.5285E-024	0.0188	6379.5113	6.86E-024	8.9
6379.9212	2.2805E-024	0.0188	0	0	0.0
6379.9602	9.0634E-025	0.0188	0	0	0.0
6380.0796	9.5083E-024	0.0212	6380.0796	9.4E-024	1.1
6380.115	1.0471E-023	0.0212	6380.115	9.52E-024	9.1
6380.2138	1.3271E-024	0.0212	0	0	0.0
6380.4462	1.0354E-024	0.0212	0	0	0.0
6380.5968	1.8667E-024	0.0212	0	0	0.0
6380.7147	6.4401E-024	0.0124	6380.7147	4.36E-024	32.3
6380.7949	1.1783E-024	0.0122	0	0	0.0
6380.8919	3.8079E-024	0.0102	6380.8919	4.19E-024	-10.0
6381.201	4.4545E-025	0.0291	0	0	0.0
6381.2536	1.4053E-023	0.0102	6381.2536	1.92E-023	-36.6
6381.2738	4.0665E-024	0.0101	0	0	0.0
6381.2972	1.6841E-023	0.0102	6381.2972	1.9E-023	-12.8
6381.3991	1.8659E-024	0.0084	0	0	0.0
6381.5512	2.4734E-024	0.0077	0	0	0.0
6381.6866	3.1676E-024	0.0078	0	0	0.0
6381.8461	9.0979E-024	0.0079	6381.8461	9.11E-024	-0.1
6382.0731	5.2181E-024	0.0084	6382.0731	6.13E-024	-17.5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6382.2853	2.4937E-024	0.0084	0	0	0.0
6382.4397	1.4559E-024	0.0084	0	0	0.0
6382.547	1.9849E-023	0.0085	6382.547	1.85E-023	6.8
6382.6369	3.3648E-024	0.004	0	0	0.0
6382.7205	4.2387E-024	0.0064	6382.7205	5.24E-024	-23.6
6382.7913	1.4319E-024	0.0076	0	0	0.0
6383.0468	1.4605E-024	0.0075	0	0	0.0
6383.1053	2.6205E-024	0.0064	0	0	0.0
6383.255	6.845E-024	0.0064	6383.255	6.37E-024	6.9
6383.3734	1.5084E-023	0.0059	6383.3734	1.55E-023	-2.8
6383.5563	6.634E-024	0.0059	6383.5563	7.62E-024	-14.9
6383.704	2.0587E-024	0.0094	0	0	0.0
6383.7794	1.2008E-024	0.014	0	0	0.0
6383.9617	4.1052E-024	0.0131	0	0	0.0
6384.0532	2.9463E-024	0.0138	0	0	0.0
6384.132	1.6894E-024	0.0137	0	0	0.0
6384.286	2.0664E-024	0.0138	0	0	0.0
6384.3258	1.4704E-023	0.0139	6384.3258	1.41E-023	4.1
6384.3551	1.1353E-023	0.0139	6384.3551	1.1E-023	3.1
6384.5545	3.9518E-024	0.0139	0	0	0.0
6384.705	2.5437E-024	0.0113	0	0	0.0
6385.1056	5.8892E-024	0.0113	6385.1056	5.24E-024	11.0
6385.1865	6.7601E-024	0.0113	6385.1865	6.01E-024	11.1
6385.2379	8.8891E-024	0.0113	6385.2379	8.31E-024	6.5
6385.2779	9.9443E-024	0.0033	6385.2779	1.17E-023	-17.7
6385.3022	1.7776E-024	0.0046	0	0	0.0
6385.3169	1.2028E-024	0.0112	0	0	0.0
6385.4443	4.9715E-024	0.0075	6385.4443	4.84E-024	2.6
6385.486	1.2366E-023	0.0075	6385.486	2.05E-023	-65.8
6385.505	5.3039E-024	0.0075	6385.505	5.44E-024	-2.6
6385.676	1.4541E-024	0.0097	0	0	0.0
6385.8285	4.2514E-024	0.0075	6385.8285	4.84E-024	-13.8
6385.9473	1.0822E-023	0.0288	6385.9473	1.12E-023	-3.5
6386.0739	2.4571E-024	0.0165	0	0	0.0
6386.1732	2.1359E-024	0.0164	0	0	0.0
6386.2365	2.8779E-023	0.0166	6386.2365	1.4E-023	51.4
6386.2563	4.2024E-024	0.0165	0	0	0.0
6386.2787	7.1911E-024	0.0166	6386.2787	4.64E-024	35.5



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6386.3179	1.0609E-024	0.0185	0	0	0.0
6386.4895	2.0242E-024	0.0164	0	0	0.0
6386.5842	2.5079E-023	0.0206	6386.5842	2.71E-023	-8.1
6386.6153	1.9956E-024	0.0089	0	0	0.0
6386.6822	6.5216E-024	0.0089	6386.6822	6.09E-024	6.6
6386.7693	1.2074E-023	0.0089	6386.7693	1.24E-023	-2.7
6386.8824	6.5216E-024	0.0089	6386.8824	5.2E-024	20.3
6387.2327	1.3396E-023	0.0042	6387.2327	1.43E-023	-6.7
6387.3919	1.6341E-024	0.0072	0	0	0.0
6387.5682	2.6752E-024	0.0083	0	0	0.0
6387.5812	6.5939E-024	0.0048	6387.5812	1.04E-023	-57.7
6387.709	1.6051E-023	0.0047	6387.709	1.51E-023	5.9
6387.9388	7.1346E-024	0.0046	6387.9388	7.38E-024	-3.4
6387.9615	9.2667E-025	0.0121	0	0	0.0
6388.1034	1.0953E-023	0.0093	6388.1034	1.1E-023	-0.4
6388.1884	2.0822E-024	0.0094	0	0	0.0
6388.5321	8.5483E-025	0.0275	0	0	0.0
6388.6874	9.8306E-024	0.0071	6388.6874	1.13E-023	-14.9
6389.4719	2.0815E-024	0.0081	0	0	0.0
6389.7945	6.9623E-024	0.0065	6389.7945	6.65E-024	4.5
6389.9342	3.7223E-023	0.0065	6389.9342	3.54E-023	4.9
6390.0497	8.9048E-025	0.0137	0	0	0.0
6390.1093	3.2316E-024	0.0059	0	0	0.0
6390.2972	2.6973E-023	0.0058	6390.2972	2.74E-023	-1.6
6390.622	3.0161E-024	0.0061	0	0	0.0
6390.7742	1.2439E-024	0.0103	0	0	0.0
6390.8629	5.2473E-024	0.0049	6390.8629	4.76E-024	9.3
6390.8798	1.3154E-024	0.0127	0	0	0.0
6390.954	3.2041E-023	0.0045	6390.954	3.32E-023	-3.6
6391.2545	3.8075E-023	0.0045	6391.2545	3.96E-023	-4.0
6391.5468	1.6042E-024	0.009	0	0	0.0
6391.6338	1.5898E-024	0.0087	0	0	0.0
6391.6796	3.681E-024	0.0067	0	0	0.0
6391.7813	1.0312E-024	0.0117	0	0	0.0
6392.2216	6.405E-024	0.0045	6392.2216	1.01E-023	-57.7
6392.2407	3.1456E-024	0.0057	0	0	0.0
6392.3279	2.1592E-023	0.0045	6392.3279	2.17E-023	-0.5
6392.4721	6.1915E-024	0.0045	6392.4721	5.36E-024	13.4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6392.533	1.2383E-024	0.0083	0	0	0.0
6392.7025	4.9254E-024	0.0029	6392.7025	5.32E-024	-8.0
6392.9253	3.7558E-024	0.0047	0	0	0.0
6393.0099	8.7636E-024	0.0041	6393.0099	9.15E-024	-4.4
6393.0516	1.3373E-024	0.0093	0	0	0.0
6393.2944	1.1851E-023	0.0041	6393.2944	1.27E-023	-7.2
6393.3296	8.3937E-025	0.0195	0	0	0.0
6393.3504	1.6563E-023	0.0046	6393.3504	1.69E-023	-2.0
6393.3918	1.1605E-023	0.0044	6393.3918	1.14E-023	1.8
6393.5266	9.5997E-024	0.0044	6393.5266	9.36E-024	2.5
6393.7239	6.7838E-024	0.0044	6393.7239	6.05E-024	10.8
6393.7682	3.3705E-024	0.0044	0	0	0.0
6393.8289	6.8406E-024	0.0044	6393.8289	6.49E-024	5.1
6394.0158	2.0799E-024	0.0073	0	0	0.0
6394.2377	4.6974E-024	0.0056	0	0	0.0
6394.6189	4.7562E-024	0.0047	0	0	0.0
6394.6306	1.5325E-023	0.0053	6394.6306	2.02E-023	-31.8
6394.7378	1.7428E-024	0.0073	0	0	0.0
6394.7825	1.6138E-023	0.0053	6394.7825	1.57E-023	2.7
6394.8306	1.9553E-024	0.0067	0	0	0.0
6394.8974	5.7384E-024	0.0053	6394.8974	4.92E-024	14.3
6394.9901	2.9613E-024	0.0053	0	0	0.0
6395.0391	1.4736E-024	0.0081	0	0	0.0
6395.186	1.057E-023	0.0053	6395.186	9.8E-024	7.3
6395.2672	1.2041E-023	0.0123	6395.2672	1.15E-023	4.5
6395.3734	2.7175E-024	0.0083	0	0	0.0
6395.5691	2.8731E-024	0.0083	0	0	0.0
6395.617	8.0526E-024	0.0083	6395.617	7.78E-024	3.4
6395.8215	5.3638E-024	0.0083	6395.8215	5.16E-024	3.8
6395.9357	2.9483E-024	0.0094	0	0	0.0
6396.2309	6.8096E-024	0.0081	6396.2309	5.61E-024	17.6
6396.2942	5.5532E-024	0.008	0	0	0.0
6396.3123	2.0443E-023	0.0081	6396.3123	2.15E-023	-5.2
6396.3795	2.2841E-024	0.009	0	0	0.0
6396.5739	3.1735E-024	0.0088	0	0	0.0
6396.6127	5.1252E-024	0.0054	6396.6127	4.15E-024	19.0
6396.8408	4.8319E-023	0.005	6396.8408	4.68E-023	3.1
6396.9484	1.9515E-023	0.005	6396.9484	1.96E-023	-0.4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6397.0526	3.5338E-024	0.0064	6397.0526	4.44E-024	-25.6
6397.162	9.4908E-024	0.005	6397.162	9.88E-024	-4.1
6397.266	5.7854E-023	0.0042	6397.266	5.61E-023	3.0
6397.3065	2.5269E-024	0.0076	0	0	0.0
6397.3674	2.9023E-024	0.0065	0	0	0.0
6397.3967	9.1835E-024	0.0045	6397.3967	1.21E-023	-31.8
6397.4888	2.267E-024	0.0076	0	0	0.0
6397.5877	2.0114E-023	0.0045	6397.5877	2.17E-023	-7.9
6397.9161	4.5584E-024	0.0051	6397.9161	4.11E-024	9.8
6398.0479	6.9455E-024	0.0041	6398.0479	6.01E-024	13.5
6398.0886	3.6839E-024	0.0047	0	0	0.0
6398.304	1.4022E-023	0.0041	6398.304	1.51E-023	-7.7
6398.5255	2.5336E-024	0.0059	0	0	0.0
6398.6003	1.8205E-023	0.0035	6398.6003	1.75E-023	3.9
6398.6731	1.1495E-023	0.0045	6398.6731	1.18E-023	-2.7
6398.7043	5.2371E-024	0.0045	6398.7043	4.92E-024	6.1
6398.8039	2.8155E-024	0.0065	0	0	0.0
6398.8569	2.5675E-024	0.0069	0	0	0.0
6398.992	8.5048E-024	0.0045	6398.992	7.86E-024	7.6
6399.0564	2.3487E-024	0.0073	0	0	0.0
6399.1884	6.9001E-024	0.0045	6399.1884	8.51E-024	-23.3
6399.254	2.8847E-024	0.0047	0	0	0.0
6399.2946	1.1379E-024	0.0141	0	0	0.0
6399.347	2.1649E-023	0.0045	6399.347	2.23E-023	-3.0
6399.4014	2.6842E-024	0.0072	0	0	0.0
6399.4589	4.318E-024	0.0054	6399.4589	4.07E-024	5.7
6399.6521	3.1364E-024	0.0069	6399.6521	5.81E-024	-85.2
6399.6764	1.5755E-024	0.0114	0	0	0.0
6399.8104	2.2145E-023	0.0045	6399.8104	2.05E-023	7.4
6400.123	1.3952E-024	0.0163	0	0	0.0
6400.2496	1.526E-023	0.0167	6400.2496	1.28E-023	16.1
6400.3664	7.5136E-024	0.0167	6400.3664	8.27E-024	-10.1
6400.458	3.3281E-024	0.0166	0	0	0.0
6400.6424	1.5064E-023	0.0078	6400.6424	1.47E-023	2.4
6400.739	1.2062E-023	0.0078	6400.739	1.37E-023	-13.6
6400.9532	4.2436E-024	0.0078	0	0	0.0
6401.1091	1.7916E-023	0.0078	6401.1091	1.84E-023	-2.7
6401.2012	1.5698E-023	0.0054	6401.2012	1.52E-023	3.2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6401.244	1.9309E-024	0.004	0	0	0.0
6401.4353	5.0885E-024	0.0046	6401.4353	4.88E-024	4.1
6401.5254	2.0395E-023	0.0046	6401.5254	2.08E-023	-2.0
6401.6286	2.0136E-023	0.0046	6401.6286	2.34E-023	-16.2
6401.6469	2.7483E-024	0.0093	0	0	0.0
6402.0718	5.091E-023	0.0033	6402.0718	5E-023	1.8
6402.1662	3.8911E-024	0.0044	0	0	0.0
6402.2574	9.3956E-024	0.0033	6402.2574	1.09E-023	-16.0
6402.3745	6.2542E-023	0.0033	6402.3745	6.37E-023	-1.9
6402.4714	8.9482E-024	0.0033	6402.4714	8.55E-024	4.5
6402.5044	1.1072E-023	0.0024	6402.5044	1.32E-023	-19.2
6402.6384	1.1409E-023	0.0036	6402.6384	1.09E-023	4.5
6402.6904	5.6503E-024	0.0036	6402.6904	5.16E-024	8.7
6402.7523	6.26E-024	0.0037	6402.7523	5.61E-024	10.4
6402.7756	2.2371E-023	0.0036	6402.7756	2.31E-023	-3.3
6403.0053	3.4959E-024	0.0046	0	0	0.0
6403.2438	2.0753E-024	0.0084	0	0	0.0
6403.2706	1.1429E-023	0.002	6403.2706	1.09E-023	4.6
6403.3021	8.566E-024	0.0031	6403.3021	1.22E-023	-42.4
6403.3245	1.7023E-024	0.0087	0	0	0.0
6403.3537	1.0863E-023	0.0031	6403.3537	1.08E-023	0.6
6403.3869	8.9714E-024	0.0031	6403.3869	8.39E-024	6.5
6403.5653	1.2673E-023	0.0031	6403.5653	1.39E-023	-9.7
6403.6013	1.397E-023	0.0031	6403.6013	1.51E-023	-8.1
6403.7508	2.182E-023	0.0031	6403.7508	2.48E-023	-13.7
6403.78	9.7677E-024	0.0033	6403.78	8.67E-024	11.2
6403.9313	2.7144E-024	0.0045	0	0	0.0
6404.0728	7.6167E-024	0.0035	6404.0728	7.1E-024	6.8
6404.1113	2.7253E-023	0.0035	6404.1113	2.52E-023	7.5
6404.3375	1.8366E-024	0.0058	0	0	0.0
6404.6659	9.7005E-024	0.0037	6404.6659	9.64E-024	0.6
6404.8829	2.7928E-024	0.0047	0	0	0.0
6404.9888	5.1133E-024	0.0037	6404.9888	4.52E-024	11.6
6405.0773	7.218E-024	0.0037	6405.0773	7.98E-024	-10.6
6405.2622	4.1439E-024	0.0058	6405.2622	5.49E-024	-32.5
6405.3697	8.9898E-024	0.0037	6405.3697	8.59E-024	4.4
6405.4774	7.0704E-023	0.0037	6405.4774	7.38E-023	-4.4
6405.5674	1.1123E-023	0.0037	6405.5674	1.19E-023	-7.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6405.7222	2.0706E-023	0.0037	6405.7222	1.94E-023	6.3
6405.8126	1.4767E-023	0.0037	6405.8126	1.46E-023	1.1
6406.1169	1.0847E-023	0.0092	6406.1169	1.1E-023	-1.4
6406.1659	5.8441E-024	0.0092	6406.1659	5.52E-024	5.5
6406.2929	3.5254E-024	0.0092	0	0	0.0
6406.361	2.1965E-024	0.0092	0	0	0.0
6406.4983	1.6134E-024	0.0092	0	0	0.0
6406.5382	2.4139E-024	0.014	0	0	0.0
6406.6235	2.4686E-024	0.008	0	0	0.0
6406.6483	3.4351E-023	0.0045	6406.6483	4.03E-023	-17.3
6406.9329	3.4685E-023	0.0045	6406.9329	3.62E-023	-4.4
6407.0351	8.5633E-024	0.0045	6407.0351	9.28E-024	-8.4
6407.247	9.3907E-024	0.005	6407.247	9.52E-024	-1.4
6407.3084	9.8226E-024	0.005	6407.3084	9.88E-024	-0.6
6407.347	1.3793E-024	0.0085	0	0	0.0
6407.5575	3.4874E-023	0.005	6407.5575	3.47E-023	0.5
6407.7214	3.2547E-023	0.005	6407.7214	3.21E-023	1.4
6407.9439	5.6795E-024	0.005	6407.9439	5.61E-024	1.2
6408.108	6.7488E-024	0.005	6408.108	5.81E-024	13.9
6408.1317	4.3048E-024	0.005	6408.1317	4.44E-024	-3.1
6408.1662	6.846E-024	0.005	6408.1662	6.21E-024	9.3
6408.1932	2.8884E-024	0.0056	0	0	0.0
6408.3197	1.4858E-024	0.0082	0	0	0.0
6408.367	4.3742E-024	0.005	0	0	0.0
6408.4171	2.6245E-024	0.0058	0	0	0.0
6408.446	2.9662E-024	0.0319	0	0	0.0
6408.5771	3.743E-025	0.0244	0	0	0.0
6408.6051	8.1652E-024	0.0054	6408.6051	7.94E-024	2.8
6408.622	2.2E-023	0.0149	6408.622	2.34E-023	-6.4
6408.7314	1.2199E-024	0.024	0	0	0.0
6408.9822	8.1791E-025	0.011	0	0	0.0
6409.0509	1.1012E-023	0.0148	6409.0509	1.17E-023	-6.2
6409.1617	2.3116E-024	0.0448	0	0	0.0
6409.3552	3.1814E-024	0.0194	0	0	0.0
6409.4659	1.2756E-024	0.0194	0	0	0.0
6409.5126	9.1542E-025	0.0194	0	0	0.0
6409.6401	4.2769E-024	0.0194	0	0	0.0
6409.6937	1.145E-023	0.0194	6409.6937	1.12E-023	2.2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6409.8185	9.9045E-024	0.0194	6409.8185	8.11E-024	18.1
6409.988	2.8282E-024	0.0045	0	0	0.0
6410.2925	4.1068E-024	0.0045	6410.2925	3.6E-024	12.3
6410.341	3.2343E-024	0.0069	0	0	0.0
6410.3526	1.1914E-023	0.0045	6410.3526	1.17E-023	1.8
6410.461	3.8812E-024	0.0045	0	0	0.0
6410.4984	1.1403E-023	0.0045	6410.4984	1.11E-023	2.7
6410.5705	5.8404E-024	0.0039	6410.5705	7.14E-024	-22.3
6410.6649	1.3379E-023	0.0058	6410.6649	1.25E-023	6.6
6410.8278	6.7571E-025	0.0222	0	0	0.0
6410.8458	1.6908E-023	0.0058	6410.8458	1.79E-023	-5.9
6410.8664	5.2555E-025	0.0197	0	0	0.0
6410.9497	5.2856E-024	0.0058	6410.9497	4.68E-024	11.5
6411.2168	9.7718E-024	0.0061	6411.2168	1.44E-023	-47.4
6411.2288	3.8631E-024	0.005	0	0	0.0
6411.3153	1.155E-023	0.0045	6411.3153	1.13E-023	2.2
6411.4983	4.5811E-024	0.0057	0	0	0.0
6411.5146	1.2872E-023	0.0045	6411.5146	1.85E-023	-43.7
6411.5692	1.472E-024	0.0074	0	0	0.0
6411.6196	7.5401E-024	0.0045	6411.6196	5E-024	33.7
6411.6401	1.5095E-023	0.0045	6411.6401	1.78E-023	-17.9
6411.8642	1.1325E-023	0.0045	6411.8642	8.83E-024	22.0
6411.8909	1.2309E-023	0.0046	6411.8909	1.41E-023	-14.6
6411.9976	1.3119E-023	0.0044	6411.9976	1.48E-023	-12.8
6412.0118	2.3567E-024	0.0078	0	0	0.0
6412.0994	4.5933E-024	0.0044	6412.0994	4.15E-024	9.7
6412.1629	3.2649E-023	0.0044	6412.1629	3.19E-023	2.3
6412.2609	1.5596E-023	0.0044	6412.2609	1.38E-023	11.5
6412.4103	3.9629E-024	0.0044	0	0	0.0
6412.5147	2.7143E-024	0.004	0	0	0.0
6412.5454	1.9038E-023	0.0027	6412.5454	1.32E-023	30.7
6412.5588	1.2008E-023	0.0025	6412.5588	1.52E-023	-26.6
6412.5896	1.0816E-023	0.0027	6412.5896	8.96E-024	17.2
6412.6126	1.4062E-024	0.0046	0	0	0.0
6412.8537	2.1114E-023	0.0038	6412.8537	2.16E-023	-2.3
6412.9232	2.9242E-023	0.0038	6412.9232	2.88E-023	1.5
6413	3.6081E-023	0.0038	6413	3.62E-023	-0.3
6413.1252	2.8343E-024	0.0038	0	0	0.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6413.2728	9.1863E-024	0.0076	6413.2728	8.27E-024	10.0
6413.4008	4.809E-024	0.0076	0	0	0.0
6413.5361	2.412E-024	0.0089	0	0	0.0
6413.5521	1.8313E-024	0.011	0	0	0.0
6413.6239	2.1484E-023	0.0076	6413.6239	1.92E-023	10.6
6413.7558	2.01E-024	0.0077	0	0	0.0
6413.8067	3.2159E-024	0.0077	0	0	0.0
6414.0839	1.3197E-023	0.0143	6414.0839	1.33E-023	-0.8
6414.1416	1.3383E-024	0.0142	0	0	0.0
6414.1636	3.3462E-024	0.0143	0	0	0.0
6414.2239	5.427E-024	0.0143	6414.2239	5.2E-024	4.2
6414.3554	5.2378E-024	0.0143	0	0	0.0
6414.4852	2.3859E-024	0.0143	0	0	0.0
6414.5874	3.4219E-024	0.014	0	0	0.0
6414.6423	2.85E-024	0.0057	0	0	0.0
6414.7001	1.5817E-024	0.0088	0	0	0.0
6414.9665	1.6657E-023	0.0039	6414.9665	1.38E-023	17.2
6415.1297	4.1182E-024	0.0046	6415.1297	4.19E-024	-1.7
6415.1621	2.9704E-024	0.0036	0	0	0.0
6415.2563	3.4152E-023	0.0026	6415.2563	3.42E-023	-0.1
6415.4149	2.9635E-023	0.0041	6415.4149	3.07E-023	-3.6
6415.5796	1.3906E-023	0.0041	6415.5796	1.44E-023	-3.6
6415.7781	1.3151E-023	0.0041	6415.7781	1.29E-023	1.9
6415.9306	3.1982E-023	0.0029	6415.9306	3.42E-023	-6.9
6416.1345	7.7793E-024	0.0041	6416.1345	7.62E-024	2.0
6416.2822	4.006E-023	0.0043	6416.2822	3.51E-023	12.4
6416.2927	1.3364E-023	0.0062	6416.2927	1.44E-023	-7.8
6416.3237	1.9247E-023	0.0043	6416.3237	1.99E-023	-3.4
6416.3406	2.9664E-023	0.0041	6416.3406	2.91E-023	1.9
6416.3512	4.5308E-024	0.0145	0	0	0.0
6416.4685	7.8363E-025	0.0163	0	0	0.0
6416.4932	1.4818E-023	0.0041	6416.4932	1.28E-023	13.6
6416.5257	1.4438E-023	0.0175	6416.5257	1.57E-023	-8.7
6416.5462	2.9224E-024	0.0467	0	0	0.0
6416.9774	1.0251E-024	0.0079	0	0	0.0
6417.0244	2.463E-024	0.0043	0	0	0.0
6417.2108	2.113E-024	0.0083	0	0	0.0
6417.2417	1.093E-023	0.0044	6417.2417	9.52E-024	12.9

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6417.2855	2.1241E-023	0.0035	6417.2855	1.92E-023	9.6
6417.3621	1.6765E-024	0.0075	0	0	0.0
6417.4995	4.5465E-024	0.0039	6417.4995	4.32E-024	5.0
6417.5527	5.8394E-024	0.0035	6417.5527	6.41E-024	-9.8
6417.6751	7.4591E-024	0.0035	6417.6751	6.98E-024	6.4
6417.7116	3.964E-024	0.0043	0	0	0.0
6417.7582	2.8117E-023	0.0035	6417.7582	2.97E-023	-5.6
6417.8561	3.0921E-024	0.0038	0	0	0.0
6417.8803	5.9334E-024	0.0026	6417.8803	5.12E-024	13.7
6417.9815	1.9229E-023	0.0035	6417.9815	1.77E-023	8.0
6418.0522	3.9794E-024	0.0044	6418.0522	4.19E-024	-5.3
6418.0895	6.3954E-024	0.0035	6418.0895	9.11E-024	-42.4
6418.1654	7.305E-024	0.0035	6418.1654	7.9E-024	-8.1
6418.1992	1.3587E-023	0.0035	6418.1992	1.54E-023	-13.3
6418.2394	8.2188E-023	0.0035	6418.2394	8.39E-023	-2.1
6418.3226	5.2158E-024	0.0038	6418.3226	6.98E-024	-33.8
6418.3558	2.8566E-024	0.0055	0	0	0.0
6418.525	1.4905E-024	0.0057	0	0	0.0
6418.5694	7.0062E-024	0.0047	6418.5694	5.52E-024	21.2
6418.6556	2.2131E-023	0.003	6418.6556	2.08E-023	6.0
6418.7241	5.9906E-024	0.003	6418.7241	6.37E-024	-6.3
6418.77	1.2634E-024	0.0065	0	0	0.0
6418.8178	1.4778E-023	0.003	6418.8178	1.73E-023	-17.1
6418.8527	4.3155E-024	0.0031	0	0	0.0
6418.8767	1.6481E-023	0.003	6418.8767	2.1E-023	-27.4
6418.9068	6.8138E-025	0.0111	0	0	0.0
6419.017	9.5821E-024	0.003	6419.017	1.35E-023	-40.9
6419.0372	4.2871E-023	0.003	6419.0372	3.54E-023	17.4
6419.0891	7.8928E-024	0.003	6419.0891	6.17E-024	21.8
6419.1279	2.2969E-023	0.003	6419.1279	2.27E-023	1.2
6419.1804	1.0647E-024	0.0074	0	0	0.0
6419.2473	1.6609E-024	0.0055	0	0	0.0
6419.2477	1.6721E-024	0.0078	0	0	0.0
6419.2718	1.7401E-023	0.0033	6419.2718	1.78E-023	-2.3
6419.3439	8.1621E-024	0.0033	6419.3439	8.07E-024	1.1
6419.4599	7.7653E-024	0.0033	6419.4599	7.62E-024	1.9
6419.5022	4.988E-024	0.0035	6419.5022	7.3E-024	-46.4
6419.5395	1.5587E-024	0.0075	0	0	0.0



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6419.7837	1.4892E-023	0.0022	6419.7837	1.44E-023	3.3
6419.8649	3.4471E-024	0.0028	0	0	0.0
6419.9755	1.3483E-023	0.0032	6419.9755	1.35E-023	-0.1
6420.0016	1.116E-023	0.0032	6420.0016	1.1E-023	1.4
6420.0825	1.7476E-023	0.0032	6420.0825	1.73E-023	1.0
6420.1334	1.742E-024	0.0058	0	0	0.0
6420.3028	5.6508E-024	0.0032	6420.3028	5.32E-024	5.9
6420.4222	7.761E-024	0.0032	6420.4222	7.78E-024	-0.2
6420.8887	1.2549E-023	0.0033	6420.8887	1.25E-023	0.4
6420.9795	6.9325E-024	0.0033	6420.9795	8.35E-024	-20.4
6421.018	2.5891E-024	0.0058	0	0	0.0
6421.1385	5.6037E-024	0.0023	6421.1385	5.97E-024	-6.5
6421.2207	4.6688E-025	0.0619	0	0	0.0
6421.2325	9.0471E-023	0.0022	6421.2325	8.91E-023	1.5
6421.3861	2.0936E-024	0.0064	0	0	0.0
6421.4347	1.2038E-023	0.0035	6421.4347	1.26E-023	-4.7
6421.5012	1.7018E-023	0.0035	6421.5012	1.93E-023	-13.4
6421.5224	1.3368E-023	0.0035	6421.5224	1.1E-023	17.7
6421.5834	6.4224E-024	0.0035	6421.5834	5.93E-024	7.7
6421.6285	1.259E-024	0.0094	0	0	0.0
6421.6811	1.2038E-023	0.0035	6421.6811	1.11E-023	7.8
6421.7502	1.9805E-024	0.0066	0	0	0.0
6421.8852	6.856E-024	0.0035	6421.8852	6.77E-024	1.3
6421.9034	1.1389E-023	0.0035	6421.9034	1.18E-023	-3.6
6422.1926	3.258E-024	0.0042	0	0	0.0
6422.2222	1.7352E-023	0.0035	6422.2222	2.25E-023	-29.7
6422.2381	3.7255E-024	0.0059	0	0	0.0
6422.442	5.3417E-023	0.0035	6422.442	5.2E-023	2.7
6422.4635	5.6661E-025	0.0238	0	0	0.0
6422.5417	8.1049E-024	0.0035	6422.5417	8.83E-024	-8.9
6422.605	1.1336E-024	0.0084	0	0	0.0
6422.639	1.2611E-024	0.0077	0	0	0.0
6422.8354	9.9469E-024	0.0035	6422.8354	8.75E-024	12.0
6423.0163	5.4127E-024	0.0035	6423.0163	5.28E-024	2.5
6423.2541	1.2532E-023	0.0037	6423.2541	1.17E-023	6.6
6423.2854	1.3261E-023	0.0037	6423.2854	1.48E-023	-11.6
6423.4045	1.9457E-024	0.0071	0	0	0.0
6423.4359	1.1874E-023	0.0065	6423.4359	1.59E-023	-33.9

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6423.4484	2.5037E-024	0.0238	0	0	0.0
6423.6114	1.6537E-023	0.0037	6423.6114	1.51E-023	8.7
6423.7138	1.3075E-023	0.0037	6423.7138	1.31E-023	-0.2
6423.7351	1.8397E-023	0.0037	6423.7351	1.87E-023	-1.6
6423.7697	6.4381E-025	0.0194	0	0	0.0
6423.8372	5.0728E-024	0.0052	6423.8372	4.24E-024	16.4
6423.8821	1.0072E-023	0.0043	6423.8821	1E-023	0.7
6423.963	2.1406E-024	0.0105	0	0	0.0
6423.9959	2.0921E-023	0.0043	6423.9959	2.21E-023	-5.6
6424.1472	2.5605E-023	0.0043	6424.1472	2.72E-023	-6.2
6424.2163	3.1826E-023	0.0043	6424.2163	2.88E-023	9.5
6424.4107	7.9286E-023	0.0043	6424.4107	6.73E-023	15.1
6424.4268	2.1653E-023	0.0043	6424.4268	2.68E-023	-23.8
6424.4731	3.5752E-023	0.0077	6424.4731	3.75E-023	-4.9
6424.4844	3.7208E-024	0.0124	0	0	0.0
6424.5568	5.1987E-024	0.0195	6424.5568	4.72E-024	9.2
6424.7347	4.8099E-024	0.0195	0	0	0.0
6424.9383	4.4585E-023	0.0195	6424.9383	4.03E-023	9.6
6425.027	3.5138E-024	0.0195	6425.027	4.36E-024	-24.1
6425.2336	2.9362E-024	0.0052	0	0	0.0
6425.3639	9.8591E-024	0.0044	6425.3639	1.02E-023	-3.5
6425.5869	2.0742E-024	0.0081	0	0	0.0
6425.6108	7.4159E-023	0.0044	6425.6108	7.7E-023	-3.8
6425.792	4.9721E-024	0.004	6425.792	5.89E-024	-18.5
6425.883	2.8486E-023	0.0076	6425.883	2.95E-023	-3.6
6425.927	2.788E-024	0.0076	0	0	0.0
6426.0501	8.8759E-024	0.0076	6426.0501	7.5E-024	15.5
6426.0724	8.6065E-024	0.0076	6426.0724	9.36E-024	-8.8
6426.131	1.3563E-023	0.0076	6426.131	1.23E-023	9.3
6426.1877	2.2224E-024	0.0075	0	0	0.0
6426.2502	1.1098E-023	0.0076	6426.2502	1.08E-023	2.7
6426.4239	2.0877E-024	0.0075	0	0	0.0
6426.594	3.8667E-024	0.008	0	0	0.0
6426.6517	3.0987E-024	0.0083	0	0	0.0
6426.7914	5.5643E-024	0.008	6426.7914	5.32E-024	4.4
6426.8078	1.1317E-024	0.022	0	0	0.0
6426.9331	2.9815E-023	0.008	6426.9331	2.81E-023	5.8
6426.9468	1.8997E-023	0.0079	6426.9468	1.84E-023	3.1

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6427.0984	3.4354E-024	0.004	0	0	0.0
6427.155	9.9234E-024	0.0028	6427.155	9.72E-024	2.0
6427.1826	1.8218E-024	0.0075	0	0	0.0
6427.2035	1.1801E-023	0.0028	6427.2035	1.2E-023	-1.7
6427.2421	2.5237E-024	0.0055	0	0	0.0
6427.4122	2.0244E-023	0.0043	6427.4122	2.27E-023	-12.1
6427.4862	4.9976E-023	0.0043	6427.4862	5.12E-023	-2.4
6427.6224	2.3617E-024	0.0057	0	0	0.0
6427.8636	1.1043E-023	0.0083	6427.8636	9.96E-024	9.8
6428.0822	3.1277E-024	0.0083	0	0	0.0
6428.164	8.9479E-023	0.0083	6428.164	8.87E-023	0.9
6428.5359	6.1233E-024	0.0169	6428.5359	7.76E-024	-26.7
6428.6015	5.988E-023	0.005	6428.6015	6.56E-023	-9.6
6428.6136	2.259E-023	0.0055	6428.6136	1.69E-023	25.2
6428.6932	4.3565E-024	0.0052	6428.6932	6.2E-024	-42.3
6428.8106	3.0342E-024	0.0065	0	0	0.0
6428.8691	5.4141E-024	0.0076	6428.8691	1.06E-023	-95.8
6428.8819	4.1335E-024	0.0092	0	0	0.0
6429.023	1.8554E-023	0.005	6429.023	1.96E-023	-5.6
6429.2797	2.0598E-024	0.0079	0	0	0.0
6429.3649	7.7907E-024	0.0083	6429.3649	7.98E-024	-2.4
6429.5482	8.5555E-024	0.0062	6429.5482	7.34E-024	14.2
6429.5845	1.5902E-023	0.0048	6429.5845	1.44E-023	9.4
6429.6095	9.8798E-024	0.0073	6429.6095	1.17E-023	-18.4
6429.6241	3.6857E-024	0.0112	0	0	0.0
6429.6866	6.6599E-024	0.0049	6429.6866	5.93E-024	11.0
6429.7981	3.3653E-024	0.0065	0	0	0.0
6429.8171	5.7127E-024	0.0044	6429.8171	5.28E-024	7.6
6429.8458	3.7609E-024	0.0048	0	0	0.0
6430.1211	7.1697E-024	0.0057	6430.1211	6.41E-024	10.6
6430.1655	5.8071E-024	0.0058	6430.1655	6.25E-024	-7.6
6430.2694	4.2977E-024	0.0064	6430.2694	5.45E-024	-26.8
6430.3072	4.3396E-024	0.0064	6430.3072	4.6E-024	-6.0
6430.3693	3.564E-024	0.0116	0	0	0.0
6430.3875	1.0021E-023	0.0059	6430.3875	1.42E-023	-41.7
6430.4154	1.216E-024	0.0161	0	0	0.0
6430.5016	1.4885E-024	0.013	0	0	0.0
6430.5298	1.4885E-024	0.013	0	0	0.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6430.6949	7.0631E-024	0.0058	6430.6949	7.22E-024	-2.2
6430.7951	1.4951E-023	0.0058	6430.7951	1.4E-023	6.4
6430.9814	2.9394E-024	0.0087	0	0	0.0
6431.2055	3.6161E-024	0.0078	0	0	0.0
6431.2484	5.1106E-023	0.0032	6431.2484	5E-023	2.2
6431.6577	4.6852E-024	0.0077	0	0	0.0
6431.7715	3.7312E-024	0.009	0	0	0.0
6431.8857	2.9996E-024	0.0072	0	0	0.0
6431.9095	3.2625E-023	0.0057	6431.9095	3.18E-023	2.5
6431.9864	3.0319E-024	0.028	0	0	0.0
6431.9997	3.6896E-023	0.0041	6431.9997	3.94E-023	-6.8
6432.0431	6.6342E-024	0.0054	6432.0431	5.65E-024	14.8
6432.1867	3.5745E-023	0.0053	6432.1867	3.72E-023	-4.1
6432.2293	1.0402E-022	0.0053	6432.2293	9.8E-023	5.8
6432.3506	2.895E-024	0.0096	0	0	0.0
6432.4108	4.9232E-024	0.0065	6432.4108	7.1E-024	-44.2
6432.4781	1.9985E-023	0.0053	6432.4781	2.1E-023	-5.1
6432.6819	4.3438E-023	0.0033	6432.6819	4.15E-023	4.5
6432.8618	3.0457E-023	0.0033	6432.8618	3.12E-023	-2.4
6432.8837	1.6384E-024	0.0097	0	0	0.0
6433.0215	2.1446E-023	0.0033	6433.0215	2.01E-023	6.3
6433.0613	1.4745E-023	0.0033	6433.0613	1.79E-023	-21.4
6433.4081	2.0982E-023	0.0046	6433.4081	2.22E-023	-5.8
6433.5155	4.5486E-024	0.0046	6433.5155	4.11E-024	9.6
6433.5531	2.2638E-024	0.0057	0	0	0.0
6433.7812	2.9094E-023	0.0046	6433.7812	2.81E-023	3.4
6433.8504	3.4314E-023	0.0046	6433.8504	3.62E-023	-5.5
6433.9727	1.0061E-024	0.0108	0	0	0.0
6434.1768	5.5186E-023	0.0036	6434.1768	5.32E-023	3.6
6434.2688	1.586E-024	0.0108	0	0	0.0
6434.31	5.1241E-023	0.0036	6434.31	5.12E-023	0.1
6434.3846	5.5726E-024	0.0044	6434.3846	6.65E-024	-19.3
6434.4143	3.9114E-023	0.0036	6434.4143	3.94E-023	-0.7
6434.46	4.8003E-024	0.0047	6434.46	5.16E-024	-7.5
6434.4994	7.827E-024	0.0036	6434.4994	7.26E-024	7.2
6434.6274	1.1096E-023	0.0032	6434.6274	1.38E-023	-24.4
6434.6675	2.1834E-023	0.0028	6434.6675	2.16E-023	1.1
6434.7865	1.0538E-022	0.004	6434.7865	1.04E-022	1.3

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6434.865	3.9933E-024	0.0118	6434.865	4.96E-024	-24.2
6434.8847	3.8392E-023	0.004	6434.8847	3.53E-023	8.1
6435.1957	8.0695E-024	0.0055	6435.1957	5.88E-024	27.1
6435.2258	7.4556E-023	0.0064	6435.2258	7.2E-023	3.4
6435.2561	7.4234E-024	0.0125	6435.2561	3.9E-024	47.5
6435.337	3.3277E-024	0.0098	6435.337	4.28E-024	-28.6
6435.4438	3.5453E-024	0.0049	6435.4438	4.15E-024	-17.1
6435.6443	2.4323E-024	0.0064	0	0	0.0
6435.7306	1.6406E-023	0.0045	6435.7306	1.58E-023	3.7
6435.87	7.3762E-024	0.0056	6435.87	7.5E-024	-1.7
6436.0052	4.0635E-023	0.0037	6436.0052	3.91E-023	3.8
6436.0413	1.2888E-023	0.0037	6436.0413	1.33E-023	-3.2
6436.0964	5.3358E-024	0.0049	6436.0964	5.32E-024	0.3
6436.1336	1.0292E-022	0.0037	6436.1336	1.01E-022	1.9
6436.2146	3.1604E-024	0.0064	0	0	0.0
6436.6363	1.347E-023	0.0028	6436.6363	1.29E-023	4.2
6436.6519	2.5315E-024	0.0084	0	0	0.0
6436.7206	5.729E-023	0.0038	6436.7206	5.81E-023	-1.4
6436.7737	7.5922E-023	0.0038	6436.7737	7.82E-023	-3.0
6436.9737	1.8858E-024	0.0078	0	0	0.0
6437.0549	5.6675E-023	0.0038	6437.0549	6.05E-023	-6.7
6437.087	7.584E-024	0.0038	6437.087	7.94E-024	-4.7
6437.109	2.7261E-024	0.0065	0	0	0.0
6437.1877	3.0336E-023	0.0038	6437.1877	3.07E-023	-1.2
6437.3486	4.1662E-023	0.0033	6437.3486	4.92E-023	-18.1
6437.3654	1.9611E-023	0.0041	6437.3654	8E-024	59.2
6437.5242	7.2144E-023	0.0033	6437.5242	6.86E-023	4.9
6437.5606	5.0257E-024	0.004	6437.5606	4.24E-024	15.6
6437.6918	1.9693E-024	0.0071	0	0	0.0
6437.7266	4.6975E-024	0.004	6437.7266	4.52E-024	3.8
6437.8638	1.738E-023	0.0021	6437.8638	1.61E-023	7.4
6437.9149	3.2699E-023	0.0021	6437.9149	3.45E-023	-5.5
6437.9269	2.7693E-024	0.0223	0	0	0.0
6438.082	2.7295E-024	0.0064	6438.082	4.03E-024	-47.6
6438.1456	1.1431E-023	0.0034	6438.1456	1.43E-023	-25.1
6438.1994	4.7818E-024	0.0046	0	0	0.0
6438.2264	1.6562E-023	0.0034	6438.2264	1.61E-023	2.8
6438.2857	6.9778E-024	0.0037	6438.2857	6.53E-024	6.4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6438.4208	1.9907E-023	0.0034	6438.4208	2.24E-023	-12.5
6438.4496	2.9963E-024	0.0061	0	0	0.0
6438.5052	3.0374E-024	0.006	6438.5052	4.4E-024	-44.9
6438.7047	7.101E-023	0.0034	6438.7047	6.9E-023	2.8
6438.7329	2.1467E-023	0.0034	6438.7329	2.24E-023	-4.3
6438.8246	1.8779E-023	0.0034	6438.8246	2.06E-023	-9.7
6438.8982	4.3098E-024	0.0059	6438.8982	6E-024	-39.2
6438.9265	5.3216E-023	0.0034	6438.9265	5.12E-023	3.8
6438.9395	7.9999E-023	0.0034	6438.9395	8.24E-023	-3.0
6438.9717	1.7854E-024	0.0114	0	0	0.0
6439.1012	5.0897E-024	0.0044	6439.1012	5.16E-024	-1.4
6439.1669	4.1456E-024	0.0049	6439.1669	5E-024	-20.6
6439.2586	2.3181E-024	0.005	0	0	0.0
6439.4008	3.4824E-023	0.0035	6439.4008	3.67E-023	-5.4
6439.4742	7.0018E-024	0.0038	6439.4742	6.69E-024	4.5
6439.5664	3.737E-024	0.0055	0	0	0.0
6439.6502	3.4701E-024	0.0111	0	0	0.0
6439.6607	3.0594E-024	0.011	0	0	0.0
6439.6842	3.045E-023	0.0035	6439.6842	2.94E-023	3.4
6439.8014	2.1909E-023	0.0035	6439.8014	2.25E-023	-2.7
6439.8998	1.2216E-023	0.0044	6439.8998	1.14E-023	6.7
6439.938	1.0665E-022	0.0032	6439.938	1.04E-022	2.5
6440.0108	7.1959E-024	0.0057	6440.0108	6.01E-024	16.5
6440.1467	2.3011E-023	0.0057	6440.1467	2.71E-023	-17.8
6440.4635	7.464E-024	0.0057	6440.4635	7.94E-024	-6.4
6440.4949	6.0824E-024	0.0057	6440.4949	5.61E-024	7.8
6440.6839	5.6855E-024	0.0072	6440.6839	5.36E-024	5.7
6440.7651	1.7495E-023	0.0072	6440.7651	1.71E-023	2.3
6441.0611	1.0514E-023	0.0072	6441.0611	1.02E-023	3.0
6441.0805	2.0652E-023	0.0072	6441.0805	2.14E-023	-3.6
6441.1576	2.5083E-024	0.0072	0	0	0.0
6441.2396	3.8942E-024	0.0083	6441.2396	4.19E-024	-7.6
6441.2572	5.6752E-024	0.0073	6441.2572	5.24E-024	7.7
6441.4882	2.2873E-024	0.0076	0	0	0.0
6441.5927	6.3385E-024	0.0076	6441.5927	6.25E-024	1.4
6441.708	6.4392E-023	0.0076	6441.708	6.17E-023	4.2
6441.7256	5.3514E-024	0.0076	6441.7256	5.77E-024	-7.8
6441.8323	3.6289E-023	0.0076	6441.8323	3.99E-023	-10.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6441.8485	5.1405E-023	0.0048	6441.8485	4.76E-023	7.4
6441.9163	2.8748E-024	0.007	0	0	0.0
6441.9443	3.3281E-024	0.0073	0	0	0.0
6442.2243	6.0508E-024	0.0041	6442.2243	5.4E-024	10.8
6442.2609	1.155E-023	0.0041	6442.2609	1.1E-023	4.8
6442.3162	5.4351E-024	0.004	6442.3162	5.52E-024	-1.6
6442.3513	5.7748E-024	0.0041	6442.3513	6.21E-024	-7.5
6442.4215	8.7259E-023	0.0041	6442.4215	8.55E-023	2.0
6442.4474	9.108E-024	0.0041	6442.4474	7.62E-024	16.3
6442.4709	8.6834E-024	0.0041	6442.4709	9.15E-024	-5.4
6442.569	5.3205E-024	0.0032	6442.569	5.2E-024	2.3
6442.7917	1.9753E-024	0.006	0	0	0.0
6442.8531	4.509E-023	0.003	6442.8531	4.36E-023	3.3
6442.9754	5.0125E-024	0.0043	6442.9754	5.81E-024	-15.9
6442.9819	3.3983E-024	0.0056	6442.9819	1E-024	70.6
6443.0363	5.9002E-023	0.003	6443.0363	6.13E-023	-3.9
6443.069	9.048E-024	0.006	6443.069	8.67E-024	4.2
6443.2383	1.954E-024	0.0061	0	0	0.0
6443.4542	1.423E-022	0.0031	6443.4542	1.38E-022	3.0
6443.4776	1.4255E-024	0.0149	0	0	0.0
6443.5033	9.1066E-024	0.0034	6443.5033	7.98E-024	12.4
6443.614	1.7298E-023	0.0031	6443.614	1.82E-023	-5.2
6443.7918	1.2979E-024	0.0127	0	0	0.0
6443.8514	8.3237E-023	0.0031	6443.8514	8.07E-023	3.0
6443.8909	6.6116E-023	0.0022	6443.8909	6.49E-023	1.8
6443.9409	6.2185E-024	0.0025	6443.9409	8.59E-024	-38.1
6443.9807	9.9939E-024	0.0032	6443.9807	1.17E-023	-17.1
6444.0202	1.5097E-024	0.0079	0	0	0.0
6444.113	5.3584E-024	0.0035	6444.113	5.93E-024	-10.7
6444.2001	4.3165E-024	0.0039	0	0	0.0
6444.2402	1.5309E-024	0.0105	0	0	0.0
6444.2585	4.3803E-024	0.0049	6444.2585	5.52E-024	-26.0
6444.4963	6.0814E-024	0.0033	6444.4963	7.22E-024	-18.7
6444.6265	5.7596E-024	0.0025	6444.6265	6.25E-024	-8.5
6444.7288	6.6617E-024	0.0036	6444.7288	6.17E-024	7.4
6444.8907	5.0229E-024	0.0042	6444.8907	6.25E-024	-24.4
6444.9203	5.9168E-024	0.0038	6444.9203	6.41E-024	-8.3
6444.9534	2.1496E-024	0.0074	0	0	0.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6445.0221	2.139E-023	0.0032	6445.0221	2.42E-023	-13.1
6445.0702	1.6388E-024	0.0092	0	0	0.0
6445.1866	3.6182E-024	0.0051	0	0	0.0
6445.2207	1.92E-023	0.0033	6445.2207	1.65E-023	14.1
6445.2633	3.8485E-024	0.0035	0	0	0.0
6445.358	3.65E-023	0.0035	6445.358	3.1E-023	15.1
6445.3741	1.128E-024	0.0485	0	0	0.0
6445.5044	3.6819E-024	0.0062	0	0	0.0
6445.6151	4.6184E-024	0.0054	0	0	0.0
6445.9228	3.0276E-024	0.0137	6445.9228	4.72E-024	-55.9
6446.1921	8.0306E-023	0.0136	6446.1921	7.58E-023	5.6
6446.2347	1.2499E-022	0.0136	6446.2347	1.23E-022	1.6
6446.3592	9.9881E-024	0.0136	6446.3592	1.06E-023	-6.1
6446.5695	9.7763E-024	0.0079	6446.5695	1.11E-023	-13.5
6446.6399	4.7111E-024	0.0167	6446.6399	5.28E-024	-12.1
6446.6831	3.5697E-024	0.006	6446.6831	4.32E-024	-21.0
6446.8257	6.7084E-024	0.0062	6446.8257	9.28E-024	-38.3
6446.8775	3.5492E-024	0.0061	0	0	0.0
6447.0098	1.895E-022	0.0063	6447.0098	1.87E-022	1.3
6447.0902	1.0565E-023	0.0063	6447.0902	1.25E-023	-18.3
6447.317	2.9132E-024	0.0067	0	0	0.0
6447.3447	2.9377E-023	0.0035	6447.3447	3.4E-023	-15.7
6447.3671	1.2288E-023	0.0035	6447.3671	8.39E-024	31.7
6447.4998	1.0299E-023	0.0035	6447.4998	1.29E-023	-25.3
6447.6532	1.7901E-022	0.0035	6447.6532	1.77E-022	1.1
6448.2866	7.2171E-024	0.0036	6448.2866	7.02E-024	2.7
6448.3392	3.9776E-024	0.0045	6448.3392	4.76E-024	-19.7
6448.4241	2.5014E-024	0.0061	0	0	0.0
6448.4616	1.1892E-023	0.0036	6448.4616	1.19E-023	-0.1
6448.5364	3.3871E-023	0.0022	6448.5364	3.38E-023	0.2
6448.7593	6.6512E-024	0.0099	6448.7593	5.08E-024	23.6
6448.772	1.8907E-023	0.0046	6448.772	2E-023	-5.8
6448.8189	7.1235E-023	0.0031	6448.8189	7.02E-023	1.5
6448.8793	1.0655E-023	0.0031	6448.8793	9.4E-024	11.8
6449.0593	1.4637E-023	0.0031	6449.0593	1.58E-023	-7.9
6449.1013	4.3645E-023	0.0031	6449.1013	4.24E-023	2.9
6449.1389	4.697E-023	0.0031	6449.1389	4.6E-023	2.1
6449.1746	1.478E-024	0.0117	0	0	0.0



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6449.3149	4.0631E-024	0.0041	6449.3149	4.4E-024	-8.3
6449.3874	2.1136E-024	0.006	0	0	0.0
6449.4549	1.6622E-024	0.0073	0	0	0.0
6449.483	1.3174E-023	0.0036	6449.483	1.25E-023	5.1
6449.5419	1.4837E-023	0.0036	6449.5419	1.52E-023	-2.4
6449.7191	1.7853E-024	0.0067	0	0	0.0
6449.7916	6.4641E-024	0.0036	6449.7916	5.16E-024	20.2
6449.8324	4.6787E-024	0.0038	6449.8324	4.68E-024	0.0
6449.899	1.3489E-023	0.0056	6449.899	1.26E-023	6.6
6450.0057	1.3798E-024	0.0139	0	0	0.0
6450.1165	2.913E-023	0.0027	6450.1165	2.92E-023	-0.2
6450.2035	6.2306E-023	0.0067	6450.2035	6.01E-023	3.5
6450.2577	8.1102E-023	0.0065	6450.2577	8.23E-023	-1.5
6450.2913	7.5327E-024	0.0089	6450.2913	7.94E-024	-5.4
6450.4345	2.8494E-023	0.0038	6450.4345	2.77E-023	2.8
6450.4845	1.2356E-024	0.0154	0	0	0.0
6450.5677	6.9708E-023	0.0047	6450.5677	6.82E-023	2.2
6450.5877	9.7667E-024	0.0121	6450.5877	1.04E-023	-6.5
6450.6235	1.337E-023	0.0031	6450.6235	1.32E-023	1.3
6450.6896	4.6071E-023	0.0022	6450.6896	4.44E-023	3.6
6450.8116	1.6889E-023	0.0031	6450.8116	1.66E-023	1.7
6450.8545	9.5605E-024	0.0031	6450.8545	1.15E-023	-20.3
6450.8993	4.0643E-023	0.0031	6450.8993	3.99E-023	1.8
6450.9215	3.7947E-023	0.0031	6450.9215	4.03E-023	-6.2
6450.9957	8.596E-023	0.0031	6450.9957	8.51E-023	1.0
6451.1864	6.7976E-023	0.0031	6451.1864	6.73E-023	1.0
6451.311	7.7073E-024	0.0031	6451.311	7.78E-024	-0.9
6451.4329	3.1887E-023	0.0047	6451.4329	4.15E-023	-30.1
6451.4431	6.1711E-024	0.018	0	0	0.0
6451.4919	1.3816E-023	0.003	6451.4919	1.32E-023	4.5
6451.5935	5.0294E-023	0.003	6451.5935	4.72E-023	6.2
6451.6483	5.7076E-024	0.004	6451.6483	6.01E-024	-5.3
6451.7239	1.5375E-023	0.003	6451.7239	1.54E-023	-0.2
6451.8277	2.5484E-023	0.003	6451.8277	2.66E-023	-4.4
6451.8653	6.6764E-024	0.0037	6451.8653	5.89E-024	11.8
6451.9741	3.0054E-023	0.003	6451.9741	3.35E-023	-11.5
6452.0567	2.6749E-024	0.0314	0	0	0.0
6452.0711	1.3672E-022	0.0021	6452.0711	1.38E-022	-0.9

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6452.088	5.0338E-024	0.014	0	0	0.0
6452.2102	1.0511E-023	0.0031	6452.2102	1.15E-023	-9.4
6452.368	4.2761E-024	0.0055	6452.368	4.8E-024	-12.3
6452.5203	3.4546E-024	0.0064	0	0	0.0
6452.6354	3.6652E-024	0.0061	0	0	0.0
6452.7093	4.3182E-024	0.0054	0	0	0.0
6452.8136	1.3703E-022	0.0071	6452.8136	1.39E-022	-1.4
6452.8606	6.2436E-024	0.0064	6452.8606	7.82E-024	-25.2
6452.8925	2.278E-024	0.0109	0	0	0.0
6453.0819	1.7128E-023	0.0057	6453.0819	1.5E-023	12.4
6453.2487	3.2905E-024	0.0082	0	0	0.0
6453.3724	7.7835E-024	0.0057	6453.3724	6.65E-024	14.6
6453.4475	3.3919E-024	0.009	0	0	0.0
6453.5079	5.8881E-024	0.0082	6453.5079	7.46E-024	-26.7
6453.535	1.3539E-022	0.008	6453.535	1.23E-022	9.2
6453.5854	1.4077E-024	0.0187	0	0	0.0
6453.7647	9.5596E-024	0.008	6453.7647	8.47E-024	11.4
6453.9092	9.7301E-024	0.008	6453.9092	1.18E-023	-21.3
6453.9324	2.1757E-024	0.0136	0	0	0.0
6454.0274	1.6043E-023	0.0082	6454.0274	1.99E-023	-24.0
6454.039	5.1404E-024	0.0174	0	0	0.0
6454.9097	1.5911E-022	0.0034	6454.9097	1.63E-022	-2.4
6454.936	1.1271E-024	0.0257	0	0	0.0
6455.1308	9.2047E-024	0.0034	6455.1308	8.79E-024	4.5
6455.2356	1.3817E-023	0.0034	6455.2356	1.23E-023	11.0
6455.5238	7.2095E-024	0.0032	6455.5238	7.26E-024	-0.7
6455.6718	2.8065E-023	0.0032	6455.6718	2.61E-023	7.0
6455.6886	4.7165E-023	0.0032	6455.6886	4.62E-023	2.0
6455.7212	1.2392E-023	0.0032	6455.7212	1.28E-023	-3.3
6455.7388	9.0276E-024	0.0035	6455.7388	6.44E-024	28.7
6455.7739	1.8828E-023	0.0037	6455.7739	2.37E-023	-25.9
6455.7844	9.4663E-024	0.0057	0	0	0.0
6455.833	2.7313E-023	0.0032	6455.833	2.75E-023	-0.7
6455.8588	1.2601E-023	0.0032	6455.8588	1.13E-023	10.3
6455.8781	6.3109E-024	0.0038	0	0	0.0
6455.9515	8.6096E-024	0.0032	6455.9515	6.2E-024	28.0
6456.0738	1.2307E-022	0.0023	6456.0738	1.18E-022	4.1
6456.1595	9.8827E-023	0.0024	6456.1595	9.88E-023	0.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6456.2484	4.8423E-023	0.0027	6456.2484	4.8E-023	0.9
6456.355	3.7804E-023	0.0027	6456.355	3.89E-023	-2.9
6456.4031	1.468E-022	0.0027	6456.4031	1.55E-022	-5.6
6456.502	6.3252E-024	0.0041	6456.502	7.46E-024	-17.9
6456.6137	1.5059E-023	0.0027	6456.6137	1.9E-023	-26.2
6456.7298	3.828E-023	0.002	6456.7298	3.72E-023	2.8
6456.7668	1.8093E-022	0.002	6456.7668	1.85E-022	-2.2
6456.7794	2.4296E-024	0.0134	0	0	0.0
6456.9658	4.1429E-023	0.0028	6456.9658	3.71E-023	10.4
6456.9909	1.297E-022	0.0028	6456.9909	1.37E-022	-5.6
6457.2037	1.4928E-022	0.0028	6457.2037	1.51E-022	-1.2
6457.3629	7.6603E-024	0.004	6457.3629	9.32E-024	-21.7
6457.4308	5.7742E-023	0.0031	6457.4308	5.89E-023	-2.0
6457.4663	2.302E-023	0.0026	6457.4663	2.13E-023	7.5
6457.4828	9.3111E-024	0.0027	6457.4828	1.04E-023	-11.7
6457.5344	1.1525E-023	0.003	6457.5344	1.19E-023	-3.3
6457.5693	7.3109E-024	0.003	6457.5693	7.58E-024	-3.7
6457.7961	5.204E-024	0.0036	6457.7961	4.52E-024	13.1
6457.8197	7.0159E-024	0.0031	6457.8197	6.25E-024	10.9
6457.8572	3.7924E-024	0.0042	0	0	0.0
6457.9505	7.5848E-024	0.003	6457.9505	7.58E-024	0.1
6458.1195	1.8302E-023	0.002	6458.1195	1.63E-023	10.9
6458.1851	1.2237E-023	0.0027	6458.1851	1.16E-023	5.2
6458.2606	4.5592E-023	0.0027	6458.2606	4.76E-023	-4.4
6458.2956	3.27E-024	0.0061	0	0	0.0
6458.5358	2.9957E-024	0.0065	0	0	0.0
6458.6096	2.2701E-023	0.0027	6458.6096	2.31E-023	-1.8
6458.6499	1.9197E-024	0.0093	0	0	0.0
6458.7328	3.091E-023	0.0023	6458.7328	2.98E-023	3.6
6458.7489	1.4768E-023	0.0031	6458.7489	1.13E-023	23.5
6458.7679	2.1569E-023	0.0024	6458.7679	2.18E-023	-1.1
6458.7945	1.5347E-022	0.0033	6458.7945	1.5E-022	2.3
6458.9333	1.7159E-023	0.0035	6458.9333	1.73E-023	-0.8
6459.1519	6.3292E-024	0.0063	6459.1519	8.03E-024	-26.9
6459.268	4.4605E-024	0.0086	6459.268	5.81E-024	-30.3
6459.2907	6.3431E-023	0.0033	6459.2907	6.21E-023	2.1
6459.4636	1.6358E-022	0.0025	6459.4636	1.66E-022	-1.5
6459.5038	7.0363E-024	0.0039	6459.5038	5.85E-024	16.9

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6459.6643	7.1906E-023	0.0038	6459.6643	6.82E-023	5.2
6459.7211	6.2367E-024	0.0061	6459.7211	6.98E-024	-11.9
6459.7879	1.3279E-022	0.0038	6459.7879	1.3E-022	2.1
6459.9167	6.7688E-024	0.0057	6459.9167	5.77E-024	14.8
6459.9675	6.9756E-023	0.0038	6459.9675	6.65E-023	4.7
6460.0308	2.767E-024	0.0108	0	0	0.0
6460.1199	3.0125E-023	0.0023	6460.1199	3.02E-023	-0.2
6460.1668	1.1503E-022	0.0038	6460.1668	1.11E-022	3.5
6460.2409	1.0866E-023	0.0038	6460.2409	1.39E-023	-27.9
6460.2789	1.3465E-023	0.0038	6460.2789	1.38E-023	-2.5
6460.4197	1.3126E-022	0.006	6460.4197	1.36E-022	-3.6
6460.4334	2.4499E-024	0.0155	0	0	0.0
6460.5478	1.3568E-022	0.0038	6460.5478	1.38E-022	-1.7
6460.6096	7.7042E-023	0.0038	6460.6096	7.02E-023	8.9
6460.6644	4.4423E-023	0.0038	6460.6644	4.92E-023	-10.8
6460.6764	3.9412E-024	0.0133	0	0	0.0
6460.8835	3.2606E-024	0.0174	6460.8835	4.15E-024	-27.3
6460.9165	2.8157E-024	0.0174	0	0	0.0
6460.9576	1.2961E-023	0.0174	6460.9576	2.23E-023	-72.1
6460.968	7.7484E-024	0.0174	0	0	0.0
6461.2293	3.2182E-024	0.0174	0	0	0.0
6461.4229	2.6163E-024	0.0262	0	0	0.0
6461.5028	1.5371E-023	0.0275	6461.5028	1.64E-023	-6.7
6461.5276	3.9858E-024	0.0267	0	0	0.0
6461.5861	1.4103E-024	0.0253	0	0	0.0
6461.6236	6.5817E-024	0.0275	6461.6236	8E-024	-21.5
6461.7144	4.2311E-024	0.0269	6461.7144	4.28E-024	-1.2
6461.7749	4.5377E-024	0.027	6461.7749	5.08E-024	-12.0
6461.8561	1.2203E-023	0.0275	6461.8561	1.21E-023	0.8
6461.9405	2.3854E-023	0.0275	6461.9405	2.32E-023	2.7
6462.2406	1.6765E-023	0.025	6462.2406	1.95E-023	-16.3
6462.3505	1.5579E-023	0.0252	6462.3505	1.59E-023	-2.1
6462.4367	2.208E-024	0.0247	0	0	0.0
6462.5646	6.0109E-024	0.0252	6462.5646	5.12E-024	14.8
6462.6104	1.0836E-023	0.0252	6462.6104	8.83E-024	18.5
6462.6932	4.3343E-024	0.025	0	0	0.0
6462.7271	3.6624E-023	0.013	6462.7271	3.77E-023	-2.9
6462.7483	7.8203E-024	0.068	6462.7483	8.12E-024	-3.8

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6462.9247	3.424E-024	0.0064	0	0	0.0
6462.9893	1.3407E-024	0.0151	0	0	0.0
6463.0326	1.3896E-022	0.0036	6463.0326	1.33E-022	4.3
6463.0749	8.7251E-024	0.0038	6463.0749	8.47E-024	2.9
6463.5454	2.9718E-024	0.0052	0	0	0.0
6463.6717	2.7943E-023	0.0036	6463.6717	2.91E-023	-4.1
6463.7529	9.7015E-023	0.0036	6463.7529	9.88E-023	-1.8
6463.7707	1.3415E-024	0.0339	0	0	0.0
6463.8776	3.7147E-024	0.0049	6463.8776	4.76E-024	-28.1
6463.9	3.1575E-024	0.0054	0	0	0.0
6464.0135	2.462E-023	0.0036	6464.0135	2.52E-023	-2.4
6464.2201	1.3476E-023	0.0039	6464.2201	1.28E-023	5.0
6464.3942	3.0882E-022	0.0036	6464.3942	2.98E-022	3.5
6464.5435	1.5375E-023	0.0036	6464.5435	1.55E-023	-0.8
6464.849	7.6875E-024	0.0066	6464.849	7.62E-024	0.9
6464.9164	2.2938E-024	0.008	0	0	0.0
6464.9352	9.0101E-024	0.0065	6464.9352	1.44E-023	-59.8
6464.9949	8.1835E-024	0.0065	6464.9949	7.26E-024	11.3
6465.0422	9.8016E-023	0.0065	6465.0422	1.05E-022	-7.1
6465.0596	5.5795E-024	0.0079	0	0	0.0
6465.0837	3.5565E-023	0.0065	6465.0837	3.42E-023	3.8
6465.1824	1.3577E-023	0.0065	6465.1824	1.27E-023	6.5
6465.2943	5.5218E-023	0.0065	6465.2943	5.49E-023	0.6
6465.3248	5.5796E-024	0.007	0	0	0.0
6465.3371	8.1834E-024	0.0067	6465.3371	1.03E-023	-25.9
6465.4044	2.9758E-024	0.0072	0	0	0.0
6465.4222	5.3945E-024	0.037	6465.4222	4.03E-024	25.3
6465.6239	5.5889E-024	0.0092	6465.6239	5.81E-024	-4.0
6465.6555	1.216E-023	0.0096	6465.6555	1.19E-023	2.1
6465.7814	1.4565E-022	0.0093	6465.7814	1.31E-022	10.1
6465.8159	5.8215E-022	0.0097	6465.8159	4.9E-022	15.8
6465.8715	2.8607E-023	0.0097	6465.8715	2.39E-023	16.5
6465.9335	5.9494E-023	0.006	6465.9335	5.81E-023	2.3
6466.245	1.8501E-023	0.0033	6466.245	1.63E-023	11.9
6466.2728	1.9833E-023	0.0031	6466.2728	1.97E-023	0.7
6466.3254	5.909E-024	0.0066	6466.3254	5.69E-024	3.7
6466.4218	1.7534E-023	0.0052	6466.4218	2.14E-023	-22.0
6466.442	6.661E-024	0.011	6466.442	1.64E-024	75.4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6466.4953	1.7783E-022	0.0031	6466.4953	1.72E-022	3.3
6466.5568	6.3297E-024	0.004	6466.5568	9.11E-024	-43.9
6466.6223	2.8115E-022	0.0022	6466.6223	2.92E-022	-3.9
6466.6355	4.8454E-023	0.006	6466.6355	4.72E-023	2.6
6466.6762	2.4469E-024	0.0111	0	0	0.0
6466.8749	2.8118E-024	0.0095	0	0	0.0
6467.0412	3.8849E-024	0.0093	0	0	0.0
6467.0626	1.3571E-022	0.0043	6467.0626	1.39E-022	-2.4
6467.2096	1.0174E-023	0.0045	6467.2096	1.02E-023	-0.3
6467.3347	4.2436E-023	0.0034	6467.3347	4.2E-023	1.0
6467.347	4.1834E-023	0.0033	6467.347	2.91E-023	30.4
6467.3679	3.3609E-023	0.0033	6467.3679	2.96E-023	11.9
6467.3961	1.2671E-023	0.0033	6467.3961	1.04E-023	17.9
6467.4514	3.1999E-024	0.0064	0	0	0.0
6467.6973	2.1604E-023	0.0033	6467.6973	2.08E-023	3.7
6467.732	1.6525E-022	0.0033	6467.732	1.52E-022	8.0
6467.7801	2.5341E-024	0.0081	0	0	0.0
6467.9466	5.5384E-024	0.0037	6467.9466	5.49E-024	0.9
6467.9969	5.6266E-024	0.008	0	0	0.0
6468.0079	1.1798E-023	0.0047	6468.0079	1.46E-023	-23.7
6468.1662	1.7201E-023	0.0038	6468.1662	1.79E-023	-4.1
6468.3076	3.89E-023	0.0033	6468.3076	4.19E-023	-7.7
6468.3796	5.0202E-023	0.0033	6468.3796	5.24E-023	-4.4
6468.4145	8.6332E-024	0.0059	6468.4145	1.51E-023	-74.9
6468.4416	6.8679E-024	0.0068	6468.4416	9.76E-024	-42.1
6468.4914	6.4158E-024	0.007	6468.4914	8.31E-024	-29.5
6468.5249	2.8761E-023	0.0033	6468.5249	3.26E-023	-13.3
6468.6016	8.2232E-023	0.0038	6468.6016	8.19E-023	0.4
6468.7921	7.8235E-023	0.0042	6468.7921	7.78E-023	0.6
6469.1099	2.9612E-023	0.0042	6469.1099	2.98E-023	-0.6
6469.355	6.3784E-023	0.0038	6469.355	6.53E-023	-2.4
6469.4405	1.3353E-023	0.0041	6469.4405	1.56E-023	-16.8
6469.5032	1.5066E-022	0.0036	6469.5032	1.55E-022	-2.9
6469.5801	3.761E-024	0.0097	0	0	0.0
6469.6123	1.3484E-023	0.0041	6469.6123	1.22E-023	9.5
6469.7556	2.2706E-022	0.0036	6469.7556	2.27E-022	0.0
6469.7978	2.268E-022	0.0036	6469.7978	2.27E-022	-0.1
6470.1007	8.4605E-024	0.0063	6470.1007	8.55E-024	-1.1

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6470.2083	1.0431E-022	0.0042	6470.2083	1.02E-022	2.2
6470.3231	1.4213E-022	0.0042	6470.3231	1.34E-022	5.7
6470.4092	7.959E-024	0.0065	6470.4092	8.43E-024	-5.9
6470.5035	1.3516E-022	0.0042	6470.5035	1.39E-022	-2.8
6470.6714	3.0399E-024	0.0372	0	0	0.0
6470.6868	4.7401E-023	0.0031	6470.6868	4.96E-023	-4.6
6470.7089	1.7058E-024	0.0218	0	0	0.0
6470.7962	9.0329E-024	0.0082	6470.7962	8.91E-024	1.4
6471.0704	2.9678E-024	0.009	0	0	0.0
6471.1844	7.1807E-024	0.0049	6471.1844	6.45E-024	10.2
6471.3799	3.2503E-024	0.0242	0	0	0.0
6471.5469	2.577E-024	0.0198	0	0	0.0
6471.5786	2.6625E-024	0.011	0	0	0.0
6471.6597	5.6369E-024	0.0112	6471.6597	5.85E-024	-3.8
6471.755	2.4108E-023	0.0109	6471.755	2.33E-023	3.4
6472.2382	1.6246E-024	0.0091	0	0	0.0
6472.3801	1.3011E-022	0.0081	6472.3801	1.37E-022	-5.3
6472.3986	2.8535E-024	0.0121	0	0	0.0
6472.9532	1.4507E-023	0.0035	6472.9532	1.4E-023	3.5
6473.1407	2.3324E-023	0.0035	6473.1407	2.31E-023	1.0
6473.2988	3.1265E-024	0.0067	0	0	0.0
6473.3911	1.6299E-023	0.0035	6473.3911	1.51E-023	7.4
6473.4231	3.7174E-023	0.0023	6473.4231	3.77E-023	-1.4
6473.5086	3.9892E-024	0.004	6473.5086	4.44E-024	-11.3
6473.6076	1.3184E-022	0.0037	6473.6076	1.31E-022	0.6
6473.6784	6.9265E-024	0.0046	6473.6784	7.14E-024	-3.1
6473.7879	1.45E-023	0.0037	6473.7879	1.44E-023	0.7
6473.9089	1.7212E-023	0.0037	6473.9089	1.65E-023	4.1
6473.9967	6.8013E-024	0.0047	6473.9967	6.94E-024	-2.0
6474.0824	1.2386E-023	0.0023	6474.0824	1.32E-023	-6.6
6474.1729	1.7684E-023	0.0039	6474.1729	1.96E-023	-10.8
6474.22	3.4228E-024	0.0065	0	0	0.0
6474.329	2.3836E-022	0.0032	6474.329	2.39E-022	-0.3
6474.351	1.8992E-024	0.0137	0	0	0.0
6474.3806	8.2856E-024	0.0038	6474.3806	7.58E-024	8.5
6474.4128	9.1413E-024	0.0035	6474.4128	8.51E-024	6.9
6474.5261	1.0963E-022	0.0032	6474.5261	1E-022	8.8
6474.57	2.4502E-023	0.0032	6474.57	2.34E-023	4.5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6474.6372	7.0334E-024	0.004	6474.6372	8.55E-024	-21.6
6474.7286	4.028E-024	0.0058	6474.7286	4.52E-024	-12.2
6474.8073	3.402E-023	0.0021	6474.8073	3.38E-023	0.6
6474.8593	5.0732E-024	0.0061	6474.8593	7.14E-024	-40.7
6475.1965	1.6218E-022	0.003	6475.1965	1.6E-022	1.3
6475.253	5.4908E-024	0.0058	6475.253	5.4E-024	1.7
6475.3468	6.8897E-023	0.003	6475.3468	6.82E-023	1.0
6475.4834	8.8299E-023	0.002	6475.4834	8.71E-023	1.4
6475.5503	9.449E-024	0.0026	6475.5503	1.16E-023	-22.8
6475.718	8.8949E-024	0.0037	6475.718	1.07E-023	-20.3
6475.7614	2.0087E-023	0.0029	6475.7614	2.23E-023	-11.0
6475.7957	7.3644E-023	0.0029	6475.7957	7.5E-023	-1.8
6475.8712	1.7195E-022	0.0029	6475.8712	1.74E-022	-1.2
6476.0089	7.2642E-023	0.0029	6476.0089	7.26E-023	0.1
6476.0262	2.6539E-023	0.0029	6476.0262	2.44E-023	8.1
6476.1182	4.8283E-023	0.0019	6476.1182	4.68E-023	3.1
6476.232	5.2222E-024	0.0036	6476.232	4.68E-024	10.4
6476.4047	1.303E-023	0.0029	6476.4047	1.26E-023	3.3
6476.4586	1.8515E-022	0.0029	6476.4586	1.87E-022	-1.0
6476.5219	1.5661E-023	0.0029	6476.5219	1.73E-023	-10.5
6476.5897	1.4272E-022	0.0029	6476.5897	1.38E-022	3.3
6476.6566	5.0824E-023	0.0029	6476.6566	5.49E-023	-8.0
6476.7495	9.2293E-024	0.0035	6476.7495	9.36E-024	-1.4
6476.9194	1.9267E-023	0.0032	6476.9194	2E-023	-3.8
6477.1456	2.5195E-023	0.0032	6477.1456	2.36E-023	6.3
6477.3321	1.0354E-023	0.0052	6477.3321	6.61E-024	36.2
6477.344	3.749E-023	0.0032	6477.344	4.31E-023	-15.0
6477.3967	7.243E-024	0.0196	0	0	0.0
6477.4117	2.8612E-022	0.0032	6477.4117	2.85E-022	0.4
6477.4309	3.2751E-022	0.0032	6477.4309	3.36E-022	-2.6
6477.4452	2.0268E-023	0.0104	0	0	0.0
6477.4598	4.9679E-024	0.0105	0	0	0.0
6477.5734	4.7171E-024	0.0115	6477.5734	4.88E-024	-3.5
6477.6261	4.3414E-024	0.0124	6477.6261	5.16E-024	-18.9
6477.683	6.2846E-023	0.003	6477.683	6.01E-023	4.4
6477.7135	3.269E-022	0.003	6477.7135	3.23E-022	1.2
6477.9111	3.5159E-022	0.003	6477.9111	3.42E-022	2.7
6478.1513	2.3371E-024	0.0061	0	0	0.0



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6478.2769	5.0186E-023	0.0032	6478.2769	4.76E-023	5.2
6478.5498	2.6898E-023	0.0032	6478.5498	2.61E-023	3.0
6478.6263	1.8655E-023	0.0032	6478.6263	1.8E-023	3.5
6478.6572	5.9409E-023	0.0042	6478.6572	3.8E-023	36.0
6478.6664	5.7469E-023	0.0044	6478.6664	7.04E-023	-22.5
6478.7193	1.0204E-023	0.0032	6478.7193	9.68E-024	5.1
6478.7953	2.6919E-024	0.0063	0	0	0.0
6478.8181	1.1887E-023	0.0026	6478.8181	1.59E-023	-33.8
6478.9453	3.3513E-024	0.0061	0	0	0.0
6478.9815	9.8251E-024	0.0032	6478.9815	1.29E-023	-31.3
6479.1034	2.1461E-023	0.0031	6479.1034	2.48E-023	-15.6
6479.1302	2.6665E-023	0.0031	6479.1302	1.43E-023	46.4
6479.145	2.9101E-023	0.0031	6479.145	3.84E-023	-32.0
6479.2561	1.4779E-022	0.0031	6479.2561	1.49E-022	-0.8
6479.2882	1.2281E-023	0.0031	6479.2882	1.18E-023	3.9
6479.3285	1.7485E-024	0.0108	0	0	0.0
6479.3575	2.9621E-023	0.0031	6479.3575	3.49E-023	-17.8
6479.433	1.2927E-023	0.0031	6479.433	1.53E-023	-18.4
6479.546	8.0141E-024	0.0042	6479.546	8.03E-024	-0.2
6479.6399	1.2989E-022	0.0031	6479.6399	1.21E-022	6.8
6479.7604	1.4779E-023	0.0034	6479.7604	1.6E-023	-8.3
6479.7947	3.3514E-024	0.0179	0	0	0.0
6479.9572	8.5761E-024	0.0041	6479.9572	8.59E-024	-0.2
6480.1625	5.6582E-023	0.0021	6480.1625	5.48E-023	3.1
6480.2163	1.0112E-023	0.003	6480.2163	9.28E-024	8.2
6480.2514	8.7777E-023	0.0028	6480.2514	9.07E-023	-3.3
6480.3339	3.7613E-023	0.0028	6480.3339	3.58E-023	4.8
6480.3897	8.7297E-023	0.0028	6480.3897	8.99E-023	-3.0
6480.4451	4.6077E-024	0.0048	6480.4451	4.75E-024	-3.1
6480.6008	2.0015E-024	0.009	0	0	0.0
6480.6834	3.8551E-023	0.0028	6480.6834	3.94E-023	-2.2
6480.8774	3.8767E-024	0.0029	6480.8774	4.32E-024	-11.4
6480.9385	1.2864E-023	0.0028	6480.9385	1.45E-023	-12.7
6481.0285	5.7065E-023	0.0028	6481.0285	5.97E-023	-4.6
6481.0684	5.6711E-024	0.003	6481.0684	4.36E-024	23.1
6481.3704	3.2734E-024	0.0045	0	0	0.0
6481.3952	3.4485E-023	0.0028	6481.3952	2.5E-023	27.5
6481.409	1.1988E-023	0.0047	6481.409	2.14E-023	-78.5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6481.4847	2.6124E-023	0.0028	6481.4847	2.49E-023	4.7
6481.5637	1.1528E-023	0.003	6481.5637	1.4E-023	-21.4
6481.7523	3.0629E-023	0.003	6481.7523	3.09E-023	-0.9
6481.8029	1.732E-022	0.003	6481.8029	1.72E-022	0.7
6481.8202	1.7269E-024	0.0293	0	0	0.0
6481.8854	4.3904E-024	0.0049	0	0	0.0
6481.9401	7.2202E-024	0.0036	6481.9401	6.13E-024	15.1
6481.9679	3.1003E-024	0.0064	0	0	0.0
6482.0341	7.6156E-024	0.0034	6482.0341	6.98E-024	8.3
6482.1207	5.6223E-023	0.003	6482.1207	5.49E-023	2.4
6482.3704	1.3255E-023	0.0031	6482.3704	1.25E-023	5.7
6482.3972	2.5864E-023	0.003	6482.3972	2.62E-023	-1.3
6482.4367	5.9427E-023	0.003	6482.4367	6.29E-023	-5.8
6482.5081	6.1008E-023	0.003	6482.5081	6.57E-023	-7.7
6482.5224	3.9741E-024	0.0119	0	0	0.0
6482.6994	6.0698E-022	0.003	6482.6994	5.97E-022	1.6
6482.7191	1.1319E-023	0.0049	0	0	0.0
6482.7738	5.6388E-024	0.0051	6482.7738	5.61E-024	0.5
6482.8848	5.235E-024	0.003	6482.8848	4.96E-024	5.3
6483.1092	3.2001E-023	0.0031	6483.1092	2.99E-023	6.6
6483.1439	1.8786E-022	0.0031	6483.1439	1.9E-022	-1.1
6483.1729	2.7727E-024	0.0098	0	0	0.0
6483.3155	6.348E-023	0.0031	6483.3155	6.41E-023	-1.0
6483.3348	3.7734E-024	0.0075	0	0	0.0
6483.4873	1.4531E-023	0.0031	6483.4873	1.33E-023	8.5
6483.5868	3.7155E-024	0.0036	0	0	0.0
6483.6868	6.722E-023	0.003	6483.6868	6.48E-023	3.6
6483.7065	3.3568E-023	0.003	6483.7065	3.01E-023	10.3
6483.7254	5.4835E-024	0.0069	0	0	0.0
6483.7495	3.2943E-024	0.006	0	0	0.0
6483.9726	9.9037E-024	0.003	6483.9726	1.02E-023	-3.0
6484.1053	4.9623E-024	0.0042	6484.1053	4.68E-024	5.7
6484.2527	2.6278E-024	0.0077	0	0	0.0
6484.3365	8.5924E-024	0.0036	6484.3365	1.27E-023	-47.8
6484.397	2.8572E-024	0.008	0	0	0.0
6484.4291	7.8979E-023	0.0036	6484.4291	7.9E-023	0.0
6484.6241	1.0073E-023	0.0036	6484.6241	1.02E-023	-1.3
6484.7145	2.0313E-023	0.0036	6484.7145	2.12E-023	-4.4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6484.7387	7.1492E-023	0.0036	6484.7387	6.7E-023	6.3
6484.7587	9.4683E-024	0.0041	6484.7587	9.4E-024	0.7
6484.8646	2.4609E-024	0.0081	0	0	0.0
6484.9752	1.3954E-023	0.0043	6484.9752	1.4E-023	-0.3
6485.1123	2.7992E-024	0.0174	0	0	0.0
6485.1421	1.5903E-022	0.0034	6485.1421	1.61E-022	-1.2
6485.4645	1.5813E-023	0.004	6485.4645	1.59E-023	-0.6
6485.5493	2.7722E-023	0.0039	6485.5493	2.22E-023	19.9
6485.5652	2.5943E-023	0.0037	6485.5652	3.11E-023	-19.9
6485.6669	6.267E-024	0.0082	6485.6669	6.82E-024	-8.8
6485.7632	4.8986E-023	0.0062	6485.7632	4.72E-023	3.6
6485.8283	3.123E-024	0.0143	0	0	0.0
6485.9832	2.4893E-022	0.0062	6485.9832	2.46E-022	1.2
6486.105	1.2576E-024	0.0323	0	0	0.0
6486.7168	5.1869E-024	0.0119	0	0	0.0
6486.953	8.0724E-024	0.0067	6486.953	7.42E-024	8.1
6487.0189	1.1835E-023	0.0047	6487.0189	1.19E-023	-0.5
6487.0592	5.113E-023	0.0047	6487.0592	5.16E-023	-0.9
6487.2155	1.1495E-024	0.0254	0	0	0.0
6487.2675	1.2027E-023	0.0047	6487.2675	1.35E-023	-12.2
6487.3235	1.3411E-024	0.0222	0	0	0.0
6487.3914	1.0601E-023	0.0047	6487.3914	1.09E-023	-2.8
6487.4621	1.1765E-022	0.0047	6487.4621	1.15E-022	2.3
6487.5326	2.8588E-023	0.0047	6487.5326	2.81E-023	1.7
6487.5951	2.6396E-024	0.0123	0	0	0.0
6487.7731	4.2789E-024	0.0181	6487.7731	6.01E-024	-40.5
6487.8225	7.0677E-024	0.0176	6487.8225	7.7E-024	-8.9
6487.8449	4.3472E-022	0.0037	6487.8449	4.32E-022	0.6
6488.0293	4.2087E-023	0.0154	6488.0293	9.2E-024	78.1
6488.0471	3.9614E-022	0.0037	6488.0471	4.2E-022	-6.0
6488.1799	2.7504E-023	0.0164	0	0	0.0
6488.199	3.6436E-022	0.0037	6488.199	3.95E-022	-8.4
6488.2246	7.9164E-024	0.0063	0	0	0.0
6488.2886	6.0216E-024	0.0065	6488.2886	8.35E-024	-38.7
6488.3655	6.5264E-024	0.0062	6488.3655	9.28E-024	-42.2
6488.4533	2.7182E-022	0.0047	6488.4533	2.43E-022	10.6
6488.4757	3.5496E-024	0.0138	0	0	0.0
6488.6266	7.1431E-024	0.0058	6488.6266	7.5E-024	-5.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6488.8184	1.0155E-022	0.0047	6488.8184	9.24E-023	9.0
6488.8502	1.7265E-023	0.0048	6488.8502	1.39E-023	19.5
6488.8765	1.005E-022	0.0052	6488.8765	9.4E-023	6.5
6488.9803	5.8889E-024	0.0072	6488.9803	8.31E-024	-41.1
6489.0636	6.4826E-024	0.0072	6489.0636	6.53E-024	-0.7
6489.2695	2.5606E-023	0.0067	6489.2695	2.57E-023	-0.4
6489.3942	4.617E-024	0.0074	6489.3942	5.2E-024	-12.6
6489.4759	3.9028E-022	0.0067	6489.4759	3.41E-022	12.6
6489.4947	4.4859E-024	0.0199	0	0	0.0
6489.6087	2.733E-023	0.0047	6489.6087	2.7E-023	1.2
6489.639	5.4266E-024	0.0101	6489.639	5E-024	7.9
6489.7062	9.0723E-024	0.0078	6489.7062	1.79E-023	-97.3
6489.7197	1.6514E-022	0.0066	6489.7197	1.37E-022	17.0
6489.7787	4.2288E-022	0.0066	6489.7787	3.65E-022	13.7
6489.8429	1.2089E-023	0.0067	6489.8429	1.07E-023	11.5
6490.1889	4.5671E-022	0.0066	6490.1889	3.98E-022	12.9
6490.2771	2.1532E-024	0.0095	0	0	0.0
6490.3029	6.1833E-024	0.0128	6490.3029	8E-024	-29.4
6490.3248	2.0694E-024	0.0207	0	0	0.0
6490.4224	2.8956E-023	0.0057	6490.4224	3.09E-023	-6.7
6490.4899	5.371E-023	0.0057	6490.4899	5.32E-023	0.9
6490.5704	5.2053E-024	0.0082	6490.5704	6.05E-024	-16.2
6490.5933	2.4817E-023	0.0057	6490.5933	2.69E-023	-8.4
6490.9658	1.1618E-023	0.0056	6490.9658	1.02E-023	12.2
6491.268	1.9797E-023	0.0049	6491.268	2.03E-023	-2.5
6491.3122	5.3192E-024	0.0123	6491.3122	7.86E-024	-47.8
6491.3518	2.5031E-024	0.0237	6491.3518	4.68E-024	-87.0
6491.4113	2.8626E-022	0.0039	6491.4113	2.81E-022	1.8
6491.4525	2.4178E-022	0.0039	6491.4525	2.34E-022	3.2
6491.5528	2.132E-023	0.0047	6491.5528	2.21E-023	-3.7
6491.6289	3.2547E-023	0.0032	6491.6289	3.59E-023	-10.3
6491.6484	3.647E-022	0.0027	6491.6484	3.41E-022	6.5
6491.8282	2.8916E-024	0.0262	0	0	0.0
6491.927	1.571E-023	0.0289	6491.927	1.61E-023	-2.5
6491.9931	5.9625E-024	0.0191	6491.9931	5.45E-024	8.6
6492.0764	9.3737E-024	0.1423	6492.0764	5.28E-024	43.7
6492.1646	5.79E-024	0.0402	6492.1646	4.32E-024	25.4
6492.2679	1.4218E-024	0.0231	0	0	0.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6492.3193	1.3238E-024	0.0231	0	0	0.0
6492.3829	1.4223E-024	0.022	0	0	0.0
6492.435	4.2673E-024	0.0219	0	0	0.0
6492.5421	4.3172E-024	0.0192	0	0	0.0
6492.6424	1.0795E-024	0.0178	0	0	0.0
6492.691	1.8646E-024	0.0176	0	0	0.0
6492.8609	1.5379E-023	0.0191	6492.8609	1.52E-023	1.2
6492.938	2.4044E-024	0.0175	0	0	0.0
6493.0723	4.7579E-024	0.0203	6493.0723	5.65E-024	-18.7
6493.1475	4.1391E-022	0.018	6493.1475	3.17E-022	23.4
6493.2051	1.3739E-023	0.0187	6493.2051	1.03E-023	25.0
6493.262	7.4093E-024	0.0182	6493.262	5.4E-024	27.1
6493.3164	9.4703E-024	0.0181	0	0	0.0
6493.3791	6.7241E-024	0.0175	6493.3791	5.2E-024	22.7
6493.4965	3.6827E-024	0.0161	0	0	0.0
6493.626	5.8761E-024	0.0162	6493.626	6.05E-024	-3.0
6494.0109	5.4568E-024	0.0131	6494.0109	6.98E-024	-27.9
6494.0491	1.75E-022	0.0127	6494.0491	1.77E-022	-1.1
6494.1472	1.8508E-022	0.0127	6494.1472	1.85E-022	0.0
6494.2846	2.5477E-023	0.0127	6494.2846	2.48E-023	2.7
6494.3566	2.6913E-023	0.0125	6494.3566	2.05E-023	23.8
6494.3767	7.6655E-023	0.0108	6494.3767	8.47E-023	-10.5
6494.4409	2.7078E-024	0.012	0	0	0.0
6494.5033	2.757E-024	0.012	6494.5033	4.11E-024	-49.1
6494.5342	3.0011E-023	0.0101	6494.5342	2.87E-023	4.4
6494.558	6.5833E-024	0.0098	6494.558	8.87E-024	-34.7
6494.7892	1.1511E-022	0.0102	6494.7892	1.19E-022	-3.4
6494.9473	3.6007E-024	0.0096	0	0	0.0
6495.0589	1.7168E-023	0.0108	6495.0589	2.03E-023	-18.2
6495.0921	2.2949E-023	0.0038	6495.0921	2.18E-023	5.0
6495.2167	4.6412E-024	0.0076	0	0	0.0
6495.3809	3.4066E-023	0.0032	6495.3809	3.28E-023	3.7
6495.4769	6.9453E-023	0.0034	6495.4769	6.8E-023	2.1
6495.4999	2.3598E-023	0.0028	6495.4999	2.44E-023	-3.4
6495.5433	5.6477E-023	0.0037	6495.5433	5.48E-023	3.0
6495.595	1.6798E-023	0.0025	6495.595	1.69E-023	-0.6
6495.651	9.0105E-024	0.0079	6495.651	8.91E-024	1.1
6495.6747	1.713E-023	0.0052	6495.6747	1.72E-023	-0.4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6495.9482	2.3764E-023	0.0042	6495.9482	2.45E-023	-3.1
6495.9807	1.2105E-022	0.0042	6495.9807	1.2E-022	0.9
6495.9974	7.2184E-023	0.0042	6495.9974	7.82E-023	-8.3
6496.0429	1.5546E-022	0.0042	6496.0429	1.41E-022	9.3
6496.1158	1.2132E-022	0.0029	6496.1158	1.17E-022	3.6
6496.2427	1.3182E-023	0.0035	6496.2427	1.34E-023	-1.7
6496.3467	6.7152E-023	0.0026	6496.3467	6.77E-023	-0.8
6496.5633	1.3997E-023	0.0039	6496.5633	1.59E-023	-13.6
6496.6151	4.0153E-023	0.0028	6496.6151	3.45E-023	14.1
6496.6339	1.8062E-022	0.0027	6496.6339	1.85E-022	-2.4
6496.758	1.3482E-022	0.0026	6496.758	1.36E-022	-0.9
6496.9085	1.7656E-022	0.0024	6496.9085	1.76E-022	0.3
6497.0465	5.0117E-023	0.0023	6497.0465	5.24E-023	-4.6
6497.0608	1.6666E-023	0.0037	0	0	0.0
6497.287	5.2966E-022	0.0019	6497.287	5.28E-022	0.3
6497.3616	1.6601E-022	0.0027	6497.3616	1.65E-022	0.6
6497.436	7.5523E-022	0.0027	6497.436	7.54E-022	0.2
6497.5242	1.5617E-022	0.0026	6497.5242	1.53E-022	2.0
6497.6788	2.2078E-023	0.0035	6497.6788	1.43E-023	35.2
6497.7503	1.8353E-022	0.0029	6497.7503	1.81E-022	1.4
6498.1922	1.1539E-022	0.0028	6498.1922	1.15E-022	0.3
6498.3209	1.9838E-022	0.0028	6498.3209	1.88E-022	5.2
6498.3346	1.1514E-022	0.0028	6498.3346	1.08E-022	6.2
6498.527	1.3756E-023	0.0023	6498.527	1.4E-023	-1.8
6498.644	5.6672E-024	0.0036	6498.644	5.57E-024	1.7
6498.891	5.2959E-024	0.0053	6498.891	4.88E-024	7.9
6498.9073	4.5325E-024	0.006	6498.9073	6.17E-024	-36.1
6499.0422	1.429E-023	0.0032	6499.0422	1.61E-023	-12.7
6499.0953	9.3601E-024	0.0045	6499.0953	1.07E-023	-14.3
6499.118	5.0789E-024	0.0067	6499.118	5.85E-024	-15.2
6499.1894	2.7965E-022	0.003	6499.1894	2.78E-022	0.6
6499.2992	1.9775E-022	0.0028	6499.2992	2.02E-022	-2.1
6499.3296	1.0057E-023	0.0039	6499.3296	8.39E-024	16.6
6499.502	2.7448E-022	0.0021	6499.502	2.75E-022	-0.2
6499.5834	2.9421E-024	0.0087	0	0	0.0
6499.6507	2.0817E-023	0.0021	6499.6507	2.31E-023	-11.0
6499.9027	1.2843E-023	0.0031	6499.9027	1.39E-023	-8.2
6500.1354	3.9507E-024	0.0068	6500.1354	3E-024	24.1

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6500.1608	9.3023E-024	0.0038	6500.1608	8.44E-024	9.3
6500.2233	3.2992E-024	0.0043	0	0	0.0
6500.4544	6.8561E-024	0.0026	6500.4544	6.53E-024	4.8
6500.5244	1.5007E-024	0.0076	0	0	0.0
6500.6281	1.1005E-024	0.0099	0	0	0.0
6500.6562	2.5518E-024	0.0051	0	0	0.0
6500.8361	5.5556E-024	0.0032	6500.8361	4.76E-024	14.3
6500.9402	1.6066E-023	0.003	6500.9402	1.69E-023	-5.2
6500.9577	2.202E-024	0.0068	0	0	0.0
6501.1894	1.4761E-023	0.0024	6501.1894	1.5E-023	-1.6
6501.3981	1.8865E-023	0.0024	6501.3981	1.8E-023	4.6
6501.4812	8.5027E-025	0.0115	0	0	0.0
6501.5988	2.7155E-023	0.003	6501.5988	2.2E-023	19.0
6501.6355	7.2481E-024	0.0035	6501.6355	7.66E-024	-5.7
6501.6812	5.2499E-024	0.004	6501.6812	5.08E-024	3.2
6501.7286	2.1245E-023	0.0031	6501.7286	2.15E-023	-1.2
6501.9768	3.6202E-024	0.004	0	0	0.0
6502.0752	4.7104E-023	0.0022	6502.0752	4.92E-023	-4.4
6502.1301	6.686E-024	0.0027	0	0	0.0
6502.1765	5.6263E-024	0.003	6502.1765	6.37E-024	-13.2
6502.33	3.3489E-024	0.0074	0	0	0.0
6502.3469	1.2113E-023	0.0025	6502.3469	1.57E-023	-29.6
6502.3903	2.4492E-024	0.0066	0	0	0.0
6502.5009	1.9756E-022	0.0028	6502.5009	1.95E-022	1.3
6502.5758	8.2834E-023	0.0028	6502.5758	7.9E-023	4.6
6502.6558	4.4744E-023	0.0029	6502.6558	4.4E-023	1.7
6502.6882	1.8477E-022	0.0029	6502.6882	1.87E-022	-1.2
6502.7388	1.5295E-023	0.0031	6502.7388	1.45E-023	5.2
6502.7724	4.1835E-023	0.0029	6502.7724	4.15E-023	0.8
6502.8582	2.2731E-022	0.0027	6502.8582	2.25E-022	1.0
6503.0991	1.2631E-023	0.0035	6503.0991	1.53E-023	-21.1
6503.1309	3.6439E-024	0.0074	0	0	0.0
6503.4145	8.5287E-024	0.0108	6503.4145	8.26E-024	3.2
6503.4266	9.4264E-024	0.0099	6503.4266	3.36E-024	64.4
6503.6482	9.8348E-024	0.0042	6503.6482	1.41E-023	-43.4
6503.6752	2.4197E-022	0.0041	6503.6752	2.35E-022	2.9
6503.732	7.5854E-022	0.0039	6503.732	7.46E-022	1.7
6503.9935	3.1404E-022	0.0042	6503.9935	3.15E-022	-0.3

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6504.2131	3.5092E-023	0.0073	6504.2131	3.88E-023	-10.6
6504.2834	2.0882E-023	0.0078	6504.2834	2.52E-023	-20.7
6504.3947	2.9069E-023	0.0082	6504.3947	3.04E-023	-4.6
6504.4325	6.7308E-024	0.008	6504.4325	5.08E-024	24.5
6504.5026	2.7367E-023	0.0079	6504.5026	2.88E-023	-5.2
6504.6143	1.8701E-023	0.0077	6504.6143	2.19E-023	-17.1
6504.6315	1.0633E-022	0.0077	6504.6315	1.01E-022	5.0
6504.7017	2.0157E-022	0.0073	6504.7017	2.05E-022	-1.7
6504.9367	7.2508E-024	0.0081	6504.9367	6.49E-024	10.5
6505.0552	5.4196E-024	0.0081	6505.0552	8.31E-024	-53.3
6505.2673	3.2143E-022	0.0073	6505.2673	3.31E-022	-3.0
6505.5202	6.0088E-024	0.008	6505.5202	6.37E-024	-6.0
6505.5953	7.7766E-024	0.0071	0	0	0.0
6505.6477	1.4728E-023	0.0072	6505.6477	1.41E-023	4.3
6505.7367	6.8841E-024	0.0065	6505.7367	8.47E-024	-23.0
6505.7729	3.3222E-024	0.0071	6505.7729	4.4E-024	-32.4
6505.9007	3.0943E-023	0.006	6505.9007	3.29E-023	-6.3
6505.9272	9.9072E-024	0.006	6505.9272	1.08E-023	-9.0
6506.0748	8.3473E-024	0.0058	6506.0748	8.23E-024	1.4
6506.1249	1.4887E-023	0.0056	6506.1249	1.67E-023	-12.2
6506.1843	8.7346E-024	0.0057	6506.1843	9.4E-024	-7.6
6506.2538	3.9531E-023	0.0057	6506.2538	4E-023	-1.2
6506.428	4.9022E-024	0.0065	6506.428	7.7E-024	-57.1
6506.4511	3.0771E-023	0.0046	6506.4511	2.98E-023	3.2
6506.6602	6.0343E-024	0.0127	0	0	0.0
6506.7217	5.2545E-024	0.0144	6506.7217	5.24E-024	0.3
6506.8059	2.7105E-023	0.0051	6506.8059	2.61E-023	3.7
6506.9561	4.8381E-022	0.0051	6506.9561	4.8E-022	0.8
6507.0052	1.4638E-023	0.0066	6507.0052	1.23E-023	16.0
6507.0737	1.2475E-023	0.0048	6507.0737	6.57E-024	47.3
6507.1562	2.1722E-022	0.0039	6507.1562	2.09E-022	3.8
6507.1755	4.8107E-023	0.004	6507.1755	5.57E-023	-15.8
6507.2188	4.2334E-023	0.0034	6507.2188	4.15E-023	2.0
6507.377	5.4692E-022	0.0041	6507.377	2.65E-022	51.5
6507.385	5.4395E-022	0.0039	6507.385	2.65E-022	51.3
6507.422	2.4846E-023	0.0032	6507.422	1.97E-023	20.7
6507.4685	7.3709E-024	0.0075	6507.4685	6.41E-024	13.0
6507.57	1.2703E-023	0.0066	6507.57	1.14E-023	10.3



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6507.7135	6.9745E-024	0.0163	6507.7135	5.04E-024	27.7
6507.7321	1.1624E-023	0.0106	6507.7321	1.35E-023	-16.1
6507.8922	2.9154E-023	0.0039	6507.8922	3.13E-023	-7.4
6507.9549	2.7879E-023	0.0042	6507.9549	3.06E-023	-9.8
6508.0098	5.1539E-023	0.0024	6508.0098	5.04E-023	2.2
6508.2041	3.0984E-024	0.0219	0	0	0.0
6508.301	4.2798E-022	0.0029	6508.301	4.43E-022	-3.5
6508.3437	3.5238E-023	0.0029	6508.3437	3.49E-023	1.0
6508.5768	5.6746E-023	0.0057	6508.5768	5.69E-023	-0.3
6508.6557	7.3357E-022	0.0059	6508.6557	7.46E-022	-1.7
6508.7138	5.8279E-023	0.0059	6508.7138	5.77E-023	1.0
6508.7478	1.2265E-023	0.0095	6508.7478	1.11E-023	9.5
6508.8288	5.1952E-023	0.0072	6508.8288	5.04E-023	3.0
6508.8498	8.8292E-023	0.0072	6508.8498	8.72E-023	1.2
6508.8864	9.3055E-024	0.0066	6508.8864	9.07E-024	2.5
6509.0177	3.7292E-022	0.0075	6509.0177	3.75E-022	-0.6
6509.1313	6.8171E-024	0.0111	6509.1313	5.97E-024	12.4
6509.173	8.4826E-024	0.0066	6509.173	7.1E-024	16.3
6509.2834	1.1023E-023	0.0106	6509.2834	1.04E-023	5.7
6509.4317	5.2411E-023	0.01	6509.4317	5.4E-023	-3.0
6509.5145	1.0349E-023	0.0098	6509.5145	1.39E-023	-34.3
6509.5514	7.8361E-024	0.0099	6509.5514	7.5E-024	4.3
6509.6125	3.0955E-024	0.0221	0	0	0.0
6510.0064	2.4155E-022	0.0048	6510.0064	2.22E-022	8.1
6510.0249	3.865E-022	0.0045	6510.0249	3.5E-022	9.4
6510.0954	7.0725E-022	0.003	6510.0954	7.3E-022	-3.2
6510.2246	5.9647E-022	0.0033	6510.2246	6.09E-022	-2.1
6510.51	5.1335E-024	0.0083	0	0	0.0
6510.5523	9.3701E-024	0.0045	6510.5523	9.96E-024	-6.3
6510.7148	3.5883E-024	0.0105	6510.7148	4.28E-024	-19.3
6510.9926	7.1501E-022	0.0052	6510.9926	7.3E-022	-2.1
6511.5091	4.4124E-023	0.0062	6511.5091	4.36E-023	1.2
6511.5225	2.1139E-023	0.008	6511.5225	1.04E-023	50.8
6511.835	6.3311E-024	0.0069	6511.835	5.73E-024	9.5
6512.0509	4.5707E-024	0.0075	0	0	0.0
6512.0761	1.1536E-023	0.0047	6512.0761	1.08E-023	6.4
6512.1105	1.1727E-023	0.0048	6512.1105	1.15E-023	1.9
6512.1238	5.0337E-024	0.0048	0	0	0.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6512.2581	2.3689E-023	0.0033	6512.2581	2.5E-023	-5.5
6512.3185	9.1009E-024	0.0036	6512.3185	7.38E-024	18.9
6512.4285	1.434E-023	0.0038	6512.4285	1.21E-023	15.6
6512.5252	6.9879E-023	0.0033	6512.5252	6.77E-023	3.1
6512.8398	5.5141E-024	0.0045	6512.8398	8.03E-024	-45.6
6512.8587	2.3343E-024	0.0084	0	0	0.0
6512.8978	7.9021E-024	0.0033	6512.8978	8.03E-024	-1.6
6512.9289	6.9079E-024	0.0035	6512.9289	5.08E-024	26.5
6512.9707	5.4175E-024	0.0041	6512.9707	6.01E-024	-10.9
6513.0147	6.7101E-024	0.0036	6513.0147	6.45E-024	3.9
6513.209	2.5629E-023	0.0021	6513.209	2.82E-023	-10.0
6513.3299	1.4109E-023	0.0022	6513.3299	1.37E-023	2.9
6513.4169	6.7931E-024	0.0032	6513.4169	5.57E-024	18.0
6513.5413	4.4288E-024	0.0041	6513.5413	6.82E-024	-54.0
6513.6557	3.2499E-022	0.002	6513.6557	3.2E-022	1.5
6513.7231	3.754E-024	0.0049	6513.7231	4.8E-024	-27.9
6513.7725	3.3546E-022	0.002	6513.7725	3.34E-022	0.4
6513.8352	1.5801E-023	0.002	6513.8352	1.37E-023	13.3
6513.8694	7.1264E-024	0.0047	6513.8694	9.84E-024	-38.1
6513.9324	7.0525E-023	0.0017	6513.9324	7.26E-023	-2.9
6514.0272	6.7147E-024	0.0029	6514.0272	6.94E-024	-3.4
6514.073	3.4504E-022	0.0028	6514.073	3.52E-022	-2.0
6514.1288	1.2305E-023	0.0028	6514.1288	1.62E-023	-31.7
6514.2036	2.2669E-023	0.0027	6514.2036	2.86E-023	-26.2
6514.2469	3.3872E-022	0.0029	6514.2469	3.37E-022	0.5
6514.4141	1.6336E-022	0.0039	6514.4141	1.63E-022	0.2
6514.5245	6.1954E-023	0.0033	6514.5245	6.25E-023	-0.9
6514.5853	7.4346E-024	0.0049	6514.5853	8E-024	-7.6
6514.6029	5.9875E-024	0.0057	0	0	0.0
6514.6286	9.8717E-023	0.0032	6514.6286	1E-022	-1.3
6514.7434	1.106E-023	0.0034	6514.7434	1.12E-023	-1.3
6514.8645	2.3564E-023	0.0035	6514.8645	2.26E-023	4.1
6514.9624	8.4365E-024	0.0081	6514.9624	5.08E-024	39.8
6514.9817	6.1291E-023	0.0033	6514.9817	6E-023	2.1
6515.7036	2.6249E-023	0.0053	6515.7036	2.5E-023	4.8
6515.7472	4.2861E-023	0.0046	6515.7472	4.56E-023	-6.4
6515.8681	2.9626E-022	0.0047	6515.8681	2.83E-022	4.5
6515.9619	2.4475E-023	0.0051	6515.9619	2.19E-023	10.5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6515.9781	3.5679E-024	0.0112	6515.9781	5.85E-024	-64.0
6516.0547	6.3175E-024	0.0123	6516.0547	4.92E-024	22.1
6516.2014	5.8111E-024	0.0132	6516.2014	4.64E-024	20.2
6516.4922	1.266E-022	0.0077	6516.4922	1.5E-022	-18.5
6516.5066	4.324E-022	0.0071	6516.5066	3.28E-022	24.1
6516.5608	8.7595E-024	0.0075	6516.5608	6.49E-024	25.9
6516.6192	5.5727E-024	0.0169	6516.6192	4.84E-024	13.1
6516.7374	8.1924E-024	0.0077	6516.7374	1.21E-023	-47.7
6516.8517	7.3322E-024	0.0088	6516.8517	1.09E-023	-48.7
6516.9365	9.7891E-023	0.008	6516.9365	9.4E-023	4.0
6516.9777	6.0045E-022	0.0081	6516.9777	3.15E-022	47.5
6517.0195	2.084E-022	0.0081	6517.0195	1.8E-022	13.6
6517.228	4.0202E-024	0.0274	0	0	0.0
6517.3427	1.0215E-023	0.0072	6517.3427	1.04E-023	-1.8
6517.3735	1.3572E-023	0.0074	6517.3735	1.62E-023	-19.4
6517.4277	7.2351E-024	0.0075	6517.4277	1.09E-023	-50.7
6517.4881	7.1972E-024	0.0074	6517.4881	8.79E-024	-22.1
6517.5799	1.0337E-023	0.0076	6517.5799	1.29E-023	-24.8
6517.6175	6.1716E-024	0.0074	6517.6175	7.94E-024	-28.7
6517.7324	4.5534E-022	0.0074	6517.7324	4.48E-022	1.6
6517.8179	5.9434E-024	0.0065	6517.8179	6.9E-024	-16.1
6517.9146	1.774E-023	0.0065	6517.9146	1.79E-023	-0.9
6518.0403	7.3591E-024	0.0066	6518.0403	7.7E-024	-4.6
6518.1329	7.7125E-024	0.0062	6518.1329	1E-023	-29.7
6518.2511	1.4044E-023	0.0066	6518.2511	1.57E-023	-11.8
6518.3365	4.6543E-024	0.0064	6518.3365	4.44E-024	4.6
6518.3935	1.7832E-023	0.0063	6518.3935	1.66E-023	6.9
6518.5956	5.3441E-024	0.0061	6518.5956	7.26E-024	-35.9
6518.7069	6.6565E-024	0.006	6518.7069	5.49E-024	17.5
6518.7401	7.7659E-024	0.006	6518.7401	7.3E-024	6.0
6518.7814	5.2957E-024	0.0058	0	0	0.0
6518.921	8.1192E-024	0.0051	6518.921	6.65E-024	18.1
6519.0473	9.5413E-023	0.0017	6519.0473	9.24E-023	3.2
6519.0813	4.4827E-024	0.0038	6519.0813	4.6E-024	-2.6
6519.1346	2.2698E-024	0.0057	0	0	0.0
6519.1692	3.0883E-023	0.0017	6519.1692	3.28E-023	-6.2
6519.1926	2.3036E-023	0.0017	6519.1926	2.33E-023	-1.1
6519.2201	1.4823E-023	0.0017	6519.2201	1.71E-023	-15.4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6519.2598	3.2786E-024	0.0044	0	0	0.0
6519.3019	1.9672E-024	0.006	0	0	0.0
6519.3708	6.0704E-023	0.0017	6519.3708	6.17E-023	-1.6
6519.5126	2.1393E-023	0.0024	6519.5126	2E-023	6.5
6519.6535	3.2795E-024	0.0052	0	0	0.0
6519.7022	2.553E-023	0.0024	6519.7022	2.5E-023	2.1
6519.7619	1.8669E-023	0.0024	6519.7619	1.68E-023	10.0
6519.9141	5.4068E-024	0.003	0	0	0.0
6519.9267	8.5219E-024	0.0023	6519.9267	9E-024	-5.6
6519.9702	1.0558E-023	0.0025	6519.9702	8.23E-024	22.0
6520.0504	1.4619E-023	0.0025	6520.0504	1.56E-023	-6.7
6520.4714	8.3776E-024	0.0036	6520.4714	1.13E-023	-34.9
6520.4975	5.4506E-024	0.0034	0	0	0.0
6520.5207	1.8168E-023	0.0036	6520.5207	2.37E-023	-30.4
6520.6351	1.4737E-023	0.0036	6520.6351	1.46E-023	0.9
6520.6583	1.6352E-023	0.0036	6520.6583	1.48E-023	9.5
6520.6839	6.552E-024	0.0039	6520.6839	5.52E-024	15.8
6520.8217	1.018E-023	0.0037	6520.8217	1.36E-023	-33.6
6520.9495	2.3213E-024	0.0057	0	0	0.0
6521.007	3.293E-023	0.0035	6521.007	3.23E-023	1.9
6521.0319	3.3213E-023	0.0034	6521.0319	3.22E-023	3.1
6521.0593	8.0379E-023	0.0034	6521.0593	7.86E-023	2.2
6521.1543	5.9723E-024	0.0036	6521.1543	8.43E-024	-41.2
6521.2167	1.5133E-023	0.0033	6521.2167	1.5E-023	0.9
6521.2609	5.9923E-023	0.0033	6521.2609	6.09E-023	-1.6
6521.3531	1.6443E-023	0.0033	6521.3531	1.66E-023	-1.0
6521.495	1.3265E-023	0.0034	6521.495	1.87E-023	-41.0
6521.5183	7.7373E-023	0.0034	6521.5183	7.46E-023	3.6
6521.7152	7.452E-024	0.0038	6521.7152	7.7E-024	-3.3
6521.795	3.4723E-023	0.0035	6521.795	3.83E-023	-10.3
6521.8777	5.9656E-023	0.0035	6521.8777	5.89E-023	1.3
6521.9711	4.5598E-022	0.0034	6521.9711	4.4E-022	3.5
6522.0234	7.3641E-024	0.0102	6522.0234	4.88E-024	33.7
6522.1886	1.4675E-023	0.0058	6522.1886	1.88E-023	-28.1
6522.2337	3.9064E-022	0.0025	6522.2337	3.8E-022	2.7
6522.3605	2.0114E-023	0.0045	6522.3605	1.97E-023	2.1
6522.4904	1.0143E-022	0.0022	6522.4904	8.64E-023	14.8
6522.7741	5.5233E-024	0.01	6522.7741	6.45E-024	-16.8

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6522.9597	7.1072E-024	0.0118	6522.9597	7.22E-024	-1.6
6523.0294	7.4792E-023	0.0033	6523.0294	4.08E-023	45.4
6523.2084	6.1842E-022	0.0038	6523.2084	6.13E-022	0.9
6523.3096	4.2066E-022	0.0033	6523.3096	4.11E-022	2.3
6523.4762	4.9426E-023	0.0033	6523.4762	5.28E-023	-6.8
6523.5548	1.7153E-023	0.0032	6523.5548	1.71E-023	0.3
6523.6067	7.1845E-024	0.0053	6523.6067	9.68E-024	-34.7
6523.6554	3.324E-024	0.0243	0	0	0.0
6523.693	1.1508E-022	0.0033	6523.693	1.07E-022	7.0
6523.9486	6.2247E-022	0.003	6523.9486	6.17E-022	0.9
6523.9682	1.3987E-022	0.003	6523.9682	1.2E-022	14.2
6524.0212	2.6459E-022	0.003	6524.0212	2.63E-022	0.6
6524.2338	1.3523E-023	0.0032	6524.2338	1.32E-023	2.4
6524.3059	1.4931E-023	0.0032	6524.3059	1.59E-023	-6.5
6524.3613	1.0315E-022	0.0026	6524.3613	1E-022	3.1
6524.3991	2.5649E-023	0.0027	6524.3991	1.5E-023	41.5
6524.4994	1.4401E-023	0.0032	6524.4994	1.43E-023	0.7
6524.5323	6.0312E-024	0.0069	6524.5323	4.68E-024	22.4
6524.7698	2.8099E-023	0.0034	6524.7698	3.35E-023	-19.2
6524.8384	1.2543E-023	0.0057	6524.8384	1.49E-023	-18.8
6524.8909	4.4892E-023	0.0027	6524.8909	4.52E-023	-0.7
6524.9373	1.3853E-022	0.004	6524.9373	4.5E-023	67.5
6524.9553	7E-022	0.0027	6524.9553	7.42E-022	-6.0
6525.0526	1.8966E-023	0.0038	6525.0526	2.36E-023	-24.4
6525.1223	7.7184E-022	0.0019	6525.1223	7.42E-022	3.9
6525.2285	1.1256E-023	0.0054	6525.2285	1.6E-023	-42.1
6525.2944	7.2627E-024	0.0081	6525.2944	8.56E-024	-17.9
6525.3196	4.6836E-023	0.0021	0	0	0.0
6525.3534	6.5802E-023	0.0055	6525.3534	2.98E-023	54.7
6525.3729	6.5752E-022	0.0019	6525.3729	3.45E-022	47.5
6525.3942	4.4796E-023	0.005	0	0	0.0
6525.7778	5.5626E-024	0.0215	0	0	0.0
6525.8125	6.4948E-023	0.0021	6525.8125	6.09E-023	6.2
6525.8989	7.0757E-024	0.003	6525.8989	8.71E-024	-23.1
6525.9442	1.0215E-023	0.0028	6525.9442	9.52E-024	6.8
6526.0626	8.9567E-023	0.0021	6526.0626	8.39E-023	6.3
6526.124	5.6085E-024	0.0036	6526.124	5.45E-024	2.8
6526.2643	4.1576E-024	0.0045	0	0	0.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6526.3972	2.4191E-023	0.0028	6526.3972	2.61E-023	-7.9
6526.4285	2.3039E-024	0.0066	0	0	0.0
6526.466	4.758E-024	0.004	6526.466	4.48E-024	5.8
6526.4987	1.1519E-023	0.0029	6526.4987	1.34E-023	-16.3
6526.5301	1.7028E-024	0.0087	0	0	0.0
6526.6663	6.0819E-024	0.0027	6526.6663	5E-024	17.8
6526.6959	4.0353E-024	0.0037	6526.6959	4.64E-024	-15.0
6526.7416	2.3259E-023	0.0021	6526.7416	2.41E-023	-3.6
6526.7968	7.7081E-023	0.0021	6526.7968	7.34E-023	4.8
6526.8776	4.6382E-024	0.0031	0	0	0.0
6526.9343	1.0763E-023	0.0021	6526.9343	1.16E-023	-7.8
6526.9633	3.6906E-024	0.0038	0	0	0.0
6527.0029	1.2946E-023	0.0021	6527.0029	1.44E-023	-11.2
6527.1423	2.0496E-023	0.003	6527.1423	2.23E-023	-8.8
6527.3226	9.1986E-024	0.0031	6527.3226	9.36E-024	-1.8
6527.6259	5.7001E-024	0.0044	6527.6259	6.49E-024	-13.9
6527.7663	5.0951E-024	0.0046	6527.7663	4.64E-024	8.9
6527.8171	3.1965E-024	0.0063	0	0	0.0
6527.8523	7.6249E-024	0.0039	6527.8523	4.52E-024	40.7
6527.8721	2.7966E-023	0.0035	6527.8721	2.44E-023	12.8
6527.9243	1.0715E-023	0.0038	6527.9243	8.11E-024	24.3
6528.0249	1.0714E-023	0.0085	6528.0249	4.28E-024	60.1
6528.0588	1.2052E-023	0.0078	6528.0588	1.07E-023	11.2
6528.2357	5.8268E-024	0.0144	6528.2357	6.9E-024	-18.4
6528.4877	7.0605E-024	0.0116	6528.4877	6.73E-024	4.7
6528.7974	2.2211E-023	0.0068	0	0	0.0
6528.8998	1.3955E-021	0.0032	6528.8998	1.35E-021	3.3
6529.1901	1.4456E-021	0.0083	6529.1901	1.23E-021	14.9
6529.2131	4.7595E-023	0.0076	6529.2131	1.95E-023	59.0
6530.3522	3.5119E-024	0.0042	0	0	0.0
6530.3871	3.017E-024	0.0045	0	0	0.0
6530.5448	2.2747E-024	0.0051	0	0	0.0
6530.6009	1.063E-023	0.0029	6530.6009	9.5E-024	10.6
6530.705	1.3053E-023	0.0029	6530.705	1.33E-023	-1.9
6530.7221	1.8292E-023	0.003	6530.7221	1.77E-023	3.2
6530.7581	1.6759E-023	0.003	6530.7581	1.94E-023	-15.8
6530.8616	4.8453E-024	0.0033	6530.8616	4.56E-024	5.9
6530.8989	1.4833E-023	0.0029	6530.8989	1.75E-023	-18.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6531.0542	9.3592E-024	0.0021	6531.0542	1.01E-023	-7.9
6531.0989	2.2324E-023	0.0021	6531.0989	2.42E-023	-8.4
6531.1489	5.9412E-024	0.0031	6531.1489	5.52E-024	7.1
6531.1703	3.4974E-023	0.002	6531.1703	3.57E-023	-2.1
6531.3384	9.0651E-024	0.002	6531.3384	1.12E-023	-23.6
6531.4154	3.2599E-024	0.0054	6531.4154	6.82E-024	-109.2
6531.5073	1.0766E-023	0.003	6531.5073	1.1E-023	-2.2
6531.6307	4.8411E-024	0.0041	6531.6307	4.15E-024	14.3
6531.6833	2.322E-024	0.0063	0	0	0.0
6531.8005	4.1848E-023	0.0029	6531.8005	4.24E-023	-1.3
6531.8456	2.2232E-024	0.0065	0	0	0.0
6531.9195	3.5406E-023	0.0021	6531.9195	3.29E-023	7.1
6531.9649	2.4072E-023	0.002	6531.9649	2.35E-023	2.4
6532.075	2.0759E-023	0.0021	6532.075	1.16E-023	44.1
6532.0943	3.4128E-024	0.0065	0	0	0.0
6532.179	4.2489E-024	0.0043	0	0	0.0
6532.2059	1.3035E-023	0.002	6532.2059	1.43E-023	-9.7
6532.2493	8.6957E-024	0.0046	6532.2493	1.15E-023	-32.2
6532.6122	5.0306E-023	0.0027	6532.6122	3.98E-023	20.9
6532.6404	3.4933E-023	0.0019	6532.6404	3.25E-023	7.0
6532.6747	4.5449E-024	0.0051	6532.6747	5.96E-024	-31.1
6532.7386	1.632E-022	0.0019	6532.7386	1.69E-022	-3.6
6532.8354	1.7985E-023	0.0021	6532.8354	1.98E-023	-10.1
6532.9307	6.8705E-024	0.0037	6532.9307	5.24E-024	23.7
6532.9661	1.7022E-023	0.0021	6532.9661	1.73E-023	-1.6
6533.0267	4.6935E-024	0.0071	6533.0267	4.07E-024	13.3
6533.0724	9.4884E-024	0.003	6533.0724	8.31E-024	12.4
6533.3446	1.8084E-022	0.0025	6533.3446	1.9E-022	-5.1
6533.3861	4.457E-022	0.0025	6533.3861	4.4E-022	1.3
6533.4331	1.617E-023	0.0033	6533.4331	1.84E-023	-13.8
6533.4615	4.4466E-022	0.0025	6533.4615	4.44E-022	0.1
6533.5968	5.8333E-024	0.0059	6533.5968	5.2E-024	10.9
6533.7201	5.8328E-024	0.006	6533.7201	5.4E-024	7.4
6533.8138	3.8029E-023	0.0019	6533.8138	3.72E-023	2.2
6533.8728	3.4897E-023	0.0019	6533.8728	3.4E-023	2.6
6534.039	2.031E-023	0.0029	6534.039	1.71E-023	15.8
6534.122	2.9806E-023	0.003	6534.122	2.93E-023	1.7
6534.1767	2.9858E-023	0.003	6534.1767	3.18E-023	-6.5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6534.2059	1.4534E-023	0.0037	6534.2059	1.38E-023	5.1
6534.256	3.2231E-023	0.003	6534.256	3.75E-023	-16.3
6534.5523	4.424E-022	0.0043	6534.5523	4.44E-022	-0.4
6534.6179	7.8789E-023	0.005	6534.6179	8.55E-023	-8.5
6534.6623	1.4973E-022	0.005	6534.6623	1.43E-022	4.5
6534.9376	3.2961E-023	0.0053	6534.9376	3.19E-023	3.2
6535.1878	5.1463E-023	0.0075	6535.1878	5.16E-023	-0.3
6535.3152	5.7938E-023	0.0121	6535.3152	5.69E-023	1.8
6535.3893	1.7632E-023	0.0055	6535.3893	1.47E-023	16.6
6535.4033	1.9363E-023	0.0041	6535.4033	2.09E-023	-7.9
6535.5912	5.5678E-024	0.0057	6535.5912	7.14E-024	-28.2
6535.6102	7.5285E-024	0.0072	6535.6102	4.76E-024	36.8
6535.7815	7.2709E-024	0.0083	6535.7815	6.86E-024	5.7
6535.9739	6.3051E-023	0.0037	6535.9739	7.22E-023	-14.5
6535.9977	4.0333E-023	0.004	6535.9977	4.6E-023	-14.1
6536.0269	3.593E-023	0.0041	6536.0269	3.34E-023	7.0
6536.105	1.3163E-023	0.0035	6536.105	1.62E-023	-23.1
6536.1465	1.1335E-023	0.0038	6536.1465	1.04E-023	8.2
6536.1967	6.7972E-023	0.002	6536.1967	7.58E-023	-11.5
6536.2553	8.2169E-024	0.0049	6536.2553	9.15E-024	-11.4
6536.3791	8.4544E-023	0.002	6536.3791	8.47E-023	-0.2
6536.593	8.4753E-022	0.0026	6536.593	8.47E-022	0.1
6536.7143	4.084E-023	0.0027	6536.7143	4.16E-023	-1.9
6536.7508	1.367E-022	0.0027	6536.7508	1.42E-022	-3.9
6536.8758	1.0475E-022	0.0027	6536.8758	1.1E-022	-5.0
6537.0219	2.3637E-023	0.0022	6537.0219	2.59E-023	-9.6
6537.1024	2.7164E-023	0.0023	6537.1024	2.41E-023	11.3
6537.116	1.8318E-023	0.0071	6537.116	1.81E-023	1.2
6537.1461	7.8195E-024	0.0035	6537.1461	7.16E-024	8.4
6537.4635	3.3944E-024	0.0086	6537.4635	4.36E-024	-28.4
6537.4895	8.3974E-023	0.0025	6537.4895	7.98E-023	5.0
6537.6806	4.2339E-022	0.0024	6537.6806	4.15E-022	2.0
6537.8037	1.0038E-023	0.0037	6537.8037	9.96E-024	0.8
6537.9956	3.4734E-023	0.0018	6537.9956	3.15E-023	9.3
6538.0619	3.4005E-023	0.0017	6538.0619	3.21E-023	5.6
6538.0945	3.2452E-024	0.004	0	0	0.0
6538.2083	3.2955E-024	0.0041	0	0	0.0
6538.3592	4.6926E-024	0.0033	0	0	0.0



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6538.411	8.7299E-023	0.0027	6538.411	8.31E-023	4.8
6538.5055	2.0412E-023	0.0033	6538.5055	2.06E-023	-0.9
6538.541	1.6937E-022	0.0033	6538.541	1.65E-022	2.6
6538.5836	4.1762E-023	0.0032	6538.5836	4.48E-023	-7.3
6538.71	9.8992E-024	0.0028	6538.71	9.76E-024	1.4
6538.8138	2.0941E-023	0.0027	6538.8138	1.9E-023	9.3
6538.8366	1.1538E-023	0.0031	6538.8366	6.37E-024	44.8
6538.8566	8.0348E-023	0.0027	6538.8566	8.43E-023	-4.9
6538.9163	8.6736E-024	0.0027	6538.9163	1.23E-023	-41.8
6538.9869	5.4572E-024	0.003	0	0	0.0
6539.2171	5.2809E-024	0.0032	6539.2171	5.57E-024	-5.5
6539.2926	2.89E-024	0.005	0	0	0.0
6539.3625	5.829E-024	0.003	6539.3625	1.04E-023	-78.4
6539.405	1.2455E-023	0.0024	6539.405	8.43E-024	32.3
6539.5277	8.8473E-023	0.0021	6539.5277	8.87E-023	-0.3
6539.5863	1.1026E-023	0.002	6539.5863	1.12E-023	-1.6
6539.6598	1.0207E-023	0.002	6539.6598	9.9E-024	3.0
6539.9733	1.1197E-023	0.0025	6539.9733	1.28E-023	-14.3
6540.1157	1.7855E-023	0.0025	6540.1157	2.25E-023	-26.0
6540.1431	8.3045E-023	0.0026	6540.1431	7.74E-023	6.8
6540.2288	4.9736E-024	0.005	0	0	0.0
6540.2486	5.68E-023	0.0026	6540.2486	5.66E-023	0.4
6540.3543	2.7852E-024	0.0066	0	0	0.0
6540.4251	2.9593E-023	0.0017	6540.4251	3.26E-023	-10.2
6540.4871	1.7395E-023	0.0018	6540.4871	1.83E-023	-5.2
6540.5151	9.5337E-024	0.0022	6540.5151	1.31E-023	-37.4
6540.5737	1.6991E-022	0.0017	6540.5737	1.72E-022	-1.2
6540.6183	3.5299E-024	0.0053	0	0	0.0
6540.887	7.6294E-023	0.0026	6540.887	7.58E-023	0.6
6540.967	5.7861E-023	0.0025	6540.967	5.89E-023	-1.8
6541.0064	2.25E-022	0.0026	6541.0064	2.29E-022	-1.8
6541.0642	2.7545E-022	0.0027	6541.0642	2.75E-022	0.2
6541.3027	9.3849E-024	0.0039	6541.3027	1.57E-023	-67.3
6541.3873	6.7676E-022	0.0018	6541.3873	6.37E-022	5.9
6541.4045	6.5221E-022	0.0018	6541.4045	6.37E-022	2.3
6541.4363	5.268E-023	0.0018	6541.4363	5.04E-023	4.3
6541.5167	1.8111E-023	0.0025	6541.5167	1.81E-023	0.1
6541.5458	8.8701E-024	0.0037	6541.5458	9.64E-024	-8.7

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6541.6787	1.8226E-023	0.0023	6541.6787	1.58E-023	13.3
6541.736	3.1869E-023	0.0037	6541.736	2.98E-023	6.5
6542.0382	3.8562E-023	0.0034	6542.0382	3.74E-023	3.0
6542.1054	2.9431E-023	0.0028	6542.1054	2.74E-023	6.9
6542.1239	6.5456E-023	0.002	6542.1239	6E-023	8.3
6542.2935	3.9033E-023	0.0021	6542.2935	4E-023	-2.5
6542.3737	5.5268E-023	0.0019	6542.3737	6.16E-023	-11.5
6542.4244	1.0292E-021	0.0019	6542.4244	9.65E-022	6.2
6542.5582	1.5592E-023	0.0049	6542.5582	1.96E-023	-25.7
6542.5807	3.3369E-023	0.0031	6542.5807	3.78E-023	-13.3
6542.6237	1.0388E-021	0.0028	6542.6237	1.01E-021	2.8
6542.8489	2.2495E-023	0.0037	6542.8489	2.21E-023	1.8
6543.0164	6.2186E-023	0.0019	6543.0164	6.45E-023	-3.7
6543.0624	3.5257E-024	0.0077	6543.0624	6.29E-024	-78.4
6543.0973	1.8404E-023	0.0023	6543.0973	1.92E-023	-4.3
6543.1322	1.7682E-023	0.0023	6543.1322	2.26E-023	-27.8
6543.2085	3.5585E-023	0.002	6543.2085	3.73E-023	-4.8
6543.39	6.1574E-024	0.0051	6543.39	6.13E-024	0.4
6543.483	1.2712E-023	0.0033	6543.483	1.07E-023	15.8
6543.5242	9.038E-024	0.0043	6543.5242	8.15E-024	9.8
6543.5501	5.661E-024	0.0059	6543.5501	4.44E-024	21.6
6543.6067	4.4692E-024	0.0068	0	0	0.0
6543.6389	1.0577E-023	0.0039	6543.6389	1.1E-023	-4.0
6543.7918	7.4987E-024	0.0049	6543.7918	5.52E-024	26.4
6543.8413	2.2289E-022	0.0032	6543.8413	2.2E-022	1.3
6543.8737	7.2228E-023	0.0033	6543.8737	6.61E-023	8.5
6543.9077	8.8755E-023	0.0032	6543.9077	8.55E-023	3.7
6544.0082	1.1053E-023	0.0034	6544.0082	9.72E-024	12.1
6544.1478	1.3689E-023	0.0042	6544.1478	1.62E-023	-18.3
6544.2016	7.9472E-024	0.0052	6544.2016	1.12E-023	-40.9
6544.3215	8.9129E-022	0.0039	6544.3215	8.71E-022	2.3
6544.4655	8.6425E-024	0.007	6544.4655	9.11E-024	-5.4
6544.5463	3.5611E-023	0.0047	6544.5463	3.54E-023	0.6
6544.7563	1.2784E-022	0.0046	6544.7563	1.3E-022	-1.7
6544.9175	4.5937E-023	0.0046	6544.9175	4.52E-023	1.6
6544.9571	2.2537E-023	0.0049	6544.9571	2E-023	11.3
6545.0647	4.9203E-024	0.0051	0	0	0.0
6545.2323	3.4277E-024	0.0065	0	0	0.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6545.258	3.4277E-024	0.0065	0	0	0.0
6545.3068	5.4137E-024	0.0057	6545.3068	7.54E-024	-39.3
6545.4158	8.7405E-024	0.0054	6545.4158	1.1E-023	-25.9
6545.6808	2.2844E-022	0.0059	6545.6808	2.28E-022	0.2
6545.8024	3.709E-024	0.0067	0	0	0.0
6545.8855	5.0033E-024	0.0065	6545.8855	4.92E-024	1.7
6545.9352	2.5325E-024	0.0095	0	0	0.0
6546.0675	8.0933E-024	0.0065	6546.0675	6.13E-024	24.3
6546.1001	5.6084E-024	0.007	6546.1001	8.35E-024	-48.9
6546.1308	8.0901E-024	0.0066	6546.1308	8.67E-024	-7.2
6546.4423	6.4087E-024	0.0032	6546.4423	5.77E-024	10.0
6546.507	4.0537E-024	0.0036	0	0	0.0
6546.5496	3.9239E-024	0.0083	0	0	0.0
6546.563	1.1769E-023	0.0031	6546.563	1.19E-023	-1.1
6546.6168	6.7736E-024	0.0034	0	0	0.0
6546.666	1.3622E-023	0.0042	6546.666	1.16E-023	14.8
6546.8645	1.5399E-024	0.0086	0	0	0.0
6546.9674	6.6557E-024	0.0035	6546.9674	6.45E-024	3.1
6547.1463	2.677E-023	0.0033	0	0	0.0
6547.2185	3.2789E-024	0.005	0	0	0.0
6547.3114	3.9747E-024	0.0043	0	0	0.0
6547.4962	3.1788E-024	0.005	0	0	0.0
6547.6568	4.1711E-024	0.0042	0	0	0.0
6547.7409	2.0359E-024	0.0067	0	0	0.0
6547.7945	4.9799E-023	0.0059	6547.7945	5.4E-023	-8.4
6547.9469	2.9248E-022	0.0033	6547.9469	2.95E-022	-0.9
6547.9725	4.3364E-023	0.0066	6547.9725	3.63E-023	16.3
6548.2206	1.9245E-023	0.006	6548.2206	1.81E-023	5.9
6548.3015	3.5664E-023	0.0041	6548.3015	3.69E-023	-3.5
6548.3655	2.8704E-023	0.0044	6548.3655	2.65E-023	7.7
6548.6453	3.2614E-023	0.0044	6548.6453	3.1E-023	4.9
6548.9247	3.6264E-022	0.0029	6548.9247	3.56E-022	1.8
6549.093	7.8092E-024	0.0046	6549.093	8.03E-024	-2.8
6549.1417	5.0556E-024	0.0058	6549.1417	5.77E-024	-14.1
6549.1773	2.825E-024	0.007	0	0	0.0
6549.1944	3.0938E-023	0.004	6549.1944	3.42E-023	-10.5
6549.287	7.586E-023	0.0034	6549.287	7.2E-023	5.1
6549.307	1.4964E-023	0.0051	6549.307	1E-023	33.2

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6549.4596	4.3568E-024	0.0045	6549.4596	5.12E-024	-17.5
6549.4908	7.4781E-024	0.004	6549.4908	7.46E-024	0.2
6549.5794	2.4754E-024	0.0057	6549.5794	5.97E-024	-141.2
6549.6317	6.3767E-023	0.0028	6549.6317	6.94E-023	-8.8
6549.862	3.614E-024	0.0056	0	0	0.0
6549.8772	1.9848E-023	0.003	6549.8772	2.45E-023	-23.4
6549.9575	8.3622E-024	0.0027	6549.9575	1.1E-023	-31.5
6549.9742	8.9387E-024	0.0026	0	0	0.0
6549.9983	4.2817E-024	0.0031	6549.9983	5.12E-024	-19.6
6550.0372	1.685E-023	0.0019	6550.0372	1.38E-023	18.1
6550.1264	6.1297E-023	0.0019	6550.1264	5.89E-023	3.9
6550.1665	3.0136E-024	0.0038	0	0	0.0
6550.2462	5.3436E-024	0.0048	0	0	0.0
6550.2566	6.5353E-024	0.0028	6550.2566	1E-023	-53.0
6550.4054	4.7019E-023	0.0044	6550.4054	4.64E-023	1.3
6550.4791	2.3728E-024	0.0074	0	0	0.0
6550.6192	2.5645E-023	0.0045	6550.6192	3.17E-023	-23.6
6550.8155	1.5255E-022	0.0045	6550.8155	1.52E-022	0.4
6550.9626	3.1382E-023	0.0047	6550.9626	3.4E-023	-8.3
6550.9976	2.6706E-023	0.0047	6550.9976	2.44E-023	8.6
6551.0202	5.9247E-024	0.0049	6551.0202	5.77E-024	2.6
6551.0606	2.1241E-023	0.0047	6551.0606	2.12E-023	0.2
6551.1224	1.4314E-024	0.0103	0	0	0.0
6551.1835	1.4579E-022	0.0047	6551.1835	1.45E-022	0.5
6551.315	1.5266E-023	0.0051	6551.315	1.93E-023	-26.4
6551.3356	1.4579E-022	0.005	6551.3356	1.41E-022	3.3
6551.4642	4.4751E-022	0.0048	6551.4642	4.36E-022	2.6
6551.5952	1.122E-023	0.0048	6551.5952	1.12E-023	0.2
6551.7179	3.3146E-022	0.0047	6551.7179	3.27E-022	1.3
6551.8107	1.6167E-022	0.0048	6551.8107	1.63E-022	-0.8
6552.1159	1.7831E-023	0.0047	6552.1159	1.72E-023	3.5
6552.1863	1.1769E-023	0.0046	6552.1863	1.17E-023	0.6
6552.2178	3.4857E-023	0.0046	6552.2178	3.26E-023	6.5
6552.3095	6.361E-023	0.0051	6552.3095	7.06E-023	-11.0
6552.3544	2.1498E-023	0.0051	6552.3544	2.04E-023	5.1
6552.3933	2.355E-022	0.0051	6552.3933	2.39E-022	-1.5
6552.4692	1.5367E-023	0.0044	6552.4692	1.5E-023	2.4
6552.6169	2.7424E-022	0.0042	6552.6169	2.73E-022	0.5

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6552.6912	6.5529E-023	0.0043	6552.6912	6.86E-023	-4.7
6552.8037	3.165E-023	0.0043	6552.8037	3.27E-023	-3.3
6552.8642	2.3359E-022	0.0043	6552.8642	2.36E-022	-1.0
6552.9558	2.8187E-022	0.0045	6552.9558	2.88E-022	-2.2
6553.03	2.5488E-022	0.0041	6553.03	2.57E-022	-0.8
6553.1383	5.178E-022	0.0045	6553.1383	4.96E-022	4.2
6553.1554	5.2657E-022	0.0045	6553.1554	4.96E-022	5.8
6553.2364	2.6938E-024	0.0094	6553.2364	4.56E-024	-69.3
6553.2828	2.978E-023	0.0028	6553.2828	3.16E-023	-6.1
6553.3826	6.9616E-023	0.0025	6553.3826	7.14E-023	-2.6
6553.4524	3.2799E-023	0.0022	6553.4524	3.18E-023	3.0
6553.5046	2.5658E-023	0.0022	6553.5046	2.24E-023	12.7
6553.5303	2.7584E-023	0.0023	6553.5303	2.63E-023	4.7
6553.5489	2.3956E-024	0.0057	0	0	0.0
6553.5769	2.9324E-024	0.0036	0	0	0.0
6553.6625	3.9176E-023	0.0022	6553.6625	4.03E-023	-2.9
6553.7081	1.1029E-023	0.0023	6553.7081	9.52E-024	13.7
6553.8059	1.7541E-023	0.0032	6553.8059	1.65E-023	5.9
6553.8308	4.6907E-024	0.0031	6553.8308	4.76E-024	-1.5
6553.896	6.3032E-024	0.0032	6553.896	7.42E-024	-17.7
6553.9789	1.6851E-023	0.0028	6553.9789	2.12E-023	-25.8
6554.0535	5.9072E-024	0.0026	6554.0535	7.1E-024	-20.2
6554.136	4.7334E-024	0.0026	6554.136	6.45E-024	-36.3
6554.1998	1.3835E-024	0.0043	0	0	0.0
6554.3012	1.6874E-024	0.0036	0	0	0.0
6554.3331	2.7611E-024	0.0026	0	0	0.0
6554.3967	1.3005E-023	0.0023	6554.3967	1.5E-023	-15.3
6554.4396	7.6249E-024	0.0023	6554.4396	1E-023	-31.1
6554.6469	3.6629E-023	0.0025	6554.6469	3.7E-023	-1.0
6554.6677	1.3249E-023	0.0025	6554.6677	1.05E-023	20.7
6554.7527	4.9188E-024	0.0031	0	0	0.0
6554.767	1.2662E-023	0.0026	6554.767	1.8E-023	-42.2
6554.8072	4.3344E-024	0.0026	0	0	0.0
6554.8423	1.0176E-023	0.0024	6554.8423	9.52E-024	6.4
6554.9711	2.4296E-023	0.0024	6554.9711	2.44E-023	-0.4
6555.0019	1.9525E-023	0.0024	6555.0019	1.81E-023	7.3
6555.0781	1.6555E-024	0.0051	0	0	0.0
6555.2217	1.022E-024	0.0079	0	0	0.0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6555.2485	5.4992E-024	0.0025	6555.2485	7.82E-024	-42.2
6555.4439	7.2956E-025	0.0106	0	0	0.0
6555.568	5.5502E-023	0.0025	6555.568	6.13E-023	-10.4
6555.6105	2.8067E-023	0.0028	6555.6105	2.49E-023	11.3
6555.685	1.2629E-021	0.0025	6555.685	1.25E-021	1.0
6555.7511	1.2726E-022	0.0025	6555.7511	1.32E-022	-3.7
6555.9964	1.1702E-021	0.0026	6555.9964	1.12E-021	4.3
6556.0607	3.3002E-023	0.0086	6556.0607	2.77E-023	16.1
6556.2022	1.6306E-023	0.0028	6556.2022	1.57E-023	3.7
6556.2745	5.1631E-023	0.0028	6556.2745	5.08E-023	1.6
6556.3231	2.77E-023	0.0034	6556.3231	2.72E-023	1.8
6556.412	3.2842E-023	0.0106	6556.412	3.17E-023	3.5
6556.5444	2.0213E-022	0.0037	6556.5444	2.12E-022	-4.9
6556.5696	1.2408E-023	0.0128	6556.5696	1.13E-023	8.9
6556.7679	1.1291E-023	0.0051	0	0	0.0
6556.8064	1.9382E-023	0.0068	6556.8064	1.87E-023	3.5
6557.037	1.1027E-023	0.015	6557.037	8.8E-024	20.2
6557.0471	6.7437E-023	0.0043	6557.0471	7E-023	-3.8
6557.0897	7.9849E-023	0.003	6557.0897	7.66E-023	4.1
6557.1805	5.9951E-024	0.0043	6557.1805	6.25E-024	-4.3
6557.2756	2.538E-023	0.0053	6557.2756	2.92E-023	-15.1
6557.3158	2.7919E-023	0.003	6557.3158	2.77E-023	0.8
6557.3676	7.4656E-024	0.0043	6557.3676	1.32E-023	-76.8
6557.4292	5.0103E-024	0.0058	0	0	0.0
6557.5516	4.1493E-022	0.0031	6557.5516	4.27E-022	-2.9
6557.5793	1.89E-022	0.003	6557.5793	1.88E-022	0.5
6557.6272	1.4467E-023	0.003	6557.6272	1.35E-023	6.7
6557.6719	3.5074E-023	0.0029	6557.6719	2.88E-023	17.9
6557.7013	1.176E-023	0.0033	6557.7013	1E-023	15.0
6557.7296	3.2671E-023	0.0029	6557.7296	3.16E-023	3.3
6557.8021	8.1299E-024	0.0031	0	0	0.0
6558.0225	3.2725E-024	0.0069	6558.0225	4.6E-024	-40.6
6558.1024	2.6964E-023	0.0019	0	0	0.0
6558.3195	4.5302E-022	0.0026	6558.3195	4.68E-022	-3.3
6558.3775	6.1363E-024	0.0064	6558.3775	4.36E-024	28.9
6558.5627	4.1947E-024	0.0067	6558.5627	4.15E-024	1.1
6558.7158	1.2236E-022	0.0018	6558.7158	1.24E-022	-1.3
6558.7795	7.7439E-024	0.003	6558.7795	1.19E-023	-53.7

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6558.9218	8.1437E-023	0.0018	6558.9218	8.59E-023	-5.5
6559.0414	3.8112E-023	0.0017	6559.0414	6.86E-024	82.0
6559.0857	1.043E-023	0.003	6559.0857	1.22E-023	-17.0
6559.4562	8.4714E-024	0.0023	6559.4562	9.03E-024	-6.6
6559.5902	2.7937E-023	0.0017	6559.5902	1.98E-023	29.1
6559.7546	2.7416E-022	0.0017	6559.7546	2.77E-022	-1.0
6559.787	6.1897E-023	0.0017	6559.787	6.05E-023	2.3
6559.9277	6.3887E-024	0.0037	6559.9277	6.01E-024	5.9
6560.0875	3.1687E-024	0.0063	0	0	0.0
6560.1613	7.2571E-024	0.0037	0	0	0.0
6560.1841	4.7529E-024	0.005	6560.1841	4.11E-024	13.5
6560.2817	3.0418E-023	0.0017	6560.2817	3.12E-023	-2.6
6560.3939	1.6272E-023	0.0019	6560.3939	1.55E-023	4.7
6560.5752	1.1783E-023	0.0022	6560.5752	1.14E-023	3.3
6560.594	1.2922E-023	0.0023	6560.594	7.32E-024	43.4
6560.6146	1.2834E-022	0.0017	6560.6146	1.42E-022	-10.6
6560.6697	2.28E-022	0.0017	6560.6697	2.32E-022	-1.8
6560.7539	6.0409E-023	0.0025	6560.7539	1.22E-023	79.8
6560.8257	8.4375E-023	0.0024	6560.8257	8.55E-023	-1.3
6560.9411	8.4615E-022	0.0024	6560.9411	8.59E-022	-1.5
6560.9919	8.5095E-022	0.0023	6560.9919	8.83E-022	-3.8
6561.0199	1.5486E-023	0.004	0	0	0.0
6561.2644	7.4203E-023	0.0016	6561.2644	7.3E-023	1.6
6561.2861	8.8736E-023	0.0016	6561.2861	8.88E-023	-0.1
6561.317	6.4958E-024	0.0052	6561.317	4.48E-024	31.0
6561.3665	7.0006E-024	0.0157	6561.3665	7.54E-024	-7.7
6561.4136	4.3065E-024	0.0071	6561.4136	5.97E-024	-38.6
6561.449	6.8188E-023	0.0017	6561.449	6.37E-023	6.6
6561.4748	3.9856E-023	0.0017	6561.4748	5.08E-023	-27.5
6561.5831	1.186E-022	0.0024	6561.5831	1.2E-022	-1.2
6561.6383	1.6719E-022	0.0024	6561.6383	1.6E-022	4.3
6561.8011	1.9937E-022	0.0024	6561.8011	2.06E-022	-3.3
6561.8397	2.7639E-023	0.0029	6561.8397	3.39E-023	-22.7
6561.9304	2.206E-022	0.0024	6561.9304	2.21E-022	-0.2
6561.9572	9.0677E-023	0.0024	6561.9572	8.7E-023	4.1
6562.0144	2.1098E-022	0.0024	6562.0144	2.1E-022	0.5
6562.0408	6.5696E-023	0.0024	6562.0408	3.93E-023	40.2
6562.1738	1.3053E-022	0.0017	6562.1738	1.2E-022	8.1

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6562.2265	3.3679E-023	0.0019	6562.2265	3.28E-023	2.6
6562.2915	1.1605E-023	0.0026	6562.2915	1.06E-023	8.7
6562.3414	5.447E-023	0.0017	6562.3414	5.65E-023	-3.7
6562.4324	9.6725E-024	0.0029	6562.4324	8.15E-024	15.7
6562.4935	5.0562E-024	0.008	6562.4935	6.2E-024	-22.6
6562.515	1.1695E-023	0.0041	6562.515	1.46E-023	-24.8
6562.5744	4.3407E-023	0.0023	6562.5744	3.94E-023	9.2
6562.608	3.4621E-023	0.0023	6562.608	3.42E-023	1.2
6562.6549	9.1558E-023	0.0023	6562.6549	9.56E-023	-4.4
6562.6862	5.9234E-024	0.0051	6562.6862	6.49E-024	-9.6
6562.7418	9.6516E-024	0.0035	6562.7418	1.02E-023	-5.7
6562.8089	3.3398E-023	0.0024	6562.8089	3.54E-023	-6.0
6562.8361	3.7741E-023	0.0023	6562.8361	3.1E-023	17.9
6562.906	2.0458E-023	0.0017	6562.906	1.22E-023	40.4
6562.9305	5.6607E-024	0.0039	0	0	0.0
6563.0193	1.0007E-022	0.0017	6563.0193	1.02E-022	-1.9
6563.1651	4.8561E-022	0.0017	6563.1651	5E-022	-3.0
6563.3355	3.2716E-023	0.0017	6563.3355	3.54E-023	-8.2
6563.3539	9.8036E-024	0.0062	6563.3539	6.41E-024	34.6
6563.4458	1.8941E-023	0.0026	6563.4458	2.23E-023	-17.7
6563.4876	4.7383E-022	0.0024	6563.4876	4.8E-022	-1.3
6563.5833	1.9399E-023	0.0026	6563.5833	1.7E-023	12.4
6563.6208	7.2997E-024	0.0047	6563.6208	5.61E-024	23.1
6563.6592	4.4921E-024	0.0068	6563.6592	4.8E-024	-6.9
6563.7916	8.5202E-024	0.0035	6563.7916	5.4E-024	36.6
6563.9896	3.3487E-023	0.0037	6563.9896	3.34E-023	0.3
6564.0889	5.6344E-023	0.0038	6564.0889	5.4E-023	4.2
6564.1084	1.1239E-022	0.0038	6564.1084	1.15E-022	-2.3
6564.2135	2.0997E-023	0.0041	6564.2135	2.2E-023	-4.8
6564.2704	2.3796E-023	0.0041	6564.2704	1.65E-023	30.7
6564.3103	2.2361E-023	0.0042	6564.3103	2.5E-023	-11.8
6564.3705	1.8484E-023	0.0039	6564.3705	1.97E-023	-6.6
6564.7805	6.4257E-024	0.0046	0	0	0.0
6564.8161	2.9734E-023	0.0038	6564.8161	7.06E-024	76.3
6564.862	6.5707E-022	0.0035	6564.862	6.69E-022	-1.8
6564.9522	1.0271E-022	0.0036	6564.9522	1.01E-022	1.7
6565.1081	1.7217E-023	0.004	0	0	0.0
6565.1334	3.1387E-023	0.0038	6565.1334	3.26E-023	-3.9



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6565.4619	5.2488E-023	0.0035	6565.4619	7.2E-024	86.3
6565.5003	1.093E-022	0.0034	6565.5003	1.14E-022	-4.3
6565.5509	6.6079E-024	0.0042	6565.5509	5.36E-024	18.9
6565.6425	7.5527E-024	0.0042	0	0	0.0
6565.6986	7.2665E-023	0.0031	6565.6986	3.79E-023	47.8
6565.8153	3.8758E-023	0.0029	6565.8153	3.74E-023	3.5
6566.3665	3.8281E-024	0.0041	6566.3665	4.88E-024	-27.5
6566.3938	5.2854E-023	0.0033	6566.3938	5.53E-023	-4.6
6566.4621	2.0341E-024	0.0064	0	0	0.0
6566.5817	2.7106E-024	0.0052	0	0	0.0
6566.6872	1.223E-023	0.0028	6566.6872	1.1E-023	10.1
6566.8	6.7922E-024	0.0033	6566.8	5.24E-024	22.9
6566.8331	2.9348E-023	0.0029	6566.8331	3E-023	-2.2
6566.8604	5.4743E-024	0.0041	0	0	0.0
6566.8819	3.092E-024	0.0061	0	0	0.0
6566.9228	6.6829E-023	0.003	6566.9228	7.02E-023	-5.0
6566.9442	8.1153E-024	0.0035	0	0	0.0
6566.9638	1.1159E-023	0.0029	6566.9638	1.06E-023	5.0
6566.987	1.5673E-023	0.0029	0	0	0.0
6567.1993	2.108E-023	0.0033	6567.1993	2.14E-023	-1.5
6567.2712	4.5989E-023	0.0041	6567.2712	3.85E-023	16.3
6567.3287	1.173E-023	0.0038	6567.3287	1.44E-023	-22.8
6567.3696	7.117E-023	0.005	6567.3696	7.46E-023	-4.8
6567.4508	4.2728E-024	0.0052	6567.4508	4.64E-024	-8.6
6567.747	1.2032E-022	0.0059	6567.747	8.19E-023	31.9
6567.799	7.0977E-023	0.0062	0	0	0.0
6567.8237	6.1558E-023	0.0057	0	0	0.0
6568.2661	1.9411E-022	0.0064	6568.2661	1.93E-022	0.6
6568.3729	8.3045E-023	0.0064	0	0	0.0
6568.47	2.5413E-022	0.0065	6568.47	2.05E-022	19.3
6568.4804	2.508E-022	0.0066	0	0	0.0
6568.5468	3.6913E-023	0.0069	0	0	0.0
6568.8547	1.0008E-023	0.0044	6568.8547	9.52E-024	4.9
6568.9018	4.7747E-024	0.0068	0	0	0.0
6568.9165	2.701E-023	0.0043	6568.9165	2.06E-023	23.7
6568.9807	3.6485E-023	0.0041	0	0	0.0
6569.0794	1.9092E-023	0.004	0	0	0.0
6569.156	1.2726E-022	0.0044	6569.156	1.24E-022	2.6

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6569.2059	2.4851E-023	0.004	6569.2059	2.46E-023	1.0
6569.5407	3.2428E-023	0.0035	6569.5407	3.71E-023	-14.4
6569.7565	1.1769E-023	0.0042	6569.7565	1.63E-023	-38.5
6569.8669	2.4216E-024	0.0059	6569.8669	4.28E-024	-76.7
6569.8957	1.5858E-023	0.0032	6569.8957	1.92E-023	-21.1
6569.9371	2.0275E-022	0.003	6569.9371	2.06E-022	-1.6
6570.0088	1.2936E-023	0.0027	6570.0088	1.1E-023	15.0
6570.0468	6.5894E-024	0.0028	6570.0468	1.3E-023	-97.3
6570.2493	9.6805E-023	0.0032	6570.2493	1.02E-022	-5.4
6570.3583	8.4375E-023	0.0029	6570.3583	8.47E-023	-0.4
6570.392	2.9711E-022	0.0026	6570.392	3.08E-022	-3.7
6570.4395	7.4258E-023	0.0028	6570.4395	7.9E-023	-6.4
6570.544	4.5039E-023	0.0032	6570.544	4.31E-023	4.3
6570.5827	9.4237E-024	0.0034	6570.5827	1.14E-023	-21.0
6570.6372	2.9974E-022	0.0031	6570.6372	3E-022	-0.1
6570.7316	1.0748E-022	0.0031	6570.7316	9.72E-023	9.6
6570.7593	4.5746E-022	0.003	6570.7593	2.94E-022	35.7
6570.7787	1.4126E-023	0.0033	0	0	0.0
6570.8484	2.7814E-022	0.0029	6570.8484	2.94E-022	-5.7
6570.8856	3.0486E-023	0.0029	6570.8856	3.04E-023	0.3
6570.9306	2.5914E-023	0.003	6570.9306	2.92E-023	-12.7
6570.9668	1.4108E-023	0.003	6570.9668	1.54E-023	-9.2
6571.1591	1.0887E-023	0.0045	6571.1591	6.21E-024	43.0
6571.4174	1.017E-023	0.0047	6571.4174	6.61E-024	35.0
6571.452	1.7464E-023	0.0032	0	0	0.0
6571.5207	1.1139E-023	0.0029	6571.5207	1.07E-023	3.9
6571.5722	1.0726E-023	0.003	6571.5722	1.16E-023	-8.1
6571.7197	2.5534E-022	0.0017	6571.7197	2.71E-022	-6.1
6571.7804	2.7264E-023	0.0017	6571.7804	2.5E-023	8.3
6571.8641	5.1259E-023	0.0024	6571.8641	5E-023	2.5
6571.9711	1.8123E-022	0.0024	6571.9711	1.87E-022	-3.2
6572.0051	9.493E-023	0.0024	6572.0051	9.2E-023	3.1
6572.2568	3.8599E-023	0.0024	6572.2568	4.03E-023	-4.4
6572.3957	4.2729E-022	0.0022	6572.3957	4.05E-022	5.2
6572.4096	3.9233E-023	0.0028	6572.4096	4.78E-023	-21.8
6572.4482	2.3604E-023	0.0021	6572.4482	2.17E-023	8.1
6572.5196	9.0341E-023	0.0019	6572.5196	8.39E-023	7.1
6572.606	3.2469E-024	0.0059	6572.606	4.03E-024	-24.1

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6572.6446	9.661E-023	0.0019	6572.6446	1.03E-022	-6.6
6572.6734	7.7929E-024	0.0029	6572.6734	8.31E-024	-6.6
6572.8538	5.1877E-022	0.0028	6572.8538	5.28E-022	-1.8
6572.952	5.2753E-022	0.0028	6572.952	5.52E-022	-4.6
6573.0186	5.6313E-023	0.0027	6573.0186	5.24E-023	6.9
6573.0388	6.9004E-023	0.0027	6573.0388	7.2E-023	-4.3
6573.2182	5.1103E-024	0.0036	6573.2182	4.88E-024	4.5
6573.3556	7.0151E-024	0.0029	0	0	0.0
6573.417	3.9056E-024	0.0073	0	0	0.0
6573.4366	2.514E-023	0.0022	6573.4366	2.58E-023	-2.6
6573.5301	1.3354E-023	0.0022	6573.5301	9.07E-024	32.1
6573.5591	5.2428E-023	0.002	6573.5591	5.77E-023	-10.1
6573.7319	1.9468E-022	0.0023	6573.7319	1.83E-022	6.0
6573.7711	1.6078E-023	0.0025	0	0	0.0
6573.8478	2.7221E-024	0.0086	0	0	0.0
6573.9236	1.2532E-023	0.003	6573.9236	1.43E-023	-14.1
6573.9817	2.2961E-023	0.0023	6573.9817	1.94E-023	15.5
6574.0071	2.2642E-022	0.0023	6574.0071	2.4E-022	-6.0
6574.0886	2.0904E-022	0.0024	6574.0886	2.1E-022	-0.5
6574.2547	5.8594E-023	0.0019	6574.2547	6.13E-023	-4.6
6574.4604	1.8152E-023	0.0024	6574.4604	1.32E-023	27.3
6574.4796	4.327E-023	0.002	6574.4796	4.4E-023	-1.7
6574.5615	4.6178E-024	0.0081	6574.5615	4.19E-024	9.3
6574.6818	2.5498E-023	0.0027	6574.6818	1.54E-023	39.6
6574.8759	1.2688E-022	0.003	6574.8759	1.05E-022	17.2
6574.9124	3.0663E-023	0.0029	6574.9124	2.39E-023	22.1
6575.0689	3.4519E-023	0.0039	6575.0689	3.65E-023	-5.7
6575.0824	1.2881E-022	0.002	6575.0824	1.27E-022	1.4
6575.2079	5.4208E-024	0.006	0	0	0.0
6575.2352	1.6988E-023	0.0028	6575.2352	1.58E-023	7.0
6575.4322	3.801E-022	0.0018	6575.4322	3.94E-022	-3.7
6575.4849	1.1172E-022	0.0024	6575.4849	1.13E-022	-1.1
6575.5381	4.3516E-023	0.0025	6575.5381	1.28E-023	70.6
6575.5994	1.5152E-023	0.0056	6575.5994	1.56E-023	-3.0
6575.6225	1.3591E-022	0.0024	6575.6225	1.4E-022	-3.0
6575.6801	9.8634E-023	0.0025	6575.6801	5.52E-023	44.0
6575.7189	4.8718E-022	0.0025	6575.7189	4.88E-022	-0.2
6575.8143	2.1752E-023	0.0037	6575.8143	1.6E-023	26.4

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
6575.8538	3.4974E-022	0.0018	6575.8538	3.41E-022	2.5
6575.907	1.5232E-023	0.0033	6575.907	1.9E-023	-24.7
6576.0076	1.2276E-023	0.0041	6576.0076	1.28E-023	-4.3
6576.1651	1.8971E-022	0.0018	6576.1651	1.11E-022	41.5
6576.2651	7.8013E-023	0.0018	6576.2651	5.12E-023	34.4
6576.3976	1.4984E-022	0.0025	6576.3976	1.47E-022	1.9
6576.5278	8.0286E-024	0.0081	6576.5278	7.82E-024	2.6
6576.5638	1.1812E-023	0.0061	0	0	0.0
6576.641	1.1106E-023	0.0049	6576.641	1.41E-023	-27.0
6576.7029	1.9088E-022	0.0019	6576.7029	1.94E-022	-1.6
6576.7463	1.1989E-022	0.002	6576.7463	7.4E-023	38.3
6576.8277	7.8234E-024	0.0086	6576.8277	1E-023	-27.8
6576.9307	8.6414E-024	0.0083	6576.9307	9.07E-024	-5.0
6576.9589	1.5719E-023	0.004	0	0	0.0
6577.008	3.127E-022	0.0021	6577.008	3.13E-022	-0.1
6577.1857	5.02E-022	0.003	6577.1857	5.08E-022	-1.2
6577.3103	1.6951E-022	0.003	6577.3103	1.75E-022	-3.2
6577.4817	1.324E-023	0.0085	6577.4817	1.34E-023	-1.2
6577.7227	5.1172E-023	0.0034	6577.7227	5E-023	2.3
6577.8502	1.6606E-023	0.0024	6577.8502	7.14E-024	57.0
6577.8713	1.1554E-023	0.0034	6577.8713	1.27E-023	-9.9
6577.8831	1.2268E-023	0.0092	0	0	0.0
6577.8996	8.9975E-024	0.0037	6577.8996	8.71E-024	3.2
6577.949	6.6557E-023	0.0033	6577.949	6.45E-023	3.1
6578.0575	1.0019E-023	0.0036	6578.0575	1.16E-023	-15.8
6578.261	4.7539E-024	0.0064	6578.261	6.13E-024	-28.9
6578.4112	4.4268E-023	0.0035	0	0	0.0
6578.4453	7.8164E-023	0.0033	6578.4453	7.98E-023	-2.1
6578.5553	8.0765E-023	0.0035	6578.5553	8.31E-023	-2.9
6578.6089	6.2872E-024	0.005	6578.6089	6.86E-024	-9.1
6578.6324	2.9135E-023	0.0035	0	0	0.0
6578.671	3.1691E-024	0.0078	0	0	0.0
6578.7484	1.2318E-022	0.0036	6578.7484	1.12E-022	9.1
6578.8055	5.6224E-024	0.0055	0	0	0.0
6578.8752	1.9576E-023	0.0041	6578.8752	1.84E-023	6.0
6578.9267	3.1077E-023	0.0039	0	0	0.0
6578.9699	5.9291E-024	0.0056	0	0	0.0
6579.0545	2.5811E-023	0.0041	6579.0545	1.66E-023	35.7

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$\delta S$	$\sigma_{Sung}$	$S_{Sung}$	Diff (%)
------------------	-----------------	------------	-----------------	------------	----------

TABLE 1 – Forces de raies  $^{14}\text{NH}_3$ . Difference entre notre travail et les données de Sung.

# Annexe 3

TABLE 1 – Résultats de la détermination de l'énergie de l'état initial pour  $^{14}\text{NH}_3$ . La 3ème colonne donne la force de raie et l'énergie de l'état initial et son erreur figure dans les 4ème et 5ème colonnes. Lorsque la transition est attribuée par Sung *et al.*, la valeur de l'énergie de l'état initial est reportée et peut être comparée à notre valeur expérimentale.

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6371.7006	6371.7009	1.52E-23	82.2	14.4	0
6372.1276	6372.1275	2.54E-24	317.8	9.4	0
6372.3557	6372.3557	4.44E-23	115.6	75.1	0
6372.5049	6372.5049	1.57E-23	1477.2	10.4	0
6372.6922	6372.6891	5.78E-24	778.7	73.9	0
6372.8144	6372.8139	1.10E-23	221.8	73.6	0
6372.9001	6372.8981	2.61E-24	1178.3	19.3	0
6373.4617	6373.4589	1.09E-24	-23.0	19.3	0
6373.4972	6373.4996	3.20E-24	924.9	19.5	0
6373.6811	6373.6811	5.72E-23	146.5	7.1	0
6374.0433	6374.0439	1.46E-23	1105.3	8.0	0
6374.2469	6374.2478	1.34E-24	708.1	19.3	0
6374.4997	6374.5005	1.26E-24	377.5	5.0	0
6374.7701	6374.7731	2.84E-24	1101.5	19.5	0
6374.8624	6374.8623	1.77E-23	743.3	2.2	759.0024
6375.0229	6375.0245	9.26E-24	272.2	7.5	0
6375.0415	6375.04	4.36E-24	1099.6	16.8	0
6375.2263	6375.2251	6.11E-24	1042.8	16.7	0
6375.2603	6375.2583	1.86E-23	772.5	1.0	758.3853
6375.3976	6375.3949	4.03E-24	390.7	6.9	0
6375.9373	6375.9356	5.05E-24	1015.6	16.8	0
6376.0767	6376.0764	2.36E-23	842.4	9.2	0
6376.1296	6376.1286	2.91E-24	794.1	16.8	0
6376.1472	6376.1419	4.89E-24	814.9	47.8	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6376.4055	6376.4021	5.27E-24	231.1	12.0	0
6376.4271	6376.426	9.71E-24	701.4	9.3	0
6376.5349	6376.5342	5.19E-24	1128.4	14.3	0
6376.6296	6376.6292	2.54E-23	1055.8	15.0	1052.5498
6376.6492	6376.6487	4.90E-24	172.2	11.0	0
6376.7293	6376.7189	1.88E-24	595.5	7.2	0
6377.1258	6377.1258	3.55E-23	80.1	7.1	0
6377.3013	6377.3003	9.69E-24	49.3	7.2	0
6377.3999	6377.4007	2.36E-24	581.2	16.8	0
6377.4314	6377.4303	5.30E-24	928.0	17.0	0
6377.6463	6377.6493	4.58E-24	485.9	16.6	0
6377.6777	6377.6786	4.92E-24	445.7	6.9	0
6377.8426	6377.8424	4.72E-24	849.7	16.7	0
6377.9598	6377.9605	5.94E-25	492.7	16.8	0
6378.0275	6378.0285	1.33E-24	362.8	16.8	0
6378.4912	6378.4911	4.85E-24	127.1	7.1	0
6378.5153	6378.5105	1.67E-24	189.4	7.5	0
6378.6615	6378.662	8.89E-24	1449.3	16.7	0
6378.6892	6378.684	2.19E-24	442.1	9.5	0
6378.8817	6378.8808	3.88E-24	524.3	9.5	0
6379.0063	6379.0063	5.53E-23	96.1	4.8	0
6379.4576	6379.4559	3.51E-24	575.3	18.5	0
6379.5113	6379.5113	7.53E-24	617.2	12.8	0
6379.9617	6379.9602	9.06E-25	132.5	5.5	0
6380.0820	6380.0796	9.51E-24	235.8	61.6	0
6380.1150	6380.115	1.05E-23	36.7	11.7	0
6380.7141	6380.7147	6.44E-24	430.9	31.1	0
6380.8875	6380.8919	3.81E-24	601.7	9.0	0
6381.2508	6381.2536	1.41E-23	52.5	1.5	0
6381.2729	6381.2738	4.07E-24	836.2	18.9	0
6381.2972	6381.2972	1.68E-23	91.4	4.3	0
6381.5542	6381.5512	2.47E-24	1096.7	18.9	0
6381.6855	6381.6866	3.17E-24	112.0	1.1	0
6381.8449	6381.8461	9.10E-24	1023.5	4.7	0
6382.0733	6382.0731	5.22E-24	548.3	13.8	0
6382.2851	6382.2853	2.49E-24	945.8	18.9	0
6382.5482	6382.547	1.98E-23	1076.4	3.8	0
6382.6373	6382.6369	3.36E-24	569.1	8.6	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6382.7196	6382.7205	4.24E-24	484.2	15.4	0
6382.7975	6382.7913	1.43E-24	487.3	15.1	0
6383.0468	6383.0468	1.46E-24	287.2	12.1	0
6383.1100	6383.1053	2.62E-24	251.8	3.1	0
6383.2583	6383.255	6.85E-24	686.5	26.5	0
6383.3734	6383.3734	1.51E-23	792.6	13.6	798.9348
6383.5563	6383.5563	6.63E-24	913.4	29.9	0
6383.7814	6383.7794	1.20E-24	584.2	19.6	0
6383.9641	6383.9617	4.11E-24	745.6	7.5	0
6384.0572	6384.0532	2.95E-24	558.5	5.6	0
6384.3259	6384.3258	1.47E-23	804.7	13.6	798.3744
6384.3552	6384.3551	1.14E-23	607.8	3.9	0
6384.5574	6384.5545	3.95E-24	64.7	4.7	0
6384.7054	6384.705	2.54E-24	335.9	1.4	0
6385.1058	6385.1056	5.89E-24	1006.5	8.0	0
6385.1869	6385.1865	6.76E-24	1474.9	18.9	0
6385.2399	6385.2379	8.89E-24	1121.6	19.0	0
6385.2780	6385.2779	9.94E-24	89.1	19.5	0
6385.2996	6385.3022	1.78E-24	19.1	27.5	0
6385.3214	6385.3169	1.20E-24	475.0	18.9	0
6385.4860	6385.486	1.24E-23	47.0	1.5	0
6385.5044	6385.505	5.30E-24	688.5	18.9	0
6385.6818	6385.676	1.45E-24	682.9	1.7	0
6385.8295	6385.8285	4.25E-24	788.4	2.2	0
6385.9497	6385.9473	1.08E-23	1384.4	45.1	0
6386.0720	6386.0739	2.46E-24	744.7	18.9	0
6386.1694	6386.1732	2.14E-24	596.6	18.9	0
6386.2341	6386.2365	2.88E-23	900.1	10.2	0
6386.2578	6386.2563	4.20E-24	500.5	2.6	0
6386.2830	6386.2787	7.19E-24	438.7	3.9	0
6386.3174	6386.3179	1.06E-24	99.0	6.9	0
6386.5855	6386.5842	2.51E-23	-19.4	14.6	0
6386.6833	6386.6822	6.52E-24	1745.8	21.4	0
6386.7687	6386.7693	1.21E-23	821.1	7.5	0
6386.8829	6386.8824	6.52E-24	812.0	5.8	0
6387.2325	6387.2327	1.34E-23	91.8	4.4	0
6387.5665	6387.5682	2.68E-24	829.3	17.4	0
6387.5821	6387.5812	6.59E-24	474.9	2.5	0



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6387.7081	6387.709	1.61E-23	1196.2	1.0	0
6387.9362	6387.9388	7.13E-24	1003.6	4.3	0
6388.1025	6388.1034	1.10E-23	995.9	14.8	0
6388.1886	6388.1884	2.08E-24	514.1	52.5	0
6388.6875	6388.6874	9.83E-24	551.9	5.1	0
6389.9342	6389.9342	3.72E-23	184.6	3.1	0
6390.2972	6390.2972	2.70E-23	104.9	6.3	0
6390.6212	6390.622	3.02E-24	643.3	9.4	0
6390.8620	6390.8629	5.25E-24	-33.9	5.9	0
6390.9543	6390.954	3.20E-23	76.8	5.5	0
6391.2553	6391.2545	3.81E-23	255.1	10.2	0
6392.3279	6392.3279	2.16E-23	16.5	3.8	0
6392.4704	6392.4721	6.19E-24	811.6	21.5	0
6392.7025	6392.7025	4.93E-24	60.1	10.8	0
6393.0092	6393.0099	8.76E-24	125.5	2.9	0
6393.2942	6393.2944	1.19E-23	93.3	20.6	0
6393.3508	6393.3504	1.66E-23	797.9	24.9	831.4579
6393.3927	6393.3918	1.16E-23	172.9	20.4	0
6393.5265	6393.5266	9.60E-24	1147.4	20.8	0
6393.7246	6393.7239	6.78E-24	412.4	17.6	383.3184
6393.7678	6393.7682	3.37E-24	1184.1	6.9	0
6393.8306	6393.8289	6.84E-24	1402.3	7.0	0
6394.0203	6394.0158	2.08E-24	446.2	20.2	0
6394.2410	6394.2377	4.70E-24	18.0	30.6	0
6394.6127	6394.6189	4.76E-24	1090.2	6.9	0
6394.6319	6394.6306	1.53E-23	589.9	17.1	0
6394.7815	6394.7825	1.61E-23	618.2	16.6	581.4709
6394.8963	6394.8974	5.74E-24	1462.6	25.2	0
6395.1853	6395.186	1.06E-23	846.4	19.6	830.9401
6395.2670	6395.2672	1.20E-23	184.4	19.4	0
6395.3743	6395.3734	2.72E-24	1057.5	10.9	0
6395.5717	6395.5691	2.87E-24	38.8	23.9	0
6395.6163	6395.617	8.05E-24	477.8	15.1	0
6395.8204	6395.8215	5.36E-24	1136.7	11.8	0
6395.9377	6395.9357	2.95E-24	83.0	15.7	0
6396.2288	6396.2309	6.81E-24	376.4	9.7	383.9775
6396.3123	6396.3123	2.04E-23	204.6	2.8	0
6396.5765	6396.5739	3.17E-24	360.2	16.2	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6396.6120	6396.6127	5.13E-24	1007.8	8.1	0
6396.8380	6396.8408	4.83E-23	843.5	39.8	856.1788
6396.9483	6396.9484	1.95E-23	181.3	2.5	0
6397.0483	6397.0526	3.53E-24	946.7	26.4	0
6397.1609	6397.162	9.49E-24	1289.5	26.0	0
6397.2660	6397.266	5.79E-23	918.7	9.7	856.6583
6397.3646	6397.3674	2.90E-24	89.7	24.2	0
6397.3965	6397.3967	9.18E-24	25.6	7.8	0
6397.4880	6397.4888	2.27E-24	424.7	30.4	0
6397.5857	6397.5877	2.01E-23	441.3	9.4	0
6397.9158	6397.9161	4.56E-24	58.3	49.2	0
6398.0496	6398.0479	6.95E-24	1130.1	27.7	0
6398.2984	6398.304	1.40E-23	490.8	35.4	0
6398.5267	6398.5255	2.53E-24	365.3	29.4	0
6398.6011	6398.6003	1.82E-23	579.0	21.9	0
6398.6722	6398.6731	1.15E-23	84.0	17.1	0
6398.7029	6398.7043	5.24E-24	668.9	2.4	0
6398.8025	6398.8039	2.82E-24	768.2	25.0	0
6398.8580	6398.8569	2.57E-24	257.6	13.0	0
6398.9905	6398.992	8.50E-24	1217.8	24.7	0
6399.0580	6399.0564	2.35E-24	463.1	24.9	0
6399.1868	6399.1884	6.90E-24	1000.8	9.0	0
6399.2552	6399.254	2.88E-24	472.1	26.4	0
6399.3477	6399.347	2.16E-23	34.9	9.6	0
6399.4565	6399.4589	4.32E-24	363.0	9.0	0
6399.8095	6399.8104	2.21E-23	1027.9	14.3	0
6400.2491	6400.2496	1.53E-23	696.5	11.6	0
6400.3674	6400.3664	7.51E-24	150.2	19.8	0
6400.6422	6400.6424	1.51E-23	232.4	22.6	0
6400.7391	6400.739	1.21E-23	1306.7	35.4	0
6400.9532	6400.9532	4.24E-24	360.8	8.6	0
6401.1088	6401.1091	1.79E-23	1197.9	14.5	0
6401.2012	6401.2012	1.57E-23	880.9	10.6	853.2115
6401.5264	6401.5254	2.04E-23	264.9	19.1	0
6401.6290	6401.6286	2.01E-23	219.7	8.4	0
6402.0719	6402.0718	5.09E-23	695.3	2.9	712.3533
6402.1658	6402.1662	3.89E-24	398.3	10.8	0
6402.2573	6402.2574	9.40E-24	1216.9	25.6	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6402.3754	6402.3745	6.25E-23	882.8	7.5	0
6402.4730	6402.4714	8.95E-24	406.3	13.8	0
6402.5049	6402.5044	1.11E-23	1299.6	31.1	0
6402.6408	6402.6384	1.14E-23	1076.7	27.6	0
6402.6934	6402.6904	5.65E-24	396.7	17.7	0
6402.7557	6402.7523	6.26E-24	1140.8	17.7	0
6402.7756	6402.7756	2.24E-23	182.3	4.9	0
6403.0057	6403.0053	3.50E-24	838.2	31.9	0
6403.2419	6403.2438	2.08E-24	677.0	36.7	0
6403.2727	6403.2706	1.14E-23	450.5	13.1	0
6403.3013	6403.3021	8.57E-24	779.5	23.3	0
6403.3551	6403.3537	1.09E-23	619.9	20.8	0
6403.3876	6403.3869	8.97E-24	188.3	3.1	0
6403.5669	6403.5653	1.27E-23	1366.6	31.8	0
6403.5999	6403.6013	1.40E-23	749.7	15.5	0
6403.7509	6403.7508	2.18E-23	672.7	3.3	0
6403.7813	6403.78	9.77E-24	413.0	13.6	0
6404.0714	6404.0728	7.62E-24	265.6	17.5	0
6404.1114	6404.1113	2.73E-23	890.7	4.3	874.1503
6404.6659	6404.6659	9.70E-24	78.8	12.7	0
6404.9888	6404.9888	5.11E-24	500.7	11.0	0
6405.0777	6405.0773	7.22E-24	523.2	15.3	0
6405.2612	6405.2622	4.14E-24	1130.5	32.0	0
6405.3698	6405.3697	8.99E-24	280.7	6.3	0
6405.4774	6405.4774	7.07E-23	241.7	4.6	0
6405.5684	6405.5674	1.11E-23	50.3	3.4	0
6405.7232	6405.7222	2.07E-23	1077.4	8.4	0
6405.8124	6405.8126	1.48E-23	914.0	14.7	0
6406.1172	6406.1169	1.08E-23	85.7	4.6	0
6406.3613	6406.361	2.20E-24	740.8	8.0	0
6406.5370	6406.5382	2.41E-24	289.3	5.1	0
6406.6483	6406.6483	3.44E-23	81.2	8.1	0
6406.9325	6406.9329	3.47E-23	1205.7	2.7	0
6407.0347	6407.0351	8.56E-24	1288.3	1.6	0
6407.2474	6407.247	9.39E-24	1314.8	3.7	0
6407.3089	6407.3084	9.82E-24	192.2	21.5	0
6407.3481	6407.347	1.38E-24	522.7	101.0	0
6407.5575	6407.5575	3.49E-23	19.1	8.4	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6407.7212	6407.7214	3.25E-23	1280.1	5.2	0
6407.9431	6407.9439	5.68E-24	414.8	4.6	0
6408.6210	6408.622	2.20E-23	1031.4	1.0	0
6409.0514	6409.0509	1.10E-23	45.2	4.3	0
6409.3556	6409.3552	3.18E-24	663.4	12.5	0
6409.5166	6409.5126	9.15E-25	742.0	12.1	0
6409.6442	6409.6401	4.28E-24	259.4	7.6	0
6409.6935	6409.6937	1.15E-23	428.8	36.7	0
6409.8204	6409.8185	9.90E-24	830.3	63.0	0
6410.2907	6410.2925	4.11E-24	309.2	24.8	265.2266
6410.3526	6410.3526	1.19E-23	292.8	9.9	0
6410.4589	6410.461	3.88E-24	211.1	2.6	0
6410.4971	6410.4984	1.14E-23	386.7	5.1	0
6410.5704	6410.5705	5.84E-24	1492.8	33.3	0
6410.6643	6410.6649	1.34E-23	370.9	9.3	0
6410.8458	6410.8458	1.69E-23	73.9	13.7	0
6410.9491	6410.9497	5.29E-24	1380.5	12.4	0
6411.2139	6411.2168	9.77E-24	777.9	9.1	0
6411.3128	6411.3153	1.16E-23	1433.4	10.6	0
6411.4996	6411.4983	4.58E-24	855.0	35.7	0
6411.5169	6411.5146	1.29E-23	1186.7	26.9	0
6411.6220	6411.6196	7.54E-24	976.8	3.3	0
6411.6420	6411.6401	1.51E-23	1264.5	11.9	0
6411.8664	6411.8642	1.13E-23	943.6	2.5	0
6411.8924	6411.8909	1.23E-23	1332.6	12.0	0
6411.9971	6411.9976	1.31E-23	858.2	8.9	0
6412.0999	6412.0994	4.59E-24	975.8	21.8	0
6412.1607	6412.1629	3.26E-23	607.0	2.2	654.4503
6412.2596	6412.2609	1.56E-23	714.2	14.7	0
6412.4104	6412.4103	3.96E-24	775.5	11.4	0
6412.5462	6412.5454	1.90E-23	84.0	12.4	0
6412.5875	6412.5896	1.08E-23	991.3	10.8	0
6412.8535	6412.8537	2.11E-23	154.4	30.7	0
6412.9236	6412.9232	2.92E-23	684.7	14.9	653.8706
6413.0000	6413	3.61E-23	293.1	8.1	0
6413.1235	6413.1252	2.83E-24	724.4	11.3	0
6413.2729	6413.2728	9.19E-24	698.9	22.9	712.3533
6413.4006	6413.4008	4.81E-24	390.1	7.2	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6413.5349	6413.5361	2.41E-24	42.0	16.6	0
6413.6239	6413.6239	2.15E-23	180.1	24.7	0
6413.7531	6413.7558	2.01E-24	535.8	28.9	0
6413.8039	6413.8067	3.22E-24	665.6	11.6	0
6414.0842	6414.0839	1.32E-23	536.6	2.6	0
6414.2261	6414.2239	5.43E-24	862.8	12.3	0
6414.3547	6414.3554	5.24E-24	1090.7	12.7	0
6414.4843	6414.4852	2.39E-24	158.0	11.6	0
6414.5873	6414.5874	3.42E-24	1288.0	62.7	0
6414.6360	6414.6423	2.85E-24	557.6	11.7	0
6414.7003	6414.7001	1.58E-24	560.0	11.3	0
6414.9664	6414.9665	1.67E-23	448.7	24.6	0
6415.1301	6415.1297	4.12E-24	225.5	11.6	0
6415.1609	6415.1621	2.97E-24	115.8	13.8	0
6415.2569	6415.2563	3.42E-23	1011.6	15.8	0
6415.4152	6415.4149	2.96E-23	1035.9	5.1	0
6415.5800	6415.5796	1.39E-23	260.5	9.3	0
6415.7742	6415.7781	1.32E-23	1225.8	9.4	0
6415.9300	6415.9306	3.20E-23	1016.2	4.3	0
6416.1354	6416.1345	7.78E-24	701.8	46.4	708.7467
6416.2835	6416.2822	4.01E-23	1011.4	3.8	0
6416.2956	6416.2927	1.34E-23	824.2	7.4	0
6416.3250	6416.3237	1.92E-23	933.9	40.0	0
6416.3400	6416.3406	2.97E-23	691.6	15.4	0
6416.4943	6416.4932	1.48E-23	572.1	6.4	0
6416.5260	6416.5257	1.44E-23	526.2	7.8	0
6417.0253	6417.0244	2.46E-24	207.5	15.0	0
6417.2418	6417.2417	1.09E-23	57.3	9.5	0
6417.2846	6417.2855	2.12E-23	1069.4	154.0	0
6417.4973	6417.4995	4.55E-24	380.0	7.1	0
6417.5540	6417.5527	5.84E-24	472.4	3.9	0
6417.6760	6417.6751	7.46E-24	765.1	39.2	0
6417.7092	6417.7116	3.96E-24	513.1	69.7	0
6417.7582	6417.7582	2.81E-23	463.5	91.0	0
6417.8553	6417.8561	3.09E-24	202.1	6.2	0
6417.8807	6417.8803	5.93E-24	485.8	4.8	0
6417.9819	6417.9815	1.92E-23	1149.6	5.5	0
6418.0554	6418.0522	3.98E-24	432.2	20.6	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6418.0892	6418.0895	6.40E-24	382.7	4.4	0
6418.1655	6418.1654	7.31E-24	1130.8	7.3	0
6418.1993	6418.1992	1.36E-23	1051.5	14.6	0
6418.2394	6418.2394	8.22E-23	683.6	5.4	679.8367
6418.3241	6418.3226	5.22E-24	228.0	17.1	0
6418.3546	6418.3558	2.86E-24	52.0	14.6	0
6418.5690	6418.5694	7.01E-24	829.1	7.4	0
6418.6563	6418.6556	2.21E-23	1217.8	5.5	0
6418.7242	6418.7241	5.99E-24	502.9	10.8	0
6418.7684	6418.77	1.26E-24	-23.0	38.4	0
6418.8184	6418.8178	1.48E-23	191.5	10.6	0
6418.8518	6418.8527	4.32E-24	554.8	3.7	0
6418.8781	6418.8767	1.65E-23	204.4	9.5	0
6419.0145	6419.017	9.58E-24	111.7	3.5	0
6419.0368	6419.0372	4.29E-23	668.4	1.5	679.2879
6419.0892	6419.0891	7.89E-24	894.2	10.9	0
6419.1289	6419.1279	2.30E-23	1087.7	6.0	0
6419.1773	6419.1804	1.06E-24	159.7	15.1	0
6419.2717	6419.2718	1.74E-23	1109.0	4.0	0
6419.3437	6419.3439	8.16E-24	688.0	6.6	0
6419.4592	6419.4599	7.77E-24	1100.0	8.3	0
6419.5002	6419.5022	4.99E-24	1112.0	6.2	0
6419.5385	6419.5395	1.56E-24	812.1	10.4	0
6419.7842	6419.7837	1.49E-23	282.2	9.0	0
6419.8651	6419.8649	3.45E-24	923.6	11.7	0
6419.9759	6419.9755	1.35E-23	423.4	4.5	0
6420.0030	6420.0016	1.12E-23	738.6	8.6	0
6420.0826	6420.0825	1.75E-23	440.9	4.6	0
6420.1353	6420.1334	1.74E-24	229.4	2.9	0
6420.3030	6420.3028	5.65E-24	1139.1	13.2	0
6420.4237	6420.4222	7.76E-24	716.2	5.5	0
6420.8884	6420.8887	1.25E-23	1291.2	6.3	0
6420.9805	6420.9795	6.93E-24	302.6	10.4	0
6421.0165	6421.018	2.59E-24	203.5	51.4	0
6421.1364	6421.1385	5.60E-24	1074.9	15.4	0
6421.2325	6421.2325	9.05E-23	663.9	22.0	0
6421.3857	6421.3861	2.09E-24	57.2	4.5	0
6421.4329	6421.4347	1.20E-23	529.7	96.1	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6421.5007	6421.5012	1.70E-23	218.2	3.5	0
6421.5215	6421.5224	1.34E-23	973.1	4.4	0
6421.5832	6421.5834	6.42E-24	961.0	13.4	0
6421.6302	6421.6285	1.26E-24	932.3	18.3	0
6421.6804	6421.6811	1.20E-23	868.6	4.0	0
6421.7514	6421.7502	1.98E-24	488.0	8.1	0
6421.8852	6421.8852	6.86E-24	743.5	3.7	0
6421.9030	6421.9034	1.14E-23	1296.0	5.4	0
6422.1921	6422.1926	3.26E-24	327.2	9.5	0
6422.2203	6422.2222	1.74E-23	1147.8	13.0	0
6422.2366	6422.2381	3.73E-24	355.3	23.4	0
6422.4420	6422.442	5.34E-23	899.4	2.9	888.5008
6422.5415	6422.5417	8.10E-24	1109.3	6.6	0
6422.8357	6422.8354	9.95E-24	399.7	7.6	0
6423.0160	6423.0163	5.41E-24	292.2	8.3	0
6423.2545	6423.2541	1.25E-23	305.2	4.6	0
6423.2847	6423.2854	1.33E-23	433.6	2.3	0
6423.4034	6423.4045	1.95E-24	557.9	11.7	0
6423.4351	6423.4359	1.19E-23	446.1	10.2	463.7071
6423.6121	6423.6114	1.65E-23	718.2	2.0	0
6423.7144	6423.7138	1.31E-23	426.2	5.7	0
6423.7355	6423.7351	1.84E-23	1266.8	2.8	0
6423.7660	6423.7697	6.44E-25	513.8	17.8	0
6423.8394	6423.8372	5.07E-24	1125.7	15.4	0
6423.8843	6423.8821	1.01E-23	1032.8	4.6	0
6423.9599	6423.963	2.14E-24	504.4	9.2	0
6423.9956	6423.9959	2.09E-23	1122.8	6.7	0
6424.1441	6424.1472	2.56E-23	440.7	152.5	0
6424.2157	6424.2163	3.18E-23	1054.5	6.7	0
6424.4115	6424.4107	7.93E-23	720.7	16.0	0
6424.4292	6424.4268	2.17E-23	260.4	42.0	0
6424.4717	6424.4731	3.58E-23	383.0	0.9	0
6424.5568	6424.5568	5.20E-24	1030.3	17.0	0
6424.7339	6424.7347	4.81E-24	898.2	11.9	0
6424.9383	6424.9383	4.46E-23	859.3	8.5	0
6425.0261	6425.027	3.51E-24	1335.2	14.7	0
6425.2324	6425.2336	2.94E-24	26.5	1.2	0
6425.3641	6425.3639	9.86E-24	114.8	4.4	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6425.6108	6425.6108	7.42E-23	690.1	1.5	697.9171
6425.7922	6425.792	4.97E-24	1153.9	11.2	0
6425.8834	6425.883	2.85E-23	1042.9	9.9	0
6425.9270	6425.927	2.79E-24	669.2	8.2	0
6426.0524	6426.0501	8.88E-24	943.1	16.3	0
6426.0724	6426.0724	8.61E-24	597.1	4.3	0
6426.1313	6426.131	1.36E-23	558.8	4.0	0
6426.1889	6426.1877	2.22E-24	637.7	8.1	0
6426.2507	6426.2502	1.11E-23	309.0	5.5	0
6426.4238	6426.4239	2.09E-24	419.4	11.1	0
6426.5945	6426.594	3.87E-24	960.9	15.1	0
6426.6522	6426.6517	3.10E-24	61.0	21.2	0
6426.7898	6426.7914	5.56E-24	1063.6	28.5	0
6426.9329	6426.9331	2.98E-23	1055.0	20.8	0
6426.9456	6426.9468	1.90E-23	1005.2	9.8	0
6427.0993	6427.0984	3.44E-24	1237.5	27.6	0
6427.1548	6427.155	9.92E-24	1074.7	16.4	0
6427.2039	6427.2035	1.18E-23	1157.3	21.9	0
6427.2451	6427.2421	2.52E-24	634.0	13.3	0
6427.4112	6427.4122	2.02E-23	704.2	9.8	0
6427.4862	6427.4862	5.00E-23	706.2	3.6	697.3954
6427.6183	6427.6224	2.36E-24	459.2	17.4	0
6427.8628	6427.8636	1.10E-23	316.8	5.1	0
6428.0779	6428.0822	3.13E-24	626.8	10.7	0
6428.1640	6428.164	8.95E-23	1047.5	3.6	0
6428.5363	6428.5359	6.12E-24	933.7	46.0	0
6428.6011	6428.6015	5.99E-23	989.0	2.5	0
6428.6141	6428.6136	2.26E-23	1106.2	17.2	0
6428.6931	6428.6932	4.36E-24	914.4	13.0	0
6428.8083	6428.8106	3.03E-24	289.7	10.8	0
6428.8619	6428.8691	5.41E-24	361.9	19.1	0
6428.8794	6428.8819	4.13E-24	412.5	27.4	0
6429.0231	6429.023	1.86E-23	1068.5	2.2	0
6429.2790	6429.2797	2.06E-24	853.2	8.9	0
6429.3663	6429.3649	7.79E-24	346.8	9.9	0
6429.5502	6429.5482	8.56E-24	342.9	13.8	0
6429.5845	6429.5845	1.59E-23	407.3	18.2	0
6429.6077	6429.6095	9.88E-24	970.7	5.5	0



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6429.6239	6429.6241	3.69E-24	409.1	20.0	0
6429.6882	6429.6866	6.66E-24	852.0	40.6	0
6429.7993	6429.7981	3.37E-24	1107.4	8.1	0
6429.8224	6429.8171	5.71E-24	506.4	19.9	0
6430.1203	6430.1211	7.17E-24	124.1	15.8	0
6430.1632	6430.1655	5.81E-24	881.1	10.1	0
6430.2693	6430.2694	4.30E-24	223.6	9.5	0
6430.3084	6430.3072	4.34E-24	913.2	18.5	0
6430.3730	6430.3693	3.56E-24	265.9	16.0	0
6430.3901	6430.3875	1.00E-23	352.0	3.4	0
6430.6946	6430.6949	7.06E-24	670.7	13.2	0
6430.7944	6430.7951	1.50E-23	852.8	24.6	0
6430.9811	6430.9814	2.94E-24	43.1	22.6	0
6431.2050	6431.2055	3.62E-24	824.4	33.7	0
6431.2484	6431.2484	5.11E-23	949.4	18.4	0
6431.6584	6431.6577	4.69E-24	321.2	30.2	0
6431.7714	6431.7715	3.73E-24	452.8	17.2	0
6431.8844	6431.8857	3.00E-24	818.6	22.6	0
6431.9091	6431.9095	3.26E-23	897.5	16.8	0
6431.9856	6431.9864	3.03E-24	308.2	49.5	0
6432.0010	6431.9997	3.69E-23	560.7	6.7	496.6762
6432.0427	6432.0431	6.63E-24	1140.7	15.9	0
6432.1865	6432.1867	3.57E-23	529.5	4.3	496.0351
6432.2293	6432.2293	1.04E-22	680.2	27.0	0
6432.4798	6432.4781	2.00E-23	867.8	16.9	0
6432.6813	6432.6819	4.34E-23	834.1	27.9	0
6432.8619	6432.8618	3.05E-23	928.3	16.1	0
6433.0220	6433.0215	2.14E-23	170.9	20.0	0
6433.0628	6433.0613	1.47E-23	882.0	29.5	0
6433.4130	6433.4081	2.10E-23	727.4	24.1	0
6433.5136	6433.5155	4.55E-24	674.2	7.7	0
6433.7809	6433.7812	2.91E-23	560.4	27.8	0
6433.8501	6433.8504	3.43E-23	897.9	14.1	0
6433.9710	6433.9727	1.01E-24	228.0	18.3	0
6434.1758	6434.1768	5.52E-23	657.3	13.3	708.2386
6434.3106	6434.31	5.12E-23	571.9	19.3	0
6434.3836	6434.3846	5.57E-24	576.2	18.7	0
6434.4142	6434.4143	3.91E-23	859.5	15.4	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6434.4604	6434.46	4.80E-24	784.3	21.1	0
6434.4995	6434.4994	7.83E-24	86.3	14.8	0
6434.6284	6434.6274	1.11E-23	762.0	44.9	0
6434.6666	6434.6675	2.18E-23	731.6	20.2	0
6434.7865	6434.7865	1.05E-22	422.3	9.0	416.8878
6434.8649	6434.865	3.99E-24	231.1	47.6	0
6434.8836	6434.8847	3.84E-23	536.4	7.4	550.7587
6435.1956	6435.1957	8.07E-24	189.9	24.3	0
6435.2265	6435.2258	7.46E-23	439.3	29.5	0
6435.2550	6435.2561	7.42E-24	409.8	16.1	0
6435.3380	6435.337	3.33E-24	12.1	21.1	0
6435.4431	6435.4438	3.55E-24	872.5	8.2	0
6435.6459	6435.6443	2.43E-24	699.9	15.0	0
6435.7298	6435.7306	1.64E-23	31.8	18.6	0
6435.8697	6435.87	7.38E-24	468.3	12.1	0
6436.0051	6436.0052	4.06E-23	685.0	7.0	0
6436.0409	6436.0413	1.29E-23	420.4	7.2	0
6436.0951	6436.0964	5.34E-24	1255.1	15.0	0
6436.1336	6436.1336	1.03E-22	810.1	8.2	0
6436.6390	6436.6363	1.35E-23	470.7	16.9	0
6436.7205	6436.7206	5.73E-23	1037.7	7.2	0
6436.7741	6436.7737	7.59E-23	770.3	5.7	0
6437.0544	6437.0549	5.67E-23	1040.9	11.9	0
6437.0853	6437.087	7.58E-24	1029.6	19.7	0
6437.1094	6437.109	2.73E-24	0.7	28.3	0
6437.1875	6437.1877	3.03E-23	967.5	11.2	0
6437.3482	6437.3486	4.17E-23	949.6	13.0	0
6437.3616	6437.3654	1.96E-23	346.9	13.0	0
6437.5257	6437.5242	7.21E-23	907.9	7.7	0
6437.5620	6437.5606	5.03E-24	75.9	11.6	0
6437.8660	6437.8638	1.74E-23	703.0	12.7	0
6437.9173	6437.9149	3.27E-23	752.6	11.4	0
6438.0867	6438.082	2.73E-24	52.5	12.6	0
6438.1467	6438.1456	1.14E-23	260.4	11.3	0
6438.1993	6438.1994	4.78E-24	481.9	9.2	0
6438.2251	6438.2264	1.66E-23	605.7	7.3	0
6438.2858	6438.2857	6.98E-24	630.4	7.5	0
6438.4203	6438.4208	1.99E-23	824.7	13.7	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6438.4537	6438.4496	3.00E-24	346.8	14.0	0
6438.5070	6438.5052	3.04E-24	17.5	28.1	0
6438.7052	6438.7047	7.10E-23	494.3	3.2	521.6219
6438.7334	6438.7329	2.15E-23	646.3	7.8	0
6438.8238	6438.8246	1.88E-23	763.6	9.2	0
6438.9004	6438.8982	4.31E-24	42.8	9.3	0
6438.9264	6438.9265	5.32E-23	632.4	9.2	0
6438.9395	6438.9395	8.00E-23	527.2	5.6	522.2229
6439.1665	6439.1669	4.15E-24	9.8	8.4	0
6439.4009	6439.4008	3.48E-23	978.3	13.8	0
6439.4768	6439.4742	7.00E-24	176.8	13.3	0
6439.5656	6439.5664	3.74E-24	667.6	15.0	0
6439.6458	6439.6502	3.47E-24	79.1	15.0	0
6439.6869	6439.6842	3.05E-23	885.0	13.7	0
6439.8024	6439.8014	2.19E-23	464.7	17.7	0
6439.9027	6439.8998	1.22E-23	194.3	12.9	0
6439.9380	6439.938	1.07E-22	398.8	15.6	0
6440.0121	6440.0108	7.20E-24	828.3	13.7	0
6440.1452	6440.1467	2.30E-23	679.2	15.7	0
6440.4652	6440.4635	7.46E-24	198.5	6.1	0
6440.4972	6440.4949	6.08E-24	206.0	5.5	0
6440.6815	6440.6839	5.69E-24	342.8	17.1	0
6440.7650	6440.7651	1.75E-23	247.9	12.3	0
6441.0608	6441.0611	1.05E-23	584.9	13.1	0
6441.0804	6441.0805	2.07E-23	319.8	6.2	293.9683
6441.1582	6441.1576	2.51E-24	1018.1	15.0	0
6441.2401	6441.2396	3.89E-24	818.3	13.8	0
6441.2560	6441.2572	5.68E-24	69.2	7.5	0
6441.4853	6441.4882	2.29E-24	251.6	11.3	0
6441.5901	6441.5927	6.34E-24	133.0	13.1	0
6441.7058	6441.708	6.44E-23	879.2	13.1	0
6441.7262	6441.7256	5.35E-24	961.5	15.0	0
6441.8316	6441.8323	3.63E-23	141.2	12.3	0
6441.8470	6441.8485	5.14E-23	883.7	13.4	0
6441.9148	6441.9163	2.87E-24	630.3	14.9	0
6441.9436	6441.9443	3.33E-24	89.8	12.6	0
6442.2244	6442.2243	6.05E-24	704.3	13.3	0
6442.2604	6442.2609	1.16E-23	253.5	10.0	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6442.3167	6442.3162	5.44E-24	176.9	19.7	0
6442.4216	6442.4215	8.73E-23	658.8	13.9	0
6442.4497	6442.4474	9.11E-24	812.3	15.0	0
6442.4723	6442.4709	8.68E-24	335.1	55.1	0
6442.5694	6442.569	5.32E-24	310.2	9.0	0
6442.7915	6442.7917	1.98E-24	187.1	32.0	0
6442.8528	6442.8531	4.51E-23	538.5	24.3	0
6442.9882	6442.9819	3.40E-24	1063.6	15.5	0
6443.0358	6443.0363	5.90E-23	534.3	21.2	0
6443.0695	6443.069	9.05E-24	227.6	32.7	0
6443.4543	6443.4542	1.42E-22	695.2	12.6	0
6443.5017	6443.5033	9.11E-24	102.2	18.1	0
6443.6139	6443.614	1.73E-23	149.9	4.4	0
6443.8520	6443.8514	8.32E-23	531.2	2.1	0
6443.8917	6443.8909	6.61E-23	796.8	8.3	0
6443.9436	6443.9409	6.22E-24	530.9	48.4	0
6443.9810	6443.9807	9.99E-24	222.1	2.1	0
6444.1144	6444.113	5.36E-24	163.9	19.4	0
6444.2102	6444.2001	4.32E-24	97.8	8.4	0
6444.2412	6444.2402	1.53E-24	411.5	14.4	0
6444.2615	6444.2585	4.38E-24	470.5	5.1	0
6444.5005	6444.4963	6.08E-24	534.4	21.1	0
6444.6290	6444.6265	5.76E-24	244.4	2.5	0
6444.7286	6444.7288	6.66E-24	929.0	19.0	0
6444.8926	6444.8907	5.02E-24	878.5	7.1	0
6444.9245	6444.9203	5.92E-24	62.3	45.3	0
6444.9553	6444.9534	2.15E-24	111.0	73.8	0
6445.0206	6445.0221	2.14E-23	252.4	50.2	0
6445.0686	6445.0702	1.64E-24	393.7	12.5	0
6445.1872	6445.1866	3.62E-24	535.6	22.2	0
6445.2223	6445.2207	1.92E-23	558.9	7.3	0
6445.2612	6445.2633	3.85E-24	624.2	30.3	0
6445.3580	6445.358	3.65E-23	168.1	2.9	0
6445.5083	6445.5044	3.68E-24	699.0	7.4	0
6445.6196	6445.6151	4.62E-24	797.0	15.2	0
6445.9174	6445.9228	3.03E-24	548.2	10.5	0
6446.1907	6446.1921	8.03E-23	831.2	5.0	856.6583
6446.2347	6446.2347	1.25E-22	534.0	14.0	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6446.3596	6446.3592	9.99E-24	111.3	37.5	0
6446.5698	6446.5695	9.78E-24	338.0	169.6	0
6446.6383	6446.6399	4.71E-24	762.9	32.3	0
6446.8279	6446.8257	6.71E-24	98.6	19.1	0
6447.0098	6447.0098	1.90E-22	795.7	59.0	0
6447.0908	6447.0902	1.06E-23	180.5	27.5	0
6447.3444	6447.3447	2.94E-23	811.0	26.5	0
6447.3667	6447.3671	1.23E-23	597.8	77.4	0
6447.5019	6447.4998	1.03E-23	242.1	52.3	0
6447.6532	6447.6532	1.79E-22	801.8	20.0	0
6448.2868	6448.2866	7.22E-24	311.5	18.2	0
6448.3395	6448.3392	3.98E-24	160.0	7.2	0
6448.4233	6448.4241	2.50E-24	171.1	1.0	0
6448.4617	6448.4616	1.19E-23	754.0	7.2	0
6448.5367	6448.5364	3.39E-23	559.0	5.9	540.4217
6448.7600	6448.7593	6.65E-24	836.5	19.9	0
6448.7701	6448.772	1.89E-23	911.1	17.1	0
6448.8183	6448.8189	7.12E-23	664.6	1.2	0
6448.8788	6448.8793	1.07E-23	1040.2	3.9	0
6449.0594	6449.0593	1.46E-23	547.8	8.6	0
6449.1010	6449.1013	4.36E-23	705.5	8.5	0
6449.1392	6449.1389	4.70E-23	405.8	6.1	413.2378
6449.1751	6449.1746	1.48E-24	289.3	14.6	0
6449.3130	6449.3149	4.06E-24	865.1	7.0	0
6449.4836	6449.483	1.32E-23	139.2	1.9	0
6449.5418	6449.5419	1.48E-23	781.1	5.5	0
6449.7184	6449.7191	1.79E-24	276.2	21.9	0
6449.7926	6449.7916	6.46E-24	717.3	12.4	0
6449.8336	6449.8324	4.68E-24	1107.2	5.6	0
6449.8973	6449.899	1.35E-23	429.5	18.3	0
6450.1157	6450.1165	2.91E-23	878.3	4.1	0
6450.2026	6450.2035	6.23E-23	791.2	5.8	0
6450.2577	6450.2577	8.11E-23	638.0	4.5	0
6450.2877	6450.2913	7.53E-24	363.7	10.9	0
6450.4338	6450.4345	2.85E-23	874.9	4.2	0
6450.5675	6450.5677	6.97E-23	710.3	10.4	0
6450.5884	6450.5877	9.77E-24	345.0	4.1	0
6450.6235	6450.6235	1.34E-23	877.8	13.6	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6450.6894	6450.6896	4.61E-23	849.1	33.7	856.1788
6450.8128	6450.8116	1.69E-23	299.3	7.7	0
6450.8556	6450.8545	9.56E-24	1385.6	13.2	0
6450.9010	6450.8993	4.06E-23	724.4	17.0	0
6450.9225	6450.9215	3.79E-23	715.0	9.4	0
6450.9956	6450.9957	8.60E-23	648.2	27.9	0
6451.1872	6451.1864	6.80E-23	771.8	27.4	0
6451.3134	6451.311	7.71E-24	1056.5	7.5	0
6451.4330	6451.4329	3.19E-23	302.2	79.0	0
6451.4418	6451.4431	6.17E-24	153.7	10.8	0
6451.4935	6451.4919	1.38E-23	218.6	8.8	0
6451.5950	6451.5935	5.03E-23	419.4	6.7	412.6244
6451.6465	6451.6483	5.71E-24	125.5	3.4	0
6451.7253	6451.7239	1.54E-23	852.6	4.6	0
6451.8282	6451.8277	2.55E-23	372.9	14.9	0
6451.8669	6451.8653	6.68E-24	512.3	9.9	0
6451.9745	6451.9741	3.01E-23	333.5	1.7	0
6452.0708	6452.0711	1.37E-22	703.1	12.9	0
6452.2094	6452.2102	1.05E-23	834.1	14.0	0
6452.3673	6452.368	4.28E-24	164.2	2.6	0
6452.5197	6452.5203	3.45E-24	336.9	4.2	0
6452.6358	6452.6354	3.67E-24	178.0	7.1	0
6452.7097	6452.7093	4.32E-24	495.3	11.0	0
6452.8136	6452.8136	1.37E-22	705.7	5.3	0
6452.8627	6452.8606	6.24E-24	97.9	4.4	0
6452.8915	6452.8925	2.28E-24	510.5	14.1	0
6453.0813	6453.0819	1.71E-23	906.5	12.8	0
6453.2468	6453.2487	3.29E-24	348.2	5.9	0
6453.3684	6453.3724	7.78E-24	511.1	16.1	0
6453.4459	6453.4475	3.39E-24	285.5	9.3	0
6453.5073	6453.5079	5.89E-24	401.6	2.9	0
6453.5350	6453.535	1.35E-22	775.5	10.6	0
6453.5853	6453.5854	1.41E-24	56.6	5.4	0
6453.7648	6453.7647	9.56E-24	777.7	25.5	0
6453.9089	6453.9092	9.73E-24	792.0	22.8	0
6453.9317	6453.9324	2.18E-24	452.3	16.3	0
6454.0303	6454.0274	1.60E-23	972.6	5.6	0
6454.0347	6454.039	5.14E-24	374.5	16.4	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6454.9097	6454.9097	1.59E-22	294.9	4.6	297.6418
6455.1302	6455.1308	9.20E-24	173.9	13.4	0
6455.2349	6455.2356	1.38E-23	193.8	4.7	0
6455.5232	6455.5238	7.21E-24	471.6	3.9	0
6455.6699	6455.6718	2.81E-23	578.5	27.0	0
6455.6885	6455.6886	4.72E-23	707.2	10.6	708.2386
6455.7192	6455.7212	1.24E-23	758.3	12.2	0
6455.7380	6455.7388	9.03E-24	239.6	83.3	0
6455.7734	6455.7739	1.88E-23	777.7	34.3	0
6455.8320	6455.833	2.73E-23	277.0	5.8	0
6455.8539	6455.8588	1.26E-23	222.6	4.4	195.6113
6455.8770	6455.8781	6.31E-24	301.3	1.7	0
6455.9517	6455.9515	8.61E-24	468.7	10.0	0
6456.0736	6456.0738	1.23E-22	562.7	3.2	551.3204
6456.1591	6456.1595	9.88E-23	557.5	6.0	550.7587
6456.2482	6456.2484	4.84E-23	784.3	5.4	0
6456.3533	6456.355	3.78E-23	962.2	9.7	0
6456.4023	6456.4031	1.47E-22	537.8	6.0	522.2229
6456.5024	6456.502	6.33E-24	896.1	15.3	0
6456.7297	6456.7298	3.83E-23	195.2	8.1	0
6456.7668	6456.7668	1.81E-22	509.7	6.8	0
6456.9667	6456.9658	4.14E-23	623.3	8.9	0
6456.9908	6456.9909	1.30E-22	575.7	5.7	0
6457.2044	6457.2037	1.49E-22	581.2	9.6	0
6457.3609	6457.3629	7.66E-24	452.6	6.0	0
6457.4314	6457.4308	5.77E-23	688.6	4.9	0
6457.4699	6457.4663	2.30E-23	402.8	12.6	0
6457.4864	6457.4828	9.31E-24	545.6	6.5	0
6457.5356	6457.5344	1.15E-23	6.5	7.2	0
6457.5683	6457.5693	7.31E-24	637.5	7.1	0
6457.7959	6457.7961	5.20E-24	905.2	79.5	0
6457.8184	6457.8197	7.02E-24	312.5	6.6	0
6457.9502	6457.9505	7.58E-24	390.7	9.1	0
6458.1196	6458.1195	1.83E-23	177.4	2.9	194.9063
6458.1862	6458.1851	1.22E-23	402.3	5.6	0
6458.2602	6458.2606	4.56E-23	642.4	5.5	0
6458.2985	6458.2956	3.27E-24	115.4	10.3	0
6458.5358	6458.5358	3.00E-24	128.9	12.4	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6458.6099	6458.6096	2.27E-23	469.0	5.7	0
6458.7338	6458.7328	3.09E-23	981.6	11.1	0
6458.7692	6458.7679	2.16E-23	829.7	12.8	0
6458.7941	6458.7945	1.53E-22	554.1	5.2	0
6458.9332	6458.9333	1.72E-23	490.2	6.0	0
6459.1534	6459.1519	6.33E-24	730.9	15.4	0
6459.2652	6459.268	4.46E-24	524.4	5.9	0
6459.2907	6459.2907	6.34E-23	424.6	5.1	0
6459.4637	6459.4636	1.64E-22	640.0	8.6	0
6459.5006	6459.5038	7.04E-24	196.6	5.6	0
6459.6632	6459.6643	7.19E-23	620.7	3.9	0
6459.7207	6459.7211	6.24E-24	682.0	17.1	0
6459.7884	6459.7879	1.33E-22	663.2	6.8	0
6459.9158	6459.9167	6.77E-24	474.5	4.1	0
6459.9673	6459.9675	6.98E-23	687.7	5.8	697.9171
6460.1202	6460.1199	3.01E-23	574.5	7.3	581.4709
6460.1658	6460.1668	1.15E-22	629.9	3.2	0
6460.2411	6460.2409	1.09E-23	555.5	13.9	0
6460.2775	6460.2789	1.35E-23	639.8	10.8	0
6460.4196	6460.4197	1.31E-22	373.8	15.5	383.9775
6460.5478	6460.5478	1.36E-22	382.2	10.7	383.3184
6460.6098	6460.6096	7.70E-23	379.1	5.3	0
6460.6636	6460.6644	4.44E-23	129.1	3.7	0
6460.8855	6460.8835	3.26E-24	80.1	9.4	0
6460.9174	6460.9165	2.82E-24	291.4	24.0	0
6460.9566	6460.9576	1.30E-23	525.2	246.1	0
6460.9690	6460.968	7.75E-24	521.4	24.6	0
6461.2311	6461.2293	3.22E-24	171.0	14.2	0
6461.4242	6461.4229	2.62E-24	506.9	12.1	0
6461.5023	6461.5028	1.54E-23	293.8	6.2	0
6461.5257	6461.5276	3.99E-24	960.0	17.4	0
6461.6195	6461.6236	6.58E-24	158.1	19.9	0
6461.7144	6461.7144	4.23E-24	557.1	54.1	0
6461.7757	6461.7749	4.54E-24	507.7	15.7	0
6461.8562	6461.8561	1.22E-23	142.4	10.3	0
6461.9402	6461.9405	2.39E-23	398.3	6.8	0
6462.2400	6462.2406	1.68E-23	845.2	4.3	0
6462.3498	6462.3505	1.56E-23	279.6	8.8	0



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6462.4400	6462.4367	2.21E-24	494.6	13.7	0
6462.5653	6462.5646	6.01E-24	462.9	5.2	0
6462.6092	6462.6104	1.08E-23	267.3	4.7	0
6462.7272	6462.7271	3.66E-23	315.5	6.6	0
6462.7459	6462.7483	7.82E-24	670.8	32.4	0
6462.9223	6462.9247	3.42E-24	575.7	13.6	0
6463.0326	6463.0326	1.39E-22	455.1	16.1	401.6479
6463.0758	6463.0749	8.73E-24	615.0	20.0	0
6463.6709	6463.6717	2.79E-23	383.3	4.6	0
6463.7529	6463.7529	9.70E-23	600.8	4.4	0
6463.8795	6463.8776	3.71E-24	762.8	6.7	0
6463.9016	6463.9	3.16E-24	281.3	14.7	0
6464.0136	6464.0135	2.46E-23	803.4	6.5	0
6464.2204	6464.2201	1.35E-23	903.7	7.5	0
6464.3942	6464.3942	3.09E-22	589.8	4.1	554.3932
6464.5434	6464.5435	1.54E-23	1185.3	13.5	0
6464.8489	6464.849	7.69E-24	267.0	6.9	0
6464.9380	6464.9352	9.01E-24	688.7	44.7	0
6464.9969	6464.9949	8.18E-24	855.6	72.5	0
6465.0422	6465.0422	9.80E-23	508.0	14.2	0
6465.0845	6465.0837	3.56E-23	577.4	13.7	0
6465.1803	6465.1824	1.36E-23	501.9	16.0	0
6465.2952	6465.2943	5.52E-23	680.9	17.2	0
6465.3433	6465.3371	8.18E-24	457.5	20.9	0
6465.4249	6465.4222	5.39E-24	180.6	11.7	0
6465.6240	6465.6239	5.59E-24	185.9	26.6	0
6465.6541	6465.6555	1.22E-23	848.9	13.6	0
6465.7816	6465.7814	1.46E-22	590.5	5.0	0
6465.8159	6465.8159	5.82E-22	604.8	7.8	0
6465.8708	6465.8715	2.86E-23	558.1	9.0	0
6465.9334	6465.9335	5.95E-23	275.9	8.7	0
6466.2453	6466.245	1.85E-23	310.3	11.6	0
6466.2736	6466.2728	1.98E-23	1164.4	11.9	0
6466.3238	6466.3254	5.91E-24	652.8	33.8	0
6466.4227	6466.4218	1.75E-23	835.3	8.0	0
6466.4419	6466.442	6.66E-24	685.5	22.2	0
6466.4953	6466.4953	1.78E-22	668.4	8.6	0
6466.5565	6466.5568	6.33E-24	323.5	10.4	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6466.6223	6466.6223	2.81E-22	581.1	9.3	0
6466.6353	6466.6355	4.85E-23	566.5	19.8	0
6466.8759	6466.8749	2.81E-24	366.1	11.8	0
6467.0630	6467.0626	1.36E-22	482.4	9.5	0
6467.2110	6467.2096	1.02E-23	405.8	7.8	0
6467.3321	6467.3347	4.24E-23	352.2	9.5	0
6467.3462	6467.347	4.18E-23	1080.7	17.2	0
6467.3700	6467.3679	3.36E-23	777.7	28.1	0
6467.3960	6467.3961	1.27E-23	998.9	49.7	0
6467.6955	6467.6973	2.16E-23	728.2	18.5	0
6467.7322	6467.732	1.65E-22	682.4	40.7	0
6467.9471	6467.9466	5.54E-24	277.7	6.9	0
6468.0099	6468.0079	1.18E-23	543.1	14.9	0
6468.1656	6468.1662	1.72E-23	468.9	12.6	0
6468.3076	6468.3076	3.89E-23	278.2	8.5	293.9683
6468.3792	6468.3796	5.02E-23	738.0	6.5	0
6468.4144	6468.4145	8.63E-24	309.4	7.5	0
6468.4400	6468.4416	6.87E-24	575.0	15.9	0
6468.4900	6468.4914	6.42E-24	425.2	2.3	0
6468.5244	6468.5249	2.88E-23	674.8	6.4	0
6468.6016	6468.6016	8.22E-23	396.5	6.9	402.2778
6468.7923	6468.7921	7.82E-23	384.5	4.3	401.6479
6469.1105	6469.1099	2.96E-23	602.0	6.0	0
6469.3553	6469.355	6.38E-23	1024.5	5.2	0
6469.4416	6469.4405	1.34E-23	400.6	3.6	0
6469.5035	6469.5032	1.51E-22	582.0	9.4	0
6469.6121	6469.6123	1.35E-23	248.0	7.5	0
6469.7551	6469.7556	2.27E-22	543.4	4.1	0
6469.7986	6469.7978	2.27E-22	538.9	5.0	0
6470.1020	6470.1007	8.46E-24	807.4	14.2	0
6470.2079	6470.2083	1.04E-22	384.2	7.1	0
6470.3231	6470.3231	1.42E-22	213.5	7.0	199.2939
6470.4087	6470.4092	7.96E-24	291.5	8.1	0
6470.5042	6470.5035	1.35E-22	586.3	11.5	0
6470.6872	6470.6868	4.74E-23	736.7	7.6	0
6470.7981	6470.7962	9.03E-24	693.8	3.1	0
6471.1850	6471.1844	7.18E-24	152.7	3.8	0
6471.3761	6471.3799	3.25E-24	486.2	4.8	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6471.5771	6471.5786	2.66E-24	510.1	11.9	0
6471.6603	6471.6597	5.64E-24	560.6	2.8	0
6471.7550	6471.755	2.41E-23	406.5	6.6	0
6472.3801	6472.3801	1.30E-22	375.4	4.4	0
6472.9571	6472.9532	1.45E-23	555.8	6.8	0
6473.1438	6473.1407	2.33E-23	808.4	4.7	0
6473.2999	6473.2988	3.13E-24	598.1	8.1	0
6473.3941	6473.3911	1.63E-23	413.7	4.8	0
6473.4218	6473.4231	3.72E-23	517.5	72.4	0
6473.5067	6473.5086	3.99E-24	530.6	12.4	0
6473.6088	6473.6076	1.32E-22	762.5	2.5	759.0024
6473.6793	6473.6784	6.93E-24	631.8	12.9	0
6473.7878	6473.7879	1.45E-23	511.7	19.1	0
6473.9097	6473.9089	1.72E-23	636.4	3.9	0
6473.9973	6473.9967	6.80E-24	477.3	2.5	0
6474.0822	6474.0824	1.24E-23	226.8	6.7	0
6474.1720	6474.1729	1.77E-23	776.9	6.9	0
6474.2201	6474.22	3.42E-24	907.7	8.1	0
6474.3290	6474.329	2.38E-22	386.3	2.2	383.3184
6474.3801	6474.3806	8.29E-24	397.6	36.7	0
6474.4112	6474.4128	9.14E-24	1124.0	8.7	0
6474.5260	6474.5261	1.10E-22	551.6	9.4	550.7587
6474.5702	6474.57	2.45E-23	420.0	2.7	0
6474.6374	6474.6372	7.03E-24	117.5	8.5	0
6474.7299	6474.7286	4.03E-24	141.2	14.0	0
6474.8077	6474.8073	3.40E-23	472.9	6.9	0
6474.8609	6474.8593	5.07E-24	782.1	6.5	0
6475.1965	6475.1965	1.62E-22	463.0	10.2	463.7071
6475.3478	6475.3468	6.89E-23	775.2	4.8	0
6475.4833	6475.4834	8.83E-23	589.8	3.2	0
6475.5529	6475.5503	9.45E-24	755.4	8.3	0
6475.7170	6475.718	8.89E-24	70.4	1.8	0
6475.7596	6475.7614	2.01E-23	1172.9	14.3	0
6475.7952	6475.7957	7.36E-23	524.9	2.1	551.3204
6475.8712	6475.8712	1.72E-22	465.9	2.0	463.0131
6476.0089	6476.0089	7.26E-23	657.6	2.4	0
6476.0263	6476.0262	2.65E-23	397.5	2.3	0
6476.1182	6476.1182	4.83E-23	775.2	2.3	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6476.2323	6476.232	5.22E-24	745.3	10.6	0
6476.4072	6476.4047	1.30E-23	94.8	9.0	116.2783
6476.4586	6476.4586	1.85E-22	419.7	1.5	0
6476.5232	6476.5219	1.57E-23	586.2	3.8	0
6476.5911	6476.5897	1.43E-22	410.2	6.5	412.6244
6476.6576	6476.6566	5.08E-23	542.0	5.0	539.8449
6476.7504	6476.7495	9.23E-24	376.0	6.6	0
6476.9198	6476.9194	1.93E-23	645.9	3.4	654.4503
6477.1449	6477.1456	2.52E-23	664.7	3.4	0
6477.3269	6477.3321	1.04E-23	15.7	49.5	0
6477.3462	6477.344	3.75E-23	583.2	8.5	0
6477.4119	6477.4117	2.86E-22	396.9	1.1	422.4583
6477.4309	6477.4309	3.28E-22	451.9	3.7	0
6477.5693	6477.5734	4.72E-24	-20.6	83.5	0
6477.6260	6477.6261	4.34E-24	188.2	6.8	0
6477.6839	6477.683	6.28E-23	288.9	41.0	283.6167
6477.7138	6477.7135	3.27E-22	478.1	0.9	0
6477.9111	6477.9111	3.52E-22	440.3	7.9	423.223
6478.1505	6478.1513	2.34E-24	314.7	4.2	0
6478.2746	6478.2769	5.02E-23	606.3	4.7	0
6478.5467	6478.5498	2.69E-23	312.5	8.5	0
6478.6253	6478.6263	1.87E-23	971.4	8.4	0
6478.6572	6478.6572	5.94E-23	278.5	155.0	0
6478.7158	6478.7193	1.02E-23	670.6	4.0	0
6478.8186	6478.8181	1.19E-23	424.2	7.5	0
6478.9807	6478.9815	9.83E-24	112.3	2.7	0
6479.1025	6479.1034	2.15E-23	333.6	7.5	0
6479.1327	6479.1302	2.67E-23	429.2	17.9	0
6479.1473	6479.145	2.91E-23	900.8	56.4	0
6479.2554	6479.2561	1.48E-22	532.1	2.4	0
6479.2867	6479.2882	1.23E-23	509.2	33.7	0
6479.3575	6479.3575	2.96E-23	980.4	13.5	0
6479.4315	6479.433	1.29E-23	15.4	15.3	0
6479.5465	6479.546	8.01E-24	-2.0	4.6	0
6479.6399	6479.6399	1.30E-22	291.2	10.3	0
6479.7606	6479.7604	1.48E-23	393.3	23.6	0
6479.7965	6479.7947	3.35E-24	236.5	44.4	0
6479.9583	6479.9572	8.58E-24	416.6	2.1	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6480.1626	6480.1625	5.66E-23	618.7	13.6	0
6480.2171	6480.2163	1.01E-23	467.6	5.6	0
6480.2520	6480.2514	8.78E-23	264.6	3.7	264.5166
6480.3354	6480.3339	3.76E-23	423.7	9.3	0
6480.3907	6480.3897	8.73E-23	269.4	6.3	265.2266
6480.4515	6480.4451	4.61E-24	734.9	2.9	0
6480.6014	6480.6008	2.00E-24	214.1	9.9	0
6480.6851	6480.6834	3.86E-23	716.5	1.8	0
6480.8775	6480.8774	3.88E-24	375.2	5.6	0
6480.9411	6480.9385	1.29E-23	381.3	8.1	0
6481.0301	6481.0285	5.71E-23	904.3	4.4	0
6481.3963	6481.3952	3.45E-23	593.2	24.0	0
6481.4124	6481.409	1.20E-23	445.7	4.2	0
6481.4877	6481.4847	2.61E-23	608.6	5.7	0
6481.5657	6481.5637	1.15E-23	297.0	9.0	0
6481.7553	6481.7523	3.06E-23	613.4	18.1	0
6481.8029	6481.8029	1.73E-22	378.5	24.3	358.2845
6481.9415	6481.9401	7.22E-24	540.5	14.6	0
6482.0347	6482.0341	7.62E-24	507.5	6.6	0
6482.1216	6482.1207	5.62E-23	651.2	3.6	0
6482.3700	6482.3704	1.33E-23	362.4	4.1	0
6482.3971	6482.3972	2.59E-23	469.7	2.9	0
6482.4366	6482.4367	5.94E-23	662.9	4.8	0
6482.5071	6482.5081	6.10E-23	863.9	5.4	0
6482.6994	6482.6994	6.07E-22	421.6	7.8	416.8878
6482.7195	6482.7191	1.13E-23	259.4	5.0	0
6482.8859	6482.8848	5.24E-24	1097.9	32.5	0
6483.1100	6483.1092	3.20E-23	924.8	6.7	0
6483.1440	6483.1439	1.88E-22	351.3	3.7	0
6483.3160	6483.3155	6.35E-23	421.1	14.9	0
6483.4874	6483.4873	1.45E-23	738.7	12.1	0
6483.6868	6483.6868	6.72E-23	186.1	2.2	195.6113
6483.7055	6483.7065	3.36E-23	340.4	2.7	0
6483.7241	6483.7254	5.48E-24	249.3	12.4	0
6483.7488	6483.7495	3.29E-24	475.3	17.2	0
6483.9723	6483.9726	9.90E-24	486.6	14.0	0
6484.1065	6484.1053	4.96E-24	415.7	19.2	0
6484.3356	6484.3365	8.59E-24	768.4	9.4	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6484.4286	6484.4291	7.90E-23	534.3	7.6	539.8449
6484.6239	6484.6241	1.01E-23	727.2	25.5	0
6484.7143	6484.7145	2.03E-23	540.8	13.3	0
6484.7387	6484.7387	7.15E-23	194.8	35.5	194.9063
6484.7583	6484.7587	9.47E-24	493.3	9.4	0
6484.9750	6484.9752	1.40E-23	215.2	5.8	0
6485.1420	6485.1421	1.59E-22	621.3	3.9	621.6929
6485.4636	6485.4645	1.58E-23	763.3	35.6	0
6485.5505	6485.5493	2.77E-23	207.4	28.3	0
6485.5662	6485.5652	2.59E-23	471.9	10.9	0
6485.6644	6485.6669	6.27E-24	259.0	19.3	0
6485.7637	6485.7632	4.90E-23	297.6	4.5	0
6485.9832	6485.9832	2.49E-22	411.7	11.5	0
6486.6773	6486.6773	0.00E+00	602.3	5.5	621.0656
6486.7158	6486.7168	5.19E-24	117.1	4.3	0
6486.9534	6486.953	8.07E-24	423.9	21.5	0
6487.0192	6487.0189	1.18E-23	298.3	4.0	0
6487.0597	6487.0592	5.11E-23	530.0	38.1	0
6487.2676	6487.2675	1.20E-23	487.0	6.9	0
6487.3240	6487.3235	1.34E-24	106.5	7.5	0
6487.3919	6487.3914	1.06E-23	538.7	2.0	0
6487.4621	6487.4621	1.18E-22	400.1	3.7	0
6487.5323	6487.5326	2.86E-23	557.4	3.5	0
6487.8450	6487.8449	4.35E-22	509.0	2.4	522.2229
6488.0356	6488.0293	4.21E-23	695.6	7.0	0
6488.0470	6488.0471	3.96E-22	357.2	5.8	0
6488.1849	6488.1799	2.75E-23	912.7	20.3	0
6488.1995	6488.199	3.64E-22	352.1	3.6	0
6488.2268	6488.2246	7.92E-24	763.3	27.3	0
6488.3646	6488.3655	6.53E-24	433.9	11.5	0
6488.4533	6488.4533	2.72E-22	423.6	5.5	0
6488.8189	6488.8184	1.02E-22	287.5	5.7	283.6167
6488.8494	6488.8502	1.73E-23	613.3	73.1	0
6488.8772	6488.8765	1.01E-22	280.5	8.9	282.9372
6489.0634	6489.0636	6.48E-24	510.1	1.8	0
6489.2684	6489.2695	2.56E-23	809.4	13.2	0
6489.4757	6489.4759	3.90E-22	279.8	7.6	265.2266
6489.6089	6489.6087	2.73E-23	690.6	33.4	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6489.6348	6489.639	5.43E-24	122.1	10.5	0
6489.7188	6489.7197	1.65E-22	135.4	12.0	0
6489.7786	6489.7787	4.23E-22	276.3	4.5	264.5166
6489.8440	6489.8429	1.21E-23	574.1	6.8	0
6490.1893	6490.1889	4.57E-22	546.9	14.9	521.6219
6490.2793	6490.2771	2.15E-24	671.7	18.7	0
6490.3043	6490.3029	6.18E-24	409.6	21.0	0
6490.4223	6490.4224	2.90E-23	826.4	20.1	0
6490.4902	6490.4899	5.37E-23	764.9	12.8	0
6490.5696	6490.5704	5.21E-24	177.0	13.7	0
6490.5931	6490.5933	2.48E-23	672.7	8.3	0
6490.9651	6490.9658	1.16E-23	489.9	7.3	0
6491.2687	6491.268	1.98E-23	635.8	10.0	0
6491.3080	6491.3122	5.32E-24	469.9	21.3	0
6491.3489	6491.3518	2.50E-24	315.6	9.8	0
6491.4110	6491.4113	2.86E-22	320.5	3.1	325.1273
6491.4530	6491.4525	2.42E-22	327.4	3.3	324.369
6491.5537	6491.5528	2.13E-23	284.8	4.1	0
6491.6293	6491.6289	3.25E-23	862.9	17.1	0
6491.6488	6491.6484	3.65E-22	587.3	7.3	0
6491.9269	6491.927	1.57E-23	876.0	37.8	0
6491.9924	6491.9931	5.96E-24	524.5	18.0	0
6492.0750	6492.0764	9.37E-24	707.8	9.1	0
6492.1638	6492.1646	5.79E-24	896.7	21.8	0
6492.3176	6492.3193	1.32E-24	252.0	4.5	0
6492.4348	6492.435	4.27E-24	839.3	20.5	0
6492.5414	6492.5421	4.32E-24	563.9	5.0	0
6492.8604	6492.8609	1.54E-23	387.2	12.9	0
6492.9383	6492.938	2.40E-24	615.4	5.2	0
6493.0700	6493.0723	4.76E-24	945.5	19.7	0
6493.1475	6493.1475	4.14E-22	680.5	15.2	0
6493.2022	6493.2051	1.37E-23	536.5	77.2	0
6493.2625	6493.262	7.41E-24	760.7	34.1	0
6493.3787	6493.3791	6.72E-24	389.7	20.7	0
6493.6274	6493.626	5.88E-24	615.2	12.8	0
6494.0084	6494.0109	5.46E-24	384.1	15.7	0
6494.0494	6494.0491	1.75E-22	411.2	1.3	412.6244
6494.1477	6494.1472	1.85E-22	414.9	1.2	413.2378

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6494.2848	6494.2846	2.55E-23	426.3	3.3	0
6494.3602	6494.3566	2.69E-23	458.3	5.2	0
6494.3772	6494.3767	7.67E-23	494.6	3.6	0
6494.5342	6494.5342	3.00E-23	454.1	3.9	0
6494.5612	6494.558	6.58E-24	602.7	15.5	0
6494.7885	6494.7892	1.15E-22	710.1	5.3	0
6494.9458	6494.9473	3.60E-24	83.7	13.7	0
6495.0590	6495.0589	1.72E-23	223.7	2.9	0
6495.0919	6495.0921	2.29E-23	169.9	4.9	0
6495.3807	6495.3809	3.41E-23	280.2	6.7	0
6495.4723	6495.4769	6.95E-23	490.4	9.7	0
6495.4988	6495.4999	2.36E-23	612.9	25.0	0
6495.5438	6495.5433	5.65E-23	292.7	7.5	0
6495.5957	6495.595	1.68E-23	185.5	4.7	0
6495.6460	6495.651	9.01E-24	316.1	48.2	0
6495.6746	6495.6747	1.71E-23	233.9	12.2	0
6495.9512	6495.9482	2.38E-23	915.0	26.9	0
6495.9815	6495.9807	1.21E-22	695.8	28.0	0
6495.9982	6495.9974	7.22E-23	336.9	13.1	0
6496.0428	6496.0429	1.55E-22	477.7	19.0	0
6496.1157	6496.1158	1.21E-22	178.5	5.2	184.553
6496.2430	6496.2427	1.32E-23	677.1	13.4	0
6496.3466	6496.3467	6.72E-23	410.3	2.9	0
6496.5640	6496.5633	1.40E-23	544.1	2.9	0
6496.6136	6496.6151	4.02E-23	702.6	17.1	0
6496.6341	6496.6339	1.81E-22	274.4	1.8	0
6496.7581	6496.758	1.35E-22	179.7	1.1	183.8291
6496.9087	6496.9085	1.77E-22	297.4	3.5	294.63
6497.0471	6497.0465	5.01E-23	498.2	8.2	496.0351
6497.0633	6497.0608	1.67E-23	603.8	6.6	0
6497.2865	6497.287	5.30E-22	279.2	3.0	0
6497.3609	6497.3616	1.66E-22	319.2	3.2	293.9683
6497.4360	6497.436	7.55E-22	284.6	1.7	0
6497.5240	6497.5242	1.56E-22	539.3	2.4	0
6497.6800	6497.6788	2.21E-23	258.5	11.7	0
6497.7501	6497.7503	1.84E-22	502.1	3.6	496.6762
6498.1920	6498.1922	1.15E-22	472.6	3.4	0
6498.3209	6498.3209	1.98E-22	407.4	2.9	402.2778



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6498.3343	6498.3346	1.15E-22	481.5	20.8	0
6498.5271	6498.527	1.38E-23	29.4	5.1	0
6498.6450	6498.644	5.67E-24	790.6	13.6	0
6498.8928	6498.891	5.30E-24	600.6	10.8	0
6498.9099	6498.9073	4.53E-24	686.2	10.8	0
6499.0427	6499.0422	1.43E-23	219.1	12.5	0
6499.0958	6499.0953	9.36E-24	746.4	11.1	0
6499.1893	6499.1894	2.80E-22	235.3	3.7	239.4083
6499.2995	6499.2992	1.98E-22	495.5	6.0	0
6499.3287	6499.3296	1.01E-23	212.1	3.1	0
6499.5023	6499.502	2.74E-22	236.5	3.2	238.6527
6499.6515	6499.6507	2.08E-23	386.5	5.1	0
6499.9066	6499.9027	1.28E-23	347.7	10.5	0
6500.4554	6500.4544	6.86E-24	526.0	6.1	0
6500.6551	6500.6562	2.55E-24	642.7	35.2	0
6500.8361	6500.8361	5.56E-24	756.2	11.6	0
6500.9399	6500.9402	1.61E-23	284.5	35.6	0
6501.1891	6501.1894	1.48E-23	36.0	6.3	0
6501.3972	6501.3981	1.89E-23	826.5	5.1	0
6501.4838	6501.4812	8.50E-25	113.0	35.0	0
6501.5989	6501.5988	2.72E-23	581.8	4.8	0
6501.6361	6501.6355	7.25E-24	216.1	4.1	0
6501.6801	6501.6812	5.25E-24	741.8	11.7	0
6501.7273	6501.7286	2.12E-23	411.9	10.6	0
6501.9762	6501.9768	3.62E-24	208.8	7.0	0
6502.0751	6502.0752	4.71E-23	130.4	4.1	0
6502.1299	6502.1301	6.69E-24	-117.8	43.2	0
6502.1759	6502.1765	5.63E-24	570.5	10.0	0
6502.3488	6502.3469	1.21E-23	388.0	3.8	0
6502.3898	6502.3903	2.45E-24	163.4	8.2	0
6502.5007	6502.5009	1.98E-22	384.0	3.9	0
6502.5755	6502.5758	8.28E-23	112.8	2.7	115.5366
6502.6552	6502.6558	4.47E-23	668.1	18.0	0
6502.6883	6502.6882	1.85E-22	281.1	9.7	0
6502.7381	6502.7388	1.53E-23	203.6	2.6	0
6502.7722	6502.7724	4.18E-23	131.4	2.8	116.2783
6502.8578	6502.8582	2.27E-22	400.6	3.1	401.6479
6503.0995	6503.0991	1.26E-23	114.3	2.7	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6503.4137	6503.4145	8.53E-24	753.9	11.6	0
6503.4257	6503.4266	9.43E-24	387.5	28.8	0
6503.6469	6503.6482	9.83E-24	219.6	25.3	0
6503.6748	6503.6752	2.42E-22	282.9	2.8	0
6503.7320	6503.732	7.59E-22	301.0	3.6	297.6418
6503.9938	6503.9935	3.14E-22	459.6	1.4	463.7071
6504.2140	6504.2131	3.51E-23	771.0	7.6	0
6504.2860	6504.2834	2.09E-23	181.1	11.9	0
6504.3963	6504.3947	2.91E-23	413.9	2.7	0
6504.4327	6504.4325	6.73E-24	209.3	3.6	0
6504.5035	6504.5026	2.74E-23	374.5	4.2	0
6504.6142	6504.6143	1.87E-23	177.0	2.6	0
6504.6319	6504.6315	1.06E-22	374.5	3.3	0
6504.7020	6504.7017	2.02E-22	295.9	3.5	0
6504.9379	6504.9367	7.25E-24	269.6	8.4	0
6505.2676	6505.2673	3.21E-22	461.0	1.4	0
6505.5205	6505.5202	6.01E-24	519.7	10.9	0
6505.5962	6505.5953	7.78E-24	677.3	18.9	0
6505.6484	6505.6477	1.47E-23	466.6	3.5	0
6505.7367	6505.7367	6.88E-24	336.9	5.3	0
6505.8997	6505.9007	3.09E-23	404.3	4.5	0
6505.9279	6505.9272	9.91E-24	114.0	5.0	0
6506.0753	6506.0748	8.35E-24	615.4	18.2	0
6506.1257	6506.1249	1.49E-23	499.5	14.3	0
6506.1857	6506.1843	8.73E-24	618.2	16.6	0
6506.2543	6506.2538	3.95E-23	513.6	5.3	522.2229
6506.4258	6506.428	4.90E-24	806.6	8.7	0
6506.4506	6506.4511	3.08E-23	656.5	4.9	0
6506.6564	6506.6602	6.03E-24	118.0	21.0	0
6506.8050	6506.8059	2.71E-23	652.8	2.8	0
6506.9540	6506.9561	4.84E-22	175.9	1.0	166.0879
6507.0679	6507.0737	1.25E-23	335.0	18.4	0
6507.1570	6507.1562	2.17E-22	214.3	1.2	0
6507.1784	6507.1755	4.81E-23	518.7	3.3	521.6219
6507.2203	6507.2188	4.23E-23	710.5	2.8	0
6507.3770	6507.377	5.47E-22	196.1	2.0	0
6507.3850	6507.385	5.44E-22	199.5	4.0	0
6507.4222	6507.422	2.48E-23	307.3	3.5	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6507.5724	6507.57	1.27E-23	595.0	6.7	0
6507.7356	6507.7321	1.16E-23	541.5	11.0	0
6507.8958	6507.8922	2.92E-23	232.8	11.9	0
6507.9613	6507.9549	2.79E-23	261.4	3.0	0
6508.0133	6508.0098	5.15E-23	301.6	1.7	0
6508.3033	6508.301	4.28E-22	202.2	1.7	0
6508.3454	6508.3437	3.52E-23	671.0	15.4	0
6508.5770	6508.5768	5.67E-23	177.2	2.0	183.8291
6508.6558	6508.6557	7.34E-22	380.2	1.1	383.3184
6508.7144	6508.7138	5.83E-23	192.3	1.7	184.553
6508.7463	6508.7478	1.23E-23	664.0	32.9	0
6508.8294	6508.8288	5.20E-23	161.4	2.2	165.3311
6508.8499	6508.8498	8.83E-23	63.9	1.7	60.413
6508.8854	6508.8864	9.31E-24	-56.3	15.5	0
6509.0174	6509.0177	3.73E-22	600.0	1.1	0
6509.2815	6509.2834	1.10E-23	871.3	7.1	0
6509.4309	6509.4317	5.24E-23	165.7	3.9	166.0879
6509.5136	6509.5145	1.03E-23	477.3	2.7	0
6509.5509	6509.5514	7.84E-24	93.2	7.5	0
6510.0059	6510.0064	2.42E-22	209.4	2.1	0
6510.0248	6510.0249	3.87E-22	594.9	2.0	0
6510.0955	6510.0954	7.07E-22	418.3	1.2	0
6510.2248	6510.2246	5.96E-22	381.9	2.1	0
6510.5531	6510.5523	9.37E-24	464.9	2.4	0
6510.9928	6510.9926	7.15E-22	420.8	3.3	422.4583
6511.5073	6511.5091	4.41E-23	526.1	4.4	0
6511.8350	6511.835	6.33E-24	202.2	3.3	0
6512.0493	6512.0509	4.57E-24	953.3	11.2	0
6512.0759	6512.0761	1.15E-23	974.2	2.6	0
6512.1069	6512.1105	1.17E-23	153.3	2.6	0
6512.2575	6512.2581	2.37E-23	374.9	2.6	0
6512.3177	6512.3185	9.10E-24	1190.0	5.5	0
6512.4278	6512.4285	1.43E-23	729.5	4.7	0
6512.5252	6512.5252	6.99E-23	268.2	1.6	264.5166
6512.8331	6512.8398	5.51E-24	409.8	22.2	0
6512.8612	6512.8587	2.33E-24	212.4	9.2	0
6512.8967	6512.8978	7.90E-24	1220.7	4.1	0
6512.9289	6512.9289	6.91E-24	158.1	1.9	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6512.9710	6512.9707	5.42E-24	804.0	3.7	0
6513.0156	6513.0147	6.71E-24	597.2	4.5	0
6513.2094	6513.209	2.56E-23	666.8	2.2	0
6513.3297	6513.3299	1.41E-23	702.0	3.7	0
6513.4160	6513.4169	6.79E-24	1147.6	2.7	0
6513.5404	6513.5413	4.43E-24	176.7	5.3	0
6513.6553	6513.6557	3.25E-22	293.1	2.7	294.63
6513.7722	6513.7725	3.35E-22	297.4	2.9	293.9683
6513.8359	6513.8352	1.58E-23	1259.5	10.4	0
6513.9322	6513.9324	7.05E-23	103.8	1.1	0
6514.0286	6514.0272	6.71E-24	690.2	2.9	0
6514.0730	6514.073	3.45E-22	372.4	1.5	0
6514.1283	6514.1288	1.23E-23	684.9	8.4	0
6514.2053	6514.2036	2.27E-23	497.4	5.2	0
6514.2474	6514.2469	3.39E-22	370.5	1.4	0
6514.4144	6514.4141	1.63E-22	102.3	2.0	105.1838
6514.5247	6514.5245	6.20E-23	725.6	1.8	0
6514.5781	6514.5853	7.43E-24	827.3	6.0	0
6514.6031	6514.6029	5.99E-24	233.8	4.3	0
6514.6293	6514.6286	9.87E-23	101.1	1.0	104.4221
6514.7432	6514.7434	1.11E-23	1231.1	23.7	0
6514.8643	6514.8645	2.36E-23	521.6	15.2	0
6514.9673	6514.9624	8.44E-24	1128.7	17.0	0
6514.9817	6514.9817	6.13E-23	291.9	4.4	0
6515.7034	6515.7036	2.62E-23	368.5	3.3	0
6515.7470	6515.7472	4.29E-23	270.4	14.0	0
6515.8679	6515.8681	2.96E-22	357.1	1.7	0
6515.9619	6515.9619	2.45E-23	555.3	2.9	0
6515.9798	6515.9781	3.57E-24	1256.9	27.2	0
6516.0545	6516.0547	6.32E-24	624.6	11.8	0
6516.4913	6516.4922	1.27E-22	278.9	33.0	0
6516.5070	6516.5066	4.32E-22	175.3	6.6	0
6516.5623	6516.5608	8.76E-24	305.0	12.6	0
6516.7416	6516.7374	8.19E-24	217.3	11.3	0
6516.8536	6516.8517	7.33E-24	645.1	10.6	0
6516.9384	6516.9365	9.79E-23	273.6	17.5	0
6516.9782	6516.9777	6.00E-22	200.4	31.8	0
6517.0209	6517.0195	2.08E-22	218.8	18.4	194.9063

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6517.3458	6517.3427	1.02E-23	708.0	17.9	0
6517.3762	6517.3735	1.36E-23	721.8	7.5	0
6517.4317	6517.4277	7.24E-24	293.9	15.2	0
6517.5825	6517.5799	1.03E-23	94.2	1.6	0
6517.6182	6517.6175	6.17E-24	402.3	5.0	0
6517.7335	6517.7324	4.55E-22	355.7	1.6	0
6517.8165	6517.8179	5.94E-24	365.5	3.0	0
6517.9145	6517.9146	1.77E-23	872.0	4.0	0
6518.0416	6518.0403	7.36E-24	606.2	6.0	0
6518.1332	6518.1329	7.71E-24	163.5	7.5	0
6518.2520	6518.2511	1.40E-23	416.4	2.6	0
6518.3358	6518.3365	4.65E-24	497.0	15.8	0
6518.3933	6518.3935	1.78E-23	244.7	6.2	0
6518.5992	6518.5956	5.34E-24	592.1	4.4	0
6518.7066	6518.7069	6.66E-24	706.2	4.1	0
6518.7390	6518.7401	7.77E-24	907.3	5.5	0
6518.7806	6518.7814	5.30E-24	979.3	7.0	0
6518.9215	6518.921	8.12E-24	181.0	4.8	0
6519.0477	6519.0473	9.54E-23	533.8	2.1	0
6519.0821	6519.0813	4.48E-24	104.5	14.3	0
6519.1344	6519.1346	2.27E-24	1093.0	22.1	0
6519.1695	6519.1692	3.09E-23	692.4	5.7	0
6519.1924	6519.1926	2.30E-23	369.6	3.7	0
6519.2201	6519.2201	1.48E-23	379.4	6.2	0
6519.3020	6519.3019	1.97E-24	245.5	8.4	0
6519.3709	6519.3708	6.07E-23	196.7	8.5	0
6519.5135	6519.5126	2.14E-23	176.9	3.6	0
6519.6538	6519.6535	3.28E-24	1045.2	14.9	0
6519.7036	6519.7022	2.55E-23	592.4	32.7	0
6519.7628	6519.7619	1.87E-23	1239.1	5.1	0
6519.9330	6519.9267	8.52E-24	83.8	7.7	0
6519.9702	6519.9702	1.06E-23	502.4	12.4	0
6520.0465	6520.0504	1.46E-23	471.4	13.8	0
6520.4706	6520.4714	8.38E-24	476.3	19.3	0
6520.5013	6520.4975	5.45E-24	272.9	5.5	0
6520.5198	6520.5207	1.82E-23	362.1	11.8	0
6520.6351	6520.6351	1.47E-23	1261.1	5.6	0
6520.6578	6520.6583	1.64E-23	1081.1	5.1	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6520.6832	6520.6839	6.55E-24	166.5	7.6	0
6520.8228	6520.8217	1.02E-23	153.7	6.2	0
6521.0068	6521.007	3.29E-23	327.9	2.7	0
6521.0311	6521.0319	3.32E-23	386.4	1.9	0
6521.0590	6521.0593	8.04E-23	56.1	2.2	55.9387
6521.2175	6521.2167	1.51E-23	304.5	20.5	0
6521.2603	6521.2609	5.99E-23	353.7	1.3	0
6521.3523	6521.3531	1.64E-23	317.2	3.5	0
6521.4935	6521.495	1.33E-23	859.9	7.8	0
6521.5185	6521.5183	7.74E-23	70.0	1.7	56.7092
6521.7140	6521.7152	7.45E-24	546.6	10.1	0
6521.7953	6521.795	3.47E-23	386.8	1.7	0
6521.8776	6521.8777	5.97E-23	135.0	1.4	0
6521.9711	6521.9711	4.56E-22	283.3	1.5	282.9372
6522.0229	6522.0234	7.36E-24	230.9	4.8	0
6522.1891	6522.1886	1.47E-23	144.1	23.4	0
6522.2340	6522.2337	3.91E-22	287.4	3.0	283.6167
6522.3612	6522.3605	2.01E-23	190.4	2.1	0
6522.4907	6522.4904	1.01E-22	694.7	22.2	0
6522.7737	6522.7741	5.52E-24	581.5	10.2	0
6522.9600	6522.9597	7.11E-24	485.7	13.8	0
6523.0317	6523.0294	7.48E-23	179.1	17.4	0
6523.2082	6523.2084	6.18E-22	318.5	1.2	325.1273
6523.3096	6523.3096	4.21E-22	197.1	1.4	0
6523.4760	6523.4762	4.94E-23	103.5	1.4	0
6523.5550	6523.5548	1.72E-23	930.5	7.7	0
6523.6932	6523.693	1.15E-22	529.7	2.9	0
6523.9487	6523.9486	6.22E-22	327.6	1.4	324.369
6523.9682	6523.9682	1.40E-22	266.2	3.3	0
6524.0213	6524.0212	2.65E-22	489.5	1.0	0
6524.2341	6524.2338	1.35E-23	917.6	9.5	0
6524.3059	6524.3059	1.49E-23	543.4	17.5	0
6524.3619	6524.3613	1.03E-22	573.9	1.9	0
6524.3951	6524.3991	2.56E-23	416.0	16.6	0
6524.5004	6524.4994	1.44E-23	815.3	13.0	0
6524.5338	6524.5323	6.03E-24	182.1	5.8	0
6524.7693	6524.7698	2.81E-23	1114.0	63.5	0
6524.8351	6524.8384	1.25E-23	773.7	84.4	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6524.8919	6524.8909	4.49E-23	375.4	3.4	0
6524.9481	6524.9373	1.39E-22	-144.6	3.2	0
6524.9557	6524.9553	7.00E-22	114.8	1.8	0
6525.0515	6525.0526	1.90E-23	728.9	31.5	0
6525.1213	6525.1223	7.72E-22	195.7	3.3	199.2939
6525.2291	6525.2285	1.13E-23	609.5	10.6	0
6525.3189	6525.3196	4.68E-23	788.3	7.5	0
6525.3576	6525.3534	6.58E-23	235.7	4.6	0
6525.3758	6525.3729	6.58E-22	88.4	8.3	0
6525.3963	6525.3942	4.48E-23	518.6	23.3	0
6525.8113	6525.8125	6.49E-23	387.5	11.9	383.3184
6525.8990	6525.8989	7.08E-24	596.1	34.7	0
6525.9450	6525.9442	1.02E-23	618.8	8.5	0
6526.0623	6526.0626	8.96E-23	1010.8	7.0	0
6526.1225	6526.124	5.61E-24	1046.8	10.2	0
6526.2649	6526.2643	4.16E-24	608.6	10.6	0
6526.3966	6526.3972	2.42E-23	978.4	11.1	0
6526.4668	6526.466	4.76E-24	1089.8	10.8	0
6526.4990	6526.4987	1.15E-23	84.6	14.4	0
6526.6686	6526.6663	6.08E-24	957.6	30.0	0
6526.6947	6526.6959	4.04E-24	301.6	15.7	0
6526.7413	6526.7416	2.33E-23	994.1	21.9	0
6526.7968	6526.7968	7.71E-23	1031.8	4.7	0
6526.8778	6526.8776	4.64E-24	241.7	36.1	0
6526.9340	6526.9343	1.08E-23	361.9	12.0	0
6526.9622	6526.9633	3.69E-24	499.2	14.8	0
6527.0030	6527.0029	1.29E-23	157.5	5.9	0
6527.1425	6527.1423	2.05E-23	557.8	6.0	0
6527.3215	6527.3226	9.20E-24	608.3	7.1	0
6527.6273	6527.6259	5.70E-24	643.5	18.2	0
6527.7666	6527.7663	5.10E-24	568.6	14.4	0
6527.8491	6527.8523	7.62E-24	814.5	27.3	0
6527.8723	6527.8721	2.80E-23	213.7	2.9	0
6527.9264	6527.9243	1.07E-23	401.6	9.4	0
6528.0246	6528.0249	1.07E-23	176.6	58.5	0
6528.0584	6528.0588	1.21E-23	540.0	18.8	0
6528.4898	6528.4877	7.06E-24	249.4	6.4	0
6528.9014	6528.8998	1.40E-21	284.7	2.0	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6529.1910	6529.1901	1.45E-21	265.0	4.4	264.5166
6529.2120	6529.2131	4.76E-23	255.7	6.7	0
6530.3531	6530.3522	3.51E-24	610.1	19.2	0
6530.6008	6530.6009	1.06E-23	222.2	1.9	0
6530.7039	6530.705	1.31E-23	923.4	4.0	0
6530.7219	6530.7221	1.83E-23	185.9	3.6	0
6530.7586	6530.7581	1.68E-23	1049.5	3.4	0
6530.8625	6530.8616	4.85E-24	74.8	2.2	0
6530.8969	6530.8989	1.48E-23	527.0	9.0	0
6531.0526	6531.0542	9.36E-24	701.7	18.4	0
6531.0986	6531.0989	2.23E-23	881.8	12.6	0
6531.1494	6531.1489	5.94E-24	857.8	30.1	0
6531.1702	6531.1703	3.50E-23	589.6	2.3	0
6531.3386	6531.3384	9.07E-24	562.3	9.2	0
6531.4148	6531.4154	3.26E-24	219.3	7.8	0
6531.5078	6531.5073	1.08E-23	698.4	3.9	0
6531.8002	6531.8005	4.18E-23	922.3	2.0	0
6531.9195	6531.9195	3.54E-23	549.8	1.8	0
6531.9648	6531.9649	2.41E-23	659.8	3.1	0
6532.0758	6532.075	2.08E-23	846.8	5.2	0
6532.2058	6532.2059	1.30E-23	358.7	5.6	0
6532.2520	6532.2493	8.70E-24	657.3	6.8	0
6532.6099	6532.6122	5.03E-23	566.9	5.4	0
6532.6399	6532.6404	3.49E-23	920.5	13.7	0
6532.7382	6532.7386	1.63E-22	41.8	2.1	44.796
6532.8363	6532.8354	1.80E-23	204.8	1.9	0
6532.9305	6532.9307	6.87E-24	370.5	25.7	0
6532.9655	6532.9661	1.70E-23	1023.2	9.4	0
6533.0748	6533.0724	9.49E-24	208.1	10.3	0
6533.3445	6533.3446	1.81E-22	42.5	1.5	45.5873
6533.3860	6533.3861	4.46E-22	195.9	2.1	195.6113
6533.4319	6533.4331	1.62E-23	9.2	3.7	0
6533.4616	6533.4615	4.45E-22	194.1	0.9	194.9063
6533.5942	6533.5968	5.83E-24	621.5	11.6	0
6533.7198	6533.7201	5.83E-24	720.9	11.6	0
6533.8136	6533.8138	3.80E-23	398.0	2.0	0
6533.8728	6533.8728	3.49E-23	855.7	3.5	0
6534.0399	6534.039	2.03E-23	516.4	6.6	0



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6534.1220	6534.122	2.98E-23	709.8	12.0	0
6534.1761	6534.1767	2.99E-23	442.4	8.2	0
6534.2052	6534.2059	1.45E-23	550.4	12.0	0
6534.2554	6534.256	3.22E-23	690.2	12.0	0
6534.5524	6534.5523	4.42E-22	238.7	2.0	0
6534.6187	6534.6179	7.88E-23	521.2	4.2	0
6534.6627	6534.6623	1.50E-22	582.0	2.7	0
6534.9370	6534.9376	3.30E-23	823.5	22.2	0
6535.1877	6535.1878	5.15E-23	122.4	1.3	116.2783
6535.3153	6535.3152	5.79E-23	52.5	1.5	0
6535.3900	6535.3893	1.76E-23	607.7	6.3	0
6535.4022	6535.4033	1.94E-23	190.1	6.1	0
6535.5887	6535.5912	5.57E-24	378.0	6.6	0
6535.6058	6535.6102	7.53E-24	839.2	16.3	0
6535.7820	6535.7815	7.27E-24	457.9	17.0	0
6535.9743	6535.9739	6.31E-23	63.1	3.5	0
6535.9966	6535.9977	4.03E-23	213.4	5.8	0
6536.0254	6536.0269	3.59E-23	70.6	3.9	0
6536.1049	6536.105	1.32E-23	235.1	12.9	0
6536.1467	6536.1465	1.13E-23	208.3	10.3	0
6536.1960	6536.1967	6.80E-23	163.1	2.4	0
6536.3786	6536.3791	8.45E-23	289.5	2.2	0
6536.5930	6536.593	8.48E-22	235.6	1.5	238.6527
6536.7111	6536.7143	4.08E-23	678.7	1.5	0
6536.7510	6536.7508	1.37E-22	142.4	3.0	0
6536.8764	6536.8758	1.05E-22	112.4	2.3	116.2783
6537.0220	6537.0219	2.36E-23	514.5	1.7	0
6537.1038	6537.1024	2.72E-23	422.1	2.3	0
6537.1164	6537.116	1.83E-23	188.4	15.6	0
6537.1448	6537.1461	7.82E-24	350.2	9.6	0
6537.4892	6537.4895	8.40E-23	117.8	1.4	115.5366
6537.6806	6537.6806	4.23E-22	238.9	2.0	239.4083
6537.8038	6537.8037	1.00E-23	539.3	8.4	0
6537.9957	6537.9956	3.47E-23	276.1	1.2	0
6538.0619	6538.0619	3.40E-23	587.6	2.6	0
6538.4107	6538.411	8.73E-23	873.0	2.2	0
6538.5054	6538.5055	2.04E-23	575.4	2.5	0
6538.5410	6538.541	1.69E-22	430.5	1.9	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6538.5837	6538.5836	4.18E-23	300.9	1.1	0
6538.7108	6538.71	9.90E-24	374.2	7.8	0
6538.8145	6538.8138	2.09E-23	531.6	1.5	0
6538.8416	6538.8366	1.15E-23	116.4	4.7	0
6538.8569	6538.8566	8.03E-23	852.6	1.4	0
6539.2173	6539.2171	5.28E-24	485.6	3.1	0
6539.3994	6539.405	1.25E-23	401.7	41.5	0
6539.5276	6539.5277	8.85E-23	364.9	4.3	0
6539.5862	6539.5863	1.10E-23	115.3	5.9	0
6539.9756	6539.9733	1.12E-23	162.2	4.0	0
6540.1156	6540.1157	1.79E-23	1336.3	13.6	0
6540.1424	6540.1431	8.30E-23	209.1	1.5	194.9063
6540.2488	6540.2486	5.68E-23	8.9	1.6	16.173
6540.4253	6540.4251	2.96E-23	260.8	2.3	0
6540.4868	6540.4871	1.74E-23	130.2	1.7	0
6540.5732	6540.5737	1.70E-22	378.3	1.8	0
6540.8868	6540.887	7.63E-23	775.0	5.2	0
6540.9672	6540.967	5.79E-23	12.1	1.7	16.9634
6541.0062	6541.0064	2.25E-22	426.8	2.2	0
6541.0642	6541.0642	2.75E-22	375.4	4.0	0
6541.3865	6541.3873	6.77E-22	183.0	0.9	183.8291
6541.4036	6541.4045	6.52E-22	185.8	1.3	184.553
6541.4357	6541.4363	5.27E-23	402.2	3.7	0
6541.5164	6541.5167	1.81E-23	921.0	7.5	0
6541.6773	6541.6787	1.82E-23	494.4	2.6	0
6541.7356	6541.736	3.19E-23	810.2	8.7	0
6542.0392	6542.0382	3.86E-23	1013.3	12.2	0
6542.1014	6542.1054	2.94E-23	573.8	7.6	0
6542.1211	6542.1239	6.55E-23	578.7	3.7	0
6542.2928	6542.2935	3.90E-23	497.9	2.1	0
6542.3698	6542.3737	5.53E-23	383.5	5.7	0
6542.4236	6542.4244	1.03E-21	207.9	1.0	206.0875
6542.5771	6542.5807	3.34E-23	1100.1	11.6	0
6542.6237	6542.6237	1.04E-21	205.3	1.6	205.2692
6542.8480	6542.8489	2.25E-23	416.5	3.8	412.6244
6543.0161	6543.0164	6.22E-23	709.8	4.7	0
6543.1319	6543.1322	1.77E-23	379.8	4.3	0
6543.2090	6543.2085	3.56E-23	530.9	6.2	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6543.5247	6543.5242	9.04E-24	526.4	12.8	0
6543.8415	6543.8413	2.23E-22	687.2	21.5	0
6543.8718	6543.8737	7.22E-23	749.0	5.0	0
6543.9075	6543.9077	8.88E-23	527.1	3.5	533.6693
6544.3215	6544.3215	8.91E-22	116.1	4.1	119.2379
6544.5455	6544.5463	3.56E-23	261.7	6.4	265.2266
6544.7564	6544.7563	1.28E-22	795.7	9.3	0
6544.9170	6544.9175	4.59E-23	286.5	1.3	264.5166
6544.9573	6544.9571	2.25E-23	111.6	3.1	0
6545.0650	6545.0647	4.92E-24	-67.6	8.3	0
6545.6808	6545.6808	2.28E-22	114.6	2.4	0
6546.1002	6546.1001	5.61E-24	334.1	2.9	0
6546.1340	6546.1308	8.09E-24	163.3	25.0	0
6546.5648	6546.563	1.18E-23	1052.3	125.5	0
6546.6676	6546.666	1.36E-23	938.7	19.2	0
6546.9676	6546.9674	6.66E-24	12.9	349.3	0
6547.3085	6547.3114	3.97E-24	731.2	7.4	0
6547.7944	6547.7945	4.98E-23	705.8	4.5	0
6547.9465	6547.9469	2.92E-22	19.3	4.5	0
6547.9724	6547.9725	4.34E-23	1158.5	14.0	0
6548.3017	6548.3015	3.57E-23	660.3	4.7	0
6548.3650	6548.3655	2.87E-23	763.3	7.0	0
6548.6110	6548.611	0.00E+00	165.9	4.0	165.3311
6548.6427	6548.6453	3.26E-23	664.9	4.1	0
6548.7988	6548.7983	0.00E+00	158.8	2.9	166.0879
6548.9248	6548.9247	3.63E-22	69.8	1.3	60.413
6549.1420	6549.1417	5.06E-24	127.5	64.9	0
6549.1946	6549.1944	3.09E-23	478.4	107.3	0
6549.2867	6549.287	7.59E-23	512.3	3.2	0
6549.3043	6549.307	1.50E-23	691.0	7.1	0
6549.4869	6549.4908	7.48E-24	994.3	16.5	0
6549.6327	6549.6317	6.38E-23	743.2	7.4	0
6549.8799	6549.8772	1.98E-23	384.2	3.6	0
6549.9748	6549.9742	8.94E-24	339.6	6.2	0
6550.0357	6550.0372	1.69E-23	489.5	3.5	0
6550.1265	6550.1264	6.13E-23	943.6	4.9	0
6550.2572	6550.2566	6.54E-24	886.9	147.8	0
6550.4052	6550.4054	4.70E-23	57.3	2.3	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6550.4802	6550.4791	2.37E-24	199.2	3.9	0
6550.6186	6550.6192	2.56E-23	182.1	30.6	0
6550.8156	6550.8155	1.53E-22	714.0	3.1	0
6550.9624	6550.9626	3.14E-23	968.8	2.8	0
6550.9972	6550.9976	2.67E-23	189.9	1.6	0
6551.0605	6551.0606	2.12E-23	612.3	3.8	0
6551.1838	6551.1835	1.46E-22	719.8	6.9	0
6551.3143	6551.315	1.53E-23	436.4	4.2	0
6551.3359	6551.3356	1.46E-22	748.4	6.8	0
6551.4642	6551.4642	4.48E-22	128.1	16.8	0
6551.5943	6551.5952	1.12E-23	229.4	3.2	0
6551.7181	6551.7179	3.31E-22	201.5	1.4	0
6551.8115	6551.8107	1.62E-22	231.3	3.4	0
6552.1167	6552.1159	1.78E-23	393.0	26.7	0
6552.2183	6552.2178	3.49E-23	417.8	1.7	0
6552.3104	6552.3095	6.36E-23	530.1	1.3	0
6552.3558	6552.3544	2.15E-23	930.7	7.6	0
6552.3942	6552.3933	2.36E-22	582.0	1.3	581.4709
6552.4703	6552.4692	1.54E-23	419.6	4.8	0
6552.6169	6552.6169	2.74E-22	412.5	1.2	416.8878
6552.6920	6552.6912	6.55E-23	624.7	2.3	621.0656
6552.8045	6552.8037	3.17E-23	283.6	2.5	283.6167
6552.8648	6552.8642	2.34E-22	582.2	2.2	580.7798
6552.9555	6552.9558	2.82E-22	417.9	1.1	0
6553.0304	6553.03	2.55E-22	418.0	2.5	423.223
6553.1386	6553.1383	5.18E-22	112.8	1.2	115.5366
6553.1550	6553.1554	5.27E-22	116.6	3.2	116.2783
6553.2829	6553.2828	2.98E-23	356.1	18.0	0
6553.3827	6553.3826	6.96E-23	783.9	18.9	0
6553.4523	6553.4524	3.28E-23	626.8	20.4	0
6553.5048	6553.5046	2.57E-23	518.8	82.5	0
6553.5303	6553.5303	2.76E-23	664.1	48.0	0
6553.6624	6553.6625	3.92E-23	280.2	1.7	282.9372
6553.7086	6553.7081	1.10E-23	390.1	5.5	0
6553.8059	6553.8059	1.75E-23	107.5	7.3	0
6553.8299	6553.8308	4.69E-24	425.3	6.2	0
6553.8959	6553.896	6.30E-24	638.9	68.3	0
6553.9756	6553.9789	1.69E-23	464.0	101.7	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6554.0532	6554.0535	5.91E-24	715.7	5.8	0
6554.1378	6554.136	4.73E-24	429.8	3.3	0
6554.1996	6554.1998	1.38E-24	5.7	16.0	0
6554.3929	6554.3967	1.30E-23	604.0	116.1	0
6554.6469	6554.6469	3.66E-23	164.2	1.9	0
6554.6666	6554.6677	1.32E-23	671.0	5.8	0
6554.7511	6554.7527	4.92E-24	261.9	1.9	0
6554.7690	6554.767	1.27E-23	381.2	3.0	0
6554.8072	6554.8072	4.33E-24	143.6	79.5	0
6554.8429	6554.8423	1.02E-23	241.3	8.2	0
6554.9714	6554.9711	2.43E-23	186.0	2.1	0
6555.0020	6555.0019	1.95E-23	233.7	2.5	0
6555.2496	6555.2485	5.50E-24	70.5	2.6	0
6555.5688	6555.568	5.55E-23	362.4	29.2	0
6555.6103	6555.6105	2.81E-23	102.3	3.7	0
6555.6850	6555.685	1.26E-21	141.3	1.2	139.3581
6555.7511	6555.7511	1.27E-22	633.2	29.5	0
6555.9971	6555.9964	1.17E-21	143.2	11.5	140.1633
6556.0610	6556.0607	3.30E-23	439.0	5.3	0
6556.2031	6556.2022	1.63E-23	547.8	1.9	0
6556.2748	6556.2745	5.16E-23	414.9	2.2	0
6556.3235	6556.3231	2.77E-23	166.9	3.1	0
6556.4124	6556.412	3.28E-23	412.5	1.6	0
6556.5446	6556.5444	2.02E-22	304.9	1.9	0
6556.5665	6556.5696	1.24E-23	211.5	4.8	0
6556.8053	6556.8064	1.94E-23	669.5	13.1	0
6557.0334	6557.037	1.10E-23	362.5	7.2	0
6557.0492	6557.0471	6.74E-23	326.5	3.3	0
6557.0903	6557.0897	7.98E-23	652.9	2.2	656.4358
6557.2757	6557.2756	2.54E-23	261.8	2.2	0
6557.3164	6557.3158	2.79E-23	303.0	4.9	0
6557.3666	6557.3676	7.47E-24	450.3	12.8	0
6557.5516	6557.5516	4.15E-22	289.4	2.0	0
6557.5795	6557.5793	1.89E-22	422.2	7.8	0
6557.6714	6557.6719	3.51E-23	519.6	5.0	0
6557.7014	6557.7013	1.18E-23	676.7	7.8	0
6557.7302	6557.7296	3.27E-23	570.7	6.0	0
6558.1029	6558.1024	2.70E-23	1286.0	20.9	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6558.3195	6558.3195	4.53E-22	295.4	3.8	0
6558.3769	6558.3775	6.14E-24	223.4	73.6	0
6558.7159	6558.7158	1.22E-22	298.7	7.4	0
6558.9222	6558.9218	8.14E-23	330.0	8.4	0
6559.0487	6559.0414	3.81E-23	45.4	357.6	0
6559.0847	6559.0857	1.04E-23	135.3	12.8	0
6559.4560	6559.4562	8.47E-24	399.0	45.3	0
6559.5919	6559.5902	2.79E-23	1025.1	7.4	0
6559.7553	6559.7546	2.74E-22	619.0	2.3	0
6559.7876	6559.787	6.19E-23	804.5	4.7	0
6560.0882	6560.0875	3.17E-24	278.0	4.5	0
6560.2820	6560.2817	3.04E-23	406.7	7.8	0
6560.3939	6560.3939	1.63E-23	380.4	10.8	0
6560.5702	6560.5752	1.18E-23	81.9	17.5	0
6560.5943	6560.594	1.29E-23	471.6	4.7	0
6560.6155	6560.6146	1.28E-22	626.1	5.1	0
6560.6702	6560.6697	2.28E-22	583.4	3.0	580.7798
6560.7538	6560.7539	6.04E-23	617.8	109.1	0
6560.8254	6560.8257	8.44E-23	16.7	3.4	16.173
6560.9410	6560.9411	8.46E-22	107.9	4.3	104.4221
6560.9926	6560.9919	8.51E-22	107.5	5.6	0
6561.2037	6561.2045	0.00E+00	-0.4	16.0	0
6561.2646	6561.2644	7.42E-23	16.0	4.0	16.9634
6561.2870	6561.2861	8.87E-23	461.1	3.8	0
6561.3118	6561.317	6.50E-24	421.2	15.4	0
6561.3670	6561.3665	7.00E-24	330.1	9.8	0
6561.4127	6561.4136	4.31E-24	465.0	21.3	0
6561.4496	6561.449	6.82E-23	572.0	6.7	0
6561.4754	6561.4748	3.99E-23	64.7	6.3	0
6561.5692	6561.564	0.00E+00	269.6	16.0	0
6561.5831	6561.5831	1.19E-22	482.5	5.3	0
6561.6419	6561.6383	1.67E-22	269.1	21.6	0
6561.8011	6561.8011	1.99E-22	464.0	5.7	463.0131
6561.8386	6561.8397	2.76E-23	286.4	5.9	294.63
6561.9303	6561.9304	2.21E-22	340.2	4.2	324.369
6561.9579	6561.9572	9.07E-23	483.6	30.0	496.6762
6562.0147	6562.0144	2.11E-22	349.9	4.9	325.1273
6562.0395	6562.0408	6.57E-23	362.3	91.3	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6562.1737	6562.1738	1.31E-22	83.7	4.8	55.9387
6562.2270	6562.2265	3.37E-23	775.6	5.3	0
6562.2909	6562.2915	1.16E-23	344.6	5.5	0
6562.3418	6562.3414	5.45E-23	64.4	4.8	56.7092
6562.4328	6562.4324	9.67E-24	461.8	6.2	0
6562.5750	6562.5744	4.34E-23	717.0	5.2	0
6562.6079	6562.608	3.46E-23	867.1	5.1	0
6562.6552	6562.6549	9.16E-23	498.8	4.2	0
6562.6879	6562.6862	5.92E-24	325.3	21.8	0
6562.8110	6562.8089	3.34E-23	1031.2	3.9	0
6562.8379	6562.8361	3.77E-23	706.8	4.6	0
6562.9027	6562.906	2.05E-23	596.0	6.0	0
6563.0196	6563.0193	1.00E-22	110.3	1.7	116.2783
6563.1650	6563.1651	4.86E-22	593.8	1.9	592.587
6563.3351	6563.3355	3.27E-23	82.5	2.9	0
6563.4460	6563.4458	1.89E-23	733.1	6.4	0
6563.4877	6563.4876	4.74E-22	586.6	2.5	593.5035
6563.5823	6563.5833	1.94E-23	806.1	4.1	0
6563.6589	6563.6592	4.49E-24	26.7	13.8	0
6563.7908	6563.7916	8.52E-24	421.7	7.1	0
6563.9896	6563.9896	3.35E-23	365.6	3.9	0
6564.0895	6564.0889	5.63E-23	535.1	4.4	0
6564.1083	6564.1084	1.12E-22	117.6	5.2	115.5366
6564.2133	6564.2135	2.10E-23	421.5	4.3	0
6564.2731	6564.2704	2.38E-23	1185.8	14.4	0
6564.3087	6564.3103	2.24E-23	119.1	5.5	0
6564.3695	6564.3705	1.85E-23	569.3	4.4	0
6564.8620	6564.862	6.57E-22	60.7	10.2	0
6564.9524	6564.9522	1.03E-22	196.0	12.5	0
6565.1329	6565.1334	3.14E-23	189.2	25.0	0
6565.4643	6565.4619	5.25E-23	971.1	363.6	0
6565.4996	6565.5003	1.09E-22	591.3	7.0	0
6565.5506	6565.5509	6.61E-24	529.7	4.0	0
6565.6427	6565.6425	7.55E-24	392.6	21.5	0
6565.6990	6565.6986	7.27E-23	540.6	6.9	0
6565.8154	6565.8153	3.88E-23	419.2	3.9	413.2378
6566.3656	6566.3665	3.83E-24	377.5	4.2	0
6566.3936	6566.3938	5.29E-23	186.0	3.5	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6566.6881	6566.6872	1.22E-23	865.1	13.4	0
6566.8011	6566.8	6.79E-24	206.6	10.4	0
6566.8327	6566.8331	2.93E-23	534.5	7.6	0
6566.8601	6566.8604	5.47E-24	257.8	8.1	0
6566.8811	6566.8819	3.09E-24	233.5	16.1	0
6566.9223	6566.9228	6.68E-23	522.9	12.8	0
6566.9425	6566.9442	8.12E-24	384.5	5.6	0
6566.9651	6566.9638	1.12E-23	210.9	44.0	0
6567.1996	6567.1993	2.11E-23	190.2	5.2	0
6567.2706	6567.2712	4.60E-23	434.3	28.8	0
6567.3281	6567.3287	1.17E-23	231.2	8.6	0
6567.3693	6567.3696	7.12E-23	193.7	3.0	0
6567.7450	6567.747	1.20E-22	391.4	11.7	0
6567.7922	6567.799	7.10E-23	1375.5	24.6	0
6567.8226	6567.8237	6.16E-23	1249.3	23.4	0
6568.2654	6568.2661	1.94E-22	584.6	5.3	0
6568.3070	6568.307	0.00E+00	83.1	3.6	85.8616
6568.3649	6568.3729	8.30E-23	522.8	5.2	0
6568.4104	6568.4086	0.00E+00	86.0	4.6	86.6578
6568.4708	6568.47	2.54E-22	24.8	16.8	0
6568.9180	6568.9165	2.70E-23	502.0	18.0	0
6568.9788	6568.9807	3.65E-23	751.0	5.8	0
6569.1562	6569.156	1.27E-22	380.7	3.8	0
6569.2054	6569.2059	2.49E-23	369.8	2.3	0
6569.5409	6569.5407	3.24E-23	660.9	2.1	0
6569.7554	6569.7565	1.18E-23	797.9	10.3	0
6569.8952	6569.8957	1.59E-23	359.9	4.7	0
6569.9365	6569.9371	2.03E-22	493.5	2.3	496.6762
6570.0088	6570.0088	1.29E-23	271.9	6.2	0
6570.0483	6570.0468	6.59E-24	339.2	4.4	0
6570.2492	6570.2493	9.68E-23	318.1	1.3	293.9683
6570.3578	6570.3583	8.44E-23	664.2	20.7	654.4503
6570.3911	6570.392	2.97E-22	359.5	3.4	358.2845
6570.4392	6570.4395	7.43E-23	297.3	14.1	0
6570.5444	6570.544	4.50E-23	744.5	6.1	0
6570.6371	6570.6372	3.00E-22	356.7	2.0	357.5842
6570.7323	6570.7316	1.07E-22	378.1	3.5	0
6570.7593	6570.7593	4.57E-22	308.3	1.6	0



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6570.8487	6570.8484	2.78E-22	236.6	0.9	239.4083
6570.8853	6570.8856	3.05E-23	274.3	2.1	0
6570.9293	6570.9306	2.59E-23	329.6	9.1	0
6571.5215	6571.5207	1.11E-23	260.6	5.9	0
6571.7197	6571.7197	2.55E-22	451.5	1.7	0
6571.7810	6571.7804	2.73E-23	306.6	4.0	0
6571.8639	6571.8641	5.13E-23	411.5	3.7	413.2378
6571.9708	6571.9711	1.81E-22	459.6	5.7	463.0131
6572.0048	6572.0051	9.49E-23	851.3	4.0	0
6572.2551	6572.2568	3.86E-23	623.8	4.8	0
6572.3956	6572.3957	4.27E-22	298.4	4.5	0
6572.4107	6572.4096	3.92E-23	610.1	34.0	0
6572.4482	6572.4482	2.36E-23	188.5	6.4	0
6572.5190	6572.5196	9.03E-23	729.0	9.6	0
6572.6447	6572.6446	9.66E-23	196.1	2.7	0
6572.8536	6572.8538	5.19E-22	68.3	34.2	55.9387
6572.9520	6572.952	5.28E-22	65.0	19.6	0
6573.0190	6573.0186	5.63E-23	412.2	1.7	412.6244
6573.0393	6573.0388	6.90E-23	402.1	1.0	401.6479
6573.4374	6573.4366	2.51E-23	421.5	4.2	0
6573.5301	6573.5301	1.34E-23	385.2	9.7	0
6573.5579	6573.5591	5.24E-23	93.8	3.9	0
6573.6986	6573.7021	0.00E+00	-54.5	12.5	0
6573.7308	6573.7319	1.95E-22	698.3	2.8	0
6573.9189	6573.9236	1.25E-23	592.8	2.9	0
6573.9849	6573.9817	2.30E-23	501.1	8.3	0
6574.0076	6574.0071	2.26E-22	224.9	6.9	0
6574.0871	6574.0886	2.09E-22	677.7	3.1	0
6574.2540	6574.2547	5.86E-23	46.2	1.9	0
6574.4609	6574.4604	1.82E-23	82.3	3.1	0
6574.4801	6574.4796	4.33E-23	270.8	2.1	0
6574.8768	6574.8759	1.27E-22	292.0	6.2	0
6574.9102	6574.9124	3.07E-23	658.0	17.0	0
6575.0669	6575.0689	3.45E-23	881.2	1.4	0
6575.0807	6575.0824	1.29E-22	37.7	3.6	0
6575.2358	6575.2352	1.70E-23	558.6	3.7	550.7587
6575.4313	6575.4322	3.80E-22	476.8	2.3	477.2645
6575.4524	6575.455	0.00E+00	210.9	18.7	0

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6575.4841	6575.4849	1.12E-22	108.9	5.9	0
6575.5368	6575.5381	4.35E-23	726.9	27.1	0
6575.6214	6575.6225	1.36E-22	216.1	1.5	0
6575.6774	6575.6801	9.86E-23	491.6	11.1	0
6575.6969	6575.6959	0.00E+00	330.6	3.4	0
6575.7189	6575.7189	4.87E-22	279.8	8.8	0
6575.8129	6575.8143	2.18E-23	693.7	1.7	0
6575.8526	6575.8538	3.50E-22	523.9	3.3	0
6576.0065	6576.0076	1.23E-23	451.7	6.9	0
6576.1644	6576.1651	1.90E-22	227.5	16.1	0
6576.2624	6576.2651	7.80E-23	382.3	5.7	0
6576.3702	6576.3752	0.00E+00	380.4	9.3	0
6576.3969	6576.3976	1.50E-22	201.1	2.1	0
6576.5277	6576.5278	8.03E-24	288.1	1.3	0
6576.6407	6576.641	1.11E-23	482.1	9.5	0
6576.7027	6576.7029	1.91E-22	508.7	3.5	521.6219
6576.7467	6576.7463	1.20E-22	320.6	8.4	0
6576.8252	6576.8277	7.82E-24	261.9	4.9	0
6576.9585	6576.9589	1.57E-23	390.1	8.3	0
6577.0076	6577.008	3.13E-22	375.3	2.0	383.3184
6577.1857	6577.1857	5.02E-22	374.0	2.5	383.9775
6577.3098	6577.3103	1.70E-22	556.0	9.8	0
6577.3342	6577.3362	0.00E+00	449.8	25.9	0
6577.4816	6577.4817	1.32E-23	493.7	10.9	0
6577.6921	6577.6936	0.00E+00	157.8	22.3	0
6577.7228	6577.7227	5.12E-23	192.6	6.0	0
6577.8522	6577.8502	1.66E-23	714.5	14.6	0
6577.8723	6577.8713	1.16E-23	691.4	16.2	0
6577.9002	6577.8996	9.00E-24	873.2	26.2	0
6577.9488	6577.949	6.66E-23	286.3	1.8	0
6578.0610	6578.0575	1.00E-23	422.6	14.9	0
6578.2617	6578.261	4.75E-24	0.9	12.5	0
6578.4130	6578.4112	4.43E-23	715.5	38.4	0
6578.4457	6578.4453	7.82E-23	373.0	7.8	0
6578.5559	6578.5553	8.08E-23	406.5	13.7	0
6578.6096	6578.6089	6.29E-24	8.9	3.9	0
6578.6324	6578.6324	2.91E-23	563.8	4.2	0
6578.7484	6578.7484	1.23E-22	197.7	4.2	183.8291

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$	$\sigma_{label}$	$S_{our\ work}$	$E_{low}$	$\delta E_{low}$	$E_{low}(SL)$
6578.8754	6578.8752	1.96E-23	342.1	6.9	0

# Annexe 4

TABLE 1 – Pour l’isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  sont reportées pour comparaison les 403 transitions présentes dans les travaux de Lees [travaux publiés (247 transitions dont 7 doublons) et communication privée des auteurs (412 transitions dont 9 doublons)]. En effet, les publications ne comportent que les transitions pour lesquelles une attribution est proposée. La 4ème colonne donne l’écart-type des valeurs de  $\sigma_{fit}$ , non défini lorsque la transition n’est mesurée qu’une seule fois. La 5ème colonne donne le nombre de mesures et la 6ème colonne représente la différence  $\Delta\sigma = \sigma_{fit} - \sigma_{Lees}$ . Cette différence reste inférieure à  $\pm 8 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$  pour l’ensemble des transitions et inférieure à  $\pm 4 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$  pour les transitions attribuées.

$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	Ecart-type ( $\text{cm}^{-1}$ )	Nombre	$\Delta\sigma$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6385.7289	6385.7234	6385.7284	n.d.	1	-0.0050
6386.428	6386.4284	6386.4258	n.d.	1	0.0027
6386.4715	6386.4669	6386.4699	n.d.	1	-0.0031
6392.5167	6392.5176	6392.5167	n.d.	1	0.0010
6393	6393.0004	6392.9974	n.d.	1	0.0030
6393.2485	6393.2485	6393.2489	n.d.	1	-0.0004
6401.2	6401.1997	6401.2001	0.0004	2	-0.0004
6401.8947	6401.8954	6401.8972	0.0004	2	-0.0018
6412.159	6412.1596	6412.1596	0.0006	2	0.0001
6425.3678	6425.3678	6425.3681	0.0013	2	-0.0003
6427.5149	6427.5152	6427.5149	n.d.	1	0.0003
6428.3265	6428.3265	6428.3295	n.d.	1	-0.0030
6430.0467	6430.0448	6430.0467	n.d.	1	-0.0019
6430.6414	6430.6419	6430.6414	n.d.	1	0.0005
6431.0197	6431.0188	6431.0197	0.0008	2	-0.0009
6431.7459	6431.745	6431.7459	0.0007	2	-0.0009
6432.1381	6432.1404	6432.1381	0.0010	2	0.0023
6432.8061	6432.8035	6432.8046	n.d.	1	-0.0011

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	$\sigma_{Lees}$	Ecart-type	Nombre	$\Delta\sigma$
6432.9386	6432.9407	6432.9417	n.d.	1	-0.0010
6433.8221	6433.8171	6433.8196	n.d.	1	-0.0025
6434.0179	6434.0179	6434.0151	n.d.	1	0.0028
6435.1314	6435.128	6435.1352	n.d.	1	-0.0072
6435.3872	6435.3852	6435.387	0.0004	2	-0.0018
6435.6971	6435.7012	6435.7016	0.0004	2	-0.0004
6435.9272	6435.9285	6435.9291	0.0007	2	-0.0006
6437.6527	6437.6527	6437.6556	0.0001	2	-0.0029
6438.8552	6438.8556	6438.8578	n.d.	1	-0.0022
6440.1349	6440.1354	6440.1277	n.d.	1	0.0078
6440.2337	6440.2295	6440.2287	n.d.	1	0.0008
6440.3954	6440.3957	6440.3945	n.d.	1	0.0012
6440.9554	6440.9549	6440.9586	n.d.	1	-0.0037
6441.1377	6441.1399	6441.1347	0.0001	2	0.0052
6443.6621	6443.6675	6443.6651	n.d.	1	0.0024
6444.934	6444.9335	6444.9343	n.d.	1	-0.0008
6445.23	6445.2293	6445.2295	n.d.	1	-0.0002
6445.7217	6445.7221	6445.7209	n.d.	1	0.0012
6446.098	6446.0976	6446.0958	n.d.	1	0.0018
6446.2893	6446.2919	6446.2893	n.d.	1	0.0026
6446.7192	6446.7236	6446.7192	0.0002	2	0.0044
6446.7462	6446.7462	6446.7432	0.0001	2	0.0030
6447.915	6447.9155	6447.9134	0.0006	2	0.0021
6448.077	6448.0756	6448.0758	0.0006	2	-0.0002
6448.1258	6448.1257	6448.1272	0.0006	2	-0.0015
6448.166	6448.165	6448.1629	n.d.	1	0.0021
6448.7356	6448.7342	6448.7356	n.d.	1	-0.0014
6448.761	6448.7607	6448.762	n.d.	1	-0.0013
6448.8581	6448.8589	6448.858	n.d.	1	0.0009
6449.1397	6449.141	6449.1406	n.d.	1	0.0004
6449.2814	6449.2832	6449.2837	0.0001	2	-0.0006
6453.3681	6453.3672	6453.3651	0.0002	2	0.0021
6453.5852	6453.5867	6453.584	n.d.	1	0.0027
6453.8696	6453.8707	6453.8702	n.d.	1	0.0005
6454.6937	6454.6933	6454.6937	n.d.	1	-0.0004
6454.9352	6454.9345	6454.9352	n.d.	1	-0.0007
6455.0817	6455.0814	6455.0857	0.0004	2	-0.0043
6455.2157	6455.2144	6455.2168	0.0001	2	-0.0025

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	$\sigma_{Lees}$	Ecart-type	Nombre	$\Delta\sigma$
6455.9352	6455.9359	6455.9356	0.0008	2	0.0004
6456.2154	6456.214	6456.2158	0.0001	2	-0.0018
6456.3405	6456.3394	6456.3405	0.0003	2	-0.0011
6456.4196	6456.4183	6456.4196	0.0001	2	-0.0013
6457.1211	6457.1231	6457.1211	n.d.	1	0.0020
6457.153	6457.1518	6457.1521	n.d.	1	-0.0003
6457.3091	6457.3111	6457.3099	n.d.	1	0.0012
6457.5167	6457.5157	6457.5167	n.d.	1	-0.0010
6458.5723	6458.572	6458.5728	0.0005	2	-0.0008
6458.85	6458.8498	6458.8483	0.0016	2	0.0015
6459.412	6459.4115	6459.4087	n.d.	1	0.0028
6459.4642	6459.4635	6459.4664	n.d.	1	-0.0029
6459.8191	6459.8193	6459.8163	n.d.	1	0.0030
6459.883	6459.8833	6459.8803	n.d.	1	0.0030
6460.6108	6460.611	6460.6105	n.d.	1	0.0005
6460.9009	6460.9014	6460.8997	n.d.	1	0.0017
6461.1375	6461.1366	6461.1359	0.0000	2	0.0007
6461.1862	6461.1864	6461.1862	0.0000	2	0.0003
6461.8798	6461.8813	6461.8817	n.d.	1	-0.0004
6462.7877	6462.7902	6462.7877	n.d.	1	0.0025
6462.8312	6462.8316	6462.831	n.d.	1	0.0006
6463.3801	6463.3799	6463.3787	0.0000	2	0.0012
6464.0521	6464.0523	6464.0512	0.0001	2	0.0012
6464.6737	6464.6737	6464.672	0.0002	2	0.0017
6464.7367	6464.7368	6464.7357	n.d.	1	0.0011
6464.7674	6464.7676	6464.7674	n.d.	1	0.0002
6464.8024	6464.8024	6464.8011	n.d.	1	0.0014
6465.0099	6465.0126	6465.0099	n.d.	1	0.0027
6465.0899	6465.0912	6465.0906	n.d.	1	0.0006
6465.1757	6465.1755	6465.1757	0.0001	2	-0.0002
6465.308	6465.3107	6465.3107	0.0000	2	0.0000
6465.3501	6465.3494	6465.3501	n.d.	1	-0.0007
6466.0449	6466.0444	6466.0439	n.d.	1	0.0005
6466.6327	6466.6352	6466.6353	n.d.	1	-0.0002
6466.7794	6466.7792	6466.7794	n.d.	1	-0.0002
6467.1468	6467.1477	6467.1467	n.d.	1	0.0010
6468.1227	6468.1223	6468.1207	n.d.	1	0.0016
6468.1705	6468.1706	6468.1717	n.d.	1	-0.0011

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	$\sigma_{Lees}$	Ecart-type	Nombre	$\Delta\sigma$
6468.338	6468.3365	6468.3365	n.d.	1	0.0001
6468.7921	6468.7909	6468.7892	n.d.	1	0.0017
6468.924	6468.9257	6468.9286	0.0001	2	-0.0029
6470.0572	6470.0567	6470.0577	0.0001	2	-0.0010
6471.3153	6471.3137	6471.3142	0.0000	2	-0.0005
6472.0516	6472.0524	6472.0517	n.d.	1	0.0007
6473.0247	6473.0244	6473.0237	n.d.	1	0.0007
6473.3755	6473.3756	6473.375	n.d.	1	0.0007
6474.2021	6474.2043	6474.2019	n.d.	1	0.0025
6475.0464	6475.0461	6475.0461	n.d.	1	0.0000
6475.3194	6475.316	6475.317	n.d.	1	-0.0010
6476.2494	6476.2527	6476.2526	0.0001	2	0.0001
6476.4113	6476.4102	6476.4114	n.d.	1	-0.0012
6477.3404	6477.3339	6477.3311	n.d.	1	0.0028
6477.351	6477.3513	6477.3504	n.d.	1	0.0009
6477.4311	6477.4306	6477.4261	n.d.	1	0.0045
6477.5666	6477.5674	6477.5649	0.0000	2	0.0025
6477.8696	6477.8719	6477.8691	0.0001	2	0.0028
6478.6593	6478.6601	6478.6576	0.0009	2	0.0025
6479.2516	6479.2516	6479.2507	n.d.	1	0.0009
6479.6077	6479.608	6479.6063	n.d.	1	0.0017
6479.7373	6479.7386	6479.7357	n.d.	1	0.0029
6479.9844	6479.9855	6479.9822	n.d.	1	0.0033
6480.0249	6480.0262	6480.0249	n.d.	1	0.0013
6480.5482	6480.551	6480.5486	n.d.	1	0.0024
6481.2189	6481.2176	6481.2181	n.d.	1	-0.0005
6481.3927	6481.3872	6481.3879	0.0012	2	-0.0007
6481.5131	6481.5106	6481.5116	0.0010	2	-0.0010
6481.6246	6481.6259	6481.6257	0.0018	2	0.0003
6482.669	6482.67	6482.6691	0.0016	2	0.0009
6482.8159	6482.8161	6482.8142	n.d.	1	0.0019
6483.124	6483.1241	6483.1241	n.d.	1	0.0000
6483.6793	6483.6793	6483.6791	n.d.	1	0.0002
6484.42	6484.4212	6484.421	0.0004	2	0.0003
6484.5445	6484.546	6484.5454	n.d.	1	0.0006
6484.795	6484.7949	6484.7926	n.d.	1	0.0023
6485.309	6485.31	6485.3089	n.d.	1	0.0011
6485.4061	6485.4059	6485.405	n.d.	1	0.0009

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	$\sigma_{Lees}$	Ecart-type	Nombre	$\Delta\sigma$
6485.6251	6485.622	6485.6188	0.0001	2	0.0032
6485.8621	6485.8567	6485.856	0.0005	2	0.0008
6485.951	6485.951	6485.9504	n.d.	1	0.0006
6486.0051	6486.0051	6486.0051	n.d.	1	0.0000
6486.5524	6486.5524	6486.5521	n.d.	1	0.0003
6486.6569	6486.6573	6486.6572	n.d.	1	0.0001
6486.914	6486.9127	6486.9124	n.d.	1	0.0004
6487.1365	6487.1369	6487.1378	n.d.	1	-0.0009
6487.2025	6487.2036	6487.2026	0.0006	2	0.0010
6487.447	6487.4472	6487.4487	0.0008	2	-0.0015
6487.49	6487.4901	6487.4898	n.d.	1	0.0004
6487.7079	6487.7082	6487.7072	n.d.	1	0.0011
6489.3077	6489.3076	6489.309	0.0001	2	-0.0014
6489.632	6489.633	6489.6336	n.d.	1	-0.0006
6491.0206	6491.0199	6491.0219	n.d.	1	-0.0020
6491.3698	6491.3696	6491.3704	n.d.	1	-0.0008
6491.8301	6491.8295	6491.8284	n.d.	1	0.0011
6492.073	6492.0732	6492.0733	n.d.	1	-0.0001
6492.6043	6492.6049	6492.605	n.d.	1	-0.0001
6493.0054	6493.005	6493.0066	0.0003	2	-0.0016
6493.1934	6493.1934	6493.192	0.0003	2	0.0014
6493.3149	6493.3132	6493.3161	0.0004	2	-0.0029
6493.3447	6493.3429	6493.3448	n.d.	1	-0.0019
6494.278	6494.2784	6494.2788	n.d.	1	-0.0004
6494.3533	6494.3523	6494.3525	n.d.	1	-0.0002
6494.395	6494.3951	6494.3935	n.d.	1	0.0016
6494.5955	6494.5954	6494.5963	n.d.	1	-0.0009
6495.4421	6495.4418	6495.4436	n.d.	1	-0.0018
6495.7259	6495.7268	6495.7271	0.0005	2	-0.0003
6496.9464	6496.9462	6496.9473	0.0001	2	-0.0011
6497.064	6497.064	6497.0637	0.0001	2	0.0003
6497.158	6497.1581	6497.1581	n.d.	1	-0.0001
6497.2052	6497.2054	6497.2041	n.d.	1	0.0013
6497.34	6497.3384	6497.3382	n.d.	1	0.0002
6497.6849	6497.6856	6497.6848	n.d.	1	0.0009
6497.7941	6497.7936	6497.7939	n.d.	1	-0.0003
6498.3179	6498.3174	6498.3172	n.d.	1	0.0002
6498.5057	6498.5071	6498.5047	n.d.	1	0.0024



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	$\sigma_{Lees}$	Ecart-type	Nombre	$\Delta\sigma$
6498.7734	6498.7736	6498.7726	n.d.	1	0.0010
6499.663	6499.6632	6499.6625	n.d.	1	0.0007
6499.9175	6499.9181	6499.9167	0.0006	2	0.0014
6500.1158	6500.1149	6500.1128	0.0002	2	0.0021
6500.7127	6500.7146	6500.7119	n.d.	1	0.0027
6501.382	6501.3823	6501.383	n.d.	1	-0.0007
6501.4395	6501.4412	6501.4387	n.d.	1	0.0025
6501.6053	6501.6063	6501.6045	n.d.	1	0.0018
6501.8229	6501.8236	6501.8223	n.d.	1	0.0013
6502.0201	6502.0199	6502.0198	0.0020	2	0.0001
6502.1336	6502.134	6502.1342	n.d.	1	-0.0002
6502.9488	6502.9489	6502.9474	0.0025	2	0.0015
6503.578	6503.5781	6503.5806	0.0006	2	-0.0025
6503.7257	6503.7267	6503.725	0.0001	2	0.0017
6504.0672	6504.0667	6504.0672	0.0004	2	-0.0005
6504.3523	6504.3518	6504.3514	n.d.	1	0.0004
6504.8277	6504.8284	6504.8281	n.d.	1	0.0003
6505.0927	6505.0932	6505.0936	n.d.	1	-0.0004
6505.1754	6505.1763	6505.1747	n.d.	1	0.0016
6505.3135	6505.3142	6505.3134	0.0008	2	0.0008
6505.3534	6505.3543	6505.3544	0.0001	2	-0.0002
6505.5961	6505.5969	6505.5973	0.0019	2	-0.0004
6506.1731	6506.1728	6506.1753	0.0001	2	-0.0025
6506.5305	6506.5288	6506.5296	0.0001	2	-0.0008
6506.6609	6506.6595	6506.66	n.d.	1	-0.0005
6507.0599	6507.0588	6507.06	n.d.	1	-0.0013
6507.1063	6507.1053	6507.1067	n.d.	1	-0.0014
6509.6208	6509.621	6509.6207	n.d.	1	0.0003
6509.6614	6509.6581	6509.6588	n.d.	1	-0.0007
6510.5099	6510.5103	6510.51	n.d.	1	0.0003
6510.8593	6510.8595	6510.8603	n.d.	1	-0.0008
6510.9556	6510.9558	6510.9553	n.d.	1	0.0005
6510.9966	6510.9966	6510.9974	0.0000	2	-0.0008
6511.6725	6511.6735	6511.6732	0.0000	2	0.0003
6511.7344	6511.7363	6511.7369	0.0006	2	-0.0006
6512.0501	6512.0498	6512.0507	0.0006	2	-0.0009
6512.1033	6512.104	6512.1041	n.d.	1	-0.0001
6512.3712	6512.3711	6512.3713	n.d.	1	-0.0002

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	$\sigma_{Lees}$	Ecart-type	Nombre	$\Delta\sigma$
6512.4942	6512.4939	6512.4944	n.d.	1	-0.0005
6512.679	6512.6784	6512.6792	n.d.	1	-0.0008
6512.9976	6512.9976	6512.9974	n.d.	1	0.0002
6513.0314	6513.0313	6513.0311	0.0002	2	0.0002
6513.2859	6513.2856	6513.2863	0.0004	2	-0.0007
6513.7674	6513.7658	6513.7659	0.0003	2	-0.0001
6513.8377	6513.8383	6513.8376	n.d.	1	0.0007
6514.1626	6514.1626	6514.1619	n.d.	1	0.0007
6514.2917	6514.2937	6514.2903	n.d.	1	0.0034
6514.4254	6514.4272	6514.4257	n.d.	1	0.0015
6515.2588	6515.2587	6515.2583	0.0025	2	0.0004
6515.6256	6515.6249	6515.6242	0.0000	2	0.0007
6516.2879	6516.2859	6516.2843	0.0009	2	0.0016
6516.4212	6516.4205	6516.4194	0.0008	2	0.0012
6517.0205	6517.0202	6517.0175	n.d.	1	0.0027
6517.2036	6517.2027	6517.2023	n.d.	1	0.0004
6520.4968	6520.4958	6520.4966	n.d.	1	-0.0008
6521.3776	6521.3764	6521.3765	n.d.	1	-0.0001
6521.5507	6521.5499	6521.5507	n.d.	1	-0.0008
6521.6397	6521.6385	6521.6397	0.0007	2	-0.0012
6521.6914	6521.6901	6521.6914	0.0006	2	-0.0014
6522.5704	6522.5703	6522.5704	0.0001	2	-0.0001
6522.8215	6522.8222	6522.8215	n.d.	1	0.0007
6523.156	6523.1557	6523.1551	n.d.	1	0.0006
6523.4672	6523.4673	6523.466	n.d.	1	0.0013
6523.496	6523.4965	6523.496	n.d.	1	0.0005
6523.7522	6523.7527	6523.7528	n.d.	1	-0.0001
6524.3887	6524.3888	6524.3889	0.0000	2	-0.0001
6524.9323	6524.9326	6524.9367	0.0001	2	-0.0041
6525.0663	6525.0659	6525.0658	0.0003	2	0.0001
6525.3546	6525.3552	6525.354	0.0007	2	0.0012
6525.7785	6525.7792	6525.7789	n.d.	1	0.0003
6526.2279	6526.2275	6526.2282	n.d.	1	-0.0007
6526.5849	6526.5846	6526.5851	n.d.	1	-0.0005
6526.6329	6526.6313	6526.6325	n.d.	1	-0.0013
6526.6721	6526.6717	6526.6715	n.d.	1	0.0002
6526.8137	6526.8128	6526.813	n.d.	1	-0.0002
6526.8783	6526.8784	6526.878	0.0006	2	0.0004

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	$\sigma_{Lees}$	Ecart-type	Nombre	$\Delta\sigma$
6527.8509	6527.8489	6527.8483	0.0008	2	0.0006
6527.9851	6527.9852	6527.9841	n.d.	1	0.0011
6528.0222	6528.0224	6528.0218	n.d.	1	0.0006
6528.282	6528.2813	6528.281	n.d.	1	0.0003
6528.3405	6528.3404	6528.3397	n.d.	1	0.0007
6529.5655	6529.5659	6529.5652	n.d.	1	0.0007
6529.6475	6529.6473	6529.6473	0.0001	2	0.0000
6529.9849	6529.9847	6529.9852	0.0001	2	-0.0005
6530.1834	6530.183	6530.1843	0.0011	2	-0.0013
6530.2304	6530.229	6530.231	n.d.	1	-0.0020
6530.5459	6530.5478	6530.5479	0.0004	2	-0.0001
6530.8383	6530.838	6530.8377	0.0002	2	0.0003
6530.9573	6530.9574	6530.9585	n.d.	1	-0.0012
6531.2711	6531.2693	6531.2684	n.d.	1	0.0009
6531.5452	6531.5451	6531.5449	n.d.	1	0.0003
6531.9572	6531.9567	6531.9579	0.0021	2	-0.0012
6532.6007	6532.6014	6532.6006	0.0006	2	0.0008
6532.646	6532.6469	6532.6447	n.d.	1	0.0022
6533.0276	6533.0291	6533.0279	n.d.	1	0.0012
6536.2574	6536.258	6536.2585	n.d.	1	-0.0005
6536.2831	6536.2845	6536.2852	n.d.	1	-0.0007
6536.4759	6536.4751	6536.476	n.d.	1	-0.0009
6536.6318	6536.6325	6536.6318	n.d.	1	0.0007
6537.3444	6537.3443	6537.3446	n.d.	1	-0.0003
6537.6551	6537.6555	6537.6551	n.d.	1	0.0004
6538.5234	6538.5237	6538.5207	n.d.	1	0.0030
6538.6776	6538.6774	6538.6775	n.d.	1	-0.0001
6538.9967	6538.9963	6538.9957	n.d.	1	0.0006
6539.3987	6539.3974	6539.398	n.d.	1	-0.0006
6539.4374	6539.4371	6539.4374	0.0007	2	-0.0004
6539.4843	6539.4844	6539.4831	0.0005	2	0.0013
6539.9304	6539.929	6539.9307	n.d.	1	-0.0017
6540.3533	6540.3523	6540.3533	n.d.	1	-0.0010
6540.4407	6540.4393	6540.4404	n.d.	1	-0.0011
6540.4865	6540.487	6540.4868	n.d.	1	0.0002
6541.1622	6541.161	6541.1629	0.0001	2	-0.0019
6541.196	6541.1947	6541.1959	0.0008	2	-0.0012
6541.5884	6541.5884	6541.5902	0.0004	2	-0.0018

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	$\sigma_{Lees}$	Ecart-type	Nombre	$\Delta\sigma$
6541.6638	6541.6625	6541.6646	n.d.	1	-0.0021
6541.7081	6541.7068	6541.7089	n.d.	1	-0.0021
6541.8181	6541.8167	6541.818	n.d.	1	-0.0013
6542.0598	6542.0585	6542.0598	n.d.	1	-0.0013
6542.0842	6542.0828	6542.0845	0.0001	2	-0.0017
6543.3056	6543.3054	6543.3064	0.0000	2	-0.0010
6543.668	6543.6673	6543.6683	n.d.	1	-0.0010
6544.0956	6544.0945	6544.0956	n.d.	1	-0.0011
6545.0647	6545.0656	6545.0659	n.d.	1	-0.0003
6545.7902	6545.7888	6545.7898	n.d.	1	-0.0010
6546.844	6546.8388	6546.8435	n.d.	1	-0.0047
6547.0443	6547.0417	6547.044	n.d.	1	-0.0023
6547.0983	6547.0958	6547.0983	n.d.	1	-0.0026
6547.8506	6547.8512	6547.8512	n.d.	1	0.0000
6548.5419	6548.5428	6548.5417	n.d.	1	0.0011
6548.8634	6548.8643	6548.8635	n.d.	1	0.0008
6548.9206	6548.9214	6548.9206	n.d.	1	0.0008
6549.0662	6549.067	6549.0667	n.d.	1	0.0003
6549.4528	6549.4535	6549.4536	n.d.	1	-0.0001
6549.714	6549.7142	6549.7151	n.d.	1	-0.0009
6549.9726	6549.972	6549.9726	n.d.	1	-0.0006
6550.164	6550.1637	6550.1644	n.d.	1	-0.0007
6550.3061	6550.306	6550.3069	0.0001	2	-0.0009
6550.4566	6550.4567	6550.4577	n.d.	1	-0.0010
6550.5175	6550.5174	6550.5187	0.0016	2	-0.0013
6550.5387	6550.5385	6550.5377	0.0010	2	0.0008
6551.3441	6551.3449	6551.3449	n.d.	1	0.0000
6551.7539	6551.7535	6551.7535	n.d.	1	0.0000
6552.4214	6552.4209	6552.422	n.d.	1	-0.0012
6552.6454	6552.6453	6552.6455	n.d.	1	-0.0002
6552.7244	6552.7243	6552.7246	n.d.	1	-0.0003
6552.7694	6552.7695	6552.7699	n.d.	1	-0.0004
6553.3428	6553.3434	6553.343	n.d.	1	0.0004
6553.8588	6553.8592	6553.8603	n.d.	1	-0.0011
6554.49	6554.4908	6554.4918	n.d.	1	-0.0010
6554.9076	6554.9072	6554.9074	n.d.	1	-0.0003
6555.9936	6555.994	6555.9938	n.d.	1	0.0002
6556.105	6556.1049	6556.1049	n.d.	1	0.0000

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	$\sigma_{Lees}$	Ecart-type	Nombre	$\Delta\sigma$
6557.667	6557.6672	6557.6666	n.d.	1	0.0006
6558.105	6558.1049	6558.1033	0.0000	2	0.0016
6558.4645	6558.4647	6558.4645	0.0017	2	0.0002
6558.5828	6558.583	6558.5833	0.0006	2	-0.0003
6558.6602	6558.6595	6558.659	n.d.	1	0.0005
6558.9583	6558.9584	6558.9575	n.d.	1	0.0009
6559.0509	6559.0508	6559.0516	n.d.	1	-0.0008
6559.1365	6559.1368	6559.1377	n.d.	1	-0.0009
6559.1734	6559.1735	6559.1743	n.d.	1	-0.0008
6559.2171	6559.2172	6559.2184	n.d.	1	-0.0012
6559.26	6559.26	6559.2591	n.d.	1	0.0009
6559.3405	6559.3404	6559.3415	n.d.	1	-0.0011
6559.5992	6559.5987	6559.5996	n.d.	1	-0.0009
6559.6785	6559.6785	6559.679	0.0009	2	-0.0005
6559.6994	6559.6994	6559.7007	0.0025	2	-0.0013
6560.7534	6560.7535	6560.7534	n.d.	1	0.0001
6560.845	6560.8449	6560.8452	n.d.	1	-0.0003
6561.3851	6561.3858	6561.3852	n.d.	1	0.0006
6561.9083	6561.9086	6561.9079	n.d.	1	0.0008
6562.0285	6562.0289	6562.028	0.0016	2	0.0009
6562.1751	6562.1746	6562.1754	0.0001	2	-0.0008
6562.2479	6562.2483	6562.2478	n.d.	1	0.0005
6562.5814	6562.5808	6562.5814	n.d.	1	-0.0006
6562.851	6562.851	6562.8509	n.d.	1	0.0001
6562.8983	6562.8981	6562.8986	n.d.	1	-0.0005
6563.1282	6563.1278	6563.1271	n.d.	1	0.0007
6564.1346	6564.1348	6564.1358	n.d.	1	-0.0011
6564.2795	6564.2791	6564.2795	0.0005	2	-0.0004
6564.573	6564.5735	6564.5734	0.0024	2	0.0001
6564.8113	6564.8126	6564.8129	n.d.	1	-0.0003
6564.992	6564.9928	6564.9937	n.d.	1	-0.0010
6565.1105	6565.1106	6565.1098	n.d.	1	0.0008
6565.4649	6565.4657	6565.4654	n.d.	1	0.0003
6565.7275	6565.7281	6565.7275	n.d.	1	0.0006
6565.8978	6565.8975	6565.897	n.d.	1	0.0005
6566.4172	6566.4182	6566.4177	0.0013	2	0.0005
6566.5442	6566.5446	6566.5441	0.0011	2	0.0005
6566.9438	6566.9433	6566.9437	n.d.	1	-0.0004

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	$\sigma_{Lees}$	Ecart-type	Nombre	$\Delta\sigma$
6566.9877	6566.9875	6566.9874	n.d.	1	0.0002
6567.2675	6567.266	6567.2673	n.d.	1	-0.0013
6567.6013	6567.6011	6567.6005	n.d.	1	0.0006
6567.7336	6567.7334	6567.7343	n.d.	1	-0.0009
6567.7928	6567.7925	6567.7913	n.d.	1	0.0012
6567.8231	6567.8229	6567.8237	n.d.	1	-0.0009
6568.2448	6568.245	6568.2446	0.0042	2	0.0004
6568.366	6568.3662	6568.3657	n.d.	1	0.0005
6568.4855	6568.4863	6568.4848	n.d.	1	0.0015
6568.5468	6568.547	6568.5472	n.d.	1	-0.0002
6568.9211	6568.9217	6568.9224	n.d.	1	-0.0007
6568.9802	6568.9811	6568.9805	n.d.	1	0.0006
6569.0797	6569.0797	6569.0789	n.d.	1	0.0008
6570.1434	6570.1433	6570.1429	0.0001	2	0.0004
6571.022	6571.0222	6571.0225	0.0004	2	-0.0004
6571.4537	6571.4534	6571.4532	n.d.	1	0.0002
6572.1137	6572.1132	6572.1133	n.d.	1	-0.0002
6572.512	6572.5108	6572.5112	n.d.	1	-0.0004
6573.616	6573.6151	6573.6143	n.d.	1	0.0008
6573.7299	6573.7293	6573.7294	n.d.	1	-0.0002
6573.7711	6573.7705	6573.7698	n.d.	1	0.0007
6574.4171	6574.4178	6574.4159	n.d.	1	0.0019
6574.6857	6574.6854	6574.6851	0.0004	2	0.0003
6574.8905	6574.8882	6574.8896	0.0020	2	-0.0014
6575.5303	6575.5296	6575.5303	n.d.	1	-0.0007
6575.6825	6575.6807	6575.6828	n.d.	1	-0.0022
6575.8127	6575.8111	6575.8119	n.d.	1	-0.0008
6575.9358	6575.9339	6575.9336	n.d.	1	0.0003
6576.1752	6576.1737	6576.1704	n.d.	1	0.0033
6576.2541	6576.2531	6576.2528	n.d.	1	0.0003
6576.2922	6576.2917	6576.2919	n.d.	1	-0.0002
6576.3569	6576.3563	6576.3569	0.0001	2	-0.0006
6576.4426	6576.4415	6576.442	n.d.	1	-0.0005
6576.5628	6576.5567	6576.5634	n.d.	1	-0.0067
6576.7488	6576.7474	6576.7498	n.d.	1	-0.0024
6576.96	6576.9602	6576.959	n.d.	1	0.0012
6577.1848	6577.1829	6577.1848	n.d.	1	-0.0019
6577.2544	6577.2531	6577.2542	n.d.	1	-0.0011

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{label}$	$\sigma_{fit}$	$\sigma_{Lees}$	Ecart-type	Nombre	$\Delta\sigma$
6577.2801	6577.279	6577.2802	n.d.	1	-0.0012
6577.8524	6577.8502	6577.8506	n.d.	1	-0.0004
6577.9009	6577.9	6577.901	n.d.	1	-0.0010
6578.2828	6578.28	6578.2826	0.0000	2	-0.0026
6578.4112	6578.4104	6578.4103	0.0000	2	0.0001

# Annexe 5

TABLE 1 – Pour l’isotopologue  $^{15}\text{NH}_3$  sont reportées les 2608 transitions détectées. La valeur de la force de raie ainsi que son incertitude donnée par la méthode sont données en 3ème et 4ème colonne. Lorsque la transition a été reportée par les travaux publiés de Lees *et al.*, la valeur est reportée dans la 5ème colonne.

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6367.5516	6367.5516	1.019E-24	1.19	
6367.6481	6367.6481	1.185E-24	1.23	
6367.6731	6367.6731	6.877E-24	0.71	
6367.7099	6367.7099	4.930E-24	0.71	
6367.7741	6367.7741	2.597E-24	0.71	
6367.873	6367.873	9.947E-25	1.21	
6367.9787	6367.979	2.447E-24	0.51	
6368.0433	6368.043	3.527E-25	1.66	
6368.0784	6368.078	9.253E-25	1.15	
6368.0978	6368.0987	8.088E-25	1.29	
6368.3773	6368.3773	5.587E-25	1.42	
6368.4244	6368.4244	3.328E-24	0.71	
6368.4507	6368.4507	7.061E-25	1.3	
6368.5297	6368.5297	2.106E-24	0.71	
6368.6148	6368.6149	9.856E-25	0.67	
6368.6703	6368.6698	2.278E-24	0.5	
6368.7753	6368.7754	6.383E-24	0.5	
6368.839	6368.839	1.590E-24	1.43	
6368.8544	6368.8544	9.639E-25	2.12	
6368.907	6368.9064	1.252E-24	0.81	
6369.0661	6369.066	2.701E-25	2.43	
6369.2094	6369.2089	8.534E-25	1.01	
6369.2768	6369.277	3.011E-24	0.5	



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6369.3359	6369.3357	9.118E-25	0.6	
6369.4123	6369.4128	1.335E-25	2.99	
6369.4353	6369.4355	2.445E-24	0.5	
6369.5492	6369.5492	4.175E-25	1.26	
6369.7364	6369.7364	2.210E-25	2.06	
6369.8181	6369.8181	7.778E-24	0.71	
6369.8502	6369.8502	1.596E-25	3.22	
6369.9063	6369.9062	1.222E-24	0.71	
6370.0664	6370.0664	3.827E-25	1.09	
6370.174	6370.1741	9.786E-24	0.71	
6370.2002	6370.2013	5.402E-25	1.67	
6370.229	6370.23	5.832E-25	1.4	
6370.3317	6370.331	1.265E-24	0.82	
6370.404	6370.4051	7.429E-25	1.13	
6370.5176	6370.521	6.962E-24	0.71	
6370.5719	6370.572	2.557E-24	0.5	
6370.6019	6370.602	3.016E-24	0.5	
6370.6593	6370.659	9.249E-25	0.74	
6370.6896	6370.69	4.226E-25	1.3	
6370.7509	6370.7516	3.771E-25	1.43	
6370.9671	6370.9671	6.692E-25	1.4	
6371.0108	6371.0108	2.333E-25	3.13	
6371.0514	6371.0515	3.284E-24	0.73	
6371.0738	6371.075	1.473E-24	0.93	
6371.1783	6371.1783	2.861E-24	0.75	
6371.3081	6371.308	7.648E-25	0.95	
6371.4356	6371.4357	3.974E-24	0.5	
6371.4794	6371.4794	1.064E-23	0.71	
6371.5099	6371.5099	1.749E-24	0.83	
6371.7002	6371.7002	1.645E-24	8.95	
6371.7401	6371.7401	4.867E-24	3.25	
6371.8845	6371.885	3.602E-24	0.5	
6371.9466	6371.9466	1.449E-24	0.67	
6371.9885	6371.989	2.767E-24	0.57	
6372.0166	6372.017	2.228E-24	0.64	
6372.0535	6372.0539	7.224E-24	0.5	
6372.1218	6372.1217	1.294E-24	0.66	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6372.1635	6372.1635	1.633E-24	0.94	
6372.2921	6372.2921	1.001E-24	1.32	
6372.3439	6372.344	1.102E-23	0.71	
6372.4947	6372.495	7.121E-25	1.7	
6372.6499	6372.649	1.019E-23	0.5	
6372.6707	6372.67	1.497E-24	0.89	
6372.8308	6372.8332	2.639E-25	3.45	
6372.8932	6372.8932	7.734E-25	2.05	
6372.9181	6372.9267	2.204E-24	0.8	
6373.0128	6373.016	6.807E-24	0.71	
6373.1236	6373.1236	1.037E-24	2.56	
6373.1393	6373.14	2.952E-24	1.13	
6373.367	6373.367	1.505E-24	0.61	
6373.4116	6373.412	2.671E-24	0.5	
6373.4376	6373.4376	9.624E-24	0.71	
6373.6805	6373.6811	1.099E-24	1	
6373.7619	6373.762	1.694E-24	0.77	
6373.8543	6373.8543	9.636E-24	0.5	
6373.8937	6373.894	6.684E-24	0.5	
6374.0303	6374.0304	1.016E-23	0.5	
6374.0503	6374.05	6.383E-25	2.39	
6374.1551	6374.155	2.234E-24	0.76	
6374.2834	6374.2838	1.028E-23	0.71	
6374.3005	6374.3	1.498E-24	1.79	
6374.3691	6374.37	6.199E-25	1.8	
6374.6466	6374.6467	2.390E-24	0.58	
6374.7256	6374.7262	4.555E-25	1.99	
6374.7592	6374.7592	5.990E-24	0.71	
6374.8301	6374.8301	3.560E-25	7.1	
6374.8504	6374.8504	5.051E-24	0.82	
6374.8846	6374.8846	8.077E-24	0.71	
6374.9446	6374.9446	1.535E-23	0.71	
6374.9913	6374.9913	1.534E-23	0.71	
6375.0351	6375.0351	2.799E-24	1.39	
6375.0541	6375.0541	1.577E-24	2.08	
6375.0824	6375.0824	9.513E-25	2.03	
6375.1563	6375.1564	2.438E-24	0.7	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6375.2074	6375.2074	1.898E-24	0.83	
6375.3003	6375.3003	2.126E-23	0.5	
6375.3763	6375.3763	4.787E-25	3.99	
6375.4168	6375.4168	1.111E-24	1.91	
6375.5212	6375.5212	4.578E-24	0.74	
6375.5922	6375.5924	4.922E-24	0.71	
6375.6919	6375.692	3.744E-25	4.99	
6375.7333	6375.7333	1.804E-24	1.31	
6375.803	6375.803	1.744E-23	0.5	
6375.9427	6375.9427	5.094E-25	3.74	
6376.1663	6376.1663	9.664E-24	0.71	
6376.2862	6376.2862	1.773E-24	0.97	
6376.4222	6376.4222	3.866E-25	2.81	
6376.4667	6376.4674	7.019E-24	0.5	
6376.5835	6376.5835	1.163E-24	1.06	
6376.6295	6376.6292	6.350E-25	1.71	
6376.728	6376.728	1.915E-24	1.25	
6376.7643	6376.7643	4.505E-24	0.74	
6376.931	6376.93	2.105E-24	1.18	
6376.9826	6376.983	2.410E-23	0.71	
6377.0541	6377.054	5.542E-24	0.84	
6377.0734	6377.0734	6.002E-24	0.8	
6377.0918	6377.0918	4.112E-24	1.07	
6377.138	6377.14	8.349E-24	0.5	
6377.2743	6377.276	4.378E-24	0.55	
6377.2975	6377.3003	3.480E-24	0.66	
6377.3406	6377.3386	5.986E-24	0.51	
6377.3797	6377.3752	2.491E-24	0.71	
6377.4488	6377.4536	1.049E-24	1.13	
6377.7515	6377.7516	2.999E-23	0.58	
6377.8406	6377.8398	9.659E-24	0.41	
6378.1195	6378.119	6.076E-25	1.63	
6378.1983	6378.1983	4.971E-25	1.94	
6378.2313	6378.2307	2.019E-24	0.7	
6378.4967	6378.4967	1.718E-25	2.74	
6378.5667	6378.5668	2.999E-24	0.41	
6378.6323	6378.6327	2.342E-24	0.44	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6378.6763	6378.6763	3.253E-25	1.67	
6378.714	6378.714	2.087E-24	0.58	
6378.7871	6378.7871	8.653E-25	0.78	
6378.8478	6378.8478	5.953E-25	1	
6378.8963	6378.8963	2.639E-25	1.88	
6379.0858	6379.0862	3.294E-25	1.02	
6379.3008	6379.3013	6.359E-25	0.64	
6379.567	6379.567	5.634E-24	0.58	
6379.585	6379.585	2.154E-24	0.76	
6379.7867	6379.7865	1.604E-24	0.46	
6379.8757	6379.8757	2.516E-25	1.73	
6379.9048	6379.905	4.910E-25	1.03	
6380.0308	6380.0308	1.350E-24	0.88	
6380.1482	6380.1482	1.337E-24	0.88	
6380.2018	6380.2018	1.252E-24	0.92	
6380.326	6380.326	6.718E-24	0.58	
6380.4151	6380.4155	2.643E-23	0.41	
6380.4869	6380.4867	1.371E-24	0.76	
6380.5104	6380.5097	1.656E-24	0.66	
6380.7114	6380.7114	4.429E-24	0.58	
6380.7612	6380.7612	1.411E-24	1.15	
6380.8686	6380.8687	1.215E-24	1.29	
6380.9011	6380.9	6.257E-25	2.21	
6380.9464	6380.946	2.080E-24	0.88	
6381.0409	6381.0409	2.123E-24	0.85	
6381.0747	6381.0747	7.449E-24	0.41	
6381.0946	6381.0962	1.685E-23	0.41	
6381.1357	6381.1368	4.612E-24	0.41	
6381.3802	6381.3802	9.219E-24	0.58	
6381.448	6381.448	5.122E-24	0.58	
6381.4858	6381.4858	2.760E-24	0.58	
6381.7924	6381.7924	5.152E-25	1.78	
6382.04	6382.041	5.887E-24	0.58	
6382.0878	6382.089	1.836E-23	0.58	
6382.2223	6382.2223	3.710E-24	0.59	
6382.335	6382.335	4.109E-25	2.95	
6382.431	6382.431	4.457E-25	1.14	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6382.5584	6382.5617	2.222E-24	0.63	
6382.7247	6382.7247	1.569E-24	2.84	
6382.8636	6382.8636	1.839E-25	3.25	
6382.8924	6382.8924	1.778E-25	3.38	
6382.9215	6382.9215	8.827E-25	0.96	
6383.0039	6383.0039	5.823E-25	1.26	
6383.0347	6383.0347	1.577E-24	0.57	
6383.0684	6383.0684	4.107E-25	1.64	
6383.1077	6383.1076	8.091E-25	0.85	
6383.1888	6383.1892	1.403E-24	0.61	
6383.219	6383.2191	5.564E-24	0.5	
6383.2491	6383.2489	1.969E-24	0.59	
6383.2713	6383.2713	2.795E-24	0.86	
6383.3362	6383.3363	1.465E-24	1.07	
6383.3662	6383.3662	2.452E-24	0.79	
6383.5875	6383.5876	3.077E-24	0.71	
6383.6395	6383.6401	3.352E-24	0.87	
6383.6563	6383.6563	8.547E-24	0.52	
6383.7198	6383.7212	7.067E-25	1.3	
6383.8003	6383.8004	8.809E-24	0.5	
6383.8347	6383.8346	7.924E-24	0.5	
6383.9127	6383.9127	2.818E-25	4.37	
6383.9416	6383.9416	4.546E-24	0.71	
6384.003	6384.003	4.283E-24	0.71	
6384.026	6384.026	8.002E-24	0.71	
6384.0673	6384.0673	1.348E-24	1.15	
6384.1715	6384.1715	4.473E-25	2.73	
6384.2267	6384.2267	8.657E-24	0.71	
6384.3525	6384.3525	4.595E-25	2.73	
6384.3944	6384.3944	8.825E-24	0.5	
6384.4372	6384.4372	8.580E-24	0.5	
6384.4682	6384.4686	3.201E-24	0.66	
6384.486	6384.4864	2.798E-24	0.75	
6384.5932	6384.5932	5.673E-24	0.71	
6384.6603	6384.6603	1.048E-24	1.05	
6384.7292	6384.7292	2.095E-24	0.88	
6384.7497	6384.75	6.004E-25	2.2	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6384.9144	6384.9145	1.317E-24	0.91	
6384.988	6384.99	1.801E-24	0.58	
6385.0622	6385.063	8.801E-25	0.93	
6385.1086	6385.1086	2.309E-24	0.52	
6385.2114	6385.2108	5.591E-24	0.71	
6385.3824	6385.3824	3.552E-25	3.14	
6385.4483	6385.4483	3.307E-24	0.71	
6385.4881	6385.488	3.674E-25	3.06	
6385.6979	6385.6979	1.240E-24	1.17	
6385.7234	6385.7289	3.297E-23	0.5	
6385.7998	6385.7996	1.635E-24	1.42	
6385.8173	6385.817	6.495E-24	0.55	
6385.9195	6385.9235	1.322E-23	0.71	
6385.9643	6385.9643	3.123E-25	4.99	
6386.0082	6386.0082	1.715E-25	8.49	
6386.1736	6386.1736	4.899E-25	3.2	
6386.2206	6386.2206	4.777E-25	3.27	
6386.388	6386.39	7.023E-24	0.5	
6386.4284	6386.428	2.448E-23	0.5	
6386.4669	6386.4715	3.340E-23	0.5	
6386.6607	6386.6607	1.898E-24	1.19	
6386.8068	6386.8102	2.229E-24	1.17	
6386.8323	6386.8323	7.108E-24	0.71	
6386.8684	6386.8692	2.376E-24	1.17	
6386.8923	6386.8923	3.649E-24	0.89	
6386.9592	6386.96	6.128E-25	1.68	
6387.0472	6387.0472	5.795E-24	0.5	
6387.0725	6387.073	6.037E-24	0.5	
6387.103	6387.104	1.428E-24	0.9	
6387.2103	6387.2103	1.062E-23	0.79	
6387.2239	6387.2239	2.657E-24	2.13	
6387.2946	6387.2946	4.769E-24	0.71	
6387.384	6387.384	6.306E-25	2	
6387.4304	6387.4304	1.420E-24	4.23	
6387.4429	6387.4429	7.236E-24	1.11	
6387.6558	6387.6562	3.746E-24	0.53	
6387.6755	6387.676	1.458E-24	0.92	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6387.8022	6387.8052	5.081E-25	2.05	
6388.0687	6388.0687	4.102E-25	2.47	
6388.1739	6388.1743	9.254E-25	1	
6388.203	6388.203	3.096E-24	0.51	
6388.3234	6388.3239	2.853E-24	0.51	
6388.4014	6388.4001	1.592E-25	6.4	
6388.4324	6388.4323	4.087E-24	0.5	
6388.4549	6388.4544	1.177E-23	0.5	
6388.4712	6388.4709	1.111E-24	2.85	
6388.5682	6388.5673	3.593E-24	0.71	
6388.6051	6388.6035	1.679E-24	1.01	
6389.2129	6389.2144	2.508E-24	0.7	
6389.2438	6389.2442	2.433E-24	0.71	
6389.3092	6389.3092	1.441E-23	0.71	
6389.326	6389.326	7.402E-25	4.63	
6389.4359	6389.4359	3.578E-25	3.52	
6389.4802	6389.4802	1.962E-24	0.94	
6389.5585	6389.5585	4.997E-24	0.71	
6389.6061	6389.6061	6.415E-25	2.71	
6389.6257	6389.6257	1.456E-24	1.39	
6389.6644	6389.6644	1.456E-24	1.13	
6389.7116	6389.7116	3.331E-25	3.75	
6389.7592	6389.7592	2.591E-25	4.72	
6389.8092	6389.8092	1.407E-24	1.16	
6389.8846	6389.8846	7.896E-25	2.27	
6389.9046	6389.9051	6.040E-24	0.5	
6389.9384	6389.9388	5.273E-24	0.71	
6389.9534	6389.9534	1.653E-24	2.29	
6390.3827	6390.3832	1.405E-23	0.71	
6390.4263	6390.4268	6.673E-24	0.71	
6390.537	6390.536	4.221E-24	0.51	
6390.5744	6390.5754	1.094E-23	0.5	
6390.6127	6390.613	9.361E-25	1.18	
6390.7734	6390.7734	2.896E-24	0.71	
6391.0048	6391.0048	9.761E-24	0.71	
6391.1199	6391.1199	2.539E-24	0.74	
6391.1568	6391.1568	3.393E-24	0.5	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6391.2506	6391.2506	8.187E-24	0.5	
6391.2825	6391.2825	4.311E-25	2.02	
6391.3445	6391.3445	1.872E-24	0.71	
6391.3738	6391.3738	5.419E-25	1.56	
6391.4006	6391.4006	1.737E-24	0.73	
6391.5227	6391.5227	4.237E-24	0.71	
6391.6191	6391.6191	2.217E-25	3.86	
6391.6408	6391.6408	4.348E-24	0.71	
6391.6622	6391.6622	3.325E-25	2.72	
6391.7429	6391.7429	2.057E-24	0.71	
6392.0345	6392.0345	4.024E-24	0.99	
6392.0706	6392.0706	1.181E-24	2.7	
6392.0954	6392.0925	9.992E-24	0.71	
6392.1194	6392.1194	5.907E-25	5.72	
6392.1526	6392.1526	6.153E-25	4.95	
6392.3013	6392.3013	1.858E-24	1.71	
6392.3917	6392.391	2.129E-24	1.54	
6392.4532	6392.453	4.803E-24	0.67	
6392.4967	6392.4971	3.925E-24	1.31	
6392.5176	6392.5167	4.939E-23	0.5	
6392.5682	6392.5689	1.322E-23	0.5	
6392.6515	6392.6515	7.571E-24	0.8	
6392.7929	6392.7929	1.708E-24	2.2	
6392.8581	6392.8581	1.470E-23	0.71	
6392.9394	6392.9394	7.214E-24	0.81	
6393.0004	6393	1.225E-23	0.71	
6393.09	6393.09	1.438E-24	2.56	
6393.2485	6393.2485	5.406E-23	0.71	
6393.3475	6393.3445	2.058E-23	0.71	
6393.4205	6393.418	2.642E-24	1.13	
6393.5444	6393.5408	1.401E-24	1.82	
6393.6509	6393.6497	1.246E-23	0.71	
6393.674	6393.6729	1.732E-24	1.87	
6393.6937	6393.6934	1.031E-23	0.71	
6393.783	6393.7836	3.088E-24	0.66	
6393.8015	6393.8001	1.262E-24	1.22	
6393.8404	6393.8359	3.200E-24	0.58	



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6393.8817	6393.8805	1.033E-23	0.71	
6394.0532	6394.0523	1.178E-24	1.23	
6394.1023	6394.1017	1.203E-23	0.71	
6394.1496	6394.1469	3.842E-24	0.71	
6394.1826	6394.1798	1.927E-24	0.89	
6394.2276	6394.2256	2.019E-23	0.71	
6394.2523	6394.2497	1.166E-24	1.33	
6394.2814	6394.2785	6.383E-25	2.13	
6394.3655	6394.3639	7.107E-24	0.71	
6394.4228	6394.4225	2.991E-24	0.53	
6394.4805	6394.4791	1.496E-24	0.79	
6394.8585	6394.8585	1.014E-23	0.71	
6394.9056	6394.9056	2.760E-23	0.71	
6394.9774	6394.9762	1.892E-24	0.86	
6395.1496	6395.1496	3.534E-24	0.59	
6395.1895	6395.1895	1.482E-24	1.96	
6395.3232	6395.3232	3.907E-24	0.96	
6395.3685	6395.3685	1.752E-24	1.71	
6395.4153	6395.4153	2.548E-24	1.29	
6395.4747	6395.4747	2.230E-23	0.71	
6395.5626	6395.5626	5.144E-25	4.96	
6395.6161	6395.6164	3.509E-24	0.65	
6395.7387	6395.7404	9.008E-24	0.5	
6395.8927	6395.8927	3.491E-23	0.71	
6396.0985	6396.0985	7.587E-24	0.71	
6396.1438	6396.1438	8.799E-24	0.71	
6396.1615	6396.1615	5.568E-24	0.88	
6396.187	6396.187	2.691E-23	0.71	
6396.2229	6396.2229	2.240E-24	1.18	
6396.2638	6396.2638	1.613E-23	0.5	
6396.3144	6396.3152	8.900E-24	0.5	
6396.5063	6396.5063	3.128E-24	0.89	
6396.5428	6396.5428	2.802E-23	0.71	
6396.5614	6396.5614	3.984E-24	1.02	
6396.609	6396.609	8.822E-24	0.71	
6396.8256	6396.8256	2.224E-24	2.13	
6396.9304	6396.9274	7.692E-25	1.78	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6397.0621	6397.0621	1.026E-24	1.36	
6397.1653	6397.1623	4.029E-25	3.61	
6397.1822	6397.1822	1.380E-24	1.29	
6397.2136	6397.2136	6.593E-24	0.71	
6397.4355	6397.4355	4.029E-25	2.85	
6397.6108	6397.6078	1.995E-24	0.68	
6397.7086	6397.7056	3.830E-24	0.77	
6397.7277	6397.7227	7.891E-24	0.71	
6397.7729	6397.772	8.781E-24	0.71	
6397.8964	6397.8934	1.203E-23	0.71	
6397.9396	6397.938	5.513E-24	0.71	
6398.0732	6398.073	1.793E-24	0.91	
6398.1998	6398.2016	4.086E-24	0.71	
6398.2604	6398.261	1.364E-23	0.5	
6398.4869	6398.4911	7.987E-24	0.71	
6398.5159	6398.5201	6.331E-25	2.85	
6398.5684	6398.5726	1.960E-24	1.14	
6398.6577	6398.6619	1.793E-23	0.71	
6398.7039	6398.7039	5.722E-25	5.37	
6398.8446	6398.8478	1.354E-23	0.71	
6398.8952	6398.8946	8.044E-25	1.39	
6399.0684	6399.068	1.811E-24	1.01	
6399.1863	6399.1863	1.398E-24	1.72	
6399.2301	6399.2297	8.606E-24	0.71	
6399.2709	6399.2706	1.409E-23	0.71	
6399.3161	6399.3151	8.387E-25	1.84	
6399.3675	6399.3696	9.967E-25	2.36	
6399.3767	6399.3798	1.896E-24	1.53	
6399.455	6399.4567	7.901E-25	2.71	
6399.5131	6399.5127	4.589E-25	1.98	
6399.5685	6399.5733	4.354E-24	0.5	
6399.5903	6399.5922	2.865E-24	0.59	
6399.6608	6399.66	1.251E-24	1.27	
6399.7063	6399.7057	1.846E-24	0.95	
6399.7727	6399.7727	2.332E-24	0.85	
6399.7997	6399.7991	7.396E-24	0.71	
6399.8235	6399.8229	5.963E-24	0.71	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6399.9542	6399.9536	8.113E-24	0.71	
6399.9913	6399.9907	2.757E-24	0.76	
6400.0369	6400.0364	1.166E-24	1.98	
6400.0544	6400.0538	1.785E-24	1.42	
6400.4562	6400.4548	6.062E-25	1.83	
6400.5848	6400.584	3.031E-25	3.29	
6400.6704	6400.6677	1.079E-24	1.44	
6400.7027	6400.7027	1.056E-23	0.71	
6400.8454	6400.8458	3.734E-24	0.5	
6400.901	6400.9022	1.009E-24	1	
6401.1708	6401.1708	3.513E-24	0.76	
6401.1997	6401.2	3.107E-23	0.71	
6401.2579	6401.26	2.483E-24	0.95	
6401.2829	6401.2823	1.708E-24	1.22	
6401.3945	6401.3945	1.461E-23	0.71	
6401.5542	6401.5543	9.132E-24	0.5	
6401.6197	6401.6192	1.185E-24	1.48	
6401.6565	6401.6566	1.318E-24	1.37	
6401.8151	6401.8152	3.689E-24	0.71	
6401.8646	6401.8647	8.055E-24	0.71	
6401.8954	6401.8947	2.659E-23	0.71	
6401.9547	6401.9548	2.939E-24	0.81	
6402.0809	6402.0821	1.767E-23	0.71	
6402.2802	6402.2806	4.855E-24	0.71	
6402.3112	6402.3116	1.587E-23	0.71	
6402.5058	6402.5058	5.792E-25	2.26	
6402.5466	6402.547	8.688E-25	1.68	
6402.5807	6402.5811	1.407E-23	0.58	
6402.6428	6402.6428	8.929E-25	1.57	
6402.7195	6402.7201	2.003E-24	0.89	
6402.7515	6402.7523	2.276E-24	0.49	
6402.7993	6402.7998	1.518E-24	0.7	
6402.884	6402.8841	1.769E-24	0.54	
6402.9226	6402.9227	1.360E-24	0.77	
6403.0189	6403.019	6.356E-24	0.58	
6403.0518	6403.0518	5.538E-25	1.47	
6403.2997	6403.2997	5.056E-24	0.9	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6403.3171	6403.3172	5.971E-24	0.58	
6403.398	6403.4072	2.611E-24	0.51	
6403.4763	6403.4837	3.850E-24	0.47	
6403.5053	6403.5053	4.443E-25	4.04	
6403.568	6403.5663	1.693E-24	1.43	
6403.645	6403.6429	6.364E-25	3.35	
6403.6977	6403.6994	2.614E-23	0.58	
6403.7139	6403.714	2.798E-24	1.15	
6403.8354	6403.835	1.897E-24	1.3	
6403.9103	6403.9103	7.205E-25	2.97	
6403.9679	6403.97	7.553E-24	0.58	
6404.0018	6404.0018	1.406E-23	0.58	
6404.0527	6404.0532	8.505E-24	0.41	
6404.0835	6404.0835	1.129E-24	1.78	
6404.0993	6404.107	2.895E-23	0.41	
6404.1275	6404.1275	1.213E-24	2.07	
6404.1994	6404.1996	8.630E-25	1.73	
6404.2692	6404.2703	1.270E-24	1.27	
6404.5389	6404.54	4.039E-24	0.6	
6404.6355	6404.635	1.274E-23	0.58	
6404.6756	6404.6751	1.837E-24	0.72	
6404.7171	6404.7137	4.718E-24	0.46	
6405.0075	6405.0033	3.034E-24	0.88	
6405.083	6405.0856	1.183E-24	1.57	
6405.112	6405.1149	3.106E-25	4.36	
6405.2456	6405.2521	1.433E-25	9.05	
6405.3765	6405.3764	7.384E-25	1.52	
6405.4799	6405.4799	4.130E-24	0.64	
6405.5206	6405.5206	2.440E-24	0.88	
6405.5945	6405.5945	6.272E-24	0.83	
6405.61	6405.61	1.250E-23	0.58	
6405.6495	6405.6495	1.160E-23	0.58	
6405.8565	6405.8565	3.755E-23	0.58	
6405.877	6405.877	1.371E-23	0.58	
6405.9447	6405.9438	5.465E-24	0.49	
6405.9724	6405.9724	1.119E-24	2	
6406.003	6405.9978	4.254E-23	0.41	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6406.0524	6406.0528	3.801E-24	1.11	
6406.2514	6406.2498	1.057E-24	3.21	
6406.4137	6406.4098	1.899E-23	0.5	
6406.4341	6406.4338	1.185E-23	0.58	
6406.4915	6406.4918	2.031E-23	0.58	
6406.5828	6406.5818	4.492E-24	0.58	
6406.6346	6406.6353	5.092E-24	0.54	
6406.8021	6406.8032	3.857E-23	0.58	
6406.9121	6406.9132	5.999E-23	0.58	
6406.9269	6406.9269	9.316E-24	1.14	
6407.0303	6407.0303	2.526E-24	2.26	
6407.1463	6407.1463	5.206E-24	0.58	
6407.3064	6407.3064	9.438E-25	1.4	
6407.3396	6407.3406	2.745E-24	0.5	
6407.4274	6407.4274	1.456E-24	0.68	
6407.5075	6407.5075	1.526E-23	0.45	
6407.6137	6407.6137	6.364E-24	0.45	
6407.664	6407.664	6.340E-25	1.27	
6407.7089	6407.7089	2.008E-24	1.53	
6407.7681	6407.7681	2.935E-25	2.47	
6407.9067	6407.907	1.385E-24	0.52	
6407.9574	6407.9579	1.097E-24	0.61	
6408.0264	6408.022	1.357E-23	0.45	
6408.1067	6408.108	1.191E-23	0.45	
6408.127	6408.125	2.005E-23	0.45	
6408.1453	6408.1435	1.836E-23	0.45	
6408.2586	6408.2555	5.787E-24	0.45	
6408.2901	6408.2871	4.501E-24	0.45	
6408.381	6408.3767	8.535E-25	1.12	
6408.4652	6408.4632	1.278E-23	0.45	
6408.5248	6408.524	2.140E-23	0.45	
6408.5485	6408.545	7.015E-25	1.53	
6408.6865	6408.6865	1.303E-23	0.45	
6408.74	6408.74	6.441E-24	0.47	
6408.9016	6408.9031	6.725E-25	1.25	
6408.9415	6408.9401	2.862E-24	0.42	
6409.1436	6409.1423	4.136E-25	1.92	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6409.2508	6409.2499	1.063E-23	0.32	
6409.2972	6409.298	8.352E-25	1.24	
6409.3252	6409.3283	1.136E-24	1.26	
6409.3427	6409.3415	9.830E-24	0.32	
6409.3819	6409.3817	1.670E-24	0.7	
6409.4043	6409.4043	6.236E-24	0.45	
6409.5102	6409.5061	1.125E-24	0.96	
6409.5797	6409.58	3.910E-24	0.45	
6409.6401	6409.6406	1.181E-24	0.93	
6409.7568	6409.7549	4.790E-25	1.96	
6409.8382	6409.8387	1.227E-23	0.45	
6409.902	6409.902	8.199E-24	0.45	
6410.0212	6410.0204	8.634E-24	0.45	
6410.0483	6410.0484	9.023E-25	1.21	
6410.1625	6410.1625	6.428E-24	0.45	
6410.2533	6410.2524	4.108E-24	0.32	
6410.2816	6410.2816	2.016E-24	0.66	
6410.3138	6410.3138	9.122E-24	0.45	
6410.3537	6410.3537	5.680E-24	0.45	
6410.3969	6410.3969	2.283E-24	0.61	
6410.4368	6410.4368	1.804E-24	0.71	
6410.5299	6410.5299	9.545E-24	0.45	
6410.5682	6410.5682	5.112E-24	0.45	
6410.662	6410.662	4.845E-24	0.45	
6410.6871	6410.6871	2.562E-25	3.8	
6410.7477	6410.7477	4.789E-25	2.04	
6410.8791	6410.8795	8.394E-24	0.32	
6410.9002	6410.903	1.183E-24	0.75	
6410.951	6410.9497	5.752E-24	0.45	
6411.0513	6411.0507	4.347E-25	1.66	
6411.15	6411.1494	3.455E-25	2.03	
6411.2968	6411.2962	1.371E-24	0.69	
6411.3355	6411.3355	1.371E-24	0.77	
6411.3541	6411.3535	2.909E-24	0.51	
6411.4557	6411.4591	3.901E-25	1.83	
6411.7377	6411.7373	4.964E-23	0.45	
6411.7692	6411.7689	1.148E-24	2.77	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6411.8343	6411.8342	5.241E-24	0.75	
6411.9164	6411.9153	5.977E-24	0.69	
6412.0349	6412.0316	1.472E-23	0.45	
6412.1163	6412.1129	2.255E-23	0.45	
6412.1596	6412.159	1.023E-22	0.32	6412.1596
6412.2113	6412.2134	4.660E-24	0.6	
6412.2545	6412.2609	5.210E-24	0.75	
6412.2991	6412.301	1.086E-23	0.48	
6412.4419	6412.4439	2.226E-23	0.45	
6412.5085	6412.5106	2.533E-24	1.3	
6412.6249	6412.6271	2.622E-24	1.26	
6412.7515	6412.7534	9.171E-24	0.53	
6412.9113	6412.9075	3.108E-24	0.47	
6412.9585	6412.9585	1.732E-23	0.45	
6413.0385	6413.04	9.710E-25	1.19	
6413.1722	6413.1719	4.911E-24	0.45	
6413.2935	6413.2952	3.013E-24	0.54	
6413.3845	6413.3883	5.391E-24	0.45	
6413.4115	6413.4153	9.152E-25	1.33	
6413.4924	6413.4927	1.149E-23	0.35	
6413.5045	6413.5091	2.389E-24	1.9	
6413.543	6413.543	4.253E-24	0.55	
6413.6673	6413.6663	8.372E-25	1.89	
6413.7535	6413.7526	2.925E-24	0.7	
6413.8141	6413.8131	2.534E-24	0.78	
6413.8508	6413.8495	1.306E-24	1.3	
6414.0281	6414.0267	2.091E-23	0.45	
6414.0462	6414.0444	2.902E-24	1.34	
6414.1082	6414.1077	2.223E-23	0.45	
6414.1947	6414.193	4.833E-23	0.45	
6414.2285	6414.2285	2.338E-23	0.45	
6414.2671	6414.2671	2.153E-23	0.45	
6414.3001	6414.3	1.932E-23	0.45	
6414.3497	6414.3497	8.206E-24	0.45	
6414.3955	6414.3955	3.964E-24	0.58	
6414.4708	6414.4698	7.927E-25	1.98	
6414.5713	6414.5713	5.527E-24	0.48	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6414.6152	6414.615	1.608E-24	1.09	
6414.7234	6414.7234	4.031E-24	0.57	
6414.839	6414.839	2.598E-23	0.32	
6414.8723	6414.8731	1.129E-24	2.66	
6414.9264	6414.9272	3.638E-23	0.45	
6414.9689	6414.9689	4.565E-23	0.45	
6415.0068	6415.0075	7.115E-23	0.45	
6415.0406	6415.0407	1.710E-24	2.12	
6415.0849	6415.0856	1.676E-24	1.77	
6415.1292	6415.1297	1.038E-23	0.5	
6415.2029	6415.2036	1.475E-23	0.45	
6415.3967	6415.3984	7.933E-24	0.68	
6415.4748	6415.4756	8.827E-24	0.55	
6415.6649	6415.6664	4.469E-25	1.97	
6415.7008	6415.7078	7.375E-25	1.28	
6415.799	6415.799	1.408E-24	0.8	
6415.8686	6415.869	2.536E-24	0.69	
6415.8867	6415.887	3.654E-24	0.55	
6415.987	6415.987	5.810E-25	1.56	
6416.1243	6416.124	1.363E-24	1.37	
6416.138	6416.138	9.682E-24	0.45	
6416.2582	6416.2582	1.120E-23	0.64	
6416.274	6416.2741	7.446E-24	0.86	
6416.4244	6416.4244	3.197E-24	0.75	
6416.4918	6416.492	1.699E-24	1.21	
6416.5867	6416.5867	9.298E-23	0.45	
6416.6401	6416.6401	1.274E-24	1.6	
6416.8831	6416.8803	2.439E-24	0.58	
6416.9087	6416.9061	1.445E-23	0.45	
6417.1163	6417.1137	2.983E-23	0.45	
6417.2541	6417.2519	1.006E-23	0.45	
6417.3272	6417.3251	6.656E-24	0.45	
6417.5282	6417.5325	8.768E-24	0.45	
6417.5771	6417.5774	2.583E-23	0.45	
6417.5969	6417.5981	6.028E-24	0.49	
6417.6226	6417.6226	4.026E-25	3.01	
6417.7982	6417.8023	5.782E-24	0.45	



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6417.9277	6417.932	2.009E-23	0.45	
6418.0164	6418.0181	3.165E-24	0.59	
6418.0384	6418.0384	9.842E-25	1.39	
6418.1671	6418.1654	1.444E-24	0.67	
6418.304	6418.304	1.354E-24	0.75	
6418.3273	6418.3273	7.275E-25	1.22	
6418.3659	6418.3659	3.100E-24	0.45	
6418.4046	6418.4046	5.484E-24	0.45	
6418.5238	6418.5238	4.029E-25	1.8	
6418.5691	6418.5691	3.246E-25	2.55	
6418.5933	6418.5933	6.906E-24	0.45	
6418.6576	6418.6556	7.947E-25	1.03	
6418.6962	6418.6964	1.298E-24	0.71	
6418.7332	6418.7332	2.832E-24	0.46	
6418.7633	6418.7633	1.768E-24	0.59	
6418.9118	6418.9118	7.948E-25	0.94	
6419.0136	6419.0136	6.605E-25	1.36	
6419.0694	6419.0694	3.526E-24	0.45	
6419.2069	6419.2069	1.455E-25	4.26	
6419.2618	6419.2618	7.142E-24	0.45	
6419.2824	6419.2824	5.597E-25	2.12	
6419.314	6419.314	8.508E-25	2.01	
6419.3316	6419.3316	6.896E-24	0.47	
6419.5147	6419.5147	1.243E-24	1.1	
6419.541	6419.541	3.472E-24	0.54	
6419.7315	6419.7315	2.867E-24	0.59	
6419.7665	6419.7665	2.699E-24	0.75	
6419.824	6419.824	5.846E-24	0.45	
6419.8483	6419.8483	8.623E-25	1.52	
6419.9917	6419.9917	2.105E-24	0.81	
6420.0386	6420.0386	5.151E-25	2.73	
6420.0861	6420.0861	6.603E-23	0.5	
6420.1179	6420.1179	7.726E-25	2.22	
6420.2336	6420.2344	1.020E-24	2.41	
6420.3368	6420.337	5.459E-24	1.52	
6420.3504	6420.3504	1.837E-23	0.61	
6420.4221	6420.4222	4.520E-23	0.45	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6420.5394	6420.5394	1.401E-24	1.82	
6420.5882	6420.5882	4.876E-24	0.68	
6420.6263	6420.6263	2.040E-24	1.33	
6420.6586	6420.6586	6.479E-24	0.57	
6420.7132	6420.714	3.778E-23	0.45	
6420.8159	6420.816	4.070E-24	0.45	
6420.8481	6420.8482	2.074E-24	0.64	
6420.9059	6420.9063	2.922E-23	0.45	
6420.9432	6420.944	1.019E-23	0.45	
6420.9853	6420.9853	7.288E-25	1.42	
6421.0909	6421.091	1.954E-23	0.45	
6421.1072	6421.1078	3.046E-23	0.45	
6421.2982	6421.3023	9.978E-25	1.07	
6421.3619	6421.362	1.368E-24	0.84	
6421.599	6421.6025	4.608E-24	0.52	
6421.7194	6421.721	6.705E-24	0.45	
6421.7665	6421.767	3.013E-23	0.45	
6421.9373	6421.937	1.697E-23	0.45	
6421.9996	6421.9958	6.391E-25	2.29	
6422.1204	6422.1205	4.007E-24	0.37	
6422.1523	6422.152	8.652E-24	0.45	
6422.2159	6422.2159	6.486E-24	0.45	
6422.3056	6422.3042	1.739E-24	0.82	
6422.3718	6422.3704	2.413E-24	0.65	
6422.4733	6422.4725	3.510E-23	0.45	
6422.5368	6422.5375	6.172E-25	1.93	
6422.6026	6422.605	1.346E-24	0.93	
6422.6361	6422.639	5.228E-24	0.48	
6422.6566	6422.6591	2.936E-23	0.41	
6422.8774	6422.8766	2.549E-24	0.55	
6422.9281	6422.9287	2.504E-24	0.56	
6423.0311	6423.0302	2.459E-24	0.56	
6423.1109	6423.111	2.874E-24	0.51	
6423.2161	6423.2163	1.216E-23	0.41	
6423.2618	6423.2614	3.679E-23	0.41	
6423.3265	6423.33	8.488E-24	0.55	
6423.3411	6423.3391	2.186E-23	0.41	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6423.3663	6423.37	3.772E-24	0.48	
6423.5087	6423.5104	2.695E-25	3.23	
6423.6458	6423.646	2.949E-23	0.41	
6423.7236	6423.7251	2.212E-24	0.6	
6423.7995	6423.7995	9.994E-24	0.41	
6423.9157	6423.916	1.527E-24	0.78	
6423.953	6423.953	4.020E-24	0.43	
6423.9939	6423.994	1.303E-24	0.88	
6424.0869	6424.087	3.941E-24	0.32	
6424.1689	6424.169	2.113E-24	0.79	
6424.2105	6424.2105	2.472E-24	0.65	
6424.2584	6424.2584	4.269E-23	0.41	
6424.2941	6424.2941	3.338E-24	0.57	
6424.341	6424.342	4.383E-24	0.45	
6424.4396	6424.44	1.551E-24	0.92	
6424.5014	6424.501	1.549E-23	0.41	
6424.5325	6424.5342	6.833E-24	0.42	
6424.552	6424.552	1.337E-24	1.31	
6424.6443	6424.6472	1.124E-24	1.14	
6424.7554	6424.7534	1.871E-23	0.41	
6424.8381	6424.8373	3.946E-24	0.67	
6425.0237	6425.0237	8.893E-24	0.41	
6425.1151	6425.115	3.858E-23	0.41	
6425.1361	6425.136	3.739E-23	0.41	
6425.2535	6425.2527	3.334E-23	0.41	
6425.2925	6425.2925	7.386E-24	0.45	
6425.3678	6425.3678	8.984E-23	0.41	6425.3681
6425.5295	6425.5295	4.873E-23	0.41	
6425.5576	6425.5576	7.749E-24	0.41	
6425.6071	6425.607	5.781E-24	0.42	
6425.9295	6425.9295	2.800E-24	0.76	
6425.9605	6425.96	5.042E-23	0.41	
6425.9757	6425.976	1.202E-23	0.59	
6426.0355	6426.0355	1.293E-24	1.19	
6426.1392	6426.14	4.035E-23	0.41	
6426.2155	6426.2162	2.836E-24	0.85	
6426.2679	6426.2686	4.212E-23	0.41	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6426.3699	6426.37	5.073E-23	0.41	
6426.3823	6426.3823	4.300E-23	0.42	
6426.5091	6426.509	1.378E-23	0.45	
6426.5326	6426.5326	2.857E-24	1.01	
6426.7841	6426.784	1.230E-23	0.41	
6426.7844	6426.7844	1.242E-23	0.41	
6426.8534	6426.8534	3.578E-24	0.77	
6426.9096	6426.91	4.355E-23	0.41	
6426.9286	6426.929	1.452E-23	0.45	
6426.9976	6427	4.500E-24	0.67	
6427.0328	6427.0328	3.483E-23	0.41	
6427.2096	6427.21	1.519E-24	1.51	
6427.2599	6427.26	1.744E-24	1.34	
6427.3547	6427.3547	2.193E-23	0.41	
6427.3963	6427.3963	2.149E-23	0.41	
6427.4352	6427.4352	7.026E-24	0.33	
6427.5152	6427.5149	7.865E-23	0.41	
6427.586	6427.5862	2.690E-24	0.82	
6427.6706	6427.6708	5.448E-23	0.41	
6427.7327	6427.7338	1.261E-24	1.51	
6427.8081	6427.8084	1.014E-23	0.41	
6427.8347	6427.8349	2.518E-23	0.41	
6427.9036	6427.9038	5.222E-24	0.52	
6427.9981	6427.9985	2.420E-24	1.4	
6428.0154	6428.0154	1.414E-23	0.41	
6428.0748	6428.0717	8.441E-25	2.14	
6428.2454	6428.2451	4.437E-24	0.57	
6428.2961	6428.2957	9.493E-24	0.41	
6428.3265	6428.3265	6.567E-23	0.41	
6428.5352	6428.5352	5.676E-24	0.51	
6428.5634	6428.5634	1.486E-24	1.35	
6428.5988	6428.6015	2.838E-24	1.87	
6428.6134	6428.6136	4.617E-24	1.24	
6428.6694	6428.6709	1.227E-24	1.53	
6428.7939	6428.794	1.275E-23	0.41	
6428.8574	6428.8574	4.393E-24	0.52	
6428.9073	6428.91	6.832E-23	0.41	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6428.9923	6428.9923	9.044E-24	0.41	
6429.1587	6429.16	7.772E-25	2.03	
6429.2178	6429.2178	2.445E-23	0.41	
6429.3882	6429.39	3.737E-23	0.29	
6429.4623	6429.462	1.749E-23	0.29	
6429.6225	6429.6222	1.520E-23	0.29	
6429.7178	6429.7178	3.216E-24	0.4	
6429.8192	6429.8171	4.118E-24	0.34	
6429.8544	6429.8545	5.947E-24	0.3	
6429.9091	6429.9085	1.061E-24	1.45	
6429.9934	6429.9932	6.029E-24	0.43	
6430.0448	6430.0467	6.399E-23	0.41	
6430.1541	6430.1555	1.761E-24	1.05	
6430.1807	6430.1801	7.452E-25	2.2	
6430.218	6430.218	8.355E-25	2.38	
6430.2923	6430.2919	1.746E-23	0.41	
6430.3197	6430.3196	1.379E-23	0.41	
6430.3931	6430.3931	3.739E-24	0.82	
6430.4379	6430.4374	6.348E-24	0.45	
6430.4736	6430.4736	6.642E-24	0.55	
6430.5761	6430.5771	1.638E-24	1.15	
6430.6419	6430.6414	6.683E-23	0.41	
6430.6658	6430.67	1.221E-23	0.41	
6430.6865	6430.6842	1.455E-23	0.41	
6430.7679	6430.7676	1.015E-23	0.41	
6430.817	6430.8233	1.084E-24	1.61	
6430.9147	6430.9153	7.458E-25	1.88	
6430.9432	6430.9438	7.345E-25	1.92	
6431.0188	6431.0197	7.398E-23	0.41	
6431.0407	6431.0404	5.480E-24	0.56	
6431.0992	6431.1017	1.672E-24	1.02	
6431.1236	6431.1242	8.463E-24	0.41	
6431.1928	6431.1935	1.820E-24	0.8	
6431.357	6431.3584	5.878E-24	0.39	
6431.3851	6431.3858	1.617E-24	0.91	
6431.4694	6431.47	1.594E-24	0.89	
6431.5214	6431.5209	4.454E-24	0.48	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6431.5444	6431.5445	8.386E-24	0.27	
6431.5853	6431.5853	1.233E-24	0.78	
6431.7107	6431.7107	4.422E-24	0.38	
6431.745	6431.7459	4.270E-23	0.38	
6431.7753	6431.7753	1.176E-24	1.12	
6431.9844	6431.9844	3.879E-24	0.45	
6432.004	6432.004	1.278E-24	0.95	
6432.0481	6432.0481	5.711E-24	0.38	
6432.0848	6432.0848	2.137E-24	0.65	
6432.1042	6432.1042	2.985E-24	0.52	
6432.1404	6432.1381	2.103E-23	0.38	6432.1381
6432.1601	6432.1601	5.100E-24	0.39	
6432.1828	6432.1828	5.926E-24	0.38	
6432.3108	6432.3071	6.673E-24	0.38	
6432.3556	6432.3576	9.275E-25	1.47	
6432.456	6432.4572	6.945E-24	0.38	
6432.5145	6432.5172	3.144E-24	0.61	
6432.5378	6432.5398	2.115E-24	0.81	
6432.5892	6432.5877	4.468E-24	0.46	
6432.7048	6432.7024	8.370E-25	1.8	
6432.7662	6432.765	2.918E-24	0.74	
6432.8035	6432.8061	8.615E-23	0.38	
6432.8223	6432.822	3.001E-23	0.38	
6432.8533	6432.8494	3.574E-24	0.58	
6432.9407	6432.9386	8.244E-23	0.38	6432.9417
6433.0231	6433.0231	9.503E-25	1.72	
6433.1027	6433.0994	1.980E-24	1.24	
6433.2499	6433.2491	5.215E-24	0.6	
6433.2795	6433.2779	5.532E-24	0.57	
6433.379	6433.3776	2.250E-24	1.2	
6433.4205	6433.421	6.366E-24	0.56	
6433.4698	6433.4689	8.357E-24	0.48	
6433.5186	6433.519	7.576E-25	3.22	
6433.5386	6433.5452	1.210E-24	2.09	
6433.6486	6433.6557	5.568E-24	0.89	
6433.697	6433.704	8.604E-24	0.6	
6433.8171	6433.8221	5.637E-23	0.38	6433.8196

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6433.843	6433.843	2.378E-24	1.49	
6433.8972	6433.9054	1.664E-24	1.85	
6434.0179	6434.0179	9.991E-23	0.38	
6434.0589	6434.0612	2.242E-24	1.78	
6434.1454	6434.145	2.479E-24	1.76	
6434.1696	6434.171	1.130E-23	0.53	
6434.2872	6434.2877	2.684E-24	0.53	
6434.4103	6434.41	1.314E-24	0.71	
6434.4382	6434.4381	1.676E-24	0.6	
6434.4963	6434.4963	1.456E-23	0.38	
6434.5114	6434.5115	4.597E-24	0.61	
6434.7097	6434.71	8.493E-25	0.98	
6434.8337	6434.834	9.127E-24	0.38	
6434.9138	6434.9152	2.447E-24	1.39	
6434.9467	6434.9499	5.369E-24	0.74	
6434.9838	6434.9865	5.573E-24	0.72	
6435.0363	6435.0405	1.626E-23	0.38	
6435.1029	6435.1029	2.039E-24	1.86	
6435.128	6435.1314	7.839E-23	0.38	
6435.2647	6435.2686	5.131E-24	0.76	
6435.3852	6435.3872	1.620E-22	0.38	
6435.4292	6435.4292	3.489E-24	1.07	
6435.5454	6435.545	1.202E-23	0.28	
6435.6189	6435.619	3.920E-24	0.57	
6435.6784	6435.6809	3.637E-24	0.72	
6435.7012	6435.6971	7.362E-23	0.38	
6435.7195	6435.72	2.844E-24	1.17	
6435.7695	6435.7701	2.731E-24	1.21	
6435.8005	6435.8012	2.538E-24	0.81	
6435.9285	6435.9272	1.179E-22	0.38	
6436.0133	6436.0133	5.314E-24	0.6	
6436.2838	6436.2824	1.145E-24	1.49	
6436.324	6436.324	1.406E-24	1.25	
6436.3585	6436.3594	1.837E-24	1.01	
6436.5071	6436.507	4.762E-24	0.52	
6436.5399	6436.54	2.437E-23	0.38	
6436.5678	6436.5678	9.638E-25	3.41	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6436.621	6436.621	8.504E-25	4.82	
6436.7165	6436.7165	7.257E-25	2.8	
6436.7753	6436.7753	7.552E-24	0.56	
6436.8267	6436.8267	1.882E-24	1.19	
6436.9196	6436.9175	3.745E-24	0.38	
6436.9636	6436.9636	5.447E-25	1.18	
6437.0005	6437.0005	3.359E-24	0.38	
6437.0454	6437.045	3.620E-24	0.41	
6437.0654	6437.065	1.782E-24	0.63	
6437.217	6437.2177	3.915E-24	0.38	
6437.3346	6437.3348	4.425E-24	0.4	
6437.3534	6437.353	1.827E-24	0.68	
6437.4318	6437.4326	7.081E-24	0.38	
6437.4496	6437.4501	2.769E-24	0.57	
6437.5264	6437.5264	6.795E-24	0.75	
6437.6376	6437.6376	6.171E-24	5.84	
6437.6527	6437.6527	1.600E-22	0.4	
6437.7255	6437.7256	1.429E-23	0.38	
6437.9763	6437.976	2.359E-24	1.16	
6438.2751	6438.275	2.610E-24	0.47	
6438.3101	6438.3101	6.810E-25	1.39	
6438.3328	6438.332	2.667E-24	0.5	
6438.4834	6438.4835	6.583E-25	1.39	
6438.5127	6438.513	5.198E-24	0.38	
6438.5453	6438.5453	2.152E-23	0.41	
6438.5678	6438.568	8.580E-24	0.38	
6438.7062	6438.7062	3.382E-24	0.69	
6438.7617	6438.762	8.172E-24	0.38	
6438.8556	6438.8552	1.211E-23	0.42	
6438.8785	6438.8785	1.325E-23	0.37	
6438.9586	6438.9586	3.928E-24	0.76	
6438.9793	6438.982	2.722E-23	0.35	
6439.0468	6439.0468	7.492E-25	2.31	
6439.1453	6439.15	7.674E-24	0.39	
6439.2447	6439.2513	3.122E-24	0.69	
6439.3263	6439.3325	2.537E-23	0.35	
6439.3572	6439.3623	3.283E-23	0.35	



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6439.4022	6439.4022	9.649E-25	1.88	
6439.492	6439.492	4.332E-23	0.35	
6439.5599	6439.56	6.710E-24	0.32	
6439.7808	6439.7835	4.534E-24	0.56	
6439.8027	6439.81	5.234E-24	0.38	
6439.8584	6439.859	5.192E-24	0.48	
6439.923	6439.9238	5.163E-23	0.25	
6439.945	6439.9448	1.653E-24	1.49	
6440.0593	6440.0559	2.693E-24	0.81	
6440.1354	6440.1349	1.002E-22	0.25	
6440.2295	6440.2337	1.131E-22	0.25	
6440.2777	6440.2778	4.570E-24	0.57	
6440.3957	6440.3954	1.025E-22	0.25	
6440.5357	6440.536	1.754E-23	0.5	
6440.5516	6440.552	1.244E-23	0.63	
6440.6445	6440.6445	9.089E-25	2.81	
6440.6751	6440.675	2.822E-23	0.35	
6440.7479	6440.7462	6.839E-24	0.52	
6440.8066	6440.8057	4.635E-24	0.86	
6440.8273	6440.8274	1.216E-24	2.77	
6440.9549	6440.9554	7.408E-23	0.35	
6440.9824	6440.9824	1.012E-24	1.71	
6441.0596	6441.0596	2.319E-24	1.25	
6441.1153	6441.1153	7.207E-24	0.96	
6441.1399	6441.1377	8.997E-23	0.35	
6441.3286	6441.3315	1.063E-23	0.35	
6441.3836	6441.3836	1.682E-24	0.9	
6441.4666	6441.4666	6.911E-24	0.39	
6441.4986	6441.4986	4.815E-23	0.35	
6441.6097	6441.6082	1.291E-24	0.78	
6441.7054	6441.7076	1.552E-23	0.25	
6441.743	6441.7435	7.727E-24	0.28	
6441.7729	6441.7735	8.026E-24	0.27	
6441.8834	6441.8841	3.461E-24	0.38	
6441.9408	6441.9428	1.685E-24	0.63	
6441.9944	6441.9952	6.305E-25	1.45	
6442.1359	6442.1359	3.844E-24	1.56	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6442.1527	6442.1534	5.216E-23	0.2	
6442.2543	6442.2548	1.140E-23	0.2	
6442.4009	6442.4044	2.115E-23	0.25	
6442.4261	6442.4265	3.766E-24	0.51	
6442.7588	6442.7571	9.498E-24	0.25	
6442.859	6442.8602	1.547E-24	0.45	
6442.9598	6442.9596	6.332E-25	1.51	
6442.9788	6442.98	1.512E-24	0.66	
6443.0032	6443.0066	6.274E-25	1.11	
6443.0742	6443.0753	1.505E-24	0.48	
6443.2038	6443.2068	1.404E-24	0.5	
6443.2789	6443.2801	8.477E-24	0.25	
6443.3221	6443.3229	4.743E-24	0.25	
6443.346	6443.3467	5.771E-24	0.25	
6443.3693	6443.37	4.211E-25	2.21	
6443.412	6443.4136	4.672E-24	0.23	
6443.4576	6443.458	5.355E-24	0.23	
6443.5869	6443.5881	4.178E-24	0.41	
6443.6675	6443.6621	7.902E-23	0.25	
6443.7742	6443.7728	7.203E-24	0.29	
6443.8293	6443.8278	5.879E-24	0.34	
6443.951	6443.9511	3.170E-23	0.25	
6443.9788	6443.9793	3.642E-25	3.52	
6444.021	6444.0216	2.326E-24	0.63	
6444.0651	6444.0658	1.999E-24	0.71	
6444.1159	6444.115	1.081E-23	0.29	
6444.1343	6444.1346	1.165E-24	1.62	
6444.1819	6444.1813	6.714E-25	2.32	
6444.2098	6444.2001	9.787E-25	1.65	
6444.4157	6444.4154	1.775E-23	0.35	
6444.4517	6444.4524	5.659E-24	0.61	
6444.6022	6444.6019	1.138E-23	0.39	
6444.6819	6444.6816	2.038E-24	1.38	
6444.7173	6444.7169	1.141E-23	0.41	
6444.7422	6444.7419	4.441E-24	0.78	
6444.7863	6444.786	1.947E-24	1.43	
6444.8373	6444.837	1.412E-24	1.92	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6444.8728	6444.8727	2.129E-24	1.33	
6444.9335	6444.934	1.177E-22	0.35	6444.9343
6444.9946	6444.9946	2.119E-24	1.26	
6445.0743	6445.0743	1.084E-23	0.35	
6445.101	6445.101	5.696E-25	3.34	
6445.2085	6445.2085	3.487E-23	0.35	
6445.2293	6445.23	1.094E-22	0.35	
6445.2724	6445.2724	2.722E-24	0.88	
6445.2983	6445.2983	2.928E-24	0.8	
6445.3578	6445.3563	2.143E-23	0.35	
6445.5164	6445.5164	1.162E-24	2.45	
6445.5765	6445.5765	1.478E-23	0.25	
6445.6532	6445.6552	7.520E-25	1.69	
6445.7221	6445.7217	1.589E-22	0.35	6445.729
6446.02	6446.022	2.552E-24	0.62	
6446.0976	6446.098	1.264E-23	0.35	6446.958
6446.2173	6446.2173	8.138E-24	0.65	
6446.2919	6446.2893	4.861E-23	0.38	
6446.3122	6446.3122	2.416E-23	0.38	
6446.3621	6446.3601	1.334E-23	0.4	
6446.6365	6446.6365	4.137E-24	0.84	
6446.6908	6446.6908	8.845E-24	0.53	
6446.7236	6446.7192	1.360E-22	0.38	
6446.7462	6446.7462	1.838E-22	0.38	6446.7432
6446.9235	6446.9235	3.936E-23	0.38	
6446.9457	6446.9457	2.890E-23	0.38	
6446.9701	6446.9701	6.226E-24	0.49	
6447.102	6447.102	1.995E-24	1.02	
6447.133	6447.133	1.703E-23	0.38	
6447.3672	6447.3672	8.917E-24	0.45	
6447.4448	6447.448	1.539E-24	1.25	
6447.5089	6447.5103	1.079E-23	0.62	
6447.5333	6447.5334	1.031E-23	0.64	
6447.6683	6447.6682	2.061E-23	1.05	
6447.7541	6447.7546	5.165E-23	0.38	
6447.9155	6447.915	1.196E-22	0.38	
6448.0756	6448.077	1.333E-22	0.27	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6448.1257	6448.1258	7.990E-23	0.38	
6448.165	6448.166	4.573E-23	0.27	
6448.3	6448.302	1.045E-23	0.5	
6448.3262	6448.327	3.686E-24	1.14	
6448.3661	6448.3674	7.547E-24	0.6	
6448.4938	6448.496	5.164E-24	0.81	
6448.6913	6448.6924	1.523E-24	2.07	
6448.7342	6448.7356	6.409E-23	0.22	
6448.7607	6448.761	1.514E-22	0.22	
6448.8589	6448.8581	1.080E-22	0.27	
6448.8886	6448.8892	3.917E-24	1.13	
6448.9097	6448.911	6.493E-24	0.72	
6448.974	6448.9736	1.156E-23	0.4	
6449.038	6449.0349	3.861E-24	0.91	
6449.141	6449.1397	1.107E-22	0.27	6449.146
6449.1668	6449.1686	1.585E-23	0.36	
6449.2832	6449.2814	1.170E-22	0.27	6449.2837
6449.5122	6449.5122	5.728E-23	0.38	
6449.5781	6449.5776	3.165E-23	0.38	
6449.6518	6449.6521	3.594E-23	0.38	
6449.6913	6449.692	3.167E-23	0.38	
6449.7905	6449.792	3.643E-23	0.38	
6449.8218	6449.8218	1.199E-24	2.09	
6449.8411	6449.842	4.887E-24	0.56	
6449.8655	6449.8662	1.290E-24	1.61	
6449.9231	6449.924	9.682E-24	0.4	
6449.9451	6449.946	2.745E-23	0.38	
6450.0216	6450.0216	1.382E-24	1.41	
6450.1164	6450.1165	2.291E-24	0.69	
6450.1749	6450.1751	3.182E-23	0.38	
6450.1979	6450.2035	5.332E-24	0.62	
6450.2581	6450.2581	2.991E-24	1.14	
6450.2764	6450.277	1.066E-22	0.38	
6450.3019	6450.3019	3.425E-24	1.29	
6450.3972	6450.3953	7.085E-24	0.32	
6450.481	6450.481	7.007E-25	3.16	
6450.5066	6450.5042	5.769E-24	0.36	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6450.623	6450.6233	2.426E-23	0.22	
6450.6512	6450.6531	5.673E-24	0.32	
6450.7298	6450.73	2.508E-24	0.64	
6450.7521	6450.7511	2.923E-24	0.64	
6450.8122	6450.8127	3.524E-24	0.48	
6450.8429	6450.8423	4.528E-24	0.4	
6450.905	6450.905	8.320E-24	0.5	
6450.9187	6450.9202	2.683E-23	0.32	
6450.975	6450.975	6.827E-23	0.27	
6450.996	6450.9955	1.080E-23	0.32	
6451.1429	6451.1433	7.501E-25	2.51	
6451.2359	6451.235	5.362E-25	3.44	
6451.2894	6451.2886	3.127E-24	0.75	
6451.3028	6451.3085	3.053E-24	0.63	
6451.3278	6451.3278	3.100E-23	0.38	
6451.347	6451.347	2.213E-24	1.94	
6451.3791	6451.382	2.706E-23	0.38	
6451.4296	6451.4296	8.176E-24	0.6	
6451.4593	6451.459	5.541E-24	0.5	
6451.4783	6451.4767	3.368E-23	0.38	
6451.6793	6451.6793	1.932E-24	1.28	
6451.7643	6451.7643	3.662E-25	4.73	
6452.0691	6452.0683	1.523E-23	0.28	
6452.0959	6452.0962	2.139E-24	0.82	
6452.1526	6452.1525	2.904E-24	0.59	
6452.2089	6452.2085	1.471E-24	0.78	
6452.2854	6452.2855	8.929E-24	0.29	
6452.3201	6452.3204	1.750E-24	0.68	
6452.3608	6452.3609	3.376E-24	0.57	
6452.4523	6452.4536	1.752E-23	0.27	
6452.552	6452.5518	1.969E-23	0.22	
6452.5938	6452.594	6.438E-24	0.31	
6452.6204	6452.6197	1.902E-23	0.22	
6452.7362	6452.7353	3.777E-23	0.27	
6452.8611	6452.8606	4.932E-24	0.43	
6452.8988	6452.8976	2.023E-23	0.33	
6452.9101	6452.9101	2.688E-24	3.85	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6452.9834	6452.9834	3.233E-24	1.13	
6453.0028	6453.0025	2.712E-24	1.08	
6453.1224	6453.1229	1.584E-24	1.21	
6453.1802	6453.1808	3.684E-24	0.57	
6453.3672	6453.3681	1.151E-22	0.27	
6453.3942	6453.3943	6.298E-24	0.68	
6453.5867	6453.5852	1.835E-22	0.38	6453.584
6453.6219	6453.6219	6.591E-24	1.38	
6453.7349	6453.7349	1.243E-23	0.34	
6453.764	6453.764	1.568E-24	1.89	
6453.8257	6453.8248	1.141E-24	2.76	
6453.8707	6453.8696	2.053E-22	0.22	
6453.9165	6453.9161	1.161E-23	0.4	
6453.9875	6453.9872	7.444E-24	0.53	
6454.0698	6454.0695	1.579E-24	2	
6454.1615	6454.1614	2.229E-23	0.27	
6454.1868	6454.1868	3.981E-23	0.38	
6454.3713	6454.3713	2.872E-24	1.02	
6454.4227	6454.4226	1.340E-24	2.05	
6454.4497	6454.4497	5.788E-24	0.56	
6454.4943	6454.4945	5.695E-24	0.57	
6454.532	6454.5319	3.138E-24	1.25	
6454.6138	6454.6135	5.851E-24	0.74	
6454.6933	6454.6937	3.820E-22	0.27	
6454.7193	6454.719	8.447E-24	0.72	
6454.7345	6454.7364	1.020E-22	0.29	
6454.8819	6454.8819	1.619E-24	3.99	
6454.9088	6454.9088	1.615E-23	0.58	
6454.9345	6454.9352	2.523E-23	0.44	
6455.0814	6455.0817	3.975E-23	0.22	
6455.2144	6455.2157	1.014E-22	0.3	6455.2168
6455.2425	6455.2461	8.689E-24	0.56	
6455.4828	6455.4828	1.444E-24	5.07	
6455.5811	6455.5818	7.277E-24	0.45	
6455.6063	6455.6072	7.463E-24	0.44	
6455.6481	6455.6482	1.933E-23	0.27	
6455.6712	6455.6712	5.700E-24	0.72	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6455.6908	6455.6897	9.781E-24	0.49	
6455.7186	6455.7177	9.817E-24	0.36	
6455.7996	6455.799	4.835E-24	0.7	
6455.9038	6455.9038	4.916E-24	1.44	
6455.9359	6455.9352	1.556E-22	0.27	
6455.9698	6455.9708	3.386E-24	1.08	
6456.214	6456.2154	1.263E-22	0.22	6456.2158
6456.3394	6456.3405	4.199E-23	0.23	
6456.3552	6456.3528	5.339E-24	0.56	
6456.4183	6456.4196	4.878E-23	0.27	
6456.8544	6456.855	1.447E-23	0.25	
6456.8815	6456.8815	3.159E-24	0.46	
6457.0526	6457.0534	9.422E-24	0.96	
6457.0652	6457.0661	8.839E-24	1.01	
6457.1231	6457.1211	3.481E-23	0.27	
6457.1518	6457.153	1.074E-22	0.27	
6457.3111	6457.3091	5.356E-23	0.27	
6457.4276	6457.4284	8.103E-24	0.41	
6457.464	6457.4641	5.865E-24	0.35	
6457.5157	6457.5167	4.574E-23	0.22	
6457.81	6457.8109	2.093E-23	0.27	
6457.8545	6457.8551	1.671E-24	0.86	
6457.8737	6457.8737	2.778E-25	6.71	
6457.9541	6457.9545	1.253E-23	0.27	
6458.0645	6458.0658	1.075E-24	1.19	
6458.3192	6458.3192	8.499E-24	0.38	
6458.3749	6458.3758	1.265E-23	0.27	
6458.4319	6458.4324	7.701E-24	0.27	
6458.4719	6458.4726	4.934E-24	0.33	
6458.572	6458.5723	4.988E-23	0.27	
6458.6824	6458.684	2.863E-24	0.48	
6458.8122	6458.8129	1.178E-23	0.3	
6458.8498	6458.85	4.222E-23	0.27	
6458.9662	6458.9662	1.324E-23	0.24	
6459.1486	6459.1485	1.877E-24	0.75	
6459.1823	6459.1823	8.124E-24	0.31	
6459.3116	6459.3116	1.409E-24	1.22	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6459.4115	6459.412	1.965E-22	0.38	
6459.4635	6459.4642	1.537E-22	0.38	
6459.8193	6459.8191	8.184E-23	0.22	
6459.8833	6459.883	2.722E-23	0.22	
6460.2879	6460.29	6.062E-24	0.41	
6460.3222	6460.3223	1.703E-24	1.27	
6460.3437	6460.3432	2.635E-24	0.78	
6460.4199	6460.42	7.981E-24	0.54	
6460.4739	6460.4742	5.019E-24	0.77	
6460.5497	6460.5508	1.035E-23	0.45	
6460.611	6460.6108	1.453E-22	0.22	6460.615
6460.8286	6460.8281	1.178E-23	0.33	
6460.9014	6460.9009	1.086E-22	0.22	646.8997
6461.0276	6461.0266	2.772E-24	1.67	
6461.1366	6461.1375	1.158E-22	0.27	
6461.1864	6461.1862	3.153E-23	0.27	
6461.434	6461.434	9.953E-23	0.38	
6461.4979	6461.4981	1.567E-23	0.28	
6461.5462	6461.5465	8.059E-24	0.31	
6461.57	6461.57	4.944E-24	0.43	
6461.6123	6461.613	5.925E-24	0.36	
6461.6926	6461.694	3.667E-24	0.52	
6461.8547	6461.8561	7.270E-24	0.32	
6461.8813	6461.8798	8.836E-23	0.27	6461.8817
6461.9791	6461.9774	3.801E-24	0.45	
6462.014	6462.013	3.107E-24	0.6	
6462.0348	6462.0336	1.819E-23	0.27	
6462.2473	6462.248	6.587E-24	0.28	
6462.3606	6462.3593	1.224E-23	0.22	
6462.3943	6462.3929	2.212E-23	0.22	
6462.4781	6462.4758	5.145E-24	0.39	
6462.6475	6462.6449	2.413E-24	0.69	
6462.6951	6462.6932	1.707E-24	0.91	
6462.7902	6462.7877	1.891E-23	0.38	
6462.8316	6462.8312	9.640E-23	0.38	6462.831
6462.9312	6462.9309	5.774E-23	0.38	
6462.9654	6462.9655	5.974E-24	0.51	



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6463.0939	6463.094	1.404E-23	0.38	
6463.1287	6463.13	5.036E-24	0.44	
6463.2429	6463.243	1.031E-23	0.29	
6463.2801	6463.2818	1.750E-24	1.62	
6463.3441	6463.3435	1.426E-23	0.27	
6463.3799	6463.3801	9.454E-23	0.27	6463.3787
6463.4031	6463.403	6.742E-24	0.41	
6463.4636	6463.4608	9.858E-24	0.44	
6463.5923	6463.5925	6.743E-24	0.6	
6463.6146	6463.613	2.134E-24	1.48	
6463.7422	6463.737	8.322E-24	0.49	
6463.813	6463.8116	1.148E-23	0.41	
6463.8522	6463.851	1.707E-24	1.65	
6463.9786	6463.9788	1.219E-23	0.28	
6464.0523	6464.0521	7.558E-23	0.27	6464.512
6464.3391	6464.3391	7.046E-23	0.38	
6464.4526	6464.45	3.630E-24	0.91	
6464.4843	6464.485	1.063E-23	0.45	
6464.508	6464.5049	8.370E-24	0.52	
6464.5603	6464.5621	1.021E-23	0.45	
6464.6737	6464.6737	2.134E-22	0.38	6464.672
6464.7368	6464.7367	4.301E-23	0.38	
6464.7676	6464.7674	2.719E-23	0.38	
6464.8024	6464.8024	7.432E-23	0.27	
6464.834	6464.8347	7.944E-24	0.36	
6464.8912	6464.8899	1.747E-23	0.27	
6464.9455	6464.945	2.555E-24	0.84	
6465.0126	6465.0099	4.042E-23	0.27	6465.99
6465.0912	6465.0899	1.259E-22	0.27	6465.96
6465.1755	6465.1757	1.372E-22	0.27	6465.1757
6465.2375	6465.2379	3.587E-24	0.89	
6465.3107	6465.308	1.306E-22	0.38	6465.317
6465.3494	6465.3501	5.842E-23	0.38	
6465.41	6465.4044	4.057E-24	0.93	
6465.43	6465.4222	3.032E-24	1.18	
6465.5328	6465.5322	1.755E-23	0.38	
6465.5894	6465.5871	2.178E-23	0.38	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6465.6645	6465.665	7.746E-24	0.4	
6465.6946	6465.6948	4.717E-24	0.57	
6465.8729	6465.8723	1.409E-23	0.3	
6465.966	6465.9668	2.258E-24	1.03	
6466.0444	6466.0449	1.393E-22	0.27	6466.439
6466.0994	6466.0964	9.730E-24	0.55	
6466.1299	6466.1279	1.792E-23	0.38	
6466.2046	6466.204	2.603E-24	1.51	
6466.3814	6466.3817	1.536E-23	0.41	
6466.557	6466.5568	2.485E-23	0.27	
6466.5925	6466.5922	1.831E-23	0.27	
6466.6352	6466.6327	3.171E-22	0.27	
6466.7792	6466.7794	3.652E-23	0.27	6466.7794
6466.8146	6466.813	1.230E-23	0.46	
6466.9527	6466.9528	6.098E-23	0.38	
6467.1477	6467.1468	2.554E-22	0.38	
6467.3047	6467.3048	5.945E-23	0.27	
6467.3422	6467.3424	1.758E-23	0.27	
6467.4032	6467.4029	3.704E-23	0.27	
6467.4518	6467.4516	8.572E-24	0.39	
6467.6846	6467.686	6.449E-24	0.77	
6467.758	6467.76	5.210E-24	0.91	
6467.9997	6467.9997	1.129E-23	0.92	
6468.0412	6468.04	4.271E-24	1.06	
6468.1223	6468.1227	6.316E-23	0.27	
6468.1706	6468.1705	1.068E-22	0.27	
6468.3365	6468.338	6.805E-22	1.46	6468.3365
6468.3831	6468.3826	2.263E-23	0.31	
6468.525	6468.5249	3.699E-23	0.38	
6468.716	6468.718	9.569E-24	0.52	
6468.7909	6468.7921	7.245E-23	0.38	6468.7892
6468.9257	6468.924	7.078E-23	0.38	6468.9286
6468.9531	6468.9534	2.907E-24	0.85	
6468.9969	6468.9989	7.702E-24	0.4	
6469.0496	6469.0498	3.755E-24	0.67	
6469.0822	6469.0835	1.955E-23	0.27	
6469.1584	6469.1578	3.955E-23	0.27	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6469.1973	6469.1954	2.180E-24	1.37	
6469.3949	6469.3927	1.107E-23	0.42	
6469.4468	6469.4468	1.322E-23	0.5	
6469.4864	6469.4857	1.030E-23	0.45	
6469.5174	6469.5163	7.186E-23	0.38	
6469.5891	6469.5889	5.634E-23	0.38	
6469.7336	6469.7348	1.064E-23	0.47	
6469.8175	6469.817	6.797E-24	0.64	
6469.918	6469.9191	1.263E-23	0.27	
6469.9676	6469.9649	6.014E-24	0.39	
6470.0093	6470.009	7.441E-24	0.34	
6470.0567	6470.0572	1.111E-22	0.27	
6470.1106	6470.1123	4.998E-24	0.57	
6470.3894	6470.3913	6.023E-24	0.5	
6470.426	6470.4276	3.631E-23	0.38	
6470.6429	6470.6443	3.063E-23	0.38	
6470.6714	6470.6714	3.036E-24	1.08	
6470.68	6470.6868	3.973E-24	0.66	
6470.7892	6470.7917	4.147E-24	0.47	
6471.0039	6471.0049	2.097E-23	0.22	
6471.2576	6471.2576	2.173E-24	0.83	
6471.3137	6471.3153	4.772E-22	1.38	6471.3142
6471.3907	6471.3907	1.709E-24	1.42	
6471.43	6471.4308	2.864E-24	1.33	
6471.448	6471.4477	3.054E-23	0.27	
6471.5363	6471.536	2.444E-24	0.74	
6471.5794	6471.5786	2.233E-23	0.22	
6471.6909	6471.6898	2.755E-24	0.67	
6471.7757	6471.7756	4.959E-24	0.36	
6471.8436	6471.8428	1.312E-23	0.27	
6472.0524	6472.0516	1.516E-22	0.38	6472.517
6472.1497	6472.1491	2.609E-24	1.06	
6472.3356	6472.3334	7.303E-24	0.37	
6472.5328	6472.5332	1.426E-23	0.27	
6472.5634	6472.5624	7.486E-24	0.37	
6472.5984	6472.597	3.842E-24	0.58	
6472.7847	6472.7839	4.622E-24	0.76	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6472.945	6472.943	2.910E-24	1.09	
6473.0244	6473.0247	1.182E-22	0.38	6473.237
6473.1755	6473.1752	7.090E-24	0.37	
6473.3322	6473.3313	1.399E-23	0.27	
6473.3756	6473.3755	1.108E-22	0.27	
6473.5283	6473.5269	2.653E-24	1.01	
6473.6382	6473.6366	5.371E-23	0.38	
6473.7095	6473.7087	1.562E-23	0.38	
6473.7338	6473.7323	4.108E-23	0.38	
6473.8065	6473.8037	3.638E-24	0.78	
6474.1229	6474.1212	4.232E-23	0.27	
6474.2043	6474.2021	5.212E-23	0.27	6474.219
6474.3044	6474.3036	7.240E-24	0.34	
6474.3609	6474.3611	7.183E-24	0.35	
6474.4173	6474.4173	1.760E-23	0.49	
6474.4313	6474.4313	6.981E-24	0.94	
6474.4897	6474.4897	4.882E-24	0.6	
6474.5281	6474.5281	4.625E-24	0.62	
6474.8121	6474.8121	9.893E-24	0.39	
6474.8388	6474.8388	2.921E-23	0.38	
6475.0208	6475.02	1.346E-23	0.27	
6475.0461	6475.0464	1.065E-22	0.27	
6475.0589	6475.0593	6.332E-24	1.03	
6475.1473	6475.1474	5.301E-24	0.41	
6475.1717	6475.1719	1.788E-24	0.99	
6475.316	6475.3194	6.150E-23	0.38	6475.317
6475.3548	6475.3548	5.050E-24	0.58	
6475.3968	6475.3968	4.151E-24	0.65	
6475.5285	6475.5285	1.275E-23	0.38	
6475.6327	6475.6327	4.922E-24	0.58	
6475.7939	6475.7947	5.752E-24	0.46	
6476.2395	6476.2395	1.892E-23	0.92	
6476.2527	6476.2494	7.241E-23	0.38	
6476.2991	6476.2991	7.746E-24	0.75	
6476.3797	6476.3797	2.739E-24	2.29	
6476.4102	6476.4113	3.625E-22	0.38	6476.4114
6476.8264	6476.8259	3.584E-24	1.07	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6477.0331	6477.033	1.212E-23	0.63	
6477.1236	6477.123	2.535E-23	0.4	
6477.1642	6477.166	9.850E-24	0.73	
6477.2638	6477.2638	3.685E-24	2.41	
6477.3339	6477.3404	1.398E-22	0.38	
6477.3513	6477.351	7.126E-23	0.38	6477.354
6477.4306	6477.4311	8.331E-23	0.27	
6477.4652	6477.4642	2.237E-23	0.28	
6477.4944	6477.494	1.315E-23	0.37	
6477.5674	6477.5666	3.595E-22	0.27	
6477.5937	6477.593	1.417E-23	0.39	
6477.7339	6477.7345	1.120E-23	0.53	
6477.8719	6477.8696	2.969E-22	0.38	
6477.9168	6477.9168	2.483E-23	0.45	
6477.9404	6477.9411	6.034E-24	0.92	
6478.1617	6478.1619	3.749E-23	0.38	
6478.4659	6478.4662	4.780E-24	0.65	
6478.5451	6478.545	1.123E-23	0.52	
6478.5615	6478.56	6.437E-24	0.81	
6478.6601	6478.6593	2.960E-22	0.38	6478.6576
6478.7881	6478.788	2.270E-24	2.98	
6478.8714	6478.8714	1.126E-23	0.49	
6478.9231	6478.923	4.840E-23	0.38	
6478.9685	6478.9686	5.525E-24	0.83	
6478.9923	6478.993	3.341E-24	1.25	
6479.059	6479.0587	6.198E-24	0.54	
6479.2516	6479.2516	7.569E-23	0.27	
6479.3906	6479.3893	1.776E-22	0.27	
6479.608	6479.6077	2.341E-22	0.38	6479.663
6479.7386	6479.7373	3.255E-22	0.38	6479.7357
6479.8033	6479.8025	9.972E-24	0.57	
6479.8432	6479.842	1.192E-23	0.31	
6479.9	6479.9002	4.039E-24	0.64	
6479.9855	6479.9844	3.176E-22	0.27	6479.9822
6480.0262	6480.0249	9.917E-23	0.27	
6480.3458	6480.3441	1.019E-23	0.42	
6480.4563	6480.4562	2.741E-23	0.38	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6480.4757	6480.4757	6.638E-24	0.64	
6480.5288	6480.5277	2.634E-23	0.38	
6480.551	6480.5482	1.261E-22	0.38	648.5486
6480.9312	6480.9311	3.873E-24	0.64	
6481.0502	6481.05	7.666E-24	0.41	
6481.1188	6481.1188	3.255E-24	1.23	
6481.2176	6481.2189	2.180E-22	0.38	6481.2181
6481.3158	6481.3158	8.694E-24	0.58	
6481.3585	6481.3585	3.298E-24	1.24	
6481.3872	6481.3927	6.964E-23	0.38	
6481.5106	6481.5131	2.229E-22	0.38	6481.5116
6481.6259	6481.6246	1.833E-22	0.27	6481.6257
6481.6766	6481.6764	2.681E-24	1.05	
6481.7681	6481.7683	2.653E-23	0.27	
6481.8423	6481.8418	6.274E-24	0.52	
6481.9587	6481.9561	5.591E-24	0.61	
6481.9764	6481.9764	2.827E-24	1.63	
6482.0123	6482.0124	4.625E-24	0.95	
6482.0486	6482.0482	1.178E-23	0.49	
6482.2261	6482.2258	5.354E-24	0.85	
6482.4448	6482.4448	3.169E-24	1.3	
6482.4919	6482.4915	8.603E-24	0.45	
6482.6428	6482.642	1.927E-24	2.17	
6482.67	6482.669	2.213E-23	0.27	6482.6691
6482.8161	6482.8159	1.470E-22	0.38	6482.8142
6483.1241	6483.124	8.998E-23	0.38	
6483.2804	6483.2785	4.968E-24	0.8	
6483.333	6483.3324	5.119E-24	0.52	
6483.3857	6483.3855	5.514E-24	0.53	
6483.4153	6483.415	3.099E-24	0.83	
6483.465	6483.4624	9.646E-24	0.36	
6483.4963	6483.496	7.474E-24	0.4	
6483.548	6483.5466	1.334E-23	0.3	
6483.5863	6483.5868	3.550E-24	0.7	
6483.6793	6483.6793	9.460E-23	0.38	
6483.7786	6483.778	2.486E-24	1.4	
6483.9059	6483.9068	3.215E-24	1.13	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6483.964	6483.9625	4.500E-24	0.86	
6483.998	6483.9974	1.624E-23	0.38	
6484.0768	6484.076	2.143E-24	1.6	
6484.1529	6484.152	4.550E-24	0.57	
6484.2123	6484.213	5.834E-24	0.47	
6484.2926	6484.293	2.014E-24	1.69	
6484.4212	6484.42	2.198E-23	0.27	6484.421
6484.5067	6484.507	2.589E-24	0.91	
6484.546	6484.5445	7.281E-23	0.38	
6484.677	6484.6774	2.998E-24	1.22	
6484.7174	6484.7174	4.499E-24	0.76	
6484.7949	6484.795	1.486E-23	0.38	6484.7926
6485.1047	6485.104	5.092E-24	0.66	
6485.31	6485.309	1.596E-22	0.27	6485.389
6485.4059	6485.4061	1.624E-22	0.38	
6485.4507	6485.45	1.246E-23	1.35	
6485.4659	6485.4659	9.145E-23	0.38	
6485.5587	6485.5587	1.007E-23	0.53	
6485.622	6485.6251	8.540E-23	0.38	
6485.8567	6485.8621	7.133E-23	0.27	
6485.8778	6485.8781	1.723E-23	0.35	
6485.951	6485.951	8.899E-23	0.27	6485.954
6486.0051	6486.0051	7.647E-23	0.27	6486.51
6486.3622	6486.3613	4.797E-24	0.82	
6486.4564	6486.4556	4.154E-24	0.92	
6486.5146	6486.5151	1.332E-23	0.42	
6486.5524	6486.5524	9.426E-23	0.38	6486.5521
6486.6148	6486.6145	2.245E-24	1.41	
6486.6573	6486.6569	9.244E-23	0.27	
6486.8615	6486.861	6.600E-24	0.59	
6486.9127	6486.914	3.637E-22	0.27	
6487.1369	6487.1365	1.843E-22	0.38	
6487.2036	6487.2025	1.217E-22	0.38	6487.226
6487.2996	6487.2983	6.467E-24	1.32	
6487.4472	6487.447	1.625E-22	0.38	6487.4487
6487.4901	6487.49	7.343E-22	1.35	6487.4898
6487.5403	6487.5401	1.053E-23	0.54	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6487.5997	6487.5999	5.557E-24	0.78	
6487.7082	6487.7079	3.355E-22	0.27	
6487.9078	6487.9078	3.083E-24	1.48	
6487.965	6487.9638	1.726E-23	0.44	
6487.9877	6487.9867	1.088E-23	0.59	
6488.1918	6488.1918	4.278E-23	0.38	
6488.613	6488.613	8.220E-24	0.4	
6488.7682	6488.7689	6.856E-25	3.76	
6488.8182	6488.8184	1.311E-23	0.38	
6488.9353	6488.9332	4.285E-25	5.87	
6488.9644	6488.9681	4.714E-24	0.71	
6489.0161	6489.016	3.428E-24	0.9	
6489.2031	6489.2029	3.205E-24	0.72	
6489.2598	6489.26	3.846E-24	0.74	
6489.3076	6489.3077	2.456E-22	0.27	6489.39
6489.3965	6489.3962	2.687E-24	0.83	
6489.4264	6489.4253	5.146E-24	0.5	
6489.633	6489.632	2.337E-22	0.38	6489.6336
6490.2245	6490.2245	7.089E-24	0.36	
6490.264	6490.2648	2.294E-24	0.81	
6490.4608	6490.462	2.997E-24	0.85	
6490.4836	6490.483	1.229E-23	0.38	
6490.585	6490.585	2.895E-23	0.38	
6490.7644	6490.7645	2.312E-24	1	
6490.8563	6490.8561	8.539E-24	0.29	
6490.8837	6490.8846	6.709E-24	0.34	
6490.9675	6490.967	1.646E-23	0.27	
6491.0199	6491.0206	1.678E-22	0.27	
6491.1695	6491.169	1.500E-23	0.27	
6491.1891	6491.1897	4.125E-24	0.54	
6491.2954	6491.2961	2.189E-23	0.38	
6491.3394	6491.3393	2.631E-23	0.38	
6491.3696	6491.3698	1.586E-22	0.38	
6491.3862	6491.3862	1.704E-23	0.42	
6491.6222	6491.6222	9.785E-24	0.51	
6491.8295	6491.8301	1.342E-22	0.22	6491.8284
6491.9094	6491.9095	6.928E-24	0.35	



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6492.0732	6492.073	2.444E-22	0.27	6492.733
6492.1972	6492.197	1.048E-23	0.38	
6492.432	6492.432	6.973E-24	0.5	
6492.6049	6492.6043	6.512E-22	1.44	6492.65
6492.7292	6492.728	2.009E-23	0.26	
6492.8965	6492.8967	5.765E-24	0.84	
6492.9395	6492.9403	2.093E-23	0.36	
6492.9603	6492.9603	3.899E-24	1.53	
6493.005	6493.0054	2.721E-23	0.55	6493.66
6493.1934	6493.1934	7.255E-23	0.38	6493.192
6493.2676	6493.2668	6.410E-24	1.1	
6493.3132	6493.3149	2.560E-22	0.38	6493.3161
6493.3429	6493.3447	3.422E-23	0.48	6493.3448
6493.4964	6493.4965	2.309E-24	1.82	
6493.529	6493.5301	3.207E-24	1.35	
6493.5705	6493.5718	2.683E-24	2.06	
6493.6051	6493.6051	1.269E-23	0.55	
6493.7493	6493.7498	4.870E-24	0.95	
6493.8093	6493.8078	1.732E-24	2.77	
6493.8846	6493.8845	6.298E-24	1.17	
6493.8945	6493.8945	1.131E-23	0.74	
6494.0506	6494.0506	5.141E-24	1.35	
6494.1476	6494.148	6.384E-24	1.12	
6494.2023	6494.2027	4.027E-24	1.03	
6494.2784	6494.278	4.538E-23	0.29	
6494.2965	6494.298	1.082E-23	1.15	
6494.3523	6494.3533	4.055E-23	0.27	
6494.381	6494.38	3.277E-23	0.31	
6494.3951	6494.395	4.345E-23	0.27	6494.3935
6494.4492	6494.4497	4.193E-24	1.01	
6494.5003	6494.5005	1.287E-23	0.42	
6494.5954	6494.5955	9.472E-23	0.38	
6494.8539	6494.8553	9.882E-24	0.88	
6494.993	6494.9927	7.444E-24	0.78	
6495.0567	6495.0564	1.339E-23	0.7	
6495.1579	6495.1581	6.274E-23	0.27	
6495.2202	6495.2211	4.316E-23	0.27	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6495.2396	6495.2403	2.492E-23	0.32	
6495.3011	6495.301	2.763E-23	0.29	
6495.4418	6495.4421	1.259E-22	0.38	
6495.6563	6495.658	1.584E-24	2.47	
6495.7268	6495.7259	2.399E-22	0.38	
6495.8061	6495.8059	6.508E-24	0.74	
6496.0035	6496.004	1.929E-22	0.27	
6496.0454	6496.0453	6.567E-24	0.68	
6496.053	6496.053	1.005E-22	0.38	
6496.0962	6496.0963	7.330E-24	0.6	
6496.2594	6496.2599	4.373E-24	0.94	
6496.2923	6496.2931	5.280E-24	0.81	
6496.6013	6496.6018	1.486E-23	1.15	
6496.619	6496.6182	2.830E-23	0.66	
6496.8351	6496.8359	6.710E-24	1.31	
6496.9462	6496.9464	4.533E-23	0.31	6496.9473
6497.064	6497.064	5.772E-22	0.27	6497.637
6497.0778	6497.0776	4.381E-23	0.44	
6497.1581	6497.158	2.898E-22	0.27	
6497.2054	6497.2052	4.102E-22	0.38	6497.241
6497.3384	6497.34	2.259E-22	0.38	
6497.4372	6497.4369	2.826E-23	0.63	
6497.5239	6497.5242	5.780E-24	2.36	
6497.6856	6497.6849	4.001E-22	0.27	6497.6848
6497.7936	6497.7941	5.351E-22	0.27	6497.7939
6497.8747	6497.8745	7.625E-24	0.95	
6497.9049	6497.905	2.995E-24	1.84	
6497.9982	6497.9982	2.695E-24	2.02	
6498.0731	6498.0698	7.829E-24	0.82	
6498.1188	6498.1189	7.701E-25	6.61	
6498.3174	6498.3179	3.695E-22	0.38	6498.3172
6498.4632	6498.4619	3.080E-24	1.48	
6498.5071	6498.5057	4.523E-22	0.27	6498.547
6498.5486	6498.5487	1.925E-24	4.35	
6498.6634	6498.6644	2.525E-23	0.3	
6498.7455	6498.7457	1.971E-23	0.34	
6498.7736	6498.7734	5.290E-22	0.27	6498.7726

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6498.7955	6498.7942	2.481E-24	2.45	
6498.8423	6498.8423	2.053E-24	2.92	
6498.9255	6498.9255	1.797E-24	3.31	
6499.0606	6499.0606	1.840E-24	2.25	
6499.3638	6499.3635	1.089E-23	0.32	
6499.4078	6499.4077	1.522E-24	1.43	
6499.5552	6499.5548	5.296E-24	0.51	
6499.6402	6499.6385	5.494E-24	0.52	
6499.6632	6499.663	8.661E-23	0.38	6499.6625
6499.6921	6499.6919	4.795E-24	0.69	
6499.7593	6499.759	2.612E-24	1.06	
6499.8272	6499.8269	1.387E-23	0.38	
6499.9181	6499.9175	2.010E-22	0.38	6499.9167
6499.9832	6499.9831	6.379E-24	0.55	
6500.0796	6500.0789	1.663E-23	0.27	
6500.1149	6500.1158	4.666E-23	0.27	65.1128
6500.136	6500.1354	2.528E-24	0.92	
6500.2081	6500.2051	9.854E-25	1.5	
6500.3402	6500.3379	2.001E-24	0.71	
6500.3729	6500.3699	2.571E-24	0.86	
6500.3883	6500.3905	2.804E-24	0.64	
6500.4124	6500.4094	1.971E-24	1.18	
6500.5799	6500.5786	5.827E-24	0.41	
6500.6461	6500.6447	1.482E-23	0.38	
6500.69	6500.687	1.285E-24	1.52	
6500.7146	6500.7127	4.499E-23	0.38	65.7119
6500.7378	6500.7365	1.127E-23	0.38	
6500.8176	6500.8158	5.356E-24	0.44	
6500.9506	6500.9484	5.227E-24	0.45	
6500.9754	6500.9724	1.928E-24	0.89	
6501.004	6501.0041	9.279E-25	1.53	
6501.0512	6501.0498	5.142E-24	0.41	
6501.0824	6501.0795	9.854E-25	1.51	
6501.1569	6501.1539	1.542E-24	1.07	
6501.2765	6501.2765	2.925E-24	0.59	
6501.2835	6501.2831	2.496E-24	0.66	
6501.3823	6501.382	5.403E-23	0.38	651.383

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6501.4412	6501.4395	1.857E-23	0.41	651.4387
6501.4749	6501.475	1.455E-24	2.99	
6501.6063	6501.6053	2.382E-22	0.38	651.645
6501.6735	6501.6812	3.936E-24	1.22	
6501.7466	6501.7443	6.203E-24	0.84	
6501.8236	6501.8229	2.248E-22	0.27	651.8223
6502.0199	6502.0201	2.454E-22	0.27	652.198
6502.0752	6502.0752	1.023E-23	0.71	
6502.134	6502.1336	2.481E-22	0.27	652.1342
6502.2606	6502.2593	5.052E-24	0.98	
6502.401	6502.3998	2.868E-24	1.58	
6502.6097	6502.61	1.584E-24	2.72	
6502.7312	6502.7335	3.280E-24	0.73	
6502.749	6502.7492	2.304E-24	0.97	
6502.8194	6502.8181	1.714E-24	1.47	
6502.9255	6502.9252	5.770E-24	0.43	
6502.9489	6502.9488	2.126E-23	0.27	652.9474
6502.9934	6502.9936	2.843E-24	0.68	
6503.0227	6503.0214	5.527E-24	0.6	
6503.1334	6503.1322	1.714E-24	1.47	
6503.2459	6503.2446	4.799E-24	0.86	
6503.2655	6503.2642	6.684E-24	0.67	
6503.308	6503.3077	5.398E-24	0.6	
6503.3414	6503.3401	5.784E-24	0.57	
6503.4408	6503.441	1.440E-23	0.29	
6503.5069	6503.5071	5.939E-24	0.46	
6503.5781	6503.578	5.776E-23	0.27	
6503.6117	6503.6104	1.457E-24	1.81	
6503.7267	6503.7257	8.181E-23	0.27	653.725
6503.8835	6503.8839	4.964E-24	0.54	
6503.9442	6503.9443	7.292E-24	0.53	
6504.0667	6504.0672	3.395E-22	0.38	654.672
6504.1036	6504.1037	7.792E-24	0.7	
6504.1455	6504.1456	2.783E-24	1.47	
6504.2406	6504.241	2.654E-24	1.52	
6504.3518	6504.3523	6.134E-23	0.27	
6504.4391	6504.4325	3.722E-24	0.97	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6504.4597	6504.4588	5.584E-24	0.69	
6504.5245	6504.5247	8.798E-24	0.37	
6504.6974	6504.6973	1.564E-23	0.43	
6504.7609	6504.7599	9.983E-24	0.6	
6504.7843	6504.7832	6.641E-24	0.81	
6504.8284	6504.8277	1.411E-22	0.38	654.8281
6504.9597	6504.9589	2.596E-23	0.38	
6505.0932	6505.0927	8.634E-23	0.27	655.936
6505.1763	6505.1754	2.412E-23	0.27	
6505.2073	6505.207	1.638E-24	1.83	
6505.3142	6505.3135	1.366E-22	0.27	655.3134
6505.3543	6505.3534	1.440E-22	0.27	655.3544
6505.4128	6505.4132	1.390E-23	0.54	
6505.4282	6505.4261	1.375E-23	0.55	
6505.5599	6505.5602	2.851E-24	1.21	
6505.5969	6505.5961	3.800E-22	0.38	655.5973
6505.6698	6505.6692	3.611E-23	0.38	
6505.713	6505.7122	1.382E-23	0.48	
6505.8624	6505.8624	2.524E-24	1.78	
6506.0106	6506.0108	3.722E-24	1.27	
6506.0608	6506.0607	3.512E-23	0.38	
6506.1008	6506.1041	3.593E-24	0.89	
6506.1728	6506.1731	1.702E-23	0.3	656.1753
6506.3148	6506.315	3.006E-24	2.11	
6506.4649	6506.4654	1.589E-23	0.55	
6506.5288	6506.5305	1.011E-22	0.38	
6506.5646	6506.5664	3.430E-24	1.33	
6506.5893	6506.5911	8.404E-24	0.65	
6506.6595	6506.6609	2.860E-22	0.38	656.66
6506.8191	6506.8209	6.517E-24	0.78	
6506.899	6506.9006	4.085E-24	0.64	
6506.9371	6506.9384	1.367E-23	0.38	
6507.0588	6507.0599	3.487E-22	0.27	657.6
6507.1053	6507.1063	1.534E-22	0.27	
6507.1788	6507.1805	6.554E-24	0.5	
6507.2085	6507.2085	2.785E-24	1.06	
6507.4337	6507.4344	1.358E-23	0.38	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6507.4726	6507.4736	6.384E-24	0.57	
6507.5727	6507.5733	7.669E-23	0.38	
6507.6968	6507.6968	4.627E-24	0.71	
6507.7735	6507.7725	6.129E-24	0.33	
6507.8092	6507.81	3.094E-24	0.51	
6507.8516	6507.8512	3.303E-24	0.48	
6507.894	6507.894	2.271E-24	0.74	
6507.9449	6507.9449	1.457E-24	1.05	
6508.0565	6508.0565	5.794E-24	0.34	
6508.123	6508.1224	6.727E-24	0.38	
6508.1806	6508.1806	2.442E-24	0.83	
6508.2002	6508.2002	8.240E-24	0.4	
6508.3295	6508.3283	9.683E-24	0.38	
6508.5342	6508.5342	5.870E-24	0.88	
6508.548	6508.5467	2.660E-23	0.27	
6508.5667	6508.5666	7.951E-24	0.41	
6508.6363	6508.6369	5.505E-24	0.4	
6508.6558	6508.6552	2.862E-23	0.27	
6508.7099	6508.7097	2.367E-24	0.58	
6508.7399	6508.7399	2.183E-24	1.05	
6508.785	6508.7845	5.419E-24	0.33	
6508.8236	6508.823	3.241E-24	0.48	
6508.9552	6508.9546	4.433E-24	0.37	
6509.0398	6509.0398	2.141E-24	1.17	
6509.1471	6509.1459	1.045E-23	0.38	
6509.2275	6509.2275	3.896E-24	0.67	
6509.2777	6509.2813	6.936E-24	0.46	
6509.3404	6509.3404	1.584E-24	1.38	
6509.3932	6509.394	4.799E-23	0.38	
6509.4362	6509.4369	4.698E-24	0.54	
6509.5386	6509.5378	7.321E-24	0.58	
6509.5567	6509.5571	4.136E-23	0.27	
6509.621	6509.6208	4.542E-23	0.27	
6509.6581	6509.6614	1.701E-23	0.39	
6509.7383	6509.7382	3.493E-24	0.68	
6509.7697	6509.7694	2.462E-23	0.28	
6509.8367	6509.837	2.528E-24	2.38	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6509.8726	6509.8725	2.181E-23	0.44	
6509.9332	6509.9323	8.612E-24	0.83	
6509.9909	6509.991	1.341E-23	0.61	
6510.097	6510.0966	3.059E-23	0.38	
6510.2766	6510.2773	6.680E-24	0.61	
6510.4071	6510.4074	9.523E-24	0.47	
6510.5103	6510.5099	2.952E-22	0.27	651.51
6510.549	6510.5482	2.860E-24	1.3	
6510.5925	6510.5925	1.971E-24	2.19	
6510.6406	6510.6405	6.176E-23	0.27	
6510.676	6510.676	2.442E-24	1.78	
6510.8595	6510.8593	1.741E-22	0.38	
6510.8875	6510.8891	2.545E-23	0.38	
6510.9558	6510.9556	4.540E-22	0.38	651.9553
6510.9966	6510.9966	2.402E-22	0.38	651.9974
6511.0977	6511.0977	5.837E-23	0.38	
6511.1135	6511.1138	1.272E-23	0.74	
6511.1719	6511.1722	3.087E-23	0.3	
6511.2052	6511.2048	6.925E-24	0.66	
6511.2597	6511.259	8.381E-23	0.27	
6511.2921	6511.2911	1.491E-23	0.39	
6511.3513	6511.3498	4.284E-24	1.09	
6511.4089	6511.409	3.042E-24	1.45	
6511.4252	6511.4246	3.556E-24	1.27	
6511.4727	6511.4731	1.237E-23	0.52	
6511.6067	6511.6044	4.842E-24	1.9	
6511.655	6511.6482	3.235E-23	0.51	
6511.6735	6511.6725	6.637E-23	0.38	6511.6732
6511.7363	6511.7344	4.547E-22	0.38	6511.7369
6511.7926	6511.791	1.624E-23	0.7	
6511.9315	6511.9297	5.484E-24	1.7	
6512.0167	6512.0171	1.342E-23	0.47	
6512.0498	6512.0501	1.946E-22	0.27	
6512.104	6512.1033	6.105E-23	0.27	6512.141
6512.3711	6512.3712	8.513E-22	1.42	6512.3713
6512.4436	6512.4425	6.555E-24	0.98	
6512.4939	6512.4942	7.429E-23	0.38	6512.4944

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6512.5498	6512.5503	3.518E-23	0.38	
6512.6001	6512.6002	1.204E-23	0.62	
6512.6529	6512.6534	5.141E-24	1.24	
6512.6784	6512.679	1.657E-22	0.38	
6512.7991	6512.7991	7.391E-23	0.38	
6512.862	6512.8624	9.042E-24	0.37	
6512.9503	6512.95	1.668E-24	1.5	
6512.9976	6512.9976	4.332E-23	0.22	
6513.0313	6513.0314	1.750E-23	0.24	6513.311
6513.0994	6513.1002	1.287E-24	1.63	
6513.1287	6513.1272	1.683E-23	0.25	
6513.159	6513.1601	3.458E-24	0.69	
6513.2856	6513.2859	2.557E-23	0.27	6513.2863
6513.3464	6513.3479	2.542E-24	0.88	
6513.3813	6513.3815	9.159E-24	0.35	
6513.514	6513.5137	1.931E-24	1.11	
6513.5709	6513.5716	1.705E-24	1.24	
6513.6048	6513.6046	3.335E-24	0.71	
6513.6566	6513.6565	1.541E-23	0.29	
6513.6877	6513.6879	1.864E-24	1.16	
6513.7658	6513.7674	5.918E-23	0.22	
6513.8383	6513.8377	6.085E-23	0.22	
6513.8706	6513.8694	8.750E-25	1.99	
6513.9658	6513.9658	1.198E-24	2.01	
6514.0514	6514.0507	1.825E-23	0.23	
6514.073	6514.073	1.150E-23	0.25	
6514.1518	6514.1518	1.105E-23	0.79	
6514.1626	6514.1626	4.009E-23	0.27	6514.1619
6514.2032	6514.2003	4.975E-24	0.64	
6514.2937	6514.2917	3.748E-23	0.38	6514.293
6514.3742	6514.3723	1.057E-23	0.38	
6514.4272	6514.4254	3.964E-23	0.38	6514.4257
6514.5025	6514.5025	1.199E-24	2.59	
6514.5197	6514.5245	3.682E-24	0.97	
6514.5706	6514.5688	1.308E-23	0.3	
6514.6278	6514.6252	6.091E-24	0.42	
6514.6514	6514.6472	2.526E-24	0.9	



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6514.7092	6514.7092	1.798E-23	0.28	
6514.8286	6514.8268	2.141E-24	0.97	
6514.9175	6514.918	4.456E-24	1.09	
6514.9877	6514.9817	3.556E-24	1.31	
6515.034	6515.034	2.177E-23	0.38	
6515.1526	6515.153	8.141E-25	5.12	
6515.2587	6515.2588	4.541E-22	0.38	6515.2583
6515.3095	6515.3095	7.198E-24	0.75	
6515.4152	6515.4152	3.428E-24	1.38	
6515.4377	6515.4377	2.442E-24	1.86	
6515.4702	6515.4702	2.057E-24	2.17	
6515.5577	6515.5577	2.228E-24	2.02	
6515.6249	6515.6256	5.308E-22	0.27	6515.6242
6515.6399	6515.6406	8.598E-23	0.28	
6515.7521	6515.7472	4.499E-24	1.08	
6515.8207	6515.821	1.329E-24	5.1	
6515.8706	6515.8701	1.359E-23	0.67	
6515.9425	6515.9425	1.484E-23	0.63	
6516.1526	6516.1526	7.932E-24	1.01	
6516.2859	6516.2879	1.005E-21	1.43	6516.2843
6516.3989	6516.3999	4.868E-23	0.27	
6516.4205	6516.4212	9.993E-22	1.43	6516.4194
6516.8167	6516.8175	9.688E-24	0.84	
6516.8395	6516.84	6.087E-24	1.22	
6516.9056	6516.906	4.115E-24	1.71	
6517.0202	6517.0205	8.491E-22	1.44	6517.175
6517.0644	6517.0643	8.016E-24	0.98	
6517.2027	6517.2036	9.927E-22	1.36	6517.223
6517.3011	6517.3011	1.845E-24	1.35	
6517.4923	6517.4923	3.133E-24	0.87	
6517.5255	6517.5256	1.717E-24	1.44	
6517.6947	6517.6947	7.761E-24	0.72	
6517.7678	6517.7686	6.775E-24	0.8	
6517.8236	6517.8236	1.463E-23	0.38	
6517.8833	6517.8837	8.790E-24	0.66	
6517.9366	6517.9403	4.459E-24	0.36	
6517.9996	6517.998	3.002E-24	0.46	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6518.0343	6518.0403	1.243E-24	1.31	
6518.1009	6518.1004	9.433E-25	1.67	
6518.1613	6518.1615	3.366E-23	0.27	
6518.2303	6518.2317	6.078E-24	0.38	
6518.2755	6518.2767	2.608E-23	0.27	
6518.3636	6518.3636	2.283E-23	0.38	
6518.4601	6518.4602	5.193E-24	0.51	
6518.5062	6518.5064	2.232E-23	0.38	
6518.5853	6518.5853	2.017E-24	1.01	
6518.6356	6518.636	9.255E-25	1.32	
6518.6776	6518.677	3.003E-23	0.31	
6518.6889	6518.6867	1.355E-23	0.68	
6518.7585	6518.7583	5.317E-24	0.45	
6518.8108	6518.8111	3.085E-24	0.45	
6518.9003	6518.901	1.292E-23	0.27	
6518.9489	6518.9494	4.077E-24	0.3	
6519.1457	6519.1457	1.718E-24	0.86	
6519.1841	6519.1926	1.846E-24	0.82	
6519.3317	6519.3334	1.848E-24	1.04	
6519.4265	6519.4265	7.815E-24	0.38	
6519.456	6519.456	4.298E-24	0.56	
6519.7064	6519.7085	4.749E-24	0.32	
6519.7505	6519.7505	7.112E-25	1.51	
6519.9339	6519.9335	5.258E-24	0.41	
6519.9721	6519.9721	4.387E-23	0.27	
6520.0114	6520.0117	7.929E-24	0.3	
6520.0973	6520.0973	1.160E-23	0.42	
6520.1817	6520.1817	5.755E-24	0.68	
6520.2077	6520.2077	2.145E-23	0.38	
6520.2366	6520.2378	2.852E-23	0.38	
6520.4222	6520.4222	1.675E-24	2.04	
6520.4462	6520.4462	2.622E-23	0.38	
6520.4958	6520.4968	2.058E-23	0.48	652.4966
6520.5293	6520.5207	1.888E-24	0.95	
6520.6635	6520.6643	3.582E-24	0.51	
6520.7431	6520.7431	2.832E-24	0.63	
6520.8311	6520.8223	1.629E-23	0.51	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6520.8336	6520.8323	1.798E-23	0.38	
6520.9406	6520.9415	2.474E-23	0.4	
6521.1959	6521.196	4.416E-24	1.48	
6521.23	6521.223	2.658E-24	2.34	
6521.3115	6521.3115	3.044E-24	2.07	
6521.3764	6521.3776	1.030E-22	0.27	6521.3765
6521.4116	6521.4115	1.500E-23	0.42	
6521.5499	6521.5507	3.457E-22	0.27	6521.557
6521.6385	6521.6397	3.477E-22	0.27	6521.6397
6521.6901	6521.6914	2.985E-23	0.29	6521.6914
6521.9642	6521.9643	4.648E-23	0.38	
6522.1312	6522.1312	1.171E-23	0.84	
6522.1548	6522.1548	4.383E-24	0.92	
6522.2378	6522.2377	3.633E-23	0.29	
6522.4291	6522.4277	4.860E-24	0.79	
6522.4666	6522.4666	2.067E-23	0.45	
6522.5703	6522.5704	3.914E-22	0.27	6522.574
6522.6386	6522.6397	1.093E-23	0.51	
6522.7639	6522.7639	3.516E-24	1.18	
6522.8222	6522.8215	3.002E-23	0.38	6522.8215
6522.8893	6522.8893	3.002E-24	1.35	
6523.076	6523.0763	8.408E-24	0.4	
6523.1557	6523.156	1.404E-22	0.27	6523.1551
6523.183	6523.1831	3.248E-23	0.27	
6523.3193	6523.3192	7.210E-23	0.27	
6523.4673	6523.4672	3.871E-23	0.38	6523.466
6523.4965	6523.496	3.639E-23	0.38	6523.496
6523.5962	6523.5962	2.793E-23	0.38	
6523.6267	6523.6267	4.420E-24	0.87	
6523.6722	6523.6722	7.338E-24	0.63	
6523.7527	6523.7522	1.597E-22	0.38	6523.7528
6523.9086	6523.9082	1.748E-23	0.34	
6524.053	6524.0526	2.839E-23	0.31	
6524.1555	6524.1555	1.416E-24	2.31	
6524.1884	6524.1889	9.970E-24	0.46	
6524.2416	6524.2412	3.072E-23	0.31	
6524.3888	6524.3887	6.801E-22	0.38	6524.3889

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6524.5533	6524.5533	6.257E-23	0.38	
6524.6588	6524.6556	3.350E-24	3.3	
6524.6951	6524.6945	3.800E-23	0.46	
6524.7964	6524.7952	3.118E-23	0.31	
6524.82	6524.8222	3.759E-24	1.36	
6524.8528	6524.8519	3.171E-23	0.3	
6524.9326	6524.9323	9.841E-23	0.28	
6525.0014	6525.0015	5.025E-24	1.29	
6525.0659	6525.0663	8.262E-23	0.27	
6525.1716	6525.1704	3.991E-24	1.33	
6525.2133	6525.2133	6.394E-24	0.9	
6525.322	6525.322	8.239E-24	0.75	
6525.3552	6525.3546	1.141E-22	0.27	
6525.4437	6525.4437	7.037E-24	0.83	
6525.4957	6525.4957	2.274E-24	2.18	
6525.7792	6525.7785	2.704E-22	0.27	6525.7789
6525.8812	6525.8812	2.060E-24	1.32	
6525.9657	6525.966	2.145E-24	1.28	
6526.2054	6526.2054	7.938E-24	0.52	
6526.2275	6526.2279	5.321E-23	0.38	6526.2282
6526.2772	6526.2779	3.476E-24	0.86	
6526.3405	6526.3405	3.604E-24	0.84	
6526.4983	6526.4987	6.144E-23	0.27	
6526.5846	6526.5849	7.550E-23	0.27	
6526.6313	6526.6329	3.002E-23	0.27	
6526.6717	6526.6721	1.564E-22	0.27	
6526.7301	6526.7291	2.960E-24	0.7	
6526.8128	6526.8137	6.780E-23	0.38	
6526.8784	6526.8783	1.471E-22	0.38	6526.878
6526.9924	6526.993	4.763E-24	0.68	
6527.0794	6527.0802	1.536E-23	0.38	
6527.2624	6527.2644	3.218E-24	0.92	
6527.3063	6527.3067	8.024E-24	0.48	
6527.3414	6527.3417	9.937E-24	0.28	
6527.4865	6527.4866	1.211E-23	0.27	
6527.5151	6527.516	3.723E-24	0.55	
6527.5387	6527.5383	2.865E-23	0.27	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6527.6714	6527.6714	1.102E-23	0.38	
6527.7115	6527.7115	2.916E-24	0.8	
6527.7428	6527.7428	2.532E-24	1.48	
6527.8489	6527.8509	1.819E-22	0.38	
6527.8823	6527.8823	7.375E-24	0.45	
6527.9852	6527.9851	9.193E-23	0.38	
6528.0224	6528.0222	2.119E-22	0.38	
6528.0426	6528.0429	4.223E-23	0.38	
6528.164	6528.164	3.430E-24	0.74	
6528.1876	6528.1876	1.419E-23	0.38	
6528.2813	6528.282	6.318E-23	0.27	
6528.3404	6528.3405	7.267E-23	0.27	
6528.4832	6528.4832	5.922E-24	0.49	
6528.6153	6528.6166	9.920E-24	0.41	
6528.6898	6528.6898	1.374E-24	1.77	
6528.7361	6528.7361	6.060E-24	0.69	
6528.7905	6528.7905	2.996E-23	0.41	
6528.846	6528.846	3.319E-23	0.38	
6528.8813	6528.8813	9.319E-24	0.53	
6529.1025	6529.1025	2.877E-24	0.94	
6529.2132	6529.2135	8.471E-24	0.48	
6529.271	6529.271	3.435E-24	0.82	
6529.3113	6529.3113	2.705E-24	0.99	
6529.3726	6529.3726	2.491E-24	1.06	
6529.4436	6529.444	5.722E-24	0.65	
6529.5659	6529.5655	5.053E-22	0.38	6529.5652
6529.6473	6529.6475	4.537E-22	0.38	6529.6473
6529.7059	6529.7059	1.429E-23	0.75	
6529.8407	6529.8413	3.104E-23	0.29	
6529.9513	6529.9512	8.564E-24	0.72	
6529.9847	6529.9849	7.746E-22	1.3	6529.9852
6530.183	6530.1834	7.777E-22	1.3	653.1843
6530.229	6530.2304	1.295E-22	0.27	
6530.2671	6530.2671	9.660E-24	0.78	
6530.3976	6530.3976	3.349E-24	1.88	
6530.4333	6530.4334	3.396E-23	0.27	
6530.4845	6530.4845	1.275E-23	0.63	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6530.5478	6530.5459	1.145E-22	0.38	
6530.5986	6530.6009	1.305E-23	0.62	
6530.838	6530.8383	4.881E-23	0.27	653.8377
6530.9422	6530.9422	1.233E-23	0.52	
6530.9574	6530.9573	7.547E-23	0.27	653.9585
6530.9781	6530.9795	1.311E-23	0.33	
6531.0698	6531.0698	3.012E-23	0.38	
6531.2121	6531.2121	2.019E-24	1.11	
6531.2415	6531.2415	1.087E-23	0.38	
6531.2693	6531.2711	2.629E-23	0.38	6531.2684
6531.3349	6531.3348	1.674E-23	0.32	
6531.4338	6531.4338	1.113E-23	0.38	
6531.4556	6531.4556	2.964E-24	0.9	
6531.5451	6531.5452	5.225E-23	0.28	6531.5449
6531.5958	6531.5959	5.201E-24	0.53	
6531.6808	6531.6808	2.105E-24	1.07	
6531.7124	6531.7124	1.074E-24	1.91	
6531.7796	6531.7796	2.964E-24	0.83	
6531.8463	6531.8456	2.580E-23	0.32	
6531.8899	6531.8899	1.461E-24	1.48	
6531.9567	6531.9572	4.863E-23	0.28	6531.9579
6532.2209	6532.2209	1.767E-23	0.84	
6532.2568	6532.2563	4.571E-23	0.44	
6532.2835	6532.2835	3.526E-24	3.47	
6532.3661	6532.3661	1.892E-24	6.3	
6532.4418	6532.4423	7.457E-24	1.18	
6532.4964	6532.4964	1.978E-24	6.04	
6532.6014	6532.6007	9.424E-22	1.3	6532.66
6532.6469	6532.646	6.312E-23	0.27	
6532.6815	6532.6747	3.744E-24	2.26	
6532.6991	6532.6991	3.655E-24	3.35	
6532.7926	6532.7926	2.451E-24	4.88	
6532.838	6532.8354	8.361E-24	1.07	
6533.0291	6533.0276	3.957E-23	0.46	6533.279
6533.2583	6533.2588	3.562E-24	0.59	
6533.3425	6533.3434	1.569E-23	0.37	
6533.36	6533.3605	4.262E-23	0.32	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6533.4372	6533.4371	1.846E-24	1.04	
6533.478	6533.4788	5.151E-24	0.68	
6533.5499	6533.5504	2.318E-24	0.8	
6533.7029	6533.7044	1.009E-23	0.38	
6533.7583	6533.7594	1.717E-24	1.01	
6533.8059	6533.804	2.575E-24	0.74	
6533.9287	6533.93	9.013E-25	1.76	
6534.0256	6534.0274	1.459E-24	1.16	
6534.0654	6534.0654	4.593E-24	0.5	
6534.2899	6534.2922	4.021E-24	0.36	
6534.333	6534.3326	4.129E-23	0.22	
6534.3517	6534.3517	1.384E-23	0.22	
6534.3876	6534.3873	2.514E-23	0.22	
6534.4667	6534.4671	4.590E-24	0.32	
6534.5308	6534.5307	2.489E-24	0.71	
6534.5892	6534.5907	4.535E-24	0.34	
6534.6169	6534.6179	4.596E-24	0.34	
6534.666	6534.6664	7.821E-24	0.28	
6534.7851	6534.7853	6.094E-24	0.54	
6534.7993	6534.7993	1.034E-23	0.37	
6534.8479	6534.8485	3.503E-24	0.4	
6534.8855	6534.8877	1.418E-24	0.6	
6534.933	6534.9317	4.251E-24	0.36	
6534.9599	6534.9593	3.043E-24	0.39	
6535.0274	6535.0274	5.782E-24	0.26	
6535.0726	6535.0728	5.563E-24	0.26	
6535.1228	6535.1229	1.339E-24	1.48	
6535.149	6535.151	1.644E-24	0.61	
6535.1892	6535.1914	6.805E-24	0.25	
6535.2599	6535.2607	1.645E-24	0.6	
6535.2974	6535.2989	1.274E-24	0.92	
6535.3652	6535.364	4.731E-24	0.29	
6535.4222	6535.4222	1.382E-24	1.51	
6535.4648	6535.4646	1.780E-23	0.27	
6535.5656	6535.5656	5.397E-24	0.53	
6535.8446	6535.8446	1.036E-24	2.51	
6535.9222	6535.9223	6.885E-23	0.27	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6535.9729	6535.9736	2.073E-24	1.1	
6536.0021	6536.0021	4.836E-24	0.57	
6536.0942	6536.0941	1.448E-23	0.36	
6536.1786	6536.1786	2.634E-24	1.14	
6536.258	6536.2574	1.872E-23	0.89	6536.2585
6536.2845	6536.2831	5.432E-23	0.38	
6536.4751	6536.4759	1.533E-21	1.29	6536.476
6536.5195	6536.5195	3.363E-24	2.21	
6536.5702	6536.5701	3.191E-24	2.32	
6536.5926	6536.5933	1.922E-23	0.33	
6536.6325	6536.6318	1.467E-21	1.31	6536.6318
6536.7778	6536.7759	3.190E-24	1.46	
6536.8074	6536.8073	1.806E-23	0.33	
6536.8798	6536.881	2.285E-24	1.94	
6536.9483	6536.9489	2.513E-23	0.29	
6536.9738	6536.9741	9.987E-24	0.48	
6537.1018	6537.1024	9.924E-24	0.48	
6537.3011	6537.306	3.578E-24	0.92	
6537.3443	6537.3444	1.451E-22	0.38	6537.3446
6537.3856	6537.3856	4.832E-24	1.02	
6537.4913	6537.4913	3.986E-23	0.38	
6537.6323	6537.632	2.013E-23	0.28	
6537.6555	6537.6551	1.302E-22	0.27	6537.6551
6537.8407	6537.8407	6.359E-24	0.43	
6537.9948	6537.9942	2.157E-24	1.13	
6538.0316	6538.031	2.243E-24	1.09	
6538.1073	6538.1067	3.581E-24	0.75	
6538.1666	6538.166	3.063E-24	0.85	
6538.5237	6538.5234	1.740E-23	0.27	6538.527
6538.6503	6538.6497	4.418E-24	0.68	
6538.6774	6538.6776	2.533E-22	0.27	
6538.7013	6538.701	2.007E-23	0.27	
6538.7442	6538.7442	1.001E-23	0.31	
6538.8577	6538.8589	2.416E-24	1.84	
6538.8769	6538.8773	2.709E-23	0.38	
6538.9963	6538.9967	1.104E-22	0.38	
6539.0442	6539.0442	3.926E-24	1.04	



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6539.0678	6539.0678	6.865E-24	0.99	
6539.1228	6539.1235	4.935E-23	0.38	
6539.182	6539.182	1.787E-23	0.47	
6539.2283	6539.2293	3.035E-23	0.27	
6539.276	6539.2768	4.727E-24	0.65	
6539.3974	6539.3987	3.282E-22	0.27	
6539.4371	6539.4374	4.345E-23	0.27	
6539.4844	6539.4843	2.472E-22	0.27	6539.4831
6539.5785	6539.5787	1.007E-23	0.57	
6539.6051	6539.605	2.242E-23	0.33	
6539.8818	6539.8822	2.330E-23	0.54	
6539.929	6539.9304	1.151E-22	0.38	
6539.9631	6539.9633	4.142E-24	2.21	
6540.0135	6540.0135	2.630E-24	1.68	
6540.1345	6540.1346	6.169E-24	0.69	
6540.3523	6540.3533	1.100E-22	0.27	654.3533
6540.3875	6540.3888	7.530E-24	0.6	
6540.4116	6540.4105	2.543E-24	1.81	
6540.4393	6540.4407	3.357E-23	0.27	654.444
6540.487	6540.4865	3.402E-23	0.32	654.4868
6540.5461	6540.5475	2.418E-23	0.46	
6540.6302	6540.631	7.242E-24	1.08	
6540.7957	6540.7965	1.384E-23	0.76	
6540.8166	6540.818	6.445E-23	0.38	
6541.0027	6541.0029	1.127E-23	0.58	
6541.0415	6541.0415	4.684E-24	1.44	
6541.161	6541.1622	8.415E-22	1.3	6541.1629
6541.1947	6541.196	1.991E-22	0.27	6541.1959
6541.2378	6541.238	1.351E-23	0.52	
6541.2969	6541.2973	1.963E-23	0.48	
6541.4409	6541.4409	6.654E-24	1.4	
6541.5263	6541.5263	8.901E-24	1.09	
6541.5884	6541.5884	2.089E-22	0.38	6541.592
6541.623	6541.6243	3.392E-23	0.43	
6541.6625	6541.6638	2.092E-22	0.38	6541.6646
6541.7068	6541.7081	1.926E-22	0.38	6541.789
6541.7696	6541.7709	3.215E-23	0.44	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6541.8167	6541.8181	1.013E-22	0.27	6541.818
6541.9359	6541.936	5.690E-24	0.97	
6542.0585	6542.0598	2.801E-22	0.27	
6542.0828	6542.0842	3.871E-22	0.27	
6542.1165	6542.1173	3.749E-23	0.3	
6542.164	6542.1655	8.051E-24	0.63	
6542.2571	6542.2582	1.272E-22	0.27	
6542.2847	6542.2825	4.268E-24	1.27	
6542.3813	6542.3825	5.436E-23	0.38	
6542.4238	6542.425	5.927E-23	0.38	
6542.4583	6542.4596	5.130E-24	1.06	
6542.4984	6542.4984	3.061E-24	1.65	
6542.5431	6542.5431	1.983E-24	2.51	
6542.621	6542.6227	5.832E-23	0.38	
6542.7206	6542.7206	1.035E-24	5.08	
6542.7992	6542.7989	1.012E-22	0.27	
6542.8238	6542.8247	3.104E-23	0.29	
6542.869	6542.8689	4.742E-24	1.17	
6542.9114	6542.9114	3.966E-24	1.36	
6543.2626	6543.2626	2.584E-23	0.76	
6543.3054	6543.3056	1.008E-21	1.31	6543.364
6543.3993	6543.3987	8.116E-24	1.18	
6543.4645	6543.4639	4.922E-24	1.82	
6543.6673	6543.668	8.847E-22	1.32	6543.6683
6543.7306	6543.7299	2.510E-24	2.26	
6543.7887	6543.7881	1.529E-24	3.62	
6543.9115	6543.908	5.332E-23	0.29	
6544.0227	6544.0226	3.202E-23	0.66	
6544.0477	6544.0478	2.260E-23	0.85	
6544.0945	6544.0956	3.204E-22	0.38	6544.956
6544.3988	6544.3988	1.763E-23	0.32	
6544.5208	6544.5208	1.166E-24	6.35	
6544.7236	6544.7237	7.569E-24	0.48	
6544.8444	6544.8439	3.368E-24	0.95	
6544.9713	6544.9707	8.896E-24	0.57	
6544.9904	6544.9898	5.484E-24	0.81	
6545.0656	6545.0647	3.753E-22	0.38	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6545.2189	6545.219	1.926E-23	0.27	
6545.3702	6545.3712	9.447E-24	0.33	
6545.3911	6545.3912	3.092E-23	0.27	
6545.4906	6545.49	1.667E-24	1.16	
6545.5271	6545.5274	6.769E-23	0.27	
6545.7888	6545.7902	2.083E-22	0.38	6545.7898
6545.86	6545.8615	1.640E-23	0.38	
6545.9498	6545.9498	1.208E-24	1.78	
6545.9793	6545.9793	2.158E-24	1.08	
6546.0061	6546.0063	3.495E-24	0.74	
6546.098	6546.0998	8.199E-25	2.94	
6546.1189	6546.12	3.625E-24	0.81	
6546.1955	6546.1971	1.286E-23	0.27	
6546.2743	6546.2743	1.239E-23	0.28	
6546.2924	6546.292	2.263E-24	0.97	
6546.3209	6546.3235	3.171E-24	0.67	
6546.5073	6546.5095	2.835E-23	0.38	
6546.5466	6546.5446	1.929E-23	0.38	
6546.614	6546.6112	2.641E-23	0.38	
6546.6858	6546.6847	3.107E-24	0.94	
6546.766	6546.7659	3.853E-23	0.38	
6546.8388	6546.844	1.428E-22	0.38	
6546.8676	6546.867	2.546E-24	1.18	
6547.0417	6547.0443	2.122E-22	0.27	
6547.0958	6547.0983	2.688E-23	0.27	
6547.1553	6547.1536	1.252E-23	0.3	
6547.2291	6547.2292	2.715E-24	0.91	
6547.2554	6547.2549	1.641E-23	0.27	
6547.2807	6547.2799	3.730E-23	0.27	
6547.3075	6547.3068	1.181E-23	0.29	
6547.3504	6547.3502	6.161E-24	0.42	
6547.4704	6547.4694	2.615E-23	0.38	
6547.4925	6547.4925	8.160E-24	0.73	
6547.5618	6547.5613	5.610E-24	0.7	
6547.5868	6547.5858	3.409E-24	1.03	
6547.6494	6547.6485	1.899E-24	1.64	
6547.8512	6547.8506	1.727E-22	0.38	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6547.9279	6547.9265	3.411E-24	1	
6547.949	6547.9474	7.491E-24	0.54	
6548.0164	6548.0165	2.648E-24	1.12	
6548.0845	6548.0844	2.152E-23	0.29	
6548.1112	6548.1115	7.406E-24	0.5	
6548.1474	6548.1474	4.455E-23	0.27	
6548.2374	6548.2373	8.240E-24	0.45	
6548.3275	6548.3272	9.667E-23	0.38	
6548.4444	6548.4441	1.018E-23	0.76	
6548.5174	6548.5174	5.821E-24	1.23	
6548.5428	6548.5419	3.950E-23	0.38	
6548.6491	6548.6511	5.690E-23	0.4	
6548.6666	6548.666	1.467E-23	1.02	
6548.7501	6548.75	3.014E-23	0.27	
6548.8643	6548.8634	6.779E-22	1.29	6548.8635
6548.9214	6548.9206	6.574E-22	0.27	6548.926
6548.9805	6548.9799	1.445E-23	0.42	
6549.067	6549.0662	1.554E-22	0.27	
6549.0876	6549.0868	8.555E-23	0.27	
6549.3466	6549.346	8.114E-24	0.91	
6549.3803	6549.3776	9.453E-24	0.81	
6549.4535	6549.4528	1.102E-22	0.38	6549.4536
6549.6794	6549.6788	1.817E-23	0.55	
6549.7142	6549.714	4.404E-22	0.27	6549.7151
6549.7668	6549.767	2.327E-23	0.32	
6549.8207	6549.8207	3.237E-24	2.23	
6549.9384	6549.9385	2.080E-23	0.51	
6549.972	6549.9726	4.290E-22	0.38	6549.9726
6550.0251	6550.0251	1.045E-23	0.79	
6550.0754	6550.0754	7.208E-24	1.06	
6550.1637	6550.164	1.542E-22	0.38	655.1644
6550.2549	6550.2549	4.614E-23	0.38	
6550.306	6550.3061	9.103E-23	0.38	
6550.3416	6550.3415	2.227E-23	0.47	
6550.4224	6550.4226	7.165E-24	1.07	
6550.4567	6550.4566	1.618E-22	0.27	655.4577
6550.5174	6550.5175	1.648E-22	0.27	655.5187

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6550.5385	6550.5387	1.604E-22	0.27	655.5377
6550.6283	6550.6298	9.589E-24	0.44	
6550.6551	6550.6541	7.355E-23	0.27	
6550.8655	6550.865	8.065E-24	0.87	
6550.959	6550.9626	3.968E-24	1.56	
6550.9967	6550.9986	1.208E-23	0.64	
6551.0537	6551.0606	2.458E-24	2.41	
6551.1864	6551.1864	9.144E-24	0.79	
6551.3449	6551.3441	9.415E-23	0.27	6551.3449
6551.5232	6551.5233	9.494E-23	0.27	
6551.5604	6551.5589	9.779E-24	0.5	
6551.5834	6551.5843	2.934E-23	0.27	
6551.6293	6551.6297	5.125E-23	0.27	
6551.7535	6551.7539	6.966E-23	0.38	6551.7535
6551.812	6551.8125	4.575E-24	1.22	
6551.8328	6551.8336	4.230E-24	1.3	
6551.8817	6551.8824	5.870E-24	0.83	
6551.9519	6551.9525	7.597E-24	0.69	
6551.983	6551.9837	2.201E-24	1.94	
6552.0288	6552.0296	5.654E-23	0.38	
6552.0793	6552.0802	2.633E-24	1.63	
6552.1434	6552.1442	2.201E-24	1.91	
6552.204	6552.2048	2.719E-24	1.58	
6552.3606	6552.3544	1.985E-24	2.11	
6552.4209	6552.4214	3.766E-23	0.27	6552.422
6552.4802	6552.4814	2.719E-24	1.59	
6552.5131	6552.5142	8.222E-24	0.49	
6552.5419	6552.542	3.108E-24	1.67	
6552.6453	6552.6454	1.039E-22	0.38	6552.6455
6552.6767	6552.6779	4.014E-24	1.44	
6552.7243	6552.7244	5.707E-22	0.38	6552.7246
6552.7695	6552.7694	5.218E-23	0.38	6552.7699
6552.8685	6552.8694	2.482E-23	0.38	
6552.9154	6552.9165	3.841E-24	1.39	
6553.0326	6553.0316	8.643E-24	0.47	
6553.0635	6553.0632	2.847E-24	1.46	
6553.2396	6553.2364	7.733E-24	0.52	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6553.2656	6553.2654	1.855E-24	2.25	
6553.3434	6553.3428	1.073E-22	0.27	6553.343
6553.4396	6553.4394	3.752E-24	1.14	
6553.5716	6553.572	9.273E-24	0.58	
6553.6843	6553.6844	6.254E-24	0.97	
6553.7046	6553.705	9.359E-24	0.71	
6553.7882	6553.7911	2.200E-24	1.82	
6553.8592	6553.8588	3.461E-23	0.27	6553.863
6553.968	6553.9674	4.697E-24	0.53	
6554.0738	6554.0734	1.647E-23	0.28	
6554.4908	6554.49	9.081E-23	0.38	6554.4918
6554.6364	6554.6364	3.200E-23	0.27	
6554.6686	6554.6686	2.203E-23	0.27	
6554.6916	6554.6906	4.273E-24	2.25	
6554.7178	6554.7178	1.079E-24	4.45	
6554.7962	6554.796	1.554E-24	3.15	
6554.9072	6554.9076	1.860E-22	0.27	
6555.0077	6555.0077	9.493E-24	0.3	
6555.1048	6555.1049	2.158E-24	1.29	
6555.1471	6555.148	2.590E-24	1.11	
6555.1942	6555.1951	9.461E-23	0.38	
6555.2402	6555.242	2.374E-24	1.2	
6555.294	6555.2949	1.152E-23	0.4	
6555.3272	6555.3273	4.359E-24	0.74	
6555.3736	6555.3742	4.536E-23	0.38	
6555.4135	6555.4142	3.332E-23	0.38	
6555.4976	6555.4977	2.849E-24	1.02	
6555.5378	6555.539	1.023E-23	0.43	
6555.5621	6555.5622	2.935E-24	1.05	
6555.6075	6555.6061	8.993E-24	0.41	
6555.7508	6555.7512	3.921E-23	0.22	
6555.7857	6555.7858	1.177E-22	0.22	
6555.8132	6555.813	6.542E-24	0.5	
6555.8939	6555.893	6.424E-24	0.52	
6555.9217	6555.9217	2.273E-24	3.44	
6555.994	6555.9936	1.995E-21	0.27	6555.9938
6556.0165	6556.0161	8.935E-24	1.31	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6556.1049	6556.105	1.965E-21	1.63	6556.149
6556.2048	6556.2048	8.462E-24	1.06	
6556.2691	6556.2706	1.118E-23	0.62	
6556.3234	6556.3229	9.415E-23	0.27	
6556.3603	6556.3603	4.126E-24	1.98	
6556.5453	6556.5453	9.262E-24	1.45	
6556.56	6556.5595	1.016E-23	0.41	
6556.631	6556.6312	3.560E-23	0.23	
6556.7635	6556.7634	9.002E-23	0.22	
6556.809	6556.8099	8.212E-24	0.38	
6556.8712	6556.8716	6.488E-24	0.45	
6556.9601	6556.9615	6.193E-24	0.46	
6557.1318	6557.1333	2.443E-24	0.89	
6557.2481	6557.248	9.395E-24	0.38	
6557.2782	6557.2756	1.980E-24	1.06	
6557.3136	6557.3158	1.980E-24	1.05	
6557.4304	6557.4299	4.639E-23	0.27	
6557.6672	6557.667	7.242E-23	0.27	
6557.7205	6557.7191	3.204E-23	0.38	
6557.8047	6557.8033	7.254E-23	0.38	
6557.8328	6557.833	3.199E-24	1.78	
6557.9196	6557.918	1.023E-23	0.67	
6557.9574	6557.9561	2.530E-23	0.38	
6558.0355	6558.0344	4.589E-24	1.26	
6558.1049	6558.105	2.194E-22	0.38	6558.133
6558.1871	6558.1908	2.185E-23	0.29	
6558.2237	6558.2235	3.769E-24	1.07	
6558.4203	6558.4209	4.019E-24	1.02	
6558.4647	6558.4645	1.696E-22	0.27	6558.4645
6558.583	6558.5828	1.674E-22	0.38	6558.5833
6558.6595	6558.6602	8.194E-23	0.38	6558.659
6558.6856	6558.6856	4.424E-24	1.37	
6558.8778	6558.8778	5.730E-24	1.06	
6558.913	6558.913	1.028E-23	0.68	
6558.9584	6558.9583	2.335E-22	0.27	6558.9575
6559.0508	6559.0509	3.112E-22	0.27	6559.516
6559.1368	6559.1365	1.762E-22	0.27	6559.1377

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6559.1735	6559.1734	2.174E-22	0.27	6559.1743
6559.2172	6559.2171	2.347E-22	0.27	6559.2184
6559.26	6559.26	2.183E-22	0.27	6559.2591
6559.3404	6559.3405	1.608E-22	0.27	6559.3415
6559.3612	6559.3619	1.439E-23	0.42	
6559.4528	6559.4532	8.442E-24	0.66	
6559.5026	6559.5016	7.594E-24	0.81	
6559.5692	6559.5683	8.565E-24	0.75	
6559.5987	6559.5992	7.822E-23	0.38	6559.5996
6559.6646	6559.6646	1.354E-23	0.56	
6559.6785	6559.6785	2.607E-23	0.38	6559.679
6559.6994	6559.6994	2.498E-23	0.39	
6560.0372	6560.0374	1.409E-23	0.36	
6560.0696	6560.0711	5.211E-24	0.76	
6560.1637	6560.1648	4.576E-23	0.27	
6560.195	6560.195	3.953E-24	0.96	
6560.2668	6560.2686	2.951E-24	1.99	
6560.2875	6560.2881	1.362E-23	0.58	
6560.5137	6560.5137	7.256E-23	0.38	
6560.5661	6560.5658	3.449E-23	0.38	
6560.7535	6560.7534	4.495E-22	0.27	656.7534
6560.8172	6560.8123	2.383E-23	0.3	
6560.8449	6560.845	3.896E-22	0.27	656.8452
6560.9466	6560.9442	9.449E-23	0.27	
6560.9682	6560.9688	6.090E-23	0.27	
6560.994	6560.9945	1.213E-22	0.22	
6561.0227	6561.0226	4.333E-23	0.27	
6561.14	6561.1386	5.089E-23	0.38	
6561.219	6561.2183	2.300E-23	0.45	
6561.304	6561.3035	1.609E-23	0.57	
6561.3858	6561.3851	8.763E-23	0.38	
6561.7599	6561.7594	1.152E-23	0.51	
6561.9086	6561.9083	9.792E-23	0.27	
6561.9308	6561.929	1.080E-23	0.59	
6562.0289	6562.0285	3.455E-22	0.38	6562.28
6562.1746	6562.1751	1.293E-22	0.38	6562.1754
6562.2483	6562.2479	3.270E-22	0.38	6562.2478



TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6562.3026	6562.302	6.151E-24	1.23	
6562.3906	6562.3913	4.297E-24	1.66	
6562.4306	6562.4303	1.816E-23	0.54	
6562.5808	6562.5814	6.824E-23	0.27	
6562.7594	6562.7597	1.879E-23	0.3	
6562.851	6562.851	1.500E-22	0.27	6562.859
6562.8981	6562.8983	1.278E-22	0.38	
6562.9374	6562.9376	1.702E-23	0.38	
6563.0461	6563.0467	4.158E-23	0.38	
6563.1278	6563.1282	1.805E-22	0.38	6563.1271
6563.1661	6563.1661	2.098E-23	0.38	
6563.2515	6563.2535	9.083E-24	0.36	
6563.3245	6563.3256	1.001E-23	0.34	
6563.3569	6563.357	5.670E-24	0.5	
6563.4448	6563.4458	6.087E-24	0.48	
6563.5166	6563.5176	4.029E-23	0.27	
6563.58	6563.5809	3.537E-23	0.27	
6563.6068	6563.6071	6.656E-24	0.85	
6563.6197	6563.6222	9.320E-24	0.42	
6563.7838	6563.784	3.480E-23	0.38	
6563.8318	6563.8332	3.568E-23	0.38	
6563.8929	6563.8944	1.727E-23	0.38	
6563.945	6563.945	1.643E-24	1.86	
6563.9987	6563.9997	4.255E-24	0.84	
6564.0266	6564.0271	1.015E-23	0.46	
6564.0657	6564.0664	6.699E-24	0.6	
6564.1348	6564.1346	2.397E-22	0.27	6564.1358
6564.2791	6564.2795	7.907E-23	0.27	6564.2795
6564.4672	6564.4672	1.187E-24	2.23	
6564.5442	6564.5442	1.888E-24	1.47	
6564.5735	6564.573	4.675E-23	0.38	6564.5734
6564.6953	6564.6958	3.375E-24	1.35	
6564.7869	6564.7872	4.249E-23	0.38	
6564.8126	6564.8113	2.247E-22	0.38	
6564.9536	6564.9523	6.666E-24	0.79	
6564.9928	6564.992	1.725E-22	0.27	
6565.0408	6565.0364	2.700E-24	1.67	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6565.0889	6565.0882	1.868E-23	0.32	
6565.1106	6565.1105	1.374E-22	0.27	
6565.2203	6565.2212	1.793E-23	0.31	
6565.2608	6565.26	2.953E-24	1.51	
6565.3747	6565.3747	2.106E-24	5.35	
6565.4657	6565.4649	4.435E-22	0.38	6565.4654
6565.5324	6565.5318	5.645E-24	1.06	
6565.5719	6565.5718	2.296E-23	0.4	
6565.6429	6565.6422	3.581E-23	0.38	
6565.7281	6565.7275	8.093E-23	0.38	6565.7275
6565.7729	6565.773	2.696E-24	2.09	
6565.7838	6565.784	2.612E-24	2.15	
6565.8189	6565.8191	1.394E-23	0.51	
6565.8975	6565.8978	1.023E-22	0.27	6565.897
6565.9604	6565.9597	5.316E-23	0.27	
6566.0454	6566.0454	1.688E-24	4.86	
6566.2827	6566.283	2.152E-24	3.86	
6566.3324	6566.3324	2.827E-24	2.98	
6566.4182	6566.4172	1.236E-22	0.38	6566.4177
6566.5265	6566.5258	9.413E-23	0.38	
6566.5446	6566.5442	5.784E-22	0.38	6566.5441
6566.6877	6566.6872	1.186E-23	0.81	
6566.7412	6566.7412	1.772E-24	4.36	
6566.8455	6566.8461	1.261E-23	0.5	
6566.8684	6566.8689	7.012E-24	0.79	
6566.9433	6566.9438	6.062E-23	0.27	
6566.9875	6566.9877	1.387E-22	0.27	
6567.1651	6567.1651	5.818E-24	1.04	
6567.266	6567.2675	7.016E-23	0.38	6567.2673
6567.3452	6567.3466	1.075E-23	0.66	
6567.4051	6567.4116	4.511E-24	1.29	
6567.5123	6567.514	1.197E-23	0.6	
6567.5523	6567.5531	3.584E-24	1.59	
6567.6011	6567.6013	7.200E-22	0.27	6567.65
6567.6696	6567.6695	1.287E-23	0.57	
6567.6961	6567.6962	9.739E-24	0.73	
6567.7334	6567.7336	5.771E-22	0.27	6567.7343

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6567.7925	6567.7928	6.736E-22	0.27	6567.7913
6567.8229	6567.8231	5.817E-22	0.27	6567.8237
6567.897	6567.8949	7.336E-24	0.86	
6567.9417	6567.9428	5.354E-24	1.11	
6567.9801	6567.9804	3.087E-23	0.36	
6568.0469	6568.0469	9.282E-24	3.32	
6568.245	6568.2448	2.079E-22	0.38	6568.2446
6568.3662	6568.366	7.625E-22	0.38	6568.3657
6568.4863	6568.4855	8.196E-22	0.27	6568.4848
6568.547	6568.5468	3.291E-22	0.27	6568.5472
6568.5878	6568.5886	9.667E-24	1.89	
6568.7001	6568.7004	1.233E-23	1.68	
6568.7231	6568.7232	1.005E-23	2.03	
6568.9217	6568.9211	9.580E-23	0.4	
6568.9811	6568.9802	3.581E-22	0.38	6568.985
6569.0352	6569.0352	5.814E-24	3.75	
6569.0797	6569.0797	1.959E-22	0.38	
6569.1555	6569.1555	3.387E-23	0.79	
6569.3459	6569.3459	5.661E-23	0.31	
6569.3877	6569.3883	3.244E-24	0.83	
6569.4246	6569.4247	9.828E-24	0.39	
6569.4756	6569.4764	4.248E-24	0.65	
6569.586	6569.5862	1.554E-23	0.37	
6569.6115	6569.6119	5.800E-24	0.55	
6569.6602	6569.6602	2.149E-24	1.17	
6569.6777	6569.678	8.847E-25	2.57	
6569.9056	6569.9071	3.581E-24	0.75	
6569.9694	6569.9695	2.949E-24	0.88	
6570.009	6570.0091	1.681E-23	0.38	
6570.0819	6570.082	2.064E-24	1.17	
6570.1433	6570.1434	8.969E-23	0.27	657.1429
6570.1748	6570.1745	3.381E-24	0.74	
6570.4456	6570.4456	4.695E-24	0.53	
6570.5032	6570.5033	3.310E-24	0.69	
6570.5385	6570.5383	2.787E-23	0.27	
6570.636	6570.6374	5.266E-23	0.38	
6570.6589	6570.66	2.187E-23	0.4	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6570.7372	6570.7378	9.226E-24	0.68	
6570.7997	6570.801	3.623E-24	1.31	
6570.8471	6570.8485	1.420E-23	0.48	
6571.0222	6571.022	8.264E-23	0.27	6571.225
6571.0668	6571.07	9.072E-25	3.72	
6571.1457	6571.1456	9.479E-24	1.12	
6571.1584	6571.158	3.983E-23	0.36	
6571.1796	6571.1812	3.530E-24	1.03	
6571.2828	6571.2829	9.593E-24	0.39	
6571.3975	6571.3975	1.644E-23	0.29	
6571.425	6571.4247	3.257E-23	0.38	
6571.4534	6571.4537	1.558E-22	0.38	
6571.7208	6571.7208	1.327E-23	0.41	
6571.8777	6571.8785	1.587E-23	0.27	
6571.944	6571.9444	5.714E-24	0.47	
6572.0802	6572.0809	5.665E-24	0.51	
6572.1132	6572.1137	1.679E-22	0.27	6572.1133
6572.1689	6572.1682	3.770E-24	0.65	
6572.3032	6572.3043	9.605E-24	0.44	
6572.3484	6572.35	9.311E-24	0.61	
6572.3659	6572.3663	1.003E-23	0.58	
6572.4242	6572.4257	3.455E-24	0.97	
6572.4475	6572.4482	2.570E-24	1.24	
6572.5108	6572.512	9.778E-23	0.38	6572.5112
6572.5572	6572.5587	2.865E-24	1.06	
6572.646	6572.6467	4.255E-24	0.77	
6572.7435	6572.7444	1.533E-23	0.38	
6572.796	6572.798	5.480E-24	0.59	
6572.871	6572.8721	7.975E-24	0.61	
6573.0376	6573.0388	4.659E-24	0.7	
6573.3474	6573.3496	5.435E-23	0.38	
6573.3874	6573.3883	6.067E-24	1.36	
6573.4459	6573.448	3.863E-23	0.38	
6573.5306	6573.5324	3.926E-23	0.38	
6573.5707	6573.5715	6.783E-24	1.26	
6573.6151	6573.616	1.143E-22	0.27	6573.6143
6573.7293	6573.7299	1.479E-22	0.27	

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6573.7705	6573.7711	1.384E-22	0.27	
6573.784	6573.7833	2.652E-23	0.7	
6573.8205	6573.8221	1.148E-23	0.44	
6573.8841	6573.8838	1.032E-23	0.47	
6573.9157	6573.9178	3.878E-24	1.02	
6573.9532	6573.9538	5.483E-24	0.76	
6574.0257	6574.0223	1.012E-23	0.7	
6574.0643	6574.0643	4.638E-24	1.04	
6574.0899	6574.089	1.003E-23	0.59	
6574.1151	6574.1151	4.764E-24	1.02	
6574.1975	6574.1977	4.638E-24	1.01	
6574.272	6574.271	3.145E-23	0.38	
6574.296	6574.296	4.132E-24	1.16	
6574.4178	6574.4171	4.511E-22	0.38	6574.4159
6574.4438	6574.4438	8.010E-24	0.76	
6574.4792	6574.4784	1.202E-23	0.51	
6574.5742	6574.5745	1.279E-23	0.45	
6574.6854	6574.6857	9.950E-23	0.27	
6574.7501	6574.7501	1.489E-24	2.78	
6574.788	6574.789	9.343E-24	0.56	
6574.8666	6574.8666	2.880E-23	0.38	
6574.8882	6574.8905	3.944E-23	0.55	6574.8896
6575.0008	6575.0008	7.878E-24	2.02	
6575.0639	6575.064	5.350E-24	2.88	
6575.1165	6575.1173	7.330E-24	2.15	
6575.3633	6575.3654	4.382E-24	3.47	
6575.432	6575.4322	1.558E-23	0.55	
6575.4701	6575.4703	8.247E-24	0.92	
6575.5078	6575.5082	4.991E-23	0.28	
6575.5296	6575.5303	2.969E-22	0.22	6575.533
6575.5475	6575.5494	4.443E-23	0.44	
6575.6243	6575.6225	7.070E-24	1.84	
6575.6807	6575.6825	4.472E-22	0.27	6575.6828
6575.7222	6575.7238	4.852E-23	0.39	
6575.7692	6575.7692	3.709E-24	3.38	
6575.8111	6575.8127	8.624E-23	0.27	
6575.9339	6575.9358	4.509E-22	0.38	6575.9336

TABLE 1 – (continued)

$\sigma_{fit}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\sigma_{label}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$S$ ( $\text{cm}/\text{mol}$ )	$\delta S$ (%)	$\sigma_{Lees}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
6576.0302	6576.0329	2.287E-23	1.11	
6576.0611	6576.0642	1.021E-23	2.24	
6576.1582	6576.1619	3.852E-22	0.27	
6576.1737	6576.1752	4.868E-22	0.38	6576.174
6576.2531	6576.2541	3.773E-22	0.22	6576.2528
6576.2917	6576.2922	4.853E-22	0.27	6576.2919
6576.3563	6576.3569	2.376E-22	0.27	6576.3569
6576.4415	6576.4426	1.548E-22	0.38	6576.442
6576.4784	6576.4789	1.098E-23	0.63	
6576.5132	6576.5112	1.414E-23	0.67	
6576.5567	6576.5628	5.069E-23	0.65	
6576.6023	6576.6024	4.095E-23	0.38	
6576.7252	6576.7252	1.723E-23	0.59	
6576.7474	6576.7488	2.915E-22	0.38	6576.7498
6576.8964	6576.8964	7.204E-24	0.89	
6576.9602	6576.96	1.606E-22	0.38	6576.959
6577.0156	6577.0156	7.373E-24	0.88	
6577.1829	6577.1848	1.296E-22	0.38	6577.1848
6577.2531	6577.2544	4.885E-23	0.3	
6577.279	6577.2801	9.464E-23	0.27	
6577.3656	6577.3666	9.764E-24	0.53	
6577.423	6577.4237	3.684E-23	0.27	
6577.6243	6577.6268	1.535E-23	0.58	
6577.6727	6577.6753	2.003E-23	0.49	
6577.7442	6577.7468	2.230E-23	0.46	
6577.8182	6577.8182	3.794E-24	1.8	
6577.8502	6577.8524	6.172E-23	0.38	
6577.9	6577.9009	2.053E-23	0.52	6577.91
6578.2229	6578.2263	4.195E-23	0.38	
6578.28	6578.2828	3.612E-22	0.38	6578.2826
6578.3388	6578.3414	3.377E-23	0.35	
6578.4104	6578.4112	3.702E-22	0.35	6578.413