

**ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE**

**FAKULTA JADERNÁ A FYZIKÁLNĚ INŽENÝRSKÁ**

**KATEDRA JADERNÉ CHEMIE**

**DISERTAČNÍ PRÁCE**

**Studium radikálů jednoduchých prebiotických molekul**

Praha 2021

Ing. Adam Pastorek

## **Poděkování**

Na tomto místě bych rád poděkoval především svému školiteli prof. RNDr. Svatopluku Civišovi, DSc., který byl mým školitelem po dlouhých 9 let a provedl mě tak nejen doktorským, ale i bakalářským a magisterským studiem na FJFI ČVUT. Prof. Civiš mi svým příkladným vedením a radami pomohl vytříbit kreativitu, improvizaci a smysl pro vědecké uvažování, což jsou vlastnosti pravých vědců a výzkumníků.

Dále bych rád poděkoval své rodině a kolegům v práci, kteří mi umožnili nerušeně vykonávat svou honbu za věděním. V neposlední řadě bych rád poděkoval své přítelkyni, která mi osvěžila velkou roli partnerů ve vědeckém i osobním životě a jejich enormní vliv na pozitivně naladěnou psychiku člověka.

## Bibliografický záznam

---

<b>Autor</b>	Ing. Adam Pastorek, České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderné chemie
<b>Název práce</b>	Studium radikálů jednoduchých prebiotických molekul
<b>Studijní program</b>	Aplikace přírodních věd
<b>Studijní obor</b>	Jaderná chemie
<b>Školitel</b>	prof. RNDr. Svatopluk Civiš, DSc., Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, Akademie věd České republiky
<b>Akademický rok</b>	2020/2021
<b>Počet stran</b>	182
<b>Klíčová slova</b>	Radikály, prebiotická chemie, FTIR, spektroskopie, CO, OH, NH, CN, CH

---

## Bibliographic entry

---

<b>Author</b>	Ing. Adam Pastorek, Czech technical university in Prague, Faculty of nuclear sciences and physical engineering, Department of nuclear chemistry
<b>Title of Dissertation</b>	Study of radicals of simple prebiotic molecules
<b>Degree programme</b>	Application of natural sciences
<b>Field of study</b>	Nuclear chemistry
<b>Supervisor</b>	prof. RNDr. Svatopluk Civiš, DSc., J. Heyrovsky institute of physical chemistry, Czech Academy of sciences
<b>Academic year</b>	2020/2021
<b>Number of pages</b>	182
<b>Keywords</b>	Radicals, prebiotic chemistry, FTIR, spectroscopy, CO, OH, NH, CN, CH

---

## Abstrakt

Tématem této disertační práce je spektroskopické studium jednoduchých radikálů (OH, NH, CN a CH). Navíc se práce věnuje spektrům oxidu uhelnatého, který je sice stabilní molekulou, ale dominantně vzniká a byl přítomen ve všech námi zkoumaných systémech.

Tato disertační práce byla realizována pomocí techniky časově rozlišené infračervené spektroskopie s Fourierovou transformací v emisním uspořádání. Vybrané směsi plynů byly zkoumány v plazmatu doutnavého výboje za podtlaku a vysokého napětí v speciálně upravené výbojové cele.

V případě oxidu uhelnatého byla získána nová experimentální data, čítající přes 200 dosud neznámých rotačně-vibračních přechodů o vysoké vibrační excitaci. Tato data byla namodelována a fitována pomocí Dunhamových rovnic a společně s teoretiky z University College London byl vytvořen nerovnovážný (non-LTE) model. Výsledná data a parametry byly opublikovány v časopise *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. V případě spekter jednotlivých radikálů byla změřena infračervená spektra v spektrální oblasti  $700\text{-}7500\text{ cm}^{-1}$ . V této práci je uveden detailní seznam všech emisních linií s odpovídající spektroskopickou notací a přiřazením, analýza časových profilů daných částic a porovnání všech spekter se solárními daty. Tato práce také na několika příkladech demonstruje všudypřítomnost CO a CN radikálu v reakcích prebiotické chemie. Zjištěná fakta o roli CO a CN v prebiotické chemii, spolu s navrhovanými reakčními mechanismy, byla opublikována v časopise *Nature Scientific Reports*. Detailní výsledky jsou uvedeny ve výsledkové části a v závěru práce, kde jsou všechny získané výsledky shrnuty.

Získaná spektrální data oxidu uhelnatého a jednotlivých diatomických radikálů byla zahrnuta do vnitřní referenční databáze projektu ARIEL, jehož hlavní misí bude studium spekter a vlastností exoplanetárních atmosfér.

Dosažené výsledky této práce rozšiřují současné vědomosti o astrofyzikálně i spektroskopicky významných molekulárních fragmentech, které hrají klíčovou roli v mnoha vědeckých odvětvích a jsou, mimo jiné, produkty prebiotických syntéz. Po vědecké stránce tato práce přispívá do oblastí fundamentální spektroskopie, prebiotické chemie a astrofyziky.

## Abstract

Theme of this work is the spectroscopic study of simple radicals (OH, NH, CN and CH). In addition, the work also aims on carbon monoxide, which is a stable molecule, but is dominantly formed and present in all explored systems.

This dissertation was realized by use of time-resolved Fourier transform infrared spectroscopy in emission arrangement. Used gaseous mixtures were observed in the plasma of glow discharge under vacuum and high voltage in specially modified discharge cell.

In case of carbon monoxide, new experimental data were obtained, counting over 200 yet unknown rotational-vibrational transitions of high vibrational excitation. This data was modelled and fitted by use of Dunham equations and, in collaboration with theoreticians from University College London, a non-equilibrium (non-LTE) model was constructed. Resulting data and parameters were published in *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. In case of individual spectra of radicals, infrared spectra in the 700-7500  $\text{cm}^{-1}$  spectral range were measured. This work contains a detailed list of emission lines together with corresponding spectral notation and assignment, analysis of time profiles of selected species and comparison of all spectra with solar data. This work also demonstrates the omnipresence of CO and CN radical in reactions of prebiotic chemistry on several examples. Obtained facts on the role of CO and CN in prebiotic chemistry, together with proposed reaction mechanisms, were published in *Nature Scientific Reports* journal. Detailed results can be found in the results section and in the conclusion of this work, where all the obtained results are summarized.

Obtained spectral data of CO and specified diatomic radicals were included into the inner reference database of the ARIEL project, whose main mission is going to be the study of spectra and features of exoplanetary atmospheres.

Achieved results of this dissertation broadens the knowledge of astrophysically and spectroscopically important molecular fragments, which play a key role in various scientific fields and are also products of prebiotic syntheses. From a scientific point of view, this dissertation contributes to the field of fundamental spectroscopy, prebiotic chemistry and astrophysics.

## Obsah

Bibliografický záznam.....	3
Bibliographic entry .....	3
Abstrakt .....	4
Abstract.....	5
Obsah .....	6
Cíle práce.....	8
Úvod .....	9
Teoretický úvod.....	11
Obecná teorie .....	13
Oxid uhelnatý.....	16
OH radikál.....	18
NH radikál.....	21
CN radikál.....	24
CH radikál.....	28
Experimentální část .....	32
Instrumentace spektrálních měření .....	32
Časové rozlišení .....	34
Aparatura pro přípravu dikyanu.....	36
Výsledky a diskuse .....	38
Oxid uhelnatý.....	38
Analýza spekter .....	38
Časové profily .....	43
Rotační a vibrační teplota výbojového plazmatu .....	46
Určení molekulárních parametrů pomocí Dunhamových rovnic.....	48
OH radikál.....	52
Analýza spekter .....	52
Srovnání se solárními spektry .....	55
Srovnání rotačních teplot výbojového plazmatu se solárními daty.....	57
NH radikál.....	59
Analýza spekter .....	59

Časové profily .....	62
Srovnání se solárními spektry .....	66
CN radikál.....	68
Analýza spekter .....	68
CH radikál.....	73
Analýza spekter .....	73
Časové profily .....	74
Rotační a vibrační teplota výbojového plazmatu .....	76
Srovnání se solárními spektry .....	77
Role radikálů v prebiotické chemii .....	79
Rozklad jednoduchých biogenních molekul elektrickým výbojem .....	79
Závěr.....	83
Přílohy .....	86
Reference .....	164

## Cíle práce

Tato disertační práce sleduje dva základní cíle. Prvním z nich je spektrální analýza jednoduchých radikálů OH, NH, CN, a CH spolu s oxidem uhelnatým. Tyto molekulární fragmenty se vyskytují v zemské atmosféře, v obálkách hvězd, v mezihvězdném prostoru i exoplanetárních atmosférách. Důležitou roli hrají i v prebiotické chemii, kde vznikají rozkladem nebo při syntéze molekul obsahujících základní biogenní atomy. Při rozkladu celé řady organických molekul vznikají i jiné typy radikálů než OH, NH, CN a CH, ale jelikož tyto nejjednodušší radikály jsou v těchto směsích zastoupeny dominantně, byl výzkum v této práci zaměřen právě na ně.

Druhým cílem práce bylo vytvořit přehlednou databázi získaných spektrálních dat. Česká republika je oficiálním členem vědeckého konsorcia vesmírné mise ARIEL a vědecký tým Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského je do realizace mise přímo zapojen. Cílem bylo tedy poskytnout realizačnímu týmu ARIEL přehledná relevantní spektrální data týkající se krátce žijících molekulárních fragmentů, které budou využity při modelování a analýze atmosfér vybraných exoplanet.



## Úvod

Pokusy o změření spekter jednoduchých radikálů je možné vysledovat již poměrně hluboko do minulosti, v některých případech i 130 let zpět. Tento výzkum byl vázán na tehdejší znalosti a pokročilost spektroskopických přístrojových technik, které se v té době obvykle omezovaly na první spektrometry s mřížkovým uspořádáním. Měřila se zpravidla pouze viditelná či UV oblast spektra. S vyhodnocováním atmosférických spekter Země, a hlavně spekter Slunce, k jehož rozvoji došlo během 30-40. let minulého století, je najednou možné zaznamenat prudký nárůst zájmu o identifikaci spekter radikálů jako OH, NH, CN a CH, které rychle nabyly na důležitosti, protože pomocí kvalitně změřených spekter je možné specifické spektrální linie těchto radikálů užít k výpočtu elementárního složení hvězd či planetárních atmosfér. Elektromagnetické záření proniká kosmickým prostorem na velké vzdálenosti a spektroskopie tedy patří mezi základní techniky při studiu vzdáleného vesmíru. Čím nižší energii a vyšší vlnovou délku záření má, tím snadněji prochází prostorem, neboť stoupá jeho schopnost procházet pevnějšími překážkami, jakými jsou například prachová mračna a mlhoviny. Infračervené záření je díky delší vlnové délce a odpovídající energii schopno vesmírem cestovat obecně dále a snadněji než záření ve viditelné spektrální oblasti, a proto patří infračervená spektra astrofyzikálně významných molekul k nutným složkám referenčních databází. IR spektroskopie je tedy užitečným nástrojem pro studium vzdálenějších oblastí vesmíru a infračervená spektra významných částic tak mohou snadno a elegantně podat cenné informace např. o chemické evoluci odlehlých hvězd.

Spektrální data astrofyzikálně významných částic jsou důležitá i z hlediska fundamentální spektroskopie. Nové informace o pozicích spektrálních čar radikálů a jejich distribuce emisních intenzit umožňují teoretickým spektroskopikům určit množství dalších charakteristických parametrů dané částice a pochopit tak její chování na kvantově-mechanické úrovni.

V neposlední řadě je nutno zmínit všudypřítomnost některých částic v reakčních mechanismech prebiotické chemie. Např. CN radikál je možné nalézt doslova v každém spektru výboje či laserové jiskry ve směsi obsahující atomy uhlíku a dusíku. Taktéž CO vykazuje dominantní přítomnost ve spektrech vysokoenergetických rozkladů jednoduchých prebiotických molekul, obzvláště pak jeho fundamentální pás v oblasti kolem  $1800\text{-}2300\text{ cm}^{-1}$ . Je velice pravděpodobné, že tyto radikály, zvláště pak rigidní CN a CO, hrají hlavní roli v procesech přenosu energie v těchto systémech. Radikály v prebiotické chemii se tak

s velkou pravděpodobností účastní procesů jako energetické mediátory a umožňují bohatou variaci reakčních produktů.

Vysoce rozlišitelná spektroskopie významných diatomických molekulárních fragmentů otevírá bránu novým poznatkům nejen o fundamentálních parametrech molekul či atomů, ale i o vzdálených objektech jako jsou vzdálené hvězdy a exoplanety v hlubokém vesmíru, a prebiotické chemii, která nám může objasnit první kroky chemické abiogeneze, a tedy i vzniku života na Zemi.

## Teoretický úvod

Prebiotická chemie zažila první obrovský rozvoj v roce 1924, kdy A. Oparin<sup>1</sup> opublikoval svou teorii koacervátů, která jako první nastínila hypotézu o možném vzniku života na Zemi procesem abiogeneze, tedy syntézou složitějších organických molekul z anorganických látek. Práce vyvolala velký rozruch v odborných kruzích a značné množství vědců se pokoušelo po následující roky tuto teorii experimentálně buď potvrdit, nebo vyvrátit. Za první úspěšné experimentátory, kteří tuto teorii ověřili v laboratoři, se považují Stanley Miller a Harold Urey, jejichž experiment, realizovaný v roce 1952 a publikovaný o rok později<sup>2</sup> v prestižním časopise Science, elegantně použil elektrického výboje k syntéze aminokyselin z atmosféry vody, methanu, amoniaku a vodíku.

Dnes, po mnoha letech od původních experimentů Millera a Ureya, je moderní vědě známo mnoho způsobů a kombinací výchozích reaktantů a zdrojů energie, které dokáží syntetizovat značné množství reakčních produktů, mezi něž se mimo aminokyseliny řadí také nukleové báze, jednoduché cukry či mastné kyseliny. Z možných zdrojů energie pro prebiotické experimenty, kterých se za posledních 70 let vyskytla celá řada, je možno namátkou zmínit například klasický elektrický výboj,<sup>3,4</sup> UV záření,<sup>5</sup> bombardování protony<sup>6,7</sup> či gama zářením,<sup>8</sup> simulaci impaktu asteroidu pomocí laserové jiskry<sup>9-11</sup> či prosté teplotní zahřívání.<sup>12-15</sup>

Ačkoli bylo vyzkoušeno velké množství výchozích směsí, kombinujících mnohé reaktanty za účelem zisku co nejpestřejší palety reakčních produktů prebiotické syntézy, v posledních letech je v prebiotické chemii vidět trend, kdy se mnoho výzkumných skupin pokouší nalézt tzv. mateřskou molekulu, pralátku, ze které byla následně vytvořena celá škála složitějších organických molekul. Taková molekula musí, aby vyhověla požadavkům na tvorbu komplexnějších produktů, zpravidla obsahovat čtyři základní biogenní prvky (C, N, O, H), z nichž se skládají i složitější biomolekuly jako nukleové báze nebo nukleosidy. Z těchto kandidátů na mateřské prebiotické molekuly je možné zmínit např. formamid, který byl předmětem celé řady studií,<sup>16-21</sup> nebo kyanovodík (HCN),<sup>22-27</sup> jenž prostou hydratací poskytuje opět formamid.

Zjištění, zda život na Zemi vznikl z jediné mateřské molekuly či směsi molekul, bude pravděpodobně předmětem dalších výzkumů prebiotických chemiků po další roky a dekády.

S jistotou je však možné tvrdit pouze to, že prokázání dané skutečnosti bude velmi náročné, neboť prebiotické reakce se udály již velmi dávno a přímé důkazy tak samozřejmě neexistují.

Z časového pohledu vzniku produktů lze v různých reakčních směsích vystopovat vedle stabilních produktů též molekulové radikály. Provedené studie ukazují, že radikály mohou být podceněnou složkou prebiotických reakcí, neboť mohou stát za mechanismy výměny energie mezi různými reakčními partnery a svou vysokou reaktivitou a schopností absorpce velkého množství energie ony reakce uskutečňují.

Dominantní role radikálů v elektrickém výboji formamidu byla např. potvrzena v experimentu, který měl sloužit ke stanovení poměru kyanovodíku (HCN) a isokyanovodíku (HNC).<sup>28</sup> V tomto experimentu, který stanovil poměr HCN/HNC v doutnavém výboji formamidu na 2.2 – 3 %, byla dokázána majoritní role CN radikálu na formaci těchto dvou tautomerů. Klíčová role CN byla rovněž potvrzena u experimentů s laserovou jiskrou, generovanou opět ve formamidu.<sup>29,30</sup> CN radikál v těchto systémech hraje důležitou roli při formaci velkých molekulárních produktů včetně bází nukleových kyselin.

Z jiných radikálů, které je možno nalézt v doutnavém výboji jednoduchých molekul, je možné zmínit například radikál CH. Ve výboji methanu<sup>31</sup> (smíšeného s heliem jako nosičem) je možno ve výsledném spektru nalézt CH radikál po boku s jinými, neutrálními a stabilními molekulami (např. acetylenem). V jiné studii je možné pozorovat klíčovou roli OH radikálu<sup>10</sup> při oxidačních pochodech v laserové jiskře ve směsi CO, vody a dusíku.

Molekuly a radikály jako CO, OH, NH, CN a CH jsou velmi rigidní, často s dvojnou či dokonce trojnou vazbou mezi atomy. Díky tomu dokáží snadno absorbovat velká množství energie, aniž by došlo k rozpadu jejich chemických vazeb. Tato energie pak může být rozdělována mezi značné množství rotačně-vibračních a elektronických energetických stavů. Díky těmto skutečnostem mohou výše uvedené radikály a CO jednat jako energetické mediátory a ve vysokoenergetických systémech předávat energii jiným částicím kolizními excitacemi (či ionizacemi), a to v téměř celém spektrálním rozsahu díky variaci energetických úrovní. Molekulární fragmenty tedy mohou hrát důležitou, ne-li klíčovou, roli při syntézách složitějších biomolekul z jednoduchých diatomických částic.

Vzhledem k důležitosti zmíněných radikálů a oxidu uhelnatého nejen na poli prebiotické chemie, ale i v astrofyzice a fundamentální spektroskopii, bude v této práci každé specii věnována samostatná teoretická kapitola.

## Obecná teorie

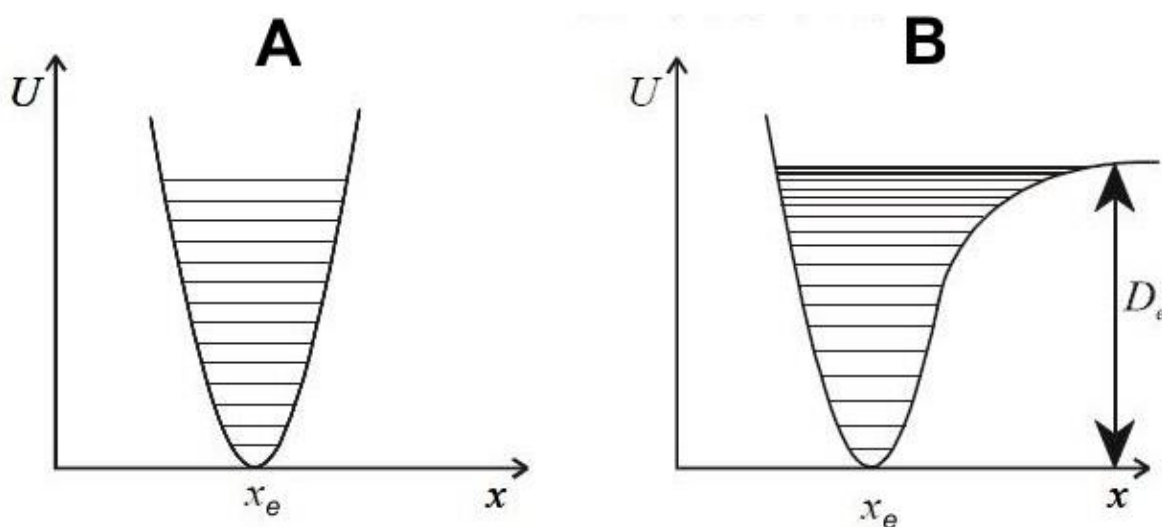
Pro zjednodušení orientace v následujícím textu a porozumění jednotlivým výrazům je nejprve nutno stručně popsat spektroskopickou notaci použitou v textu práce.

Notace molekulového termu popisuje grupu a moment hybnosti, které danou molekulu charakterizují, resp. charakterizují elektronický kvantový stav, který je vlastním stavem elektronického molekulového Hamiltoniánu. Molekulový term lze obecně vyjádřit následujícím výrazem:

$${}^{2S+1}\Lambda_{\Omega(g/u)}^{+/-} \quad (1)$$

kde  $S$  je celkové spinové kvantové číslo,  $\Lambda$  je projekce orbitálního momentu hybnosti na mezijaderné ose,  $\Omega$  je projekce celkového momentu hybnosti na mezijaderné ose, poměr  $g/u$  symbolizuje paritu stavu a  $+/-$  v exponentu definuje reflexní symetrii (neboli zrcadlový odraz) podél libovolné roviny obsahující mezijadernou osu. Kvantové číslo  $\Lambda$  nabývá celočíselných kladných hodnot od 0 do  $N$  a dle své hodnoty se označuje velkým řeckým písmenem v sekvenci:  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \dots$  pro  $\Lambda = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Notace uvedená ve vztahu (1) je platná pro homonukleární diatomika, pro diatomika heteronukleární se vynechá indexace  $g/u$  (*gerade/ungerade*) kvůli neexistenci inverzního centra molekuly.

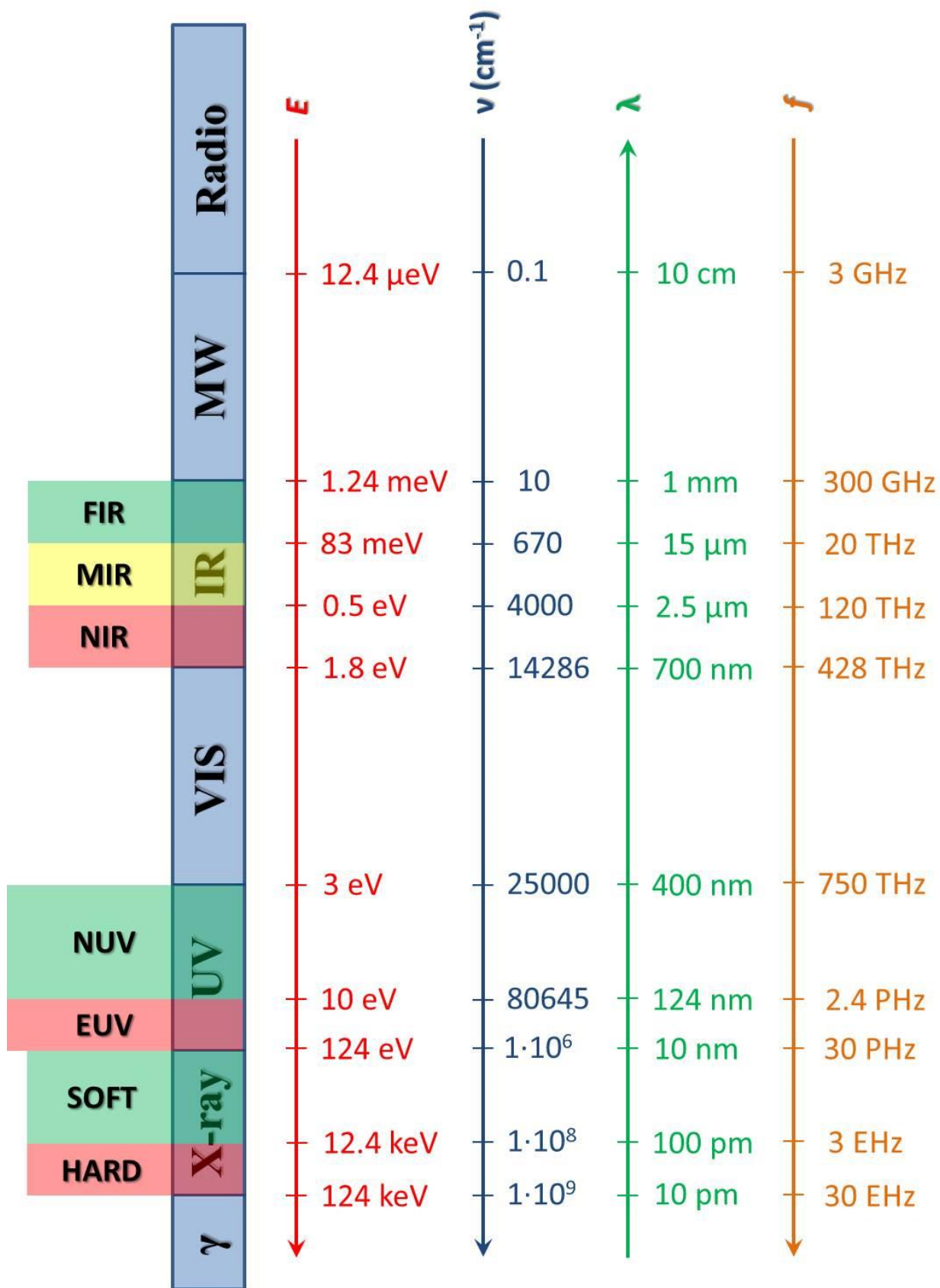
Charakterizace jednotlivých možných energetických stavů molekul je zpravidla realizována prostřednictvím potenciálových křivek (Obrázek 1).



Obrázek 1: Harmonický (panel A) a anharmonický (panel B) potenciál<sup>32</sup>

$U$  v Obrázku 1 značí potenciál,  $x$  mezijadernou vzdálenost a  $D_e$  disociační energii. Rovnovážná mezijaderná vzdálenost je pak označena symbolem  $x_e$ . Potenciálové křivky reálných molekul nikdy nevykazují chování harmonických oscilací (panel A Obrázku 1). Kdyby tomu tak bylo, bylo by teoreticky možné neustále zvyšovat energii molekuly a ta by nikdy nedisociovala. Ve skutečnosti se skutečný potenciál molekuly chová anharmonicky (panel B Obrázku 1) a molekula tedy po dodání určité energie ( $D_e$ ) disociuje na atomy. Díky anharmonicitě také nejsou např. vibrační energetické stavy stejně daleko od sebe, jako v panelu A. Namísto toho se s rostoucí energií jejich vzájemná vzdálenost zmenšuje.

Pro snazší orientaci v jednotkách, běžně užívaných napříč všemi oblastmi spektroskopie, bylo vytvořeno přehledové elektromagnetické spektrum, které je znázorněno na Obrázku 2. Toto spektrum má za cíl usnadnit konverzi mezi čtyřmi nejběžněji užívanými veličinami (energií záření ( $E$ ), vlnočtem ( $\nu$ ), vlnovou délkou ( $\lambda$ ) a frekvencí ( $f$ )) pro popis oblastí spektra.



Obrázek 2: Přehledové elektromagnetické spektrum

## Oxid uhelnatý

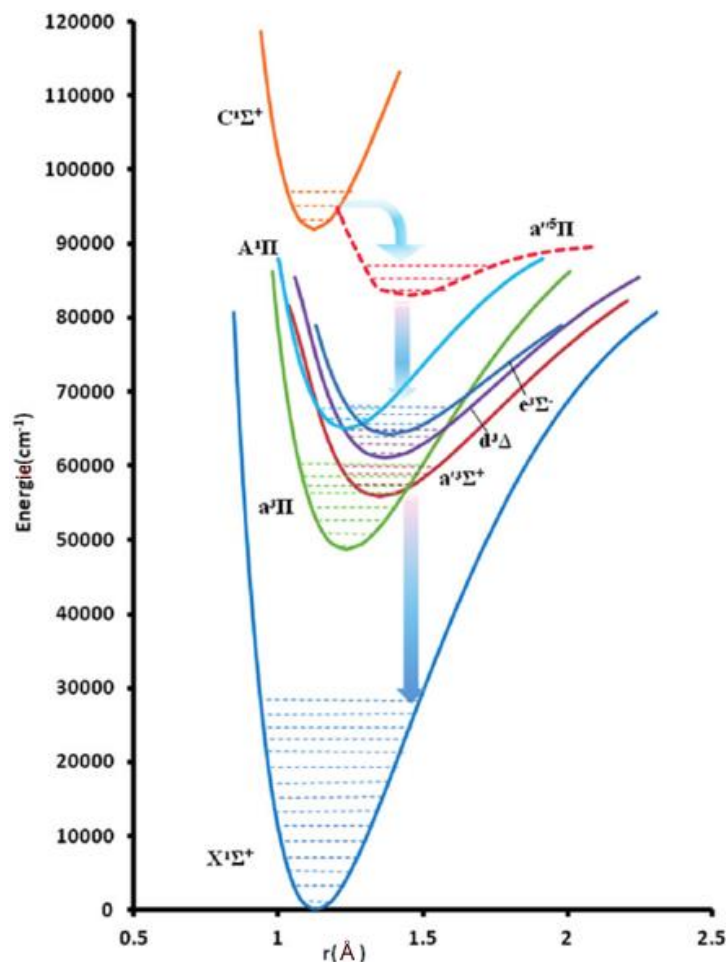
Oxid uhelnatý je velice důležitou molekulou v prebiotické chemii, neboť jeho spektra se vyskytují při rozkladu téměř jakékoli směsi jednoduchých látek obsahujících základní biogenní atomy (C, N, O, H).

CO není možné nalézt jen v zemské atmosféře, ale i v mezihvězdném prostoru<sup>33,34</sup> a na hvězdách, kde slouží jako nástroj pro stanovení izotopických poměrů uhlíku a kyslíku,<sup>35,36</sup> které se užívají k modelaci chemické evoluce dané hvězdy. CO je nejstabilnější diatomickou molekulou a je druhou nejzastoupenější částicí (hned po vodíku) v chladných mezihvězdných oblacích.<sup>37</sup> V atmosféře Země je CO přítomen v koncentraci kolem 80 ppb a je zde relativně krátce žijící molekulou (cca 3 měsíce v troposféře). CO hraje roli ve formaci přízemního ozonu a je také produktem nedokonalého spalování paliv obsahujících uhlík a jeho sloučeniny.

První spektrální detekce CO v absorpčním režimu je datována do roku 1889 a je zároveň považována za první spektrální detekci diatomika v plynné fázi.<sup>38</sup> Rotačně-vibrační linie CO jsou přitom běžně užívány ke kalibraci vlnové délky infračervených spektrometrů v laboratoři.<sup>39,40</sup> Jedno z prvních stanovení hmotnostně nezávislých Dunhamových parametrů pro různé izotopy CO je popsáno v práci George *et al.*<sup>41</sup> z roku 1994. Pro stanovení těchto parametrů bylo užito velmi přesné mikrovlnné a infračervené měření a získaná data umožňují rekonstrukci teoretického spektra CO pro většinu spektrálních rozsahů. Dunhamovy parametry pro CO byly v minulosti zkoumány Farrenqem *et al.*<sup>42</sup> na základě analýzy solárních spekter. V kombinaci s dostupnými laboratorními referenčními daty dokázal Farrenq provést Dunhamův fit s velmi obsáhlým datovým souborem, který analyzoval přechody CO až do rotačního kvantového čísla  $J_{\max} = 133$  a vibračního kvantového čísla  $v_{\max} = 41$ . Kromě výše popsaných statí bylo o molekule CO<sup>43-49</sup> a jeho izotopech<sup>50,51,60-64,52-59</sup> publikováno velké množství dalších prací. Mnoho z těchto publikací bylo zaměřeno na studium fundamentálního přechodu ( $\Delta v = 1$ ) CO a jeho první overton ( $\Delta v = 2$ ).<sup>65-67</sup>

Tvar potenciálových křivek pro CO v nejnižších energetických stavech je popsán na Obrázku 3.





Obrázek 3: Potenciálové křivky<sup>68</sup> pro nejběžnější energetické stavy CO

Kritické zhodnocení čistě rotačních a rotačně-vibračních přechodů a energetických úrovní  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  v základním stavu  $\text{X}^1\Sigma^+$  bylo provedeno Tashkunem<sup>69</sup> v roce 2010 a Velichkem<sup>70</sup> v roce 2012. Všechny dostupné přechody CO od mikrovlnné až po viditelnou oblast byly podrobeny analýze pomocí RITZ kódu a byl získán set 2247 energetických úrovní této molekuly, pokrývající spektrální rozsah od 0 do  $67000\text{ cm}^{-1}$ .

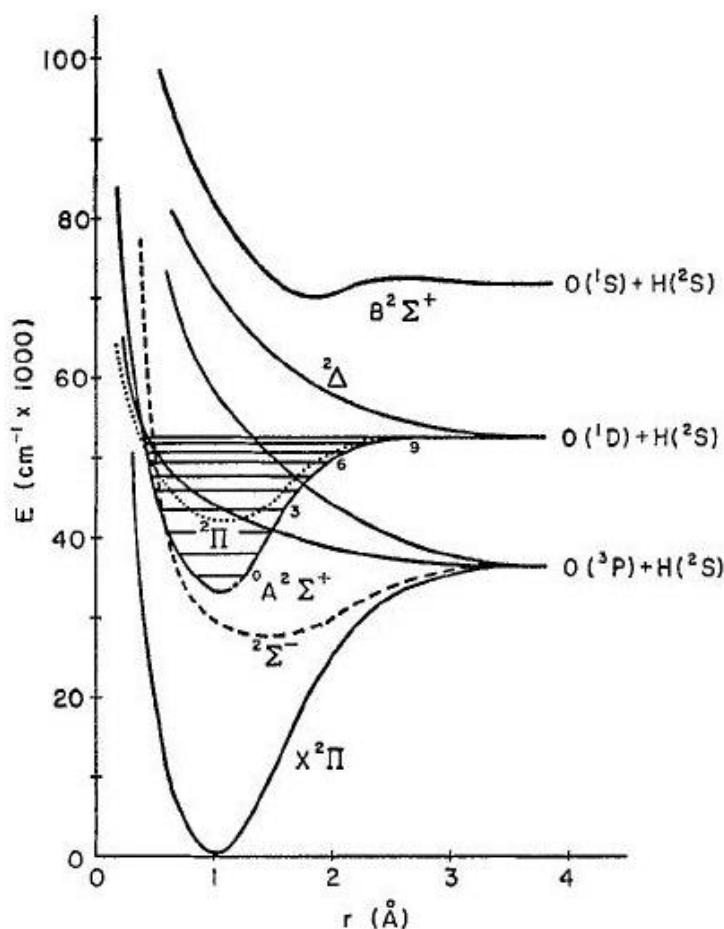
Četné overtonické přechody (přechody odpovídající vyšším harmonickým frekvencím)  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  publikovali např. A. P. Mishra,<sup>71</sup> Malathy Devi<sup>72</sup> ( $\Delta v = 2$  sekvence) a Picqué<sup>73</sup> a Swann<sup>74</sup> ( $\Delta v = 3$ ). Pro třetí overton CO je možné zmínit publikaci Ogilvieho *et al.*<sup>38</sup> ( $\Delta v = 4$ ) a pro  $\Delta v = 5$  sekvenci pak např. práci Chunga *et al.*<sup>75</sup>

V rámci této disertační práce byl učiněn pokus o doplnění spektroskopických dat CO o dosud nezměřené rotačně-vibrační přechody s vysokou vibrační excitací pro fundamentální i první overtonický pás na základě dat získaných rozkladem molekuly formamidu v pozitivním sloupci doutnavého výboje.

## OH radikál

OH je krátce žijící intermediát, který často doprovází procesy hoření a exploze. Je známo, že hydroxylový radikál hraje klíčovou roli v atmosférické chemii Země, kde je hlavním aktérem oxidačních dějů v troposféře. OH lze nalézt ve slunečních spektrech, v mezihvězdných oblacích a atmosférách planet.

Potenciálové křivky OH radikálu v různých energetických stavech je možné vidět na Obrázku 4.



Obrázek 4: Potenciálové křivky OH radikálu pro nízko ležící energetické stavy<sup>76</sup>

První informace o spektrech OH byly zveřejněny již téměř před stoletím.<sup>77</sup> Tato práce obsahovala první jasnou detekci OH radikálu, který byl až do této doby jinak zaměňován za další z mnoha pásů vody. Po tomto důkazu spektrální existence OH radikálu následovalo mnoho prací, které se zprvu zaměřovaly na čistě experimentální záchyt OH spekter v široké

škále spektra, avšak později přibývalo více a více teoretických publikací, které umožnily přesnější popis kvantových dějů na molekulární úrovni.

V roce 1950 učinil I. A. B. Meinel hraniční objev, když objevil emisní linie OH radikálu v UV spektrech noční oblohy<sup>78</sup> a empiricky stanovil rotační teplotu OH ( $260 \pm 5$  K). Až později vyšlo najevo, že za těmito spektry (známými pod označením „night-time airglow“, nebo též prostě „Meinelovy pásy“) stojí základní energetický stav OH  $X^2\Pi$ , který obsahuje přechody s jasně definovanou rotačně-vibrační strukturou. Meinelovy pásy vznikají reakcí vodíkových atomů s ozonem ve svrchní mezoféře přibližně 90 km nad povrchem Země a jako referenční spektra jsou důležitým nástrojem pro kvantifikaci kyslíku v chromosféře i fotosféře Slunce i jiných hvězd. Nedávno byly též zkoumány fluktuace Meinelových pásů ve vzdálené oblasti IR spektra („FIR“, cca  $10 - 670$   $\text{cm}^{-1}$ ), které mají být používány k prokazování efektu gravitačních vln.<sup>79</sup> Meinelovy pásy byly mnohokrát měřeny *in situ*, ale za komplexní infračervenou experimentální studii, věrně napodobující podmínky v mezoféře zemské atmosféry, lze považovat zřejmě až práci Abramse *et al.* (1994),<sup>80</sup> který změřil tyto pásy s umělým zdrojem v laboratoři v rozsahu spektra  $1850 - 9000$   $\text{cm}^{-1}$ . Zatím nejnovější teoretické vysvětlení Meinelových pásů a tamější funkce OH radikálu je popsána v práci Chena *et al.*<sup>81</sup>

Čistě experimentální laboratorní studie, zaměřené především na změření co největšího počtu linií OH ve všech spektrálních rozsazích, se vyvíjely od prvních experimentů s výboji ve vodních parách a fotografickou detekcí,<sup>76</sup> přes zábleskovou fotolýzu par peroxidu vodíku,<sup>82</sup> reakci vodíku s  $\text{NO}_2$  v průtokové cele,<sup>83</sup> kyslíkovo-acetylenový plamen pro simulaci teplejších spektrálních zdrojů (např. chladné hvězdy),<sup>84</sup> po dvojitou laserovou rezonanci sloužící k specifické excitaci OH do požadovaných energetických stavů.<sup>85</sup> Ani užití laserem indukované fluorescence<sup>86</sup> nebo prosté měření emisního záření OH z elektrického výboje ve směsi vody s heliem<sup>87</sup> nebylo výjimkou.

K. R. German byl jedním z prvních, komu se podařilo experimentálně změřit zářivou dobu života OH radikálu v prvním excitovaném stavu  $A^2\Sigma^+$ , kterou stanovil na  $0,688 \pm 0,021$   $\mu\text{s}$ .<sup>88</sup> Teoreticky byly tyto hodnoty podpořeny Ch. W. Bauschlicherem v roce 1987.<sup>89</sup>

Experimentální data, zahrnující pozice a intenzity linií OH radikálu, sloužila mimo jiné k teoretické predikci dalších energetických hladin OH radikálu a k zisku molekulových konstant, kterými je možné namodelovat spektrum OH radikálu v celém spektrálním

rozsahu.<sup>90–93</sup> Také bylo publikováno mnoho prací zaměřených na výpočet různých molekulárních parametrů linií a tranzitních momentů.<sup>94–97</sup>

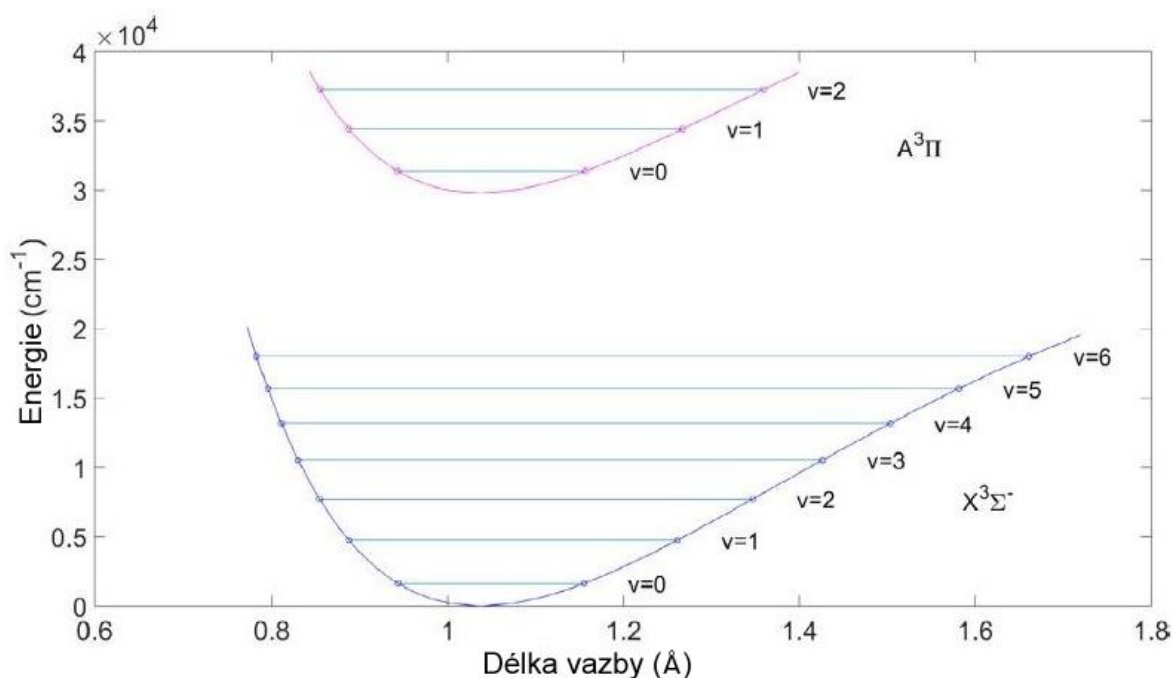
Výrazným objevem byla detekce OH radikálu v solárních spektrech. Na základě parametrů čistě rotačních linií OH lze vypočítat zastoupení kyslíku na Slunci s vysokou přesností a téměř nezávisle na jiných modelech a proměnných. Jako první se touto možností teoreticky zabýval Goldman *et al.* (1983),<sup>98</sup> který rovněž poskytl informaci o možnosti stanovení slunečního poměru kyslík – uhlík na základě rotačních přechodů radikálu CH. Grevesse *et al.*<sup>99</sup> se zase zabýval rotačně-vibračními solárními spektry a jejich vlivem na kvantifikaci kyslíku. V solárních spektrech lze nalézt rotační přechody pro základní, první i druhý excitovaný vibrační stav, ale i rotačně-vibrační přechody v rámci vysokých rotačních kvantových čísel  $J$ .<sup>100</sup> Mezi novější publikace o solárním kyslíkovém zastoupení určeném na základě kvantifikace spekter OH radikálu lze řadit např. výzkum Asplunda *et al.*,<sup>101</sup> který se zaměřil na implementaci moderních 3D hydrodynamických modelů solární atmosféry.

Mezi nejnovější publikace, které využívají dobře probádanou spektroskopii OH radikálu, patří detekce OH v atmosférách exoplanet či na hvězdách. V takových případech se OH radikál, spolu s dalšími parametry, využívá k výpočtu zastoupení kyslíku v obálkách hvězd chudých na kovy<sup>102</sup> nebo k pochopení mechanismu zářivých přechodů v atmosféře terestrických planet, např. Venuše.<sup>103</sup> Nedávno byl OH radikál rovněž zachycen v atmosféře exoplanety WASP-33b.<sup>104</sup> Jedná se tedy zatím o vůbec první detekci OH radikálu v exoplanetární atmosféře.

## NH radikál

NH radikál je relativně stabilní diatomický fragment, který snadno vzniká při vysokoenergetických a rozkladných dějích molekul, jež obsahují dusík a vodík. NH lze spektrálně detekovat v plamenech některých hořlavých směsí. Využití spekter NH radikálu v astrochemii spočívá ve stanovení dusíkového zastoupení v obálkách hvězd a v mezihvězdných oblacích. Kvantifikace dusíku na základě spekter NH má výhodu nezávislosti na spektrálním složení ostatních prvků. V případě stanovení zastoupení dusíku např. pomocí spekter CN je nutno počítat i se společnou rolí uhlíku.

Potenciálové křivky NH radikálu jsou vyobrazeny na Obrázku 5.



Obrázek 5: Potenciálové křivky<sup>105</sup> pro nejnižší energetické stavy radikálu NH

První detekce spekter NH radikálu byla provedena v roce 1893. Váže se na publikaci proslulého rakouského chemika a fotografa J. M. Edera,<sup>106</sup> který provedl vůbec první fotografickou detekci emisních spekter NH. V roce 1919 Fowler *et al.*<sup>107</sup> publikoval studii, ve které popisuje detekci těchto molekulárních pásů NH ve slunečních spektrech.

Rozsáhlá a detailní spektroskopická studie NH radikálu byla zveřejněna až v roce 1936 G. Funkem.<sup>108</sup> Jednalo se o studium absorpčních spekter NH v snadno měřitelné UV oblasti kolem 336 nm. Jako ve většině měření té doby, i zde se jednalo o zachycení spekter citlivou fotografickou cestou pomocí mřížkového spektrometru.

Po chemické stránce, zaměřující se hlavně na syntézu NH radikálu, lze zmínit práci K. Stewarta,<sup>109</sup> který rozpracoval možnosti syntézy tohoto radikálu. Stewart v této práci navrhl produkci NH prostřednictvím rozkladu azoimidu tzv. aktivním dusíkem jako nejvhodnější metodu přípravy NH pro spektroskopické účely. Za novější studii chemismu a hlavně již také reakčního mechanismu vzniku NH lze pokládat práci van Helden *et al.*,<sup>110</sup> který se zaměřil na vznik tohoto radikálu v plazmatu směsi vodíku a dusíku.

Objev NH radikálu v solárních datech zvýšil zájem o detailní porozumění spekter NH, která začala rychle nabývat na důležitosti a do té doby nedostatečné spektroskopické studie byly nahrazovány extenzivními publikacemi zaměřujícími se čistě na fundamentální spektroskopii NH, produkovaného relativně chladnými laboratorními zdroji. Mezi techniky produkce NH radikálu v laboratoři patřila např. záblesková fotolýza kyseliny izokyanaté (HNCO),<sup>111</sup> fotolýza amoniaku smíchaného s inertním plynem,<sup>112</sup> UV fotolýza amoniaku následovaná rezonanční fluorescencí NH,<sup>113</sup> elektrický výboj dusíku s vodíkem v duté katodě<sup>114</sup> či moderní dvoufotonový záchyt na amoniaku v průtokovém reaktoru pomocí laditelného laseru.<sup>115</sup> Ram *et al.*<sup>116</sup> později též diskutoval efektivitu měření UV/VIS spekter NH radikálu pomocí kryogenického echelle spektrografu ve srovnání s klasickým FTIR spektrometrem, kdy se prokázalo, že kryogenický spektrograf v Národní Observatoři v Kitt Peak v Arizoně (zvaný zde „Phoenix“) má větší citlivost.

Z hlediska astronomie, NH radikál má největší význam pro určení zastoupení prvků, hlavně dusíku, v obálkách hvězd a v mezihvězdném prostoru. NH byl detekován i v kometárním prostředí, např. lze zmínit detekci tohoto radikálu v ohonu komety Cunningham,<sup>117</sup> kde byl zachycen spolu s dalšími radikály CN, OH a CH. Kometární NH radikál je rovněž možné použít k výpočtu fotodisociačního poločasu života při přechodu NH z excitovaného stavu  $A^3\Pi$  do stavu základního, jak demonstroval P. Singh ve své práci.<sup>118</sup> NH lze nalézt na chladných hvězdách, například HD 122563,<sup>119</sup> která je silně chudá na kovy. Rovibronické pásy NH lze rovněž pozorovat ve spektrech Betelgeuze,<sup>120</sup> druhé nejjasnější hvězdě v souhvězdí Orionu. V. Smith *et al.* našel v roce 1986 NH ve spektrech celkem 12 rudých obrů<sup>121</sup> a získaná data použil k určení zastoupení uhlíku, dusíku, kyslíku a dalších prvků. Za podobně zaměřenou lze považovat publikaci Aoki *et al.*,<sup>122</sup> ve které byla studována vysoce rozlišená IR spektra CN a NH, pocházející z obrů třídy K a M, a kde poukázal na výhodu stanovení zastoupení dusíku ve vnějším obalu hvězd prostřednictvím detekce NH radikálu, ve srovnání s CN (nezávislost na jiných prvcích).

První důkaz existence NH v mezihvězdném prostoru je uveden v publikaci D. Meyera<sup>123</sup> z roku 1991, která demonstrovala nález tohoto radikálu v difúzním mračnu v okolí  $\zeta$  Per (Zeta Persei) a HD 27778. Spektra NH radikálu se podařilo zachytit v UV oblasti a jednalo se o laboratorně velmi dobře známý elektronický přechod  $A^3\Pi \rightarrow X^3\Sigma$ . V roce 1997 se podařilo detekovat NH radikál též v mezihvězdném oblaku v blízkosti  $\zeta$  Oph (Zeta Ophiuchi), jasné hvězdy vzdálené asi 366 světelných let od Země.<sup>124</sup> Data získaná při tomto měření efektivně vyvrátila domněnku o tzv. horké formaci NH, kdy je NH formován sloučením vodíku s dusíkem za současného vzniku atomárního vodíku, a podpořila hypotézu o dominanci chemických reakcí na povrchu zrn v difúzních molekulárních mračcích jako hlavního zdroje NH. Tuto myšlenku podpořila též práce Weselaka *et al.* z roku 2009.<sup>125</sup>

Možný komplexní původ dusíku na hvězdách chudých na kovy se pokoušel vysvětlit Spite *et al.*<sup>126</sup> v roce 2005. Posláním této publikace bylo nastínit možné cesty vzniku lehkých prvků v raných fázích života naší galaxie, což práce činila vypočítáváním poměrů zastoupení prvků a modelováním tzv. mixování, kdy docházelo k signifikantnímu promíchávání vrstev hvězd. Práce srovnávala podmínky a data z celkem 35 hvězd a předložila závěr, že zastoupení plynů na povrchu hvězdy, která nepodstoupila mixování, odpovídá složení těchto plynů při vzniku dané hvězdy v originálním poměru.

Jako u každé astronomicky významné molekuly, byly i pro NH radikál vytvořeny mnohé publikace zaměřující se pouze na teoretické upřesnění molekulárních parametrů této specie. Již v roce 1970 lze nalézt jeden z prvních ab initio výpočtů,<sup>127</sup> majících za cíl výpočet délky vazby v tomto radikálu a též určení vzniku  $NH^+$  či  $NH^-$  v krystalech fosforečnanu amonného ozářených gama zářením. Detailní analýzou spekter NH radikálu pomocí Dunhamova fitu se zabývala publikace G. Dase *et al.*,<sup>128</sup> který popsal spektra NH radikálu pouhými pěti parametry, nutnými pro teoretickou konstrukci celého spektra. Ram *et al.* zrevidoval v roce 2010 molekulární konstanty, které slouží rovněž ke konstrukci spektra NH.<sup>129</sup> Další publikace, sahající až do současnosti, jen nadále vylepšovaly teoretický model nutný k popisu celého spektra NH radikálu.<sup>105,130,131</sup>

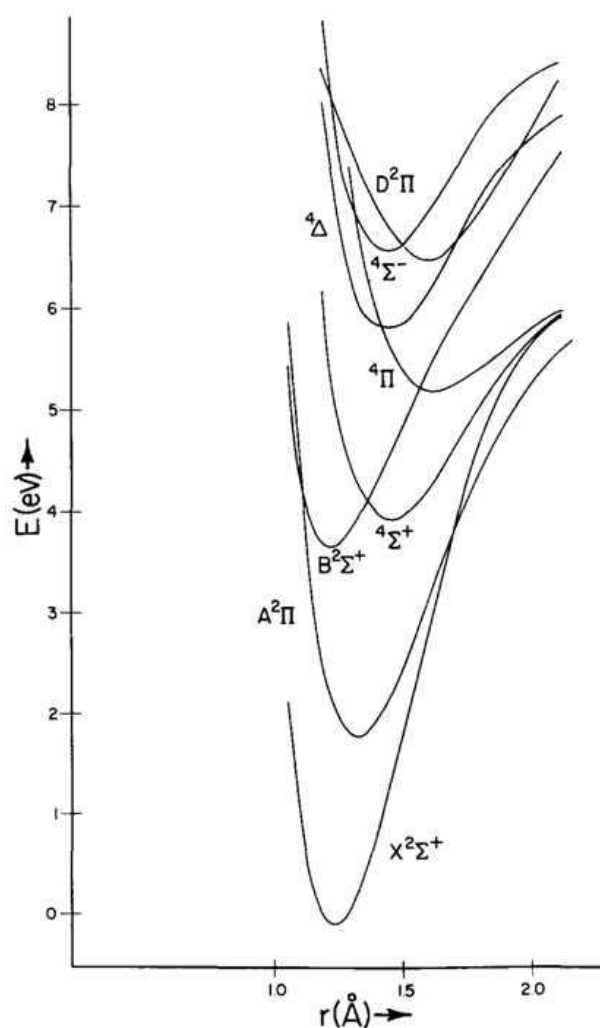
V současné době se NH radikál využívá nově i jako médium vhodné k vyvíjení magnetických molekulárních pastí.<sup>132</sup> Tyto pasti slouží k fyzikálnímu studiu chování hmoty za nízkých teplot a vysokých hustot. NH radikál je v takovýchto systémech nutno zbrzdit na velmi nízkou kinetickou energii, a tím jej silně ochladit. V takovýchto případech se využívá jednoho specifického energetického stavu NH, a sice metastabilního  $a^1\Delta$ , který je následně excitován

do stavu  $A^3\Pi$ , jenž poté deexcituje do základního energetického stavu  $X^3\Sigma^-$ . Zbrzdění NH radikálu je prováděno např. tzv. Starkovým zpomalovačem<sup>133</sup> nebo Zeemanovým zpomalovačem.<sup>134</sup> Tyto experimenty, vedoucí k ideálně kineticky zpomaleným NH radikálům o vysoké lokální hustotě, mají potenciálně velký význam pro kvantové počítače.

## CN radikál

CN radikál má mezi jinými diatomickými radikály výjimečné postavení. Z laboratorních experimentů je známo, že rozkladem téměř jakékoliv molekuly obsahující atomy uhlíku a dusíku vzniká přednostně právě tento radikál. CN radikál obsahuje trojnou vazbu a jako takový je velmi rigidní. Tato rigidita mu mimo jiné umožňuje absorbovat velká množství energie, aniž by došlo k rozpadu radikálu na atomy, a zajišťuje mu výhodné Franck-Condonovy faktory pro přechod mezi jednotlivými energetickými stavy, což dále umožňuje snadnou existenci CN v celé řadě energetický stavů. CN radikál je důležitým diatomikem z pohledu fundamentální spektroskopie, neboť jej lze nalézt ve spektrech příslušejícím mnoha vysokoteplotním událostem, jako např. hoření, exploze, výboje či exotermické chemické reakce, ale také ve spektrech hvězd a v mezihvězdném prostoru. Právě astrofyzikální důležitost CN radikálu je důkazem o významu spektroskopických měření této specie za různých podmínek a v odlišných experimentálních uspořádáních. V neposlední řadě je nutno zmínit obrovskou důležitost CN radikálu v prebiotické syntéze, kde spolu s ostatními klíčovými radikály hraje roli mediátoru energie a umožňuje tak průběh celé kaskády chemických reakcí dodáním excitační energie, uložené v nepřeborném množství elektronických, rotačně-vibračních i čistě rotačních energetických hladin. Potenciálové křivky jednotlivých elektronických stavů CN radikálu jsou zobrazeny na Obrázku 6.





Obrázek 6: Potenciálové křivky<sup>135</sup> pro vybrané energetické stavy CN

Z pohledu fundamentální spektroskopie lze spektra CN radikálu dělit na základě celé řady parametrů, nicméně v historii studia CN zaznamenalo nebývalou popularitu dělení na dva systémy odvozené z astrofyzikálních pozorování. První systém náleží přechodům  $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ , které spadají do široké spektrální oblasti od viditelné červené části spektra až po oblast MIR (middle infrared,  $\sim 4000\text{-}670\text{ cm}^{-1}$ ); z toho důvodu se tento spektrální systém, ohraničující množství energetických přechodů výše uvedeného typu, označuje jako „červený“. Druhý systém, nazývaný „fialový“, náleží všem přechodům typu  $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ , tedy přechodům mezi druhým elektronicky excitovaným a základním stavem, jejichž spektra se rozprostírají ve viditelné a ultrafialové části spektra.

Za jednu z prvních prací, která se zabývala hlubší spektroskopickou analýzou CN radikálu, lze považovat studii Francise A. Jenkinse z roku 1928.<sup>136</sup> V této práci Jenkins popsal rozšíření fialového systému CN pásů, které se nazývaly „tail bands“ dle spektrálního tvaru, který

pozoroval T. Thiele v roce 1897.<sup>137</sup> Technika měření byla realizována fotografickou cestou na fotografické desky za užití mřížkového spektrometru.

Rotačně-vibrační pás CN v základním stavu  $X^2\Sigma^+$ , nacházející se v okolí vlnové délky 5  $\mu\text{m}$  ( $2000\text{ cm}^{-1}$ ), byl poprvé spektroskopicky změřen v roce 1975 R. Treffersem.<sup>138</sup> Treffers změřil 3 linie CN radikálu, a to pomocí tzv. Kingovy pece, která poskytovala zdroj záření žhavením směsi dusíku a oxidu uhelnatého ze vzduchu. V roce 1978 D. Cerny *et al.*<sup>139</sup> provedl extenzivní spektroskopickou analýzu červeného systému CN pomocí FTIR spektrometru. Měření bylo realizováno v oblasti  $4000\text{--}11000\text{ cm}^{-1}$  a CN radikál byl generován v plamenu oxidu dusného a acetyleny. Publikace rovněž poskytla jeden z prvních globálních fitů spektra CN radikálu. Měření Cernyho *et al.* bylo doplněno o další laboratorně získaná data CN v základním rotačně-vibračním elektronickém stavu v roce 1982, kdy Davies *et al.* studoval CN vznikající v elektrickém výboji dusíku smíchaného s dikyanem.<sup>140</sup> Tato práce, obsahující jinak relativně sporé množství experimentálních dat, potvrdila výhody užití nových diodových laserů pro spektroskopii volných radikálů.

Milimetrovou a sub-milimetrovou (mikrovlnnou) spektroskopií CN radikálu se zabýval D. Skatrud *et al.*,<sup>141</sup> který změřil 65 nových linií v oblasti mikrovln a FIR v rozmezí cca 220–453 GHz. Experiment byl realizován v elektrickém výboji dusíku a methanu. Milimetrová spektra CN byla rovněž zkoumána Bogeym *et al.* v roce 1986, který rozšířil referenční data<sup>142</sup> pro CN v této oblasti o přechody do  $v = 9$ . Na rozdíl od Skatruda *et al.* postupoval Bogey *et al.* generací CN radikálu v radiofrekvenčním výboji směsi CO, N<sub>2</sub> a helia při teplotě kapalného dusíku. Za další zmínku o mikrovlnné spektroskopii CN lze uvést např. práci Ita *et al.* (1991),<sup>143</sup> který dále zkvalitnil dostupná spektrální data a rozšířil je až do  $v = 10$ .

Metodou supersonické expanze<sup>144</sup> CN radikálu se zabýval Prasad *et al.* v roce 1992. Jeho specifická experimentální technika, kdy byl CN produkován v koronálním výboji směsi helia, methylazidu a diazoacetonitrilu, které byly následně chlazeny tryskáním při supersonických rychlostech; mu umožnila poměrně přesně změřit přechody CN typu  $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$  pro  $\Delta v = 0$  a  $\Delta v = 1$ . Za velmi podobnou lze považovat též studii Rehfusse *et al.*<sup>145</sup>

Wurfel *et al.* v roce 1993 zkoumal infračervenou fluorescenci CN zachyceného v tuhých krystalických maticích vzácných plynů.<sup>146</sup> Toto experimentální uspořádání umožnilo studovat zachycený CN po relativně dlouhou dobu, což jen vyzdvihlo význam spektroskopie cílových produktů v tuhých maticích.

Za novější studie CN radikálu lze považovat např. práci Lia *et al.*,<sup>147</sup> který zkoumal rotačně-vibrační sktrukturu přechodu  $v = 2 \rightarrow 0$  v červeném systému CN pomocí koncentrační modulované laserové spektroskopie; nebo např. studii Chao-Xionga *et al.*,<sup>148</sup> který se zabýval velmi podobnou experimentální technikou pro studium CN v úzké viditelné oblasti 17450-17830  $\text{cm}^{-1}$ . Dále lze zmínit práci Horké *et al.* (2003),<sup>149</sup> Hempela *et al.* (2003),<sup>150</sup> Li *et al.* (2003),<sup>151</sup> Hübnera *et al.* (2005)<sup>152</sup> a Civiše *et al.* (2008).<sup>153</sup>

Jako pro každou významnou spektroskopickou molekulu, i pro CN radikál vzniklo mnoho čistě teoretických publikací. Např. Ito *et al.*<sup>154</sup> se zabýval perturbační analýzou emisního spektra fialového systému CN pro vyšší vibrační kvantová čísla (do  $v = 17$ ), a později až pro  $v = 19$ .<sup>155</sup> Ram *et al.*<sup>156</sup> se v roce 2010 zabýval FTIR emisní spektroskopií CN radikálu v červeném systému a získal set nových a přesných spektroskopických konstant. V témže roce Ram *et al.*<sup>157</sup> publikoval rozšíření svých spektroskopických parametrů pro červený systém CN, a to měřením ve spektrální oblasti 3500-22000  $\text{cm}^{-1}$ . Další práce těchto autorů byla publikována o dva roky později (2012),<sup>158</sup> kdy opět posunuli hranice přesnosti spektroskopických konstant a dalších parametrů pro úspěšnou teoretickou modelaci CN radikálu. Určením Einsteinových koeficientů CN pro oba spektrální systémy se zabývala řada dalších prací, např. publikace Brooke *et al.* z roku 2014.<sup>159</sup>

V roce 1994 se Pradhan *et al.*<sup>160</sup> zabýval studiem disociační energie CN, kde pomocí teoretického modelování dospěl k hodnotě  $E_D = 7,72 \pm 0,04$  eV, což je velmi vysoká energie vazby. Tato rigidita CN přispívá ke schopnosti CN absorbovat velké množství energie bez následného přerušení vazby mezi atomy C a N.

CN radikál je rovněž možné generovat ve stejnosměrném výboji methylthiokyanátu ( $\text{CH}_3\text{SCN}$ ). Tímto způsobem generace CN se zabýval Li *et al.*<sup>161</sup> v roce 2004, kdy bylo zjištěno, že s vyšším plazmatickým prouděním se dosahuje nižších koncentrací CN, zatímco koncentrace nestabilního CS se zvyšuje. Aplikace podobných poznatků byla využita v průmyslu polovodičů na tenké filmové vrstvě.

CN radikál lze též generovat fotolýzou jednoduchých molekulárních plynů. Např. v roce 2011 se pokoušel Hodyss *et al.*<sup>162</sup> simulovat prostředí Tritonu (největší měsíc Neptunu, který je zároveň nejchladnějším tělesem ve sluneční soustavě) a Pluta pomocí tenkých kryogenních filmů ledů methanu, dusíku a CO v daných poměrech. Bombardováním těchto ledů pomocí UV záření bylo generováno značné množství produktů jako například ethan, acetylen, HCO či CN radikál.

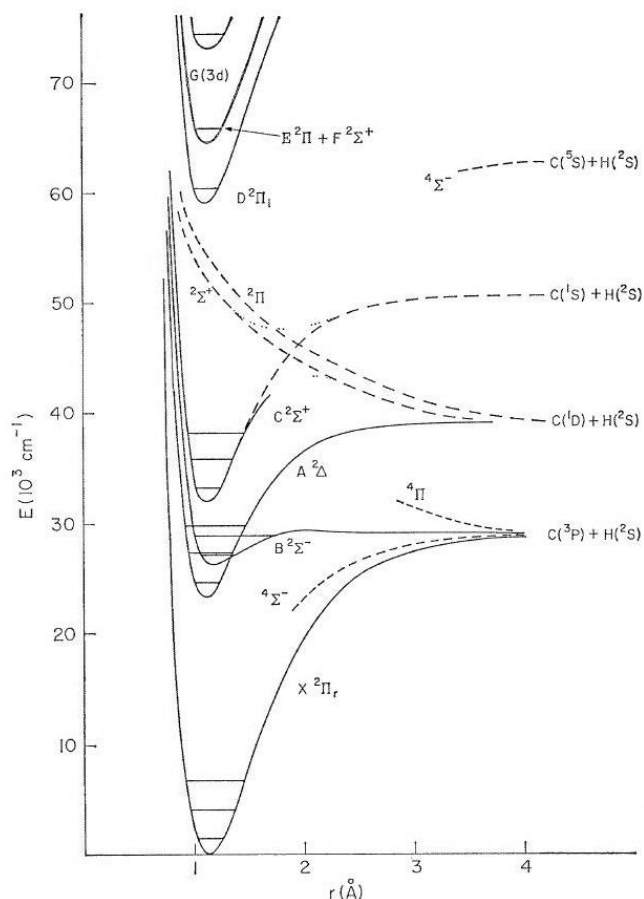
Předchozí výčet laboratorních a astrofyzikálních prací zaměřených na spektra CN poukazuje na jeho důležitost. CN je možné nalézt v obálkách hvězd i v mezihvězdných oblacích. Spektra CN radikálu lze výhodně využít k určení poměru C/N a jejich izotopickému zastoupení, což vede k možnosti namodelovat postupná stádia vývoje dané hvězdy. Aplikace těchto poznatků byla dobře zmíněna např. v práci Lamberta *et al.* z roku 1974,<sup>35</sup> kdy byl zkoumán poměr izotopů  $^{12}\text{C}$  a  $^{13}\text{C}$  na Betelgeuze. Finální poměr byl stanoven na  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 7,0 \pm 1,5$ , což vypovídá o silném nadbytku  $^{12}\text{C}$ . Za jednu z prvních publikací o spektrech CN v mezihvězdném prostoru lze považovat práci Salecka *et al.* (1993),<sup>163</sup> kde se jednalo o detekci CN v souhvězdí Orionu A. Jejich pozorování bylo definitivně potvrzeno o rok později vlastními analýzami dat z teleskopu KOSMA.<sup>164</sup> Sneden *et al.* v roce 2014<sup>165</sup> publikoval ucelenou databázi molekulárních konstant, parametrů a linií CN pro červený i fialový systém, kterou je možno užít jako průvodce pro analýzu astrofyzikálních dat. Tato extenzivní práce shrnuje dosavadní spektroskopická data o CN radikálu a popisuje jejich aplikaci při astrofyzikálních měřeních.

Speciální astrofyzikální aplikovatelnost měření CN radikálu tkví také v možnosti stanovení teploty vnějšího vesmíru. K tomuto objevu se dospělo krátce po zjištění teploty kosmického radiačního pozadí (3 K). Teplota se tímto způsobem měří prostřednictvím rotačních energetických hladin CN. Viz např. P. Thaddeus (1972).<sup>166</sup>

## CH radikál

Spektra CH radikálu je možné pozorovat v jakémkoli systému, kde dochází k rozkladu uhlovodíků při vysokoenergetických událostech. Jako další radikály, je i CH přítomen ve spektrech produktů exotermických chemických reakcí a hoření a explozí. CH je možné nalézt nejen v solárních spektrech, ale i v mezihvězdném prostoru a v obálkách hvězd. Výjimkou není ani přítomnost CH radikálu v difúzních mezihvězdných mračnecích. Z těchto důvodů je CH radikál, po boku s NH, CN a OH, zařazován mezi astronomicky nejvýznamnější specie.

Spektroskopické vlastnosti CH radikálu jsou definovány tvarem a pozicí potenciálových funkcí pro jednotlivé elektronické stavy této částice (Obrázek 7).



Obrázek 7: Potenciálové křivky<sup>167</sup> pro známé elektronické stavy CH

Poprvé byl CH radikál detegován v roce 1919 Heurlingerem a Hulthenem.<sup>168</sup> Spektra CH radikálu byla následně zkoumána při různorodých experimentálních podmínkách po dalších 50 let. V roce 1969 Herzberg a Johns<sup>167</sup> shrnuli dosavadní znalosti o spektrech CH radikálu a změřili nové elektronické přechody v oblasti 73000, 65000, 64000, 59000 a 33000  $\text{cm}^{-1}$ . V roce 1978 Filseth *et al.*<sup>169</sup> měřil fluorescenci CH v nízkotlakém plamenu acetyleny s kyslíkem a vodíkem. Změřena byla chemiluminiscence 0-0 pásu v přechodu  $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$ , což je dominantní spektrální složka při spalování všech uhlovodíků. V roce 1978 je také již možné nalézt první publikace zaměřené na měření CH radikálu pomocí laserové magnetické rezonance, což je dodnes jedna z nejcitlivějších spektroskopických technik. Práce Hougena<sup>170</sup> poskytla přesná data pro energie rotačních energetických úrovní v oblasti FIR až mikrovln a také jako jedna z prvních demonstrovala parametry hyperjemného štěpení některých linií. Ve výboji methanu a argonu zkoumal emisní přechody CH typu  $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$  Suzuki *et al.*<sup>171</sup> V roce 1986 P. Chen *et al.*<sup>172</sup> studoval do té doby neznámé linie CH radikálu, pocházející z dvoufotonových přechodů do Rydbergových a jiných vysoce excitovaných valenčních stavů. Tyto nové pásy byly nalezeny v oblasti nad 50000  $\text{cm}^{-1}$ , tedy v oblasti UV, a byly

zkoumány při zábleskové fotolýze ketenu, který byl předtím připraven pomocí mžikové vakuové pyrolýzy anhydridu kyseliny octové. P. Bernath *et al.*<sup>173</sup> v roce 1991 pozoroval nové emisní přechody CH typu  $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$  a  $B^2\Sigma^- \rightarrow X^2\Pi$ . Spektra kyslík-acetylenového plamenu se zabýval také Hung *et al.*,<sup>174</sup> který použil pokrokovou detekční metodu pomocí dvou barvivových laserů a poukázal tak na vhodnost této techniky při detekci radikálů. Posledních zhruba 20 let je pak z pohledu CH zaměřeno na analýzu stále nových přechodů a izotopů, jako např. práce Bembenka *et al.*<sup>175</sup> z roku 1997, obsahující měření přechodu  $C^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$  pro izotop uhlíku  $^{13}\text{C}$ ; práce M. Zachwieji<sup>176</sup> o přechodu  $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$  rovněž pro  $^{13}\text{C}$ ; rezonanční multifotonová ionizační spektroskopie přechodu  $A^2\Delta \rightarrow D^2\Pi$ ,<sup>177</sup> která poukázala na neznámý Rydbergův stav kolem  $63000\text{ cm}^{-1}$ ; submilimetrová měření CH v oblasti 530 GHz (kolem  $17\text{ cm}^{-1}$ ) Amana<sup>178</sup> z roku 2000; podobná měření Davidsona<sup>179</sup> z roku 2001 v oblasti FIR, který se dokázal dostat až na přesnost měření 100 kHz; zajímavá práce Czyzewskiho *et al.*<sup>180</sup> (2002) o kinetice rozpadu CH, zkoumané pomocí cavity ring-down spektroskopie; měření  $^{13}\text{CH}$  v oblasti FIR pomocí již zmíněné, vysoce citlivé, laserové magnetické rezonance;<sup>181</sup> měření první vibračně excitované energetické úrovně stavu  $X^2\Pi$  M. Jacksona *et al.*<sup>182</sup> z roku 2008; měření linií CH o extrémních frekvencích (535 GHz) s vysokým rozlišením S. Truppeho *et al.*<sup>183</sup> (2014), které mohou poskytnout informaci o stálosti základních fyzikálních konstant; či moderní práce Ganse *et al.*<sup>184</sup> (2016), zaměřená na aplikaci synchrotronového záření při studiu jednofotonových přechodů CH typu  $X^2\Pi \rightarrow X^+1\Sigma^+$  nebo  $X^2\Pi \rightarrow a^+3\Pi$ .

Velké pozornosti se rovněž dočkal kation CH radikálu,  $\text{CH}^+$ , který byl široce spektroskopicky analyzován. Namátkou lze zmínit např. publikace M. Carreho<sup>185</sup> (1969) nebo Carringtona a Ramsaye<sup>186</sup> (1982).

CH radikálu bylo věnováno velké množství čistě teoretických prací, které se zabývaly spektroskopickými vlastnostmi této částice. Radiační dobu života stavu  $A^2\Delta$  CH radikálu měřil Carozza a Anderson<sup>187</sup> (1977). Na základě dostupných dat stanovili tuto dobu na  $508 \pm 25\text{ ns}$  pro  $v' = 0$ . Práce Jørgensena *et al.*<sup>188</sup> z roku 1996 zas předkládá velmi podrobnou databázi všech možných linií CH, vytvořených modelací kvantově dovolených energetických přechodů mezi hladinami  $X^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$ ,  $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$ ,  $B^2\Sigma^- \rightarrow X^2\Pi$  a také  $C^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ . Pomocí jednoduchého modelu vytvořili databázi čítající 112821 linií CH, kterou dali volně k dispozici na svých serverech. Zkvalitněním potenciálových křivek pro CH se zabýval J. Martin<sup>189</sup> (1998). Pomocí *ab initio* výpočtů zpřesnil energetické posazení den potenciálů a délek vazeb pro čtyři různá diatomika (CH, NH, OH a HF) na úroveň chyby kolem  $1\text{ cm}^{-1}$ . A. Kalemós *et al.*<sup>190</sup> teoreticky zkoumal Rydbergovy stavy CH a poskytli set přesných

spektroskopických konstant. Vibračním tranzitním momentem CH radikálu se zabýval Ghosh *et al.* (1999),<sup>191</sup> který tento stanovil na základě poruchy intenzit P a R větve CH radikálu (tzv. Herman-Wallis efekt). Vysoce excitovanými stavy typu  $E^2\Pi$  a  $F^2\Pi$  se zabýval A. Metropoulos *et al.*,<sup>192</sup> kterému se povedlo stanovit predisociační dobu života stavu  $E^2\Pi$  na cca 2 ps. Z dalších teoretických prací o CH je možné zmínit např. práci Heryadiho *et al.* (2002)<sup>193</sup> o přímém stanovení ionizačních potenciálů CH; publikaci Reddyho *et al.* (2004)<sup>194</sup> o dalším zpřesnění potenciálových křivek CH a výpočtu disociačních energií (zde stanoveno na  $3,48 \pm 0,903$  eV); práci Vázquez *et al.* (2007)<sup>195</sup> o Rydbergových stavech CH, spočítaných kompletně *ab initio*; práci Lavína *et al.*<sup>196</sup> z roku 2009 o síle oscilátorů a jejich distribuci ve spektrech CH nebo např. publikaci Masserona *et al.* (2014),<sup>197</sup> kde vyčerpávajícím způsobem shrnul dostupné pozice a intenzitní distribuce linií a pásů CH a jejich přítomnost v atmosférách hvězd.

CH byl jednou z prvních částic, které byly spektrálně identifikovány v astronomických zdrojích elektromagnetického záření. Jako první byl detekován v difúzních mezihvězdných mračnách Swingsem a Rosenfeldem<sup>198</sup> v roce 1937. Dále byl detekován v kometárních spektrech (Swings a Nicolet, 1938)<sup>199</sup> a na Slunci, Wildt (1941).<sup>200</sup> V historii je možné sledovat, jak se jednotlivé linie, obvykle změřené v difúzních mezihvězdných mračnách, přiřazují známým speciím. Např. v roce 1960 vyšla práce Douglase a Mortona,<sup>201</sup> kde popsali přiřazení linie o vlnové délce 3579 Å radikálu CH. V roce 2001 pak lze zmínit přiřazení linií kolem 1369 Å J. Watsonem.<sup>202</sup>

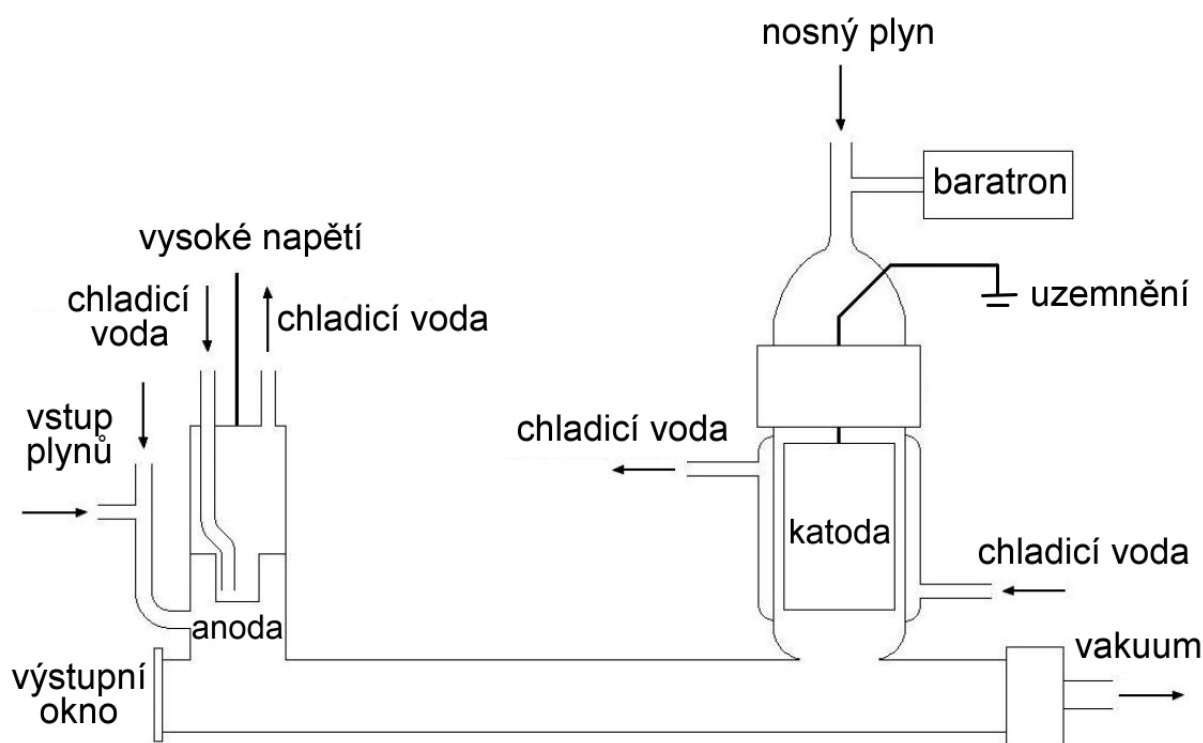
Solárními spektry se zabýval také Mélen *et al.*<sup>203</sup> v roce 1989, kdy použil spektra získaná sondou ATMOS (Atmospheric Trace Molecule Spectroscopy), která byla ve funkci mezi 29. 4. a 2. 5. 1985. Ve spektrech bylo identifikováno 558 nových spektrálních linií CH, které byly využity ke zkvalitnění dosavadních dat. Následně data z mise ATMOS zkoumal Zachwieja (1995),<sup>204</sup> který v solárních spektrech našel dalších 144 nových linií CH.

Kvalitní spektrální databáze CH radikálu umožňuje např. studium exoplanetárních atmosfér stanovením zastoupení uhlíku a vodíku. Spektra CH je rovněž možno využít k stanovení významného parametru poměru  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ , který je možno vyčíst z vysoce rozlišených spekter a vypovídá také např. o chemické evoluci hvězdy.

## Experimentální část

### Instrumentace spektrálních měření

Při všech spektrálních měřeních byla užita speciálně upravená výbojová kyveta, jejíž schéma je možné vidět na Obrázku 8. Tato výbojová cela představuje jen jeden z mnoha způsobů, kterým lze provádět spektroskopické studium celé řady radikálů. Pozitivní sloupec doutnavého výboje uvnitř cely je jednoduchý na realizaci a navíc je možné jej časově modulovat (on-off) spínáním a vypínáním elektrického napětí, které z tohoto uspořádání činí velmi vhodnou metodu pro aplikaci časově rozlišené FTIR spektroskopie.



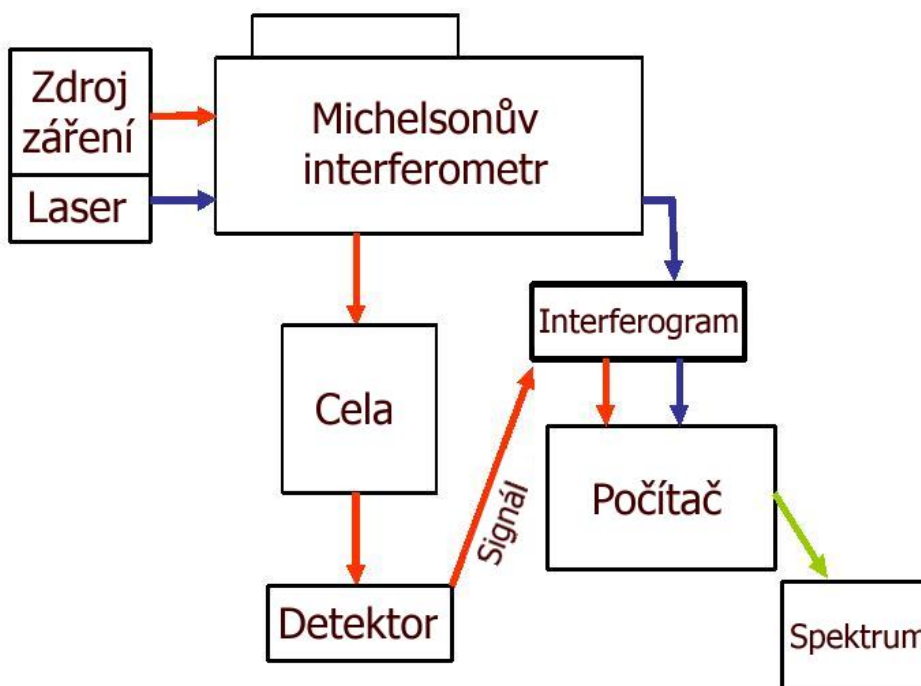
Obrázek 8: Výbojová cela

Výbojová cela byla vyrobena z teplotně odolného skla, aby odolala častým teplotním šokům, ke kterým dochází při samotné realizaci doutnavého vysokonapěťového výboje. Anoda i katoda jsou vyrobeny z nerezové oceli, přičemž katoda je, na rozdíl od anody, dutá a má velkou vnitřní plochu. Bylo empiricky zjištěno, že toto geometrické uspořádání s velkou plochou katody snižuje elektronický šum. Obě elektrody jsou fyzicky spojeny skleněnou trubicí o průměru 12 mm a délce 25 cm, v níž se tvoří samotný doutnavý výboj mezi oběma elektrodami. Napětí mezi elektrodami dosahuje hodnot kolem 1 kV. Elektrody jsou navíc



vybaveny systémem vnitřního chlazení, a to díky dvojitému skleněnému plášti, v němž neustále proudí voda. Skleněná spojovací trubice je na jednom konci opatřena výstupním okénkem, které je vždy vybráno s ohledem na spektrální rozsah požadovaného měření a typicky bývá použit fluorid vápenatý ( $\text{CaF}_2$ ) nebo bromid draselný (KBr). Z druhé strany je trubice připojena na vakuovou rotační olejovou vývěvu. Celý výbojový systém je tedy neustále v režimu podtlaku a jemného průtoku plyné směsi. Podtlak ve výbojové cele obvykle dosahuje hodnot kolem  $2 \cdot 10^{-3}$  Torr (cca 0,3 Pa). Skleněná trubice je navíc ještě celá ponořena v chladicím médiu, obvykle vodě, kapalném dusíku či suchém ledu. Inertní plyn (pokud je ho při měření užito) je do výbojové cely přiváděn na katodu a anodu zároveň, přídavné plyny (obvykle ty, jež se měří) se pak přivádějí jen na anodu a vlivem čerpání vývěvou pak driftují pozitivním sloupcem výboje ke katodě a poté ven ze systému. Emisní záření vystupuje z výbojové cely výstupním okénkem, které je navíc připevněno k trubici pod Brewsterovým úhlem, aby nedocházelo k násobné reflexi záření. Poté je záření opticky orientováno na čočku, která přivede spojený svazek do vstupní apertury spektrometru.

Pro měření spekter byl užit infračervený spektrometr Bruker IFS 120 HR, který byl modifikován pro časově rozlišená měření. Tato modifikace z něj v současnosti činí jediný časově rozlišený emisní FTIR spektrometr s vysokým rozlišením na světě. Schéma vnitřního uspořádání tohoto spektrometru je možné vidět na Obrázku 9.

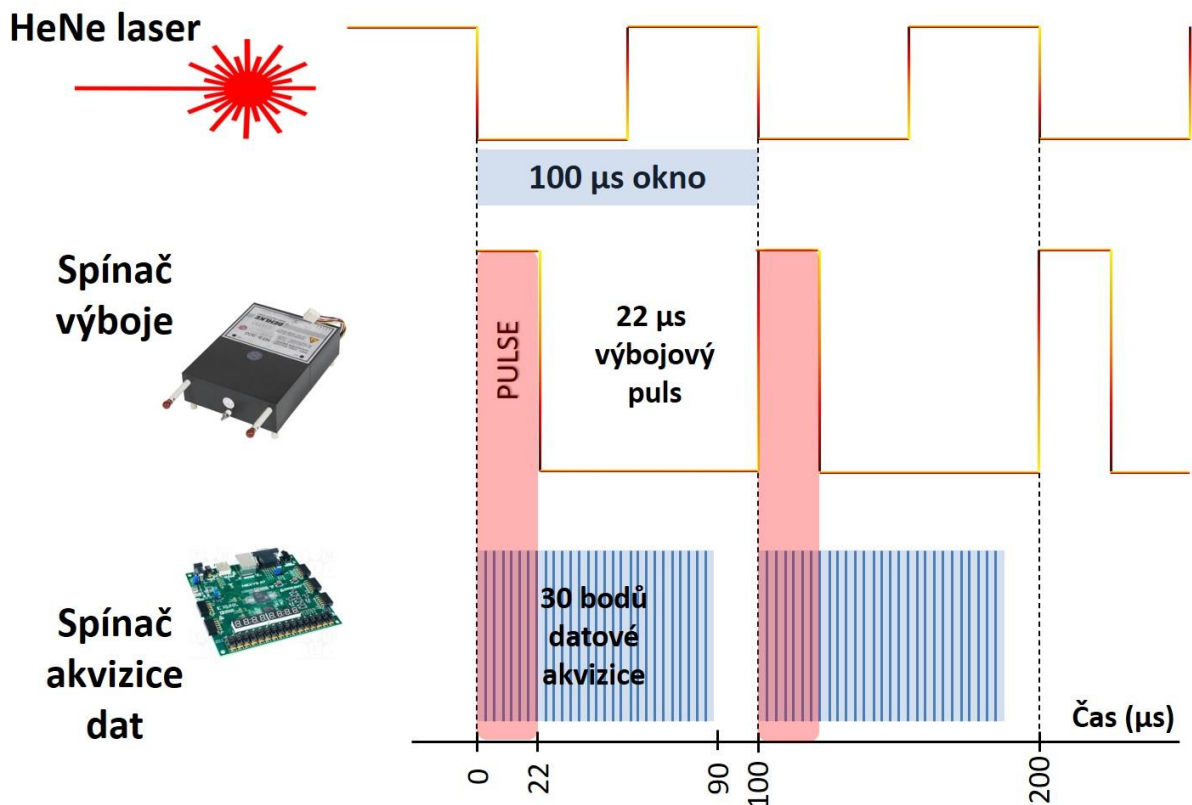


Obrázek 9: Schéma vnitřního uspořádání spektrometru<sup>205</sup> Bruker IFS 120 HR

Jak je možné vidět na Obrázku 9, srdcem spektrometru je samotný Michelsonův interferometr, v němž se setkávají signály ze zdroje záření (zde výbojová cela, viz Obrázek 8), pak tentýž signál odražený od mobilního zrcadla spektrometru a také trasovací signál HeNe laseru, který se užívá k odečtení přesné polohy mobilního zrcadla. Vzniklá interference signálů je pak opticky směřována přes vzorkový prostor, do kterého lze vkládat referenční květu se vzorky do dráhy paprsku a pozorovat tak spektra i v absorpčním režimu, a dále do detektorového prostoru. Při měření byly užity detektory InSb a MCT (Hg/Cd/Te). Oba detektory jsou polovodičové a operují při teplotách kapalného dusíku, přičemž pak InSb detektor je určen pro rozsahy vlnočtů  $1800-13000\text{ cm}^{-1}$  a MCT pro  $700-3000\text{ cm}^{-1}$ . Při měřeních popsanych v této práci byly užívány oba detektory. Analogový signál z detektoru je digitalizován pomocí analogově-digitálního převodníku a následně je zpracován počítačem, kde je uložen v paměti jako interferogram. Pomocí následné operace Fourierovy transformace je pak z interferogramu vytvořeno výsledné spektrum. Matematická stránka konverze interferogramu na spektrum v souvislosti s akvizicí interferenčních dat spektrometrem byla detailně popsána v mé bakalářské práci.<sup>206</sup>

## Časové rozlišení

Časové rozlišení odlišuje použitý experimentální systém od běžné infračervené spektroskopie. Přidání třetí, časové, dimenze v naměřených datech umožňuje nejen pozorovat kinetiku jednotlivých spektrálních přechodů, ale také průměrovat jednotlivé vybrané časy pro získání optimálního poměru signál-šum (tzv. signal-to-noise ratio). Navíc, některé těžce měřitelné částice, jako např. NH radikál, téměř není možné změřit klasickou IR emisní spektroskopií. Užitím časového rozlišení však lze díky časově posunutým spektrům odseparovat spektra NH radikálu od spekter jiných částic nebo molekul. Časové rozlišení v tomto případě tedy umožňuje získat spektra vybraných částic v maximu jejich intenzit a separaci různých produktů vznikajících ve výboji v širokém časovém rozsahu (0-100  $\mu\text{s}$ ). Princip užitého časového rozlišení je zobrazen na Obrázku 10.

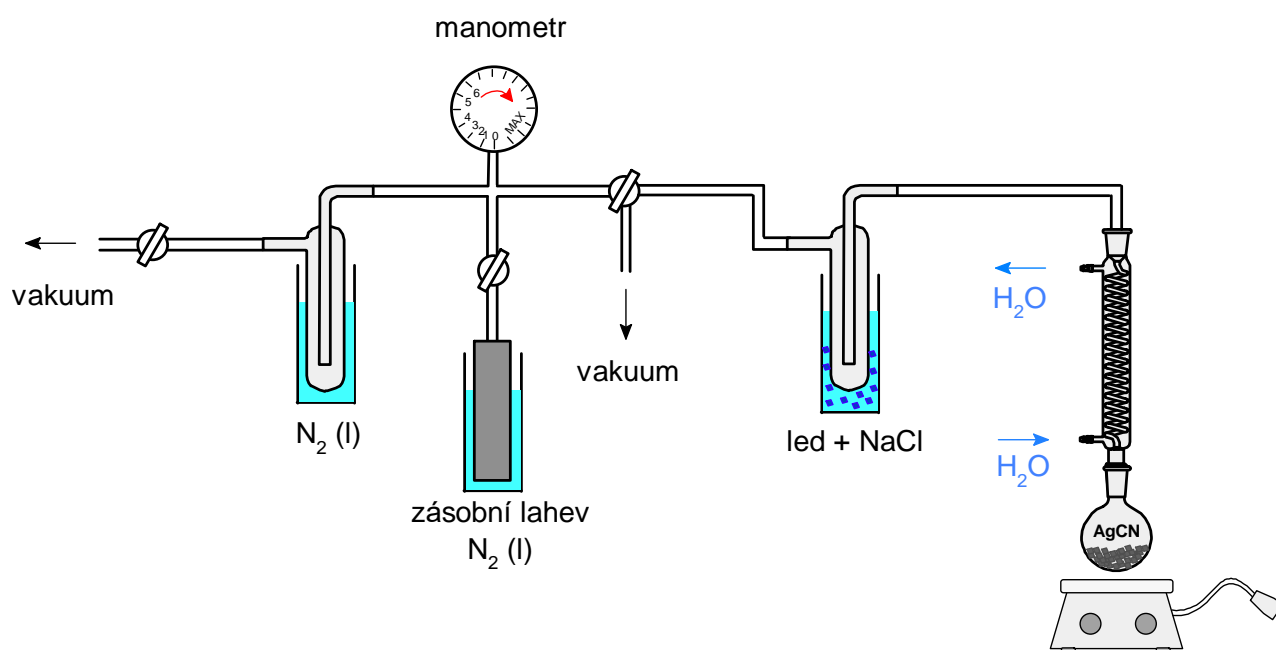


Obrázek 10: Časové rozlišení a akvizice dat

Poloha mobilního zrcadla interferometru je určena pozicí zrcadla na základě interferenčních pulsů HeNe laserového signálu, který je možné vidět v horní části Obrázku 10. Signál tohoto laseru má tvar kosinové funkce, ale po digitalizaci má tzv. obdélníkový průběh, který se v spektrometru užívá jako vnitřní standard. Frekvence těchto obdélníkových pulsů závisí na rychlosti mobilního zrcadla. Typicky je rychlost zrcadla při měřeních nastavena na odpovídající frekvenci 10 kHz, což definuje šířku jednoho laserového obdélníkového okna na 100 μs (jedna celá digitalizovaná vlna). Během této doby je realizováno celé jedno měření a akvizice dat. Výbojový puls je řízen vysokonapětovým spínačem (Behlke electronic GmbH) a jeho délka může být libovolně modifikována. Běžná délka pulsu činí 22 μs, jak je uvedeno v Obrázku 10. Při sepnutí pulsu spínačem je na elektrody výbojové cely přivedeno vysoké napětí a vznikne doutnavý výboj. Výboj je spínačem přerušen po uplynutí nastavené délky pulsu a výboj v cele zanikne. Během pulsu i po něm je možné provádět kontinuální akvizici dat. Ta je řízena AD spínačem, který je rovněž možné plně naprogramovat dle požadovaných parametrů. Možné je nastavit jak počet akvizičních bodů (zde obvykle 30, maximálně pak 64) a jejich vzájemné časové intervaly (na Obrázku 10 každé 3 μs), tak i např. datový offset, který definuje mrtvou dobu na počátku procesu akvizice dat, po kterou žádná akvizice neprobíhá.

## Aparatura pro přípravu dikyanu

Spektra CN radikálu lze generovat mnoha způsoby, jedním z nejjednodušších je rozklad dikyanu  $((\text{CN})_2)$  v plazmatu doutnavého výboje. Jelikož dikyan samotný se komerčně neprodává, je nutné jej pro účely výzkumu syntetizovat přímo v laboratoři. Obrázek 11 popisuje schéma aparatury užití při syntéze dikyanu.



Obrázek 11: Aparatura pro syntézu dikyanu

Dikyan byl syntetizován tepelným rozkladem kyanidu stříbrného ( $\text{AgCN}$ ). Kyanid stříbrný byl navážen do kulové varné baňky, která byla umístěna do topného hnízda. Systém byl evakuován na tlak cca  $5 \cdot 10^{-2}$  Torr pomocí rotační olejové vývěvy, aby byla minimalizována přítomnost vzdušné vlhkosti. Kyanid byl zahříván nejprve na  $280^\circ\text{C}$  po dobu cca 15 minut pro odpaření nečistot a zbytkové vlhkosti. Zahřívací systém byl opatřen spirálovým chladičem s konstantním průtokem vody pro zachycení potenciálně časně unikajícího dikyanu. Páry nečistot byly zachytávány ve vymrazovačce chlazené směsí ledu a chloridu sodného ( $\text{NaCl}$ ). Po uplynutí 15 minut bylo přistoupeno k samotnému tepelnému rozkladu  $\text{AgCN}$ , který byl realizován při teplotě  $380^\circ\text{C}$  do viditelného ukončení reakce. Kyanid stříbrný se rozkládá dle chemické reakce:<sup>207</sup>



Jelikož vznikající dikyan je stálý plyn s teplotou tání  $-27,9\text{ }^{\circ}\text{C}$ , je možné jej vymrazit kapalným dusíkem. Systém byl během samotné syntézy stále udržován v mírném podtlaku a dikyan byl vymražen pomocí kapalného dusíku. Po ukončení syntézy (obvykle cca 1 h) byl systém odpojen od vývěvy a chlazení, kapalný dusík byl odstraněn z vymrazovačky a dikyan byl predestilován do zásobní plynové lahve, chlazené rovněž na teplotu kapalného dusíku. Následně byla lahev uzavřena, odpojena od aparatury a ohřáta na laboratorní teplotu. Aparatura byla poté opět evakuována vývěvou. Vzhledem k vysoké toxicitě dikyanu byla celá syntéza realizována v digestoři.

## Výsledky a diskuse

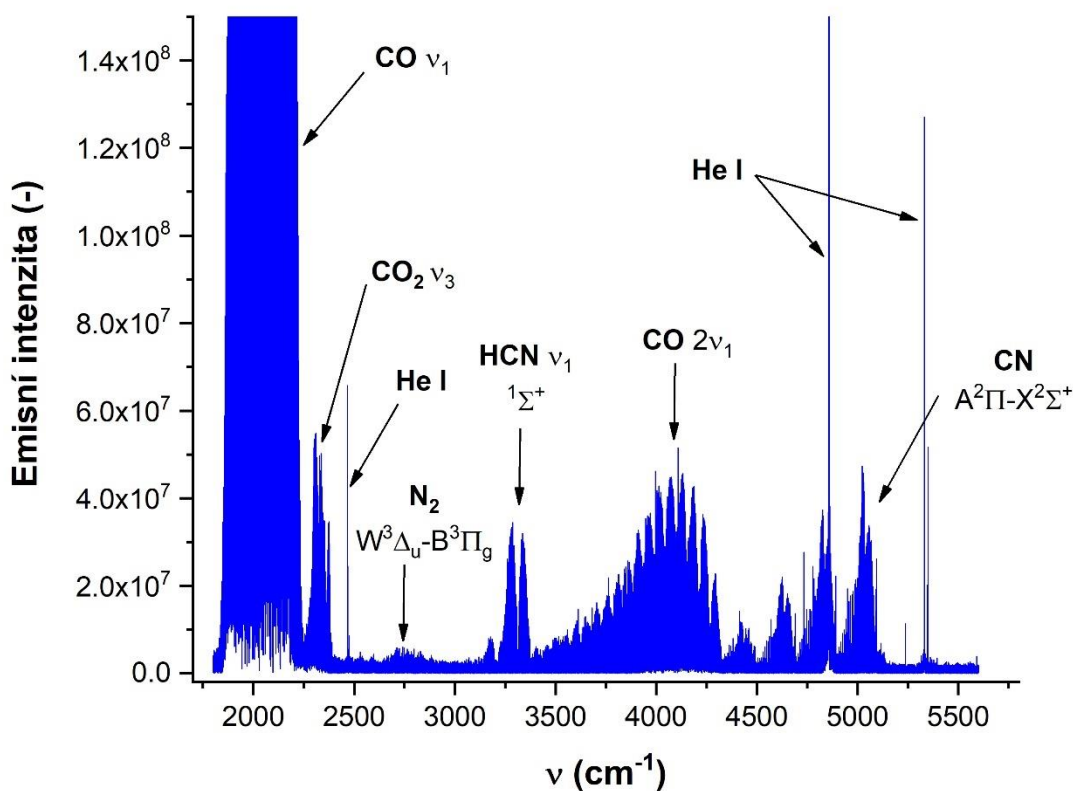
### Oxid uhelnatý

#### Analýza spekter

Oxid uhelnatý byl spektrálně zkoumán v doutnavém výboji par formamidu (CAS 75-12-7, Sigma-Aldrich, čistota > 99 %) smíseném s dusíkem a vodní párou při teplotě 60 °C. Tato plynná směs byla konstantně vstříkována do doutnavého výboje čistého helia (Messer Technogas, čistota 5.4) o tlaku 1,8 Torr. Výsledný tlak plynné směsi ve výbojové cele činil 2,0 Torr při kontinuálním odsávání výbojových produktů. Elektrické napětí mezi oběma elektrodami výbojové cely bylo 1 kV a elektrický proud činil 100 mA. Při měřeních s InSb detektorem bylo použito vstupní okno do spektrometru z CaF<sub>2</sub>, stejně jako vnitřní dělič svazku („beam-splitter“), výstupní okno výbojové cely a fokusační čočka. Při měřeních s MCT detektorem byl pak zvolen KBr jako vhodný optický materiál pro všechna okna a dělič svazku. Za materiál čočky, fokusující svazek do apertury spektrometru, byl zvolen ZnSe. Vstupní apertura spektrometru byla nastavena na průměr 1,7 mm. Spektrometr byl evakuován na tlak 10<sup>-3</sup> mbar. Spektra byla pořizována při spektrálním rozlišení 0,02 cm<sup>-1</sup> (bez apodizace) a počet provedených scanů činil 200. Apodizace byla provedena Norton-Beer weak algoritmem. Díky užití kombinovaných detektorů bylo možné pokrýt spektrální rozsah 700-7000 cm<sup>-1</sup>. Spektra byla kalibrována vůči fundamentálním a overtonickým přechodům CO uvedených v knize Guelachviliho a Raa z roku 1986.<sup>208</sup>

Výboj měl délku 22 μs a sběr dat byl realizován každou 3. mikrosekundu. Počet akvizičních bodů byl 30, čili bylo pokryto 90 μs akvizičního času. Offset byl nastaven na 0 μs, což znamená, že žádná data nebyla ignorována.

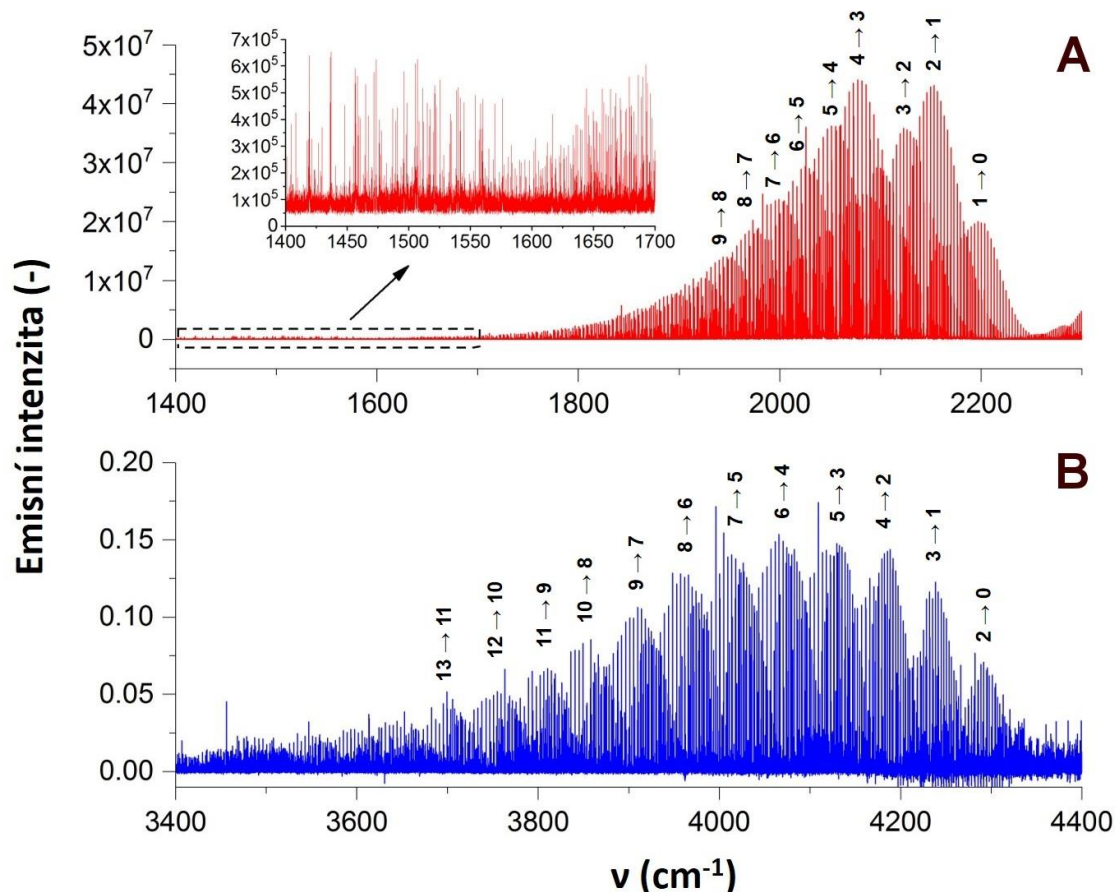
Spektrum výboje ve směsi formamid-dusík-voda-helium, pořizené v čase 33 μs, je možné vidět na Obrázku 12.



Obrázek 12: Spektrum výboje směsi formamid-dusík-voda v heliu (čas 33  $\mu$ s, 11  $\mu$ s po skončení výbojového pulsu)

Na základě měření časově rozlišených spekter směsi formamid-dusík-voda lze v časovém spektru, 11  $\mu$ s po skončení výboje, identifikovat celou řadu krátce žijících meziproductů včetně stabilnějších molekul. Mimo rotačně-vibračního fundamentálního a overtonického pásu oxidu uhelnatého je zde silně zastoupen také kyanovodík (HCN), oxid uhličitý, dusík a CN radikál.

Detailní spektrum CO je znázorněno na Obrázku 13, kde je zachycen fundamentální a první overtonický pás CO. Část spektra 1400-1700  $\text{cm}^{-1}$  u fundamentálního rotačně-vibračního pásu CO, obsahující nově nalezené linie, je zde pro přehlednost zvětšena.

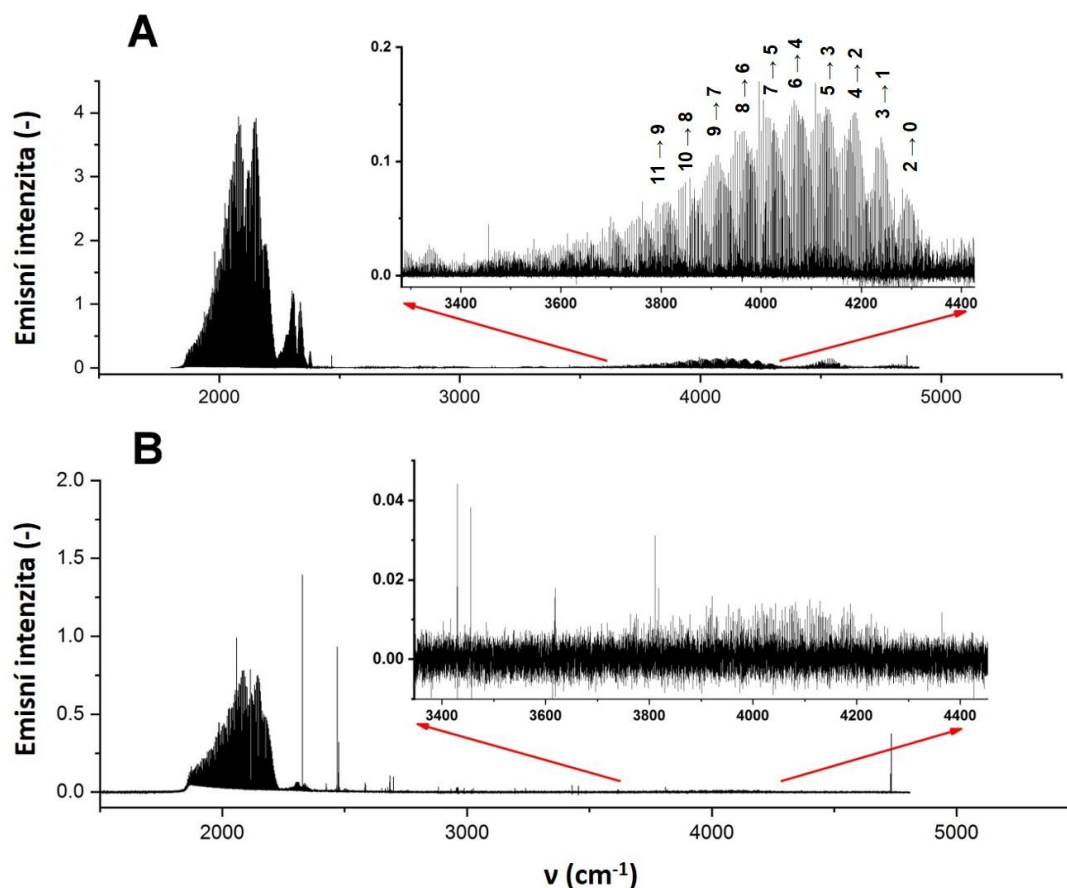


Obrázek 13: Rotačně-vibrační struktura CO v základním stavu  $X^1\Sigma^+$  v čase 33  $\mu\text{s}$   
panel A – fundamentální pás CO ( $v_1$ ), panel B – první overtón CO ( $2v_1$ )

Obrázek 13 byl vytvořen selekcí nejintenzivnějšího spektra (zde 33.  $\mu\text{s}$ ) z matice časově rozlišených dat. Na panelu A je zachycen rotačně-vibrační fundamentální pás CO ( $v_1$ ), pro nějž platí rozdíl vibračních kvantových čísel jednotlivých přechodů  $\Delta v = 1$ . Změřeny byly přechody až do vibračního čísla  $v = 30$ . Na panelu B je pak znázorněn první rotačně-vibrační overtón CO ( $2v_1$ ), pro nějž platí rozdíl vibračních čísel jednotlivých přechodů  $\Delta v = 2$ . V případě overtónu byly identifikovány přechody do vibračního čísla  $v = 24$ . Spektra na obou panelech náleží CO v základním elektronickém stavu  $X^1\Sigma^+$ .

Je zajímavé, že pokud je výboj realizován pouze v čistém CO, k populaci overtónu CO téměř nedochází, což je opak výboje formamidové směsi, kde je overtón silně populován. Tento efekt je možné pozorovat na Obrázku 14. Experimentální podmínky obou měření zůstaly stejné, tedy 1,8 Torr helia jako nosného plynu, 0,2 Torr formamidové směsi či čistého CO a stejné optické uspořádání spektrometru.



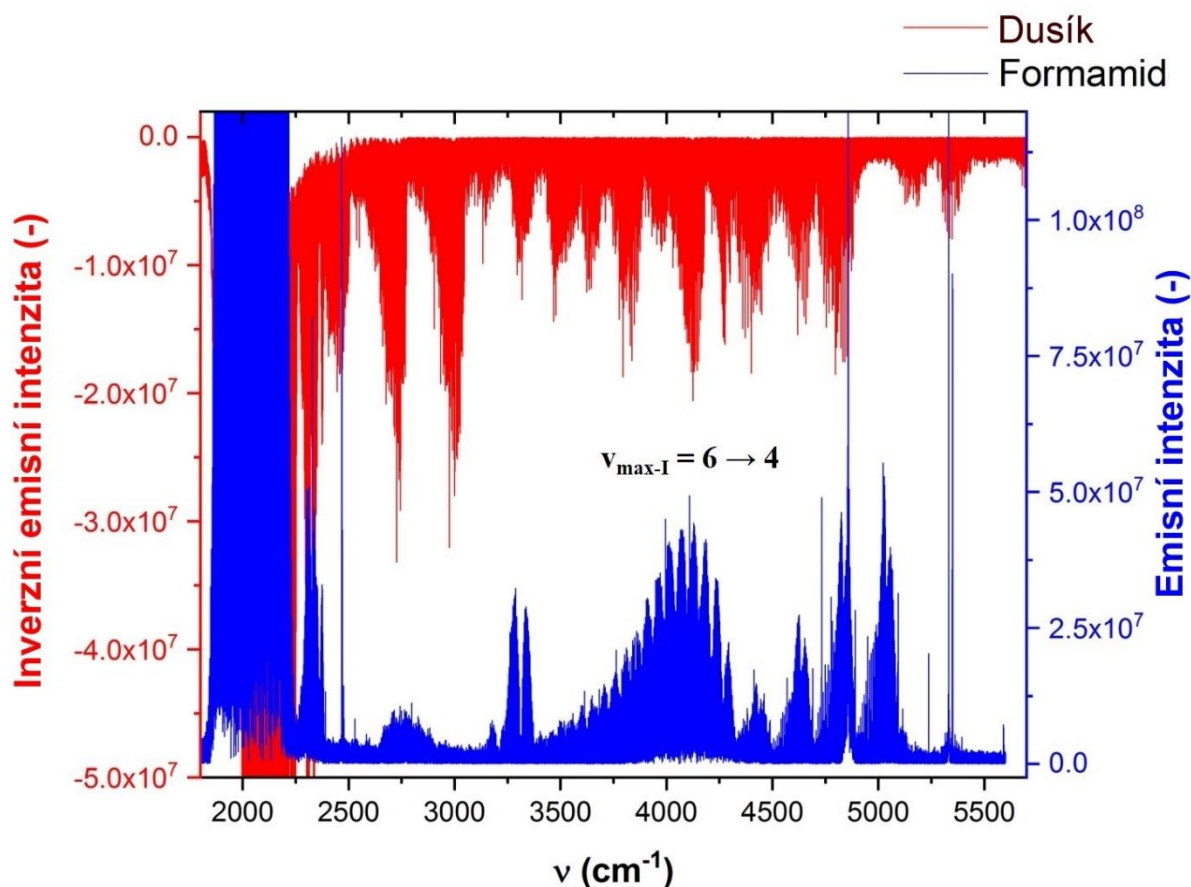


Obrázek 14: Srovnání spekter formamidové směsi a čistého CO pro 33.  $\mu\text{s}$   
panel A – helium + formamidová směs, panel B – helium + čistý CO

Jak je možné vidět na Obrázku 14, formamidová směs, na rozdíl od čistého CO, produkuje oba pásy CO. Tento fenomén je spojen s dostupnou excitační energií ve výbojovém systému. Při doutnavém výboji formamidové směsi je v systému přítomno velké množství částic, které kolizně excitují své reakční partnery, což nakonec vede k vytvoření silné populace energetických mediátorů, jako CN a CO. Tyto částice jsou excitovány do rozličných energetických stavů. Díky této dostupnosti velkého množství excitační energie v systému je CO overton silně populován. Tato variace vysoce excitovaných částic ve výboji čistého CO chybí.

Navíc je možné si všimnout, že první overton CO vykazuje tzv. inverzní populaci (viz též Obrázek 15). Inverzní populace označuje jev, kdy dojde k vyšší populaci jiného vibračního přechodu než nejnižšího, který je u normální populace nejintenzivnější. Inverzní populace se vyskytuje u laserů, např. právě u CO laserů, jak byly popsány A. Ioninem *et al.*<sup>209,210</sup> Tato inverze je zřejmě způsobena čerpáním CO energetickými přechody v excitované molekule

dusíku přítomné v systému. Dusík je rigidní molekula, která stejně jako rigidní radikály dokáže existovat v celé řadě elektronicky, vibračně i rotačně vzbuzených stavů, aniž by disociovala. Dusík hraje velkou roli při formaci produktů výboje formamidové směsi. Na Obrázku 15 je možné vidět srovnání emisního spektra čistého dusíku a doutnavého výboje formamidové směsi, kde je první overtone CO v inverzní populaci (maximální intenzita je dosažena u horkého pásu 6-4).



Obrázek 15: Srovnání emisního spektra molekuly dusíku (červeně) a formamidové směsi (modře)

V případě CO laserů, míchaných s dusíkem, je ve výboji transfer energie mezi oběma částicemi realizován dominantně prvním vibračním stavem CO kvůli kvazi-rezonančnímu rozdílu energie mezi prvním vibračním stavem CO a dusíku, který činí cca  $188 \text{ cm}^{-1}$ .<sup>211</sup> Tato porucha se zesiluje s rostoucím vibračním stavem CO kvůli jeho anharmonicitě. Pro dusík je situace opačná. Vyšší energetické stavy dusíku dosahují rezonance s  $1 \rightarrow 0$  přechodem CO. Proto pouze nižší vibrační stavy CO mohou být excitovány vibračně vzbuzeným dusíkem prostřednictvím anharmonických kolizí.<sup>212</sup>

Jak je možné vidět na Obrázku 12, 13, 14 a 15, stimulovaná emise prvního overtonu CO vykazuje maximum okolo  $v = 4, 5$ . Pro výše vibračně vzbuzené stavy kolem  $v = 10$  inverze mizí. Tento jev parciální inverze je v souladu s teorií fundamentálního CO laseru. Požadavek pro funkci laseru v rovibronické parciální populační inverzi je dán vztahem (3).

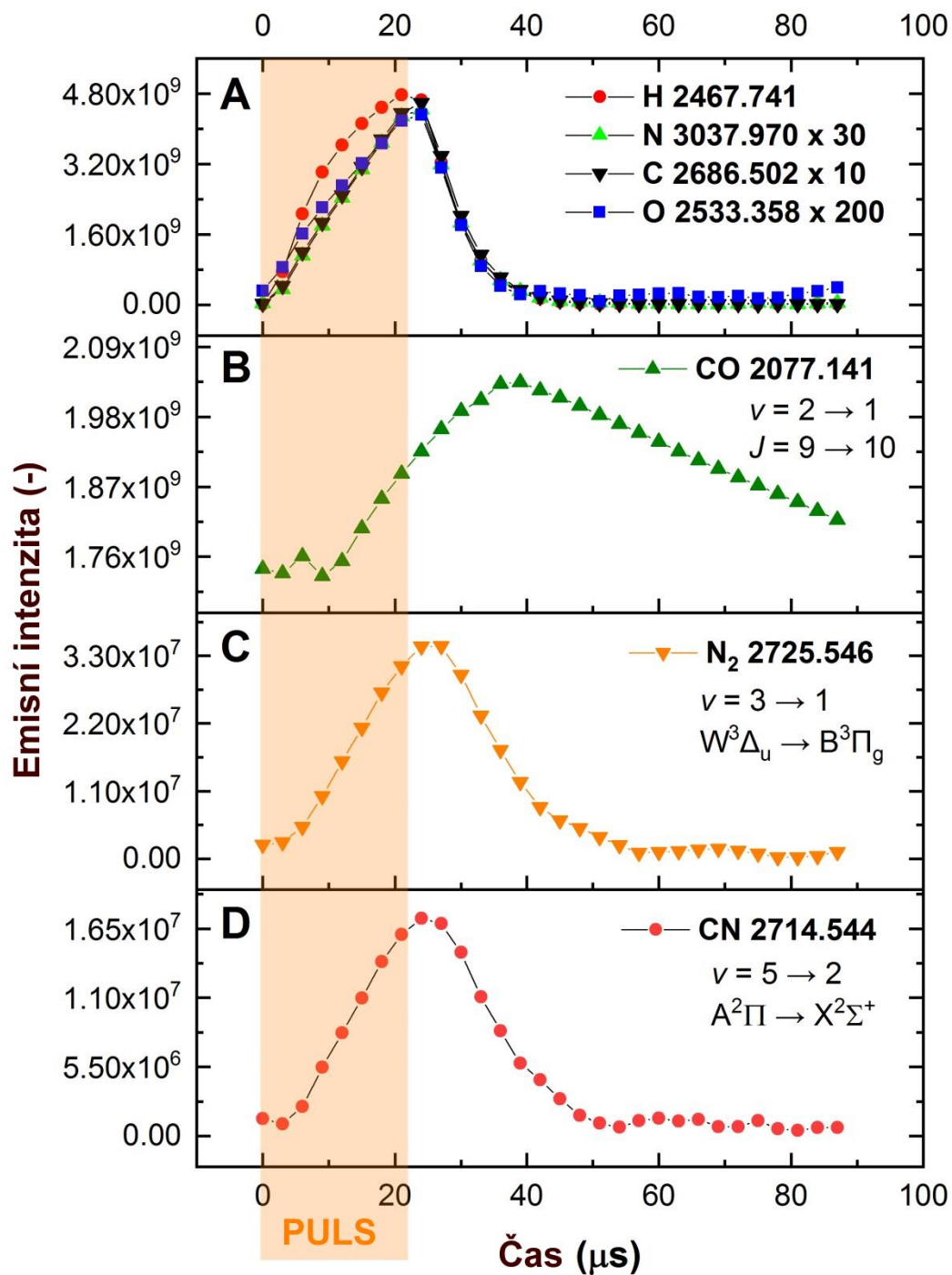
$$\frac{N_{v'J'}}{g_{J'}} > \frac{N_{v''J''}}{g_{J''}} \quad (3)$$

Kde  $N_{v'J'}$  označuje hustotu obsazenosti vyššího stavu o specifickém vibračním ( $v$ ) a rotačním ( $J$ ) kvantovém čísle,  $N_{v''J''}$  značí totéž pro nižší stav,  $g_{J'}$  je degenerace vyššího rotačního stavu a  $g_{J''}$  pak degenerace nižšího stavu. Tato podmínka (3) je pro výše popsany formamidový výbojový systém splněna, a proto je možné pozorovat CO overton v parciální inverzi, jako v případě CO laserů.

Aktivní médium overtonického CO laseru obvykle sestává z CO, N<sub>2</sub> a helia. Laser funguje na principu excitace CO do vysokých vibračně excitovaných stavů díky anharmonickým kolizím. Laser vyžaduje neustálé chlazení a preferovaně také konstantní průtok aktivního média. Na základě našeho pozorování parciální inverzi CO overtonu ve spektrech výboje formamidové směsi jsme uvažovali o stavbě formamidového laseru pro spektrální oblast 2.5  $\mu\text{m}$ . Nakonec tento projekt nebyl zrealizován a naši ideu jsme nabídli výzkumnému týmu prof. A. Ionina z Ruské federace. Navržená konstrukce laseru je založena na principu využití formamidové směsi jako možného aktivního média overtonického CO laseru.

### Časové profily

Časové rozlišení, popsané na Obrázku 10, umožňuje mimo jiné sledovat časový vývoj vybraných linií ve spektru a vyvozovat tak možné závěry o kinetice dané specie ve výbojovém systému. Časové profily jednotlivých částic, které je možno pozorovat ve výsledném spektru výboje formamidové směsi (Obrázek 12), jsou přehledně zobrazeny v Obrázku 16.



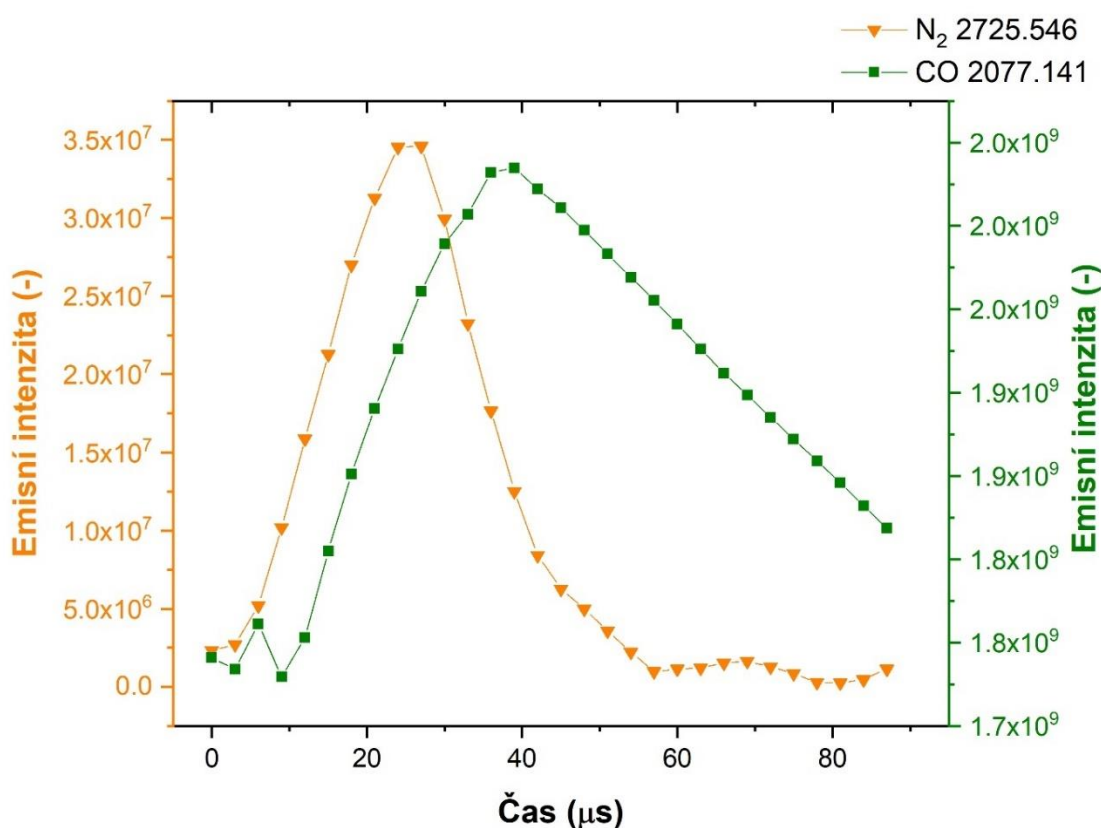
Obrázek 16: Časové profily vybraných linií částic v časových spektrech výboje formamidu

Panel A Obrázku 16 popisuje časové profily atomárních linií, které se podařilo identifikovat ve výsledných spektrech formamidového výboje (s výjimkou velmi intenzivních linií atomárního helia, které však vykazují stejné chování). Všechny atomy mají emisní maximum

kolem 3  $\mu\text{s}$  po skončení výbojového pulsu o délce 22  $\mu\text{s}$ . Intenzita atomárních přechodů po výboji rychle klesá a po dalších zhruba 15  $\mu\text{s}$  (40.  $\mu\text{s}$  akvizice dat) již emisní intenzita bez výjimek splývá s šumem pozadí. V našich spektrech se atomární linie dominantně objevují jako prvotní vznikající částice.

Na druhou stranu oxid uhelnatý, uvedený v panelu B, je dlouho žijící stabilní molekula. Maximální intenzita CO nastává kolem 15  $\mu\text{s}$  po skončení výbojového pulsu. Je zajímavé, že na počátku pulsu je intenzita emise CO linií zhasena počínajícím výbojem na nulu, i když zjevně CO na konci pozorovacího okna (o šířce 100  $\mu\text{s}$ ) kompletně nedeexcitoval.

Časový profil vybrané emisní linie molekulárního dusíku z přechodu typu  $W^3\Delta_u \rightarrow B^3\Pi_g$  je vyneseno v panelu C. Časový profil dusíku je oproti CO posunut ke kratším časům. Srovnáním časových profilů CO a dusíku je možné pozorovat pokles intenzity emisního signálu dusíku se simultánním růstem intenzity CO. Tento fakt podporuje hypotézu o vzájemném přenosu energie mezi  $N_2$  a CO prostřednictvím kolizních excitací, jak bylo diskutováno v předchozí sekci práce, zabývající se populační inverzí CO overtonu. Detailněji je možné sledovat tuto časovou souslednost energetické výměny na Obrázku 17.



Obrázek 17: Detail časových profilů CO a  $N_2$  v emisním spektru formamidového výboje

Panel D Obrázku 16 pak popisuje časový profil linie CN radikálu, jenž je podobný časovému profilu molekulárního dusíku. Z předchozích závěrů je patrné, že CN hraje ve výboji podobnou roli energetického mediátoru jako N<sub>2</sub> a slouží tak jako potenciální intermediát při vzniku složitějších organických molekul (viz kapitola Role radikálů v prebiotické chemii).

### Rotační a vibrační teplota výbojového plazmatu

Jednou z důležitých charakteristik výbojového plazmatu je jeho teplota, která obecně popisuje energetickou distribuci částic v celém systému. Teplota plazmatu se obvykle dělí na čtyři samostatné veličiny: elektronická teplota  $T_e$ , vibrační teplota  $T_V$ , rotační teplota  $T_R$  a kinetická teplota  $T_\sigma$ . Mezi jednotlivými teplotami existuje následující relace:

$$T_{el} > T_V > T_R \equiv T_\sigma \quad (4)$$

Distribuci mezi excitovanými částicemi a částicemi v základním stavu navíc popisuje excitační teplota  $T_{exc}$ .

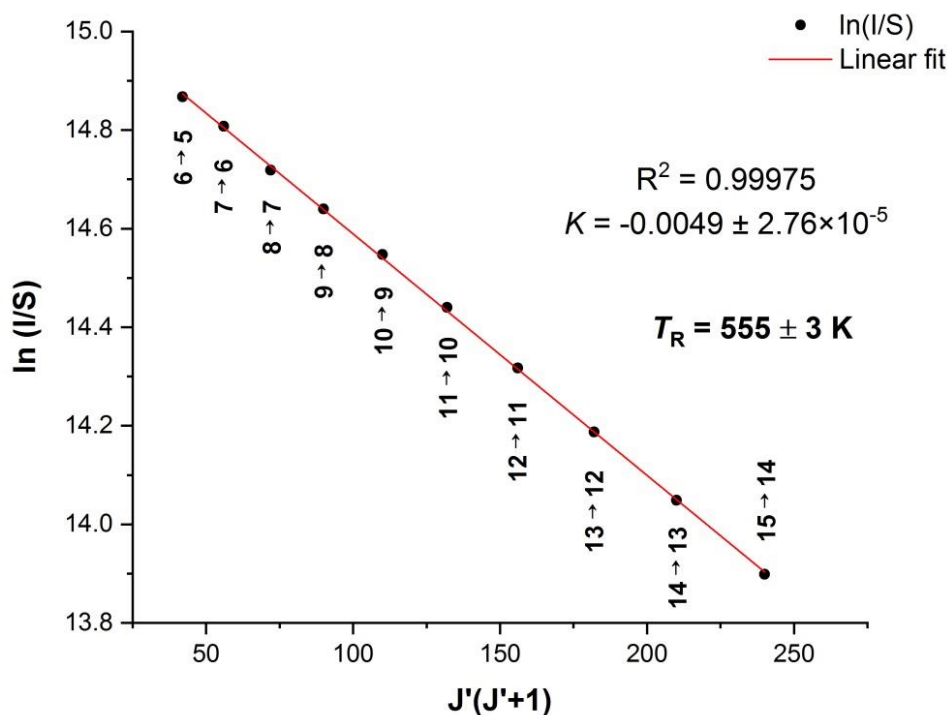
V případě rotačně-vibračních přechodů je možné vyjádřit rotační teplotu jako závislost (5).

$$\ln\left(\frac{I}{S_{J',J''}}\right) = \frac{-E_R}{kT_R} + Q \quad (5)$$

Kde  $I$  je intenzita,  $S_{J',J''}$  je Höhnel-Londonův faktor definovaný jako  $S_{J',J''} = B_{v'}(J'+1)$  pro R-větve molekul,  $k$  je Boltzmannova konstanta,  $E_R$  je energie vyššího rotačního stavu,  $T_R$  značí rotační teplotu a  $Q$  je konstanta. Aplikuje-li se na vztah (5) lineární regrese, rotační teplota je pak určena směrnici dané regresní přímky dle vztahu (6).

$$T_R = -\frac{hcB_{v'}}{Kk} \quad (6)$$

Kde  $h$  je Planckova konstanta,  $c$  je rychlost světla ve vakuu,  $B_{v'}$  značí rotační konstantu pro daný vyšší vibrační stav a  $K$  je směrnice regresní přímky.



Obrázek 18: Stanovení rotační teploty plazmatu pomocí CO pro přechod  $v = 2 \rightarrow 1$

Jak lze vidět na Obrázku 18, rotační teplota plazmatu pro výše zmíněný formamidový výboj byla stanovena pomocí jednotlivých linií rotačně-vibračního přechodu typu  $v = 2 \rightarrow 1$  ve fundamentálním pásu CO. Do výpočtu byly zahrnuty pouze R-větve tohoto přechodu. Přechody specifikované v Obrázku 18 u jednotlivých bodů značí rotační kvantová čísla pro vybrané linie. Rotační teplota ve formamidovém výboji byla stanovena na  $T_R = 555 \pm 3$  K.

Vibrační teplotu výbojového plazmatu je možné spočítat podobným způsobem jako teplotu rotační. Vibrační teplotu je možno extrahovat ze závislosti (7).

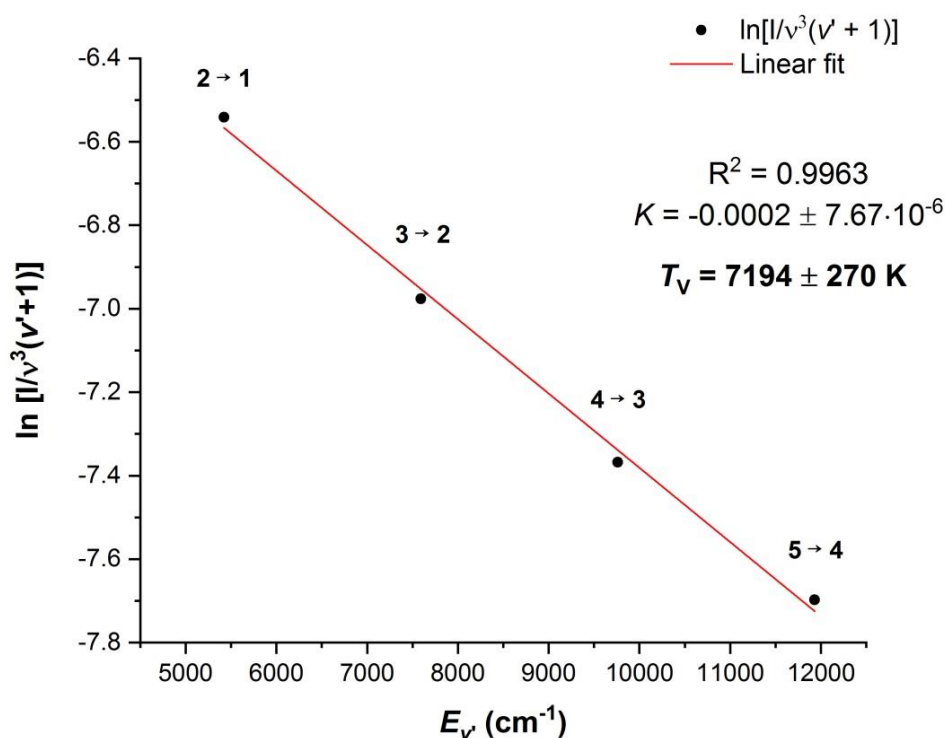
$$\ln \left[ \frac{I}{\nu^3(\nu' + 1)} \right] = KE_{\nu'} + Q \quad (7)$$

Kde  $I$  je intenzita,  $\nu$  je vlnčet hrany vybraného pásu (zjednodušeně pak vlnčet nejprominentnější linie),  $\nu'$  je vibrační kvantové číslo vyššího energetického stavu,  $K$  je směrnice regresní přímky,  $E_{\nu'}$  značí energii vyššího vibračního stavu a  $Q$  je jako obvykle konstanta. Užitím lineární regrese na vztah (7) je pak vibrační teplota definována vztahem (8).

$$T_V = -\frac{hc}{kK} \quad (8)$$



Samotnou lineární regresi závislosti (7) pro formamidový výbojový systém je možné vidět na Obrázku 19.



Obrázek 19: Stanovení vibrační teploty plazmatu v horkých pásích  $v_1$  přechodů CO

Vibrační teplota plazmatu formamidového výboje byla stanovena na  $T_v = 7194 \pm 270$  K. Hodnoty z Obrázku 19 byly spočítány z intenzit jednotlivých horkých pásů fundamentálního přechodu ( $v_1$ ) CO pro fixní rotační kvantová čísla, a sice  $J = 10 \rightarrow 9$ . Hodnoty uvedené u jednotlivých bodů pak označují vibrační přechody.

### Určení molekulárních parametrů pomocí Dunhamových rovnic

Kompletní seznam všech změřených linií fundamentálního rotačně-vibračního pásu CO je možné vidět v Tabulce 1 v příloze této práce. Tabulka obsahuje jak jednotlivé vlnočty linií ( $v$ ), tak i spektrální přiřazení vyjádřené notací pomocí rotačních ( $J$ ) a vibračních ( $v$ ) kvantových čísel. Rutinní přiřazení linií bylo provedeno vlastním programem, jenž byl napsán v jazyce MATLAB. Jeden apostrof v Tabulce 1 značí vyšší energetický stav a dva apostrofy pak nižší. O-C parametr („Observed-Calculated“) vyjadřuje odchylku experimentálních linií CO od teoretických dat, získaných Dunhamovým fitem celého datového souboru (viz níže).



Jak je vidět v Tabulce 1, data jsou seřazena podle vzrůstajícího vibračního kvantového čísla od  $1 \rightarrow 0$  do  $30 \rightarrow 29$ . Pro každý takto specifikovaný vibrační přechod jsou pak data seřazena dle vzrůstajícího vlnočtu. Data v Tabulce 1 pro vyšší vibrační přechody jsou zároveň prvními experimentálně změřenými liniemi fundamentálního CO a byla publikována v práci Pastorek *et al.* (2021).<sup>213</sup>

Tabulka 2 v příloze popisuje seznam všech experimentálně získaných linií prvního overtonu CO. Styl řazení dat a uváděné parametry linií jsou totožné s formátem užitým v Tabulce 1.

Samotný Dunhamův fit linií popsanych v Tabulkách 1 a 2 byl proveden dle matematického vztahu (9), který popisuje rotačně-vibrační energii diatomické molekuly v základním energetickém stavu.

$$E_{vJ} = \sum_{mj} Y_{mj} \left( v + \frac{1}{2} \right)^m [J(J + 1)]^j \quad (9)$$

Kde  $E$  značí energii,  $v$  a  $J$  jsou vibrační a rotační kvantová čísla a  $Y$  je Dunhamův parametr.

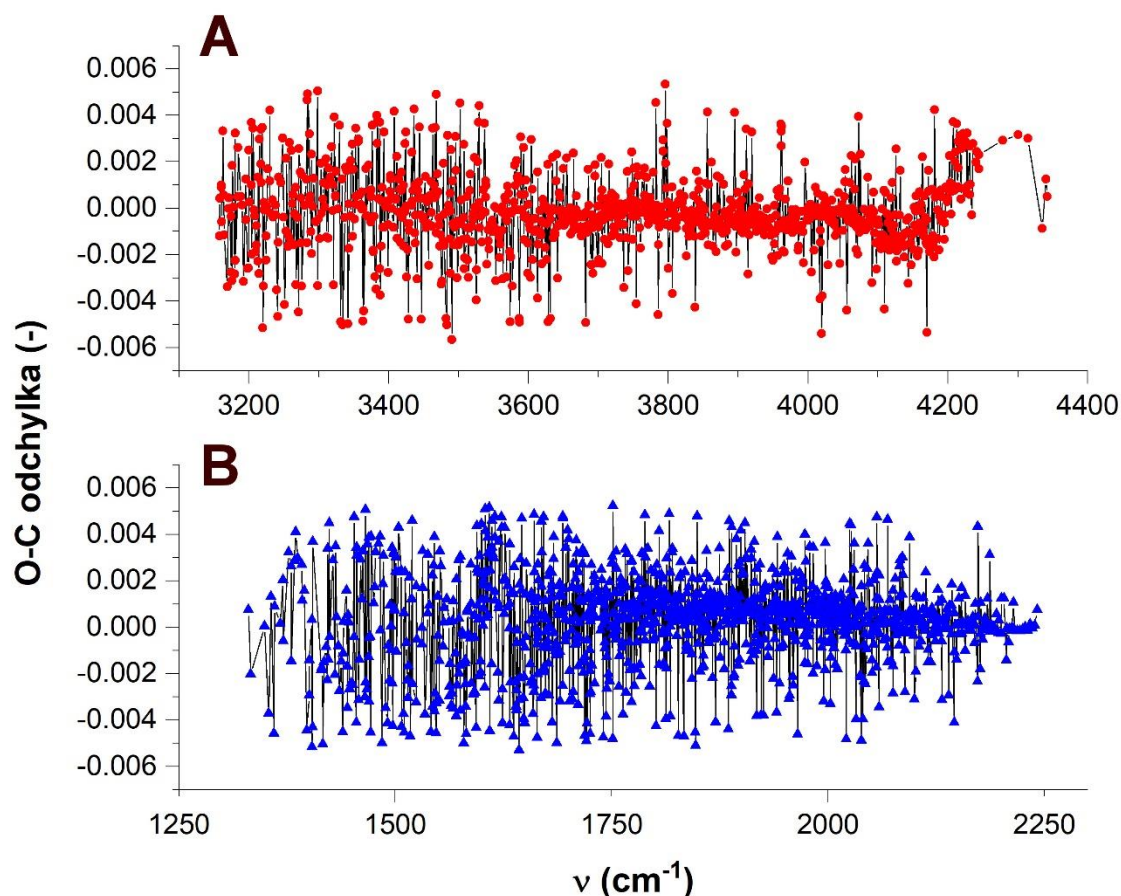
Fit byl realizován se všemi liniemi v Tabulce 1 a 2, celkový počet fitovaných linií byl tedy 2318. Pro fitování byly užity 3 iterační cykly výpočetního algoritmu a průměrná odchylka fitu činila  $0,00187 \text{ cm}^{-1}$ . Získané Dunhamovy parametry, které slouží k dokonalému popsání spektra CO a jeho následné možné teoretické konstrukci, jsou uvedeny v Tabulce 3 spolu se srovnáním s daty ostatních autorů.

Tabulka 3: Získané Dunhamovy parametry

Parametr	Získaná hodnota	Odchylka	Guelachvili 1983 <sup>66</sup>	Farrenq 1991 <sup>42</sup>	George 1994 <sup>41</sup>	Voitsekhovskaya 2010 <sup>57</sup>	Velichko 2012 <sup>70</sup>
Y <sub>10</sub>	2,16981435058E+03	2,60346E-04	2,169813079E+03	2,169812670E+03	2,16981272207061E+03	2,16981260189138E+03	2,16981271269893E+03
Y <sub>20</sub>	-1,32880451734E+01	6,90001E-05	-1,328790597E+01	-1,328787634E+01	-1,3287915708423E+01	-1,32880390472301E+01	-1,32879077503162E+01
Y <sub>30</sub>	1,04196903414E-02	8,31465E-06	1,041444739E-02	1,041106647E-02	1,04233331951946E-02	1,04297230421766E-02	1,04200107689629E-02
Y <sub>40</sub>	6,92027520078E-05	4,61776E-07	6,921598529E-05	6,936640756E-05	6,7462405343680E-05	6,91624678098570E-05	6,80377742384337E-05
Y <sub>50</sub>	1,68790806557E-07	1,02696E-08	1,657890319E-07	1,679352306E-07	3,2986711937998E-07	-	2,783610500612498E-07
Y <sub>60</sub>	2,05925160000E-09	fixni*	2,466226718E-09	2,059251576E-09	-5,8493637376180E-09	-	-3,19724526593943E-09
Y <sub>70</sub>	-8,48735465211E-10	2,05532E-12	-8,630071431E-10	-8,488145707E-10	-6,2715847364920E-10	-	-7,068230585339760E-10
Y <sub>80</sub>	1,23977200000E-11	fixni*	1,261536024E-11	1,239772013E-11	9,0775889392701E-12	-	1,03749356544423E-11
Y <sub>90</sub>	-8,23373730000E-14	fixni*	-8,363842545E-14	-8,233737278E-14	-6,1705367158987E-14	-	-7,05404492531844E-14
Y <sub>01</sub>	1,93128382294E+00	3,06305E-06	1,931280862E+00	1,931280985E+00	1,9312809033958E+00	1,93128401690855E+00	1,93128087327140E+00
Y <sub>11</sub>	-1,75043277315E-02	3,18138E-07	-1,750410155E-02	-1,750439229E-02	-1,7504193371413E-02	-1,75116889793261E-02	-1,75041235527725E-02
Y <sub>21</sub>	7,41356432756E-07	2,75631E-08	5,422101371E-07	7,173917007E-07	6,2379766846640E-07	1,92588311032083E-06	5,70532184909572E-07
Y <sub>31</sub>	-2,26621471569E-08	6,82024E-10	1,311844382E-08	-2,146354586E-08	-7,0546494085138E-09	-1,40220011143880E-07	9,69857903930996E-09
Y <sub>41</sub>	4,43540390000E-09	fixni*	1,401093703E-09	4,435403909E-09	3,4920931173138E-09	4,34781878468765E-09	1,35483542867397E-09
Y <sub>51</sub>	-1,36106950000E-10	fixni*	-5,829907475E-12	-1,361069450E-10	-1,0881270072104E-10	-	2,25449888217700E-11
Y <sub>61</sub>	1,24578570000E-12	fixni*	-1,434127145E-12	1,245785715E-12	9,5370204560962E-13	-	-3,19275246504171E-12
Y <sub>71</sub>	-2,12512340000E-14	fixni*	-	-2,125123415E-14	-2,1251311385081E-14	-	4,32011471696302E-14
Y <sub>02</sub>	-6,12311794934E-06	2,43250E-09	-6,120747566E-06	-6,121615183E-06	-6,1215848016203E-06	6,13285831240000E-06	-6,12158560096097E-06
Y <sub>12</sub>	1,03492300000E-09	fixni*	9,449843095E-10	1,034922952E-09	1,0188484060611E-09	-1,01342795667900E-08	1,02459633331244E-09
Y <sub>22</sub>	-1,84976700000E-10	fixni*	-1,450768382E-10	-1,849766981E-10	-1,8203310242138E-10	1,911114139748080E-09	-1,80717504333141E-10
Y <sub>32</sub>	2,43111090000E-12	fixni*	-2,927592559E-12	2,431110877E-12	1,7737257777330E-12	-1,55862557242420E-10	1,22972770958921E-12
Y <sub>42</sub>	-1,04348860000E-13	fixni*	1,660533203E-13	-1,043488564E-13	-1,0434878309722E-13	1,23163810413664E-12	-4,92314710035746E-15
Y <sub>03</sub>	5,88490500000E-12	fixni*	5,555386989E-12	5,884905033E-12	5,8860382897684E-12	7,49718003847800E-12	5,88575750614083E-12
Y <sub>13</sub>	-1,42865330000E-13	fixni*	-1,512463732E-13	-1,428653277E-13	-1,4336331475578E-13	4,39367271266751E-13	-1,43834090220217E-13
Y <sub>23</sub>	-1,22532850000E-15	fixni*	-1,471295100E-15	-1,225328499E-15	-1,0421817812590E-15	-4,13264102453580E-13	-7,89546451928477E-16
Y <sub>04</sub>	-3,61578570000E-17	fixni*	-	-3,615785745E-17	-3,6175232747399E-17	-	-3,61692680681491E-17
Y <sub>14</sub>	-7,40580130000E-19	fixni*	-	-7,405801298E-19	-7,2671020958070E-19	-	-7,18415798732584E-19
Y <sub>24</sub>	-5,05437660000E-21	fixni*	-	-5,054376594E-21	-5,0546748483490E-21	-	-9,48909588925019E-21
Y <sub>05</sub>	-4,55298500000E-23	fixni*	-	-4,55298526E-23	-4,5798771172546E-23	-	-4,60743885881130E-23
Y <sub>15</sub>	-5,92225750000E-24	fixni*	-	-5,922257515E-24	-5,9223569597228E-24	-	-4,99321091850083E-24
Y <sub>06</sub>	-1,51964150000E-27	fixni*	-	-1,519641502E-27	-1,5196377524508E-27	-	-7,78104388574249E-28

\*Hodnoty odchylek označené v Tabulce 3 jako fixní označují Dunhamův parametr, který byl zařazen na hodnotě převzaté z práce Farrenqa *et al.* (1991).<sup>42</sup> Tabulka 3 neobsahuje všechny Dunhamovy parametry, jež se vyskytují v literatuře, neboť pro fitování linií CO byly použity pouze parametry v tabulce uvedené.

O-C odchylka Dunhamova fitu uvedená v Tabulkách 1 a 2 je graficky znázorněna na Obrázku 20 v závislosti na rostoucím vlnočtu.



Obrázek 20: Závislost O-C odchylky jednotlivých fitovaných linií na vlnočtu pro overton CO (panel A) a pro fundamentální pás CO (panel B)

V ideálním případě dokonalého Dunhamova fitu by Obrázek 20 měl pro oba pásy CO vykazovat náhodnou distribuci odchylek, které by se navíc neměly extrémně odchylovat od nuly. Jak je z obrázku vidět, obě distribuce odchylek tuto nahodilost téměř splňují, s výjimkou oblasti 4200-4400 cm<sup>-1</sup> u overtonu CO, kde se vyskytuje residuum dané klesající intenzitou měřených linií.

## OH radikál

### Analýza spekter

Rotační a rotačně-vibrační spektra OH radikálu v základním elektronickém stavu byla zkoumána nejprve se směsí vodních par a nosného plynu (helium), ale tato kombinace se ukázala jako neefektivní. Naopak jako výborná pro produkci OH radikálu se ukázala být směs kyslíku a vodíku v heliu. Bylo vyzkoušeno množství kombinací parciálních tlaků všech tří komponent, než byl nalezen jejich optimální poměr. Závislost emisního signálu vybrané linie při vybraném čase popisuje Tabulka 4.

Tabulka 4: Emisní signály linie  $3509,6 \text{ cm}^{-1}$  při různých kombinacích parciálních tlaků plynů

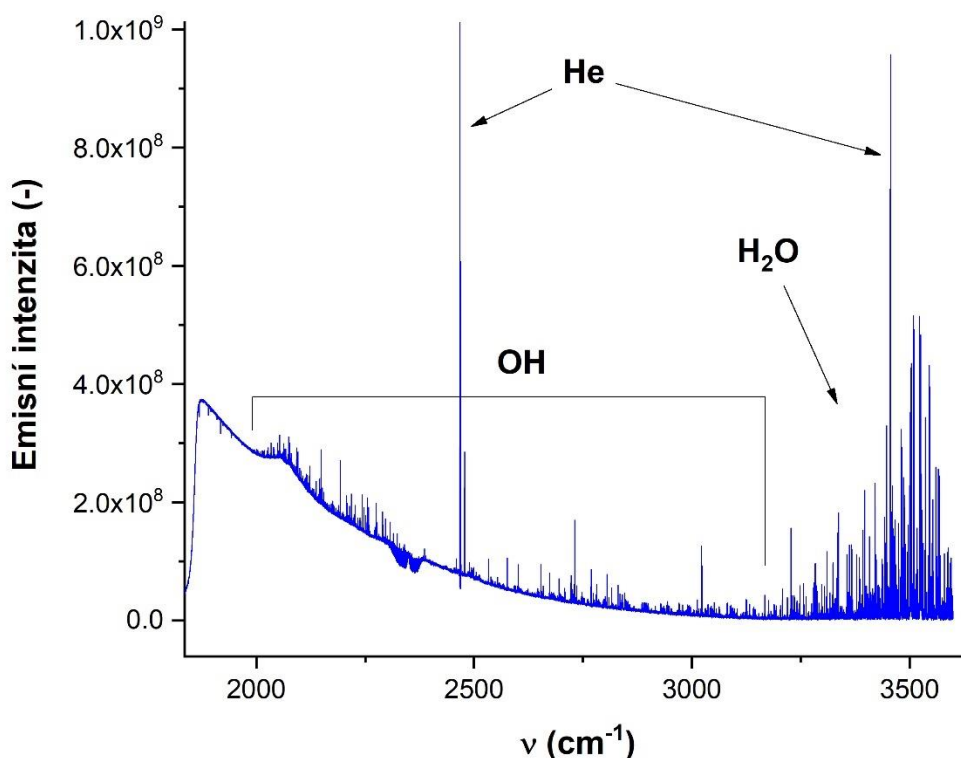
<i>n</i>	<i>p</i> (Torr)			<i>I</i> (-)
	He	H <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	
1	1,1	0,1	0,4	3900000
2	1,0	0,2	0,2	4500000
3	1,0	0,3	0,2	5000000
4	1,0	0,4	0,2	5200000
5	1,0	0,5	0,2	6000000
6	1,0	0,6	0,2	6500000
7	1,0	1,0	0,2	6400000
8	1,0	1,5	0,2	5200000
9	1,0	0,6	0,4	7600000
10	1,0	0,6	0,6	8400000
11	1,0	0,6	0,8	8450000
12	1,0	0,6	1,2	9100000
13	1,0	1,2	1,2	9700000

V tabulce *n* označuje číslo měření, *p* je tlak v Torrech a *I* je intenzita dané linie ( $3509,6 \text{ cm}^{-1}$ ). Měření popsaná v Tabulce 4 byla vždy zkoumána pro spektra v čase  $40 \mu\text{s}$  při rozlišení  $0,05 \text{ cm}^{-1}$  a pro 5 scanů. Pro další experimenty byla vybrána kombinace parciálních tlaků  $p(\text{He}) = 1 \text{ Torr}$ ,  $p(\text{H}_2) = 0,6 \text{ Torr}$  a  $p(\text{O}_2) = 0,6 \text{ Torr}$ . Tato tlaková kombinace sice nevykazovala absolutně nejvyšší emisní intenzitu zkoumané linie OH radikálu, nicméně intenzita byla již dostačující a nedocházelo k tlakovému rozšíření linií, které bylo jinak pozorováno u vyšších parciálních tlaků vodíku a kyslíku.

Samotná měření OH radikálu byla realizována při elektrickém napětí  $1,4 \text{ kV}$  a elektrickém proudu  $100\text{-}150 \text{ mA}$ . Byly použity oba detektory, tedy jak MCT, tak InSb s odpovídající optikou pro celý systém (jako v případě měření CO). Spektrometr byl evakuován na tlak

$10^{-3}$  mbar a spektrální rozlišení činilo  $0,02\text{ cm}^{-1}$  nebo  $0,05\text{ cm}^{-1}$ . Vstupní apertura spektrometru byla v případě měření s InSb detektorem nastavena na šířku 2 mm a pro MCT pak na 4 mm. Délka výbojového pulsu činila  $22\text{ }\mu\text{s}$ , offset byl nastaven na  $0\text{ }\mu\text{s}$  a akvizice dat probíhala každou 2.  $\mu\text{s}$ . Jelikož počet akvizičních dat byl 30, bylo měření pokryto celkem  $60\text{ }\mu\text{s}$ . Počet scanů se pro jednotlivá měření měnil, a to v rozsahu od 100 až do 1000. Kvalitní spektrum OH radikálu bylo dosaženo užitím interferenčních filtrů pro spektrální rozsah  $400\text{-}1000\text{ cm}^{-1}$  a  $1800\text{-}3500\text{ cm}^{-1}$ .

Rotačně-vibrační spektrum OH radikálu v základním elektronickém stavu  $X^2\Pi$  pro spektrální rozsah  $1800\text{-}3500\text{ cm}^{-1}$  je zachyceno na Obrázku 21.

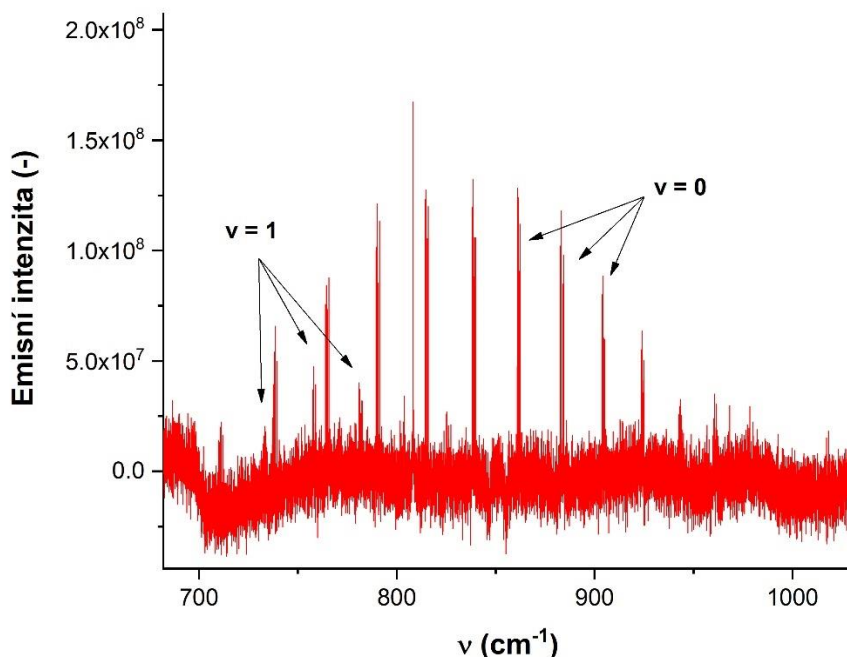


Obrázek 21: Průměrové spektrum měření OH radikálu v oblasti  $1800\text{-}3500\text{ cm}^{-1}$

Spektrum na Obrázku 21 obsahuje silné atomární emisní linie helia a také molekulární pásy vody, které mají sice maximum kolem  $3500\text{ cm}^{-1}$ , nicméně zasahují až do oblasti kolem  $2500\text{ cm}^{-1}$ . Spektrum bylo pořízeno při rozlišení  $0,05\text{ cm}^{-1}$  a s akumulací 1000 scanů. Spektrum na Obrázku 21 bylo vytvořeno průměrováním časových spekter v intervalu  $20\text{-}32\text{ }\mu\text{s}$ , které

projevily nejintenzivnější linie OH radikálu. Optické materiály pro vedení svazku emisního záření do spektrometru a dále do detektoru zůstaly stejné jako v případě měření CO.

Průměrové spektrum OH radikálu v oblasti 400-1000  $\text{cm}^{-1}$  je uvedeno níže na Obrázku 22.



Obrázek 22: Rotační spektrum OH radikálu v oblasti 400-1000  $\text{cm}^{-1}$  v základním ( $v = 0$ ) a prvním ( $v = 1$ ) vibračně excitovaném stavu

Obrázek 22 zachycuje rotační spektrum OH v základním a prvním vibračně excitovaném stavu. Spektrum bylo pořízeno akumulací 300 scanů při spektrálním rozlišení 0,02  $\text{cm}^{-1}$ . Použité optické materiály byly vyrobeny z KBr a fokusační čočka pak ze ZnSe. Spektrum na Obrázku 22 bylo vytvořeno průměrováním spekter v časech 16-28  $\mu\text{s}$  pro dosažení nejlepšího poměru signál-šum.

Tabulka 5 v příloze popisuje všechny emisní rotačně-vibrační linie OH radikálu pro spektrální rozsah 1800-3500  $\text{cm}^{-1}$ , jež byly přiřazeny pomocí dat z databáze HITRAN, obsahující teoretické predikce pozic jednotlivých linií pro širokou oblast infračerveného spektra. Všechny linie v tabulce byly kalibrovány pomocí linií OH uvedených v databázi HITRAN. Linie v tabulce jsou seřazeny dle vzrůstajícího vlnočtu.

V Tabulce 5  $v_{\text{exp}}$  značí experimentální vlnočet,  $v_{\text{the}}$  vlnočet získaný z databáze HITRAN, GUQ je tzv. globální kvantum pro vyšší energetickou hladinu (popisuje štěpení hladiny, viz níže), GLQ je globální kvantum pro nižší energetickou hladinu,  $v$  je vibrační kvantové číslo a  $J$  je rotační kvantové číslo. Znaménková konvence apostrofů zůstala zachována.

Jak je vidět v Tabulce 5, získaná data o emisních liniích OH ukazují, že se jedná o přechody typu X-X, tedy rotačně-vibrační přechody v základním energetickém stavu  $X^2\Pi$ . Jak je možné si rovněž všimnout, linie OH radikálu vykazují štěpení základní energetické hladiny vlivem spin-orbitální interakce, která může orientovat spinový moment hybnosti OH paralelně či anti-paralelně. OH tedy v základní energetické hladině může existovat ve stavu  $X_{1/2}$  či  $X_{3/2}$ . Dále je možno okrajově zmínit, že OH radikál ve stavu  $X_{3/2}$  podléhá tzv.  $\Lambda$ -doublingu (interakce celkového momentu hybnosti se spinem elektronu).

Tabulka 6 v příloze obsahuje všechny změřené rotační linie OH radikálu v oblasti 700-1000  $\text{cm}^{-1}$ . Formátování dat v tabulce je stejné jako v případě Tabulky 5.

Tabulka 6 zobrazuje čistě rotační emisní přechody, tedy zde nedochází ke změně vibračního kvantového čísla ( $\Delta v = 0$ ). U těchto čistě rotačních přechodů platí, že linie OH se sdružují do kvadrupletů s jasně definovanou rotační konstantou, která určuje vzájemné vzdálenosti kvadrupletů ve spektru. Navíc jako obvykle platí, že s rostoucím vlnočtem roste rotační kvantové číslo, a s rostoucím vibračním kvantovým číslem klesá celková emisní intenzita linií, jak je možné vidět na Obrázku 23. Data v Tabulce 6 byla sice změřena s interferenčním filtrem o rozsahu 400-1000  $\text{cm}^{-1}$ , nicméně MCT detektor, užitý při měření v této spektrální oblasti, ztrácí pod cca 700  $\text{cm}^{-1}$  citlivost a dále již není schopen měření. V oblasti kolem 1000  $\text{cm}^{-1}$  zase měření nad touto hranicí komplikují relativně vysoká rotační kvantová čísla, která vyžadují horký zdroj záření (např. je snadné je detekovat v solárních spektrech díky vysokým slunečním teplotám).

Tabulka 6 zachycuje první laboratorní experimentálně získané čistě rotační přechody OH radikálu v oblasti 700-1000  $\text{cm}^{-1}$ . Je však nutno zmínit, že tato data pro OH radikál jsou již známa a publikována na základě solárních spekter získaných z projektů ATMOS a ACE.

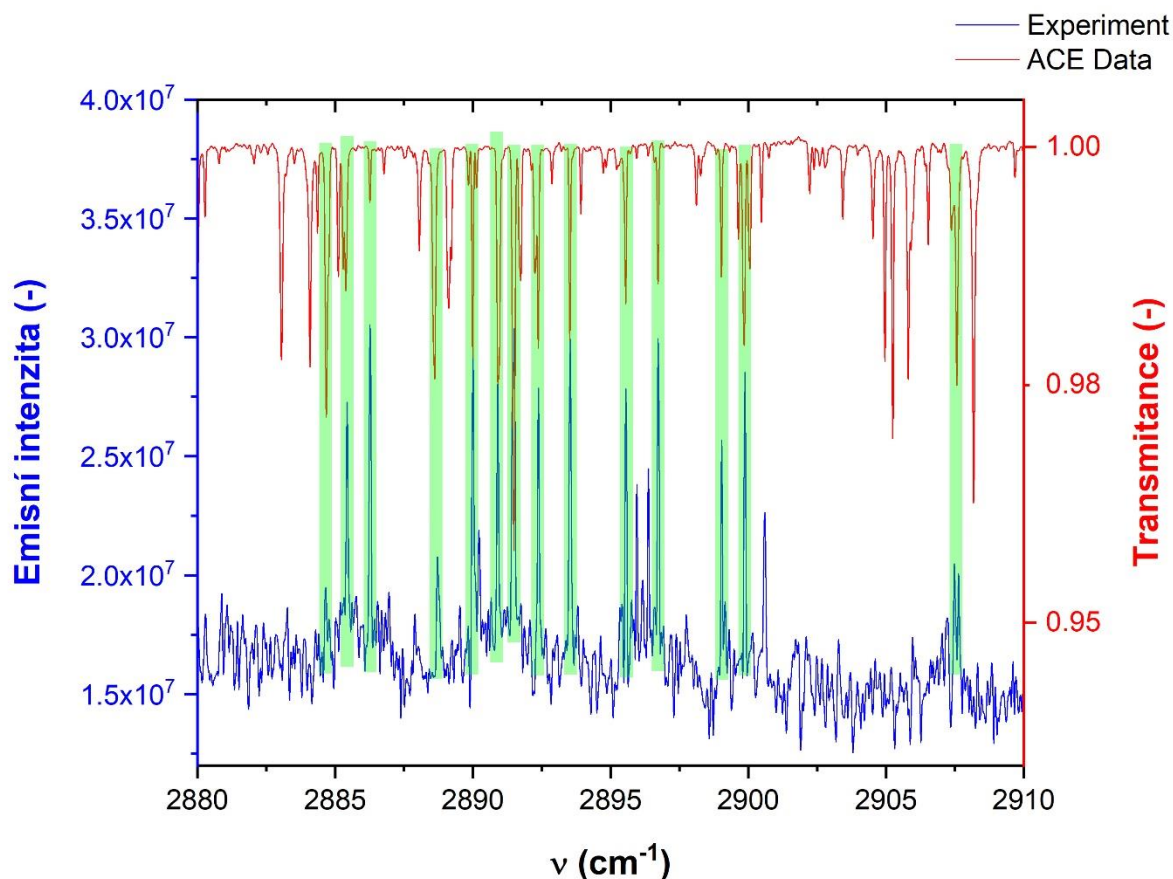
### **Srovnání se solárními spektry**

Experimentální data pro OH radikál byla srovnána se solárními spektry, získanými z mise ACE (Atmospheric Chemistry Experiment), která byla spuštěna v roce 2003. Spektrometry ACE byly umístěny na palubě kanadského satelitu SCISAT a mise přinesla výsledky



v podobě emisních spekter Slunce a absorpčních spekter molekul v zemské atmosféře, které byly užity pro studium poklesu koncentrace stratosférického ozonu.

Obrázek 23 popisuje srovnání experimentálních dat OH radikálu se solárními spektry z ACE v oblasti 2880-2910  $\text{cm}^{-1}$ .

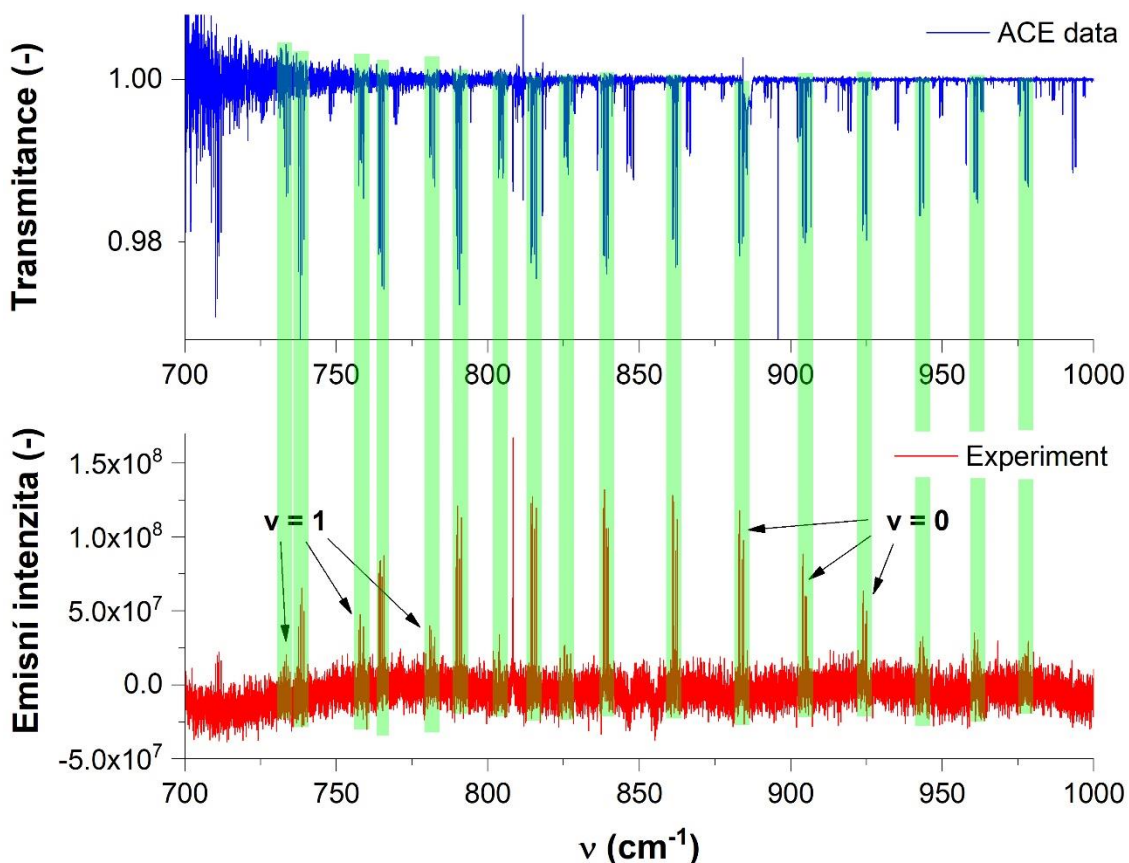


Obrázek 23: Srovnání laboratorně změřeného rotačně-vibračního spektra OH se solárním spektrem z mise ACE

Zeleně zvýrazněné oblasti spektra v Obrázku 23 označují koincidence obou spekter. Jak je možné si dále všimnout, distribuce emisních intenzit (nebo transmittancí v případě ACE) se v obou spektrech liší, což je dáno rozdílnou teplotou energetického zdroje.

Obrázek 24 ukazuje srovnání solárních spekter a experimentálních dat pro OH radikál v oblasti 700-1000  $\text{cm}^{-1}$ , tedy čistě rotační přechody OH radikálu.



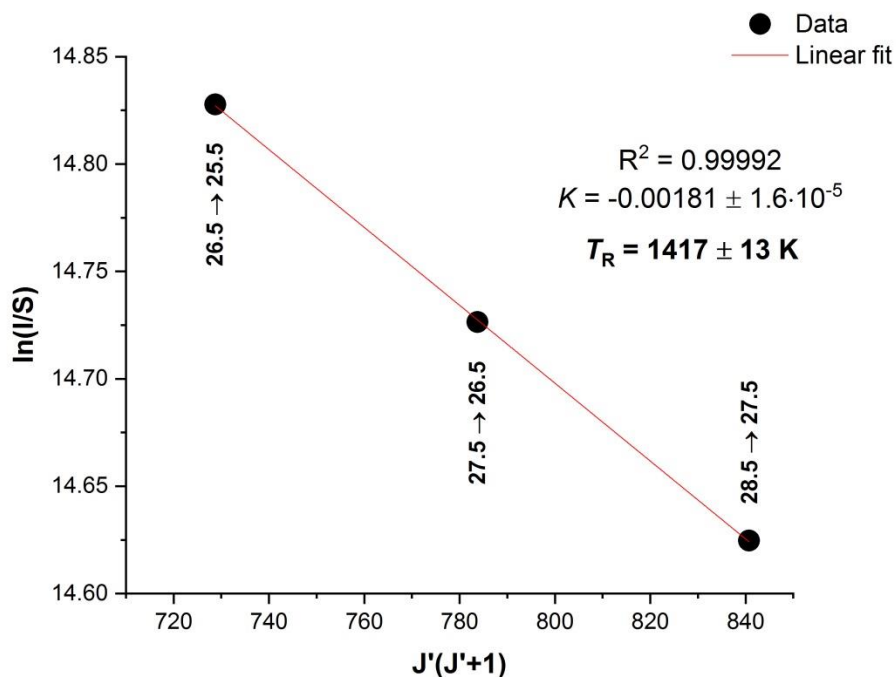


Obrázek 24: Srovnání experimentálního spektra OH a ACE spektra pro 700-1000  $\text{cm}^{-1}$

Zeleně zvýrazněné oblasti v Obrázku 24 označují shodu obou spekter. Je možné vidět, že solární spektra vykazují excitaci do vyšších rotačních stavů, a proto jsou zde přítomny rotační přechody OH i nad 1000  $\text{cm}^{-1}$ , zatímco u našich laboratorních dat již chybí. Intenzita jednotlivých linií se v obou spektrech liší díky rozdílným teplotám v plazmatu.

#### Srovnání rotačních teplot výbojového plazmatu se solárními daty

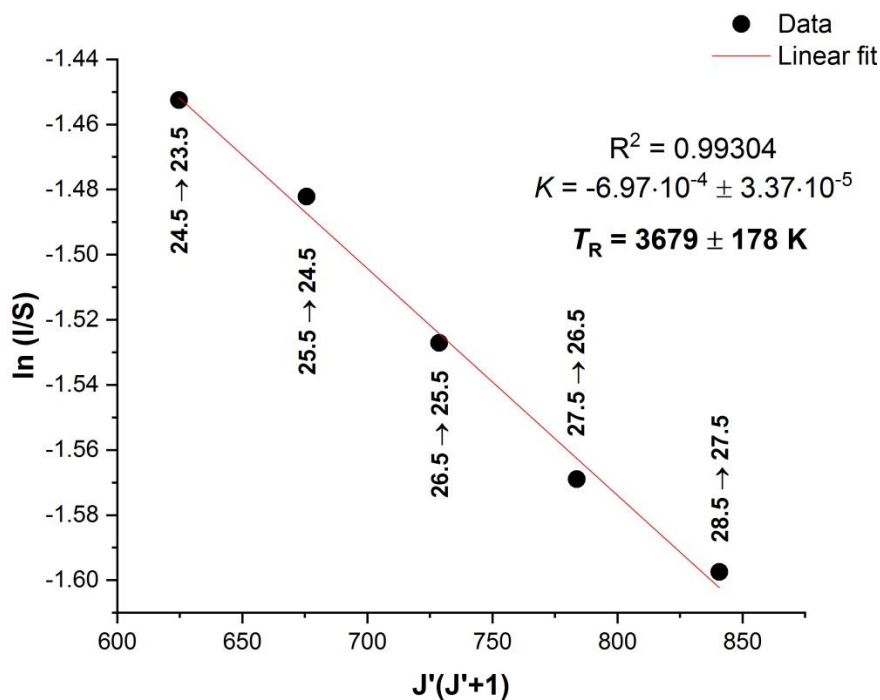
Obrázek 25 popisuje stanovení rotační teploty výbojového plazmatu pomocí OH linií v experimentální výbojové směsi ( $\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{He}$ ).



Obrázek 25: Stanovení rotační teploty výbojového plazmatu pomocí OH pro základní vibrační stav  $v = 0$

Obrázek 25 popisuje stanovení rotační teploty výbojového plazmatu pomocí čistě rotačních linií OH radikálu, specificky o vlnočtech  $838,480 \text{ cm}^{-1}$ ,  $861,298 \text{ cm}^{-1}$  a  $883,157 \text{ cm}^{-1}$ . Na obrázku je u každého bodu popsána změna rotačního kvantového čísla. Dle vztahu (6) a Obrázku 25 byla rotační teplota stanovena na  $T_R = 1417 \pm 13 \text{ K}$ . Hodnota spolehlivosti lineární regrese činila  $R^2 = 0,99992$  a směrnice byla  $K = -0,00181 \pm 1,6 \cdot 10^{-5}$ .

Na Obrázku 26 je zobrazeno stanovení rotační teploty plazmatu odvozené z čistě rotačních linií OH ze solárních spekter ACE.



Obrázek 26: Stanovení rotační teploty solárního plazmatu pomocí OH pro základní vibrační stav  $v = 0$

Obrázek 26 ukazuje stanovení rotační teploty plazmatu pomocí čistě rotačních přechodů OH radikálu převzatých ze solárních spekter ACE. Stejně jako v předchozím případě se jedná o rotační přechody v základním vibračním stavu. K určení teploty byla použita rovnice (6) a ta byla stanovena na  $T_R = 3679 \pm 178$  K. Hodnota spolehlivosti lineární regrese činila  $R^2 = 0,99304$  a směrnice regrese byla  $K = -6,97 \cdot 10^{-4} \pm 3,37 \cdot 10^{-5}$ . Jak lze vidět při porovnání Obrázku 25 a 26, solární data vykazují téměř dvakrát vyšší rotační teplotu plazmatu, což je ve shodě s pozorováním. Pro výpočet rotační teploty laboratorního OH spektra byly použity pouze tři rotační přechody, zbylé dva v nižší vlnočtové oblasti ( $791,281 \text{ cm}^{-1}$  a  $815,948 \text{ cm}^{-1}$ ) byly z výpočtu vyřazeny z důvodu nelineárního poklesu citlivosti použitého detektoru (HgCdTe).

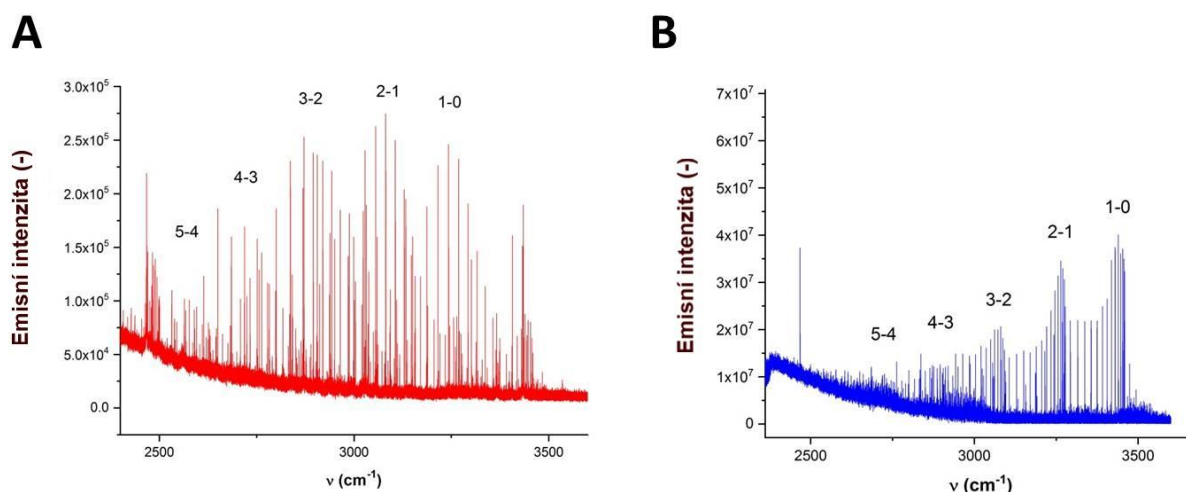
## NH radikál

### Analýza spekter

NH radikál byl spektrálně zkoumán ve dvou různých výbojových systémech. První systém, který se hojně užíval v minulosti, sestával ze směsi dusíku a vodíku v heliu jako nosném

plynu. Novější měření byla realizována se směsí dusíku a amoniaku v argonu. Tlaky plynů v první zkoumané směsi činily 1 Torr pro každou složku, u druhé směsi pak tlaky činily 0,5 Torr argonu, 0,8 Torr dusíku a 0,1 Torr amoniaku. Elektrické napětí mezi elektrodami výbojové cely se pohybovalo v rozmezí 1-1,4 kV a elektrický proud pak činil 150-300 mA. Měření bylo realizováno s oběma detektory (InSb, MCT) a odpovídajícím optickým nastavením. Šířka vstupní apertury spektrometru činila 2 mm. Spektrální rozlišení činilo  $0,02 \text{ cm}^{-1}$ . Délka výbojového pulsu se pohybovala v rozmezí 22-30  $\mu\text{s}$ , offset byl nastaven na 0  $\mu\text{s}$  a akvizice probíhala po 2-3  $\mu\text{s}$ . V závislosti na akvizičním režimu dat tedy byla pokryta oblast o časovém rozsahu 60 až 90  $\mu\text{s}$ .

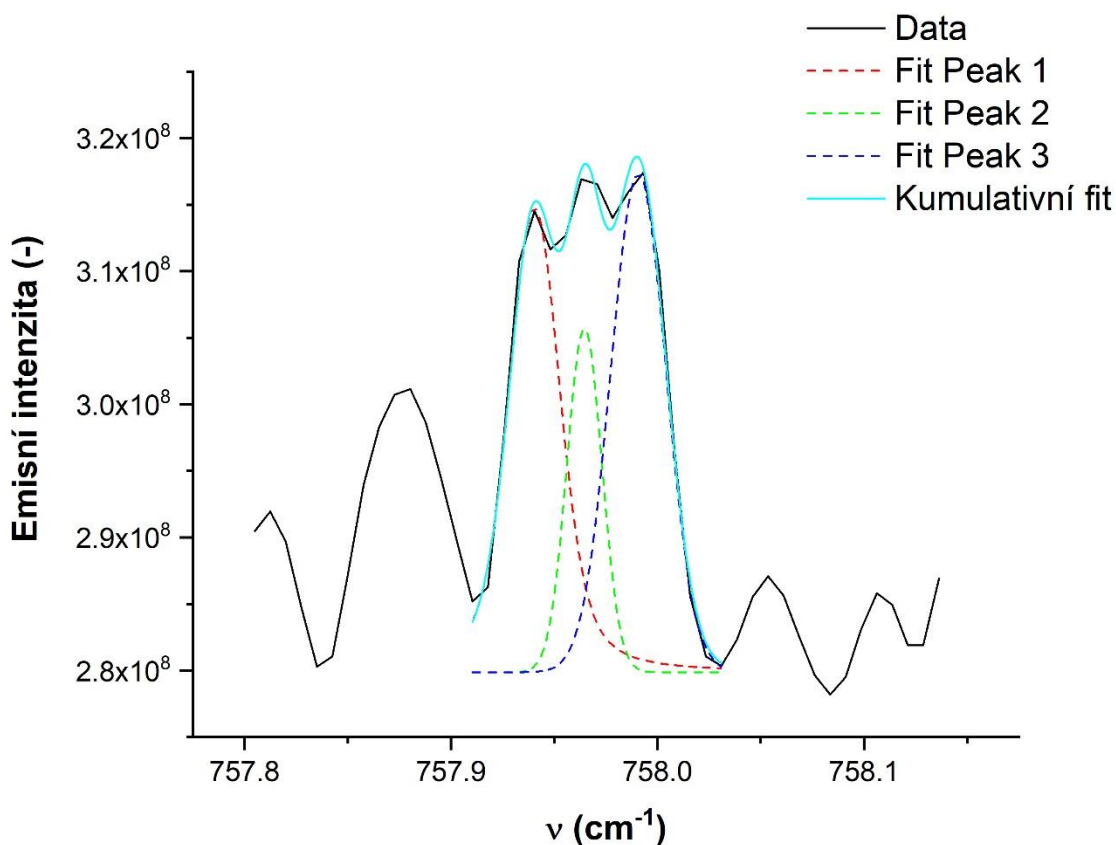
Obrázek 27 zobrazuje získané rotačně-vibrační spektrum NH radikálu ve výboji provedeném v obou směsích.



Obrázek 27: panel A – spektrum doutnavého výboje ve směsi  $\text{H}_2 + \text{N}_2 + \text{He}$   
panel B – spektrum doutnavého výboje ve směsi  $\text{N}_2 + \text{NH}_3 + \text{Ar}$

Spektrum na panelu A bylo vytvořeno průměrováním časově rozlišených spekter v intervalu 44-50  $\mu\text{s}$ , jež vykazala nejintenzivnější linie NH radikálu. Akumulace u tohoto spektra byla 50 scanů. Spektrum na panelu B pak vzniklo průměrováním spekter NH radikálu pro všechny časy, přičemž akumulace zde byla nastavena na 100 scanů. Obě spektra se dramaticky liší ve svém tvaru, a tedy intenzitní distribuci. Obě spektra popisují přechody NH radikálu v základním stavu  $X^3\Sigma^-$ , a to pro  $\Delta v = 1$  od přechodů  $1 \rightarrow 0$  až do  $5 \rightarrow 4$ . Jedná se tedy, stejně jako v případě OH radikálu pro stejnou spektrální oblast, o rotačně-vibrační přechody.

Pro směs typu  $N_2 + NH_3 + Ar$  se povedlo změřit také několik čistě rotačních přechodů NH radikálu ( $\Delta v = 0$ ). Emisní linie NH radikálu v této spektrální oblasti,  $700-1000\text{ cm}^{-1}$ , jsou částečně rozlišitelné a vykazují strukturu jednotlivých čar porušenou celou řadou efektů způsobených interakcí elektronu s celkovým momentem hybnosti. Část rotačního spektra v oblasti kolem  $757\text{ cm}^{-1}$  je zobrazena na Obrázku 28.



Obrázek 28: Dekonvoluce tripletu NH radikálu ( $J'' = 26, v = 0$ )

Obrázek 28 popisuje dekonvoluci tripletu NH radikálu s rotačním kvantovým číslem  $J'' = 26$  a vibračním kvantovým číslem  $v = 0$ . Dekonvoluce je v tomto případě nutná, neboť jednotlivé linie tripletů jsou velmi blízko u sebe a užitá spektrální rozlišení  $0,02\text{ cm}^{-1}$  nestačí na jejich plnou separaci. Zvýšení rozlišení na  $0,01$  či dokonce  $0,005\text{ cm}^{-1}$  nepřineslo žádné zlepšení. I přes tyto komplikace se však podařilo změřit celkem 4 rotační triplety NH radikálu, jejichž pozice je detailněji specifikována v Tabulce 7.

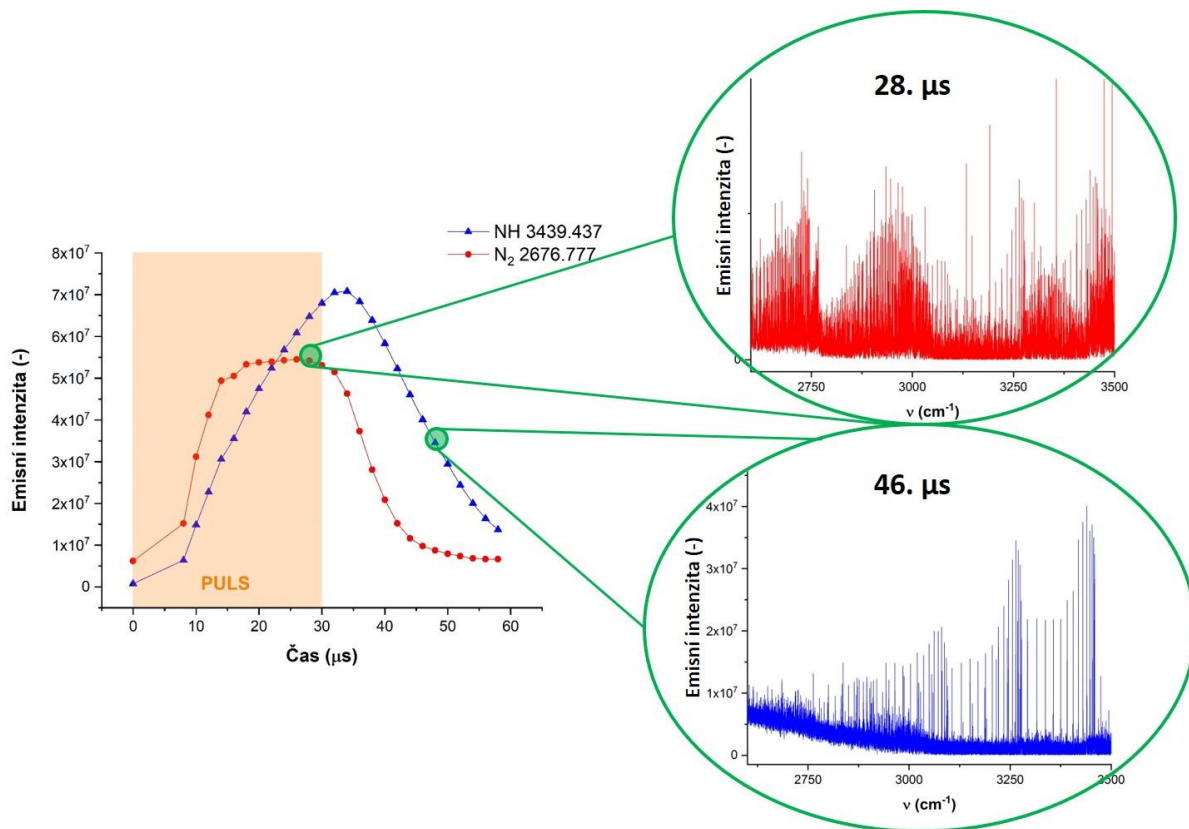
Tabulka 7: Experimentální pozice čistě rotačních přechodů NH radikálu ( $\text{v cm}^{-1}$ )

<b>J''</b>	<b>Experiment</b>	<b>Solární data*</b>
<b>26</b>	757,940	757,936
	757,966	757,964
	757,993	757,992
<b>27</b>	776,966	776,966
	776,990	776,986
	777,014	777,009
<b>28</b>	795,104	795,099
	795,125	795,122
	795,146	795,143
<b>29</b>	812,301	812,310
	812,329	812,332
	812,355	812,360

Jak je možné vidět v Tabulce 7, změřeny byly triplety NH s  $J''$  od 26 do 29, což odpovídá zvolené spektrální oblasti  $700\text{-}1000\text{ cm}^{-1}$ . \*Solární data, uvedená v Tabulce 7 byla převzata z vesmírné mise ATMOS (Atmospheric Trace Molecule Spectroscopy), která byla realizována v časovém rozmezí od 29. 4. do 2. 5. 1985. Data z tohoto satelitu byla extenzivně popsána v práci Farmera a Nortona (1989)<sup>214</sup> a Gellera *et al.* (1991).<sup>215</sup>

### Časové profily

Ve výbojové směsi  $\text{N}_2 + \text{NH}_3 + \text{Ar}$  je možné pozorovat časově závislou distribuci emisních intenzit mezi molekulárním dusíkem a NH radikálem. Tuto časovou závislost zobrazuje Obrázek 29.

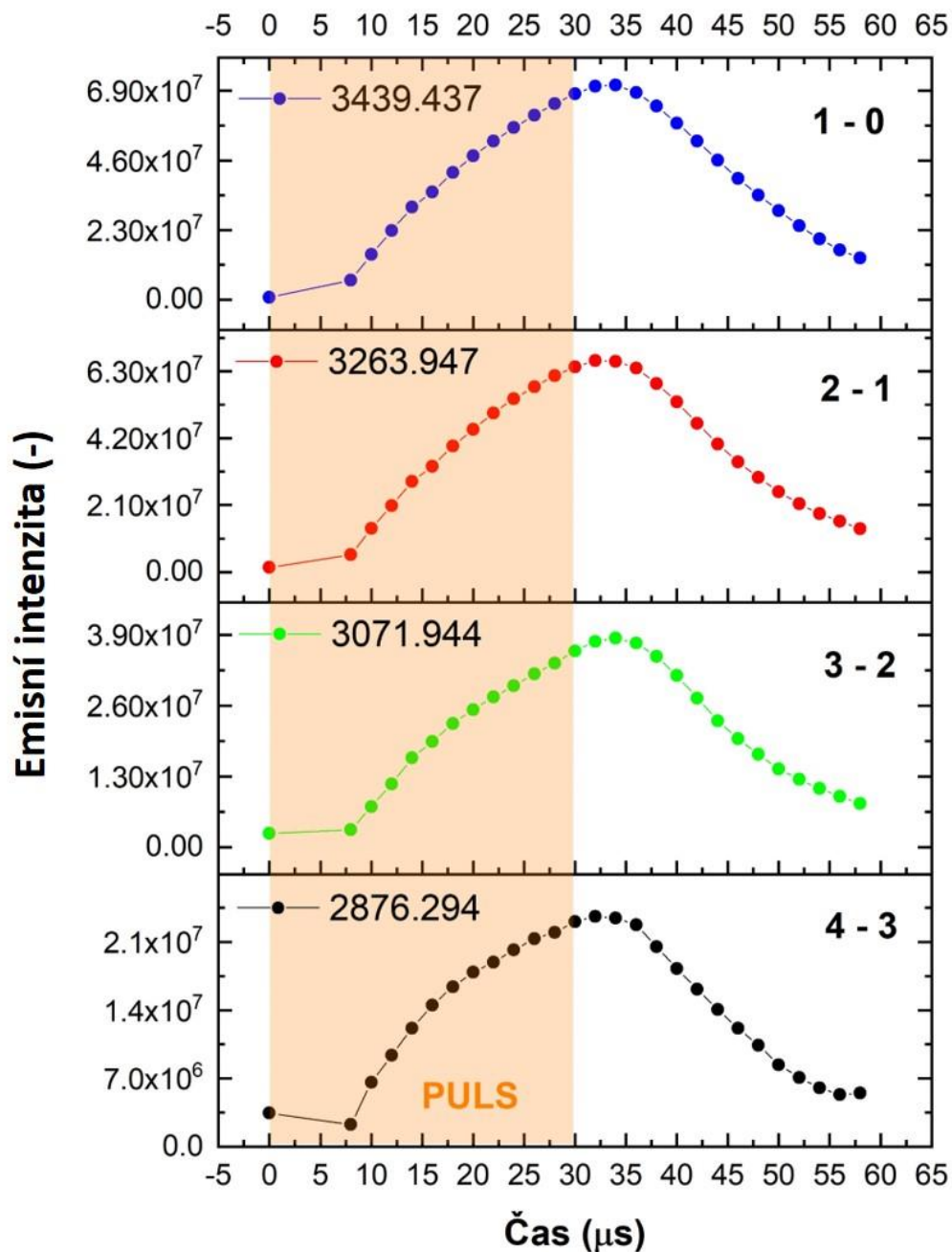


Obrázek 29: Časové profily NH radikálu a dusíku a tvar spektra ve vybraných časech

Obrázek 29 ukazuje časové křivky dusíku (přechod  $B^3\Sigma_u^- \rightarrow B^3\Pi_g$ ,  $v = 4 \rightarrow 6$ ) a NH radikálu (pás  $1 \rightarrow 0$ ). Dle těchto křivek v levé části obrázku lze vidět, že obě částice ve výbojové části (zde výboj o délce trvání  $30 \mu\text{s}$ ) získávají energii a jejich emisní intenzita tedy s časem roste. Relaxace molekulárního dusíku probíhá rychleji než v případě NH radikálu. Tento jev je možné vysvětlit vzájemnou výměnou energie mezi excitovaným dusíkem a NH radikálem. Podíváme-li se na spektrum v čase  $28 \mu\text{s}$  (tedy  $2 \mu\text{s}$  před skončením výbojového pulsu), uvidíme ve spektru pouze množství dusíkových páسů, které zcela překryjí spektrum NH radikálu, jenž tedy není možné pozorovat (viz červené spektrum na Obrázku 29 vpravo nahoře). Analýzou časových profilů obou částic je však možné zjistit, že v pozdějších pozorovacích časech, např.  $46 \mu\text{s}$  měření, již molekulární dusík ve spektru prakticky neexistuje a spektrum NH radikálu tedy může být pozorováno bez překryvu s dalším spektrem ( $\text{N}_2$ ) (viz modré spektrum na Obrázku 29 vpravo dole). V tomto případě časové rozlišení a detekce spekter v různých časových intervalech umožňují separaci dvou silných nezávislých spekter a jasně ukazují na jedinečnost této metody.

Na Obrázku 30 je možné vidět srovnání časových profilů jedné vybrané emisní linie NH pro různé vibrační přechody typu  $\Delta v = 1$  (pro různé tzv. horké pásy, „hotbands“).



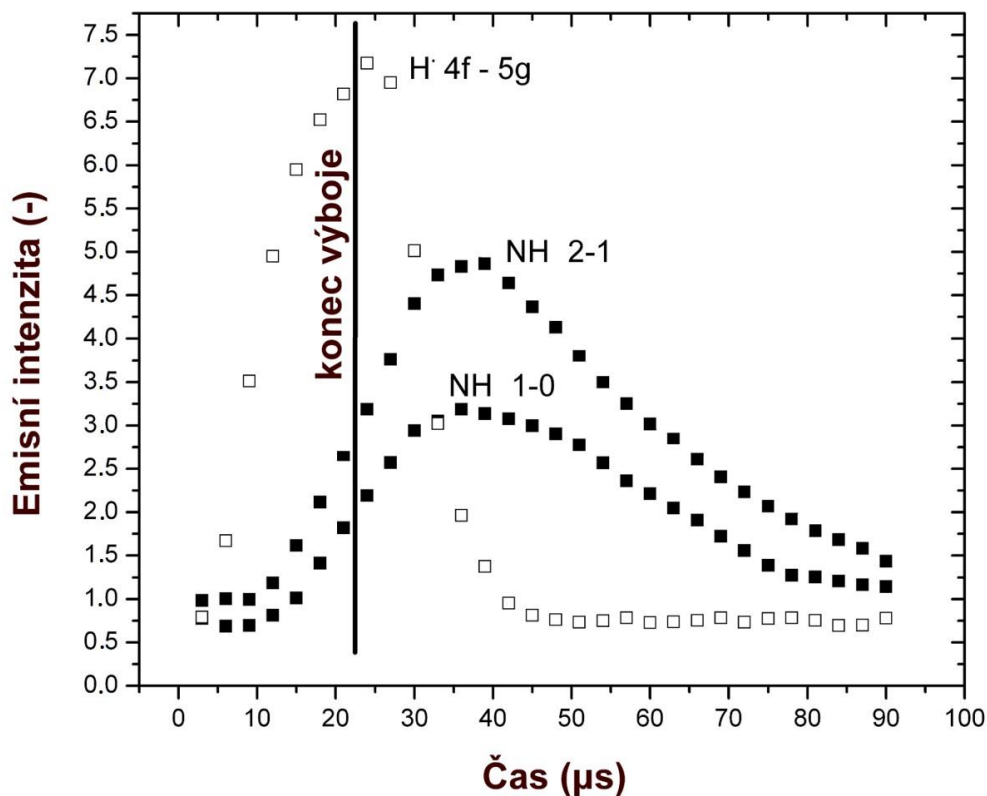


Obrázek 30: Časové profily vybraných linií NH pro specifikované horké pásy

Jak lze vidět na Obrázku 30, časové profily se pro jednotlivé typy přechodů  $\Delta v = 1$  téměř neliší.

I pro výbojovou směs typu  $H_2 + N_2 + He$  byly zkoumány časové profily přítomných částic. Obrázek 31 popisuje časové křivky vybraných linií NH radikálu a porovnává profily s časovým průběhem linie atomárního vodíku.





Obrázek 31: Časové profily vybraných linií NH radikálu a atomárního vodíku ve výbojové směsi  $\text{H}_2 + \text{N}_2 + \text{He}$

Na Obrázku 31 jsou zobrazeny časové profily pro linii atomárního vodíku 4f – 5g, vlnočet  $2467,75 \text{ cm}^{-1}$ , pro přechod NH 1  $\rightarrow$  0 o vlnočtu  $3242,96 \text{ cm}^{-1}$  a pro přechod NH 2  $\rightarrow$  1 o vlnočtu  $3081,46 \text{ cm}^{-1}$ . Výbojový puls měl v tomto případě šířku  $22 \mu\text{s}$  a akvizice dat probíhala každou třetí mikrosekundu, proto má měřicí okno délku  $90 \mu\text{s}$ . Stejně jako v předchozím případě, i zde linie NH radikálu i vodíku nabývají intenzity po dobu trvání výbojového pulsu. Maxima intenzit linií NH je možné pozorovat kolem  $39 \mu\text{s}$  a po tomto čase intenzita NH radikálu pro libovolný přechod typu  $\Delta v = 1$  klesá. V čase  $45 \mu\text{s}$  již ve spektru nejsou přítomny žádné atomární linie a kvůli delší době života je přítomen pouze NH radikál. Pro vybrané emisní linie NH radikálu byly ze spekter vypočítány doby života, které jsou uvedeny v Tabulce 8.

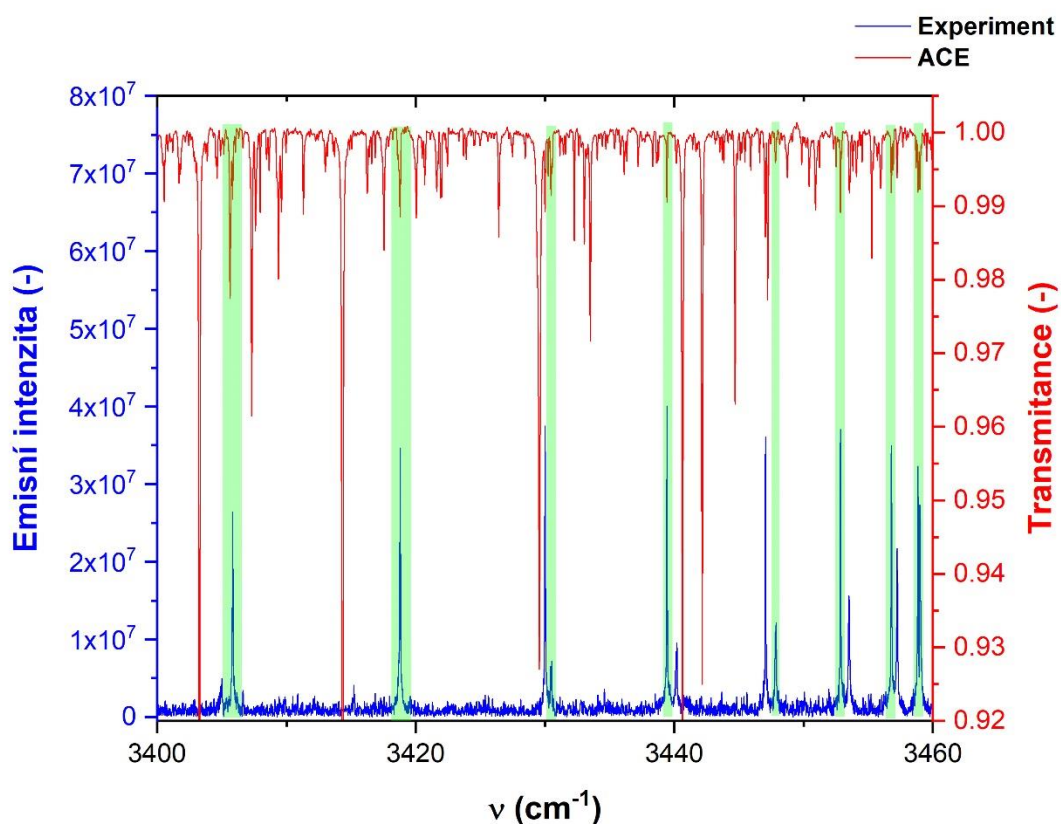
Tabulka 8: Klasifikace a doba života vybraných emisních linií NH radikálu

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	$\nu' - \nu''$	$N', J'$	$N'', J''$	$t$ (μs)
2778,19	4-3 (R)	5, 6	4, 5	30,8 ± 4,2
2532,12	4-3 (P)	4, 3	5, 4	25,9 ± 4,5
2919,73	3-2 (R)	4, 4	3, 3	35,9 ± 2,9
2685,03	3-2 (P)	3, 4	4, 5	37,0 ± 4,6
3081,46	2-1 (R)	4, 5	3, 4	40,6 ± 2,9
2871,51	2-1 (P)	2, 3	3, 4	45,9 ± 4,4

V Tabulce 8 existuje slabá korelace mezi dobou života ( $t$ ) jednotlivých přechodů a vibračním kvantovým číslem. Lze prohlásit, že se snižujícím se vibračním číslem doba života daného přechodu roste, jinými slovy, s rostoucí excitací se doba života daného přechodu zmenšuje. Nejdéle žijí částice v základním vibračním stavu, což je ve shodě s daty získanými při spektrální analýze vibrační relaxace CN radikálu v základním elektronickém stavu.<sup>153</sup>

### Srovnání se solárními spektry

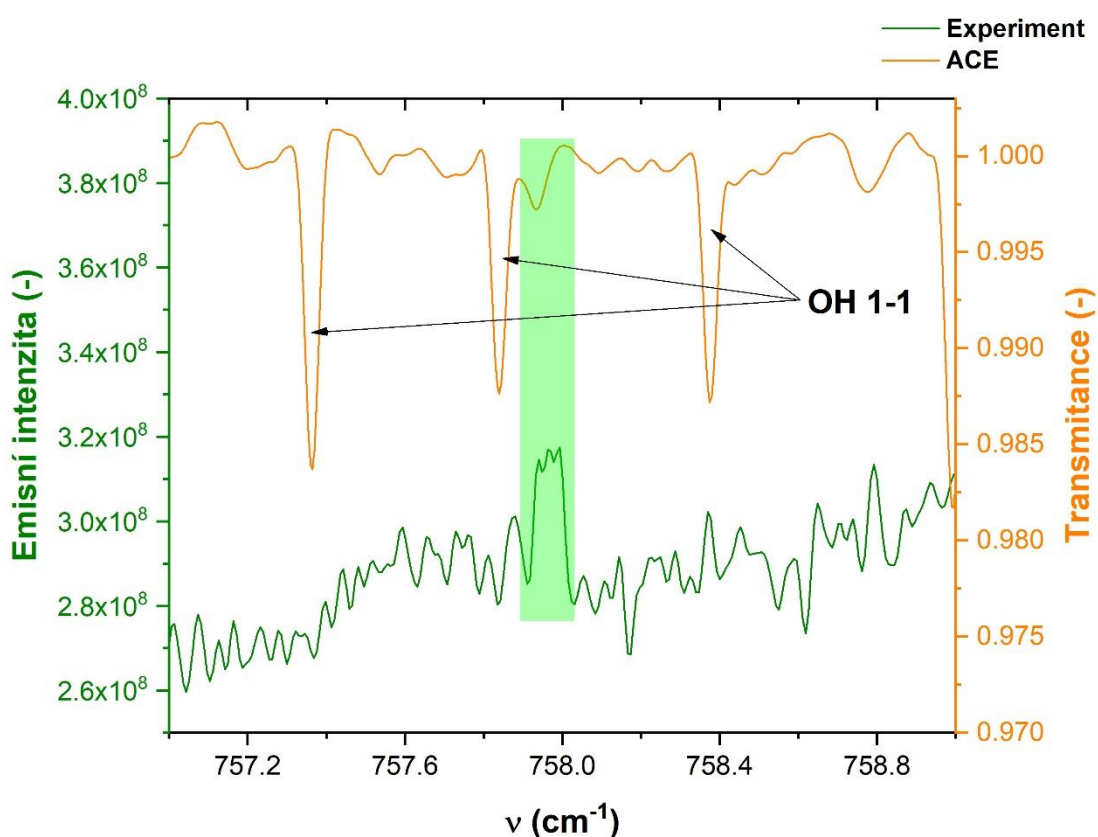
Srovnání experimentálních dat se solárními daty ze satelitu ACE lze vidět na Obrázku 32. Pro přehlednost byla vybrána oblast 3400-3460 cm<sup>-1</sup>.



Obrázek 32: Srovnání experimentálních dat NH (1-0) se solárním spektrem ACE

Linie NH radikálu lze nalézt v solárních spektrech, nicméně intenzita jednotlivých linií a jejich Boltzmannovské rozdělení je zcela odlišné od námi naměřených laboratorních spekter. I v tomto případě se jedná hlavně o vliv teploty plazmatu, v němž byly jednotlivé linie NH excitovány. Zatímco v experimentálních datech je intenzita linií obecně vyšší s nižším vibračním číslem a středně vysokým číslem rotačním, v solárních datech je intenzita posunuta k vyšším rotačním číslům díky mnohem vyšší teplotě.

Ve slunečních spektrech lze nalézt slabé emisní linie čistě rotačních přechodů NH. Srovnání těchto experimentálních přechodů se solárními spektry ukazuje Obrázek 33.



Obrázek 33: Srovnání čistě rotačních přechodů NH se solárními daty ACE

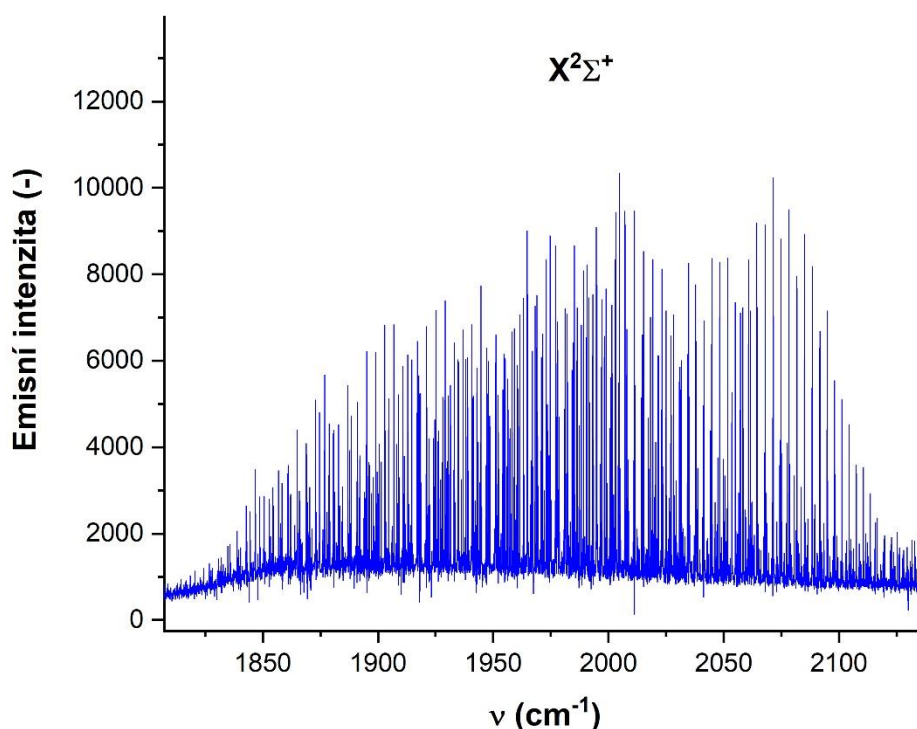
Porovnáním laboratorních dat se solárními daty ze satelitu ACE se ukázalo, že laboratorní rozlišení je vyšší a umožňuje částečnou separaci jednotlivých komponent rotačních přechodů (viz Obrázek 28 a Tabulka 7).

## CN radikál

### Analýza spekter

CN radikál byl zkoumán v doutnavém výboji dikyanu, jehož laboratorní příprava byla popsána na Obrázku 11 v experimentální části práce. Některé experimenty pro měření CN byly realizovány také s formamidovou směsí, popsanou v části věnované oxidu uhelnatému. Měření CN radikálu byla prováděna s InSb detektorem a optikou a děličem svazku z CaF<sub>2</sub>. Spektrální rozlišení se pohybovalo od 0,07 do 0,025 cm<sup>-1</sup>. Počet scanů se pro jednotlivá měření velmi lišil, ale fluktoval kolem hodnoty 30 nebo 50. Délka výbojového pulsu činila 20-40 μs, elektrické napětí činilo cca 0,8 kV a elektrický proud pak 50-100 mA. Při měřeních nebyl užit žádný offset akvizice dat. Akvizice dat probíhala každou 3. μs. Parciální tlak helia činil 3 Torr, tlak dikyanu pak 50 mTorr.

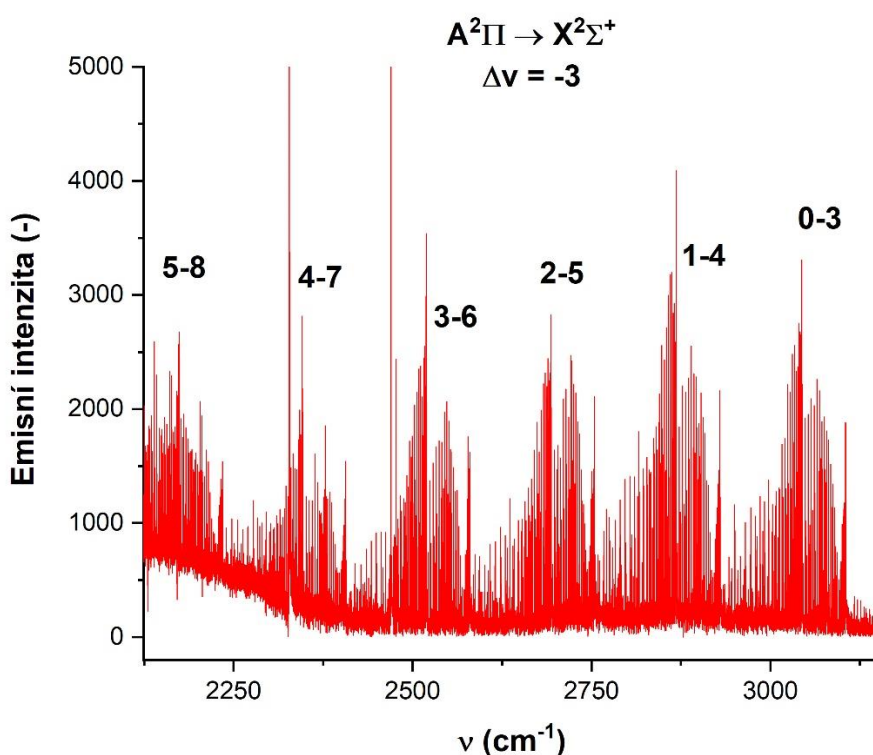
Na Obrázku 34 je zachyceno přehledové rotačně-vibrační spektrum CN radikálu v oblasti 1800-2200 cm<sup>-1</sup>.



Obrázek 34: Spektrum rotačně-vibračního fundamentálního pásu CN v základním stavu X<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup>

Obrázek 34 ukazuje spektrum CN radikálu v základním energetickém stavu  $X^2\Sigma^+$ , jedná se tedy o rotačně-vibrační přechody. Pro tyto přechody platí rozdíl vibračních kvantových čísel  $\Delta v = 1$ . Spektrum na Obrázku 34 bylo získáno při rozlišení  $0,027 \text{ cm}^{-1}$  a akumulaci 50 scanů. Elektrický proud činil 50 mA, napětí pak 0,7 kV. Ostatní podmínky byly srovnatelné s obecnými podmínkami všech CN experimentů popsanych na začátku této kapitoly. Obrázek 34 představuje spektrum v čase  $39 \mu\text{s}$  (při délce výboje  $20 \mu\text{s}$ ).

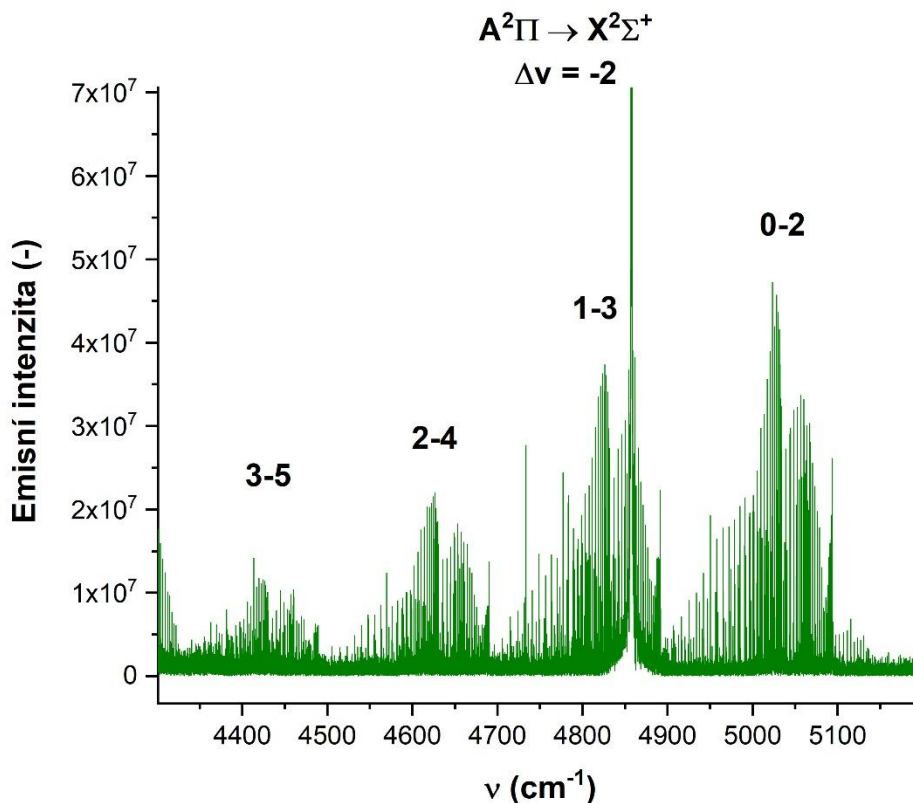
Přehledové spektrum CN radikálu ve spektrální oblasti  $2150\text{-}3250 \text{ cm}^{-1}$ , ve které se objevují elektronické přechody CN typu  $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ , je uvedeno na Obrázku 35.



Obrázek 35: Spektrum elektronických pásů CN pro sekvenci  $\Delta v = -3$  (čas  $39 \mu\text{s}$ )

V případě elektronických přechodů v této spektrální oblasti se jedná o elektronickou sekvenci  $\Delta v = -3$  v přechodech  $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ . Experimentálně bylo změřeno celkem 6 spektrálních pásů, a to od 0-3 přechodu až po 5-8. Spektra na Obrázku 35 a 34 byla pořizena za identických podmínek.

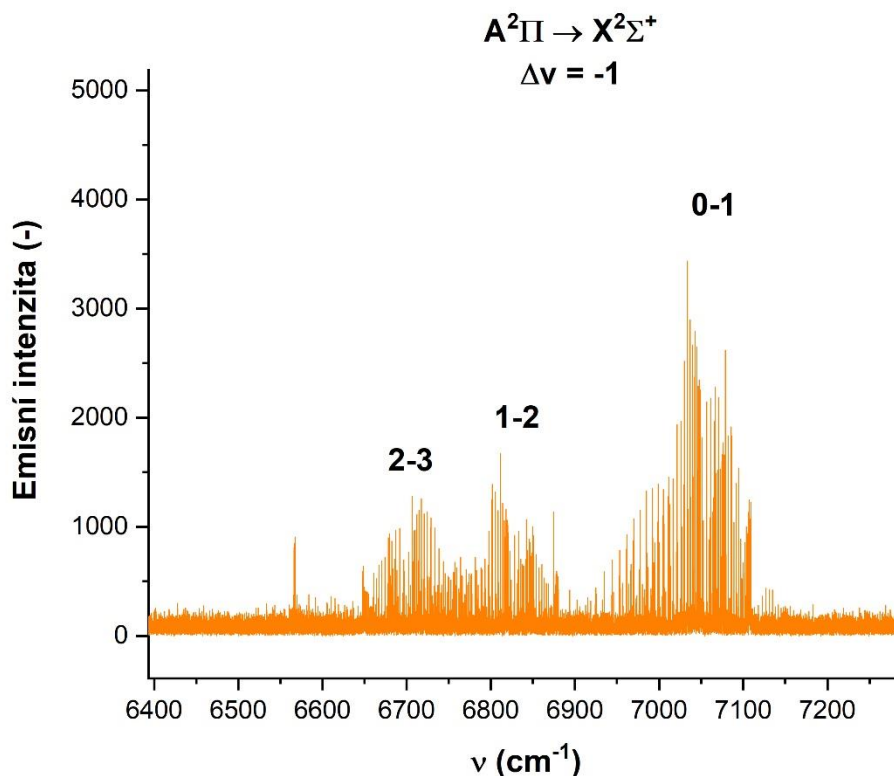
Níže na Obrázku 36 je možné vidět elektronické spektrum CN radikálu pro sekvenci  $\Delta v = -2$ , která se rozprostírá v spektrální oblasti  $4350\text{-}5150 \text{ cm}^{-1}$ .



Obrázek 36: Spektrum elektronických pásů CN pro sekvenci  $\Delta v = -2$  (čas 36  $\mu\text{s}$ )

V spektrální oblasti 4350-5150  $\text{cm}^{-1}$  byly naměřeny elektronické přechody typu  $\Delta v = -2$  (Obrázek 34). Jedná se o emisní spektrum formamidové směsi, pořízené v čase 36  $\mu\text{s}$ , 14  $\mu\text{s}$  po skončení výbojového pulsu. Spektrální rozlišení činilo 0,05  $\text{cm}^{-1}$  a akumulace byla 50 scanů. Délka pulsu byla nastavena na 22  $\mu\text{s}$  a 30 akvizčních bodů bylo pořízeno s intervalem 3  $\mu\text{s}$ . Elektrický proud mezi elektrodami výbojové cely činil 1,4 kV a proud byl 100 mA. Použit byl detektor InSb s odpovídající optikou.

Spektrum CN radikálu v oblasti 6400-7100  $\text{cm}^{-1}$  odpovídá sekvenci elektronických přechodů typu  $\Delta v = -1$ . Přehledové spektrum této elektronické sekvence ilustruje Obrázek 37.



Obrázek 37: Spektrum elektronických pásů CN pro sekvenci  $\Delta v = -1$  (čas 24  $\mu\text{s}$ )

Spektrum na Obrázku 37 bylo pořízeno ve výbojové směsi dikyanu a helia. Experimentální podmínky byly stejné jako v případě měření sekvence  $\Delta v = -3$ .

V tabulce 9 v příloze jsou sumarizovány všechny získané linie fundamentálního rotačně-vibračního pásu CN radikálu v základním stavu. Data v tabulce jsou uspořádány dle vzrůstajícího vibračního kvantového čísla a pak dle rostoucího vlnočtu v rámci každého vibračního přechodu.

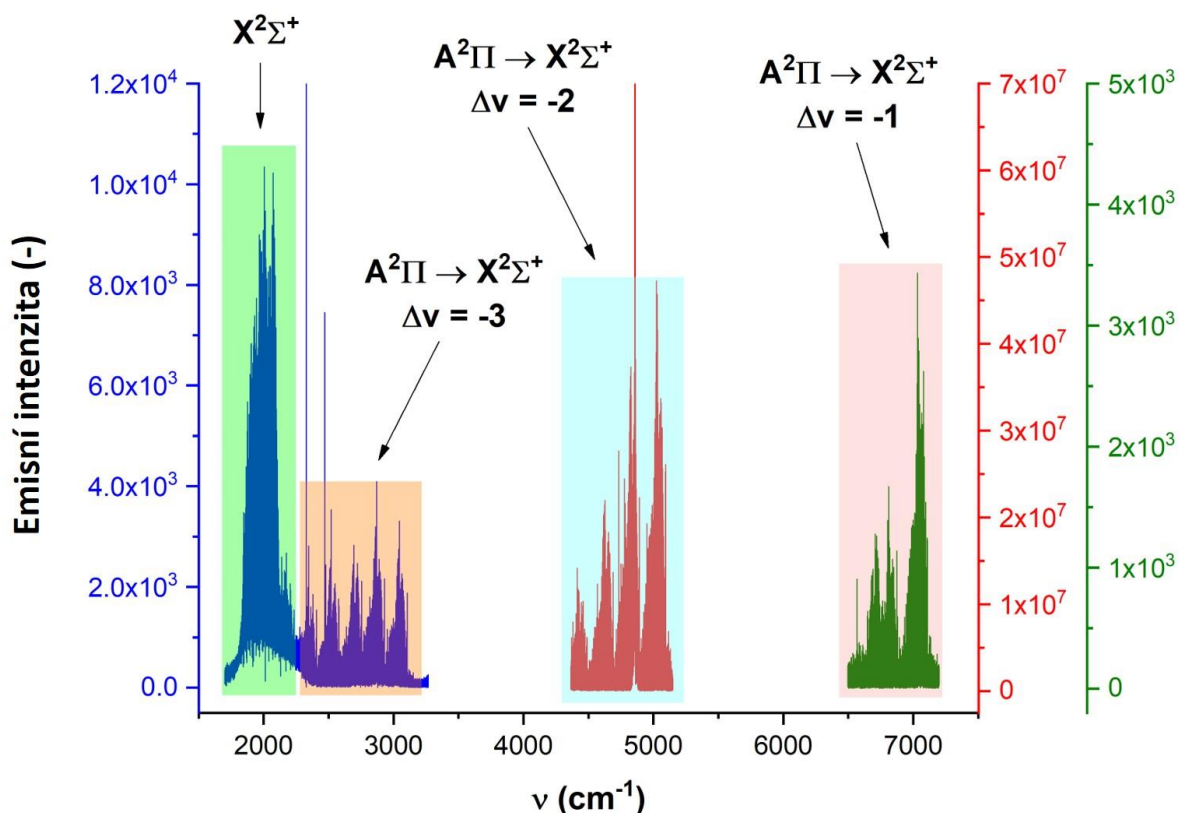
Experimentální pozice emisních linií CN v základním energetickém stavu  $X^2\Sigma^+$  uvedené v Tabulce 9 byly již detailně rozebrány v publikaci Horká *et al.*<sup>149</sup> (2003).

Tabulka 10 v příloze zahrnuje všechny získané experimentální linie elektronického přechodu CN radikálu pro sekvenci  $\Delta v = -3$  v oblasti 2150-3250  $\text{cm}^{-1}$ . Formátování dat je totožné s Tabulkou 9, až na notaci jednotlivých linií, která je zde doplněna tzv. notací PQR, protože elektronické přechody CN radikálu mají vždy 3 větve pro každý pás.

V tabulce 11 v příloze jsou shrnuty všechny změřené linie sekvence  $\Delta v = -2$  elektronického přechodu CN radikálu  $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ . Formátování tabulky je podobné jako v předchozích případech.

V tabulce 12 v příloze jsou uvedeny všechny experimentálně získané linie elektronického přechodu CN pro sekvenci  $\Delta v = -1$  (149 emisních linií).

Přehledové spektrum všech pásů CN radikálu pro rozsah  $1800-7500\text{ cm}^{-1}$  je zachyceno na Obrázku 38.



Obrázek 38: Přehledové spektrum všech měřených pásů CN v rozsahu  $1800-7500\text{ cm}^{-1}$

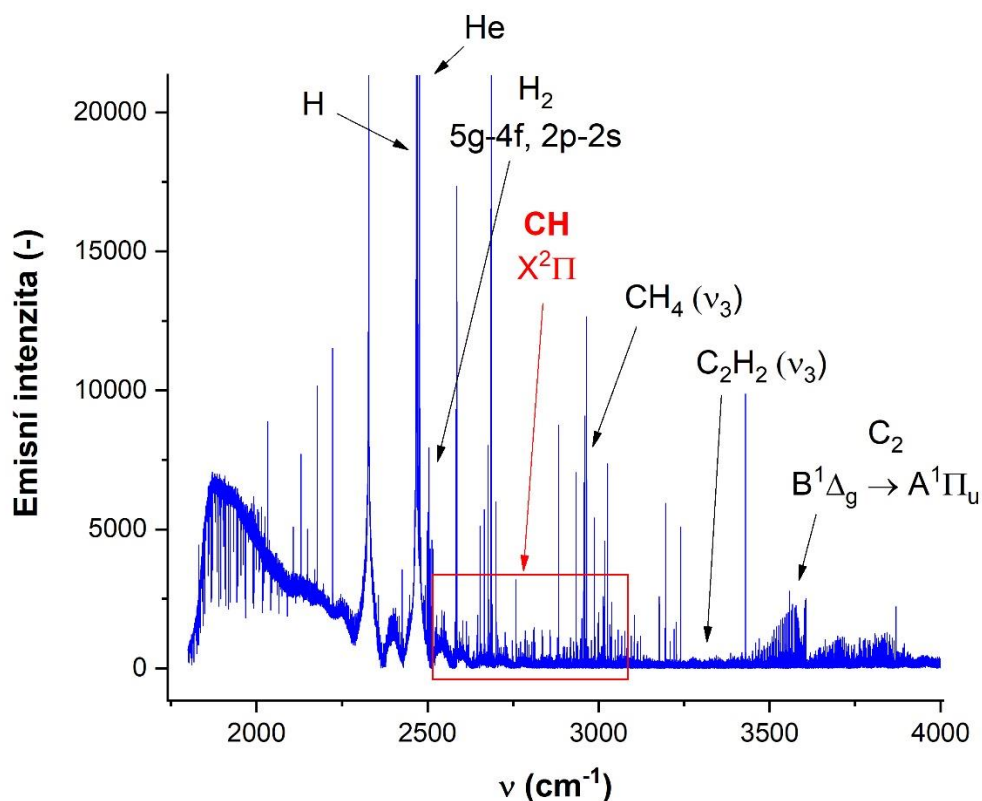


## CH radikál

### Analýza spekter

CH radikál byl spektrálně zkoumán v doutnavém výboji methanu smíšeného s heliem jako nosným plynem. Optimální parciální tlak ve výbojové cele pro helium činil 3 Torr a tlak methanu pak byl vždy 0,05 Torr. Experimenty byly vždy prováděny s InSb detektorem a optikou z CaF<sub>2</sub>. Spektrální rozlišení bez apodizace činilo 0,035 cm<sup>-1</sup> a dostatečného poměru signál-šum bylo dosaženo akumulací 64 scanů. Výbojový puls při dvou hlavních experimentálních provedeních výboje v methanu měl délku 10 a 40 μs, přičemž v případě kratšího výboje byl offset nastaven na 3 μs a v případě delšího výboje pak na 35 μs. Akvizice dat probíhala v obou případech každou 1 μs a počet akvizičních dat byl jako ve všech předchozích experimentech 30. Elektrické napětí ve výbojové cele činilo 1,2 kV a elektrický proud byl 100 mA.

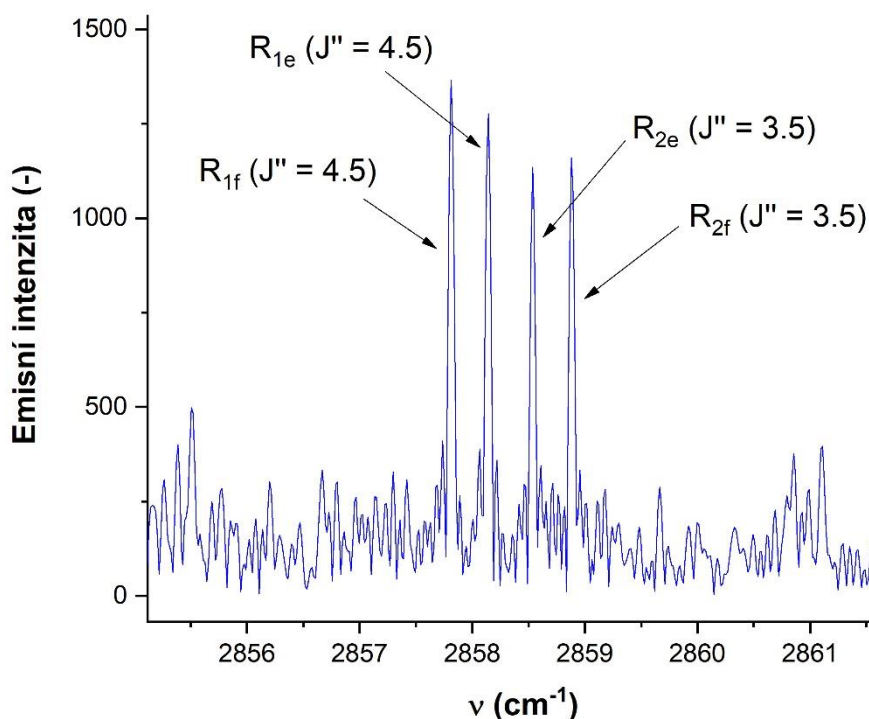
Přehledové spektrum doutnavého výboje ve směsi He + CH<sub>4</sub> je zachyceno na Obrázku 39.



Obrázek 39: Přehledové spektrum doutnavého výboje ve směsi He + CH<sub>4</sub> v oblasti 1800-4000 cm<sup>-1</sup> pořízené 7 μs po skončení 40 μs výboje

Jak lze vidět na Obrázku 39, spektrum obsahuje množství různých částic. Mimo atomárních specií jako H či He je zde přítomen rovněž molekulární vodík (přechody typu 5g-4f a 2p-2s), pás methanu (pás  $\nu_3$ ), acetylenu ( $\nu_3$ ) a  $C_2$  radikál (elektronický přechod  $B^1\Delta_g \rightarrow A^1\Pi_u$ ).

Emisní linie CH radikálu, změřené a popsané na Obrázku 39, odpovídají rotačně-vibračním přechodům v základním energetickém stavu  $X^2\Pi$  a sdružují se do struktury kvadrupletů. Detail takového kvadrupletu je uveden na Obrázku 40.

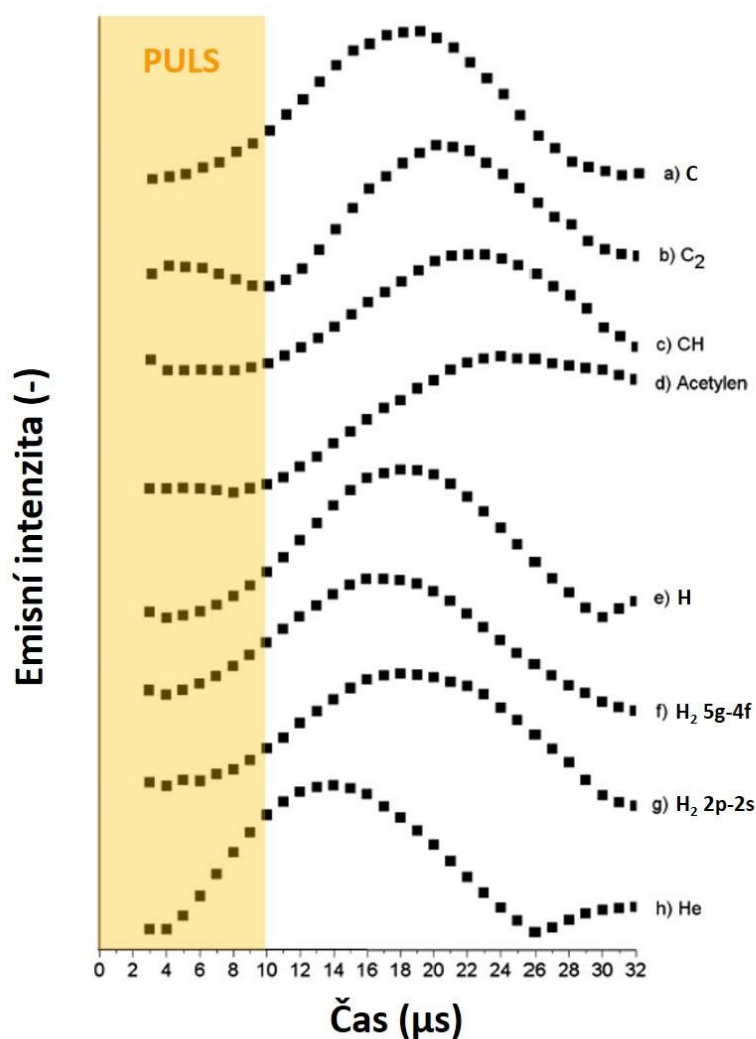


Obrázek 40: Detailní pohled na kvadruplet CH radikálu v oblasti kolem 2858  $cm^{-1}$

Tabulka 13 v příloze popisuje všechny experimentálně získané emisní linie CH a jejich spektrální klasifikaci. F v Tabulce 13 značí kvantové číslo vyjadřující celkový moment hybnosti, který na rozdíl od kvantového čísla J zahrnuje veškerá spinová kvantová čísla. Přiřazení jednotlivých linií bylo provedeno pomocí dat extrahovaných z databáze ExoMol,<sup>216</sup> jež vychází z dat z databáze MOLLIST.<sup>217</sup>

### Časové profily

Časové profily vybraných emisních linií specií detekovaných ve spektru jsou zobrazeny na Obrázku 41.



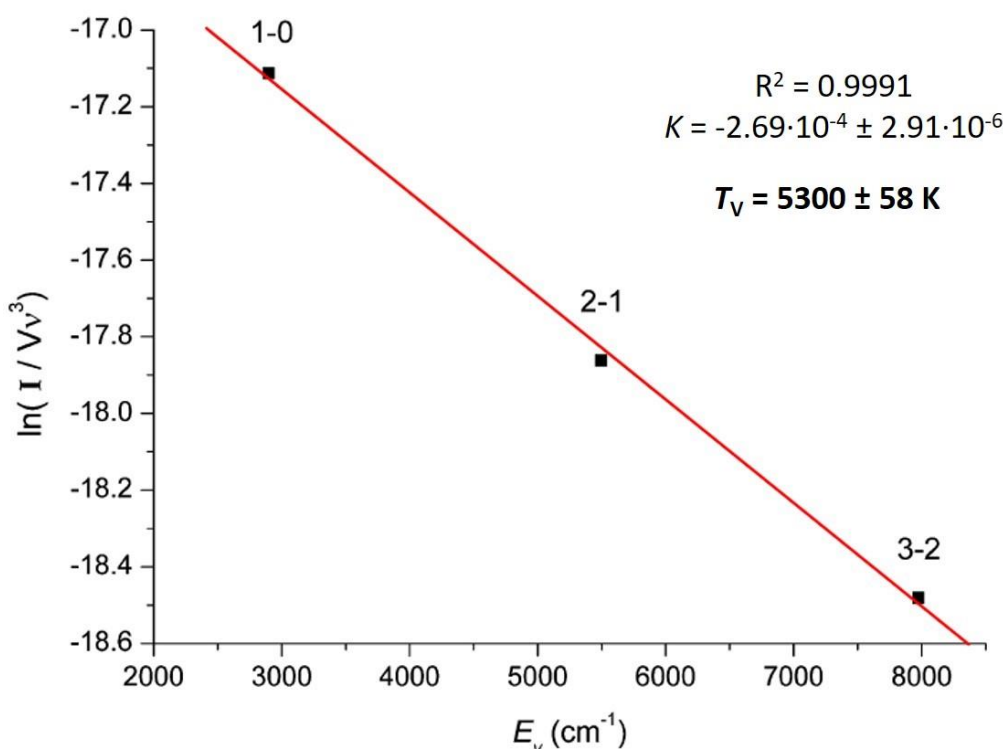
Obrázek 41: Časové křivky vybraných linií částic přítomných ve spektru výboje  $\text{CH}_4$  a  $\text{He}^{31}$

Časové profily na Obrázku 41 souvisejí s doutnavým výbojem o délce trvání  $10 \mu\text{s}$ . Jak je možné vidět, offset činil  $3 \mu\text{s}$  a akvizice dat probíhala každou  $1 \mu\text{s}$ . Emise atomární linie He (linie h na Obrázku 39,  $2469,74 \text{ cm}^{-1}$ ) je pozorovatelná již  $4 \mu\text{s}$  po začátku výbojového pulsu, přičemž toto zpoždění je dáno postupným nárůstem elektronové hustoty ve výbojovém sloupci. Maximální intenzita He se nachází v čase  $13 \mu\text{s}$ , tedy  $3 \mu\text{s}$  po skončení výboje. Díky těmto parametrům je He v tomto výboji částicí s nejkratší dobou života. Uhlík (linie a,  $2222,57 \text{ cm}^{-1}$ ,  $^1\text{P}^0\text{-}^1\text{P}$ ) a vodík (linie e,  $2467,75 \text{ cm}^{-1}$ ) se chovají podobně jako helium, ale jejich časové křivky jsou mírně posunuty k delším časům. Podobně jako uhlík se také chová  $\text{C}_2$  (linie b,  $3605,42 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{B}^1\Delta_g \rightarrow \text{A}^1\Pi_u$ ), ale jeho doba života je opět o něco delší. Samotná intenzita CH radikálu (linie c,  $2645,48 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{P}_{1f}(3,5)$ ) začíná růst teprve až kolem  $10 \mu\text{s}$ , tedy až na konci výbojového pulsu, a vykazuje hodnoty vyšší než pozadí až do konce pozorovacího okna v čase  $32 \mu\text{s}$ . Kratší doby života než CH, ale delší než atomy, vykazují

linie molekulárního vodíku (linie f, R<sub>1</sub>(4), a g, Q(1)), které kompletně deexcitují v čase 31 μs. Nejdéle žijící specie je pak acetylen (linie d, 3318,35 cm<sup>-1</sup>, ν<sub>3</sub>), která je i na konci pozorovacího okna v čase 32 μs stále velmi intenzivní.

### Rotační a vibrační teplota výbojového plazmatu

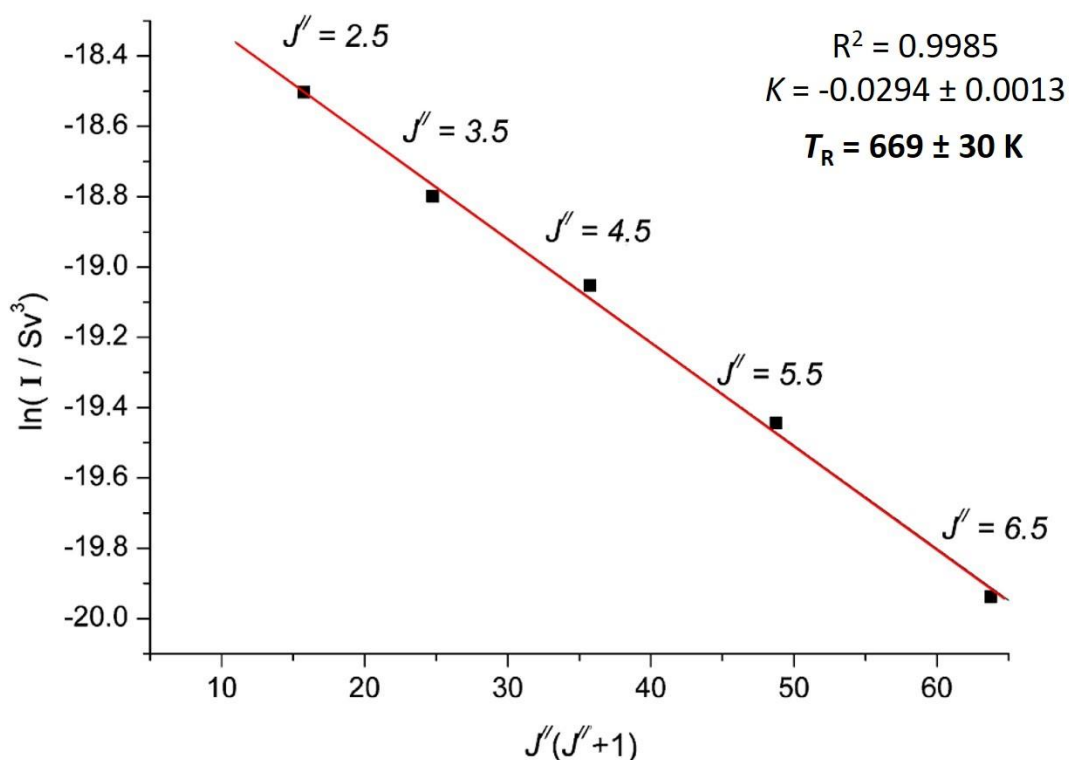
Vibrační teplota CH radikálu ve výboji methanu a helia byla spočítána dle rovnic (7) a (8). Určení této vibrační teploty popisuje Obrázek 42.



Obrázek 42: Stanovení vibrační teploty plazmatu na základě rotačně-vibračních spekter CH

Obrázek 42 popisuje stanovení vibrační teploty výbojového plazmatu pomocí přechodů CH radikálu (vibrační přechody 1-0: 2576,07 cm<sup>-1</sup>, 2-1: 2704,80 cm<sup>-1</sup> a 3-2: 2834,97 cm<sup>-1</sup>), která byla určena na hodnotu  $T_v = 5300 \pm 58$  K. Hodnota spolehlivosti lineární regrese činila  $R^2 = 0,9991$  a směrnice byla  $K = -2,69 \cdot 10^{-4} \pm 2,91 \cdot 10^{-6}$ .

Rotační teplota plazmatu na základě emisních linií CH byla spočítána dle rovnic (5) a (6). Grafické vyjádření tohoto stanovení je možné vidět na Obrázku 43.

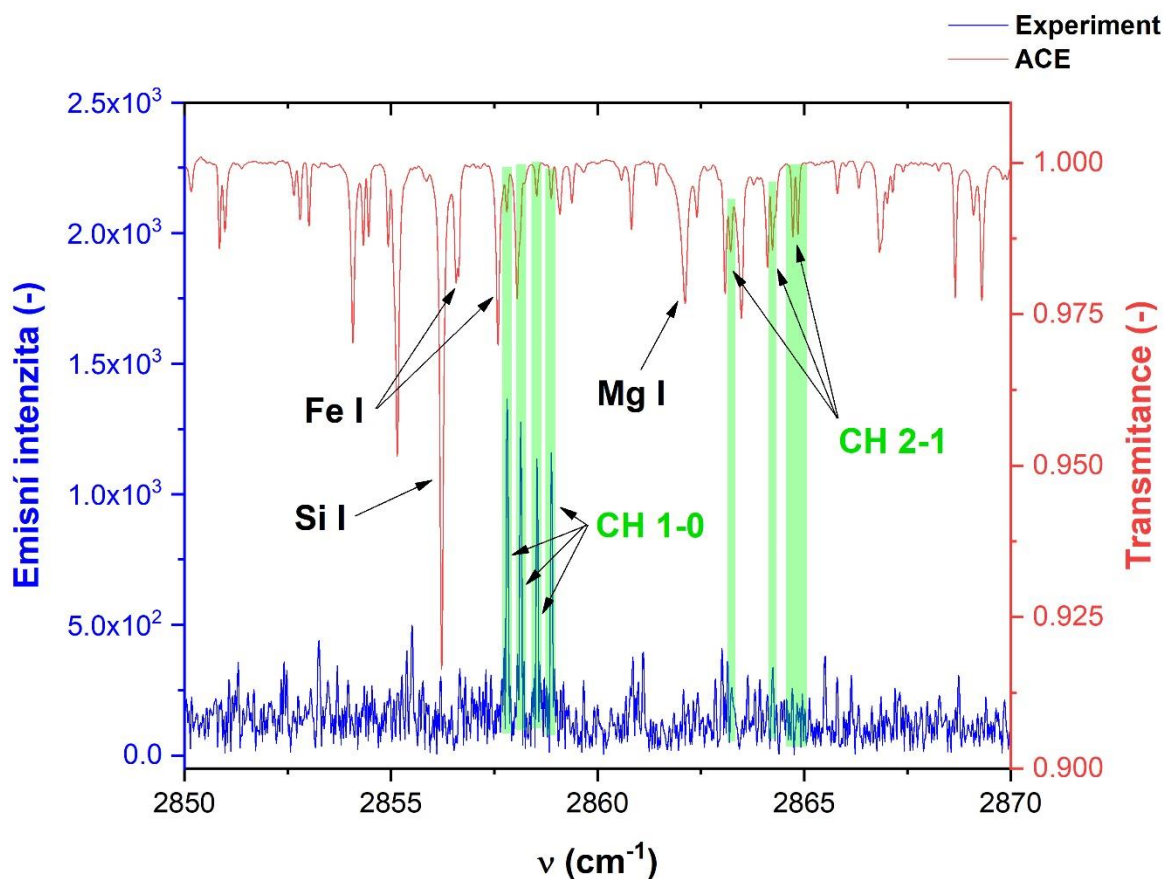


Obrázek 43: Stanovení rotační teploty plazmatu pomocí CH

Hodnota rotační teploty byla pomocí Obrázku 43 a rovnice (6) stanovena na  $T_R = 669 \pm 30$  K. Hodnota spolehlivosti lineární regrese činila  $R^2 = 0,9985$  a směrnice pak  $K = -0,0294 \pm 0,0013$ . Užity byly rotační přechody s  $J'' = 2,5$  až  $6,5$  pro fixní vibrační přechod 1-0. Jednotlivé emisní linie CH, vybrané pro stanovení rotační teploty, spadají do větve  $R_{1e}$  a jejich vlnočty činily  $2811,0 \text{ cm}^{-1}$ ,  $2835,29 \text{ cm}^{-1}$ ,  $2858,19 \text{ cm}^{-1}$ ,  $2879,822 \text{ cm}^{-1}$  a  $2900,08 \text{ cm}^{-1}$ .

### Srovnání se solárními spektry

Spektrum CH radikálu bylo nalezeno v solárních spektrech ACE. Na Obrázku 44 je zachyceno laboratorně detekované spektrum CH v oblasti  $2850\text{-}2870 \text{ cm}^{-1}$  společně se solárním spektrem pořízeným misí ACE.



Obrázek 44: Srovnání rotačně-vibračního spektra CH se solárním spektrem ACE

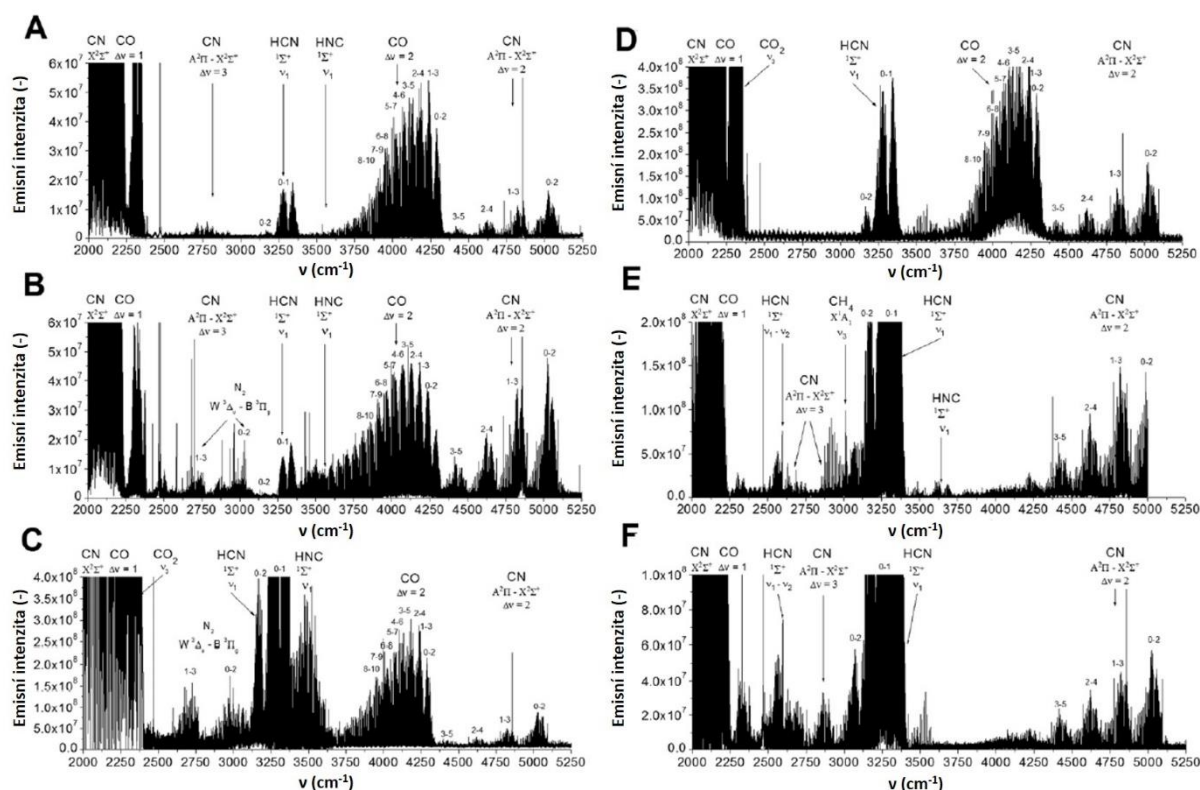
Na Obrázku 44 je vidět typickou strukturu CH radikálu. Zeleným zvýrazněním jsou zobrazeny koincidence obou spekter, a to pro vibrační přechody CH  $v = 1 \rightarrow 0$  a  $v = 2 \rightarrow 1$ . Jak je možné vidět, zatímco experimentální spektra CH pro přechody typu  $v = 1 \rightarrow 0$  jsou velmi intenzivní, přechody  $v = 2 \rightarrow 1$  jsou již slabé. Solární linie CH radikálu jsou ve srovnání s atomárními liniemi, jako např. křemík či železo, rovněž slabé, avšak tento jev je v souladu se známým faktem o obecně vyšší intenzitě atomárních přechodů ve srovnání s přechody molekulárními.

## Role radikálů v prebiotické chemii

### Rozklad jednoduchých biogenních molekul elektrickým výbojem

V rámci této disertační práce byla provedena celá řada experimentů zaměřených na detekci rozkladných produktů různých směsí organických i anorganických molekul ( $\text{NH}_3$ , formamid, formaldehyd, methanol, methan,  $\text{CH}_3\text{CN}$ ) s vodní párou a dusíkem jako nosnými plyny. Výsledná časově rozlišená spektra jsou zobrazena na Obrázku 45.

Celkový tlak plyných směsí se různil v rozmezí 1-10 Torr. Kompletní optika byla vyrobena z  $\text{CaF}_2$ , elektrické napětí v systému činilo  $\sim 1\text{ kV}$  a elektrický proud pak  $\sim 100\text{ mA}$ . Délka pulsu činila  $22\ \mu\text{s}$ , offset byl  $0\ \mu\text{s}$  a akvizice dat probíhala každé  $3\ \mu\text{s}$ . Spektrální rozlišení činilo  $0,02\ \text{cm}^{-1}$  a akumulováno bylo vždy 50 scanů pro zlepšení poměru signál-šum. Zaznamenávána byla spektrální oblast středního IR záření  $1800\text{--}4000\ \text{cm}^{-1}$  a užít byl detektor InSb.



Obrázek 45: Srovnání emisních časově rozlišených spekter doutnavého výboje v jednotlivých vybraných směsích<sup>22</sup>

panel A –  $\text{NH}_3 + \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ , panel B – formamid +  $\text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$ , panel C –  $\text{HCHO} + \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$ , panel D –  $\text{CH}_3\text{OH} + \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$ , panel E –  $\text{CH}_4 + \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$ , panel F –  $\text{CH}_3\text{CN} + \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$

Na základě těchto měření (Obrázek 45) se ukázalo, že jakákoliv směs obsahující uhlík a dusík se při vysokoenergetické události rozkládá na CN radikál. V případně přítomnosti dalších prvků (vodík a kyslík) lze ve výsledné směsi stabilních produktů vždy nalézt vysoké výtěžky HCN. Nejprominentnější pásy ve spektrech potom náleží CO, CO<sub>2</sub>, CN a HCN. Je zjevné, že i oxid uhelnatý tedy hraje díky své vysoké stabilitě a rigiditě velkou roli v prebiotické chemii. V mnoha spektrech lze rovněž registrovat přítomnost izomeru kyanovodíku HNC, tedy isokyanovodíku. Ve spektrech se dále nacházejí atomární emisní linie všech prvků (H, N, C a O) a také molekulární pás dusíku náležící elektronickému přechodu  $W^3\Delta_u \rightarrow B^3\Pi_g$ , který byl zkoumán také v kapitole o CO.

Zkoumané směsi zobrazené na Obrázku 45 jsou relevantní v prebiotické chemii a lze diskutovat i jejich roli v rámci chemických reakcí probíhajících v planetárních atmosférách.

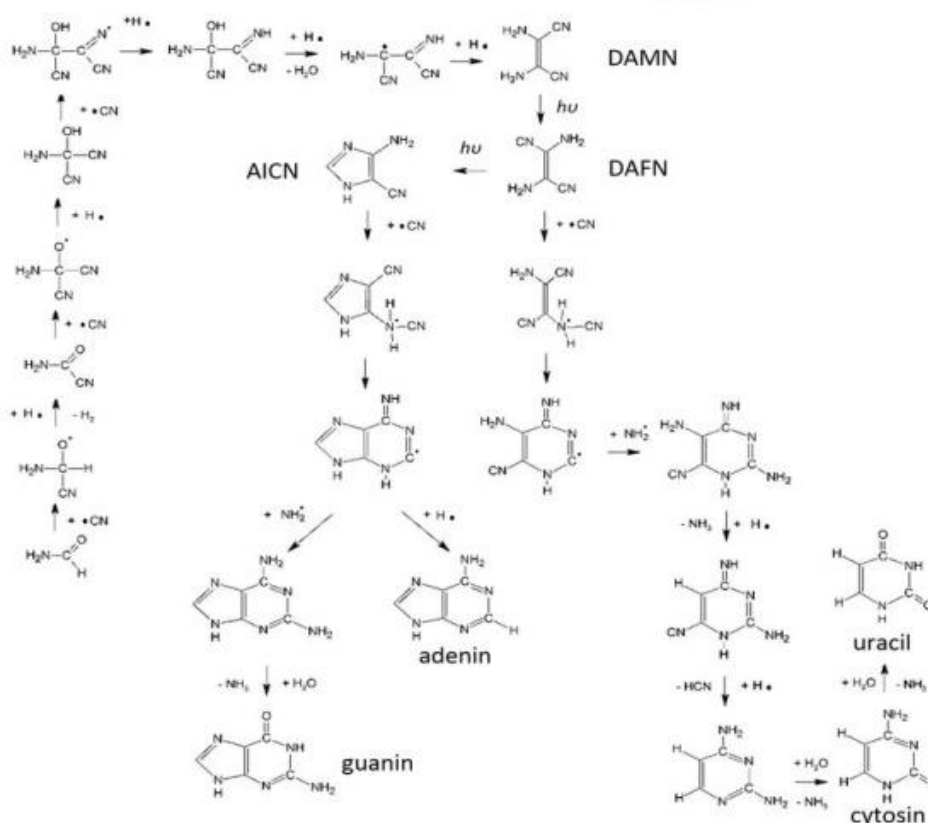
Jak již bylo několikrát zmíněno, CN radikál je díky své trojné vazbě velmi rigidní. Tato rigidita, ve spojení s komplexním elektronickým a ro-vibračním spektrem této částice, umožňuje CN radikálu absorpci obrovského množství energie a její distribuci do celé řady elektronických, rotačně-vibračních i rotačních excitovaných stavů. Díky těmto vlastnostem a vhodným Franck-Condonovým faktorům pro přechod mezi jednotlivými elektronickými stavy (viz potenciálové křivky CN, Obrázek 6) může být CN radikál excitován do vysokých vibračních a rotačních stavů, což se projevuje značným množstvím pozorovatelných přechodů CN v široké oblasti spektra od viditelné až po mikrovlnnou část. Trojná vazba navíc propůjčuje CN extrémně vysokou disociační energii vazby, a sice 7,77 eV,<sup>218</sup> což umožňuje CN radikálu pojmout velká množství energie a populovat tak bohatou variaci excitovaných stavů, aniž by došlo k disociaci vazby. Částice jako CN je tak schopna interagovat a přenášet energii na téměř libovolnou jinou molekulu či radikál v širokém spektrálním rozsahu.

Oxid uhelnatý, jehož prominentní spektra je možno pozorovat rovněž ve většině výbojových systémů (Obrázek 45), jsou spolu s CN částice schopné výjimečně absorpce termální energie, která by byla jinak v systému disipována, a to prostřednictvím excitace svých vibračních a rotačních stavů. Proto částice jako CO a CN kontrolují tok energie v systému, napříč celým reakčním mechanismem až k finálním produktům reakce, které, jak se ukázalo, mohou být komplexní organické biomolekuly jako např. báze nukleových kyselin.

Těžší stabilní produkty výbojových reakcí se nacházejí obvykle v kondenzované fázi a lze je detekovat pomocí technik plynové nebo kapalinové chromatografie. Kondenzovaná fáze již pomocí FTIR spektroskopie v tomto uspořádání není měřitelná. Na základě již publikovaných



a nově získaných dat bylo ve spolupráci s teoretickými chemiky z Brna (Biofyzikální ústav, AV ČR) zkonstruováno přehledové schéma formace cytosinu, guaninu, adeninu a uracilu ve výboji obsahujícím primární směs formamidu a byla ukázána fundamentální role CN radikálu při jejich chemickém vzniku.



Obrázek 46: Schéma formace komplexnějších molekul z formamidu<sup>17</sup>

Formamid je nejprve rozložen na radikály a jednoduché plynné molekuly. Pomocí FTIR spektroskopie a chemických modelů bylo zjištěno, že ve výsledné směsi radikálů převažuje CN a NH radikál. Jak lze vidět na Obrázku 46, CN radikál dále reaguje s molekulou formamidu. Postupná adice CN radikálu spolu s vodíkovými radikály nakonec vede k formaci molekuly 2,3-diaminomaleonitrilu (DAMN), který je považován za prekurzor všech nukleových bází. Schéma popsané na obrázku výše dále popisuje vznik 2,3-diaminofumaronitrilu (DAFN) a 4-amino-5-kyanoimidazolu (AICN) fotoizomerací. DAFN dále reaguje s CN a NH<sub>2</sub> radikály za postupného vzniku cytosinu, který dále tvoří uracil hydratací a deaminací. AICN rovněž reaguje s CN radikálem a vodíkovým radikálem za tvorby adeninu. Při preferenci reakce s NH<sub>2</sub> radikálem místo reakce s vodíkovým radikálem pak dojde k formaci guaninu. Těmito postupnými kroky, jež mají všechny

exergonický charakter a jejich aktivační energie je relativně malá, je možno dospět ke všem bázím nukleových kyselin.

V modelovém schématu uvedeném na Obrázku 46 hraje CN radikál zásadní roli a celý reakční mechanismus vedoucí k nukleovým bázím je postaven na jeho existenci.

Tyto závěry podtrhují významnou roli radikálů, zejména pak CN, OH, NH, CH a mimo jiné i molekuly CO, v prebiotické chemii.

Výsledky popsané v této kapitole byly publikovány v časopise *Nature Scientific Reports*.<sup>22</sup>

## Závěr

V této disertační práci jsou předloženy výsledky časově rozlišené infračervené spektrální analýzy jednoduchých diatomických radikálů (OH, NH, CN a CH) a oxidu uhelnatého.

V případě CO byly spektrálně zkoumány dva pásy, a sice fundamentální pás CO ( $\nu_1$ ), obsahující rotačně-vibrační přechody v základním elektronickém stavu  $X^1\Sigma^+$ , a první overton CO ( $2\nu_1$ ). Analýzou těchto pásů bylo nalezeno přes 200 nových emisních spektrálních linií CO, které byly spolu s již známými přechody popsány v Tabulkách 1 a 2 v příloze. Celý spektrální soubor obou pásů byl rovněž fitován pomocí Dunhamových rovnic. Tyto výsledky byly zveřejněny v časopise *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, kde byly rovněž publikovány nerovnovážné modely výše popsaných spekter CO, získané ve spolupráci s teoretickými výzkumníky z University College London ve Velké Británii. Rovněž byly analyzovány časové profily částic přítomných ve stejném výbojovém systému. Na základě těchto časových profilů byl diskutován možný energetický přenos mezi dusíkem a CO. Popsána zde byla také parciální inverzní populace prvního CO overtonu, což je v souladu s teorií CO laserů. Díky časovým křivkám byla, mimo jiné, ukázána velká role CN radikálu a dusíku jako energetických mediátorů. Emisní linie CO byly využity ke kalkulaci teploty výbojového plazmatu. Rotační teplota byla stanovena na  $T_R = 555 \pm 3$  K a vibrační teplota pak na  $T_V = 7194 \pm 270$  K.

U OH radikálu byla spektrálně zkoumána rotačně-vibrační struktura základního elektronického pásu  $X^2\Pi$  a pak také čistě rotační přechody pro vibrační hladiny  $v = 0$  a  $v = 1$ . Pro základní elektronický pás  $X^2\Pi$  byl v oblasti spektra  $1800\text{-}3500\text{ cm}^{-1}$  uveden kompletní seznam emisních linií s jejich spektrální klasifikací a data byla také porovnána se solárními spektry z mise ACE. V případě čistě rotačních přechodů OH byly tyto přehledně uvedeny v tabulce s příslušnou spektrální notací a linie byly rovněž porovnány se solárními spektry. Popsané čistě rotační přechody OH ve spektrální oblasti  $700\text{-}1000\text{ cm}^{-1}$  byly dle dostupné literatury změřeny v laboratoři za využití chladného zdroje vůbec poprvé. Vybrané rotační přechody OH radikálu byly užity k výpočtu rotační teploty výbojového plazmatu experimentální směsi, která byla stanovena na  $T_R = 1417 \pm 13$  K. Stejně přechody byly užity rovněž ke stanovení rotační teploty plazmatu solárního, jehož spektrální data byla převzata z mise ACE. Rotační teplota solárního plazmatu byla stanovena na  $T_R = 3679 \pm 178$  K, což je ve shodě s vyšší excitací přechodů na Slunci díky vyšší okolní teplotě.

NH radikál byl zkoumán ve spektrální oblasti  $1800\text{-}3500\text{ cm}^{-1}$ , kde se nachází jeho základní elektronický pás  $X^3\Sigma^-$ . Pro tento pás byl uveden seznam jednotlivých emisních linií s příslušnou spektrální klasifikací, a to pro vibrační přechody od  $1 \rightarrow 0$  až do  $5 \rightarrow 4$ . Rovněž byly změřeny 4 čistě rotační triplety NH radikálu v oblasti  $750\text{-}820\text{ cm}^{-1}$ , které byly porovnány s výsledky mise ATMOS. Stejně jako v případě čistě rotačních přechodů OH, i zde je dle dostupné literatury pravděpodobné, že se jedná o vůbec první laboratorně změřené linie NH v této spektrální oblasti. Oba spektrální soubory NH radikálu byly porovnány se solárními spektry ACE. V případě výbojové směsi  $\text{N}_2 + \text{NH}_3 + \text{Ar}$  byla zkoumána časová distribuce intenzit mezi dusíkem a NH radikálem, což ukázalo na přenos energie mezi těmito dvěma částicemi. Rovněž bylo ukázáno, že pro jednotlivé horké pásy se v tomto případě časové křivky tvarem nijak neliší. V případě výbojové směsi typu  $\text{H}_2 + \text{N}_2 + \text{He}$  se časové profily pro jednotlivé horké pásy nepatrně odlišují dobou života, která roste se snižující se energií vibračního přechodu, což je v souladu s dříve získanými daty pro vibrační relaxaci CN radikálu.

CN radikál byl zkoumán ve spektrálním rozsahu  $1800\text{-}7500\text{ cm}^{-1}$  a měřeny byly elektronické přechody typu  $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$  pro sekvenci  $\Delta v = -3, -2$  a  $-1$ , a fundamentální pás CN v základním elektronickém stavu  $X^2\Sigma^+$ . Pozice emisních linií všech těchto pásů spolu s příslušnou spektrální klasifikací byly uvedeny v souvisejících tabulkách v příloze. Pro CN radikál bylo také vytvořeno přehledové spektrum v rozsahu  $1800\text{-}8000\text{ cm}^{-1}$ .

V případě CH radikálu byl spektrálně zkoumán pás v základním elektronickém stavu  $X^2\Pi$ . Emisní linie, sdružené do kvadrupletů, byly popsány v tabulce spolu s příslušnou spektrální klasifikací. Získaná spektra CH radikálu byla porovnána se solárními spektry ACE. Ve výbojovém systému  $\text{He} + \text{CH}_4$  byla pomocí emisních linií CH spočítána rotační a vibrační teplota plazmatu, která byla stanovena na  $T_R = 669 \pm 30\text{ K}$  a  $T_V = 5300 \pm 58\text{ K}$ .

Role výše popsaných radikálů v prebiotické chemii byla zkoumána pomocí elektrického výboje v směsích plynů či látek, jež vykazovaly společnou přítomnost všech čtyř biogenních prvků (C, N, O, H). V emisních spektrech elektrického doutnavého výboje různých plynů či molekul obsahujících výše zmíněné základní biogenní atomy se projeví dominantní pásy CN a HCN. Bylo tedy dokázáno, že CN radikál vzniká při každém vysokoenergetickém rozkladu molekul složených z dusíku a uhlíku. Ve většině spekter byl detekován též CO, který vykazoval velmi prominentní fundamentální a první overtonický pás. Dle popsaných parametrů CN a CO bylo dokázáno, že CN radikál a CO hrají klíčovou roli při přenosu

energie v celém systému a v prebiotické chemii. Tyto výsledky byly publikovány v časopise *Nature Scientific Reports* spolu s navrhovanými reakčními mechanismy. Rovněž bylo navrženo schéma, které demonstruje důležitost CN radikálu při formaci komplexnějších molekul, jako jsou nukleové báze. Radikály jako NH, OH a CH byly rovněž pozorovány při rozkladech prebiotických molekul, ale pro dominantní projev těchto částic ve spektru bylo nutno zvolit specifické experimentální podmínky, jejichž detailní popis je uveden v jednotlivých kapitolách.

V neposlední řadě je nutno zmínit, že během experimentální práce na výše zmíněných radikálech došlo k úspěšnému navázání spolupráce s teoretickými výzkumníky ze skupiny ExoMol. Tato výzkumná skupina, situovaná na University College London ve Velké Británii, je stejně jako náš vědecký tým zapojena do vesmírné mise ARIEL, jejímž cílem má být výzkum exoplanetárních atmosfér. ExoMol na této misi zodpovídá za referenční databázi molekul a atomů, kterou bude ARIEL pro analýzu používat. Díky společné práci na této misi se nám podařilo navázat hlubší vědeckou spolupráci a docílili jsme tak zařazení našich spektrálních dat o radikálech do jejich databáze. Předpokládáme, že v rámci mezinárodní mise ARIEL budou výsledky této práce využity a povedou k detailnímu, pravdivému a správnému popisu spekter exoplanetárních atmosfér.

## **Přílohy**

Tabulka 1: Experimentální pozice linií fundamentálního pásu CO ( $\Delta v = 1$ )

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
2018,1523	0,00207	28	29	1	0	2199,9322	-2,70E-04	16	15	1	0
2022,9157	-1,40E-04	27	28	1	0	2203,1637	0,00125	17	16	1	0
2027,6506	5,00E-05	26	27	1	0	2206,3549	-4,00E-05	18	17	1	0
2032,3534	-8,10E-04	25	26	1	0	2209,5097	-7,00E-05	19	18	1	0
2037,0246	-0,00208	24	25	1	0	2212,6268	-2,00E-05	20	19	1	0
2041,6655	-0,00231	23	24	1	0	2215,7058	-1,30E-04	21	20	1	0
2050,8535	-0,00196	21	22	1	0	2218,7468	-1,60E-04	22	21	1	0
2055,4017	1,00E-05	20	21	1	0	2221,7496	-1,60E-04	23	22	1	0
2059,9157	-3,00E-04	19	20	1	0	2224,7141	-9,00E-05	24	23	1	0
2064,3977	-5,40E-04	18	19	1	0	2227,6401	0	25	24	1	0
2068,8529	0,00464	17	18	1	0	2230,5272	-1,40E-04	26	25	1	0
2073,2661	1,80E-04	16	17	1	0	2233,3759	1,30E-04	27	26	1	0
2077,6518	7,30E-04	15	16	1	0	2236,1852	-5,00E-05	28	27	1	0
2082,0028	-7,70E-04	14	15	1	0	2238,9557	8,00E-05	29	28	1	0
2086,3237	4,40E-04	13	14	1	0	2241,6875	7,50E-04	30	29	1	0
2090,6099	-1,00E-04	12	13	1	0	1987,9257	0,00106	29	30	2	1
2094,8634	-2,50E-04	11	12	1	0	1992,6862	2,40E-04	28	29	2	1
2099,0837	-3,50E-04	10	11	1	0	1997,4185	0,00198	27	28	2	1
2103,2713	2,30E-04	9	10	1	0	2002,1155	-6,80E-04	26	27	2	1
2107,4248	2,60E-04	8	9	1	0	2006,7839	-8,90E-04	25	26	2	1
2111,5442	-1,40E-04	7	8	1	0	2011,4231	8,90E-04	24	25	2	1
2115,6288	-0,0015	6	7	1	0	2016,0281	-1,90E-04	23	24	2	1
2119,6831	8,10E-04	5	6	1	0	2020,6019	-9,80E-04	22	23	2	1
2123,7000	-1,60E-04	4	5	1	0	2025,1503	0,00446	21	22	2	1
2127,6835	-2,50E-04	3	4	1	0	2029,6584	0,00138	20	21	2	1
2131,6298	-0,00312	2	3	1	0	2034,1363	2,00E-05	19	20	2	1
2135,5475	-3,00E-05	1	2	1	0	2038,5786	-0,00488	18	19	2	1
2139,4245	-0,00293	0	1	1	0	2042,9960	-0,00245	17	18	2	1
2147,0826	1,00E-04	1	0	1	0	2047,3815	4,30E-04	16	17	2	1
2150,8571	-2,90E-04	2	1	1	0	2051,7311	-8,00E-05	15	16	2	1
2154,5967	-2,70E-04	3	2	1	0	2056,0499	0,00127	14	15	2	1
2158,3001	-0,001	4	3	1	0	2060,3340	7,20E-04	13	14	2	1
2161,9695	-1,40E-04	5	4	1	0	2064,5854	4,10E-04	12	13	2	1
2165,6023	-1,40E-04	6	5	1	0	2068,8021	-0,0015	11	12	2	1
2169,1987	-6,60E-04	7	6	1	0	2072,9896	6,30E-04	10	11	2	1
2172,7579	-0,00234	8	7	1	0	2077,1409	-5,00E-05	9	10	2	1
2176,2860	0,00106	9	8	1	0	2081,2595	1,00E-04	8	9	2	1
2179,7734	9,00E-05	10	9	1	0	2085,3441	-7,00E-05	7	8	2	1
2183,2251	-1,10E-04	11	10	1	0	2089,3956	4,90E-04	6	7	2	1
2186,6403	-1,90E-04	12	11	1	0	2093,4123	2,20E-04	5	6	2	1
2190,0190	0	13	12	1	0	2097,3949	-2,00E-05	4	5	2	1
2193,3605	-1,00E-04	14	13	1	0	2101,3416	-0,0019	3	4	2	1
2196,6649	-2,40E-04	15	14	1	0	2105,2589	0,00124	2	3	2	1

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
2109,1373	4,00E-05	1	2	2	1	2021,5624	3,30E-04	16	17	3	2
2112,9829	7,50E-04	0	1	2	1	2025,8773	1,70E-04	15	16	3	2
2120,5680	7,90E-04	1	0	2	1	2030,1598	2,50E-04	14	15	3	2
2124,3076	5,10E-04	2	1	2	1	2034,4097	5,40E-04	13	14	3	2
2128,0116	-7,00E-05	3	2	2	1	2038,6276	0,00177	12	13	3	2
2131,6820	0,00119	4	3	2	1	2042,8091	-3,10E-04	11	12	3	2
2135,3144	4,00E-05	5	4	2	1	2046,9599	1,60E-04	10	11	3	2
2138,9121	-7,00E-05	6	5	2	1	2051,0773	6,00E-04	9	10	3	2
2142,4738	-3,00E-04	7	6	2	1	2055,1599	-2,20E-04	8	9	3	2
2146,0006	6,00E-04	8	7	2	1	2059,2121	0,00224	7	8	3	2
2149,4898	8,00E-05	9	8	2	1	2063,2261	3,20E-04	6	7	3	2
2152,9432	9,00E-05	10	9	2	1	2067,2084	6,70E-04	5	6	3	2
2156,3602	1,60E-04	11	10	2	1	2071,1557	1,50E-04	4	5	3	2
2159,7405	1,60E-04	12	11	2	1	2075,0707	0,00158	3	4	3	2
2163,0840	1,20E-04	13	12	2	1	2078,9487	4,40E-04	2	3	3	2
2166,3906	9,00E-05	14	13	2	1	2082,7955	0,00265	1	2	3	2
2169,6602	1,20E-04	15	14	2	1	2086,6050	0,00226	0	1	3	2
2172,8929	4,50E-04	16	15	2	1	2094,1185	7,00E-04	1	0	3	2
2176,0872	-2,70E-04	17	16	2	1	2097,8233	6,20E-04	2	1	3	2
2179,2450	1,00E-05	18	17	2	1	2101,4937	0,00143	3	2	3	2
2182,3649	3,00E-05	19	18	2	1	2105,1256	-8,20E-04	4	3	3	2
2185,4470	4,00E-05	20	19	2	1	2108,7251	1,20E-04	5	4	3	2
2188,4912	9,00E-05	21	20	2	1	2112,2879	9,00E-05	6	5	3	2
2191,4972	2,00E-05	22	21	2	1	2115,8138	-9,50E-04	7	6	3	2
2194,4656	5,70E-04	23	22	2	1	2119,3060	3,30E-04	8	7	3	2
2197,3948	3,00E-04	24	23	2	1	2122,7607	2,90E-04	9	8	3	2
2200,2867	0,00125	25	24	2	1	2126,1791	2,70E-04	10	9	3	2
2205,9498	-0,00142	27	26	2	1	2129,5611	3,20E-04	11	10	3	2
2208,7251	-6,40E-04	28	27	2	1	2132,9064	2,90E-04	12	11	3	2
2211,4610	-1,50E-04	29	28	2	1	2136,2151	4,20E-04	13	12	3	2
2214,1584	0,00107	30	29	2	1	2139,4870	6,50E-04	14	13	3	2
1962,5633	0,00201	29	30	3	2	2142,7219	9,40E-04	15	14	3	2
1967,2899	0,00234	28	29	3	2	2145,9173	-0,00106	16	15	3	2
1971,9827	-3,70E-04	27	28	3	2	2149,0785	8,00E-05	17	16	3	2
1976,6461	-0,00158	26	27	3	2	2152,2011	1,20E-04	18	17	3	2
1985,8841	5,00E-04	24	25	3	2	2155,2861	2,00E-04	19	18	3	2
1990,4548	1,70E-04	23	24	3	2	2158,3344	0,00136	20	19	3	2
1994,9910	-0,00317	22	23	3	2	2161,3425	2,60E-04	21	20	3	2
1999,5022	1,20E-04	21	22	3	2	2164,3136	2,40E-04	22	21	3	2
2003,9778	-4,10E-04	20	21	3	2	2167,2467	4,50E-04	23	22	3	2
2008,4208	-0,00162	19	20	3	2	2170,1418	0,00103	24	23	3	2
2012,8352	6,30E-04	18	19	3	2	2173,0011	0,00433	25	24	3	2
2017,2151	6,00E-04	17	18	3	2	2175,8123	-0,0018	26	25	3	2



Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
2178,5921	-5,30E-04	27	26	3	2	2106,1399	3,80E-04	12	11	4	3
2181,3326	4,00E-04	28	27	3	2	2109,4139	7,70E-04	13	12	4	3
2184,0339	0,00124	29	28	3	2	2112,6504	5,70E-04	14	13	4	3
2186,6970	0,00312	30	29	3	2	2115,8500	5,20E-04	15	14	4	3
1937,2674	0,00181	29	30	4	3	2119,0116	-3,30E-04	16	15	4	3
1941,9571	3,00E-04	28	29	4	3	2122,1369	-1,40E-04	17	16	4	3
1946,6164	-8,50E-04	27	28	4	3	2125,2248	1,50E-04	18	17	4	3
1951,2466	-2,00E-04	26	27	4	3	2128,2757	0,00108	19	18	4	3
1955,8455	2,10E-04	25	26	4	3	2131,2862	-6,00E-04	20	19	4	3
1960,4122	-4,00E-04	24	25	4	3	2134,2613	2,50E-04	21	20	4	3
1964,9487	1,30E-04	23	24	4	3	2137,1980	7,80E-04	22	21	4	3
1969,4536	5,50E-04	22	23	4	3	2140,0961	9,30E-04	23	22	4	3
1973,9262	2,90E-04	21	22	4	3	2142,9566	0,00186	24	23	4	3
1978,3666	-3,90E-04	20	21	4	3	2145,7717	-0,0041	25	24	4	3
1987,1548	0,00156	18	19	4	3	2148,5568	-0,00139	26	25	4	3
1991,4989	7,80E-04	17	18	4	3	2151,3030	0,00123	27	26	4	3
1995,8111	4,50E-04	16	17	4	3	2154,0081	0,00171	28	27	4	3
2000,0917	0,00103	15	16	4	3	1916,6951	-3,20E-04	28	29	5	4
2004,3388	7,60E-04	14	15	4	3	1921,3235	0,00271	27	28	5	4
2008,5540	0,00139	13	14	4	3	1925,9169	0,00163	26	27	5	4
2012,7344	1,60E-04	12	13	4	3	1930,4790	3,00E-04	25	26	5	4
2016,8830	2,20E-04	11	12	4	3	1935,0112	2,60E-04	24	25	5	4
2020,9988	7,10E-04	10	11	4	3	1943,9830	0,00174	22	23	5	4
2025,0794	-6,10E-04	9	10	4	3	1948,4183	-7,60E-04	21	22	5	4
2029,1285	9,00E-05	8	9	4	3	1952,8249	-1,80E-04	20	21	5	4
2033,1438	6,80E-04	7	8	4	3	1957,2001	9,20E-04	19	20	5	4
2037,1247	6,80E-04	6	7	4	3	1961,5422	9,80E-04	18	19	5	4
2041,0711	1,50E-04	5	6	4	3	1965,8515	4,50E-04	17	18	5	4
2044,9842	4,40E-04	4	5	4	3	1970,1289	3,80E-04	16	17	5	4
2048,8629	5,90E-04	3	4	4	3	1974,3737	2,10E-04	15	16	5	4
2052,7057	-7,50E-04	2	3	4	3	1978,5868	9,80E-04	14	15	5	4
2056,5184	0,00237	1	2	4	3	1982,7688	0,00345	13	14	5	4
2067,7355	-4,80E-04	1	0	4	3	1986,9130	0,00106	12	13	5	4
2071,4066	7,30E-04	2	1	4	3	1991,0260	5,60E-04	11	12	5	4
2075,0388	-0,00166	3	2	4	3	1995,1067	9,90E-04	10	11	5	4
2078,6393	-3,30E-04	4	3	4	3	1999,1530	3,90E-04	9	10	5	4
2082,2045	0,0013	5	4	4	3	2003,1671	0,00113	8	9	5	4
2085,7308	-2,50E-04	6	5	4	3	2007,1465	8,30E-04	7	8	5	4
2089,2233	2,90E-04	7	6	4	3	2011,0920	4,60E-04	6	7	5	4
2092,6792	2,50E-04	8	7	4	3	2015,0038	3,50E-04	5	6	5	4
2096,0991	3,80E-04	9	8	4	3	2018,8820	7,50E-04	4	5	5	4
2099,4829	7,30E-04	10	9	4	3	2022,7252	4,10E-04	3	4	5	4
2102,8294	2,50E-04	11	10	4	3	2026,5346	6,80E-04	2	3	5	4

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
2030,3121	0,0036	1	2	5	4	1957,0492	1,20E-04	13	14	6	5
2041,4227	-7,60E-04	1	0	5	4	1961,1612	5,70E-04	12	13	6	5
2045,0609	0,00254	2	1	5	4	1965,2400	9,00E-04	11	12	6	5
2048,6576	-3,70E-04	3	2	5	4	1969,2848	4,70E-04	10	11	6	5
2052,2228	6,60E-04	4	3	5	4	1973,2955	-6,90E-04	9	10	6	5
2055,7509	1,60E-04	5	4	5	4	1977,2754	8,70E-04	8	9	6	5
2059,2448	0,00119	6	5	5	4	1981,2193	1,00E-04	7	8	6	5
2062,7011	5,00E-04	7	6	5	4	1985,1306	5,40E-04	6	7	6	5
2066,1222	6,30E-04	8	7	5	4	1989,0080	0,00105	5	6	6	5
2069,5070	6,30E-04	9	8	5	4	1992,8507	9,60E-04	4	5	6	5
2072,8534	-0,00145	10	9	5	4	1996,6619	0,00363	3	4	6	5
2076,1672	3,30E-04	11	10	5	4	2000,4341	0,00171	2	3	6	5
2079,4430	7,20E-04	12	11	5	4	2004,1733	0,00133	1	2	6	5
2082,6809	-4,00E-05	13	12	5	4	2007,8776	7,50E-04	0	1	6	5
2085,8841	0,00141	14	13	5	4	2018,7815	-3,60E-04	2	1	6	5
2089,0464	-9,90E-04	15	14	5	4	2022,3465	1,00E-05	3	2	6	5
2092,1752	3,10E-04	16	15	5	4	2025,8773	0,00161	4	3	6	5
2095,2658	7,50E-04	17	16	5	4	2029,3686	-7,10E-04	5	4	6	5
2098,3182	4,90E-04	18	17	5	4	2032,8274	2,00E-04	6	5	6	5
2104,3104	4,20E-04	20	19	5	4	2036,2497	4,70E-04	7	6	6	5
2107,2487	-5,90E-04	21	20	5	4	2039,6361	8,70E-04	8	7	6	5
2110,1518	0,00127	22	21	5	4	2046,3022	0,0036	10	9	6	5
2113,0159	0,00237	23	22	5	4	2049,5763	6,30E-04	11	10	6	5
2118,6228	-0,00149	25	24	5	4	2052,8182	0,00207	12	11	6	5
2121,3724	6,50E-04	26	25	5	4	2056,0181	-0,00173	13	12	6	5
2124,0798	-5,90E-04	27	26	5	4	2062,3165	1,10E-04	15	14	6	5
2126,7517	0,00162	28	27	5	4	2065,4097	7,40E-04	16	15	6	5
1886,8851	0,00101	29	30	6	5	2068,4633	-8,80E-04	17	16	6	5
1891,5031	-0,00204	28	29	6	5	2071,4831	0,00119	18	17	6	5
1896,0938	-0,00164	27	28	6	5	2074,4622	2,00E-04	19	18	6	5
1900,6571	0,00227	26	27	6	5	2077,4064	0,00209	20	19	6	5
1905,1862	0,00302	25	26	6	5	2080,3094	7,00E-04	21	20	6	5
1909,6789	-0,00145	24	25	6	5	2083,1779	0,0029	22	21	6	5
1914,1471	9,30E-04	23	24	6	5	2086,0061	0,00302	23	22	6	5
1918,5810	4,80E-04	22	23	6	5	2088,7900	-0,00279	24	23	6	5
1922,9832	-5,00E-05	21	22	6	5	2091,5438	-1,90E-04	25	24	6	5
1927,3560	0,0018	20	21	6	5	2094,2604	0,00388	26	25	6	5
1931,6949	0,00166	19	20	6	5	2099,5619	-0,0031	28	27	6	5
1936,0011	8,90E-04	18	19	6	5	2102,1620	0,00134	29	28	6	5
1940,2757	7,20E-04	17	18	6	5	1861,8017	-1,00E-05	29	30	7	6
1944,5183	9,00E-04	16	17	6	5	1866,3855	-0,00217	28	29	7	6
1948,7283	9,80E-04	15	16	6	5	1870,9426	-2,70E-04	27	28	7	6
1952,9054	8,00E-04	14	15	6	5	1875,4680	8,20E-04	26	27	7	6

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1879,9598	-6,40E-04	25	26	7	6	2050,5701	-0,00141	20	19	7	6
1884,4250	0,00249	24	25	7	6	2053,4430	0,00203	21	20	7	6
1888,8545	0,00124	23	24	7	6	2056,2771	0,00474	22	21	7	6
1893,2531	5,80E-04	22	23	7	6	2059,0621	-0,00343	23	22	7	6
1897,6188	-0,00137	21	22	7	6	2061,8206	2,70E-04	24	23	7	6
1901,9584	0,00235	20	21	7	6	2075,0108	-0,00284	29	28	7	6
1906,2610	9,90E-04	19	20	7	6	1836,7953	0,00148	29	30	8	7
1910,5327	7,80E-04	18	19	7	6	1845,8654	6,40E-04	27	28	8	7
1914,7729	0,00127	17	18	7	6	1850,3545	5,40E-04	26	27	8	7
1918,9802	0,00121	16	17	7	6	1854,8104	-0,00172	25	26	8	7
1923,1551	0,00125	15	16	7	6	1859,2389	-2,00E-04	24	25	8	7
1927,2964	3,30E-04	14	15	7	6	1863,6343	-4,50E-04	23	24	8	7
1931,4063	7,90E-04	13	14	7	6	1867,9984	-5,20E-04	22	23	8	7
1935,4827	6,90E-04	12	13	7	6	1872,3325	0,00102	21	22	8	7
1939,5267	0,00127	11	12	7	6	1876,6335	0,00122	20	21	8	7
1943,5361	4,70E-04	10	11	7	6	1880,9023	0,00113	19	20	8	7
1947,5133	8,40E-04	9	10	7	6	1885,1390	0,001	18	19	8	7
1951,4565	7,30E-04	8	9	7	6	1889,3439	0,00126	17	18	8	7
1955,3662	7,80E-04	7	8	7	6	1893,5163	0,00137	16	17	8	7
1959,2423	0,00105	6	7	7	6	1897,6575	0,00277	15	16	8	7
1963,0838	6,70E-04	5	6	7	6	1901,7622	3,10E-04	14	15	8	7
1966,8916	7,00E-04	4	5	7	6	1905,8370	7,20E-04	13	14	8	7
1970,6663	0,00187	3	4	7	6	1909,8788	0,00107	12	13	8	7
1974,4064	0,00285	2	3	7	6	1913,8866	4,90E-04	11	12	8	7
1978,1080	-1,30E-04	1	2	7	6	1917,8638	0,00253	10	11	8	7
1981,7798	0,00178	0	1	7	6	1921,8039	8,30E-04	9	10	8	7
1992,5772	-8,70E-04	2	1	7	6	1925,7119	5,50E-04	8	9	8	7
1996,1091	0,00138	3	2	7	6	1929,5863	3,30E-04	7	8	8	7
1999,6021	1,60E-04	4	3	7	6	1933,4277	9,10E-04	6	7	8	7
2003,0593	-0,0013	5	4	7	6	1937,2343	6,50E-04	5	6	8	7
2006,4841	5,70E-04	6	5	7	6	1941,0076	0,00119	4	5	8	7
2009,8713	7,10E-04	7	6	7	6	1944,7467	0,00177	3	4	8	7
2013,2229	0,00126	8	7	7	6	1948,4514	0,00235	2	3	8	7
2016,5374	8,70E-04	9	8	7	6	1952,1210	0,00236	1	2	8	7
2019,8159	7,90E-04	10	9	7	6	1955,7506	-0,00294	0	1	8	7
2023,0584	0,00117	11	10	7	6	1962,9181	-5,80E-04	1	0	8	7
2026,2637	9,50E-04	12	11	7	6	1966,4489	2,60E-04	2	1	8	7
2029,4340	0,00249	13	12	7	6	1969,9434	8,00E-05	3	2	8	7
2032,5626	-7,80E-04	14	13	7	6	1976,8269	6,30E-04	5	4	8	7
2035,6591	8,90E-04	15	14	7	6	1980,2149	6,50E-04	6	5	8	7
2041,7388	0,00267	17	16	7	6	1983,5676	0,00124	7	6	8	7
2044,7180	-9,40E-04	18	17	7	6	1986,8808	-0,00166	8	7	8	7
2047,6660	0,00189	19	18	7	6	1990,1625	1,00E-04	9	8	8	7

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1993,4072	0,00116	10	9	8	7	1926,2067	0,0016	1	2	9	8
1996,6114	-0,00183	11	10	8	7	1936,8980	-0,00221	1	0	9	8
1999,7845	6,90E-04	12	11	8	7	1940,3975	0,00231	2	1	9	8
2002,9170	-6,50E-04	13	12	8	7	1943,8540	-9,10E-04	3	2	9	8
2006,0148	2,10E-04	14	13	8	7	1947,2800	7,90E-04	4	3	9	8
2009,0755	0,001	15	14	8	7	1950,6686	6,50E-04	5	4	9	8
2012,0975	2,90E-04	16	15	8	7	1954,0219	9,30E-04	6	5	9	8
2015,0840	0,00141	17	16	8	7	1957,3412	0,00306	7	6	9	8
2018,0312	7,10E-04	18	17	8	7	1960,6200	7,00E-04	8	7	9	8
2020,9404	-3,50E-04	19	18	8	7	1963,8649	5,90E-04	9	8	9	8
2023,8142	9,70E-04	20	19	8	7	1967,0747	0,00169	10	9	9	8
2026,6522	0,0044	21	20	8	7	1970,2474	0,00213	11	10	9	8
2032,1986	-0,00395	23	22	8	7	1973,3794	-0,00154	12	11	9	8
2037,6017	-0,00214	25	24	8	7	1976,4800	1,40E-04	13	12	9	8
2040,2426	-0,00396	26	25	8	7	1979,5433	0,00141	14	13	9	8
1811,8611	-8,90E-04	29	30	9	8	1982,5649	-0,00198	15	14	9	8
1816,3826	0,00489	28	29	9	8	1985,5554	7,10E-04	16	15	9	8
1820,8632	5,10E-04	27	28	9	8	1988,5064	0,00124	17	16	9	8
1825,3164	-3,70E-04	26	27	9	8	1991,4176	-5,60E-04	18	17	9	8
1829,7421	0,00227	25	26	9	8	1994,2946	0,00107	19	18	9	8
1834,1323	6,00E-04	24	25	9	8	1997,1329	0,00178	20	19	9	8
1838,4919	-3,40E-04	23	24	9	8	1999,9306	-1,90E-04	21	20	9	8
1842,8191	-0,00222	22	23	9	8	2002,6891	-0,00329	22	21	9	8
1847,1199	0,00112	21	22	9	8	2005,4152	-5,70E-04	23	22	9	8
1851,3859	0,00141	20	21	9	8	2008,1008	1,00E-05	24	23	9	8
1855,6193	0,00101	19	20	9	8	2010,7455	-0,00179	25	24	9	8
1859,8212	0,00115	18	19	9	8	2020,9404	-0,00482	29	28	9	8
1863,9911	0,00149	17	18	9	8	1787,0109	0,00315	29	30	10	9
1868,1283	0,00147	16	17	9	8	1791,4891	7,60E-04	28	29	10	9
1872,2323	7,40E-04	15	16	9	8	1795,9383	1,10E-04	27	28	10	9
1876,3044	7,30E-04	14	15	9	8	1804,7473	0,00222	25	26	10	9
1880,3440	0,00101	13	14	9	8	1809,1017	-1,30E-04	24	25	10	9
1884,3499	5,00E-04	12	13	9	8	1813,4255	-0,00177	23	24	10	9
1888,3234	6,70E-04	11	12	9	8	1817,7236	0,00236	22	23	10	9
1892,2639	0,00104	10	11	9	8	1821,9845	9,00E-04	21	22	10	9
1896,1705	8,90E-04	9	10	9	8	1826,2150	7,90E-04	20	21	10	9
1900,0436	7,30E-04	8	9	9	8	1830,4132	2,70E-04	19	20	10	9
1903,8832	7,40E-04	7	8	9	8	1834,5799	3,10E-04	18	19	10	9
1907,6893	0,00104	6	7	9	8	1838,7158	0,00173	17	18	10	9
1911,4591	-0,00101	5	6	9	8	1842,8191	0,00288	16	17	10	9
1915,1998	0,00193	4	5	9	8	1846,8873	0,00142	15	16	10	9
1918,9019	5,20E-04	3	4	9	8	1850,9237	7,70E-04	14	15	10	9
1922,5709	3,90E-04	2	3	9	8	1854,9282	0,00101	13	14	10	9

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1858,8993	7,50E-04	12	13	10	9	1801,1238	9,20E-04	20	21	11	10
1862,8378	9,60E-04	11	12	10	9	1805,2876	0,0011	19	20	11	10
1866,7427	7,80E-04	10	11	10	9	1809,4194	0,00132	18	19	11	10
1870,6143	6,60E-04	9	10	10	9	1813,5189	0,00143	17	18	11	10
1874,4519	4,00E-05	8	9	10	9	1817,5846	6,00E-05	16	17	11	10
1878,2575	0,00106	7	8	10	9	1821,6201	9,60E-04	15	16	11	10
1882,0278	5,80E-04	6	7	10	9	1825,6218	6,90E-04	14	15	11	10
1885,7642	1,40E-04	5	6	10	9	1829,5908	4,80E-04	13	14	11	10
1889,4684	0,00159	4	5	10	9	1833,5267	8,00E-05	12	13	11	10
1893,1356	2,70E-04	3	4	10	9	1837,4306	7,30E-04	11	12	11	10
1896,7705	0,00104	2	3	10	9	1841,3004	4,90E-04	10	11	11	10
1900,3697	6,30E-04	1	2	10	9	1845,1371	5,00E-04	9	10	11	10
1903,9385	0,0045	0	1	10	9	1848,9400	2,10E-04	8	9	11	10
1910,9626	0,00335	1	0	10	9	1852,7103	9,50E-04	7	8	11	10
1914,4186	-6,70E-04	2	1	10	9	1856,4468	0,00169	6	7	11	10
1921,2326	-7,80E-04	4	3	10	9	1860,1483	0,00135	5	6	11	10
1924,5877	5,40E-04	5	4	10	9	1863,8152	5,00E-04	4	5	11	10
1927,9068	0,00155	6	5	10	9	1867,4487	4,80E-04	3	4	11	10
1931,1866	-8,80E-04	7	6	10	9	1871,0484	0,00104	2	3	11	10
1934,4340	2,90E-04	8	7	10	9	1874,6154	0,00341	1	2	11	10
1937,6448	0,00101	9	8	10	9	1888,5198	-0,00252	2	1	11	10
1940,8184	8,30E-04	10	9	10	9	1891,9113	-8,30E-04	3	2	11	10
1943,9525	-0,00242	11	10	10	9	1895,2675	9,70E-04	4	3	11	10
1947,0557	3,00E-05	12	11	10	9	1898,5867	0,00132	5	4	11	10
1950,1202	5,20E-04	13	12	10	9	1901,8688	2,70E-04	6	5	11	10
1953,1500	0,00319	14	13	10	9	1905,1151	-7,30E-04	7	6	11	10
1956,1376	6,90E-04	15	14	10	9	1908,3281	9,60E-04	8	7	11	10
1959,0877	-0,00212	16	15	10	9	1914,6400	-0,00118	10	9	11	10
1962,0078	0,00239	17	16	10	9	1917,7426	-0,00102	11	10	11	10
1964,8789	-0,00461	18	17	10	9	1920,8096	1,30E-04	12	11	11	10
1967,7251	0,0011	19	18	10	9	1923,8399	0,00131	13	12	11	10
1970,5286	0,00189	20	19	10	9	1926,8303	-5,20E-04	14	13	11	10
1973,2955	0,004	21	20	10	9	1929,7860	-3,00E-05	15	14	11	10
1976,0174	-8,30E-04	22	21	10	9	1932,7049	8,40E-04	16	15	11	10
1978,7102	0,00347	23	22	10	9	1935,5873	0,00253	17	16	11	10
1996,4432	-6,40E-04	30	29	10	9	1938,4275	-5,00E-04	18	17	11	10
1762,2343	0,00177	29	30	11	10	1941,2375	0,00389	19	18	11	10
1771,0935	8,20E-04	27	28	11	10	1946,7316	2,10E-04	21	20	11	10
1775,4789	0,00239	26	27	11	10	1949,4259	0,00265	22	21	11	10
1779,8297	3,90E-04	25	26	11	10	1954,6891	-0,00308	24	23	11	10
1784,1529	0,00196	24	25	11	10	1959,8046	-0,00249	26	25	11	10
1788,4461	0,00484	23	24	11	10	1741,9470	-9,10E-04	28	29	12	11
1796,9289	0,00153	21	22	11	10	1750,6792	0,00304	26	27	12	11

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1754,9971	0,00327	25	26	12	11	1917,5529	-0,00381	20	19	12	11
1759,2791	-0,00123	24	25	12	11	1920,2512	-5,80E-04	21	20	12	11
1763,5363	7,80E-04	23	24	12	11	1922,9050	-0,00379	22	21	12	11
1767,7610	0,00173	22	23	12	11	1925,5238	-0,00379	23	22	12	11
1771,9524	9,90E-04	21	22	12	11	1930,6487	-0,00127	25	24	12	11
1776,1129	0,00108	20	21	12	11	1940,4260	-0,00367	29	28	12	11
1780,2420	0,00166	19	20	12	11	1712,9237	-4,70E-04	29	30	13	12
1784,3382	0,00137	18	19	12	11	1721,6396	-0,00413	27	28	13	12
1788,4006	-5,40E-04	17	18	12	11	1725,9545	-0,00278	26	27	13	12
1792,4342	0,00107	16	17	12	11	1730,2374	-0,00241	25	26	13	12
1796,4325	-1,50E-04	15	16	12	11	1738,7133	0,00205	23	24	13	12
1800,4019	0,00234	14	15	12	11	1742,9015	0,00162	22	23	13	12
1804,3343	5,90E-04	13	14	12	11	1747,0582	0,00129	21	22	13	12
1808,2358	8,40E-04	12	13	12	11	1751,1819	-3,20E-04	20	21	13	12
1812,1040	8,40E-04	11	12	12	11	1755,2755	-1,40E-04	19	20	13	12
1815,9387	5,40E-04	10	11	12	11	1759,3385	0,00147	18	19	13	12
1819,7405	6,80E-04	9	10	12	11	1763,3671	8,40E-04	17	18	13	12
1823,5093	0,00131	8	9	12	11	1767,364	8,30E-04	16	17	13	12
1827,2432	6,70E-04	7	8	12	11	1771,3258	-0,00183	15	16	13	12
1830,9445	0,00121	6	7	12	11	1775,2602	7,30E-04	14	15	13	12
1834,6125	0,00239	5	6	12	11	1779,1595	9,30E-04	13	14	13	12
1838,2426	-2,70E-04	4	5	12	11	1783,0256	8,30E-04	12	13	13	12
1841,8421	7,00E-04	3	4	12	11	1786,8586	6,70E-04	11	12	13	12
1845,4066	0,00104	2	3	12	11	1790,6586	7,10E-04	10	11	13	12
1848,9400	0,00479	1	2	12	11	1794,4255	9,70E-04	9	10	13	12
1852,4283	-0,00189	0	1	12	11	1798,1591	0,00142	8	9	13	12
1859,3179	0,00231	1	0	12	11	1801,8586	0,0014	7	8	13	12
1866,0615	9,30E-04	3	2	12	11	1805,5246	0,00165	6	7	13	12
1869,3796	-4,30E-04	4	3	12	11	1809,1558	0,00102	5	6	13	12
1872,6659	0,00195	5	4	12	11	1812,7537	0,00116	4	5	13	12
1875,9136	0,00142	6	5	12	11	1816,3165	4,10E-04	3	4	13	12
1879,1257	0,00114	7	6	12	11	1819,8485	0,00323	2	3	13	12
1882,3031	0,00215	8	7	12	11	1823,3403	3,50E-04	1	2	13	12
1885,4424	0,00119	9	8	12	11	1826,7953	-0,00467	0	1	13	12
1888,5495	0,00432	10	9	12	11	1836,9709	2,70E-04	2	1	13	12
1891,6137	9,80E-04	11	10	12	11	1840,2908	2,40E-04	3	2	13	12
1894,6445	8,20E-04	12	11	12	11	1843,5772	0,00211	4	3	13	12
1900,5958	5,30E-04	14	13	12	11	1846,8190	-0,00509	5	4	13	12
1903,5164	8,00E-04	15	14	12	11	1850,0367	-6,90E-04	6	5	13	12
1906,4017	0,00294	16	15	12	11	1853,2156	7,30E-04	7	6	13	12
1909,2452	6,00E-04	17	16	12	11	1856,3547	-0,00166	8	7	13	12
1912,0541	0,00113	18	17	12	11	1859,4618	9,00E-05	9	8	13	12
1914,8274	0,00368	19	18	12	11	1862,5303	-4,90E-04	10	9	13	12

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1865,5639	4,50E-04	11	10	13	12	1830,4952	7,80E-04	8	7	14	13
1868,5607	0,00118	12	11	13	12	1836,5983	-7,80E-04	10	9	14	13
1871,5195	6,20E-04	13	12	13	12	1839,5978	9,50E-04	11	10	14	13
1877,3280	0,00117	15	14	13	12	1842,5569	-0,00115	12	11	14	13
1880,1754	2,80E-04	16	15	13	12	1845,4832	6,60E-04	13	12	14	13
1882,9872	0,0011	17	16	13	12	1848,3706	4,40E-04	14	13	14	13
1885,7642	0,00458	18	17	13	12	1851,2206	-1,60E-04	15	14	14	13
1888,4926	-0,00292	19	18	13	12	1854,0341	-1,00E-04	16	15	14	13
1891,1915	-0,00216	20	19	13	12	1856,8106	2,70E-04	17	16	14	13
1893,8577	0,00381	21	20	13	12	1859,5523	0,0033	18	17	14	13
1896,4787	0,00264	22	21	13	12	1862,2494	-6,60E-04	19	18	14	13
1899,0642	0,00418	23	22	13	12	1864,9145	0,00114	20	19	14	13
1911,4045	0,00299	28	27	13	12	1870,1220	-0,00408	22	21	14	13
1697,0459	0,00343	27	28	14	13	1875,1847	-0,00129	24	23	14	13
1701,3190	-0,00187	26	27	14	13	1880,0901	-0,00179	26	25	14	13
1705,5655	-0,00277	25	26	14	13	1884,8382	-0,00438	28	27	14	13
1709,7877	0,00318	24	25	14	13	1889,4370	1,40E-04	30	29	14	13
1718,1234	4,20E-04	22	23	14	13	1663,9408	-0,00475	29	30	15	14
1722,2455	5,90E-04	21	22	14	13	1672,5226	-0,00192	27	28	15	14
1726,3378	0,00269	20	21	14	13	1676,7669	-8,90E-04	26	27	15	14
1730,3954	0,00197	19	20	14	13	1680,9819	0,00184	25	26	15	14
1738,4143	4,10E-04	17	18	14	13	1689,3128	0,00178	23	24	15	14
1742,3763	5,70E-04	16	17	14	13	1693,4301	6,80E-04	22	23	15	14
1746,3031	-0,00201	15	16	14	13	1697,5159	-3,40E-04	21	22	15	14
1750,2019	0	14	15	14	13	1701,5722	8,50E-04	20	21	15	14
1754,0661	1,50E-04	13	14	14	13	1705,5973	0,00272	19	20	15	14
1757,8974	3,00E-04	12	13	14	13	1709,5854	-4,10E-04	18	19	15	14
1761,6968	0,00158	11	12	14	13	1713,5461	0,00122	17	18	15	14
1765,4611	9,40E-04	10	11	14	13	1717,4697	-0,00195	16	17	15	14
1769,1927	9,30E-04	9	10	14	13	1721,3665	5,20E-04	15	16	15	14
1772,8867	-0,0032	8	9	14	13	1725,2280	2,80E-04	14	15	15	14
1776,5550	5,80E-04	7	8	14	13	1729,0573	5,90E-04	13	14	15	14
1780,1859	7,30E-04	6	7	14	13	1732,8545	0,00167	12	13	15	14
1783,7832	0,0012	5	6	14	13	1736,6172	0,00128	11	12	15	14
1787,3462	0,00142	4	5	14	13	1740,3470	0,00117	10	11	15	14
1794,3680	4,40E-04	2	3	14	13	1744,0427	2,70E-04	9	10	15	14
1797,8267	-5,70E-04	1	2	14	13	1747,7075	0,00195	8	9	15	14
1807,9992	0,00127	1	0	14	13	1751,3403	0,00523	7	8	15	14
1811,3165	-0,00167	2	1	14	13	1754,9303	-5,20E-04	6	7	15	14
1814,6024	-7,70E-04	3	2	14	13	1758,4937	0,00103	5	6	15	14
1821,0678	9,40E-04	5	4	14	13	1762,0196	-8,70E-04	4	5	15	14
1824,2461	8,40E-04	6	5	14	13	1765,5159	0,00183	3	4	15	14
1827,3892	0,00138	7	6	14	13	1768,9718	-0,00152	2	3	15	14

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1772,4009	0,00283	1	2	15	14	1722,6066	0,00128	8	9	16	15
1782,4623	-0,0016	1	0	15	14	1726,2006	7,60E-04	7	8	16	15
1785,7490	-2,10E-04	2	1	15	14	1729,7618	0,00119	6	7	16	15
1789,0023	0,00301	3	2	15	14	1736,7814	0,00109	4	5	16	15
1792,2156	0,00162	4	3	15	14	1740,2342	-0,00474	3	4	16	15
1795,3956	0,00245	5	4	15	14	1743,6594	-0,00384	2	3	16	15
1798,5377	0,00105	6	5	15	14	1750,4110	0,00279	0	1	16	15
1801,6445	1,80E-04	7	6	15	14	1760,2663	0,00185	2	1	16	15
1804,7144	-0,00162	8	7	15	14	1763,4814	0,00179	3	2	16	15
1807,7513	-3,00E-04	9	8	15	14	1766,6566	-0,0028	4	3	16	15
1810,7525	0,00158	10	9	15	14	1769,8040	3,40E-04	5	4	16	15
1813,7168	0,00298	11	10	15	14	1775,9833	-0,00174	7	6	16	15
1816,6413	0,00115	12	11	15	14	1779,0212	-6,50E-04	8	7	16	15
1819,5300	2,30E-04	13	12	15	14	1782,0224	-1,60E-04	9	8	16	15
1822,3837	0,00117	14	13	15	14	1784,9902	0,0032	10	9	16	15
1827,9790	0,00213	16	15	15	14	1787,9152	1,70E-04	11	10	16	15
1830,7189	7,50E-04	17	16	15	14	1790,8066	1,10E-04	12	11	16	15
1833,4173	-0,00468	18	17	15	14	1793,6617	4,40E-04	13	12	16	15
1836,0872	-0,001	19	18	15	14	1799,2596	-4,60E-04	15	14	16	15
1838,7158	-8,60E-04	20	19	15	14	1802,0065	0,0027	16	15	16	15
1846,3695	-0,00453	23	22	15	14	1804,7144	0,00416	17	16	16	15
1851,2895	0,00207	25	24	15	14	1807,3815	0,00228	18	17	16	15
1853,6862	-3,00E-05	26	25	15	14	1810,0127	0,0021	19	18	16	15
1856,0450	-0,00122	27	26	15	14	1812,6003	-0,00393	20	19	16	15
1862,8940	0,0021	30	29	15	14	1815,1597	-2,60E-04	21	20	16	15
1639,5784	-0,00341	29	30	16	15	1817,6738	-0,00383	22	21	16	15
1656,4761	3,00E-04	25	26	16	15	1820,1605	0,00339	23	22	16	15
1660,6242	0,00239	24	25	16	15	1822,5988	5,70E-04	24	23	16	15
1664,7361	-4,40E-04	23	24	16	15	1829,6928	0,00281	27	26	16	15
1668,8244	0,00456	22	23	16	15	1615,3039	0,00153	29	30	17	16
1672,8721	5,20E-04	21	22	16	15	1619,5338	-0,00315	28	29	17	16
1676,8938	0,00221	20	21	16	15	1632,0517	-0,00422	25	26	17	16
1680,8821	0,00235	19	20	16	15	1640,2458	-6,70E-04	23	24	17	16
1684,8349	-0,00101	18	19	16	15	1644,2925	-0,00218	22	23	17	16
1688,7605	5,90E-04	17	18	16	15	1648,3074	-0,00394	21	22	17	16
1692,6530	0,00137	16	17	16	15	1656,2470	-0,00238	19	20	17	16
1696,5103	-6,00E-04	15	16	16	15	1660,1677	-0,00277	18	19	17	16
1700,3414	0,00381	14	15	16	15	1664,0587	-7,30E-04	17	18	17	16
1704,1333	0,00174	13	14	16	15	1667,9166	5,10E-04	16	17	17	16
1707,8919	-7,40E-04	12	13	16	15	1671,7386	-0,00173	15	16	17	16
1711,6231	0,00239	11	12	16	15	1679,2909	-3,00E-05	13	14	17	16
1715,3141	-0,00151	10	11	16	15	1683,0209	0,0039	12	13	17	16
1718,9757	-0,00149	9	10	16	15	1686,7109	8,50E-04	11	12	17	16



Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1690,3689	-0,00105	10	11	17	16	1650,8107	-4,10E-04	14	15	18	17
1693,9982	0,00166	9	10	17	16	1658,2273	0,0012	12	13	18	17
1697,5893	-3,70E-04	8	9	17	16	1661,8845	3,40E-04	11	12	18	17
1704,6719	-0,0031	6	7	17	16	1665,5111	0,00203	10	11	18	17
1708,1673	3,90E-04	5	6	17	16	1669,1039	0,00323	9	10	18	17
1711,6231	-0,00167	4	5	17	16	1672,6593	4,70E-04	8	9	18	17
1718,4410	0,00321	2	3	17	16	1676,1828	-6,00E-04	7	8	18	17
1721,7921	-5,50E-04	1	2	17	16	1679,6758	0,00157	6	7	18	17
1725,1083	-0,00459	0	1	17	16	1686,5491	-0,00498	4	5	18	17
1738,0471	0,00249	3	2	17	16	1689,9447	0,00189	3	4	18	17
1741,1899	4,10E-04	4	3	17	16	1693,2947	-0,00251	2	3	18	17
1744,2976	-0,00126	5	4	17	16	1709,5485	-6,60E-04	2	1	18	17
1747,3703	-0,00226	6	5	17	16	1712,6947	1,90E-04	3	2	18	17
1750,4110	5,50E-04	7	6	17	16	1715,8056	0,00111	4	3	18	17
1753,4130	6,10E-04	8	7	17	16	1718,8743	-0,00466	5	4	18	17
1756,3782	-1,00E-05	9	8	17	16	1721,9172	-5,70E-04	6	5	18	17
1759,3082	4,20E-04	10	9	17	16	1724,9189	-0,00188	7	6	18	17
1762,2003	-6,40E-04	11	10	17	16	1727,8888	9,70E-04	8	7	18	17
1765,0580	4,60E-04	12	11	17	16	1730,8192	4,30E-04	9	8	18	17
1767,8806	0,00316	13	12	17	16	1733,7146	0,00113	10	9	18	17
1770,6613	8,10E-04	14	13	17	16	1739,3936	1,00E-04	12	11	18	17
1773,4094	0,00286	15	14	17	16	1742,1779	-6,40E-04	13	12	18	17
1776,1129	-0,00253	16	15	17	16	1744,9282	0,00148	14	13	18	17
1778,7852	-0,00182	17	16	17	16	1747,6356	-0,00231	15	14	18	17
1781,4232	0,00204	18	17	17	16	1750,3147	0,00275	16	15	18	17
1784,0156	-0,0021	19	18	17	16	1752,9484	-2,90E-04	17	16	18	17
1786,5780	0,00151	20	19	17	16	1755,5505	0,00253	18	17	18	17
1789,1004	0,00302	21	20	17	16	1758,1071	-0,00256	19	18	18	17
1791,5836	0,00339	22	21	17	16	1760,6357	0,0021	20	19	18	17
1794,0223	-0,00255	23	22	17	16	1763,1159	-0,00374	21	20	18	17
1796,4325	0,00136	24	23	17	16	1765,5710	0,00337	22	21	18	17
1801,1238	-0,00425	26	25	17	16	1770,3482	-6,50E-04	24	23	18	17
1810,0535	-0,00155	30	29	17	16	1777,2322	6,60E-04	27	26	18	17
1591,1046	-0,00277	29	30	18	17	1566,9978	0,00112	29	30	19	18
1599,4801	0,00445	27	28	18	17	1575,2932	-0,00163	27	28	19	18
1603,6187	0,0051	26	27	18	17	1583,4704	7,70E-04	25	26	19	18
1611,8010	0,0046	24	25	18	17	1587,5080	-0,00242	24	25	19	18
1619,8551	9,80E-04	22	23	18	17	1591,5195	-4,40E-04	23	24	19	18
1623,8316	-0,00411	21	22	18	17	1595,5004	0,00235	22	23	19	18
1631,7036	-5,00E-05	19	20	18	17	1599,4458	0,00119	21	22	19	18
1639,4413	-0,00232	17	18	18	17	1603,3569	-0,00257	20	21	19	18
1643,2671	0,00184	16	17	18	17	1607,2457	0,00321	19	20	19	18
1647,0538	-6,70E-04	15	16	18	17	1611,0967	0,00318	18	19	19	18

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1614,9163	0,00387	17	18	19	18	1590,4626	-0,00289	17	18	20	19
1618,6971	-0,00195	16	17	19	18	1594,2215	0,00437	16	17	20	19
1622,4580	0,00474	15	16	19	18	1597,9367	3,40E-04	15	16	20	19
1626,1755	5,90E-04	14	15	19	18	1601,6231	7,00E-05	14	15	20	19
1629,8647	8,60E-04	13	14	19	18	1605,2774	4,10E-04	13	14	20	19
1633,5214	0,00148	12	13	19	18	1608,8998	0,0017	12	13	20	19
1637,1456	0,0026	11	12	19	18	1612,4893	0,00308	11	12	20	19
1640,7328	-1,30E-04	10	11	19	18	1619,5637	8,30E-04	9	10	20	19
1644,2925	0,00294	9	10	19	18	1623,0554	0,00429	8	9	20	19
1647,8097	-0,00305	8	9	19	18	1626,5079	0,00212	7	8	20	19
1651,3051	0,00274	7	8	19	18	1629,9285	0,00179	6	7	20	19
1658,1780	-0,00223	5	6	19	18	1633,3114	-0,00237	5	6	20	19
1661,5693	0,0011	4	5	19	18	1636,6621	-0,0047	4	5	20	19
1664,9247	0,00271	3	4	19	18	1639,9821	-0,00357	3	4	20	19
1674,7772	3,50E-04	0	1	19	18	1643,2671	-0,00312	2	3	20	19
1681,1691	-0,00408	1	0	19	18	1649,7349	-8,70E-04	0	1	20	19
1687,4298	5,30E-04	3	2	19	18	1656,0607	-0,00158	1	0	20	19
1693,5487	0,00478	5	4	19	18	1659,1693	-0,00372	2	1	20	19
1696,5482	3,50E-04	6	5	19	18	1662,2485	-5,00E-05	3	2	20	19
1702,4484	2,70E-04	8	7	19	18	1665,2900	0,00126	4	3	20	19
1705,3459	0,0017	9	8	19	18	1671,2672	0,00476	6	5	20	19
1708,2061	0,00209	10	9	19	18	1674,1955	-1,70E-04	7	6	20	19
1711,0291	0,00167	11	10	19	18	1677,0914	-0,00155	8	7	20	19
1713,8159	0,00161	12	11	19	18	1679,9554	0,00127	9	8	20	19
1716,5678	0,00334	13	12	19	18	1682,7820	0,00295	10	9	20	19
1719,2765	-0,00128	14	13	19	18	1685,5664	-0,00118	11	10	20	19
1721,9553	0,0012	15	14	19	18	1688,3209	0,00133	12	11	20	19
1724,5923	-9,70E-04	16	15	19	18	1691,0354	5,50E-04	13	12	20	19
1727,1935	-0,00164	17	16	19	18	1693,7180	0,00471	14	13	20	19
1729,7618	0,00223	18	17	19	18	1698,9632	0,00419	16	15	20	19
1732,2879	0,00151	19	18	19	18	1704,0554	-1,30E-04	18	17	20	19
1737,2265	-1,30E-04	21	20	19	18	1709,0054	0,00375	20	19	20	19
1742,0156	9,30E-04	23	22	19	18	1711,4146	-0,00334	21	20	20	19
1744,3486	-0,00264	24	23	19	18	1716,1389	0,00272	23	22	20	19
1751,1245	-0,00479	27	26	19	18	1718,4410	0,00316	24	23	20	19
1753,3124	0,00148	28	27	19	18	1720,6961	-0,00489	25	24	20	19
1542,9721	0,00224	29	30	20	19	1722,9269	0,00142	26	25	20	19
1547,0960	-0,00326	28	29	20	19	1725,1083	-0,00286	27	26	20	19
1555,2650	-8,20E-04	26	27	20	19	1547,0330	-0,00455	22	23	21	20
1571,2236	-0,00249	22	23	20	19	1550,9110	-0,00314	21	22	21	20
1575,1407	0,00305	21	22	20	19	1562,3502	-0,00297	18	19	21	20
1582,8662	6,70E-04	19	20	20	19	1566,1024	2,70E-04	17	18	21	20
1586,6811	-4,70E-04	18	19	20	19	1569,8177	-0,00112	16	17	21	20

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1573,5060	0,0029	15	16	21	20	1580,5126	-0,00154	6	7	22	21
1577,1546	-2,10E-04	14	15	21	20	1583,8321	7,40E-04	5	6	22	21
1580,7724	-0,00143	13	14	21	20	1593,5740	-0,00433	2	3	22	21
1584,3597	-3,00E-04	12	13	21	20	1596,7565	-0,00209	1	2	22	21
1587,9142	0,00103	11	12	21	20	1609,1276	-0,00445	2	1	22	21
1591,4337	5,00E-04	10	11	21	20	1615,1093	0,00115	4	3	22	21
1594,9209	9,50E-04	9	10	21	20	1623,8030	-0,00265	7	6	22	21
1598,3718	-0,00146	8	9	21	20	1626,6374	0,00429	8	7	22	21
1601,7953	0,0023	7	8	21	20	1632,1806	0,00101	10	9	22	21
1605,1802	0,0012	6	7	21	20	1645,4077	0,00159	15	14	22	21
1608,5363	0,00516	5	6	21	20	1650,4391	0,00142	17	16	22	21
1611,8527	0,00345	4	5	21	20	1657,7051	0,00139	20	19	22	21
1640,1543	-0,0027	4	3	21	20	1660,0476	-0,0025	21	20	22	21
1643,1215	-0,00528	5	4	21	20	1662,3591	6,80E-04	22	21	22	21
1646,0656	0,00469	6	5	21	20	1664,6265	-0,00201	23	22	22	21
1648,9571	-0,00213	7	6	21	20	1669,0552	0,00176	25	24	22	21
1657,4394	0,00148	10	9	21	20	1673,3208	-0,00285	27	26	22	21
1660,1964	0,00485	11	10	21	20	1677,4350	-0,00291	29	28	22	21
1665,5888	-2,10E-04	13	12	21	20	1471,3788	-0,00453	29	30	23	22
1668,2295	-0,00304	14	13	21	20	1491,1940	-0,00411	24	25	23	22
1670,8382	-8,80E-04	15	14	21	20	1495,0679	5,00E-05	23	24	23	22
1673,4096	0,00114	16	15	21	20	1498,9070	8,20E-04	22	23	23	22
1675,9405	-3,00E-05	17	16	21	20	1510,2268	-0,00452	19	20	23	22
1678,4376	0,00244	18	17	21	20	1524,8826	-5,10E-04	15	16	23	22
1683,3112	-2,40E-04	20	19	21	20	1545,8783	-0,00284	9	10	23	22
1685,6921	-6,90E-04	21	20	21	20	1549,2643	-3,50E-04	8	9	23	22
1688,0349	-0,00119	22	21	21	20	1555,9310	2,20E-04	6	7	23	22
1690,3380	-0,00317	23	22	21	20	1565,6727	-0,00285	3	4	23	22
1701,2849	-0,00317	28	27	21	20	1575,1079	-0,00358	0	1	23	22
1495,1635	-9,70E-04	29	30	22	21	1581,2261	-0,00244	1	0	23	22
1499,2247	7,40E-04	28	29	22	21	1595,9054	3,40E-04	6	5	23	22
1515,1519	-0,00167	24	25	22	21	1598,7316	-0,00195	7	6	23	22
1519,0594	0,00122	23	24	22	21	1601,5279	0,00182	8	7	23	22
1530,5830	-1,00E-05	20	21	22	21	1604,2849	0,00239	9	8	23	22
1534,3574	-0,00375	19	20	22	21	1607,0032	5,30E-04	10	9	23	22
1545,4995	-0,00361	16	17	22	21	1609,6889	0,00246	11	10	23	22
1549,1538	0,00133	15	16	22	21	1612,3368	0,00316	12	11	23	22
1552,7719	0,00263	14	15	22	21	1614,9489	0,00477	13	12	23	22
1556,3542	8,40E-04	13	14	22	21	1622,5586	0,00475	16	15	23	22
1563,4213	-0,00157	11	12	22	21	1632,1806	0,00359	20	19	23	22
1566,9045	-0,00349	10	11	22	21	1636,7631	0,00145	22	21	23	22
1570,3560	-0,00382	9	10	22	21	1649,5890	-0,00412	28	27	23	22
1573,7786	3,80E-04	8	9	22	21	1447,6782	-0,00267	29	30	24	23

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1455,6333	0,00344	27	28	24	23	1551,5522	0,00328	8	7	25	24
1474,9612	0,00105	22	23	24	23	1562,0767	2,30E-04	12	11	25	24
1482,4763	0,00391	20	21	24	23	1579,0793	-3,60E-04	19	18	25	24
1486,1839	0,00308	19	20	24	23	1581,3553	-0,0034	20	19	25	24
1493,4993	-0,00229	17	18	24	23	1602,0369	8,10E-04	30	29	25	24
1497,1094	-0,00424	16	17	24	23	1400,4995	-0,00292	29	30	26	25
1500,6963	0,00302	15	16	24	23	1404,4187	-0,0043	28	29	26	25
1511,2386	0,00238	12	13	24	23	1415,9980	-0,00182	25	26	26	25
1514,6817	-0,00303	11	12	24	23	1423,5667	0,00449	23	24	26	25
1531,4305	0,0033	6	7	24	23	1445,4910	5,20E-04	17	18	26	25
1537,8912	0,00313	4	5	24	23	1449,0306	-0,00241	16	17	26	25
1541,0628	-0,00451	3	4	24	23	1452,5427	-4,10E-04	15	16	26	25
1544,2149	0,00266	2	3	24	23	1469,5988	-0,00319	10	11	26	25
1559,4181	0,00122	2	1	24	23	1485,8300	0,00187	5	6	26	25
1562,3502	-0,00256	3	2	24	23	1501,2021	-0,00104	0	1	26	25
1573,7392	-0,00197	7	6	24	23	1507,1064	-0,00428	1	0	26	25
1579,2152	-0,005	9	8	24	23	1512,8772	-6,80E-04	3	2	26	25
1581,9008	-0,00459	10	9	24	23	1523,9832	-0,00323	7	6	26	25
1587,1691	0,00272	12	11	24	23	1564,6525	-0,00337	24	23	26	25
1592,2777	-0,0028	14	13	24	23	1570,6986	0,00208	27	26	26	25
1594,7846	0,0025	15	14	24	23	1384,7661	0,00411	27	28	27	26
1597,2496	0,00307	16	15	24	23	1392,3811	0,00116	25	26	27	26
1602,0653	0,00205	18	17	24	23	1414,4795	-0,00183	19	20	27	26
1604,4194	0,00416	19	18	24	23	1432,0204	4,50E-04	14	15	27	26
1606,7333	0,00386	20	19	24	23	1455,1982	0,00342	7	8	27	26
1611,2423	-0,00158	22	21	24	23	1458,3702	-0,00139	6	7	27	26
1613,4468	0,00299	23	22	24	23	1461,5157	0,00122	5	6	27	26
1619,8163	0,00371	26	25	24	23	1467,7015	0,00357	3	4	27	26
1625,8336	0,00201	29	28	24	23	1470,7378	-4,00E-04	2	3	27	26
1424,0544	-4,10E-04	29	30	25	24	1509,6069	-0,00373	11	10	27	26
1439,6895	-0,00112	25	26	25	24	1517,0162	-0,00468	14	13	27	26
1443,5237	0,0016	24	25	25	24	1519,4216	0,00459	15	14	27	26
1451,0886	-0,00248	22	23	25	24	1524,0992	0,00177	17	16	27	26
1454,8242	-0,0041	21	22	25	24	1530,8354	-7,30E-04	20	19	27	26
1465,8468	-0,00236	18	19	25	24	1539,2892	9,40E-04	24	23	27	26
1493,8145	9,50E-04	10	11	25	24	1545,2262	0,0039	27	26	27	26
1500,4770	0,00241	8	9	25	24	1547,1191	-0,00322	28	27	27	26
1503,7591	0,00431	7	8	25	24	1550,8030	-0,00144	30	29	27	26
1507,0037	0,00244	6	7	25	24	1379,9154	-0,00145	22	23	28	27
1516,5389	0,00214	3	4	25	24	1383,5532	0,00288	21	22	28	27
1531,7424	0,00171	1	0	25	24	1387,1550	0,00297	20	21	28	27
1537,5784	6,00E-04	3	2	25	24	1397,7608	-0,00444	17	18	28	27
1543,2700	-0,00341	5	4	25	24	1404,6830	0,00369	15	16	28	27

Tabulka 1 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1414,8037	-0,00173	12	13	28	27	1366,9903	1,60E-04	12	13	30	29
1421,3889	-0,00226	10	11	28	27	1370,2324	0,00205	11	12	30	29
1427,8464	0,00289	8	9	28	27	1376,6141	0,00324	9	10	30	29
1431,0228	0,0035	7	8	28	27	1379,7535	0,00263	8	9	30	29
1434,1605	-8,00E-04	6	7	28	27	1391,9751	0,00269	4	5	30	29
1440,3436	2,40E-04	4	5	28	27	1394,9440	0,00157	3	4	30	29
1446,3887	2,10E-04	2	3	28	27	1400,7776	-0,00141	1	2	30	29
1469,1755	-4,50E-04	5	4	28	27	1403,6456	3,30E-04	0	1	30	29
1477,1391	0,00325	8	7	28	27	1417,4487	-0,00149	4	3	30	29
1484,7651	-0,00497	11	10	28	27	1420,1040	-8,40E-04	5	4	30	29
1492,0737	-7,80E-04	14	13	28	27	1422,7223	-0,00139	6	5	30	29
1496,7564	-0,00242	16	15	28	27	1430,3619	-0,00204	9	8	30	29
1499,0481	0,00316	17	16	28	27	1435,2729	-0,00273	11	10	30	29
1503,5067	0,00238	19	18	28	27	1437,6750	-0,00148	12	11	30	29
1509,9095	6,20E-04	22	21	28	27	1444,6537	-0,00346	15	14	30	29
1513,9848	-0,00229	24	23	28	27	1446,9069	-0,00268	16	15	30	29
1519,8116	-0,00243	27	26	28	27	1455,5458	0,00308	20	19	30	29
1330,2536	7,50E-04	29	30	29	28	1459,6341	0,00293	22	21	30	29
1349,0315	6,00E-05	24	25	29	28	1465,4802	0,00507	25	24	30	29
1356,3257	0,00131	22	23	29	28	1469,1755	-0,00127	27	26	30	29
1359,9189	-0,00457	21	22	29	28						
1370,5289	-5,80E-04	18	19	29	28						
1403,7621	-0,00516	8	9	29	28						
1416,1229	-0,00502	4	5	29	28						
1422,1067	0,0034	2	3	29	28						
1439,1908	-0,00451	3	2	29	28						
1444,6089	-0,00169	5	4	29	28						
1452,4697	0,00476	8	7	29	28						
1457,5172	-0,00313	10	9	29	28						
1462,4329	0,00328	12	11	29	28						
1464,8261	-0,003	13	12	29	28						
1467,1889	-0,00268	14	13	29	28						
1469,5208	0,00387	15	14	29	28						
1471,8089	0,00392	16	15	29	28						
1476,2703	0,00174	18	17	29	28						
1480,5847	0,00361	20	19	29	28						
1482,6802	-1,20E-04	21	20	29	28						
1488,7445	-0,00346	24	23	29	28						
1496,2989	0,00343	28	27	29	28						
1498,0876	0,00322	29	28	29	28						
1332,7887	-0,00203	22	23	30	29						
1353,6959	-0,00371	16	17	30	29						
1360,4114	8,90E-04	14	15	30	29						

Tabulka 2: Experimentální pozice linií prvního overtonu CO ( $\Delta v = 2$ )

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4132,1584	0,00162	26	27	2	0	4142,7503	-0,00108	14	15	3	1
4137,7684	-0,00211	25	26	2	0	4147,5236	-0,00244	13	14	3	1
4143,3148	-0,00324	24	25	2	0	4152,2320	-7,40E-04	12	13	3	1
4154,2138	-1,30E-04	22	23	2	0	4156,8693	-0,00206	11	12	3	1
4159,5627	7,00E-04	21	22	2	0	4161,4407	-0,00103	10	11	3	1
4164,8426	-6,80E-04	20	21	2	0	4165,9425	-0,00121	9	10	3	1
4170,0523	-0,00535	19	20	2	0	4170,3756	-0,00157	8	9	3	1
4175,2032	-0,00174	18	19	2	0	4174,7406	-0,00133	7	8	3	1
4180,2829	-0,00211	17	18	2	0	4179,0363	-0,00158	6	7	3	1
4185,2964	-0,00131	16	17	2	0	4183,2655	6,60E-04	5	6	3	1
4190,2437	7,90E-04	15	16	2	0	4187,4209	-0,00179	4	5	3	1
4195,1191	-0,00134	14	15	2	0	4191,5107	-5,60E-04	3	4	3	1
4199,9306	4,30E-04	13	14	2	0	4195,5298	-6,30E-04	2	3	3	1
4204,6717	-2,50E-04	12	13	2	0	4199,4803	2,80E-04	1	2	3	1
4209,3464	7,70E-04	11	12	2	0	4203,3610	0,00109	0	1	3	1
4213,9520	9,30E-04	10	11	2	0	4210,9124	0,00242	1	0	3	1
4218,4885	3,90E-04	9	10	2	0	4214,5816	0,00174	2	1	3	1
4222,9598	0,00318	8	9	2	0	4218,1803	8,60E-04	3	2	3	1
4227,3571	6,60E-04	7	8	2	0	4221,7116	0,00302	4	3	3	1
4231,6880	5,80E-04	6	7	2	0	4225,1700	0,00287	5	4	3	1
4235,9522	0,00277	5	6	2	0	4228,5559	9,60E-04	6	5	3	1
4240,1443	0,00199	4	5	2	0	4231,8729	0,00103	7	6	3	1
4244,2676	0,00169	3	4	2	0	4241,3983	0,00243	10	9	3	1
4278,2397	0,00292	5	4	2	0	4244,4301	0,00231	11	10	3	1
4300,7056	0,00316	12	11	2	0	4017,1055	-0,0039	28	29	4	2
4314,6022	0,003	17	16	2	0	4022,7854	5,30E-04	27	28	4	2
4335,0327	-8,70E-04	26	25	2	0	4028,3920	-0,00244	26	27	4	2
4340,5229	0,00126	29	28	2	0	4033,9383	3,40E-04	25	26	4	2
4342,2032	5,10E-04	30	29	2	0	4039,4141	-0,00118	24	25	4	2
4068,8518	-0,00178	28	29	3	1	4044,8262	-6,00E-05	23	24	4	2
4074,5665	0,00233	27	28	3	1	4050,1698	-9,50E-04	22	23	4	2
4080,2088	-4,00E-05	26	27	3	1	4060,6592	-5,10E-04	20	21	4	2
4085,7888	0,00133	25	26	3	1	4065,8037	-1,70E-04	19	20	4	2
4091,2967	-0,0032	24	25	3	1	4070,8790	-0,00197	18	19	4	2
4096,7445	-0,00149	23	24	3	1	4075,8902	-6,60E-04	17	18	4	2
4102,1242	-0,00139	22	23	3	1	4080,8325	-8,90E-04	16	17	4	2
4107,4374	-0,00116	21	22	3	1	4085,7076	-8,10E-04	15	16	4	2
4112,6834	-0,00135	20	21	3	1	4090,5151	-6,90E-04	14	15	4	2
4117,8633	-7,20E-04	19	20	3	1	4095,2543	-0,00106	13	14	4	2
4122,9755	-7,20E-04	18	19	3	1	4099,9265	-5,00E-04	12	13	4	2
4128,0194	-0,0018	17	18	3	1	4104,5288	-0,00174	11	12	4	2
4132,9972	-0,00162	16	17	3	1	4109,0615	-0,00435	10	11	4	2
4137,9073	-0,00163	15	16	3	1	4113,5311	-0,00167	9	10	4	2

Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4117,9298	-0,00137	8	9	4	2	3998,3524	-5,00E-04	22	23	5	3
4122,2593	-0,00159	7	8	4	2	4003,5958	1,60E-04	21	22	5	3
4126,5195	-0,00229	6	7	4	2	4008,7698	-0,00182	20	21	5	3
4130,7134	-3,10E-04	5	6	4	2	4013,8813	6,30E-04	19	20	5	3
4134,8349	-0,00163	4	5	4	2	4018,9223	-3,70E-04	18	19	5	3
4138,8885	-0,00158	3	4	4	2	4023,8974	-5,00E-05	17	18	5	3
4142,8732	-0,00102	2	3	4	2	4028,8046	-2,80E-04	16	17	5	3
4146,7877	-0,0011	1	2	4	2	4033,6442	-6,10E-04	15	16	5	3
4150,6319	-0,00178	0	1	4	2	4038,4165	-5,90E-04	14	15	5	3
4158,1119	-0,00185	1	0	4	2	4043,1215	-9,00E-05	13	14	5	3
4161,7485	-1,30E-04	2	1	4	2	4047,7579	-2,40E-04	12	13	5	3
4165,3123	-9,30E-04	3	2	4	2	4052,3271	4,90E-04	11	12	5	3
4168,8059	-0,00149	4	3	4	2	4056,8263	-5,50E-04	10	11	5	3
4172,2317	7,30E-04	5	4	4	2	4061,2582	-5,10E-04	9	10	5	3
4175,5824	-0,00141	6	5	4	2	4065,6216	-4,50E-04	8	9	5	3
4178,8646	-0,00118	7	6	4	2	4069,9159	-8,20E-04	7	8	5	3
4182,0772	4,80E-04	8	7	4	2	4074,1416	-9,70E-04	6	7	5	3
4185,2164	-8,00E-05	9	8	4	2	4078,2988	-6,60E-04	5	6	5	3
4188,2846	-3,30E-04	10	9	4	2	4082,3863	-9,40E-04	4	5	5	3
4191,2824	4,90E-04	11	10	4	2	4086,4052	-5,60E-04	3	4	5	3
4194,2070	-2,80E-04	12	11	4	2	4090,3545	-3,80E-04	2	3	5	3
4197,0618	9,10E-04	13	12	4	2	4094,2343	-1,60E-04	1	2	5	3
4199,8434	8,10E-04	14	13	4	2	4098,0417	-0,00263	0	1	5	3
4202,5545	0,00226	15	14	4	2	4105,4529	-0,0015	1	0	5	3
4205,1904	7,20E-04	16	15	4	2	4112,5824	-0,00152	3	2	5	3
4207,7585	0,00372	17	16	4	2	4116,0413	-0,00181	4	3	5	3
4210,2494	0,00201	18	17	4	2	4119,4308	-9,10E-04	5	4	5	3
4212,6710	0,00364	19	18	4	2	4122,7485	-0,0011	6	5	5	3
4215,0174	0,00287	20	19	4	2	4125,9951	-0,0015	7	6	5	3
4217,2919	0,00312	21	20	4	2	4129,1712	-0,00139	8	7	5	3
4219,4925	0,00256	22	21	4	2	4132,2762	-0,00122	9	8	5	3
4221,6211	0,00322	23	22	4	2	4135,3097	-0,00123	10	9	5	3
4225,6567	0,00321	25	24	4	2	4138,2719	-0,00108	11	10	5	3
4227,5641	0,00323	26	25	4	2	4141,1629	-5,20E-04	12	11	5	3
4231,1567	0,00266	28	27	4	2	4143,9817	-4,10E-04	13	12	5	3
4234,4505	-2,80E-04	30	29	4	2	4146,7274	-0,00149	14	13	5	3
3959,7953	-8,80E-04	29	30	5	3	4149,4025	-0,00113	15	14	5	3
3965,5016	-6,90E-04	28	29	5	3	4152,0062	3,00E-05	16	15	5	3
3971,1438	0,00117	27	28	5	3	4154,5369	5,30E-04	17	16	5	3
3976,7170	-7,00E-05	26	27	5	3	4156,9931	-9,70E-04	18	17	5	3
3982,2254	-6,00E-05	25	26	5	3	4159,3785	-6,40E-04	19	18	5	3
3987,6669	-7,60E-04	24	25	5	3	4161,6916	1,70E-04	20	19	5	3
3993,0425	-0,00102	23	24	5	3	4163,9330	0,00221	21	20	5	3

Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4166,0976	5,30E-04	22	21	5	3	4076,4083	-5,30E-04	8	7	6	4
4168,1897	-4,20E-04	23	22	5	3	4079,4781	-6,20E-04	9	8	6	4
4170,2093	-5,00E-04	24	23	5	3	4082,4766	-7,00E-04	10	9	6	4
4172,1576	0,00163	25	24	5	3	4085,4042	-2,30E-04	11	10	6	4
4174,0266	-0,00187	26	25	5	3	4088,2593	-6,50E-04	12	11	6	4
4177,5527	8,20E-04	28	27	5	3	4091,0437	-3,00E-05	13	12	6	4
4180,7831	0,00424	30	29	5	3	4093,7563	6,90E-04	14	13	6	4
3908,3662	0,00143	29	30	6	4	4096,3949	-5,50E-04	15	14	6	4
3914,0329	-0,00283	28	29	6	4	4098,9624	-7,00E-04	16	15	6	4
3919,6442	0,00328	27	28	6	4	4101,4577	-7,10E-04	17	16	6	4
3930,6539	4,40E-04	25	26	6	4	4103,8801	-0,00114	18	17	6	4
3936,0599	-6,20E-04	24	25	6	4	4106,2314	-3,00E-05	19	18	6	4
3941,4012	-3,00E-05	23	24	6	4	4108,5096	7,60E-04	20	19	6	4
3946,6743	-0,00117	22	23	6	4	4110,7140	6,70E-04	21	20	6	4
3951,8832	1,10E-04	21	22	6	4	4112,8445	-2,40E-04	22	21	6	4
3957,0219	-0,00204	20	21	6	4	4114,9023	-6,30E-04	23	22	6	4
3962,1014	0,00353	19	20	6	4	4116,8874	-3,50E-04	24	23	6	4
3967,1039	-8,40E-04	18	19	6	4	4118,7995	4,50E-04	25	24	6	4
3972,0437	-7,10E-04	17	18	6	4	4120,6378	0,00111	26	25	6	4
3976,9160	-7,30E-04	16	17	6	4	4124,0901	-2,80E-04	28	27	6	4
3981,7207	-8,60E-04	15	16	6	4	4125,7087	0,00255	29	28	6	4
3986,4571	-0,00164	14	15	6	4	4127,2458	-0,00185	30	29	6	4
3991,1274	-7,40E-04	13	14	6	4	3857,0758	-0,00158	29	30	7	5
3995,7316	0,00199	12	13	6	4	3868,2813	-0,00188	27	28	7	5
4000,2628	-2,00E-04	11	12	6	4	3873,7886	0,0013	26	27	7	5
4004,7254	-0,00276	10	11	6	4	3879,2264	0,00102	25	26	7	5
4009,1249	-6,00E-05	9	10	6	4	3884,5969	-3,70E-04	24	25	7	5
4013,4529	-3,30E-04	8	9	6	4	3889,9028	-3,00E-05	23	24	7	5
4017,7119	-9,50E-04	7	8	6	4	3900,3141	-2,80E-04	21	22	7	5
4021,9033	-3,50E-04	6	7	6	4	3905,4195	-5,80E-04	20	21	7	5
4026,0258	3,00E-04	5	6	6	4	3910,4579	-9,70E-04	19	20	7	5
4030,0777	-5,50E-04	4	5	6	4	3915,4303	-3,10E-04	18	19	7	5
4034,0613	-4,50E-04	3	4	6	4	3920,3351	-5,00E-05	17	18	7	5
4037,9751	-7,50E-04	2	3	6	4	3925,1724	5,00E-05	16	17	7	5
4041,8194	-0,00101	1	2	6	4	3929,9415	-5,60E-04	15	16	7	5
4045,5929	-0,00238	0	1	6	4	3934,6433	-8,40E-04	14	15	7	5
4052,9365	0,00114	1	0	6	4	3939,2777	-7,30E-04	13	14	7	5
4056,4999	-3,80E-04	2	1	6	4	3943,8440	-8,00E-04	12	13	7	5
4059,9944	-5,20E-04	3	2	6	4	3948,3410	-0,0021	11	12	7	5
4063,4185	-6,40E-04	4	3	6	4	3952,7721	-0,00109	10	11	7	5
4066,7736	8,10E-04	5	4	6	4	3957,1342	-7,10E-04	9	10	7	5
4070,0553	-4,20E-04	6	5	6	4	3961,4308	0,00268	8	9	7	5
4073,2673	-4,80E-04	7	6	6	4	3965,6518	-8,80E-04	7	8	7	5



Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
3969,8075	-9,30E-04	6	7	7	5	3858,9663	-7,50E-04	19	20	8	6
3973,8945	-7,40E-04	5	6	7	5	3863,9020	-0,00164	18	19	8	6
3977,9119	-0,00105	4	5	7	5	3868,7731	6,00E-05	17	18	8	6
3981,8608	-6,20E-04	3	4	7	5	3873,5745	-6,00E-04	16	17	8	6
3985,7387	-0,00181	2	3	7	5	3878,3086	-0,00108	15	16	8	6
3989,5493	-7,60E-04	1	2	7	5	3882,9758	-8,30E-04	14	15	8	6
4000,5595	-5,30E-04	1	0	7	5	3887,5753	-5,20E-04	13	14	8	6
4004,0896	-3,70E-04	2	1	7	5	3892,1064	-6,80E-04	12	13	8	6
4007,5495	-1,40E-04	3	2	7	5	3896,5695	-7,90E-04	11	12	8	6
4010,9388	-1,00E-04	4	3	7	5	3900,9648	-4,80E-04	10	11	8	6
4014,2575	-9,00E-05	5	4	7	5	3905,2909	-0,00102	9	10	8	6
4017,5054	-1,80E-04	6	5	7	5	3909,5495	-5,60E-04	8	9	8	6
4020,6832	5,00E-04	7	6	7	5	3913,7388	-7,60E-04	7	8	8	6
4023,7890	1,80E-04	8	7	7	5	3917,8596	-6,60E-04	6	7	8	6
4026,8239	1,10E-04	9	8	7	5	3921,9117	-3,20E-04	5	6	8	6
4029,7872	-2,60E-04	10	9	7	5	3925,8937	-0,001	4	5	8	6
4032,6795	-1,80E-04	11	10	7	5	3929,8076	-5,40E-04	3	4	8	6
4035,5002	-1,00E-04	12	11	7	5	3933,6513	-9,10E-04	2	3	8	6
4038,2490	-1,80E-04	13	12	7	5	3937,4256	-0,00115	1	2	8	6
4040,9261	-8,00E-05	14	13	7	5	3941,1308	-8,20E-04	0	1	8	6
4043,5318	6,70E-04	15	14	7	5	3951,8252	-0,00153	2	1	8	6
4046,0637	-2,10E-04	16	15	7	5	3955,2505	-9,40E-04	3	2	8	6
4048,5245	1,50E-04	17	16	7	5	3958,6049	-8,40E-04	4	3	8	6
4050,9122	-1,10E-04	18	17	7	5	3961,8928	0,00331	5	4	8	6
4053,2293	0,00166	19	18	7	5	3965,1020	-5,30E-04	6	5	8	6
4055,4658	-0,0044	20	19	7	5	3968,2439	-8,30E-04	7	6	8	6
4057,6398	-3,00E-05	21	20	7	5	3971,3152	-7,30E-04	8	7	8	6
4059,7375	0,00111	22	21	7	5	3974,3155	-4,90E-04	9	8	8	6
4061,7620	0,00226	23	22	7	5	3977,2444	-3,50E-04	10	9	8	6
4063,7097	-2,00E-05	24	23	7	5	3980,1019	-1,80E-04	11	10	8	6
4067,3911	0,00211	26	25	7	5	3982,8874	-4,20E-04	12	11	8	6
4069,1172	-7,80E-04	27	26	7	5	3985,6010	-8,20E-04	13	12	8	6
4072,3579	0,00395	29	28	7	5	3988,2430	-9,50E-04	14	13	8	6
4073,8596	-0,00103	30	29	7	5	3990,8139	-1,40E-04	15	14	8	6
3805,9337	-0,00368	29	30	8	6	3993,3096	-0,00235	16	15	8	6
3811,5371	-8,50E-04	28	29	8	6	3998,0906	-6,00E-05	18	17	8	6
3817,0734	6,20E-04	27	28	8	6	4000,3712	5,00E-05	19	18	8	6
3822,5422	5,00E-04	26	27	8	6	4002,5789	3,00E-05	20	19	8	6
3827,9442	-3,90E-04	25	26	8	6	4006,7751	-3,20E-04	22	21	8	6
3833,2812	-9,00E-05	24	25	8	6	4010,6800	8,90E-04	24	23	8	6
3838,5474	-0,00427	23	24	8	6	4012,5208	4,00E-05	25	24	8	6
3843,7564	8,20E-04	22	23	8	6	4017,6017	-0,00148	28	27	8	6
3848,8922	-6,80E-04	21	22	8	6	4019,1439	-0,0054	29	28	8	6

Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4020,6174	-0,00378	30	29	8	6	3938,2470	-4,40E-04	15	14	9	7
3766,0147	0,00173	27	28	9	7	3940,7099	-6,20E-04	16	15	9	7
3771,4471	4,20E-04	26	27	9	7	3943,1008	-4,80E-04	17	16	9	7
3776,8142	-1,50E-04	25	26	9	7	3945,4191	-4,70E-04	18	17	9	7
3782,1204	0,00455	24	25	9	7	3947,6648	-4,40E-04	19	18	9	7
3787,3502	-8,20E-04	23	24	9	7	3949,8359	-0,00225	20	19	9	7
3792,5222	0,00246	22	23	9	7	3951,9372	-9,60E-04	21	20	9	7
3797,6227	8,60E-04	21	22	9	7	3953,9648	-3,00E-04	22	21	9	7
3802,6573	1,00E-04	20	21	9	7	3955,9196	7,70E-04	23	22	9	7
3807,6255	-1,60E-04	19	20	9	7	3957,7997	5,00E-04	24	23	9	7
3812,5267	-3,80E-04	18	19	9	7	3959,6069	8,30E-04	25	24	9	7
3817,3617	3,80E-04	17	18	9	7	3961,3429	0,00362	26	25	9	7
3822,1294	0,00117	16	17	9	7	3964,5823	-0,00185	28	27	9	7
3826,8272	-4,70E-04	15	16	9	7	3966,0936	-0,0019	29	28	9	7
3831,4593	-2,00E-04	14	15	9	7	3967,5330	4,00E-04	30	29	9	7
3836,0241	5,40E-04	13	14	9	7	3704,1129	4,30E-04	29	30	10	8
3840,5213	0,00159	12	13	9	7	3709,6424	-1,60E-04	28	29	10	8
3844,9472	-6,10E-04	11	12	9	7	3715,1088	0,0019	27	28	10	8
3849,3069	-8,10E-04	10	11	9	7	3720,5052	-1,70E-04	26	27	10	8
3853,5982	-0,00106	9	10	9	7	3725,8370	-8,00E-04	25	26	10	8
3857,8216	-7,30E-04	8	9	9	7	3731,1028	-0,00127	24	25	10	8
3861,9760	-7,50E-04	7	8	9	7	3736,3006	-0,00342	23	24	10	8
3866,0621	-3,00E-04	6	7	9	7	3741,4391	0,00158	22	23	10	8
3870,0805	0,00138	5	6	9	7	3746,5048	3,80E-04	21	22	10	8
3874,0263	-4,60E-04	4	5	9	7	3751,5049	3,30E-04	20	21	10	8
3877,9042	-9,80E-04	3	4	9	7	3756,4381	2,50E-04	19	20	10	8
3881,7126	-0,00163	2	3	9	7	3761,3039	-1,90E-04	18	19	10	8
3885,4522	-0,00156	1	2	9	7	3766,1037	5,50E-04	17	18	10	8
3889,1240	3,60E-04	0	1	9	7	3770,8345	-4,00E-04	16	17	10	8
3896,2540	1,90E-04	1	0	9	7	3775,4994	2,10E-04	15	16	10	8
3899,7131	-7,10E-04	2	1	9	7	3780,0956	-2,70E-04	14	15	10	8
3903,1034	-1,70E-04	3	2	9	7	3784,6247	-1,00E-04	13	14	10	8
3906,4221	-8,30E-04	4	3	9	7	3789,0854	-4,30E-04	12	13	10	8
3909,6712	-5,40E-04	5	4	9	7	3793,4785	-3,10E-04	11	12	10	8
3912,8488	-0,00106	6	5	9	7	3797,8029	-7,10E-04	10	11	10	8
3915,9560	-0,00114	7	6	9	7	3802,0593	-7,80E-04	9	10	10	8
3918,9931	-3,40E-04	8	7	9	7	3806,2474	-6,60E-04	8	9	10	8
3921,9584	-2,00E-04	9	8	9	7	3810,3669	-5,20E-04	7	8	10	8
3924,8517	-7,70E-04	10	9	9	7	3814,4176	-4,00E-04	6	7	10	8
3927,6745	-4,20E-04	11	10	9	7	3818,3993	-3,70E-04	5	6	10	8
3930,4255	-2,90E-04	12	11	9	7	3822,3119	-3,80E-04	4	5	10	8
3933,1046	-3,30E-04	13	12	9	7	3826,1548	-8,70E-04	3	4	10	8
3935,7116	-6,00E-04	14	13	9	7	3829,9285	-0,00121	2	3	10	8

Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
3833,6335	-7,40E-04	1	2	10	8	3742,1664	1,10E-04	11	12	11	9
3837,2679	-0,00122	0	1	10	8	3746,4567	7,20E-04	10	11	11	9
3844,3305	0,00115	1	0	10	8	3750,6774	5,00E-05	9	10	11	9
3847,7532	-0,00119	2	1	10	8	3754,8299	-3,50E-04	8	9	11	9
3851,1081	-0,0011	3	2	10	8	3758,9137	-8,40E-04	7	8	11	9
3857,6069	-6,10E-04	5	4	10	8	3762,9315	0,00143	6	7	11	9
3860,7501	-6,20E-04	6	5	10	8	3766,8767	1,00E-05	5	6	11	9
3863,8225	-5,90E-04	7	6	10	8	3770,7539	-3,60E-04	4	5	11	9
3866,8241	-3,90E-04	8	7	10	8	3774,5627	7,00E-05	3	4	11	9
3869,7539	-8,70E-04	9	8	10	8	3778,3032	0,00155	2	3	11	9
3872,6132	-5,70E-04	10	9	10	8	3781,9713	1,10E-04	1	2	11	9
3875,4006	-7,50E-04	11	10	10	8	3785,5665	-0,00458	0	1	11	9
3878,1166	-7,60E-04	12	11	10	8	3795,9568	0,00534	2	1	11	9
3880,7615	-1,60E-04	13	12	10	8	3799,2716	2,70E-04	3	2	11	9
3883,3331	-9,90E-04	14	13	10	8	3802,5206	-2,20E-04	4	3	11	9
3885,8341	-4,10E-04	15	14	10	8	3805,7007	9,10E-04	5	4	11	9
3888,2627	-7,00E-05	16	15	10	8	3808,8082	1,00E-04	6	5	11	9
3890,6187	-1,00E-05	17	16	10	8	3811,8450	-5,80E-04	7	6	11	9
3892,9018	-4,00E-04	18	17	10	8	3814,8124	3,00E-04	8	7	11	9
3895,1172	0,00412	19	18	10	8	3817,7077	2,00E-04	9	8	11	9
3897,2493	-0,0019	20	19	10	8	3820,5319	2,60E-04	10	9	11	9
3899,3171	6,80E-04	21	20	10	8	3823,2843	-7,00E-05	11	10	11	9
3901,3081	-4,90E-04	22	21	10	8	3825,9635	-0,00205	12	11	11	9
3903,2276	5,00E-05	23	22	10	8	3828,5745	-5,20E-04	13	12	11	9
3905,0735	3,40E-04	24	23	10	8	3831,1117	-9,30E-04	14	13	11	9
3906,8442	-0,00107	25	24	10	8	3833,5775	-7,40E-04	15	14	11	9
3908,5434	-3,20E-04	26	25	10	8	3835,9715	-1,90E-04	16	15	11	9
3910,1692	8,20E-04	27	26	10	8	3838,2924	-4,50E-04	17	16	11	9
3911,7225	0,00341	28	27	10	8	3842,7180	3,50E-04	19	18	11	9
3914,5991	0,00105	30	29	10	8	3844,8210	-1,00E-05	20	19	11	9
3664,3599	0,00237	27	28	11	9	3846,8512	-2,70E-04	21	20	11	9
3685,4153	0,00167	23	24	11	9	3848,8090	1,20E-04	22	21	11	9
3690,5116	-2,90E-04	22	23	11	9	3850,6926	-4,90E-04	23	22	11	9
3695,5430	-5,70E-04	21	22	11	9	3852,5039	-6,00E-05	24	23	11	9
3700,5077	-8,10E-04	20	21	11	9	3854,2424	0,00107	25	24	11	9
3705,4042	-0,00238	19	20	11	9	3855,9092	0,00414	26	25	11	9
3710,2377	7,00E-05	18	19	11	9	3857,4960	0,00101	27	26	11	9
3715,0016	9,00E-05	17	18	11	9	3861,8225	0,00199	30	29	11	9
3719,6983	2,10E-04	16	17	11	9	3602,9113	-0,00298	29	30	12	10
3724,3277	4,90E-04	15	16	11	9	3619,0931	-0,00239	26	27	12	10
3728,8881	-6,40E-04	14	15	11	9	3624,3575	1,00E-04	25	26	12	10
3733,3825	-3,00E-05	13	14	11	9	3629,5530	-1,50E-04	24	25	12	10
3737,8083	-1,30E-04	12	13	11	9	3634,6848	0,00219	23	24	12	10

Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
3639,7468	0,00117	22	23	12	10	3800,0918	-0,00259	24	23	12	10
3649,6735	0,00171	20	21	12	10	3803,4262	1,30E-04	26	25	12	10
3654,5368	0,00216	19	20	12	10	3804,9814	1,00E-04	27	26	12	10
3659,3305	2,00E-05	18	19	12	10	3563,3365	-0,00305	27	28	13	11
3664,0586	-5,70E-04	17	18	12	10	3568,6292	-0,00297	26	27	13	11
3668,7211	5,30E-04	16	17	12	10	3573,8539	-0,00489	25	26	13	11
3673,3142	-3,20E-04	15	16	12	10	3579,0192	-7,00E-05	24	25	13	11
3677,8405	-3,90E-04	14	15	12	10	3584,1148	0,00134	23	24	13	11
3682,2946	-0,00493	13	14	12	10	3589,1443	0,00307	22	23	13	11
3686,6904	1,10E-04	12	13	12	10	3594,1030	5,80E-04	21	22	13	11
3691,0127	-3,40E-04	11	12	12	10	3598,9954	-0,00151	20	21	13	11
3695,2690	0,00138	10	11	12	10	3603,8275	0,00296	19	20	13	11
3699,4532	-6,90E-04	9	10	12	10	3608,5847	-4,70E-04	18	19	13	11
3703,5714	-3,10E-04	8	9	12	10	3613,2748	-0,00387	17	18	13	11
3707,6204	-5,20E-04	7	8	12	10	3617,9037	-0,00117	16	17	13	11
3711,6018	4,10E-04	6	7	12	10	3622,4638	1,50E-04	15	16	13	11
3715,5127	-2,60E-04	5	6	12	10	3626,9542	-6,60E-04	14	15	13	11
3719,3543	-0,0012	4	5	12	10	3631,3736	-0,00475	13	14	13	11
3723,1278	-0,00105	3	4	12	10	3635,7327	-0,00127	12	13	13	11
3726,8328	-6,00E-05	2	3	12	10	3640,0215	-1,00E-04	11	12	13	11
3730,4674	0	1	2	12	10	3644,2404	-6,70E-04	10	11	13	11
3734,0320	-3,10E-04	0	1	12	10	3648,3919	-3,40E-04	9	10	13	11
3740,9514	-0,00127	1	0	12	10	3652,4743	-6,70E-04	8	9	13	11
3747,5924	-3,60E-04	3	2	12	10	3656,4890	-1,10E-04	7	8	13	11
3750,8083	9,70E-04	4	3	12	10	3660,4334	-0,00112	6	7	13	11
3753,9515	1,00E-04	5	4	12	10	3664,3101	-9,50E-04	5	6	13	11
3757,0247	-1,10E-04	6	5	12	10	3668,1185	-6,00E-05	4	5	13	11
3760,0257	-0,00171	7	6	12	10	3671,8565	-3,90E-04	3	4	13	11
3765,8198	2,00E-04	9	8	12	10	3675,5251	-8,00E-04	2	3	13	11
3768,6102	0,00131	10	9	12	10	3679,1244	-0,00105	1	2	13	11
3771,3261	-6,90E-04	11	10	12	10	3682,6552	-1,80E-04	0	1	13	11
3773,9736	4,60E-04	12	11	12	10	3689,5034	-0,00243	1	0	13	11
3776,5478	1,00E-05	13	12	12	10	3692,8252	-8,40E-04	2	1	13	11
3779,0507	1,00E-04	14	13	12	10	3696,0753	-7,60E-04	3	2	13	11
3781,4809	-5,20E-04	15	14	12	10	3699,2558	8,00E-05	4	3	13	11
3783,8402	1,10E-04	16	15	12	10	3702,3645	-3,90E-04	5	4	13	11
3786,1249	-0,00157	17	16	12	10	3705,4042	7,90E-04	6	5	13	11
3788,3399	-5,10E-04	18	17	12	10	3708,3698	-0,00134	7	6	13	11
3790,4818	5,00E-05	19	18	12	10	3711,2678	-1,30E-04	8	7	13	11
3792,5533	0,00294	20	19	12	10	3714,0921	-0,00153	9	8	13	11
3794,5458	-2,80E-04	21	20	12	10	3716,8477	-3,90E-04	10	9	13	11
3796,4707	0,00194	22	21	12	10	3719,5318	6,40E-04	11	10	13	11
3798,3219	0,00365	23	22	12	10	3722,1419	-8,00E-04	12	11	13	11

Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
3724,6827	1,50E-04	13	12	13	11	3647,8682	-7,00E-05	4	3	14	12
3727,1502	-3,70E-04	14	13	13	11	3650,9418	-7,50E-04	5	4	14	12
3729,5459	-7,00E-04	15	14	13	11	3653,9459	-2,90E-04	6	5	14	12
3731,8707	1,90E-04	16	15	13	11	3656,8786	-4,60E-04	7	6	14	12
3734,1219	-2,30E-04	17	16	13	11	3659,7407	-3,00E-04	8	7	14	12
3736,3006	-7,10E-04	18	17	13	11	3662,5315	-3,60E-04	9	8	14	12
3740,4420	2,00E-04	20	19	13	11	3665,2508	-6,90E-04	10	9	14	12
3742,4001	-0,00269	21	20	13	11	3667,8995	-2,50E-04	11	10	14	12
3746,1055	-3,00E-05	23	22	13	11	3670,4756	-8,90E-04	12	11	14	12
3747,8494	0,00242	24	23	13	11	3672,9813	-2,50E-04	13	12	14	12
3749,5136	-0,00134	25	24	13	11	3675,4136	-0,00119	14	13	14	12
3751,1110	0,00173	26	25	13	11	3677,7757	-3,60E-04	15	14	14	12
3754,0723	-0,00411	28	27	13	11	3680,0644	-8,00E-04	16	15	14	12
3755,4507	0,00177	29	28	13	11	3684,4255	-0,00103	18	17	14	12
3756,7486	0,0014	30	29	13	11	3686,4977	-7,00E-04	19	18	14	12
3502,3681	0,00453	29	30	14	12	3690,4214	-0,00244	21	20	14	12
3507,7552	0,00274	28	29	14	12	3692,2743	-0,0028	22	21	14	12
3513,0734	-0,00223	27	28	14	12	3694,0568	-3,80E-04	23	22	14	12
3528,6532	0,00371	24	25	14	12	3695,7658	0,00187	24	23	14	12
3533,7083	-1,10E-04	23	24	14	12	3698,9545	-0,00236	26	25	14	12
3538,7021	0,00118	22	23	14	12	3700,4405	-0,00222	27	26	14	12
3543,6251	-0,00177	21	22	14	12	3704,4583	0,00218	30	29	14	12
3548,4856	-5,20E-04	20	21	14	12	3462,9811	0,00344	27	28	15	13
3553,2754	-0,00312	19	20	14	12	3468,2046	0,00491	26	27	15	13
3558,0027	-0,00124	18	19	14	12	3473,3541	-0,00164	25	26	15	13
3562,6623	6,00E-05	17	18	14	12	3478,4476	0,00194	24	25	15	13
3567,2529	-3,60E-04	16	17	14	12	3483,4643	-0,00502	23	24	15	13
3571,7775	6,40E-04	15	16	14	12	3488,4272	6,30E-04	22	23	15	13
3576,2327	-2,00E-04	14	15	14	12	3493,3157	-0,00158	21	22	15	13
3580,6212	-4,00E-05	13	14	14	12	3498,1383	-0,003	20	21	15	13
3584,9431	0,00137	12	13	14	12	3502,8978	-6,80E-04	19	20	15	13
3589,1954	0,00117	11	12	14	12	3507,5883	-4,00E-04	18	19	15	13
3593,3812	0,00261	10	11	14	12	3512,2123	5,10E-04	17	18	15	13
3597,4942	-4,70E-04	9	10	14	12	3516,7691	0,00147	16	17	15	13
3601,5416	-7,20E-04	8	9	14	12	3521,2558	-2,60E-04	15	16	15	13
3605,5222	8,10E-04	7	8	14	12	3525,6743	-0,00265	14	15	15	13
3609,4313	-4,50E-04	6	7	14	12	3530,0293	-8,40E-04	13	14	15	13
3613,2748	0,00156	5	6	14	12	3534,3153	-2,00E-04	12	13	15	13
3617,0447	-0,00102	4	5	14	12	3538,5327	-1,80E-04	11	12	15	13
3620,7494	3,70E-04	3	4	14	12	3542,6812	-9,40E-04	10	11	15	13
3627,9495	0,00189	1	2	14	12	3550,7749	-8,00E-04	8	9	15	13
3631,4421	-4,80E-04	0	1	14	12	3554,7197	-1,00E-05	7	8	15	13
3641,5054	-0,00301	2	1	14	12	3558,5929	-0,00212	6	7	15	13

Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
3562,4013	-1,70E-04	5	6	15	13	3483,8567	-1,40E-04	12	13	16	14
3566,1394	4,70E-04	4	5	15	13	3488,0363	-0,00281	11	12	16	14
3569,8067	-5,40E-04	3	4	15	13	3492,1526	-6,70E-04	10	11	16	14
3573,4044	-0,00187	2	3	15	13	3496,2008	0,00162	9	10	16	14
3580,3977	0,00185	0	1	15	13	3500,1751	-0,00158	8	9	16	14
3587,1016	-0,00491	1	0	15	13	3504,0860	3,60E-04	7	8	16	14
3590,3568	-7,00E-05	2	1	15	13	3507,9233	-0,00261	6	7	16	14
3593,5357	-0,00136	3	2	15	13	3511,6965	-8,40E-04	5	6	16	14
3596,6466	-3,30E-04	4	3	15	13	3515,3989	-8,80E-04	4	5	16	14
3599,6865	1,70E-04	5	4	15	13	3519,0323	-7,90E-04	3	4	16	14
3602,6542	-9,10E-04	6	5	15	13	3522,5993	0,00217	2	3	16	14
3605,5509	-0,00222	7	6	15	13	3529,5212	0,00441	0	1	16	14
3608,3792	-0,00101	8	7	15	13	3539,3740	9,70E-04	2	1	16	14
3611,1353	-9,40E-04	9	8	15	13	3542,5169	-0,00141	3	2	16	14
3613,8195	-0,00156	10	9	15	13	3545,5926	-6,90E-04	4	3	16	14
3616,4344	-1,10E-04	11	10	15	13	3548,5968	-0,00101	5	4	16	14
3618,9759	-5,60E-04	12	11	15	13	3551,5318	7,00E-05	6	5	16	14
3621,4461	-6,40E-04	13	12	15	13	3554,3939	-9,90E-04	7	6	16	14
3623,8435	-0,0017	14	13	15	13	3557,1862	-9,50E-04	8	7	16	14
3626,1695	-0,00221	15	14	15	13	3559,9068	-0,00155	9	8	16	14
3628,4212	-0,0049	16	15	15	13	3562,5574	-9,60E-04	10	9	16	14
3632,7178	-1,50E-04	18	17	15	13	3565,1368	-2,10E-04	11	10	16	14
3634,7551	-1,00E-05	19	18	15	13	3567,6445	3,40E-04	12	11	16	14
3636,7185	-0,00105	20	19	15	13	3570,0806	9,40E-04	13	12	16	14
3638,6100	-0,00112	21	20	15	13	3572,4432	-1,60E-04	14	13	16	14
3640,4320	0,00232	22	21	15	13	3574,7330	-0,0021	15	14	16	14
3642,1743	-7,70E-04	23	22	15	13	3576,9514	-0,00335	16	15	16	14
3643,8478	6,60E-04	24	23	15	13	3579,1024	2,60E-04	17	16	16	14
3645,4462	4,70E-04	25	24	15	13	3581,1781	9,70E-04	18	17	16	14
3402,4775	0,00125	29	30	16	14	3583,1816	0,00204	19	18	16	14
3407,7987	0,00418	28	29	16	14	3585,1092	-8,00E-05	20	19	16	14
3418,2354	0,00155	26	27	16	14	3586,9614	-0,00475	21	20	16	14
3423,3574	0,00278	25	26	16	14	3588,7506	5,90E-04	22	21	16	14
3428,4045	-0,00478	24	25	16	14	3593,6616	-3,90E-04	25	24	16	14
3433,3978	1,10E-04	23	24	16	14	3596,5700	0,0012	27	26	16	14
3438,3194	-3,00E-04	22	23	16	14	3599,1771	-0,00281	29	28	16	14
3443,1763	0,00113	21	22	16	14	3363,2801	-0,00486	27	28	17	15
3447,9644	4,30E-04	20	21	16	14	3388,3817	3,50E-04	22	23	17	15
3457,3385	-0,00246	18	19	16	14	3393,2049	0,00328	21	22	17	15
3461,9281	-7,70E-04	17	18	16	14	3397,9554	1,90E-04	20	21	17	15
3466,4530	0,00347	16	17	16	14	3402,6434	0,0014	19	20	17	15
3470,9035	7,00E-04	15	16	16	14	3411,8168	0,00223	17	18	17	15
3479,6050	-0,0016	13	14	16	14	3416,3009	8,20E-04	16	17	17	15

Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
3420,7181	-1,10E-04	15	16	17	15	3348,1184	0,00276	20	21	18	16
3425,0689	9,00E-05	14	15	17	15	3352,7707	0,00344	19	20	18	16
3429,3508	-9,50E-04	13	14	17	15	3357,3525	5,50E-04	18	19	18	16
3433,5672	3,20E-04	12	13	17	15	3361,8695	-4,00E-05	17	18	18	16
3437,7130	-0,00106	11	12	17	15	3375,0192	7,80E-04	14	15	18	16
3441,7939	7,60E-04	10	11	17	15	3379,2659	-3,60E-04	13	14	18	16
3445,8037	-2,80E-04	9	10	17	15	3383,4503	0,004	12	13	18	16
3449,7459	-5,20E-04	8	9	17	15	3387,5558	-0,0026	11	12	18	16
3453,6195	-8,40E-04	7	8	17	15	3391,6016	-8,20E-04	10	11	18	16
3457,4249	-6,80E-04	6	7	17	15	3395,5785	3,00E-04	9	10	18	16
3461,1618	-1,90E-04	5	6	17	15	3399,4849	-7,10E-04	8	9	18	16
3464,8304	9,70E-04	4	5	17	15	3403,3249	4,00E-04	7	8	18	16
3468,4267	-0,00106	3	4	17	15	3407,0939	-8,20E-04	6	7	18	16
3471,9564	-4,20E-04	2	3	17	15	3410,7965	3,70E-04	5	6	18	16
3475,4132	-0,00327	1	2	17	15	3414,4284	-1,80E-04	4	5	18	16
3478,8063	-2,70E-04	0	1	17	15	3417,9927	7,70E-04	3	4	18	16
3488,5579	-1,30E-04	2	1	17	15	3421,4844	-0,00163	2	3	18	16
3491,6696	0,00118	3	2	17	15	3424,9140	0,00328	1	2	18	16
3494,7077	-8,20E-04	4	3	17	15	3428,2652	-6,80E-04	0	1	18	16
3497,6776	-5,70E-04	5	4	17	15	3437,9136	0,00101	2	1	18	16
3500,5758	-0,00142	6	5	17	15	3443,9968	0,0035	4	3	18	16
3503,4049	-6,30E-04	7	6	17	15	3446,9233	-0,00478	5	4	18	16
3506,1616	-0,00136	8	7	17	15	3449,7919	-3,80E-04	6	5	18	16
3508,8472	-0,00214	9	8	17	15	3452,5871	0,00136	7	6	18	16
3511,4632	-0,00133	10	9	17	15	3455,3086	2,80E-04	8	7	18	16
3514,0054	-0,00298	11	10	17	15	3457,9604	5,20E-04	9	8	18	16
3516,4815	7,60E-04	12	11	17	15	3460,5414	0,00115	10	9	18	16
3518,8800	-0,00145	13	12	17	15	3463,0499	6,10E-04	11	10	18	16
3521,2099	-4,80E-04	14	13	17	15	3465,4873	4,50E-04	12	11	18	16
3523,4674	4,00E-05	15	14	17	15	3467,8533	5,20E-04	13	12	18	16
3525,6483	-0,00395	16	15	17	15	3470,1484	0,00148	14	13	18	16
3527,7669	0,002	17	16	17	15	3472,3684	-7,30E-04	15	14	18	16
3529,8054	2,50E-04	18	17	17	15	3474,5181	-0,00115	16	15	18	16
3531,7725	-3,50E-04	19	18	17	15	3476,5940	-0,00314	17	16	18	16
3533,6664	-0,00145	20	19	17	15	3478,6012	-0,00143	18	17	18	16
3535,4908	8,00E-04	21	20	17	15	3482,3911	-0,00475	20	19	18	16
3537,2428	0,00366	22	21	17	15	3484,1864	0,00314	21	20	18	16
3538,9156	4,70E-04	23	22	17	15	3485,8978	1,30E-04	22	21	18	16
3540,5154	-0,00241	24	23	17	15	3487,5376	-0,00133	23	22	18	16
3318,8107	0,00265	26	27	18	16	3489,1094	0,00252	24	23	18	16
3323,8589	5,40E-04	25	26	18	16	3490,5957	-0,00566	25	24	18	16
3338,6139	0,00176	22	23	18	16	3495,8447	0,00309	29	28	18	16
3343,3974	1,80E-04	21	22	18	16	3274,3623	-0,00151	25	26	19	17

Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
3284,2006	0,00492	23	24	19	17	3437,8638	-0,00151	24	23	19	17
3289,0111	-0,00102	22	23	19	17	3440,7081	-0,00304	26	25	19	17
3298,4504	0,00505	20	21	19	17	3443,2623	4,20E-04	28	27	19	17
3307,6134	0,00199	18	19	19	17	3209,8981	-0,00188	28	29	20	18
3312,0949	0,001	17	18	19	17	3220,0526	-0,00516	26	27	20	18
3316,5105	0,00133	16	17	19	17	3225,0366	-0,00119	25	26	20	18
3320,8581	0,00101	15	16	19	17	3229,9529	0,00117	24	25	20	18
3325,1391	0,0016	14	15	19	17	3253,5243	-9,80E-04	19	20	20	18
3333,4965	0,00125	12	13	19	17	3258,0426	0,00283	18	19	20	18
3337,5719	-4,00E-04	11	12	19	17	3262,4874	2,00E-04	17	18	20	18
3341,5763	-0,00498	10	11	19	17	3266,8683	8,90E-04	16	17	20	18
3345,5217	-3,30E-04	9	10	19	17	3271,1758	-0,00448	15	16	20	18
3349,3961	0,00168	8	9	19	17	3275,4271	0,00145	14	15	20	18
3353,1988	5,00E-04	7	8	19	17	3279,6035	1,20E-04	13	14	20	18
3356,9364	0,00288	6	7	19	17	3283,7180	0,00466	12	13	20	18
3360,6001	1,50E-04	5	6	19	17	3287,7559	5,30E-04	11	12	20	18
3364,1930	-0,00442	4	5	19	17	3291,7294	7,00E-05	10	11	20	18
3367,7275	0,0017	3	4	19	17	3295,6345	-5,80E-04	9	10	20	18
3371,1868	0,00186	2	3	19	17	3299,4720	-4,70E-04	8	9	20	18
3374,5741	-6,00E-04	1	2	19	17	3303,2433	0,00193	7	8	20	18
3377,8931	-0,00182	0	1	19	17	3306,9427	0,00109	6	7	20	18
3384,3299	0,00373	1	0	19	17	3310,5752	0,00213	5	6	20	18
3387,4406	0,0037	2	1	19	17	3314,1373	0,00172	4	5	20	18
3390,4784	9,00E-04	3	2	19	17	3321,0499	-0,00331	2	3	20	18
3393,4470	-8,30E-04	4	3	19	17	3340,1379	0,00161	3	2	20	18
3396,3478	6,00E-05	5	4	19	17	3343,0700	-0,00173	4	3	20	18
3399,1743	-0,00277	6	5	19	17	3345,9388	0,00204	5	4	20	18
3401,9364	7,20E-04	7	6	19	17	3348,7300	-0,00122	6	5	20	18
3404,6234	-2,00E-05	8	7	19	17	3351,4545	-4,70E-04	7	6	20	18
3409,7861	4,20E-04	10	9	19	17	3354,1080	1,50E-04	8	7	20	18
3412,2586	-0,0013	11	10	19	17	3356,6927	0,00298	9	8	20	18
3414,6639	0,00125	12	11	19	17	3359,2010	5,80E-04	10	9	20	18
3416,9923	-0,00147	13	12	19	17	3361,6405	7,00E-04	11	10	20	18
3419,2527	-4,10E-04	14	13	19	17	3364,0077	-1,00E-05	12	11	20	18
3421,4415	9,70E-04	15	14	19	17	3368,5282	-3,20E-04	14	13	20	18
3423,5557	-1,60E-04	16	15	19	17	3372,7624	7,70E-04	16	15	20	18
3425,5960	-0,00297	17	16	19	17	3374,7704	4,90E-04	17	16	20	18
3427,5679	-0,00178	18	17	19	17	3376,7094	0,00358	18	17	20	18
3429,4672	-6,60E-04	19	18	19	17	3378,5673	-0,00188	19	18	20	18
3431,2935	1,50E-04	20	19	19	17	3380,3569	-0,00295	20	19	20	18
3433,0484	0,00241	21	20	19	17	3382,0742	-0,00348	21	20	20	18
3434,7264	7,60E-04	22	21	19	17	3383,7253	0,00279	22	21	20	18
3436,3364	0,00427	23	22	19	17	3385,2946	4,10E-04	23	22	20	18



Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
3388,2137	-0,00375	25	24	20	18	3180,6154	0,00324	13	14	22	20
3389,5671	-0,00163	26	25	20	18	3184,6548	0,00261	12	13	22	20
3160,8473	9,00E-04	28	29	21	19	3188,6248	5,00E-04	11	12	22	20
3170,9341	-2,00E-05	26	27	21	19	3192,5252	-0,00316	10	11	22	20
3175,8760	-0,00313	25	26	21	19	3196,3637	-5,00E-04	9	10	22	20
3180,7558	-0,00225	24	25	21	19	3200,1342	0,0025	8	9	22	20
3190,3172	1,30E-04	22	23	21	19	3203,8344	0,00369	7	8	22	20
3199,6075	-0,00258	20	21	21	19	3207,4610	-8,00E-05	6	7	22	20
3204,1545	-0,00198	19	20	21	19	3211,0219	-7,60E-04	5	6	22	20
3213,0461	-0,00228	17	18	21	19	3214,5125	-0,00282	4	5	22	20
3217,3955	0,00191	16	17	21	19	3217,9400	0,00111	3	4	22	20
3221,6717	2,50E-04	15	16	21	19	3221,2899	-0,00335	2	3	22	20
3225,8819	7,00E-05	14	15	21	19	3224,5760	-0,00223	1	2	22	20
3230,0288	0,00423	13	14	21	19	3239,9539	-0,00351	3	2	22	20
3234,0999	3,60E-04	12	13	21	19	3242,8244	0,00134	4	3	22	20
3238,1063	-2,80E-04	11	12	21	19	3245,6194	0,0011	5	4	22	20
3242,0441	-0,00147	10	11	21	19	3248,3460	0,00302	6	5	22	20
3249,7184	-3,80E-04	8	9	21	19	3250,9928	-0,00415	7	6	22	20
3257,1168	-0,00121	6	7	21	19	3253,5822	0,00215	8	7	22	20
3260,7170	0,00249	5	6	21	19	3256,0905	-0,00165	9	8	22	20
3264,2405	-0,00159	4	5	21	19	3260,9012	-0,00148	11	10	22	20
3274,4102	4,50E-04	1	2	21	19	3263,2014	5,80E-04	12	11	22	20
3286,9930	3,50E-04	2	1	21	19	3265,4271	-2,40E-04	13	12	22	20
3289,9658	0,00233	3	2	21	19	3267,5788	-0,00329	14	13	22	20
3292,8653	0,00128	4	3	21	19	3269,6645	-4,00E-04	15	14	22	20
3298,4504	-0,00334	6	5	21	19	3271,6782	0,00256	16	15	22	20
3301,1413	-0,00131	7	6	21	19	3273,6157	0,00156	17	16	22	20
3303,7604	-2,20E-04	8	7	21	19	3275,4769	-0,00335	18	17	22	20
3306,3080	3,90E-04	9	8	21	19	3282,2189	0,00123	22	21	22	20
3308,7835	6,00E-05	10	9	21	19	3283,7180	-0,00149	23	22	22	20
3311,1867	-0,00125	11	10	21	19	3286,5062	0,0032	25	24	22	20
3313,5197	-0,0013	12	11	21	19	3290,1236	-0,00196	28	27	22	20
3320,0897	-1,10E-04	15	14	21	19	3157,9673	-0,00119	6	7	23	21
3322,1394	0,00393	16	15	21	19	3161,4946	-5,80E-04	5	6	23	21
3324,1094	5,10E-04	17	16	21	19	3164,9518	-0,00114	4	5	23	21
3327,8384	-3,00E-05	19	18	21	19	3174,9084	-0,00275	1	2	23	21
3329,5978	0,00357	20	19	21	19	3195,7081	0,00126	5	4	23	21
3331,2723	-0,00489	21	20	21	19	3198,3940	-0,00259	6	5	23	21
3334,4189	-0,00503	23	22	21	19	3201,0159	2,70E-04	7	6	23	21
3341,0068	0,00178	28	27	21	19	3203,5648	0,001	8	7	23	21
3163,7763	5,70E-04	17	18	22	20	3206,0444	0,00345	9	8	23	21
3172,3289	-2,00E-05	15	16	22	20	3208,4466	-3,30E-04	10	9	23	21
3176,5062	0,00184	14	15	22	20	3210,7800	-0,00159	11	10	23	21

Tabulka 2 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	O-C	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
3213,0461	0,00133	12	11	23	21
3215,2393	0,00297	13	12	23	21
3217,3595	0,0034	14	13	23	21
3219,4074	0,00347	15	14	23	21
3221,3796	-8,00E-05	16	15	23	21
3226,8745	0,00169	19	18	23	21
3230,1714	-2,00E-04	21	20	23	21
3234,5713	-3,90E-04	24	23	23	21
3238,3104	1,30E-04	27	26	23	21
3241,3784	-0,00466	30	29	23	21
3158,5223	4,30E-04	10	9	24	22
3160,8225	9,90E-04	11	10	24	22
3163,0530	0,00333	12	11	24	22
3169,3003	-0,00339	15	14	24	22
3171,2448	4,50E-04	16	15	24	22
3174,9084	-3,50E-04	18	17	24	22
3178,2829	6,00E-05	20	19	24	22
3179,8578	-0,00284	21	20	24	22
3184,1556	4,90E-04	24	23	24	22

Tabulka 5: Emisní linie OH radikálu ve stavu X<sup>2</sup>Π pro rozsah 1800-3500 cm<sup>-1</sup>

$\nu_{\text{exp}} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	$\nu_{\text{the}} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
1800,446	1800,4439	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	31,5	31,5
1809,623	1809,6284	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	30,5	29,5
1815,217	1815,2130	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	33,5	32,5
1830,622	1830,6216	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	9	4,5	4,5
1831,194	1831,1974	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	11	10	3,5	3,5
1831,900	1831,9033	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	10,5	10,5
1841,066	1841,0623	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	12,5	11,5
1845,863	1845,8676	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	11	10	0,5	0,5
1852,695	1852,6929	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	9	7,5	6,5
1853,482	1853,4827	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	23,5	23,5
1857,031	1857,0251	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	17,5	16,5
1861,155	1861,1582	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	17,5	17,5
1873,392	1873,3963	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	31,5	30,5
1874,106	1874,1051	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	16,5	15,5
1874,954	1874,9583	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	12	11	4,5	3,5
1876,410	1876,4114	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	1	33,5	32,5
1882,668	1882,6714	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	15,5	14,5
1892,140	1892,1423	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	21,5	20,5
1896,451	1896,4507	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	31,5	30,5
1896,710	1896,7146	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	18,5	17,5
1903,463	1903,4661	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	44,5	43,5
1911,094	1911,0901	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	11	10	3,5	2,5
1914,208	1914,2077	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	29,5	29,5
1915,376	1915,3717	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	11,5	10,5
1917,164	1917,1681	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	31,5	31,5
1917,589	1917,5893	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	9	1,5	0,5
1920,084	1920,0807	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	14,5	13,5
1920,720	1920,7181	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	10,5	9,5
1923,072	1923,0681	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	9	11,5	11,5
1929,481	1929,4854	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	11	10	4,5	3,5
1931,048	1931,0476	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	43,5	43,5
1931,351	1931,3462	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	9	2,5	1,5
1933,067	1933,0646	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	7,5	7,5
1934,787	1934,7906	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	24,5	24,5
1936,178	1936,1774	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	45,5	44,5
1937,176	1937,1710	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	48,5	47,5
1937,520	1937,5144	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	5,5	4,5
1938,309	1938,3107	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	11	10	14,5	13,5
1945,384	1945,3854	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	2	38,5	37,5
1947,848	1947,8485	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	11	10	6,5	5,5
1954,325	1954,3230	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	12	11	9,5	8,5
1958,558	1958,5616	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	9,5	8,5
1959,418	1959,4236	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	2	39,5	38,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
1961,094	1961,0974	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	18,5	18,5
1961,361	1961,3609	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	12,5	11,5
1962,808	1962,8122	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	14,5	13,5
1963,790	1963,7875	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	13,5	12,5
1965,611	1965,6111	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	4,5	3,5
1966,374	1966,3764	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	11	10	9,5	8,5
1966,564	1966,5696	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	11	10	10,5	9,5
1976,236	1976,2361	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	9	8,5	8,5
1977,699	1977,6944	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	9	8,5	8,5
1979,602	1979,5993	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	2	41,5	40,5
1982,445	1982,4416	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	32,5	31,5
1987,580	1987,5831	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	20,5	19,5
1988,381	1988,3768	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	9,5	8,5
1988,920	1988,9222	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	9,5	8,5
1992,404	1992,4086	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	9	7,5	7,5
1993,934	1993,9378	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	16,5	16,5
1994,580	1994,5761	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	3,5	2,5
1995,710	1995,7124	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	8,5	7,5
2002,359	2002,3557	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	7,5	7,5
2005,428	2005,4248	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	9	6,5	6,5
2006,945	2006,9497	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	25,5	24,5
2013,393	2013,3908	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	4,5	4,5
2018,329	2018,3278	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	11	10	4,5	4,5
2018,486	2018,4820	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	11	10	4,5	4,5
2018,958	2018,9637	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	16,5	16,5
2022,899	2022,9029	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	11	10	6,5	6,5
2027,037	2027,0364	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	27,5	27,5
2028,469	2028,4709	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	1	37,5	36,5
2029,116	2029,1208	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	15,5	15,5
2032,290	2032,2947	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	13,5	12,5
2033,261	2033,2613	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	4,5	4,5
2038,596	2038,6013	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	13,5	13,5
2041,394	2041,3904	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	12,5	11,5
2042,213	2042,2170	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	1	48,5	47,5
2046,502	2046,4982	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	47,5	47,5
2052,710	2052,7092	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	1	46,5	45,5
2053,434	2053,4338	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	46,5	46,5
2062,792	2062,7909	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	24,5	24,5
2066,788	2066,7908	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	6,5	5,5
2072,637	2072,6340	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	12,5	11,5
2076,034	2076,0376	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	14,5	13,5
2077,771	2077,7669	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	5,5	4,5
2078,649	2078,6480	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	21,5	20,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
2081,875	2081,8743	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	20,5	19,5
2083,407	2083,4077	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	18,5	17,5
2089,220	2089,2262	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	6,5	5,5
2090,101	2090,1048	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	16,5	15,5
2093,855	2093,8595	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	37,5	37,5
2096,806	2096,8049	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	46,5	45,5
2099,631	2099,6357	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	28,5	27,5
2100,434	2100,4365	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	5,5	4,5
2100,495	2100,5003	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	5,5	4,5
2101,576	2101,5764	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	1	42,5	41,5
2102,034	2102,0287	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	28,5	27,5
2103,778	2103,7782	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	40,5	40,5
2105,372	2105,3676	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	1,5	0,5
2108,949	2108,9501	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	40,5	40,5
2112,280	2112,2818	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	23,5	22,5
2113,806	2113,8113	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	22,5	21,5
2117,259	2117,2628	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	44,5	44,5
2118,693	2118,6924	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	1	44,5	43,5
2121,644	2121,6466	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	5,5	4,5
2124,783	2124,7869	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	18,5	17,5
2126,461	2126,4551	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	37,5	36,5
2128,449	2128,4549	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	20,5	19,5
2130,197	2130,1966	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	17,5	16,5
2135,207	2135,2035	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	10,5	10,5
2140,712	2140,7082	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	20,5	20,5
2141,723	2141,7187	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	9	4,5	3,5
2148,794	2148,7956	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	4,5	3,5
2156,356	2156,3581	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	9	5,5	4,5
2160,794	2160,7936	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	39,5	39,5
2160,991	2160,9896	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	5,5	5,5
2163,779	2163,7839	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	8,5	7,5
2170,339	2170,3335	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	28,5	27,5
2171,124	2171,1248	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	47,5	46,5
2177,009	2177,0139	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	43,5	43,5
2178,593	2178,5963	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	12,5	11,5
2179,771	2179,7761	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	18,5	17,5
2183,221	2183,2194	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	8,5	7,5
2190,503	2190,5017	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	9,5	8,5
2192,833	2192,8334	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	7,5	7,5
2198,935	2198,9365	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	11,5	10,5
2210,096	2210,0951	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	17,5	16,5
2214,699	2214,7004	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	25,5	24,5
2215,091	2215,0889	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	1,5	1,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
2218,525	2218,5190	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	15,5	15,5
2225,863	2225,8587	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	14,5	14,5
2228,441	2228,4435	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	17,5	16,5
2230,386	2230,3796	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	34,5	33,5
2232,192	2232,1884	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	10,5	9,5
2232,708	2232,7070	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	2,5	2,5
2233,209	2233,2138	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	40,5	40,5
2233,383	2233,3803	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	1,5	1,5
2238,938	2238,9376	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	6,5	6,5
2239,138	2239,1421	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	1,5	1,5
2244,569	2244,5728	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	15,5	15,5
2245,231	2245,2302	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	35,5	35,5
2255,009	2255,0064	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	37,5	36,5
2256,635	2256,6336	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	23,5	22,5
2268,556	2268,5561	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	37,5	37,5
2279,486	2279,4883	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	12,5	12,5
2283,543	2283,5467	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	26,5	25,5
2285,533	2285,5353	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	26,5	25,5
2286,062	2286,0652	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	24,5	24,5
2292,333	2292,3276	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	2,5	1,5
2300,178	2300,1787	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	22,5	21,5
2301,345	2301,3493	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	21,5	20,5
2304,614	2304,6165	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	19,5	19,5
2308,138	2308,1370	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	18,5	18,5
2308,420	2308,4250	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	16,5	15,5
2309,386	2309,3909	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	35,5	34,5
2310,184	2310,1848	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	45,5	44,5
2313,790	2313,7878	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	12,5	11,5
2314,760	2314,7646	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	7,5	6,5
2316,056	2316,0614	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	4,5	3,5
2318,716	2318,7144	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	18,5	17,5
2319,467	2319,4705	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	18,5	17,5
2319,603	2319,5981	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	36,5	36,5
2332,894	2332,8894	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	18,5	18,5
2338,193	2338,1974	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	3,5	2,5
2339,771	2339,7726	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	11,5	10,5
2345,979	2345,9818	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	3,5	2,5
2349,494	2349,4948	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	20,5	19,5
2358,180	2358,1743	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	41,5	40,5
2358,392	2358,3866	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	12,5	11,5
2367,179	2367,1840	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	15,5	14,5
2369,847	2369,8492	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	2,5	1,5
2375,319	2375,3146	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	7,5	6,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
2378,676	2378,6780	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	22,5	21,5
2379,333	2379,3372	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	23,5	22,5
2380,327	2380,3277	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	22,5	21,5
2380,870	2380,8650	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	41,5	40,5
2384,806	2384,8071	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	16,5	16,5
2393,044	2393,0495	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	11,5	10,5
2394,156	2394,1582	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	8	8,5	7,5
2398,972	2398,9707	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	25,5	24,5
2399,886	2399,8871	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	40,5	40,5
2400,427	2400,4298	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	34,5	33,5
2402,911	2402,9088	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	20,5	19,5
2405,811	2405,8090	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	1,5	1,5
2406,090	2406,0919	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	19,5	18,5
2407,510	2407,5085	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	2,5	2,5
2412,344	2412,3496	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	7,5	6,5
2412,615	2412,6165	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	14,5	13,5
2413,603	2413,6056	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	7,5	6,5
2414,404	2414,4049	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	21,5	20,5
2415,228	2415,2299	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	17,5	16,5
2416,609	2416,6138	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	14,5	13,5
2416,859	2416,8567	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	13,5	12,5
2421,341	2421,3364	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	35,5	35,5
2423,558	2423,5583	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	17,5	17,5
2424,248	2424,2536	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	20,5	19,5
2431,692	2431,6935	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	22,5	21,5
2433,166	2433,1644	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	11,5	10,5
2433,664	2433,6618	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	22,5	21,5
2433,870	2433,8638	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	13,5	13,5
2434,759	2434,7554	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	21,5	20,5
2435,154	2435,1558	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	22,5	22,5
2452,333	2452,3357	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	7,5	6,5
2453,348	2453,3513	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	24,5	23,5
2454,287	2454,2851	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	6,5	6,5
2454,407	2454,4094	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	19,5	18,5
2454,602	2454,6040	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	1,5	0,5
2455,533	2455,5333	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	24,5	23,5
2456,074	2456,0785	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	19,5	18,5
2456,500	2456,4964	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	40,5	40,5
2457,190	2457,1880	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	5,5	4,5
2457,861	2457,8653	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	12,5	12,5
2460,001	2459,9981	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	12,5	12,5
2462,496	2462,4913	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	41,5	41,5
2470,981	2470,9841	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	36,5	35,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
2473,382	2473,3816	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	2,5	1,5
2479,688	2479,6912	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	9,5	8,5
2481,945	2481,9499	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	24,5	24,5
2485,635	2485,6363	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	21,5	20,5
2486,743	2486,7414	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	29,5	28,5
2487,226	2487,2307	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	20,5	19,5
2487,524	2487,5245	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	21,5	20,5
2488,738	2488,7348	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	20,5	19,5
2490,977	2490,9744	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	36,5	36,5
2500,841	2500,8355	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	12,5	11,5
2505,305	2505,3086	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	18,5	17,5
2505,456	2505,4605	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	26,5	25,5
2506,890	2506,8912	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	18,5	17,5
2508,656	2508,6584	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	17,5	16,5
2510,949	2510,9502	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	22,5	21,5
2511,732	2511,7334	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	23,5	22,5
2512,209	2512,2138	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	15,5	14,5
2512,663	2512,6651	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	22,5	21,5
2514,184	2514,1848	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	4,5	3,5
2514,840	2514,8380	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	14,5	13,5
2524,246	2524,2509	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	36,5	35,5
2532,667	2532,6680	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	5,5	4,5
2536,945	2536,9448	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	10	9	13,5	12,5
2537,138	2537,1362	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	3,5	3,5
2538,344	2538,3461	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	16,5	15,5
2539,080	2539,0806	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	20,5	19,5
2540,801	2540,8019	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	19,5	18,5
2540,882	2540,8862	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	20,5	19,5
2542,233	2542,2291	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	19,5	18,5
2545,740	2545,7442	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	5,5	4,5
2545,817	2545,8228	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	27,5	27,5
2546,874	2546,8766	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	17,5	17,5
2550,359	2550,3599	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	31,5	31,5
2551,110	2551,1114	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	11,5	10,5
2552,471	2552,4720	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	11,5	10,5
2555,564	2555,5650	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	17,5	16,5
2556,656	2556,6539	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	6,5	6,5
2557,892	2557,8937	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	16,5	15,5
2558,811	2558,8115	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	14,5	13,5
2559,035	2559,0365	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	16,5	15,5
2560,933	2560,9321	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	13,5	12,5
2563,325	2563,3282	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	5,5	5,5
2565,504	2565,5049	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	22,5	21,5



Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
2566,918	2566,9233	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	21,5	20,5
2567,528	2567,5317	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	14,5	13,5
2568,462	2568,4643	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	28,5	27,5
2568,561	2568,5635	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	21,5	20,5
2569,119	2569,1241	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	11,5	11,5
2576,564	2576,5599	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	7,5	7,5
2578,544	2578,5451	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	40,5	39,5
2579,098	2579,0949	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	8,5	7,5
2581,389	2581,3837	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	2,5	2,5
2582,162	2582,1653	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	1,5	1,5
2584,366	2584,3708	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	1,5	1,5
2585,191	2585,1945	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	10,5	9,5
2587,241	2587,2431	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	17,5	16,5
2591,877	2591,8805	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	2,5	2,5
2591,986	2591,9852	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	19,5	18,5
2593,706	2593,7059	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	19,5	18,5
2593,848	2593,8526	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	18,5	17,5
2595,205	2595,2009	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	18,5	17,5
2599,016	2599,0163	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	9,5	8,5
2602,024	2602,0221	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	19,5	18,5
2603,687	2603,6900	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	23,5	22,5
2604,566	2604,5657	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	13,5	12,5
2605,132	2605,1351	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	16,5	15,5
2606,535	2606,5399	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	16,5	15,5
2607,700	2607,7009	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	15,5	14,5
2608,757	2608,7622	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	15,5	14,5
2609,785	2609,7795	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	8,5	8,5
2611,977	2611,9805	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	31,5	30,5
2614,565	2614,5637	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	38,5	38,5
2616,422	2616,4201	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	12,5	11,5
2617,803	2617,8090	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	17,5	16,5
2619,893	2619,8889	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	13,5	13,5
2620,942	2620,9427	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	21,5	20,5
2621,369	2621,3710	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	8	7	15,5	14,5
2621,876	2621,8732	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	16,5	15,5
2622,469	2622,4699	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	20,5	19,5
2622,888	2622,8886	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	21,5	20,5
2623,087	2623,0915	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	13,5	13,5
2623,807	2623,8074	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	15,5	14,5
2624,032	2624,0331	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	20,5	19,5
2630,277	2630,2726	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	13,5	13,5
2631,752	2631,7467	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	4,5	3,5
2632,517	2632,5202	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	8,5	7,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
2642,780	2642,7822	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	17,5	17,5
2642,901	2642,8993	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	8,5	8,5
2644,306	2644,3074	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	18,5	17,5
2645,939	2645,9410	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	18,5	17,5
2646,343	2646,3441	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	17,5	16,5
2647,616	2647,6113	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	17,5	16,5
2647,732	2647,7335	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	18,5	18,5
2648,429	2648,4323	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	12,5	11,5
2649,430	2649,4261	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	12,5	11,5
2650,388	2650,3821	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	4,5	3,5
2653,976	2653,9735	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	15,5	14,5
2654,691	2654,6934	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	10,5	10,5
2655,290	2655,2874	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	15,5	14,5
2655,589	2655,5834	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	2,5	1,5
2656,821	2656,8205	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	14,5	13,5
2657,797	2657,7987	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	14,5	13,5
2659,354	2659,3532	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	5,5	4,5
2665,229	2665,2234	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	8,5	7,5
2665,334	2665,3318	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	37,5	36,5
2665,812	2665,8061	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	8,5	7,5
2675,901	2675,8986	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	20,5	19,5
2677,551	2677,5501	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	19,5	18,5
2677,756	2677,7607	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	20,5	19,5
2679,031	2679,0341	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	19,5	18,5
2686,409	2686,4040	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	9,5	9,5
2688,175	2688,1759	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	3,5	2,5
2690,776	2690,7744	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	8,5	8,5
2691,102	2691,0958	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	4,5	3,5
2693,337	2693,3388	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	11,5	10,5
2696,001	2696,0026	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	17,5	16,5
2696,304	2696,3045	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	3,5	3,5
2697,274	2697,2765	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	10,5	9,5
2697,543	2697,5472	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	17,5	16,5
2698,236	2698,2371	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	16,5	15,5
2698,346	2698,3498	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	12,5	11,5
2699,425	2699,4212	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	16,5	15,5
2702,038	2702,0327	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	14,5	13,5
2702,877	2702,8766	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	4,5	3,5
2703,257	2703,2545	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	14,5	13,5
2703,437	2703,4349	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	7,5	6,5
2703,921	2703,9222	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	7,5	6,5
2703,999	2703,9937	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	11,5	10,5
2705,215	2705,2161	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	13,5	12,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
2706,106	2706,1100	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	13,5	12,5
2711,024	2711,0281	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	7,5	7,5
2711,534	2711,5377	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	24,5	23,5
2714,011	2714,0154	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	17,5	17,5
2714,190	2714,1866	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	22,5	22,5
2722,482	2722,4793	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	4,5	3,5
2723,361	2723,3661	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	5,5	4,5
2723,558	2723,5546	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	6,5	6,5
2727,582	2727,5860	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	27,5	26,5
2730,332	2730,3288	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	19,5	18,5
2733,523	2733,5259	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	18,5	17,5
2740,326	2740,3293	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	6,5	5,5
2740,717	2740,7199	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	6,5	5,5
2741,057	2741,0520	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	9,5	8,5
2741,567	2741,5627	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	9,5	8,5
2746,692	2746,6946	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	14,5	14,5
2747,019	2747,0247	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	16,5	15,5
2747,423	2747,4238	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	2,5	2,5
2748,475	2748,4785	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	16,5	15,5
2749,267	2749,2629	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	13,5	12,5
2749,388	2749,3841	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	4,5	3,5
2749,494	2749,4918	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	15,5	14,5
2750,393	2750,3913	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	13,5	12,5
2750,592	2750,5912	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	15,5	14,5
2750,703	2750,7009	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	25,5	25,5
2751,908	2751,9069	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	5,5	4,5
2752,855	2752,8527	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	12,5	11,5
2753,661	2753,6611	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	12,5	11,5
2754,870	2754,8674	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	35,5	35,5
2758,355	2758,3594	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	10,5	10,5
2758,610	2758,6150	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	1,5	1,5
2764,266	2764,2669	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	13	11	10,5	10,5
2765,008	2765,0129	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	23,5	22,5
2767,952	2767,9491	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	9,5	9,5
2769,375	2769,3715	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	33,5	32,5
2775,803	2775,8081	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	5,5	4,5
2776,106	2776,1014	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	5,5	4,5
2776,291	2776,2959	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	4,5	4,5
2778,075	2778,0804	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	9,5	8,5
2778,970	2778,9744	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	20,5	20,5
2783,957	2783,9606	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	8,5	7,5
2784,187	2784,1878	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	18,5	17,5
2784,381	2784,3826	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	8,5	7,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
2785,212	2785,2163	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	6,5	5,5
2785,876	2785,8752	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	18,5	17,5
2786,149	2786,1478	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	17,5	16,5
2787,466	2787,4671	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	17,5	16,5
2792,669	2792,6658	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	6,5	5,5
2793,320	2793,3209	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	20,5	19,5
2795,613	2795,6111	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	12,5	11,5
2796,232	2796,2372	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	9	8	14,5	13,5
2796,647	2796,6451	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	12,5	11,5
2797,321	2797,3258	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	15,5	14,5
2798,685	2798,6871	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	15,5	14,5
2799,081	2799,0789	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	15,5	14,5
2799,699	2799,6977	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	11,5	10,5
2800,064	2800,0688	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	14,5	13,5
2800,420	2800,4192	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	11,5	10,5
2801,083	2801,0820	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	14,5	13,5
2803,712	2803,7056	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	20,5	19,5
2804,316	2804,3137	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	3,5	3,5
2806,840	2806,8432	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	11,5	10,5
2807,115	2807,1153	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	6,5	6,5
2809,282	2809,2880	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	18,5	17,5
2809,455	2809,4578	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	15,5	14,5
2811,884	2811,8842	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	18,5	17,5
2812,793	2812,7874	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	15,5	15,5
2814,074	2814,0775	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	1	46,5	45,5
2814,150	2814,1500	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	24,5	24,5
2814,809	2814,8130	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	13,5	12,5
2814,921	2814,9259	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	12,5	12,5
2816,198	2816,2029	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	13	11	7,5	6,5
2816,501	2816,5064	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	7,5	7,5
2818,158	2818,1570	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	8,5	7,5
2818,646	2818,6419	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	13,5	12,5
2818,771	2818,7715	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	8,5	7,5
2819,600	2819,6014	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	14,5	13,5
2820,314	2820,3107	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	5,5	4,5
2821,167	2821,1632	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	6	16,5	15,5
2825,995	2825,9971	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	7,5	6,5
2826,478	2826,4731	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	2,5	2,5
2827,096	2827,0986	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	3,5	2,5
2829,378	2829,3777	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	23,5	22,5
2837,428	2837,4287	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	17,5	16,5
2838,076	2838,0783	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	4,5	3,5
2839,024	2839,0254	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	17,5	16,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
2839,585	2839,5819	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	16,5	15,5
2840,818	2840,8160	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	16,5	15,5
2841,023	2841,0210	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	11,5	10,5
2841,964	2841,9596	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	11,5	10,5
2842,227	2842,2214	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	33,5	33,5
2845,720	2845,7220	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	10,5	9,5
2846,851	2846,8558	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	14,5	13,5
2848,122	2848,1232	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	14,5	13,5
2849,931	2849,9294	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	13,5	12,5
2850,860	2850,8551	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	13,5	12,5
2851,638	2851,6384	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	12,5	12,5
2852,098	2852,1020	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	3,5	2,5
2857,721	2857,7188	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	7,5	6,5
2857,914	2857,9087	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	3,5	2,5
2858,232	2858,2351	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	7,5	6,5
2862,178	2862,1738	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	5,5	4,5
2864,373	2864,3776	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	0	47,5	47,5
2867,170	2867,1683	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	6,5	5,5
2867,404	2867,4078	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	6,5	5,5
2872,328	2872,3286	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	27,5	27,5
2881,084	2881,0817	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	7,5	7,5
2885,435	2885,4379	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	11,5	10,5
2886,275	2886,2734	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	10,5	9,5
2889,080	2889,0761	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	26,5	25,5
2890,003	2890,0029	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	16,5	15,5
2890,670	2890,6739	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	0	40,5	39,5
2890,905	2890,9021	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	9,5	8,5
2891,506	2891,5070	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	16,5	15,5
2892,381	2892,3835	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	15,5	14,5
2893,533	2893,5306	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	15,5	14,5
2895,560	2895,5626	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	13,5	12,5
2895,958	2895,9590	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	6,5	5,5
2896,064	2896,0686	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	4,5	4,5
2896,373	2896,3751	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	6,5	5,5
2896,733	2896,7346	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	13,5	12,5
2899,036	2899,0363	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	12,5	11,5
2899,878	2899,8732	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	12,5	11,5
2901,970	2901,9660	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	4,5	4,5
2904,605	2904,6106	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	18,5	17,5
2907,488	2907,4925	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	5,5	4,5
2907,641	2907,6385	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	5,5	4,5
2914,691	2914,6862	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	13	11	9,5	8,5
2923,471	2923,4663	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	10,5	9,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
2928,156	2928,1513	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	17,5	16,5
2928,773	2928,7749	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	9,5	8,5
2929,521	2929,5190	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	9,5	8,5
2932,769	2932,7695	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	5,5	4,5
2933,082	2933,0840	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	5,5	4,5
2935,220	2935,2225	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	8,5	7,5
2935,669	2935,6747	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	8,5	7,5
2936,420	2936,4180	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	29,5	28,5
2936,521	2936,5260	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	22,5	21,5
2938,785	2938,7820	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	8,5	7,5
2939,825	2939,8249	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	32,5	31,5
2941,861	2941,8603	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	15,5	14,5
2942,722	2942,7242	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	5,5	4,5
2943,271	2943,2700	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	15,5	14,5
2943,390	2943,3909	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	12,5	11,5
2945,334	2945,3301	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	3,5	3,5
2945,571	2945,5694	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	14,5	13,5
2946,855	2946,8547	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	46,5	46,5
2947,355	2947,3548	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	11,5	10,5
2948,105	2948,1017	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	11,5	10,5
2956,908	2956,9075	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	13	11	3,5	2,5
2958,895	2958,8905	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	29,5	29,5
2960,715	2960,7161	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	24,5	23,5
2961,030	2961,0325	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	23,5	22,5
2963,479	2963,4750	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	12,5	12,5
2963,672	2963,6684	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	1,5	0,5
2964,226	2964,2254	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	30,5	30,5
2964,686	2964,6890	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	24,5	24,5
2965,529	2965,5266	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	12,5	12,5
2966,544	2966,5493	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	21,5	20,5
2967,036	2967,0400	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	9,5	8,5
2968,038	2968,0379	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	4,5	3,5
2968,257	2968,2514	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	4,5	3,5
2968,427	2968,4297	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	24,5	24,5
2970,976	2970,9753	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	8,5	7,5
2971,620	2971,6201	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	8,5	7,5
2975,969	2975,9640	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	12,5	12,5
2978,682	2978,6790	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	7,5	6,5
2978,821	2978,8232	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	3,5	2,5
2979,040	2979,0378	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	7,5	6,5
2979,632	2979,6280	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	31,5	30,5
2980,388	2980,3903	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	6,5	5,5
2981,240	2981,2385	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	10,5	9,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
2982,930	2982,9356	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	2,5	2,5
2983,165	2983,1633	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	2,5	2,5
2987,763	2987,7583	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	13	11	10,5	10,5
2988,189	2988,1932	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	22,5	21,5
2990,281	2990,2823	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	11,5	10,5
2990,976	2990,9731	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	28,5	28,5
2991,259	2991,2599	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	11,5	10,5
2992,949	2992,9487	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	14,5	13,5
2994,265	2994,2623	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	14,5	13,5
2994,851	2994,8542	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	10,5	9,5
2995,514	2995,5099	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	10,5	9,5
2995,751	2995,7517	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	17,5	16,5
2995,922	2995,9231	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	13,5	12,5
2996,896	2996,8917	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	13,5	12,5
3001,790	3001,7913	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	3,5	2,5
3011,946	3011,9450	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	7,5	6,5
3012,858	3012,8597	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	6	5	14,5	13,5
3013,566	3013,5665	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	15,5	14,5
3015,970	3015,9746	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	9,5	9,5
3016,857	3016,8604	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	17,5	16,5
3016,990	3016,9867	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	17,5	16,5
3018,333	3018,3303	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	8	7	14,5	13,5
3021,287	3021,2929	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	3,5	2,5
3021,543	3021,5446	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	6,5	5,5
3025,773	3025,7764	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	8,5	8,5
3032,281	3032,2812	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	4,5	3,5
3032,502	3032,4965	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	4,5	3,5
3036,173	3036,1732	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	10,5	9,5
3037,050	3037,0519	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	10,5	9,5
3041,509	3041,5096	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	9,5	8,5
3042,073	3042,0729	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	9,5	8,5
3043,217	3043,2137	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	13,5	12,5
3043,830	3043,8252	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	13	11	4,5	3,5
3044,431	3044,4298	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	13,5	12,5
3045,816	3045,8194	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	48,5	47,5
3046,582	3046,5811	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	12,5	11,5
3047,463	3047,4583	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	12,5	11,5
3047,833	3047,8312	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	16,5	16,5
3050,889	3050,8871	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	28,5	27,5
3051,582	3051,5819	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	6,5	5,5
3052,018	3052,0222	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	6,5	5,5
3052,389	3052,3931	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	35,5	34,5
3053,134	3053,1352	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	15,5	14,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
3056,780	3056,7789	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	1	43,5	43,5
3058,015	3058,0117	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	5,5	5,5
3063,055	3063,0562	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	5,5	4,5
3063,221	3063,2208	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	5,5	4,5
3067,016	3067,0196	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	40,5	40,5
3069,504	3069,5043	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	1	44,5	43,5
3071,691	3071,6903	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	25,5	25,5
3073,515	3073,5207	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	2,5	2,5
3074,559	3074,5613	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	1,5	1,5
3076,574	3076,5764	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	1,5	1,5
3080,416	3080,4114	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	20,5	19,5
3080,993	3080,9937	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	9,5	8,5
3081,771	3081,7720	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	9,5	8,5
3087,306	3087,3054	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	8,5	7,5
3087,775	3087,7746	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	8,5	7,5
3089,767	3089,7681	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	5,5	4,5
3090,102	3090,1031	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	5,5	4,5
3092,600	3092,5985	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	12,5	11,5
3093,712	3093,7155	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	12,5	11,5
3093,985	3093,9803	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	23,5	22,5
3096,446	3096,4481	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	11,5	10,5
3097,233	3097,2327	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	11,5	10,5
3098,740	3098,7366	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	16,5	15,5
3104,038	3104,0349	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	4,5	3,5
3104,106	3104,1010	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	4,5	3,5
3120,086	3120,0920	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	43,5	42,5
3121,589	3121,5841	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	13,5	13,5
3124,666	3124,6647	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	8,5	7,5
3125,340	3125,3410	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	8,5	7,5
3126,376	3126,3772	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	4,5	3,5
3126,604	3126,6064	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	4,5	3,5
3127,411	3127,4094	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	10,5	9,5
3132,238	3132,2381	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	7,5	6,5
3132,615	3132,6111	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	7,5	6,5
3133,528	3133,5257	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	18,5	17,5
3136,941	3136,9426	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	11,5	11,5
3138,866	3138,8648	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	43,5	43,5
3141,044	3141,0422	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	11,5	10,5
3142,060	3142,0589	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	11,5	10,5
3144,651	3144,6488	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	11,5	11,5
3145,495	3145,4920	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	10,5	9,5
3146,184	3146,1825	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	10,5	9,5
3147,785	3147,7831	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	7,5	6,5



Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
3148,611	3148,6093	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	2,5	1,5
3151,843	3151,8400	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	23,5	22,5
3160,261	3160,2643	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	38,5	38,5
3161,425	3161,4285	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	3,5	2,5
3163,809	3163,8054	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	6,5	5,5
3164,742	3164,7432	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	13	11	11,5	10,5
3165,658	3165,6590	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	24,5	23,5
3167,096	3167,0945	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	7,5	6,5
3167,666	3167,6666	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	7,5	6,5
3175,415	3175,4138	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	46,5	45,5
3176,318	3176,3212	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	6,5	5,5
3176,596	3176,5956	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	6,5	5,5
3177,621	3177,6205	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	1	42,5	42,5
3183,472	3183,4730	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	2,5	1,5
3183,843	3183,8477	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	12,5	11,5
3188,097	3188,0997	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	21,5	20,5
3188,481	3188,4794	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	10,5	9,5
3189,393	3189,3945	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	10,5	9,5
3192,718	3192,7215	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	7,5	7,5
3193,401	3193,4037	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	14,5	13,5
3193,689	3193,6869	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	9,5	8,5
3194,284	3194,2819	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	9,5	8,5
3195,925	3195,9268	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	20,5	19,5
3196,032	3196,0310	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	32,5	31,5
3201,546	3201,5426	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	13	11	2,5	1,5
3201,631	3201,6361	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	19,5	18,5
3205,872	3205,8669	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	7,5	6,5
3206,354	3206,3478	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	16,5	15,5
3206,931	3206,9285	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	5	4	17,5	16,5
3208,176	3208,1747	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	6,5	5,5
3208,638	3208,6401	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	6,5	5,5
3210,348	3210,3485	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	15,5	15,5
3211,157	3211,1587	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	12	10	10,5	9,5
3213,243	3213,2383	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	22,5	21,5
3219,583	3219,5872	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	5,5	4,5
3219,764	3219,7602	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	5,5	4,5
3219,933	3219,9282	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	4,5	3,5
3220,432	3220,4334	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	10,5	9,5
3224,939	3224,9367	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	5,5	4,5
3225,943	3225,9419	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	19,5	19,5
3227,887	3227,8930	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	13	11	7,5	6,5
3228,062	3228,0589	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	3,5	3,5
3228,622	3228,6218	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	7	19,5	18,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
3230,185	3230,1809	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	5	4	14,5	14,5
3231,647	3231,6464	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	3,5	3,5
3232,391	3232,3928	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	3,5	3,5
3233,606	3233,6099	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	2,5	2,5
3234,659	3234,6582	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	36,5	35,5
3234,839	3234,8379	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	9,5	8,5
3235,650	3235,6499	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	9,5	8,5
3238,196	3238,1923	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	20,5	20,5
3239,246	3239,2437	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	1,5	1,5
3239,837	3239,8362	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	45,5	44,5
3241,018	3241,0164	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	8,5	7,5
3241,516	3241,5146	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	5,5	4,5
3243,610	3243,6144	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	7	5	25,5	24,5
3244,210	3244,2065	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	14,5	14,5
3247,779	3247,7779	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	5,5	4,5
3248,134	3248,1339	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	5,5	4,5
3249,058	3249,0566	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	36,5	36,5
3251,413	3251,4092	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	13,5	12,5
3256,601	3256,5985	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	1,5	1,5
3257,779	3257,7808	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	22,5	21,5
3262,679	3262,6769	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	11	9	14,5	13,5
3263,003	3263,0051	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	20,5	20,5
3267,222	3267,2211	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	2,5	2,5
3267,530	3267,5273	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	5,5	5,5
3268,016	3268,0112	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	20,5	19,5
3269,344	3269,3466	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	7,5	6,5
3274,168	3274,1732	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	36,5	35,5
3274,286	3274,2898	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	16,5	15,5
3280,036	3280,0357	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	8,5	7,5
3280,742	3280,7429	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	8,5	7,5
3284,810	3284,8089	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	9,5	8,5
3285,763	3285,7631	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	4,5	3,5
3286,008	3286,0085	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	4,5	3,5
3287,479	3287,4782	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	7,5	6,5
3287,876	3287,8763	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	7,5	6,5
3294,768	3294,7639	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	28,5	28,5
3296,123	3296,1213	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	18,5	18,5
3299,463	3299,4577	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	27,5	26,5
3299,889	3299,8935	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	27,5	26,5
3307,468	3307,4682	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	44,5	44,5
3308,074	3308,0695	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	9,5	8,5
3309,004	3309,0014	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	5,5	5,5
3309,850	3309,8443	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	5,5	5,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
3317,669	3317,6675	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	10,5	9,5
3318,916	3318,9191	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	19,5	19,5
3319,470	3319,4717	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	27,5	26,5
3320,103	3320,1079	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	12	10	6,5	5,5
3322,001	3322,0014	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	3,5	2,5
3322,145	3322,1409	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	3,5	2,5
3323,155	3323,1576	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	17,5	17,5
3323,979	3323,9772	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	7,5	6,5
3324,575	3324,5773	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	7,5	6,5
3326,493	3326,4958	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	2,5	1,5
3330,511	3330,5054	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	9,5	9,5
3333,089	3333,0887	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	6,5	5,5
3333,386	3333,3843	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	6,5	5,5
3336,241	3336,2431	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	26,5	25,5
3340,127	3340,1276	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	11	9	9,5	8,5
3340,845	3340,8413	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	20,5	19,5
3340,949	3340,9518	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	12	10	7,5	7,5
3341,757	3341,7607	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	12	10	1,5	0,5
3341,872	3341,8707	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	3,5	2,5
3344,674	3344,6773	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	2,5	1,5
3344,787	3344,7848	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	2,5	1,5
3346,239	3346,2351	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	33,5	32,5
3347,392	3347,3942	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	7	6	20,5	19,5
3351,085	3351,0795	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	8,5	8,5
3351,396	3351,3982	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	24,5	23,5
3351,517	3351,5183	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	24,5	23,5
3351,811	3351,8063	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	12	10	3,5	2,5
3355,203	3355,1983	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	25,5	25,5
3358,125	3358,1197	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	11,5	10,5
3360,166	3360,1598	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	2,5	2,5
3366,550	3366,5482	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	6,5	5,5
3367,037	3367,0383	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	6,5	5,5
3372,980	3372,9743	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	0	44,5	43,5
3374,117	3374,1137	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	13,5	12,5
3377,885	3377,8875	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	5,5	4,5
3378,075	3378,0773	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	5,5	4,5
3380,712	3380,7184	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	1,5	1,5
3383,422	3383,4217	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	15,5	14,5
3384,225	3384,2238	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	38,5	38,5
3388,768	3388,7677	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	15,5	14,5
3389,176	3389,1720	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	20,5	19,5
3391,334	3391,3333	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	11,5	11,5
3391,800	3391,7963	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	38,5	38,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
3393,414	3393,4149	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	20,5	19,5
3394,369	3394,3732	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	5,5	4,5
3394,895	3394,8970	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	18,5	17,5
3395,077	3395,0742	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	4	3	17,5	16,5
3395,246	3395,2410	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	3,5	3,5
3395,450	3395,4496	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	18,5	17,5
3396,050	3396,0467	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	3,5	3,5
3397,213	3397,2118	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	2,5	2,5
3400,085	3400,0853	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	2,5	2,5
3400,751	3400,7502	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	1,5	1,5
3402,819	3402,8225	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	1,5	1,5
3402,927	3402,9322	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	42,5	41,5
3407,375	3407,3767	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	32,5	31,5
3407,613	3407,6117	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	5,5	4,5
3407,986	3407,9885	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	5,5	4,5
3412,779	3412,7785	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	14,5	14,5
3421,927	3421,9322	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	4,5	3,5
3424,086	3424,0852	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	13,5	12,5
3434,061	3434,0635	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	12	10	2,5	1,5
3434,645	3434,6455	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	13,5	13,5
3436,804	3436,7992	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	6,5	5,5
3442,181	3442,1792	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	1,5	0,5
3447,016	3447,0115	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	4,5	3,5
3453,713	3453,7093	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	36,5	35,5
3459,906	3459,9029	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	12	10	10,5	9,5
3462,589	3462,5901	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	4,5	4,5
3464,506	3464,5002	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	11	9	7,5	6,5
3470,341	3470,3419	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	12	10	0,5	0,5
3481,673	3481,6739	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	28,5	27,5
3484,594	3484,5983	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	3,5	2,5
3484,749	3484,7482	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	3,5	2,5
3489,092	3489,0907	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	36,5	35,5
3489,472	3489,4758	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	35,5	34,5
3493,001	3493,0005	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	8	12,5	11,5
3494,127	3494,1248	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	1	2,5	1,5
3502,001	3502,0002	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	27,5	26,5
3509,564	3509,5633	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	3,5	2,5
3510,822	3510,8165	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	9	7	16,5	15,5
3512,081	3512,0802	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	11	9	10,5	9,5
3512,465	3512,4673	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	7,5	7,5
3516,726	3516,7239	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	12	10	2,5	1,5
3532,405	3532,4007	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	7,5	7,5
3534,956	3534,9508	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	25,5	24,5

Tabulka 5 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
3537,868	3537,8657	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	4,5	3,5
3541,038	3541,0400	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	1	41,5	40,5
3548,676	3548,6793	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	8	14,5	14,5
3556,264	3556,2615	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	3,5	2,5
3556,818	3556,8180	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	14,5	13,5
3557,133	3557,1361	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	34,5	33,5
3559,444	3559,4469	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	24,5	23,5
3564,867	3564,8711	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	2	1	5,5	4,5
3565,672	3565,6678	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	2,5	2,5
3566,080	3566,0815	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	11	9	9,5	8,5
3568,416	3568,4159	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	1,5	1,5
3568,523	3568,5228	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	1,5	1,5
3568,909	3568,9058	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	0,5	0,5
3569,213	3569,2145	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	0	0,5	0,5
3571,168	3571,1709	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	4	3	7,5	6,5
3578,154	3578,1589	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	3	2	16,5	15,5
3578,672	3578,6759	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	3	2	17,5	16,5
3582,911	3582,9115	X <sub>1/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	6	5	23,5	22,5
3586,253	3586,2484	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	0	39,5	38,5
3588,743	3588,7436	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	10	8	15,5	14,5
3591,748	3591,7523	X <sub>3/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	2	0	41,5	41,5

Tabulka 6: Rotační emisní linie OH v základním a prvním excitovaném vibračním stavu

$v_{\text{exp}} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	$v_{\text{the}} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	GUQ	GLQ	$v'$	$v''$	$J'$	$J''$
710,139	710,1364	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	20,5	19,5
710,774	710,7714	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	21,5	20,5
711,196	711,1886	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	20,5	19,5
712,000	711,9951	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	21,5	20,5
737,487	737,4856	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	21,5	20,5
738,052	738,0500	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	22,5	21,5
738,556	738,5517	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	21,5	20,5
739,285	739,2818	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	22,5	21,5
757,366	757,3654	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	1	23,5	22,5
757,838	757,8394	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	1	24,5	23,5
758,997	758,9941	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	1	24,5	23,5
763,983	763,9828	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	22,5	21,5
764,484	764,4861	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	23,5	22,5
765,058	765,0580	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	22,5	21,5
765,719	765,7208	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	23,5	22,5
780,877	780,8806	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	1	24,5	23,5
781,302	781,3067	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	1	25,5	24,5
781,889	781,8884	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	1	24,5	23,5
782,450	782,4516	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	1	25,5	24,5
789,600	789,6035	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	23,5	22,5
790,050	790,0534	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	24,5	23,5
790,680	790,6827	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	23,5	22,5
791,281	791,2860	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	24,5	23,5
803,484	803,4846	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	1	25,5	24,5
803,863	803,8687	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	1	26,5	25,5
814,319	814,3239	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	24,5	23,5
814,722	814,7272	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	25,5	24,5
815,398	815,4022	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	24,5	23,5
815,948	815,9525	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	25,5	24,5
825,147	825,1554	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	1	26,5	25,5
825,497	825,5026	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	1	1	27,5	26,5
826,135	826,1420	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	1	1	26,5	25,5
838,116	838,1217	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	25,5	24,5
838,480	838,4842	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	26,5	25,5
839,189	839,1942	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	25,5	24,5
839,691	839,6970	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	26,5	25,5
860,970	860,9758	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	26,5	25,5
861,298	861,3024	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	27,5	26,5
862,032	862,0374	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	26,5	25,5
862,493	862,4976	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	27,5	26,5
882,862	882,8660	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	27,5	26,5
883,157	883,1610	X <sub>3/2</sub>	X <sub>3/2</sub>	0	0	28,5	27,5
883,910	883,9119	X <sub>1/2</sub>	X <sub>1/2</sub>	0	0	27,5	26,5

Tabulka 6 (pokračování)

$\nu_{\text{exp}} (\text{cm}^{-1})$	$\nu_{\text{the}} (\text{cm}^{-1})$	GUQ	GLQ	$\nu'$	$\nu''$	$J'$	$J''$
884,330	884,3335	$X_{3/2}$	$X_{3/2}$	0	0	28,5	27,5
903,769	903,7735	$X_{1/2}$	$X_{1/2}$	0	0	28,5	27,5
904,036	904,0406	$X_{3/2}$	$X_{3/2}$	0	0	29,5	28,5
904,795	904,7988	$X_{1/2}$	$X_{1/2}$	0	0	28,5	27,5
905,179	905,1854	$X_{3/2}$	$X_{3/2}$	0	0	29,5	28,5
923,678	923,6805	$X_{1/2}$	$X_{1/2}$	0	0	29,5	28,5
923,919	923,9230	$X_{3/2}$	$X_{3/2}$	0	0	30,5	29,5
924,680	924,6804	$X_{1/2}$	$X_{1/2}$	0	0	29,5	28,5
925,033	925,0350	$X_{3/2}$	$X_{3/2}$	0	0	30,5	29,5
942,571	942,5702	$X_{1/2}$	$X_{1/2}$	0	0	30,5	29,5
942,788	942,7908	$X_{3/2}$	$X_{3/2}$	0	0	31,5	30,5
943,540	943,5400	$X_{1/2}$	$X_{1/2}$	0	0	30,5	29,5
943,862	943,8652	$X_{3/2}$	$X_{3/2}$	0	0	31,5	30,5
960,626	960,6281	$X_{3/2}$	$X_{3/2}$	0	0	32,5	31,5
961,651	961,6600	$X_{3/2}$	$X_{3/2}$	0	0	32,5	31,5

Tabulka 9: Experimentální pozice linií CN radikálu ve stavu  $X^2\Sigma^+$  (fundamentální)

$\nu$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1928,5855	26	27	1	0	2101,2625	17	16	1	0
1933,2020	25	26	1	0	2104,3954	18	17	1	0
1937,8149	24	25	1	0	2107,4877	19	18	1	0
1942,3878	23	24	1	0	2110,5439	20	19	1	0
1946,9344	22	23	1	0	2112,5613	21	20	1	0
1951,4403	21	22	1	0	2116,5377	22	21	1	0
1955,9139	20	21	1	0	2119,4735	23	22	1	0
1960,3640	19	20	1	0	2122,3717	24	23	1	0
1964,7830	18	19	1	0	2125,2563	25	24	1	0
1969,1610	17	18	1	0	2128,1161	26	25	1	0
1973,5134	16	17	1	0	2130,8628	27	26	1	0
1977,8299	15	16	1	0	2133,5737	28	27	1	0
1982,1188	14	15	1	0	1912,3507	24	25	2	1
1986,3719	13	14	1	0	1916,8967	23	24	2	1
1990,5944	12	13	1	0	1921,4114	22	23	2	1
1994,7822	11	12	1	0	1925,8873	21	22	2	1
1998,9378	10	11	1	0	1930,3330	20	21	2	1
2003,0601	9	10	1	0	1934,7503	19	20	2	1
2007,1483	8	9	1	0	1939,1278	18	19	2	1
2011,2042	7	8	1	0	1943,4779	17	18	2	1
2015,2257	6	7	1	0	1947,7994	16	17	2	1
2019,2137	5	6	1	0	1952,0832	15	16	2	1
2023,1678	4	5	1	0	1956,3365	14	15	2	1
2027,0870	3	4	1	0	1960,5572	13	14	2	1
2030,9735	2	3	1	0	1964,7432	12	13	2	1
2034,8172	1	2	1	0	1968,8991	11	12	2	1
2038,6415	0	1	1	0	1973,0215	10	11	2	1
2046,1731	1	0	1	0	1977,1091	9	10	2	1
2049,8840	2	1	1	0	1981,1653	8	9	2	1
2053,5619	3	2	1	0	1985,1861	7	8	2	1
2057,2034	4	3	1	0	1989,1737	6	7	2	1
2060,8098	5	4	1	0	1993,1274	5	6	2	1
2064,3806	6	5	1	0	1997,0467	4	5	2	1
2067,9153	7	6	1	0	2000,9327	3	4	2	1
2071,4142	8	7	1	0	2004,7752	2	3	2	1
2074,8768	9	8	1	0	2008,6006	1	2	2	1
2078,3038	10	9	1	0	2012,3840	0	1	2	1
2081,6943	11	10	1	0	2019,8438	1	0	2	1
2085,0476	12	11	1	0	2023,5209	2	1	2	1
2088,3645	13	12	1	0	2027,1632	3	2	2	1
2091,6447	14	13	1	0	2030,7691	4	3	2	1
2094,8878	15	14	1	0	2034,3397	5	4	2	1
2098,0937	16	15	1	0	2037,8752	6	5	2	1



Tabulka 9 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
2041,3746	7	6	2	1	1993,4751	1	0	3	2
2044,8378	8	7	2	1	1997,1204	2	1	3	2
2048,2649	9	8	2	1	2000,7248	3	2	3	2
2051,6558	10	9	2	1	2004,2952	4	3	3	2
2055,0098	11	10	2	1	2007,8314	5	4	3	2
2058,3277	12	11	2	1	2011,3309	6	5	3	2
2061,6090	13	12	2	1	2014,7942	7	6	3	2
2064,8485	14	13	2	1	2018,2215	8	7	3	2
2068,0587	15	14	2	1	2021,6128	9	8	3	2
2071,2298	16	15	2	1	2024,9676	10	9	3	2
2074,3594	17	16	2	1	2028,2849	11	10	3	2
2077,4544	18	17	2	1	2031,5668	12	11	3	2
2080,5117	19	18	2	1	2034,8172	13	12	3	2
2083,5320	20	19	2	1	2038,0184	14	13	3	2
2086,5050	21	20	2	1	2041,1879	15	14	3	2
2089,4503	22	21	2	1	2044,3201	16	15	3	2
2092,3576	23	22	2	1	2047,4164	17	16	3	2
2095,2542	24	23	2	1	2050,4704	18	17	3	2
2098,0491	25	24	2	1	2053,4899	19	18	3	2
2100,8117	26	25	2	1	2056,4728	20	19	3	2
2103,5892	27	26	2	1	2059,4119	21	20	3	2
2106,2607	28	27	2	1	2062,3248	22	21	3	2
2108,9338	29	28	2	1	2065,1719	23	22	3	2
2111,5424	30	29	2	1	2068,0104	24	23	3	2
2114,2053	31	30	2	1	2070,7981	25	24	3	2
1913,4396	18	19	3	2	2073,5051	26	25	3	2
1917,7724	17	18	3	2	2076,2609	27	26	3	2
1922,0434	16	17	3	2	2078,9582	28	27	3	2
1926,2969	15	16	3	2	2081,5644	29	28	3	2
1930,5166	14	15	3	2	2084,1264	30	29	3	2
1938,8586	12	13	3	2	1879,0565	20	21	4	3
1942,9789	11	12	3	2	1883,3974	19	20	4	3
1947,0669	10	11	3	2	1887,6986	18	19	4	3
1951,1218	9	10	3	2	1891,9962	17	18	4	3
1955,1433	8	9	3	2	1896,2530	16	17	4	3
1959,1301	7	8	3	2	1900,4697	15	16	4	3
1963,0831	6	7	3	2	1904,6590	14	15	4	3
1967,0031	5	6	3	2	1908,8107	13	14	4	3
1970,8884	4	5	3	2	1912,9321	12	13	4	3
1974,7401	3	4	3	2	1917,0201	11	12	4	3
1978,5553	2	3	3	2	1921,0744	10	11	4	3
1982,3364	1	2	3	2	1925,0944	9	10	4	3
1986,0849	0	1	3	2	1933,0352	7	8	4	3

Tabulka 9 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1936,9546	6	7	4	3	1891,0186	11	12	5	4
1940,8393	5	6	4	3	1895,0415	10	11	5	4
1944,6911	4	5	4	3	1899,0268	9	10	5	4
1948,5072	3	4	4	3	1902,9792	8	9	5	4
1952,2885	2	3	4	3	1906,8983	7	8	5	4
1956,0374	1	2	4	3	1910,7842	6	7	5	4
1959,7519	0	1	4	3	1914,6344	5	6	5	4
1967,0700	1	0	4	3	1918,4500	4	5	5	4
1970,6745	2	1	4	3	1922,2334	3	4	5	4
1974,2471	3	2	4	3	1925,9797	2	3	5	4
1977,7820	4	3	4	3	1929,6927	1	2	5	4
1981,2823	5	4	4	3	1933,3707	0	1	5	4
1984,7451	6	5	4	3	1940,6144	1	0	5	4
1988,1732	7	6	4	3	1944,1887	2	1	5	4
1991,5644	8	7	4	3	1947,7257	3	2	5	4
1994,9192	9	8	4	3	1951,2274	4	3	5	4
1998,2386	10	9	4	3	1954,6896	5	4	5	4
2001,5185	11	10	4	3	1958,1176	6	5	5	4
2004,7751	12	11	4	3	1961,5093	7	6	5	4
2007,9730	13	12	4	3	1964,8646	8	7	5	4
2011,1463	14	13	4	3	1968,1830	9	8	5	4
2014,2751	15	14	4	3	1971,4660	10	9	5	4
2017,3701	16	15	4	3	1974,7401	11	10	5	4
2020,4280	17	16	4	3	1977,9176	12	11	5	4
2023,4488	18	17	4	3	1981,0874	13	12	5	4
2026,4283	19	18	4	3	1984,2228	14	13	5	4
2029,3747	20	19	4	3	1987,3204	15	14	5	4
2032,2860	21	20	4	3	1990,3789	16	15	5	4
2035,1494	22	21	4	3	1993,3984	17	16	5	4
2037,9720	23	22	4	3	1996,3794	18	17	5	4
2040,7559	24	23	4	3	1999,3226	19	18	5	4
2043,5171	25	24	4	3	2002,2282	20	19	5	4
2046,2237	26	25	4	3	2005,1024	21	20	5	4
2048,8977	27	26	4	3	2007,9237	22	21	5	4
1853,3519	20	21	5	4	2010,7229	23	22	5	4
1857,6627	19	20	5	4	2013,4075	24	23	5	4
1861,9471	18	19	5	4	2016,1979	25	24	5	4
1866,2023	17	18	5	4	2018,8718	26	25	5	4
1870,4164	16	17	5	4	1844,5397	16	17	6	5
1874,5996	15	16	5	4	1848,6991	15	16	6	5
1878,7577	14	15	5	4	1852,8143	14	15	6	5
1882,8797	13	14	5	4	1856,9055	13	14	6	5
1886,9652	12	13	5	4	1860,9559	12	13	6	5

Tabulka 9 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1864,9779	11	12	6	5	1865,8429	4	5	7	6
1872,9162	9	10	6	5	1869,5497	3	4	7	6
1876,8354	8	9	6	5	1873,2297	2	3	7	6
1880,7213	7	8	6	5	1876,8761	1	2	7	6
1884,5728	6	7	6	5	1887,5802	1	0	7	6
1888,3869	5	6	6	5	1891,0880	2	1	7	6
1892,1679	4	5	6	5	1894,5505	3	2	7	6
1895,9158	3	4	6	5	1897,9789	4	3	7	6
1899,6268	2	3	6	5	1901,3698	5	4	7	6
1903,3036	1	2	6	5	1904,7246	6	5	7	6
1906,9448	0	1	6	5	1908,0437	7	6	7	6
1914,1238	1	0	6	5	1911,3281	8	7	7	6
1917,6601	2	1	6	5	1914,5755	9	8	7	6
1921,1622	3	2	6	5	1917,7724	10	9	7	6
1924,6259	4	3	6	5	1920,9524	11	10	7	6
1928,0538	5	4	6	5	1924,0855	12	11	7	6
1931,4453	6	5	6	5	1927,1844	13	12	7	6
1934,8021	7	6	6	5	1930,2394	14	13	7	6
1938,1189	8	7	6	5	1933,2620	15	14	7	6
1941,4018	9	8	6	5	1936,2485	16	15	7	6
1947,8548	11	10	6	5	1939,1858	17	16	7	6
1951,0282	12	11	6	5	1942,1069	18	17	7	6
1954,1597	13	12	6	5	1944,9719	19	18	7	6
1957,2567	14	13	6	5	1947,7994	20	19	7	6
1960,3161	15	14	6	5	1950,5953	21	20	7	6
1963,3356	16	15	6	5	1816,6909	10	11	8	7
1966,3226	17	16	6	5	1820,5594	9	10	8	7
1972,1678	19	18	6	5	1824,4058	8	9	8	7
1975,0354	20	19	6	5	1828,2782	7	8	8	7
1977,8728	21	20	6	5	1832,0105	6	7	8	7
1980,6772	22	21	6	5	1835,7451	5	6	8	7
1983,4130	23	22	6	5	1839,4649	4	5	8	7
1986,1304	24	23	6	5	1843,1407	3	4	8	7
1988,8102	25	24	6	5	1846,7576	2	3	8	7
1830,8573	13	14	7	6	1850,3724	1	2	8	7
1834,9072	12	13	7	6	1853,9552	0	1	8	7
1838,8903	11	12	7	6	1860,9559	1	0	8	7
1842,8405	10	11	7	6	1864,4642	2	1	8	7
1846,7576	9	10	7	6	1867,8652	3	2	8	7
1850,6460	8	9	7	6	1871,2807	4	3	8	7
1854,4941	7	8	7	6	1874,6404	5	4	8	7
1858,3114	6	7	7	6	1877,9579	6	5	8	7
1862,0958	5	6	7	6	1881,2390	7	6	8	7

Tabulka 9 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
1884,4849	8	7	8	7
1887,6986	9	8	8	7
1890,8615	10	9	8	7
1893,9942	11	10	8	7
1897,0903	12	11	8	7
1900,1581	13	12	8	7
1903,1714	14	13	8	7
1906,1642	15	14	8	7
1909,1000	16	15	8	7
1912,0119	17	16	8	7
1914,8826	18	17	8	7

Tabulka 10: Experimentální pozice linií CN radikálu pro  $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$  ( $\Delta v = -3$ )

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	v'	v''	větev	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	v'	v''	větev
3091,324	1,5	1,5	0	3	Q22	2986,156	23,5	23,5	0	3	Q11
3089,093	2,5	2,5	0	3	Q22	2980,150	24,5	24,5	0	3	Q11
3086,689	3,5	3,5	0	3	Q22	3034,942	1,5	2,5	0	3	P11
3084,118	4,5	4,5	0	3	Q22	3029,051	3,5	4,5	0	3	P11
3081,379	5,5	5,5	0	3	Q22	3025,579	4,5	5,5	0	3	P11
3078,463	6,5	6,5	0	3	Q22	3021,748	5,5	6,5	0	3	P11
3075,367	7,5	7,5	0	3	Q22	3017,571	6,5	7,5	0	3	P11
3072,083	8,5	8,5	0	3	Q22	3013,038	7,5	8,5	0	3	P11
3068,609	9,5	9,5	0	3	Q22	3008,182	8,5	9,5	0	3	P11
3064,938	10,5	10,5	0	3	Q22	3002,988	9,5	10,5	0	3	P11
3061,063	11,5	11,5	0	3	Q22	2997,465	10,5	11,5	0	3	P11
3056,982	12,5	12,5	0	3	Q22	2991,621	11,5	12,5	0	3	P11
3052,692	13,5	13,5	0	3	Q22	2985,463	12,5	13,5	0	3	P11
3048,178	14,5	14,5	0	3	Q22	2978,992	13,5	14,5	0	3	P11
3043,456	15,5	15,5	0	3	Q22	2972,218	14,5	15,5	0	3	P11
3038,498	16,5	16,5	0	3	Q22	2957,769	16,5	17,5	0	3	P11
3033,326	17,5	17,5	0	3	Q22	2950,093	17,5	18,5	0	3	P11
3027,914	18,5	18,5	0	3	Q22	2942,125	18,5	19,5	0	3	P11
3022,273	19,5	19,5	0	3	Q22	2933,869	19,5	20,5	0	3	P11
3016,400	20,5	20,5	0	3	Q22	3049,110	6,5	7,5	0	3	P22
3010,287	21,5	21,5	0	3	Q22	3042,345	7,5	8,5	0	3	P22
3003,938	22,5	22,5	0	3	Q22	3035,386	8,5	9,5	0	3	P22
3042,300	1,5	1,5	0	3	Q11	3028,248	9,5	10,5	0	3	P22
3043,211	2,5	2,5	0	3	Q11	3020,909	10,5	11,5	0	3	P22
3043,970	4,5	4,5	0	3	Q11	3013,366	11,5	12,5	0	3	P22
3043,820	5,5	5,5	0	3	Q11	3005,620	12,5	13,5	0	3	P22
3043,309	6,5	6,5	0	3	Q11	2997,666	13,5	14,5	0	3	P22
3042,466	7,5	7,5	0	3	Q11	2989,492	14,5	15,5	0	3	P22
3041,279	8,5	8,5	0	3	Q11	2981,099	15,5	16,5	0	3	P22
3039,765	9,5	9,5	0	3	Q11	2963,643	17,5	18,5	0	3	P22
3037,913	10,5	10,5	0	3	Q11	2954,589	18,5	19,5	0	3	P22
3035,750	11,5	11,5	0	3	Q11	2945,295	19,5	20,5	0	3	P22
3033,266	12,5	12,5	0	3	Q11	2935,772	20,5	21,5	0	3	P22
3030,469	13,5	13,5	0	3	Q11	2926,016	21,5	22,5	0	3	P22
3027,364	14,5	14,5	0	3	Q11	3050,577	2,5	1,5	0	3	R11
3023,958	15,5	15,5	0	3	Q11	3054,808	3,5	2,5	0	3	R11
3020,252	16,5	16,5	0	3	Q11	3058,678	4,5	3,5	0	3	R11
3016,247	17,5	17,5	0	3	Q11	3062,195	5,5	4,5	0	3	R11
3011,951	18,5	18,5	0	3	Q11	3065,367	6,5	5,5	0	3	R11
3007,361	19,5	19,5	0	3	Q11	3068,187	7,5	6,5	0	3	R11
3002,490	20,5	20,5	0	3	Q11	3070,670	8,5	7,5	0	3	R11
2997,317	21,5	21,5	0	3	Q11	3072,817	9,5	8,5	0	3	R11
2991,882	22,5	22,5	0	3	Q11	3074,633	10,5	9,5	0	3	R11

Tabulka 10 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	v'	v''	větev	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	v'	v''	větev
3076,129	11,5	10,5	0	3	R11	2902,018	13,5	12,5	1	4	R11
3077,302	12,5	11,5	0	3	R11	2902,542	14,5	13,5	1	4	R11
3078,161	13,5	12,5	0	3	R11	2902,754	15,5	14,5	1	4	R11
3078,707	14,5	13,5	0	3	R11	2902,664	16,5	15,5	1	4	R11
3078,946	15,5	14,5	0	3	R11	2902,282	17,5	16,5	1	4	R11
3078,884	16,5	15,5	0	3	R11	2901,598	18,5	17,5	1	4	R11
3078,527	17,5	16,5	0	3	R11	2900,626	19,5	18,5	1	4	R11
3077,862	18,5	17,5	0	3	R11	2899,362	20,5	19,5	1	4	R11
3076,913	19,5	18,5	0	3	R11	2897,800	21,5	20,5	1	4	R11
3075,666	20,5	19,5	0	3	R11	2895,955	22,5	21,5	1	4	R11
3074,128	21,5	20,5	0	3	R11	2893,827	23,5	22,5	1	4	R11
3072,309	22,5	21,5	0	3	R11	2891,419	24,5	23,5	1	4	R11
3070,202	23,5	22,5	0	3	R11	2888,733	25,5	24,5	1	4	R11
3067,815	24,5	23,5	0	3	R11	2926,689	4,5	3,5	1	4	R22
3065,141	25,5	24,5	0	3	R11	2927,599	5,5	4,5	1	4	R22
3101,430	3,5	2,5	0	3	R22	2928,337	6,5	5,5	1	4	R22
3102,540	4,5	3,5	0	3	R22	2928,898	7,5	6,5	1	4	R22
3103,470	5,5	4,5	0	3	R22	2929,258	8,5	7,5	1	4	R22
3104,238	6,5	5,5	0	3	R22	2929,434	9,5	8,5	1	4	R22
3104,819	7,5	6,5	0	3	R22	2929,397	10,5	9,5	1	4	R22
3105,201	11,5	10,5	0	3	R22	2929,161	11,5	10,5	1	4	R22
3104,770	12,5	11,5	0	3	R22	2928,723	12,5	11,5	1	4	R22
3104,142	13,5	12,5	0	3	R22	2928,063	13,5	12,5	1	4	R22
3103,283	14,5	13,5	0	3	R22	2927,184	14,5	13,5	1	4	R22
3102,213	15,5	14,5	0	3	R22	2926,084	15,5	14,5	1	4	R22
3100,913	16,5	15,5	0	3	R22	2924,759	16,5	15,5	1	4	R22
3099,375	17,5	16,5	0	3	R22	2923,200	17,5	16,5	1	4	R22
3097,607	18,5	17,5	0	3	R22	2921,417	18,5	17,5	1	4	R22
3095,614	19,5	18,5	0	3	R22	2919,389	19,5	18,5	1	4	R22
3090,891	21,5	20,5	0	3	R22	2914,622	21,5	20,5	1	4	R22
3088,177	22,5	21,5	0	3	R22	2911,883	22,5	21,5	1	4	R22
2870,266	1,5	0,5	1	4	R11	2908,886	23,5	22,5	1	4	R22
2874,817	2,5	1,5	1	4	R11	2917,673	0,5	0,5	1	4	Q22
2879,011	3,5	2,5	1	4	R11	2915,611	1,5	1,5	1	4	Q22
2882,834	4,5	3,5	1	4	R11	2913,391	2,5	2,5	1	4	Q22
2886,318	5,5	4,5	1	4	R11	2911,003	3,5	3,5	1	4	Q22
2889,449	6,5	5,5	1	4	R11	2908,444	4,5	4,5	1	4	Q22
2892,234	7,5	6,5	1	4	R11	2905,718	5,5	5,5	1	4	Q22
2894,682	8,5	7,5	1	4	R11	2902,815	6,5	6,5	1	4	Q22
2896,797	9,5	8,5	1	4	R11	2899,724	7,5	7,5	1	4	Q22
2898,583	10,5	9,5	1	4	R11	2896,452	8,5	8,5	1	4	Q22
2900,047	11,5	10,5	1	4	R11	2892,986	9,5	9,5	1	4	Q22
2901,189	12,5	11,5	1	4	R11	2889,323	10,5	10,5	1	4	Q22

Tabulka 10 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	v'	v''	větev	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	v'	v''	větev
2885,460	11,5	11,5	1	4	Q22	2822,149	10,5	11,5	1	4	P11
2881,387	12,5	12,5	1	4	Q22	2816,349	11,5	12,5	1	4	P11
2877,105	13,5	13,5	1	4	Q22	2810,231	12,5	13,5	1	4	P11
2872,606	14,5	14,5	1	4	Q22	2803,804	13,5	14,5	1	4	P11
2867,889	15,5	15,5	1	4	Q22	2797,072	14,5	15,5	1	4	P11
2862,948	16,5	16,5	1	4	Q22	2790,037	15,5	16,5	1	4	P11
2857,784	17,5	17,5	1	4	Q22	2782,705	16,5	17,5	1	4	P11
2852,384	18,5	18,5	1	4	Q22	2775,081	17,5	18,5	1	4	P11
2846,759	19,5	19,5	1	4	Q22	2663,033	7,5	8,5	2	5	P11
2840,894	20,5	20,5	1	4	Q22	2658,248	8,5	9,5	2	5	P11
2834,797	21,5	21,5	1	4	Q22	2653,121	9,5	10,5	2	5	P11
2828,462	22,5	22,5	1	4	Q22	2647,685	10,5	11,5	2	5	P11
2866,627	1,5	1,5	1	4	Q11	2641,922	11,5	12,5	2	5	P11
2867,537	2,5	2,5	1	4	Q11	2635,845	12,5	13,5	2	5	P11
2868,072	3,5	3,5	1	4	Q11	2629,461	13,5	14,5	2	5	P11
2868,271	4,5	4,5	1	4	Q11	2622,774	14,5	15,5	2	5	P11
2868,116	5,5	5,5	1	4	Q11	2615,785	15,5	16,5	2	5	P11
2867,607	6,5	6,5	1	4	Q11	2608,498	16,5	17,5	2	5	P11
2866,757	7,5	7,5	1	4	Q11	2600,919	17,5	18,5	2	5	P11
2865,573	8,5	8,5	1	4	Q11	2593,048	18,5	19,5	2	5	P11
2864,058	9,5	9,5	1	4	Q11	2584,901	19,5	20,5	2	5	P11
2862,219	10,5	10,5	1	4	Q11	2576,457	20,5	21,5	2	5	P11
2860,053	11,5	11,5	1	4	Q11	2567,727	21,5	22,5	2	5	P11
2857,577	12,5	12,5	1	4	Q11	2558,730	22,5	23,5	2	5	P11
2854,789	13,5	13,5	1	4	Q11	2724,131	2,5	3,5	2	5	P22
2851,694	14,5	14,5	1	4	Q11	2718,140	3,5	4,5	2	5	P22
2848,296	15,5	15,5	1	4	Q11	2712,010	4,5	5,5	2	5	P22
2844,598	16,5	16,5	1	4	Q11	2705,700	5,5	6,5	2	5	P22
2840,605	17,5	17,5	1	4	Q11	2699,204	6,5	7,5	2	5	P22
2836,319	18,5	18,5	1	4	Q11	2692,531	7,5	8,5	2	5	P22
2831,746	19,5	19,5	1	4	Q11	2685,667	8,5	9,5	2	5	P22
2826,882	20,5	20,5	1	4	Q11	2678,619	9,5	10,5	2	5	P22
2821,736	21,5	21,5	1	4	Q11	2671,368	10,5	11,5	2	5	P22
2816,307	22,5	22,5	1	4	Q11	2663,922	11,5	12,5	2	5	P22
2810,599	23,5	23,5	1	4	Q11	2656,260	12,5	13,5	2	5	P22
2804,608	24,5	24,5	1	4	Q11	2648,398	13,5	14,5	2	5	P22
2856,590	2,5	3,5	1	4	P11	2640,315	14,5	15,5	2	5	P22
2853,502	3,5	4,5	1	4	P11	2632,017	15,5	16,5	2	5	P22
2850,058	4,5	5,5	1	4	P11	2623,497	16,5	17,5	2	5	P22
2842,106	6,5	7,5	1	4	P11	2614,756	17,5	18,5	2	5	P22
2837,617	7,5	8,5	1	4	P11	2605,786	18,5	19,5	2	5	P22
2832,790	8,5	9,5	1	4	P11	2596,591	19,5	20,5	2	5	P22
2827,635	9,5	10,5	1	4	P11	2587,162	20,5	21,5	2	5	P22

Tabulka 10 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev
2695,399	1,5	0,5	2	5	R11	2730,174	24,5	23,5	2	5	R22
2704,050	3,5	2,5	2	5	R11	2740,737	1,5	1,5	2	5	Q22
2707,840	4,5	3,5	2	5	R11	2738,531	2,5	2,5	2	5	Q22
2711,278	5,5	4,5	2	5	R11	2736,156	3,5	3,5	2	5	Q22
2714,370	6,5	5,5	2	5	R11	2733,610	4,5	4,5	2	5	Q22
2717,124	7,5	6,5	2	5	R11	2730,894	5,5	5,5	2	5	Q22
2719,538	8,5	7,5	2	5	R11	2728,002	6,5	6,5	2	5	Q22
2721,621	9,5	8,5	2	5	R11	2724,925	7,5	7,5	2	5	Q22
2723,374	10,5	9,5	2	5	R11	2721,661	8,5	8,5	2	5	Q22
2724,802	11,5	10,5	2	5	R11	2718,208	9,5	9,5	2	5	Q22
2725,923	12,5	11,5	2	5	R11	2714,554	10,5	10,5	2	5	Q22
2726,727	13,5	12,5	2	5	R11	2710,701	11,5	11,5	2	5	Q22
2727,219	14,5	13,5	2	5	R11	2706,637	12,5	12,5	2	5	Q22
2727,413	15,5	14,5	2	5	R11	2702,365	13,5	13,5	2	5	Q22
2727,297	16,5	15,5	2	5	R11	2697,877	14,5	14,5	2	5	Q22
2726,887	17,5	16,5	2	5	R11	2693,166	15,5	15,5	2	5	Q22
2726,175	18,5	17,5	2	5	R11	2688,243	16,5	16,5	2	5	Q22
2725,184	19,5	18,5	2	5	R11	2683,085	17,5	17,5	2	5	Q22
2723,890	20,5	19,5	2	5	R11	2677,706	18,5	18,5	2	5	Q22
2722,317	21,5	20,5	2	5	R11	2672,090	19,5	19,5	2	5	Q22
2720,450	22,5	21,5	2	5	R11	2666,243	20,5	20,5	2	5	Q22
2718,307	23,5	22,5	2	5	R11	2660,157	21,5	21,5	2	5	Q22
2715,874	24,5	23,5	2	5	R11	2653,837	22,5	22,5	2	5	Q22
2713,156	25,5	24,5	2	5	R11	2692,679	2,5	2,5	2	5	Q11
2751,675	4,5	3,5	2	5	R22	2693,412	4,5	4,5	2	5	Q11
2752,564	5,5	4,5	2	5	R22	2692,743	6,5	6,5	2	5	Q11
2753,275	6,5	5,5	2	5	R22	2691,893	7,5	7,5	2	5	Q11
2753,809	7,5	6,5	2	5	R22	2690,710	8,5	8,5	2	5	Q11
2754,145	8,5	7,5	2	5	R22	2689,198	9,5	9,5	2	5	Q11
2754,301	9,5	8,5	2	5	R22	2687,363	10,5	10,5	2	5	Q11
2754,238	10,5	9,5	2	5	R22	2685,205	11,5	11,5	2	5	Q11
2753,980	11,5	10,5	2	5	R22	2682,732	12,5	12,5	2	5	Q11
2753,513	12,5	11,5	2	5	R22	2679,953	13,5	13,5	2	5	Q11
2752,832	13,5	12,5	2	5	R22	2676,866	14,5	14,5	2	5	Q11
2751,929	14,5	13,5	2	5	R22	2673,478	15,5	15,5	2	5	Q11
2750,802	15,5	14,5	2	5	R22	2669,790	16,5	16,5	2	5	Q11
2749,455	16,5	15,5	2	5	R22	2665,812	17,5	17,5	2	5	Q11
2747,870	17,5	16,5	2	5	R22	2661,537	18,5	18,5	2	5	Q11
2746,061	18,5	17,5	2	5	R22	2656,975	19,5	19,5	2	5	Q11
2744,017	19,5	18,5	2	5	R22	2652,126	20,5	20,5	2	5	Q11
2739,205	21,5	20,5	2	5	R22	2646,992	21,5	21,5	2	5	Q11
2736,442	22,5	21,5	2	5	R22	2641,577	22,5	22,5	2	5	Q11
2733,426	23,5	22,5	2	5	R22	2629,910	24,5	24,5	2	5	Q11



Tabulka 10 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev
2493,753	6,5	7,5	3	6	P11	2528,505	13,5	13,5	3	6	Q22
2489,328	7,5	8,5	3	6	P11	2524,031	14,5	14,5	3	6	Q22
2484,576	8,5	9,5	3	6	P11	2519,338	15,5	15,5	3	6	Q22
2479,504	9,5	10,5	3	6	P11	2514,417	16,5	16,5	3	6	Q22
2474,095	10,5	11,5	3	6	P11	2509,278	17,5	17,5	3	6	Q22
2468,367	11,5	12,5	3	6	P11	2503,902	18,5	18,5	3	6	Q22
2462,339	12,5	13,5	3	6	P11	2498,299	19,5	19,5	3	6	Q22
2456,000	13,5	14,5	3	6	P11	2492,470	20,5	20,5	3	6	Q22
2449,356	14,5	15,5	3	6	P11	2486,404	21,5	21,5	3	6	Q22
2442,415	15,5	16,5	3	6	P11	2517,840	1,5	1,5	3	6	Q11
2435,175	16,5	17,5	3	6	P11	2518,717	2,5	2,5	3	6	Q11
2427,641	17,5	18,5	3	6	P11	2519,434	4,5	4,5	3	6	Q11
2419,820	18,5	19,5	3	6	P11	2519,263	5,5	5,5	3	6	Q11
2411,711	19,5	20,5	3	6	P11	2518,758	6,5	6,5	3	6	Q11
2550,283	2,5	3,5	3	6	P22	2517,908	7,5	7,5	3	6	Q11
2544,364	3,5	4,5	3	6	P22	2516,724	8,5	8,5	3	6	Q11
2538,267	4,5	5,5	3	6	P22	2515,213	9,5	9,5	3	6	Q11
2532,000	5,5	6,5	3	6	P22	2513,382	10,5	10,5	3	6	Q11
2525,552	6,5	7,5	3	6	P22	2511,230	11,5	11,5	3	6	Q11
2518,928	7,5	8,5	3	6	P22	2508,766	12,5	12,5	3	6	Q11
2512,106	8,5	9,5	3	6	P22	2505,994	13,5	13,5	3	6	Q11
2505,112	9,5	10,5	3	6	P22	2502,917	14,5	14,5	3	6	Q11
2497,907	10,5	11,5	3	6	P22	2499,543	15,5	15,5	3	6	Q11
2490,498	11,5	12,5	3	6	P22	2495,863	16,5	16,5	3	6	Q11
2482,890	12,5	13,5	3	6	P22	2491,895	17,5	17,5	3	6	Q11
2475,066	13,5	14,5	3	6	P22	2487,636	18,5	18,5	3	6	Q11
2467,029	14,5	15,5	3	6	P22	2483,089	19,5	19,5	3	6	Q11
2458,781	15,5	16,5	3	6	P22	2478,257	20,5	20,5	3	6	Q11
2450,311	16,5	17,5	3	6	P22	2473,138	21,5	21,5	3	6	Q11
2441,616	17,5	18,5	3	6	P22	2578,409	5,5	4,5	3	6	R22
2432,697	18,5	19,5	3	6	P22	2579,095	6,5	5,5	3	6	R22
2566,736	1,5	1,5	3	6	Q22	2579,601	7,5	6,5	3	6	R22
2564,547	2,5	2,5	3	6	Q22	2579,678	11,5	10,5	3	6	R22
2562,187	3,5	3,5	3	6	Q22	2579,180	12,5	11,5	3	6	R22
2559,653	4,5	4,5	3	6	Q22	2578,473	13,5	12,5	3	6	R22
2556,946	5,5	5,5	3	6	Q22	2577,544	14,5	13,5	3	6	R22
2554,068	6,5	6,5	3	6	Q22	2576,391	15,5	14,5	3	6	R22
2551,002	7,5	7,5	3	6	Q22	2575,021	16,5	15,5	3	6	R22
2547,750	8,5	8,5	3	6	Q22	2573,417	17,5	16,5	3	6	R22
2544,302	9,5	9,5	3	6	Q22	2571,585	18,5	17,5	3	6	R22
2540,662	10,5	10,5	3	6	Q22	2561,877	22,5	21,5	3	6	R22
2536,820	11,5	11,5	3	6	Q22	2558,844	23,5	22,5	3	6	R22
2532,769	12,5	12,5	3	6	Q22	2555,575	24,5	23,5	3	6	R22

Tabulka 10 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev
2521,421	1,5	0,5	3	6	R11	2356,803	3,5	2,5	4	7	R11
2525,868	2,5	1,5	3	6	R11	2360,509	4,5	3,5	4	7	R11
2529,974	3,5	2,5	3	6	R11	2366,886	6,5	5,5	4	7	R11
2533,721	4,5	3,5	3	6	R11	2369,564	7,5	6,5	4	7	R11
2537,120	5,5	4,5	3	6	R11	2371,911	8,5	7,5	4	7	R11
2540,173	6,5	5,5	3	6	R11	2373,926	9,5	8,5	4	7	R11
2542,890	7,5	6,5	3	6	R11	2375,615	10,5	9,5	4	7	R11
2545,270	8,5	7,5	3	6	R11	2376,999	11,5	10,5	4	7	R11
2547,316	9,5	8,5	3	6	R11	2378,057	12,5	11,5	4	7	R11
2549,039	10,5	9,5	3	6	R11	2378,801	13,5	12,5	4	7	R11
2550,441	11,5	10,5	3	6	R11	2379,245	14,5	13,5	4	7	R11
2551,532	12,5	11,5	3	6	R11	2379,384	15,5	14,5	4	7	R11
2552,303	13,5	12,5	3	6	R11	2378,764	17,5	16,5	4	7	R11
2552,769	14,5	13,5	3	6	R11	2337,727	1,5	2,5	4	7	P11
2552,940	15,5	14,5	3	6	R11	2335,067	2,5	3,5	4	7	P11
2552,801	16,5	15,5	3	6	R11	2332,047	3,5	4,5	4	7	P11
2552,368	17,5	16,5	3	6	R11	2328,693	4,5	5,5	4	7	P11
2551,635	18,5	17,5	3	6	R11	2320,925	6,5	7,5	4	7	P11
2550,618	19,5	18,5	3	6	R11	2316,544	7,5	8,5	4	7	P11
2549,305	20,5	19,5	3	6	R11	2311,827	8,5	9,5	4	7	P11
2547,710	21,5	20,5	3	6	R11	2306,789	9,5	10,5	4	7	P11
2545,829	22,5	21,5	3	6	R11	2301,423	10,5	11,5	4	7	P11
2543,665	23,5	22,5	3	6	R11	2295,747	11,5	12,5	4	7	P11
2541,219	24,5	23,5	3	6	R11	2289,756	12,5	13,5	4	7	P11
2538,489	25,5	24,5	3	6	R11	2283,452	13,5	14,5	4	7	P11
2403,296	3,5	2,5	4	7	R22	2276,855	14,5	15,5	4	7	P11
2404,317	4,5	3,5	4	7	R22	2269,959	15,5	16,5	4	7	P11
2405,160	5,5	4,5	4	7	R22	2262,766	16,5	17,5	4	7	P11
2405,824	6,5	5,5	4	7	R22	2255,279	17,5	18,5	4	7	P11
2406,311	7,5	6,5	4	7	R22	2247,512	18,5	19,5	4	7	P11
2406,696	9,5	8,5	4	7	R22	2239,460	19,5	20,5	4	7	P11
2405,756	12,5	11,5	4	7	R22	2231,118	20,5	21,5	4	7	P11
2405,029	13,5	12,5	4	7	R22	2222,492	21,5	22,5	4	7	P11
2404,074	14,5	13,5	4	7	R22	2383,064	1,5	2,5	4	7	P22
2402,906	15,5	14,5	4	7	R22	2377,362	2,5	3,5	4	7	P22
2401,505	16,5	15,5	4	7	R22	2365,438	4,5	5,5	4	7	P22
2399,881	17,5	16,5	4	7	R22	2359,216	5,5	6,5	4	7	P22
2398,027	18,5	17,5	4	7	R22	2352,815	6,5	7,5	4	7	P22
2395,945	19,5	18,5	4	7	R22	2346,229	7,5	8,5	4	7	P22
2393,620	20,5	19,5	4	7	R22	2339,472	8,5	9,5	4	7	P22
2391,065	21,5	20,5	4	7	R22	2332,513	9,5	10,5	4	7	P22
2348,339	1,5	0,5	4	7	R11	2325,343	10,5	11,5	4	7	P22
2352,746	2,5	1,5	4	7	R11	2317,989	11,5	12,5	4	7	P22

Tabulka 10 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev
2310,430	12,5	13,5	4	7	P22	2335,717	12,5	12,5	4	7	Q11
2294,670	14,5	15,5	4	7	P22	2332,952	13,5	13,5	4	7	Q11
2286,468	15,5	16,5	4	7	P22	2329,891	14,5	14,5	4	7	Q11
2278,038	16,5	17,5	4	7	P22	2326,511	15,5	15,5	4	7	Q11
2269,391	17,5	18,5	4	7	P22	2322,851	16,5	16,5	4	7	Q11
2260,520	18,5	19,5	4	7	P22	2318,895	17,5	17,5	4	7	Q11
2251,424	19,5	20,5	4	7	P22	2314,651	18,5	18,5	4	7	Q11
2242,092	20,5	21,5	4	7	P22	2310,120	19,5	19,5	4	7	Q11
2232,534	21,5	22,5	4	7	P22	2305,301	20,5	20,5	4	7	Q11
2222,741	22,5	23,5	4	7	P22	2300,203	21,5	21,5	4	7	Q11
2395,664	0,5	0,5	4	7	Q22	2294,823	22,5	22,5	4	7	Q11
2393,656	1,5	1,5	4	7	Q22	2289,164	23,5	23,5	4	7	Q11
2391,475	2,5	2,5	4	7	Q22	2283,229	24,5	24,5	4	7	Q11
2389,130	3,5	3,5	4	7	Q22	2156,743	4,5	5,5	5	8	P11
2386,610	4,5	4,5	4	7	Q22	2153,064	5,5	6,5	5	8	P11
2383,917	5,5	5,5	4	7	Q22	2149,053	6,5	7,5	5	8	P11
2381,051	6,5	6,5	4	7	Q22	2144,700	7,5	8,5	5	8	P11
2377,992	7,5	7,5	4	7	Q22	2140,026	8,5	9,5	5	8	P11
2371,320	9,5	9,5	4	7	Q22	2135,024	9,5	10,5	5	8	P11
2367,689	10,5	10,5	4	7	Q22	2129,698	10,5	11,5	5	8	P11
2363,853	11,5	11,5	4	7	Q22	2124,061	11,5	12,5	5	8	P11
2359,816	12,5	12,5	4	7	Q22	2118,117	12,5	13,5	5	8	P11
2355,561	13,5	13,5	4	7	Q22	2111,870	13,5	14,5	5	8	P11
2351,097	14,5	14,5	4	7	Q22	2105,308	14,5	15,5	5	8	P11
2346,413	15,5	15,5	4	7	Q22	2098,461	15,5	16,5	5	8	P11
2341,507	16,5	16,5	4	7	Q22	2091,315	16,5	17,5	5	8	P11
2336,383	17,5	17,5	4	7	Q22	2083,882	17,5	18,5	5	8	P11
2331,027	18,5	18,5	4	7	Q22	2076,163	18,5	19,5	5	8	P11
2325,431	19,5	19,5	4	7	Q22	2068,153	19,5	20,5	5	8	P11
2319,617	20,5	20,5	4	7	Q22	2059,869	20,5	21,5	5	8	P11
2313,563	21,5	21,5	4	7	Q22	2051,295	21,5	22,5	5	8	P11
2307,276	22,5	22,5	4	7	Q22	2211,045	1,5	2,5	5	8	P22
2344,801	1,5	1,5	4	7	Q11	2205,373	2,5	3,5	5	8	P22
2345,681	2,5	2,5	4	7	Q11	2199,561	3,5	4,5	5	8	P22
2346,192	3,5	3,5	4	7	Q11	2193,557	4,5	5,5	5	8	P22
2346,368	4,5	4,5	4	7	Q11	2187,388	5,5	6,5	5	8	P22
2346,192	5,5	5,5	4	7	Q11	2181,035	6,5	7,5	5	8	P22
2345,681	6,5	6,5	4	7	Q11	2174,508	7,5	8,5	5	8	P22
2344,834	7,5	7,5	4	7	Q11	2167,781	8,5	9,5	5	8	P22
2343,651	8,5	8,5	4	7	Q11	2160,862	9,5	10,5	5	8	P22
2342,145	9,5	9,5	4	7	Q11	2153,754	10,5	11,5	5	8	P22
2340,318	10,5	10,5	4	7	Q11	2146,444	11,5	12,5	5	8	P22
2338,173	11,5	11,5	4	7	Q11	2138,926	12,5	13,5	5	8	P22

Tabulka 10 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev
2131,205	13,5	14,5	5	8	P22	2191,840	11,5	11,5	5	8	Q22
2123,264	14,5	15,5	5	8	P22	2187,813	12,5	12,5	5	8	Q22
2115,105	15,5	16,5	5	8	P22	2183,576	13,5	13,5	5	8	Q22
2106,730	16,5	17,5	5	8	P22	2179,122	14,5	14,5	5	8	Q22
2098,133	17,5	18,5	5	8	P22	2174,454	15,5	15,5	5	8	Q22
2089,309	18,5	19,5	5	8	P22	2169,559	16,5	16,5	5	8	Q22
2080,259	19,5	20,5	5	8	P22	2164,446	17,5	17,5	5	8	Q22
2070,983	20,5	21,5	5	8	P22	2159,104	18,5	18,5	5	8	Q22
2061,482	21,5	22,5	5	8	P22	2153,528	19,5	19,5	5	8	Q22
2172,704	1,5	1,5	5	8	Q11	2147,727	20,5	20,5	5	8	Q22
2174,069	3,5	3,5	5	8	Q11	2141,690	21,5	21,5	5	8	Q22
2174,246	4,5	4,5	5	8	Q11	2135,415	22,5	22,5	5	8	Q22
2174,069	5,5	5,5	5	8	Q11	2176,207	1,5	0,5	5	8	R11
2173,555	6,5	6,5	5	8	Q11	2180,573	2,5	1,5	5	8	R11
2172,704	7,5	7,5	5	8	Q11	2184,579	3,5	2,5	5	8	R11
2171,527	8,5	8,5	5	8	Q11	2188,246	4,5	3,5	5	8	R11
2170,024	9,5	9,5	5	8	Q11	2191,563	5,5	4,5	5	8	R11
2168,201	10,5	10,5	5	8	Q11	2194,546	6,5	5,5	5	8	R11
2166,062	11,5	11,5	5	8	Q11	2197,180	7,5	6,5	5	8	R11
2163,616	12,5	12,5	5	8	Q11	2199,499	8,5	7,5	5	8	R11
2160,862	13,5	13,5	5	8	Q11	2201,483	9,5	8,5	5	8	R11
2157,805	14,5	14,5	5	8	Q11	2203,144	10,5	9,5	5	8	R11
2154,447	15,5	15,5	5	8	Q11	2204,488	11,5	10,5	5	8	R11
2150,796	16,5	16,5	5	8	Q11	2205,521	12,5	11,5	5	8	R11
2146,854	17,5	17,5	5	8	Q11	2206,243	13,5	12,5	5	8	R11
2142,624	18,5	18,5	5	8	Q11	2206,661	14,5	13,5	5	8	R11
2138,108	19,5	19,5	5	8	Q11	2206,775	15,5	14,5	5	8	R11
2133,306	20,5	20,5	5	8	Q11	2206,589	16,5	15,5	5	8	R11
2128,224	21,5	21,5	5	8	Q11	2206,114	17,5	16,5	5	8	R11
2122,861	22,5	22,5	5	8	Q11	2205,337	18,5	17,5	5	8	R11
2117,225	23,5	23,5	5	8	Q11	2204,277	19,5	18,5	5	8	R11
2111,305	24,5	24,5	5	8	Q11	2202,929	20,5	19,5	5	8	R11
2223,514	0,5	0,5	5	8	Q22	2201,293	21,5	20,5	5	8	R11
2221,516	1,5	1,5	5	8	Q22	2194,696	24,5	23,5	5	8	R11
2219,360	2,5	2,5	5	8	Q22	2191,935	25,5	24,5	5	8	R11
2217,022	3,5	3,5	5	8	Q22	2232,048	4,5	3,5	5	8	R22
2214,518	4,5	4,5	5	8	Q22	2233,504	6,5	5,5	5	8	R22
2211,838	5,5	5,5	5	8	Q22	2233,964	7,5	6,5	5	8	R22
2208,980	6,5	6,5	5	8	Q22	2234,238	8,5	7,5	5	8	R22
2205,938	7,5	7,5	5	8	Q22	2234,304	9,5	8,5	5	8	R22
2202,707	8,5	8,5	5	8	Q22	2234,173	10,5	9,5	5	8	R22
2199,284	9,5	9,5	5	8	Q22	2233,837	11,5	10,5	5	8	R22
2195,663	10,5	10,5	5	8	Q22	2233,297	12,5	11,5	5	8	R22

Tabulka 10 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev
2232,534	13,5	12,5	5	8	R22	1986,723	14,5	14,5	6	9	Q11
2231,564	14,5	13,5	5	8	R22	1983,379	15,5	15,5	6	9	Q11
2230,371	15,5	14,5	5	8	R22	1979,748	16,5	16,5	6	9	Q11
2228,946	16,5	15,5	5	8	R22	1975,822	17,5	17,5	6	9	Q11
2227,298	17,5	16,5	5	8	R22	1971,613	18,5	18,5	6	9	Q11
2225,421	18,5	17,5	5	8	R22	1967,118	19,5	19,5	6	9	Q11
2223,305	19,5	18,5	5	8	R22	1962,337	20,5	20,5	6	9	Q11
2218,383	21,5	20,5	5	8	R22	1989,108	3,5	3,5	6	9	Q12
2215,552	22,5	21,5	5	8	R22	1985,816	4,5	4,5	6	9	Q12
1973,846	7,5	8,5	6	9	P11	1982,182	5,5	5,5	6	9	Q12
1969,200	8,5	9,5	6	9	P11	1978,202	6,5	6,5	6	9	Q12
1964,247	9,5	10,5	6	9	P11	2060,744	4,5	4,5	6	9	Q12
1958,962	10,5	11,5	6	9	P11	2061,542	5,5	5,5	6	9	Q12
1953,375	11,5	12,5	6	9	P11	2062,165	6,5	6,5	6	9	Q12
1947,476	12,5	13,5	6	9	P11	2062,587	7,5	7,5	6	9	Q12
1941,274	13,5	14,5	6	9	P11	2062,868	9,5	9,5	6	9	Q12
1927,962	15,5	16,5	6	9	P11	2062,704	10,5	10,5	6	9	Q12
1920,865	16,5	17,5	6	9	P11	2043,434	4,5	4,5	6	9	Q12
1905,822	18,5	19,5	6	9	P11	2040,765	5,5	5,5	6	9	Q12
1978,202	2,5	3,5	6	9	P12	2037,913	6,5	6,5	6	9	Q12
2040,729	5,5	6,5	6	9	P21	2034,894	7,5	7,5	6	9	Q12
2037,874	6,5	7,5	6	9	P21	2031,666	8,5	8,5	6	9	Q12
2034,405	2,5	3,5	6	9	P22	2028,249	9,5	9,5	6	9	Q12
2022,692	4,5	5,5	6	9	P22	2024,651	10,5	10,5	6	9	Q12
2003,776	7,5	8,5	6	9	P22	2020,845	11,5	11,5	6	9	Q12
1997,115	8,5	9,5	6	9	P22	2016,824	12,5	12,5	6	9	Q12
1990,235	9,5	10,5	6	9	P22	2012,598	13,5	13,5	6	9	Q12
1983,173	10,5	11,5	6	9	P22	2008,161	14,5	14,5	6	9	Q12
1975,909	11,5	12,5	6	9	P22	2003,503	15,5	15,5	6	9	Q12
1968,441	12,5	13,5	6	9	P22	1998,624	16,5	16,5	6	9	Q12
1944,761	15,5	16,5	6	9	P22	1993,523	17,5	17,5	6	9	Q12
1936,431	16,5	17,5	6	9	P22	1982,641	19,5	19,5	6	9	Q12
2002,445	2,5	2,5	6	9	Q11	1964,587	22,5	22,5	6	9	Q12
2003,103	4,5	4,5	6	9	Q11	2020,243	5,5	4,5	6	9	Q12
2002,931	5,5	5,5	6	9	Q11	2025,793	7,5	6,5	6	9	Q12
2002,410	6,5	6,5	6	9	Q11	2028,071	8,5	7,5	6	9	Q12
2001,561	7,5	7,5	6	9	Q11	2030,025	9,5	8,5	6	9	Q12
2000,388	8,5	8,5	6	9	Q11	2031,666	10,5	9,5	6	9	Q12
1998,893	9,5	9,5	6	9	Q11	2033,982	12,5	11,5	6	9	Q12
1997,079	10,5	10,5	6	9	Q11	2034,675	13,5	12,5	6	9	Q12
1994,952	11,5	11,5	6	9	Q11	2035,156	15,5	14,5	6	9	Q12
1992,507	12,5	12,5	6	9	Q11	2034,962	16,5	15,5	6	9	Q12
1989,766	13,5	13,5	6	9	Q11	2034,459	17,5	16,5	6	9	Q12

Tabulka 10 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	větev
2033,667	18,5	17,5	6	9	R11
2032,593	19,5	18,5	6	9	R11
2027,638	22,5	21,5	6	9	R11
2002,445	2,5	1,5	6	9	R12
2002,445	6,5	5,5	6	9	R12
2000,434	8,5	7,5	6	9	R12
1998,940	9,5	8,5	6	9	R12
1995,014	11,5	10,5	6	9	R12
2062,200	6,5	5,5	6	9	R22
2062,632	7,5	6,5	6	9	R22
2062,868	8,5	7,5	6	9	R22
2062,920	9,5	8,5	6	9	R22
2062,766	10,5	9,5	6	9	R22
2062,409	11,5	10,5	6	9	R22
2061,837	12,5	11,5	6	9	R22
2060,065	14,5	13,5	6	9	R22

Tabulka 11: Emisní linie CN radikálu pro přechod  $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$  a sekvenci  $\Delta v = -2$ 

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4187,060	55,5	56,5	0	2	4836,980	27,5	28,5	0	2
4384,736	46,5	47,5	0	2	4838,876	19,5	20,5	0	2
4401,342	54,5	55,5	0	2	4842,401	37,5	37,5	0	2
4419,728	65,5	65,5	0	2	4844,780	26,5	27,5	0	2
4427,216	64,5	64,5	0	2	4849,194	26,5	27,5	0	2
4440,598	52,5	53,5	0	2	4851,492	18,5	19,5	0	2
4459,823	51,5	52,5	0	2	4867,243	49,5	48,5	0	2
4465,156	62,5	62,5	0	2	4874,208	34,5	33,5	0	2
4497,418	49,5	50,5	0	2	4876,348	34,5	34,5	0	2
4506,292	49,5	49,5	0	2	4877,305	23,5	24,5	0	2
4515,793	48,5	49,5	0	2	4878,133	48,5	47,5	0	2
4529,501	59,5	59,5	0	2	4896,900	32,5	33,5	0	2
4541,865	47,5	47,5	0	2	4897,432	21,5	22,5	0	2
4551,711	46,5	47,5	0	2	4898,701	14,5	15,5	0	2
4575,975	45,5	46,5	0	2	4898,884	46,5	45,5	0	2
4580,511	56,5	56,5	0	2	4906,127	21,5	22,5	0	2
4588,570	55,5	56,5	0	2	4909,341	45,5	44,5	0	2
4603,495	43,5	44,5	0	2	4916,693	20,5	21,5	0	2
4609,256	43,5	44,5	0	2	4919,501	44,5	43,5	0	2
4613,054	54,5	54,5	0	2	4925,252	18,5	19,5	0	2
4652,749	40,5	41,5	0	2	4925,395	18,5	18,5	0	2
4653,081	51,5	52,5	0	2	4926,986	19,5	20,5	0	2
4660,060	51,5	50,5	0	2	4930,614	11,5	12,5	0	2
4674,663	50,5	50,5	0	2	4933,883	17,5	18,5	0	2
4687,681	38,5	38,5	0	2	4934,024	17,5	17,5	0	2
4702,155	37,5	38,5	0	2	4935,077	28,5	29,5	0	2
4713,013	47,5	48,5	0	2	4937,016	27,5	27,5	0	2
4713,263	61,5	60,5	0	2	4940,562	10,5	11,5	0	2
4731,022	35,5	35,5	0	2	4942,315	16,5	16,5	0	2
4741,910	59,5	58,5	0	2	4948,218	41,5	40,5	0	2
4750,464	58,5	57,5	0	2	4950,157	9,5	10,5	0	2
4755,790	58,5	57,5	0	2	4950,288	15,5	15,5	0	2
4771,727	32,5	33,5	0	2	4956,287	16,5	17,5	0	2
4778,144	56,5	55,5	0	2	4957,919	14,5	14,5	0	2
4784,672	31,5	31,5	0	2	4959,394	8,5	9,5	0	2
4785,294	23,5	24,5	0	2	4959,599	24,5	23,5	0	2
4797,111	30,5	31,5	0	2	4960,736	25,5	26,5	0	2
4808,131	40,5	40,5	0	2	4965,530	15,5	16,5	0	2
4819,100	39,5	40,5	0	2	4970,334	38,5	37,5	0	2
4829,606	52,5	52,5	0	2	4974,516	14,5	15,5	0	2
4831,355	38,5	38,5	0	2	4976,765	6,5	7,5	0	2
4832,786	52,5	51,5	0	2	4979,018	21,5	21,5	0	2
4833,317	27,5	28,5	0	2	4984,054	22,5	22,5	0	2

Tabulka 11 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4984,945	10,5	11,5	0	2	5043,585	12,5	12,5	0	2
4985,032	10,5	10,5	0	2	5044,416	25,5	24,5	0	2
4990,928	9,5	9,5	0	2	5044,497	3,5	2,5	0	2
4991,055	21,5	22,5	0	2	5047,193	27,5	27,5	0	2
4991,215	21,5	21,5	0	2	5048,032	11,5	12,5	0	2
4991,734	12,5	13,5	0	2	5048,265	4,5	3,5	0	2
4992,631	4,5	5,5	0	2	5051,158	4,5	5,5	0	2
4995,880	18,5	17,5	0	2	5052,114	26,5	26,5	0	2
4996,471	8,5	8,5	0	2	5052,417	10,5	10,5	0	2
4998,090	20,5	20,5	0	2	5054,002	22,5	21,5	0	2
4998,685	34,5	33,5	0	2	5056,475	9,5	9,5	0	2
4999,972	11,5	12,5	0	2	5056,558	21,5	20,5	0	2
5000,673	17,5	17,5	0	2	5056,921	25,5	24,5	0	2
5000,808	17,5	16,5	0	2	5057,603	3,5	4,5	0	2
5001,497	54,5	53,5	0	2	5060,302	8,5	8,5	0	2
5001,644	7,5	7,5	0	2	5060,710	19,5	18,5	0	2
5004,703	34,5	34,5	0	2	5061,265	24,5	23,5	0	2
5006,952	2,5	3,5	0	2	5061,349	9,5	8,5	0	2
5007,968	10,5	11,5	0	2	5063,903	7,5	7,5	0	2
5010,860	5,5	5,5	0	2	5063,996	11,5	10,5	0	2
5011,045	18,5	18,5	0	2	5064,471	16,5	15,5	0	2
5014,889	4,5	4,5	0	2	5065,222	13,5	12,5	0	2
5015,726	9,5	10,5	0	2	5065,313	14,5	13,5	0	2
5016,987	17,5	18,5	0	2	5067,281	6,5	6,5	0	2
5018,297	32,5	32,5	0	2	5068,931	22,5	22,5	0	2
5018,528	3,5	3,5	0	2	5070,440	5,5	5,5	0	2
5021,778	2,5	3,5	0	2	5073,391	4,5	4,5	0	2
5022,122	30,5	29,5	0	2	5075,805	20,5	19,5	0	2
5023,232	11,5	11,5	0	2	5076,131	3,5	3,5	0	2
5023,320	11,5	10,5	0	2	5078,667	2,5	3,5	0	2
5024,640	1,5	2,5	0	2	5078,747	19,5	18,5	0	2
5025,861	10,5	9,5	0	2	5081,012	1,5	2,5	0	2
5028,055	9,5	8,5	0	2	5081,284	18,5	18,5	0	2
5028,476	15,5	15,5	0	2	5081,415	18,5	17,5	0	2
5030,721	30,5	30,5	0	2	5086,951	0,5	0,5	0	2
5033,427	4,5	4,5	0	2	5088,442	1,5	1,5	0	2
5033,655	14,5	15,5	0	2	5090,987	3,5	3,5	0	2
5033,772	14,5	14,5	0	2	5091,956	4,5	4,5	0	2
5036,439	27,5	26,5	0	2	5092,746	5,5	4,5	0	2
5037,637	6,5	7,5	0	2	5093,553	9,5	9,5	0	2
5038,801	13,5	13,5	0	2	5093,625	9,5	8,5	0	2
5040,331	2,5	1,5	0	2	5093,689	8,5	8,5	0	2
5040,584	26,5	25,5	0	2	5102,092	3,5	2,5	0	2



Tabulka 11 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
5106,763	4,5	3,5	0	2	4777,023	11,5	12,5	1	3
5109,231	39,5	38,5	0	2	4777,112	11,5	11,5	1	3
5115,479	6,5	5,5	0	2	4782,094	36,5	35,5	1	3
5119,514	7,5	6,5	0	2	4783,251	10,5	11,5	1	3
5123,317	8,5	7,5	0	2	4783,333	10,5	10,5	1	3
5126,906	9,5	8,5	0	2	4789,194	9,5	9,5	1	3
5130,243	10,5	9,5	0	2	4789,319	21,5	21,5	1	3
5133,351	11,5	10,5	0	2	4794,699	8,5	8,5	1	3
5136,436	32,5	31,5	0	2	4798,639	17,5	17,5	1	3
5145,086	16,5	15,5	0	2	4802,653	19,5	20,5	1	3
5149,717	20,5	19,5	0	2	4803,231	16,5	16,5	1	3
5150,273	23,5	22,5	0	2	4808,067	32,5	31,5	1	3
4463,941	31,5	32,5	1	3	4808,990	18,5	19,5	1	3
4468,423	39,5	40,5	1	3	4809,123	18,5	18,5	1	3
4501,748	37,5	38,5	1	3	4811,418	14,5	14,5	1	3
4528,821	35,5	36,5	1	3	4812,993	4,5	4,5	1	3
4544,316	34,5	34,5	1	3	4814,110	9,5	10,5	1	3
4557,584	33,5	34,5	1	3	4815,190	17,5	17,5	1	3
4557,829	33,5	33,5	1	3	4816,603	3,5	3,5	1	3
4570,799	32,5	33,5	1	3	4818,253	12,5	12,5	1	3
4596,332	30,5	31,5	1	3	4818,342	12,5	11,5	1	3
4625,454	20,5	21,5	1	3	4819,829	2,5	2,5	1	3
4629,725	38,5	38,5	1	3	4821,156	11,5	11,5	1	3
4648,346	26,5	27,5	1	3	4821,238	11,5	10,5	1	3
4651,467	36,5	36,5	1	3	4821,601	8,5	9,5	1	3
4663,035	17,5	18,5	1	3	4822,665	1,5	2,5	1	3
4674,928	16,5	17,5	1	3	4823,704	10,5	10,5	1	3
4691,673	32,5	32,5	1	3	4823,784	10,5	9,5	1	3
4705,038	21,5	22,5	1	3	4825,895	9,5	9,5	1	3
4708,629	13,5	14,5	1	3	4826,526	15,5	15,5	1	3
4709,959	30,5	30,5	1	3	4830,850	2,5	2,5	1	3
4710,176	30,5	29,5	1	3	4831,288	3,5	3,5	1	3
4714,988	19,5	20,5	1	3	4831,811	14,5	14,5	1	3
4715,138	19,5	19,5	1	3	4833,693	1,5	0,5	1	3
4715,555	20,5	21,5	1	3	4835,891	6,5	7,5	1	3
4740,869	16,5	16,5	1	3	4836,833	13,5	13,5	1	3
4754,974	16,5	17,5	1	3	4837,741	26,5	25,5	1	3
4757,470	24,5	24,5	1	3	4838,203	2,5	1,5	1	3
4764,310	23,5	23,5	1	3	4839,161	28,5	28,5	1	3
4767,051	24,5	24,5	1	3	4841,608	12,5	12,5	1	3
4770,825	22,5	22,5	1	3	4842,320	3,5	2,5	1	3
4773,116	14,5	15,5	1	3	4842,709	5,5	6,5	1	3
4775,207	6,5	7,5	1	3	4844,389	27,5	27,5	1	3

Tabulka 11 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4849,313	4,5	5,5	1	3	4566,094	7,5	8,5	2	4
4858,233	8,5	9,5	1	3	4569,641	12,5	13,5	2	4
4861,540	11,5	10,5	1	3	4569,735	12,5	12,5	2	4
4861,883	7,5	7,5	1	3	4572,521	14,5	15,5	2	4
4862,300	12,5	11,5	1	3	4573,525	23,5	24,5	2	4
4862,488	15,5	14,5	1	3	4576,258	11,5	11,5	2	4
4862,702	13,5	12,5	1	3	4581,167	13,5	14,5	2	4
4865,255	6,5	6,5	1	3	4581,715	20,5	20,5	2	4
4866,400	22,5	21,5	1	3	4581,855	20,5	19,5	2	4
4868,403	5,5	5,5	1	3	4582,441	10,5	10,5	2	4
4869,923	21,5	20,5	1	3	4588,266	9,5	9,5	2	4
4871,339	4,5	5,5	1	3	4589,567	12,5	13,5	2	4
4873,161	20,5	19,5	1	3	4592,637	18,5	17,5	2	4
4876,125	19,5	18,5	1	3	4593,738	8,5	8,5	2	4
4881,124	17,5	17,5	1	3	4597,279	3,5	4,5	2	4
4881,242	17,5	16,5	1	3	4597,534	17,5	16,5	2	4
4886,281	1,5	0,5	1	3	4598,837	7,5	7,5	2	4
4888,781	3,5	3,5	1	3	4601,541	19,5	20,5	2	4
4891,024	6,5	5,5	1	3	4603,567	6,5	6,5	2	4
4891,268	9,5	8,5	1	3	4604,131	2,5	3,5	2	4
4891,420	8,5	7,5	1	3	4607,923	5,5	5,5	2	4
4904,836	39,5	38,5	1	3	4610,162	14,5	14,5	2	4
4927,519	10,5	9,5	1	3	4611,898	4,5	4,5	2	4
4933,352	12,5	11,5	1	3	4618,670	2,5	3,5	2	4
4946,784	21,5	20,5	1	3	4619,965	11,5	10,5	2	4
4412,692	21,5	22,5	2	4	4621,487	1,5	2,5	2	4
4463,117	17,5	18,5	2	4	4622,503	10,5	9,5	2	4
4465,421	24,5	25,5	2	4	4624,691	9,5	8,5	2	4
4485,982	22,5	23,5	2	4	4625,376	15,5	15,5	2	4
4486,150	22,5	22,5	2	4	4627,972	7,5	6,5	2	4
4494,012	22,5	23,5	2	4	4630,074	4,5	4,5	2	4
4504,753	21,5	22,5	2	4	4632,417	1,5	0,5	2	4
4505,297	20,5	21,5	2	4	4635,667	13,5	13,5	2	4
4514,488	19,5	20,5	2	4	4639,581	25,5	24,5	2	4
4523,344	18,5	19,5	2	4	4640,346	12,5	13,5	2	4
4525,444	19,5	20,5	2	4	4641,716	5,5	6,5	2	4
4532,014	17,5	17,5	2	4	4644,868	11,5	12,5	2	4
4535,375	18,5	19,5	2	4	4646,382	23,5	22,5	2	4
4540,220	16,5	16,5	2	4	4651,907	21,5	20,5	2	4
4548,107	15,5	15,5	2	4	4652,032	25,5	25,5	2	4
4548,274	9,5	10,5	2	4	4653,393	7,5	6,5	2	4
4555,659	14,5	14,5	2	4	4654,186	20,5	19,5	2	4
4563,144	23,5	23,5	2	4	4655,555	8,5	7,5	2	4

Tabulka 11 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4656,154	19,5	18,5	2	4	4249,108	26,5	27,5	3	5
4657,356	9,5	8,5	2	4	4264,027	17,5	18,5	3	5
4660,663	7,5	7,5	2	4	4266,166	24,5	24,5	3	5
4660,791	2,5	3,5	2	4	4276,390	23,5	24,5	3	5
4664,020	6,5	6,5	2	4	4281,154	33,5	32,5	3	5
4666,732	1,5	2,5	2	4	4283,643	23,5	24,5	3	5
4667,161	5,5	5,5	2	4	4284,192	33,5	33,5	3	5
4667,906	21,5	21,5	2	4	4286,461	22,5	23,5	3	5
4670,090	4,5	4,5	2	4	4304,079	31,5	32,5	3	5
4671,321	20,5	19,5	2	4	4305,687	20,5	21,5	3	5
4674,179	19,5	19,5	2	4	4308,699	30,5	30,5	3	5
4674,313	19,5	18,5	2	4	4308,973	13,5	14,5	3	5
4675,315	2,5	3,5	2	4	4312,701	44,5	43,5	3	5
4683,576	15,5	14,5	2	4	4313,928	30,5	30,5	3	5
4685,231	14,5	13,5	2	4	4314,952	19,5	19,5	3	5
4686,534	13,5	13,5	2	4	4315,752	20,5	21,5	3	5
4688,298	4,5	4,5	2	4	4323,629	18,5	19,5	3	5
4689,544	6,5	5,5	2	4	4323,762	18,5	18,5	3	5
4689,830	8,5	8,5	2	4	4329,465	11,5	12,5	3	5
4707,182	5,5	4,5	2	4	4330,240	42,5	41,5	3	5
4725,585	10,5	9,5	2	4	4332,124	17,5	18,5	3	5
3995,269	44,5	45,5	3	5	4332,256	17,5	17,5	3	5
4011,897	43,5	43,5	3	5	4333,748	27,5	27,5	3	5
4034,413	33,5	34,5	3	5	4335,803	18,5	19,5	3	5
4067,299	31,5	32,5	3	5	4340,297	16,5	17,5	3	5
4070,575	39,5	40,5	3	5	4340,929	27,5	28,5	3	5
4083,304	30,5	31,5	3	5	4345,437	17,5	18,5	3	5
4089,126	38,5	38,5	3	5	4348,138	15,5	16,5	3	5
4101,107	37,5	38,5	3	5	4348,903	25,5	25,5	3	5
4103,697	37,5	37,5	3	5	4350,559	40,5	39,5	3	5
4114,433	28,5	29,5	3	5	4355,651	14,5	15,5	3	5
4130,524	35,5	36,5	3	5	4357,851	25,5	25,5	3	5
4142,945	45,5	45,5	3	5	4362,831	13,5	14,5	3	5
4145,431	34,5	35,5	3	5	4363,906	15,5	16,5	3	5
4145,671	34,5	34,5	3	5	4365,796	24,5	24,5	3	5
4169,189	43,5	42,5	3	5	4366,243	7,5	8,5	3	5
4179,652	42,5	42,5	3	5	4369,662	12,5	13,5	3	5
4209,480	29,5	30,5	3	5	4372,761	14,5	15,5	3	5
4216,792	39,5	40,5	3	5	4375,498	21,5	21,5	3	5
4217,058	39,5	39,5	3	5	4375,640	21,5	20,5	3	5
4224,704	28,5	29,5	3	5	4376,158	11,5	12,5	3	5
4228,628	38,5	38,5	3	5	4380,861	22,5	22,5	3	5
4240,324	37,5	38,5	3	5	4381,357	20,5	20,5	3	5

Tabulka 11 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4381,498	20,5	19,5	3	5	4435,333	13,5	13,5	3	5
4382,300	10,5	11,5	3	5	4436,385	2,5	1,5	3	5
4382,381	10,5	10,5	3	5	4440,413	3,5	2,5	3	5
4383,487	36,5	36,5	3	5	4441,428	27,5	26,5	3	5
4387,032	19,5	18,5	3	5	4444,518	11,5	12,5	3	5
4388,100	9,5	10,5	3	5	4444,602	11,5	11,5	3	5
4389,718	12,5	13,5	3	5	4445,242	23,5	22,5	3	5
4390,009	4,5	5,5	3	5	4447,313	5,5	4,5	3	5
4392,121	18,5	18,5	3	5	4448,192	22,5	21,5	3	5
4393,600	8,5	8,5	3	5	4450,190	6,5	5,5	3	5
4394,837	20,5	20,5	3	5	4450,815	21,5	20,5	3	5
4397,022	17,5	17,5	3	5	4450,908	25,5	25,5	3	5
4397,822	11,5	12,5	3	5	4452,906	9,5	9,5	3	5
4398,670	7,5	7,5	3	5	4455,102	19,5	18,5	3	5
4401,273	19,5	20,5	3	5	4456,636	8,5	9,5	3	5
4401,413	19,5	19,5	3	5	4456,701	8,5	8,5	3	5
4401,595	16,5	16,5	3	5	4457,991	10,5	9,5	3	5
4403,369	6,5	6,5	3	5	4458,096	17,5	16,5	3	5
4403,957	2,5	3,5	3	5	4459,747	12,5	11,5	3	5
4405,560	33,5	32,5	3	5	4460,089	13,5	12,5	3	5
4405,838	15,5	15,5	3	5	4460,281	7,5	7,5	3	5
4409,746	14,5	14,5	3	5	4463,631	6,5	6,5	3	5
4411,634	4,5	4,5	3	5	4466,382	1,5	2,5	3	5
4413,319	13,5	13,5	3	5	4469,667	4,5	4,5	3	5
4413,769	17,5	17,5	3	5	4472,376	3,5	3,5	3	5
4415,163	3,5	4,5	3	5	4474,869	2,5	3,5	3	5
4416,551	12,5	12,5	3	5	4475,859	43,5	42,5	3	5
4418,369	2,5	2,5	3	5	4477,176	1,5	2,5	3	5
4419,544	16,5	16,5	3	5	4480,756	16,5	15,5	3	5
4420,716	8,5	9,5	3	5	4481,980	42,5	41,5	3	5
4421,155	1,5	1,5	3	5	4482,696	15,5	14,5	3	5
4421,980	10,5	10,5	3	5	4484,375	14,5	13,5	3	5
4422,053	10,5	9,5	3	5	4485,796	13,5	12,5	3	5
4424,238	9,5	8,5	3	5	4486,809	3,5	3,5	3	5
4424,786	30,5	29,5	3	5	4486,885	12,5	12,5	3	5
4425,784	28,5	27,5	3	5	4487,807	11,5	11,5	3	5
4427,882	7,5	8,5	3	5	4487,989	1,5	0,5	3	5
4428,362	1,5	0,5	3	5	4488,486	10,5	10,5	3	5
4429,176	2,5	2,5	3	5	4488,558	10,5	9,5	3	5
4429,293	5,5	5,5	3	5	4488,908	6,5	5,5	3	5
4429,617	3,5	2,5	3	5	4488,991	9,5	8,5	3	5
4430,329	14,5	14,5	3	5	4489,187	8,5	7,5	3	5
4434,826	6,5	7,5	3	5	4497,601	3,5	2,5	3	5

Tabulka 11 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4508,112	37,5	36,5	3	5	4163,858	13,5	13,5	4	6
4517,937	8,5	7,5	3	5	4165,068	15,5	16,5	4	6
4534,665	14,5	13,5	3	5	4166,465	24,5	24,5	4	6
4541,567	19,5	18,5	3	5	4167,013	38,5	38,5	4	6
3994,603	41,5	41,5	4	6	4167,255	7,5	8,5	4	6
3994,882	41,5	40,5	4	6	4169,860	22,5	22,5	4	6
3997,024	54,5	53,5	4	6	4170,558	12,5	13,5	4	6
4000,622	54,5	53,5	4	6	4170,732	37,5	36,5	4	6
4006,536	40,5	40,5	4	6	4176,164	21,5	20,5	4	6
4022,035	52,5	52,5	4	6	4182,429	13,5	14,5	4	6
4026,485	28,5	29,5	4	6	4183,336	5,5	6,5	4	6
4038,772	27,5	28,5	4	6	4185,031	35,5	34,5	4	6
4046,251	50,5	50,5	4	6	4188,465	21,5	22,5	4	6
4051,489	36,5	35,5	4	6	4188,871	9,5	10,5	4	6
4057,924	49,5	49,5	4	6	4188,942	9,5	9,5	4	6
4065,806	17,5	18,5	4	6	4190,818	4,5	5,5	4	6
4067,618	24,5	24,5	4	6	4190,876	35,5	34,5	4	6
4074,327	34,5	35,5	4	6	4194,276	8,5	9,5	4	6
4074,554	34,5	34,5	4	6	4194,335	8,5	8,5	4	6
4077,787	23,5	24,5	4	6	4195,778	53,5	52,5	4	6
4080,373	47,5	47,5	4	6	4197,919	3,5	4,5	4	6
4087,970	22,5	22,5	4	6	4201,883	19,5	20,5	4	6
4091,175	46,5	46,5	4	6	4202,058	16,5	16,5	4	6
4091,439	46,5	45,5	4	6	4204,950	33,5	33,5	4	6
4096,104	22,5	23,5	4	6	4209,952	31,5	30,5	4	6
4101,456	45,5	44,5	4	6	4211,886	32,5	31,5	4	6
4106,758	21,5	22,5	4	6	4213,763	13,5	13,5	4	6
4109,577	30,5	29,5	4	6	4214,227	17,5	18,5	4	6
4114,698	30,5	30,5	4	6	4215,422	30,5	29,5	4	6
4122,068	43,5	42,5	4	6	4216,988	12,5	12,5	4	6
4126,335	28,5	28,5	4	6	4218,096	31,5	31,5	4	6
4129,690	42,5	41,5	4	6	4218,301	31,5	30,5	4	6
4131,704	42,5	41,5	4	6	4218,912	2,5	2,5	4	6
4132,879	28,5	29,5	4	6	4219,872	11,5	11,5	4	6
4133,066	28,5	28,5	4	6	4219,994	16,5	17,5	4	6
4140,423	10,5	11,5	4	6	4222,405	10,5	10,5	4	6
4141,027	41,5	40,5	4	6	4222,479	10,5	9,5	4	6
4142,076	26,5	26,5	4	6	4224,593	9,5	9,5	4	6
4149,160	15,5	16,5	4	6	4224,650	9,5	8,5	4	6
4156,633	14,5	15,5	4	6	4225,512	15,5	16,5	4	6
4163,380	23,5	23,5	4	6	4226,415	8,5	8,5	4	6
4163,529	23,5	22,5	4	6	4227,881	7,5	7,5	4	6
4163,767	13,5	14,5	4	6	4228,688	7,5	8,5	4	6

Tabulka 11 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4228,988	6,5	6,5	4	6	4289,308	8,5	8,5	4	6
4229,621	2,5	1,5	4	6	4296,706	39,5	38,5	4	6
4229,710	5,5	5,5	4	6	4322,134	33,5	32,5	4	6
4230,881	14,5	14,5	4	6	4337,003	27,5	26,5	4	6
4232,388	1,5	0,5	4	6	4338,951	17,5	16,5	4	6
4235,582	6,5	7,5	4	6	4341,297	20,5	19,5	4	6
4235,871	13,5	13,5	4	6	3988,810	19,5	19,5	5	7
4238,531	48,5	47,5	4	6	3990,010	21,5	22,5	5	7
4241,691	24,5	23,5	4	6	3990,618	9,5	9,5	5	7
4244,341	4,5	3,5	4	6	3992,532	4,5	5,5	5	7
4245,128	11,5	11,5	4	6	3994,000	18,5	18,5	5	7
4245,951	26,5	26,5	4	6	3995,912	8,5	9,5	5	7
4247,948	22,5	21,5	4	6	3996,969	20,5	20,5	5	7
4248,734	4,5	5,5	4	6	3998,599	33,5	32,5	5	7
4249,387	10,5	10,5	4	6	3998,984	17,5	16,5	5	7
4250,402	6,5	5,5	4	6	3999,568	3,5	4,5	5	7
4253,408	9,5	9,5	4	6	4003,426	16,5	16,5	5	7
4254,965	8,5	7,5	4	6	4009,689	18,5	19,5	5	7
4256,616	18,5	17,5	4	6	4009,802	5,5	6,5	5	7
4256,693	9,5	8,5	4	6	4015,099	13,5	13,5	5	7
4257,199	8,5	8,5	4	6	4015,828	17,5	17,5	5	7
4258,060	10,5	9,5	4	6	4016,006	9,5	10,5	5	7
4259,086	11,5	10,5	4	6	4017,207	3,5	4,5	5	7
4259,687	15,5	14,5	4	6	4018,397	12,5	11,5	5	7
4259,750	12,5	11,5	4	6	4021,113	29,5	28,5	5	7
4260,066	13,5	12,5	4	6	4021,191	11,5	11,5	5	7
4260,762	7,5	7,5	4	6	4021,271	11,5	10,5	5	7
4263,132	22,5	22,5	4	6	4023,092	1,5	1,5	5	7
4263,274	22,5	21,5	4	6	4027,731	8,5	8,5	5	7
4266,893	1,5	2,5	4	6	4031,028	5,5	5,5	5	7
4267,220	5,5	5,5	4	6	4031,416	4,5	3,5	5	7
4270,047	20,5	20,5	4	6	4032,325	14,5	14,5	5	7
4270,122	4,5	4,5	4	6	4037,239	6,5	7,5	5	7
4275,303	2,5	2,5	4	6	4042,065	12,5	12,5	5	7
4277,593	1,5	1,5	4	6	4043,880	5,5	6,5	5	7
4278,367	17,5	17,5	4	6	4045,521	4,5	3,5	5	7
4278,484	17,5	16,5	4	6	4046,552	11,5	11,5	5	7
4280,603	16,5	16,5	4	6	4050,293	4,5	5,5	5	7
4282,683	15,5	14,5	4	6	4050,727	10,5	11,5	5	7
4287,122	3,5	2,5	4	6	4050,797	10,5	10,5	5	7
4287,905	11,5	11,5	4	6	4053,633	20,5	19,5	5	7
4289,076	9,5	9,5	4	6	4053,931	7,5	6,5	5	7
4289,139	9,5	8,5	4	6	4054,743	9,5	10,5	5	7

Tabulka 11 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
4055,653	19,5	18,5	5	7
4055,992	8,5	7,5	5	7
4058,592	8,5	8,5	5	7
4059,025	10,5	9,5	5	7
4060,658	12,5	11,5	5	7
4060,900	14,5	13,5	5	7
4063,997	22,5	21,5	5	7
4067,478	21,5	21,5	5	7
4074,008	19,5	18,5	5	7
4080,964	0,5	1,5	5	7
4081,577	16,5	15,5	5	7
4085,217	14,5	14,5	5	7
4098,884	3,5	2,5	5	7
4103,264	4,5	3,5	5	7
4114,103	35,5	34,5	5	7
4118,614	8,5	7,5	5	7
4127,717	31,5	30,5	5	7
4132,572	13,5	12,5	5	7
4138,190	26,5	25,5	5	7
4140,183	18,5	17,5	5	7

Tabulka 12: Pozice emisních linií CN pro sekvenci  $\Delta v = -1$  přechodu  $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ 

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$v'$	$v''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$v'$	$v''$
6484,045	59,5	58,5	0	1	7023,429	31,5	31,5	0	1
6497,467	48,5	48,5	0	1	7027,136	17,5	18,5	0	1
6516,834	47,5	47,5	0	1	7030,587	30,5	30,5	0	1
6535,876	46,5	46,5	0	1	7033,584	16,5	17,5	0	1
6540,721	56,5	56,5	0	1	7034,286	3,5	4,5	0	1
6554,252	45,5	46,5	0	1	7037,141	11,5	10,5	0	1
6572,662	44,5	45,5	0	1	7037,696	2,5	3,5	0	1
6572,987	44,5	44,5	0	1	7049,281	3,5	3,5	0	1
6612,312	52,5	52,5	0	1	7061,508	25,5	25,5	0	1
6660,013	31,5	32,5	0	1	7065,349	21,5	20,5	0	1
6671,620	38,5	39,5	0	1	7066,728	24,5	24,5	0	1
6676,236	38,5	39,5	0	1	7080,639	21,5	20,5	0	1
6694,775	47,5	46,5	0	1	7084,447	20,5	20,5	0	1
6709,873	46,5	46,5	0	1	7108,176	9,5	8,5	0	1
6719,545	45,5	46,5	0	1	7108,350	5,5	4,5	0	1
6744,837	56,5	55,5	0	1	7108,690	6,5	5,5	0	1
6749,835	43,5	44,5	0	1	7108,785	7,5	6,5	0	1
6778,830	41,5	42,5	0	1	7127,004	5,5	4,5	0	1
6781,849	31,5	32,5	0	1	7154,115	14,5	13,5	0	1
6802,489	52,5	51,5	0	1	7159,118	19,5	18,5	0	1
6821,756	38,5	37,5	0	1	6509,645	34,5	35,5	1	2
6832,959	37,5	38,5	0	1	6517,431	26,5	27,5	1	2
6837,893	27,5	28,5	0	1	6536,503	42,5	43,5	1	2
6842,201	49,5	48,5	0	1	6541,139	32,5	32,5	1	2
6858,361	35,5	35,5	0	1	6548,445	24,5	25,5	1	2
6873,259	17,5	18,5	0	1	6564,822	40,5	41,5	1	2
6888,928	45,5	45,5	0	1	6567,760	40,5	39,5	1	2
6915,557	30,5	30,5	0	1	6606,381	20,5	21,5	1	2
6923,090	42,5	41,5	0	1	6630,261	35,5	35,5	1	2
6932,027	57,5	56,5	0	1	6632,565	25,5	25,5	1	2
6935,980	28,5	29,5	0	1	6652,416	33,5	32,5	1	2
6954,723	39,5	38,5	0	1	6676,602	31,5	31,5	1	2
6955,369	26,5	27,5	0	1	6682,759	14,5	15,5	1	2
6956,017	55,5	54,5	0	1	6687,161	30,5	31,5	1	2
6973,671	24,5	24,5	0	1	6697,562	19,5	19,5	1	2
6990,364	22,5	23,5	0	1	6697,645	29,5	30,5	1	2
6998,488	21,5	21,5	0	1	6707,162	18,5	18,5	1	2
6999,946	51,5	50,5	0	1	6713,648	40,5	39,5	1	2
7005,135	9,5	9,5	0	1	6714,879	40,5	40,5	1	2
7006,140	20,5	20,5	0	1	6738,777	16,5	17,5	1	2
7011,029	8,5	8,5	0	1	6741,965	14,5	14,5	1	2
7016,514	7,5	7,5	0	1	6764,172	11,5	11,5	1	2
7020,394	18,5	19,5	0	1	6765,492	20,5	19,5	1	2



Tabulka 12 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$
6770,917	34,5	33,5	1	2	6592,636	5,5	5,5	2	3
6771,747	19,5	18,5	1	2	6597,104	6,5	7,5	2	3
6773,293	33,5	32,5	1	2	6604,278	3,5	2,5	2	3
6777,068	9,5	9,5	1	2	6607,852	4,5	3,5	2	3
6777,728	20,5	21,5	1	2	6610,334	10,5	10,5	2	3
6782,918	8,5	8,5	1	2	6614,763	9,5	9,5	2	3
6788,363	7,5	7,5	1	2	6617,730	17,5	16,5	2	3
6794,151	31,5	31,5	1	2	6619,033	22,5	21,5	2	3
6797,635	14,5	13,5	1	2	6619,265	16,5	15,5	2	3
6801,231	1,5	2,5	1	2	6620,443	15,5	14,5	2	3
6801,594	9,5	10,5	1	2	6621,242	14,5	13,5	2	3
6805,406	12,5	11,5	1	2	6621,707	12,5	11,5	2	3
6805,626	28,5	27,5	1	2	6622,818	7,5	7,5	2	3
6812,362	1,5	1,5	1	2	6623,346	21,5	20,5	2	3
6820,876	3,5	3,5	1	2	6640,189	16,5	16,5	2	3
6821,118	27,5	26,5	1	2	6646,833	0,5	0,5	2	3
6840,622	43,5	42,5	1	2	6652,190	6,5	6,5	2	3
6844,980	3,5	4,5	1	2	6681,350	8,5	7,5	2	3
6847,169	22,5	22,5	1	2	6687,430	10,5	9,5	2	3
6847,459	16,5	15,5	1	2	6693,681	26,5	25,5	2	3
6859,264	19,5	18,5	1	2					
6862,618	18,5	17,5	1	2					
6878,762	10,5	9,5	1	2					
6879,719	5,5	5,5	1	2					
6879,949	8,5	7,5	1	2					
6880,146	7,5	6,5	1	2					
6915,356	29,5	28,5	1	2					
6918,229	28,5	27,5	1	2					
6920,836	12,5	11,5	1	2					
6922,969	26,5	25,5	1	2					
6926,334	15,5	14,5	1	2					
6926,423	24,5	23,5	1	2					
6928,604	22,5	21,5	1	2					
6499,499	10,5	11,5	2	3					
6517,997	24,5	24,5	2	3					
6526,381	23,5	24,5	2	3					
6540,370	13,5	14,5	2	3					
6543,467	10,5	11,5	2	3					
6544,145	19,5	18,5	2	3					
6557,941	11,5	12,5	2	3					
6583,987	10,5	9,5	2	3					
6584,810	1,5	2,5	2	3					
6592,435	25,5	24,5	2	3					

Tabulka 13: Pozice emisních linií CH v základním stavu X<sup>2</sup>Π

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	F'	F''	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	F'	F''
2513,872	6,5	7,5	1	0	6	8	2729,863	2,5	2,5	1	0	2	3
2514,197	5,5	6,5	1	0	5	6	2730,183	1,5	1,5	1	0	0	1
2514,428	6,5	7,5	1	0	6	8	2731,926	0,5	0,5	1	0	0	0
2535,198	2,5	3,5	1	0	2	3	2736,074	2,5	1,5	1	0	2	1
2536,167	2,5	3,5	1	0	2	3	2749,537	1,5	0,5	1	0	0	0
2547,568	4,5	5,5	1	0	4	5	2749,674	1,5	0,5	1	0	0	0
2547,937	5,5	6,5	1	0	5	7	2785,113	2,5	1,5	1	0	2	2
2548,079	4,5	5,5	1	0	4	5	2797,010	1,5	0,5	1	0	0	0
2548,409	5,5	6,5	1	0	5	7	2806,756	2,5	2,5	1	0	2	3
2550,550	5,5	5,5	1	0	5	5	2810,799	3,5	2,5	1	0	3	3
2580,646	3,5	4,5	1	0	3	4	2810,996	3,5	2,5	1	0	3	3
2581,193	4,5	5,5	1	0	4	6	2812,968	2,5	1,5	1	0	2	1
2581,583	4,5	5,5	1	0	4	6	2813,204	2,5	1,5	1	0	2	1
2584,140	4,5	4,5	1	0	4	4	2835,242	4,5	3,5	1	0	4	4
2595,962	1,5	2,5	1	0	0	2	2836,115	3,5	2,5	1	0	3	2
2599,821	15,5	15,5	1	0	15	15	2855,856	4,5	4,5	1	0	4	5
2612,718	2,5	3,5	1	0	2	3	2857,813	5,5	4,5	1	0	5	5
2613,062	2,5	3,5	1	0	2	3	2858,141	5,5	4,5	1	0	5	5
2613,613	3,5	4,5	1	0	3	5	2858,538	4,5	3,5	1	0	4	3
2613,914	3,5	4,5	1	0	3	5	2858,885	4,5	3,5	1	0	4	3
2643,436	1,5	2,5	1	0	0	2	2862,009	2,5	1,5	1	0	2	2
2645,247	2,5	3,5	1	0	2	4	2862,504	2,5	1,5	1	0	2	2
2645,404	12,5	12,5	1	0	12	13	2877,906	5,5	5,5	1	0	5	6
2658,778	11,5	11,5	1	0	11	12	2879,754	6,5	5,5	1	0	6	6
2659,520	11,5	10,5	1	0	11	10	2879,883	5,5	4,5	1	0	5	4
2664,883	0,5	1,5	1	0	1	1	2880,283	5,5	4,5	1	0	5	4
2667,875	11,5	11,5	1	0	11	12	2899,653	7,5	6,5	1	0	7	7
2676,357	1,5	2,5	1	0	0	3	2917,844	7,5	7,5	1	0	7	8
2678,687	10,5	10,5	1	0	10	11	2918,928	7,5	6,5	1	0	7	6
2682,487	1,5	1,5	1	0	0	1	2919,102	8,5	7,5	1	0	8	8
2682,711	1,5	1,5	1	0	0	1	2919,424	7,5	6,5	1	0	7	6
2690,858	7,5	8,5	1	0	7	9	2935,753	8,5	8,5	1	0	8	9
2692,158	7,5	7,5	1	0	7	7	2936,285	9,5	8,5	1	0	9	9
2697,364	8,5	8,5	1	0	8	9	2966,456	10,5	10,5	1	0	10	11
2701,386	7,5	7,5	1	0	7	8	2993,358	12,5	12,5	1	0	12	13
2703,722	6,5	7,5	1	0	6	8	3003,078	13,5	13,5	1	0	13	14
2705,242	7,5	7,5	1	0	7	8	3019,696	5,5	4,5	1	0	5	5
2709,129	5,5	5,5	1	0	5	5	3020,854	16,5	15,5	1	0	16	16
2709,264	6,5	6,5	1	0	6	7	3027,096	17,5	16,5	1	0	17	17
2711,189	6,5	5,5	1	0	6	5	3027,819	16,5	15,5	1	0	16	15
2712,420	5,5	5,5	1	0	5	5	3035,017	19,5	18,5	1	0	19	19
2726,181	3,5	3,5	1	0	3	4	2522,374	2,5	3,5	2	1	2	3
2727,193	2,5	2,5	1	0	2	2	2526,297	2,5	2,5	2	1	2	2

Tabulka 13 (pokračování)

$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	F'	F''	$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	J'	J''	$\nu'$	$\nu''$	F'	F''
2552,370	1,5	2,5	2	1	0	2	2616,430	6,5	5,5	3	2	6	5
2552,504	1,5	2,5	2	1	0	2	2616,778	6,5	5,5	3	2	6	5
2571,869	7,5	7,5	2	1	7	7	2616,921	5,5	4,5	3	2	5	4
2586,501	5,5	5,5	2	1	5	5	2634,736	7,5	6,5	3	2	7	6
2595,727	3,5	3,5	2	1	3	3	2635,120	7,5	6,5	3	2	7	6
2600,191	3,5	3,5	2	1	3	3	2652,187	8,5	7,5	3	2	8	7
2600,894	3,5	3,5	2	1	3	3							
2601,181	2,5	2,5	2	1	2	2							
2603,707	1,5	1,5	2	1	0	0							
2604,164	1,5	1,5	2	1	0	0							
2605,884	0,5	0,5	2	1	0	1							
2623,561	1,5	0,5	2	1	0	1							
2669,003	1,5	0,5	2	1	0	1							
2669,120	1,5	0,5	2	1	0	0							
2678,077	2,5	2,5	2	1	2	2							
2702,253	3,5	3,5	2	1	3	3							
2726,617	5,5	4,5	2	1	5	4							
2726,924	5,5	4,5	2	1	5	4							
2727,327	4,5	3,5	2	1	4	3							
2727,666	4,5	3,5	2	1	4	3							
2730,963	2,5	1,5	2	1	2	0							
2747,175	6,5	5,5	2	1	6	5							
2747,539	6,5	5,5	2	1	6	5							
2748,065	5,5	4,5	2	1	5	4							
2783,013	7,5	7,5	2	1	7	7							
2784,470	8,5	7,5	2	1	8	7							
2785,246	7,5	6,5	2	1	7	6							
2801,156	9,5	8,5	2	1	9	8							
2801,396	8,5	7,5	2	1	8	7							
2801,919	8,5	7,5	2	1	8	7							
2843,136	12,5	11,5	2	1	12	11							
2864,241	13,5	12,5	2	1	13	12							
2880,032	15,5	14,5	2	1	15	14							
2530,244	2,5	1,5	3	2	2	0							
2553,943	3,5	2,5	3	2	3	2							
2554,127	3,5	2,5	3	2	3	2							
2555,986	2,5	1,5	3	2	2	0							
2576,067	4,5	3,5	3	2	4	3							
2576,310	4,5	3,5	3	2	4	3							
2577,140	3,5	2,5	3	2	3	2							
2577,418	3,5	2,5	3	2	3	2							
2596,883	5,5	4,5	3	2	5	4							
2597,179	5,5	4,5	3	2	5	4							

## Reference

1. Oparin, A. I. The origin of life. *New York, Macmillan Company.* viii p 2 (1938).
2. Miller, S. L. A production of amino acids under possible primitive earth conditions. *Science (80-. ).* **117**, 528–529 (1953).
3. Miller, S. L. & Urey, H. C. Organic Compound Synthesis on the Primitive Earth. *Science (80-. ).* **130**, 245–251 (1959).
4. Balucani, N. Elementary Reactions and Their Role in Gas-Phase Prebiotic Chemistry. *Int. J. Mol. Sci.* **10**, 2304–2335 (2009).
5. Barks, H. L. *et al.* Guanine, Adenine, and Hypoxanthine Production in UV-Irradiated Formamide Solutions: Relaxation of the Requirements for Prebiotic Purine Nucleobase Formation. *ChemBioChem* **11**, 1240–1243 (2010).
6. Saladino, R., Carota, E., Botta, G., Kapralov, M. & Timoshenko, G. N. Meteorite-catalyzed syntheses of nucleosides and of other prebiotic compounds from formamide under proton irradiation. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **112**, (2015).
7. Saladino, R. *et al.* Proton irradiation: a key to the challenge of N-glycosidic bond formation in a prebiotic context. *Sci. Rep.* **7**, 14709 (2017).
8. Pastorek, A. *et al.* Primordial Radioactivity and Prebiotic Chemical Evolution: Effect of  $\gamma$  radiation on Formamide-Based Synthesis. *J. Phys. Chem. B* **124**, 8951–8959 (2020).
9. Bar-Nun, A. & Shaviv, A. Dynamics of the chemical evolution of Earth's primitive atmosphere. *Icarus* **24**, 197–210 (1975).
10. Ferus, M., Matulkova, I., Juha, L. & Civiš, S. Investigation of laser-plasma chemistry in CO-N<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O mixtures using O-18 labeled water. *Chem. Phys. Lett.* **472**, 14–18 (2009).
11. Civiš, S. *et al.* Amino acid formation induced by high-power laser in CO<sub>2</sub> / CO – N<sub>2</sub> – H<sub>2</sub>O gas mixtures. *Chem. Phys. Lett.* **386**, 169–173 (2004).
12. Saladino, R., Crestini, C., Costanzo, G. & DiMauro, E. On the Prebiotic Synthesis of Nucleobases, Nucleotides, Oligonucleotides, Pre-RNA and Pre-DNA Molecules. in

- Prebiotic Chemistry* **259**, 29–68 (Springer-Verlag, 2005).
13. Yamada, H. & Okamoto, T. A One-step Synthesis of Purine Ring from Formamide. *Chem. Pharm. Bull. (Tokyo)*. **20**, 623–624 (1972).
  14. Yamada, H., Hirobe, M., Higashiyama, K., Takahashi, H. & Suzuki, K. T. Detection of carbon-13-nitrogen-15 coupled units in adenine derived from doubly labeled hydrogen cyanide or formamide. *J. Am. Chem. Soc.* **100**, 4617–4618 (1978).
  15. Pastorek, A. *et al.* Prebiotic synthesis at impact craters: the role of Fe-clays and iron meteorites. *Chem. Commun.* **55**, 10563–10566 (2019).
  16. Šponer, J. E. *et al.* Prebiotic synthesis of nucleic acids and their building blocks at the atomic level - merging models and mechanisms from advanced computations and experiments. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 20047—20066 (2016).
  17. Ferus, M. *et al.* High-energy chemistry of formamide : A unified mechanism of nucleobase formation. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **112**, 657–662 (2015).
  18. Ferus, M. *et al.* Formation of nucleobases in a Miller–Urey reducing atmosphere. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **114**, 4306–4311 (2017).
  19. Rotelli, L. *et al.* The key role of meteorites in the formation of relevant prebiotic molecules in a formamide/water environment. *Sci. Rep.* **6**, (2016).
  20. Saladino, R., Botta, G., Pino, S., Costanzo, G. & Di, E. From the one-carbon amide formamide to RNA all the steps are prebiotically possible. *Biochimie* **94**, 1451–1456 (2012).
  21. Saladino, R., Botta, G., Bizzarri, B. M., Di Mauro, E. & Garcia Ruiz, J. M. A Global Scale Scenario for Prebiotic Chemistry: Silica-Based Self-Assembled Mineral Structures and Formamide. *Biochemistry* **55**, 2806–2811 (2016).
  22. Ferus, M. *et al.* High Energy Radical Chemistry Formation of HCN-rich Atmospheres on early Earth. *Sci. Rep.* **7**, 6275 (2017).
  23. Xu, J. *et al.* A prebiotically plausible synthesis of pyrimidine beta-ribonucleosides and their phosphate derivatives involving photoanomerization. *Nat. Chem.* **9**, 303–309 (2017).

24. Sutherland, J. D. Studies on the origin of life - the end of the beginning. *Nat. Rev. Chem.* **1**, (2017).
25. Sutherland, J. D. The Origin of Life-Out of the Blue. *Angew. Chemie - Int. Ed.* **55**, 104–121 (2016).
26. Powner, M. W. & Sutherland, J. D. Prebiotic chemistry: a new modus operandi. *Philos. Trans. R. Soc. B Biol. Sci.* **366**, 2870–2877 (2011).
27. Powner, M., Sutherland, J. & Szostak, J. The Origins of Nucleotides. *Synlett* **2011**, 1956–1964 (2011).
28. Ferus, M. *et al.* HNC/HCN ratio in acetonitrile, formamide, and BrCN discharge. *J. Phys. Chem. A* **115**, 1885–1899 (2011).
29. Ferus, M., Kubelík, P. & Civiš, S. Laser spark formamide decomposition studied by FT-IR spectroscopy. *J. Phys. Chem. A* **115**, (2011).
30. Ferus, M. *et al.* On the Road from Formamide Ices to Nucleobases: IR-Spectroscopic Observation of a Direct Reaction between Cyano Radicals and Formamide in a High-Energy Impact Event. *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 20788–20796 (2012).
31. Civiš, S., Kubelík, P. & Ferus, M. Time-resolved fourier transform emission spectroscopy of He/CH<sub>4</sub> in a positive column discharge. *J. Phys. Chem. A* **116**, 3137–3147 (2012).
32. Pelikán, P., Lapčík, L., Zmeškal, O. & Krčma, F. *Fyzikální chemie: Struktura hmoty.* (Vutium, 2000).
33. Whittet, D. C. B. & Duley, W. W. Carbon monoxide frosts in the interstellar medium. *Astron. Astrophys. Rev.* **2**, 167–189 (1991).
34. Oka, T. & Geballe, T. R. The Central 300 pc of the Galaxy Probed by Infrared Spectra of H<sub>3</sub><sup>+</sup> and CO. II. Expansion and Morphology of the Warm Diffuse Gas. *Astrophys. J.* **902**, 9 (2020).
35. Lambert, D. L., Dearborn, D. S. & Sneden, C. The C-12/C-13 ratio in stellar atmospheres. II - CN and CO in alpha Orionis. *Astrophys. J.* **193**, 621 (1974).
36. Rank, D. M., Geballe, T. R. & Wollman, E. R. Detection of <sup>17</sup>O in IRC+10216.

- Astrophys. J.* **187**, L111 (1974).
37. Hagen, W., Allamandola, L. J. & Greenberg, J. M. Infrared absorption lines by molecules in grain mantles. *Astron. Astrophys.* **86**, L3–L6 (1980).
  38. Ogilvie, J. F., Cheah, S. L., Lee, Y. P. & Sauer, S. P. A. Infrared spectra of CO in absorption and evaluation of radial functions for potential energy and electric dipolar moment. *Theor. Chem. Acc.* **108**, 85–97 (2002).
  39. Narahari Rao, K. *Wavelength Standards in the Infrared*. (Academic Press, 1966).
  40. Gordon, I. E. *et al.* The HITRAN 2016 molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **203**, 3–69 (2017).
  41. George, T., Urban, W. & Lefloch, A. Improved mass-independent dunham parameters for the ground state of CO and calibration frequencies for the fundamental band. *Journal of Molecular Spectroscopy* **165**, 500–505 (1994).
  42. Farrenq, R., Guelachvili, G., Sauval, A. J., Grevesse, N. & Farmer, C. B. Improved Dunham coefficients for CO from infrared solar lines of high rotational excitation. *J. Mol. Spectrosc.* **149**, 375–390 (1991).
  43. Yoshida, T. & Sasada, H. Near-infrared spectroscopy with a wavemeter. *J. Mol. Spectrosc.* **153**, 208–210 (1992).
  44. Cazzoli, G., Puzzarini, C. & Lapinov, A. V. Precise Laboratory Frequencies for the J = 1-0 and J = 2-1 Rotational Transitions of C18O. *Astrophys. J.* **592**, L95–L98 (2003).
  45. George, T., Wu, B., Dax, A., Schneider, M. & Urban, W. Saturation stabilization of the CO fundamental-band laser. *Appl. Phys. B Photophysics Laser Chem.* **53**, 330–332 (1991).
  46. Malathy Devi, V., Benner, D. C., Smith, M. A. H. & Rinsland, C. P. Self-broadening and self-shift coefficients in the fundamental band of <sup>12</sup>C<sup>16</sup>O. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **60**, 815–824 (1998).
  47. Wappelhorst, M. H. *et al.* Sub-doppler heterodyne frequency measurements on isotopic species of carbon monoxide and improved frequencies for secondary standards near 60 THz. *J. Mol. Spectrosc.* **181**, 357–362 (1997).

48. George, T., Saupe, S., Wappelhorst, M. H. & Urban, W. The CO fundamental-band laser as secondary frequency standard at 5  $\mu\text{m}$ . *Appl. Phys. B Lasers Opt.* **59**, 159–166 (1994).
49. Rothman, L. S. *et al.* The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **110**, 533–572 (2009).
50. Varberg, T. D. & Evenson, K. M. Accurate far-infrared rotational frequencies of carbon monoxide. *Astrophys. J.* **385**, 763 (1992).
51. Gendriesch, R. *et al.* Accurate laboratory rest frequencies of vibrationally excited CO up to  $v = 3$  and up to 2 THz. *Astron. Astrophys.* **497**, 927–930 (2009).
52. Todd, T. R., Clayton, C. M., Telfair, W. & Ubbin, T. K. M. Infrared Emission of  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ ,  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ , and  $^{12}\text{C}^{17}\text{O}$ . (1976).
53. Klapper, G. *et al.* Laboratory Precision Measurements of the Rotational Spectrum of  $^{12}\text{C}^{17}\text{O}$  and  $^{13}\text{C}^{17}\text{O}$ . *Astrophys. J.* **582**, 262–268 (2003).
54. Klapper, G., Lewen, F., Gendriesch, R., Belov, S. P. & Winnewisser, G. Sub-Doppler Measurements of the Rotational Spectrum of  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ . *J. Mol. Spectrosc.* **201**, 124–127 (2000).
55. Winnewisser, G., Belov, S. P., Klaus, T. & Schieder, R. Sub-Doppler Measurements on the Rotational Transitions of Carbon Monoxide. *J. Mol. Spectrosc.* **184**, 468–472 (1997).
56. Watson, J. K. G. The isotope dependence of diatomic Dunham coefficients. *J. Mol. Spectrosc.* **80**, 411–421 (1980).
57. Voitsekhovskaya, O. K., Kashirskii, D. E. & Korchikov, V. S. Determination of dunham coefficients and calculation of the energies of highly excited vibrational-rotational levels of the carbon monoxide molecule in the electronic ground state. *Moscow Univ. Phys. Bull.* **65**, 386–391 (2010).
58. Coxon, J. A. & Hajigeorgiou, P. G. Direct potential fit analysis of the  $X^1\Sigma^+$  ground state of CO. *J. Chem. Phys.* **121**, 2992–3008 (2004).
59. Rytel, M. & Rytel, T. Dunham Series Coefficients up to 20th Order. *J. Mol. Spectrosc.*



- 185**, 417–419 (1997).
60. de Natale, P., Inguscio, M., Orza, C. R. & Zink, L. R. Far-infrared Fourier transform spectroscopy of (C-12)(0-18). *Astrophys. J.* **370**, L53 (1991).
  61. Maki, A. G., Wells, J. S. & Jennings, D. A. Heterodyne frequency measurements of CO and OCS beyond 2100 cm<sup>-1</sup>. *J. Mol. Spectrosc.* **144**, 224–229 (1990).
  62. Tyuterev, V. G. & Velichko, T. I. High-order anharmonicity parameters in various representations of the diatomic potential function and exact relations between spectroscopic constants. application to the co molecule. *Chem. Phys. Lett.* **104**, 596–604 (1984).
  63. Rothman, L. S. *et al.* HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **111**, 2139–2150 (2010).
  64. Belov, S. P., Tret'iaikov, M. I. & Suenram, R. D. Improved laboratory rest frequency measurements and pressure shift and broadening parameters for the J = 2 - 1 and J = 3 - 2 rotational transitions of CO. *Astrophys. J.* **393**, 848 (1992).
  65. Guelachvili, G. Absolute wavenumbers and molecular constants of the fundamental bands of 12C16O, 12C17O, 12C18O, 13C16O, 13C17O, 13C18O and of the 2-1 bands of 12C16O and 13C16O, around 5μm, by Fourier spectroscopy under vacuum. *J. Mol. Spectrosc.* **75**, 251–269 (1979).
  66. Guelachvili, G., de Villeneuve, D., Farrenq, R., Urban, W. & Verges, J. Dunham coefficients for seven isotopic species of CO. *J. Mol. Spectrosc.* **98**, 64–79 (1983).
  67. Chen, D. W., Narahari Rao, K. & McDowell, R. S. Fundamental and overtone bands of isotopic species of carbon monoxide. *J. Mol. Spectrosc.* **61**, 71–78 (1976).
  68. Al-Tuwirqi, R., Al-Suliman, N., Khalil, A. A. I. & Gondal, M. A. New observation of the quintet states of CO excited by glow discharge. *Mol. Phys.* **110**, 2951–2956 (2012).
  69. Tashkun, S. A., Velichko, T. I. & Mikhailenko, S. N. Critical evaluation of measured pure-rotation and rotation-vibration line positions and an experimental dataset of energy levels of 12C16O in X1Σ<sup>+</sup> state. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **111**, 1106–1116 (2010).

70. Velichko, T. I., Mikhailenko, S. N. & Tashkun, S. A. Global Multi-isotopologue fit of measured rotation and vibration-rotation line positions of CO in X  $1\sigma^+$  state and new set of mass-independent Dunham coefficients. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **113**, 1643–1655 (2012).
71. Mishra, A. P., Shetty, B. J. & Kshirsagar, R. J. Fourier transform emission spectroscopy of  $\Delta v = 2$  sequence bands of the CO molecule in the ground electronic state. *J. Mol. Spectrosc.* **232**, 296–307 (2005).
72. Devi, V. M., Benner, D. C., Smith, M. A. H., Rinsland, C. P. & Mantz, A. W. Determination of self- and H<sub>2</sub>-broadening and shift coefficients in the 2-0 band of <sup>12</sup>C<sup>16</sup>O using a multispectrum fitting procedure. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **75**, 455–471 (2002).
73. Picqué, N. & Guelachvili, G. Absolute wavenumbers and self-induced pressure lineshift coefficients for the 3-0 vibration-rotation band of <sup>12</sup>C<sup>16</sup>O. *J. Mol. Spectrosc.* **185**, 244–248 (1997).
74. Swann, W. C. & Gilbert, S. L. Pressure-induced shift and broadening of 1560–1630-nm carbon monoxide wavelength-calibration lines. *J. Opt. Soc. Am. B* **19**, 2461 (2002).
75. Chung, C. Y., Ogilvie, J. F. & Lee, Y. P. Detection of vibration-rotational band 5-0 of <sup>12</sup>C<sup>16</sup>O X  $1\Sigma^+$  with cavity ringdown absorption near 0.96  $\mu\text{m}$ . *J. Phys. Chem. A* **109**, 7854–7858 (2005).
76. Carlone, C. & Dalby, F. W. Spectrum of the hydroxyl radical. *Can. J. Phys.* **47**, 1945–1957 (1969).
77. Watson, W. W. The Emission Spectrum of Water-Vapor. *Astrophys. J.* **60**, 145 (1924).
78. Meinel, I. A. B. OH Emission Bands in the Spectrum of the Night Sky. *Astrophys. J.* **111**, 555 (1950).
79. Frey, H. U., Mende, S. B., Arens, J. F., McCullough, P. R. & Swenson, G. R. Atmospheric gravity wave signatures in the infrared hydroxyl OH airglow. *Geophys. Res. Lett.* **27**, 41–44 (2000).
80. Abrams, M. C., Davis, S. P., Rao, M. L. P., Engleman, Rolf, J. & Brault, J. W. High-resolution Fourier transform spectroscopy of the Meinel system of OH. *Astrophys. J.*

- Suppl. Ser.* **93**, 351 (1994).
81. Chen, Q., Hu, X., Guo, H. & Xie, D. Insights into the Formation of Hydroxyl Radicals with Nonthermal Vibrational Excitation in the Meinel Airglow. *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 1822–1828 (2021).
  82. Engleman, R. Accurate wavenumbers of the  $A^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$  (0, 0) and (1, 0) bands of OH and OD. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **12**, 1347–1350 (1972).
  83. Crosley, D. R. & Lengel, R. K. Relative transition probabilities and the electronic transition moment in the A-X system of OH. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **15**, 579–591 (1975).
  84. Maillard, J. P., Chauville, J. & Mantz, A. W. High-resolution emission spectrum of OH in an oxyacetylene flame from 3.7 to 0.9  $\mu\text{m}$ . *J. Mol. Spectrosc.* **63**, 120–141 (1976).
  85. Sappey, A. D. & Copeland, R. A. Laser Double-Resonance Study of OH ( $X^2\Pi$ ,  $v = 12$ ). *J. Mol. Spectrosc.* **143**, 160–168 (1990).
  86. Copeland, R. A., Jeffries, J. B. & Crosley, D. R. The OH  $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi(4,2)$  band: Line positions and linewidths. *J. Mol. Spectrosc.* **143**, 183–185 (1990).
  87. Stark, G., Brault, J. W. & Abrams, M. C. Fourier-transform spectra of the  $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$   $\Delta v = 0$  bands of OH and OD. *J. Opt. Soc. Am. B* **11**, 3 (1994).
  88. German, K. R. Direct measurement of the radiative lifetimes of the  $A^2\Sigma^+$  ( $V' = 0$ ) states of OH and OD. *J. Chem. Phys.* **62**, 2584–2587 (1975).
  89. Bauschlicher, C. W. & Langhoff, S. R. Theoretical determination of the radiative lifetime of the  $A^2\Sigma^+$  state of OH. *J. Chem. Phys.* **87**, 4665–4672 (1987).
  90. Coxon, J. A. Optimum molecular constants and term values for the  $X^2\Pi(v \leq 5)$  and  $A^2\Sigma^+(v \leq 3)$  states of OH. *Can. J. Phys.* **58**, 933–949 (1980).
  91. Coxon, J. A. & Foster, S. C. Rotational analysis of hydroxyl vibration–rotation emission bands: Molecular constants for OH  $X^2\Pi$ ,  $6 \leq v \leq 10$ . *Can. J. Phys.* **60**, 41–48 (1982).
  92. Coxon, J. A., Sappey, A. D. & Copeland, R. A. Molecular constants and term values for the hydroxyl radical, OH: The  $X^2\Pi$  ( $v = 8, 12$ ),  $A^2\Sigma^+$  ( $v = 4-9$ ),  $B^2\Sigma^+$  ( $v = 0, 1$ ),

- and  $C2\Sigma^+$  ( $v = 0, 1$ ) states. *J. Mol. Spectrosc.* **145**, 41–55 (1991).
93. Bernath, P. F. & Colin, R. Revised molecular constants and term values for the  $X2\Pi$  and  $B2\Sigma^+$  states of OH. *J. Mol. Spectrosc.* **257**, 20–23 (2009).
  94. Goldman, A. *et al.* Updated line parameters for OH  $X2\Pi$ - $X2\Pi$  ( $v'',v'$ ) transitions. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **59**, 453–469 (1998).
  95. Billoux, T., Cressault, Y. & Gleizes, A. Tables of radiative transition probabilities for the main diatomic molecular systems of OH, CH, CH<sup>+</sup>, CO and CO<sup>+</sup> occurring in CO-H<sub>2</sub> syngas-type plasma. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **133**, 434–444 (2014).
  96. Brooke, J. S. A. *et al.* Line strengths of rovibrational and rotational transitions in the  $X2\Pi$  ground state of OH. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **168**, 142–157 (2016).
  97. Yousefi, M., Bernath, P. F., Hodges, J. & Masseron, T. A new line list for the  $A2\Sigma^+$ - $X2\Pi$  electronic transition of OH. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **217**, 416–424 (2018).
  98. Goldman, A., Murcray, D. G., Lambert, D. L. & Dominy, J. F. The pure rotation spectrum of the hydroxyl radical and the solar oxygen abundance. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **203**, 767–776 (1983).
  99. Grevesse, N., Sauval, A. J. & van Dishoeck, E. F. An analysis of vibration-rotation lines of OH in the solar infrared spectrum. *Astron. Astrophys.* **141**, 10–16 (1984).
  100. Mélen, F. *et al.* A new analysis of the OH radical spectrum from solar infrared observations. *J. Mol. Spectrosc.* **174**, 490–509 (1995).
  101. Asplund, M., Grevesse, N., Sauval, A. J., Allende Prieto, C. & Kiselman, D. Line formation in solar granulation. *Astron. Astrophys.* **417**, 751–768 (2004).
  102. Melendez, J. & Barbuy, B. Keck NIRSPEC Infrared OH Lines: Oxygen Abundances in Metal-poor Stars down to  $[Fe/H] = -2.9$ . *Astrophys. J.* **575**, 474–483 (2002).
  103. Piccioni, G. *et al.* First detection of hydroxyl in the atmosphere of Venus. *Astron. Astrophys.* **483**, 29–33 (2008).
  104. Nugroho, S. K. *et al.* First Detection of Hydroxyl Radical Emission from an Exoplanet Atmosphere: High-dispersion Characterization of WASP-33b Using Subaru/IRD.

- Astrophys. J. Lett.* **910**, L9 (2021).
105. Fernando, A. M., Bernath, P. F., Hodges, J. N. & Masseron, T. A new linelist for the  $A3\Pi-X3\Sigma^-$  transition of the NH free radical. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **217**, 29–34 (2018).
  106. Eder, J. M. Beiträge zur Spectralanalyse. *Denksch. Wien. Akad.* **60**, 1–12 (1893).
  107. Fowler, A. & Gregory, C. C. L. The Ultra-Violet Band of Ammonia, and Its Occurrence in the Solar Spectrum. *Philos. Trans. R. Soc. London* **218**, 351–372 (1919).
  108. Funke, G. W. Das Absorptionsspektrum des NH. *Zeitschrift für Phys.* **101**, 104–112 (1936).
  109. Stewart, K. The imine radical, NH. *Trans. Faraday Soc.* **41**, 663 (1945).
  110. Van Helden, J. H. *et al.* Production mechanisms of NH and NH<sub>2</sub> radicals in N<sub>2</sub>-H<sub>2</sub> plasmas. *J. Phys. Chem. A* **111**, 11460–11472 (2007).
  111. Dixon, R. N. THE 0–0 AND 1–0 BANDS OF THE A (  $3\Pi_i$  )– X (  $3\Sigma^-$  ) SYSTEM OF NH. *Can. J. Phys.* **37**, 1171–1186 (1959).
  112. Mantei, K. A. & Bair, E. J. Reactions of nitrogen-hydrogen radicals. III. Formation and disappearance of NH radicals in the photolysis of ammonia. *J. Chem. Phys.* **49**, 3248–3256 (1968).
  113. Hansen, I., Hoinghaus, K., Zetzsch, C. & Stuhl, F. Detection of NH ( $X\ 3\Sigma^-$ ) by resonance fluorescence in the pulsed vacuum uv photolysis of NH<sub>3</sub> and its application to reactions of NH radicals. *Chem. Phys. Lett.* **42**, 370–372 (1976).
  114. Brazier, C. R., Ram, R. S. & Bernath, P. F. Fourier transform spectroscopy of the  $A3\Pi-X3\Sigma^-$  transition of NH. *J. Mol. Spectrosc.* **120**, 381–402 (1986).
  115. Clement, S. G., Ashfold, M. N. R., Western, C. M., Johnson, R. D. & Hudgens, J. W. Triplet excited states of the NH(ND) radical revealed via two photon resonant multiphoton ionization spectroscopy. *J. Chem. Phys.* **96**, 5538–5540 (1992).
  116. Ram, R. S., Bernath, P. F. & Hinkle, K. H. Infrared emission spectroscopy of NH: Comparison of a cryogenic echelle spectrograph with a Fourier transform spectrometer. *J. Chem. Phys.* **110**, 5557–5563 (1999).

117. Swings, P., Elvey, C. T. & Babcock, H. W. The Spectrum of Comet Cunningham, 1940C. *Astrophys. J.* **94**, 320 (1941).
118. Singh, P. D. & Gruenwald, R. B. The photodissociation lifetimes of the NH radical in comets. *Astron. Astrophys.* **178**, 277–282 (1987).
119. Sneden, C. The nitrogen abundance of the very metal-poor star HD 122563. *Astrophys. J.* **184**, 839 (1973).
120. Lambert, D. L., Brown, J. A., Hinkle, K. H. & Johnson, H. R. Carbon, nitrogen, and oxygen abundances in Betelgeuse. *Astrophys. J.* **284**, 223 (1984).
121. Smith, V. V. & Lambert, D. L. The chemical composition of red giants. II - Helium burning and the s-process in the MS and S stars. *Astrophys. J.* **311**, 843 (1986).
122. Aoki, W. & Tsuji, T. High resolution infrared spectroscopy of CN and NH lines: nitrogen abundance in oxygen-rich giants through K to late M. *Astron. Astrophys.* **328**, 175–186 (1997).
123. Meyer, D. M. & Roth, K. C. Discovery of interstellar NH. *Astrophys. J.* **376**, L49 (1991).
124. Crawford, I. A. & Williams, D. A. Detection of interstellar NH towards  $\zeta$  Ophiuchi by means of ultra-high-resolution spectroscopy. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **291**, (1997).
125. Weselak, T., Galazutdinov, G. A., Beletsky, Y. & Krełowski, J. Interstellar NH molecule in translucent sightlines. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **400**, 392–397 (2009).
126. Spite, M. *et al.* First stars VI - Abundances of C, N, O, Li, and mixing in extremely metal-poor giants. Galactic evolution of the light elements. *Astron. Astrophys.* **430**, 655–668 (2005).
127. Claxton, T. A. Ab initio UHF calculations. Part 3.—NH radicals. *Trans. Faraday Soc.* **66**, 1540–1543 (1970).
128. Das, G., Wahl, A. C. & Stevens, W. J. Ab initio study of the NH radical. *J. Chem. Phys.* **61**, 433–434 (1974).
129. Ram, R. S. & Bernath, P. F. Revised molecular constants and term values for the X $3\Sigma^-$  and A $3\Pi$  states of NH. *J. Mol. Spectrosc.* **260**, 115–119 (2010).

130. Brooke, J. S. A., Bernath, P. F., Western, C. M., van Hemert, M. C. & Groenenboom, G. C. Line strengths of rovibrational and rotational transitions within the  $X^3\Sigma^-$  ground state of NH. *J. Chem. Phys.* **141**, 054310 (2014).
131. Brooke, J. S. A., Bernath, P. F. & Western, C. M. Note: Improved line strengths of rovibrational and rotational transitions within the  $X^3\Sigma^-$  ground state of NH. *J. Chem. Phys.* **143**, 026101 (2015).
132. van de Meerakker, S. Y. T., Jongma, R. T., Bethlem, H. L. & Meijer, G. Accumulating NH radicals in a magnetic trap. *Phys. Rev. A - At. Mol. Opt. Phys.* **64**, 4 (2001).
133. Van De Meerakker, S. Y. T., Labazan, I., Hoekstra, S., Küpper, J. & Meijer, G. Production and deceleration of a pulsed beam of metastable NH ( $a^1\Delta$ ) radicals. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **39**, (2006).
134. Plomp, V., Gao, Z., Cremers, T. & Van De Meerakker, S. Y. T. Multistage Zeeman deceleration of NH  $X^3\Sigma^-$  radicals. *Phys. Rev. A* **99**, 1–6 (2019).
135. Schaefer, H. F. & Heil, T. G. Electronic structures and potential energy curves for the low-lying states of the CN radical. *J. Chem. Phys.* **54**, 2573–2580 (1971).
136. Jenkins, F. A. Extension of the violet CN band system to include the CN tail bands. *Phys. Rev.* **31**, 539–558 (1928).
137. Thiele, T. N. On the Law of Spectral Series. *Astrophys. J.* **6**, 65 (1897).
138. Treffers, R. R. Observations of the fundamental rotation-vibration band of CN. *Astrophys. J.* **196**, 883 (1975).
139. Cerny, D., Bacis, R., Guelachvili, G. & Roux, F. Extensive analysis of the red system of the CN molecule with a high resolution Fourier Spectrometer. *J. Mol. Spectrosc.* **73**, 154–167 (1978).
140. Davies, P. B. & Hamilton, P. A. The infrared laser spectrum of the CN radical in its ground state. *J. Chem. Phys.* **76**, 2127–2128 (1982).
141. Skatrud, D. D., De Lucia, F. C., Blake, G. A. & Sastry, K. V. L. N. The millimeter and submillimeter spectrum of CN in its first four vibrational states. *J. Mol. Spectrosc.* **99**, 35–46 (1983).

142. Bogey, M., Demuynck, C. & Destombes, J. L. The millimeter wave spectrum of  $^{13}\text{CN}$  in the excited vibrational states  $v \leq 9$ . *Chem. Phys.* **102**, 141–146 (1986).
143. Ito, H., Kuchitsu, K., Yamamoto, S. & Saito, S. Microwave spectroscopy of the  $v=3-10$  levels of  $\text{CN}$  ( $X2\Sigma^+$ ). *Chem. Phys. Lett.* **186**, 539–546 (1991).
144. Prasad, C. V. V., Bernath, P. F., Frum, C. & Engleman, R. Fourier transform jet emission spectroscopy of the  $B2\Sigma^+-X2\Sigma^+$  transition of  $\text{CN}$ . *J. Mol. Spectrosc.* **151**, 459–473 (1992).
145. Rehfuss, B. D., Suh, M. H., Miller, T. A. & Bondybey, V. E. Fourier transform UV, visible, and infrared spectra of supersonically cooled  $\text{CN}$  radical. *J. Mol. Spectrosc.* **151**, 437–458 (1992).
146. Wurfel, B. E. *et al.* Infrared fluorescence and absorption studies of  $\text{CN}$ : spectra and relaxation in solid rare gases. *Chem. Phys.* **174**, 255–265 (1993).
147. Liu, Y. *et al.* Near-infrared spectrum of the  $A2\Pi_i-X2\Sigma^+$  (2, 0) band of  $\text{CN}$  studied by concentration modulation laser spectroscopy. *J. Mol. Spectrosc.* **205**, 16–19 (2001).
148. Chao-Xiong, X. *et al.* Band (5, 0) in the Red System  $A2I-X2+$  of  $\text{CN}$  Studied by Optical Heterodyne Magnetic Rotation Enhanced Concentration Modulation Spectroscopy. *Chinese Phys. Lett.* **19**, 1277–1279 (2002).
149. Horká, V., Civiš, S., Špirko, V. & Kawaguchi, K. The infrared spectrum of  $\text{CN}$  in its ground electronic state. *Collect. Czechoslov. Chem. Commun.* **69**, 73–89 (2004).
150. Hempel, F., RÖPCKE, J., Pipa, A. & Davies, P. B. Infrared laser spectroscopy of the  $\text{CN}$  free radical in a methane-nitrogen-hydrogen plasma. *Mol. Phys.* **101**, 589–594 (2003).
151. Li, P. & Fan, W. Y. The  $\text{CN}$  free radical in acetonitrile discharges. *J. Appl. Phys.* **93**, 9497–9502 (2003).
152. Hübner, M., Castillo, M., Davies, P. B. & Ropeke, J. Diode laser spectroscopy of the fundamental bands of  $^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ ,  $^{13}\text{C}^{14}\text{N}$ ,  $^{12}\text{C}^{15}\text{N}$ ,  $^{13}\text{C}^{15}\text{N}$  free radicals in the ground  $2\Sigma^+$  electronic state. *Spectrochim. Acta - Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* **61**, 57–60 (2005).



153. Civiš, S., Šedivcová-Uhlíková, T., Kubelík, P. & Kawaguchi, K. Time-resolved Fourier transform emission spectroscopy of A $2\Pi$ -X $2\Sigma^+$  infrared transition of the CN radical. *J. Mol. Spectrosc.* **250**, 20–26 (2008).
154. Ito, H., Ozaki, Y., Suzuki, K., Kondow, T. & Kuchitsu, K. Emission spectrum of the CN(B  $2\Sigma^+$ -X  $2\Sigma^+$ ) tail band system: B  $2\Sigma^+$  +  $\sim$  4 $\Pi$  perturbations in the  $\nu_B = 9, 12,$  and 17 levels. *J. Chem. Phys.* **96**, 4195–4204 (1992).
155. Ito, H., Kazama, A. & Kuchitsu, K. Perturbations in the CN(B $2\Sigma^+$  - X $2\Sigma^+$ ) tail band system Part 4. The B $2\Sigma^+$   $\sim$  A $2\Pi$ i perturbations in the  $\nu_B = 11, 14-16, 18$  and 19 levels. *J. Mol. Struct.* **324**, 29–43 (1994).
156. Ram, R. S., Wallace, L., Hinkle, K. & Bernath, P. F. Fourier transform emission spectroscopy of the a  $2\Pi$ -X  $2\Sigma^+$  (RED) system of  $^{13}\text{C}^{14}\text{N}$ . *Astrophys. Journal, Suppl. Ser.* **188**, 500–505 (2010).
157. Ram, R. S., Wallace, L. & Bernath, P. F. High resolution emission spectroscopy of the A $2$ -X  $2\Sigma^+$  (red) system of  $^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ . *J. Mol. Spectrosc.* **263**, 82–88 (2010).
158. Ram, R. S. & Bernath, P. F. Fourier transform emission spectroscopy of the A  $2\Pi$ -X  $2\Sigma^+$  (red) system of  $^{13}\text{C}^{14}\text{N}$  (II). *J. Mol. Spectrosc.* **274**, 22–27 (2012).
159. Brooke, J. S. A. *et al.* Einstein A coefficients and oscillator strengths for the A  $2\Pi$ -X $2\Sigma^+$  (red) and B  $2\Sigma^+$ -X $2\Sigma^+$  (violet) systems and rovibrational transitions in the X $2\Sigma^+$  state of CN. *Astrophys. Journal, Suppl. Ser.* **210**, (2014).
160. Pradhan, A. D., Partridge, H. & Bauschlicher, C. W. The dissociation energy of CN and C $_2$ . *J. Chem. Phys.* **101**, 3857–3861 (1994).
161. Li, P., Tan, Y. L. & Fan, W. Y. The CN and CS transient species in CH $_3$ SCN discharges. *Chem. Phys.* **302**, 171–177 (2004).
162. Hodyss, R., Howard, H. R., Johnson, P. V., Goguen, J. D. & Kanik, I. Formation of radical species in photolyzed CH $_4$ :N $_2$  ices. *Icarus* **214**, 748–753 (2011).
163. Saleck, A. H., Simon, R., Schneider, N. & Winnewisser, G. Detection of interstellar (C-12)(N-15). *Astrophys. J.* **414**, L133 (1993).
164. Saleck, A. H., Simon, R. & Winnewisser, G. Interstellar CN rotational spectra:

- (12)C(15)N. *Astrophys. J.* **436**, 176 (1994).
165. Sneden, C., Lucatello, S., Ram, R. S., Brooke, J. S. A. & Bernath, P. Line lists for the a  $2\Pi-X\ 2\Sigma^+$  (red) and B  $2\sigma^+-X\ 2\Sigma^+$  (violet) systems of CN,  $^{13}\text{C}^{14}\text{N}$ , and  $^{12}\text{C}^{15}\text{N}$ , and application to astronomical spectra. *Astrophys. Journal, Suppl. Ser.* **214**, (2014).
166. Thaddeus, P. The Short-Wavelength Spectrum of the Microwave Background. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **10**, 305–334 (1972).
167. Herzberg, G. & Johns, J. W. C. New spectra of the CH molecule. *Astrophys. J.* **158**, 399 (1969).
168. Heurlinger, T. & Hulthen, E. On the structure of the band spectrum of burning hydrocarbons. *Zeitschrift für Wiss. Phot.* **18**, 241–248 (1919).
169. Filseth, S. V., Zacharias, H., Danon, J., Wallenstein, R. & Welge, K. H. Laser excited fluorescence of CH in a low pressure flame. *Chem. Phys. Lett.* **58**, 140–144 (1978).
170. Hougen, J. T., Mucha, J. A., Jennings, D. A. & Evenson, K. M. Far infrared laser magnetic resonance spectrum of CH. *J. Mol. Spectrosc.* **72**, 463–483 (1978).
171. Suzuki, K. & Kuchitsu, K. Emission spectra of CH(A  $2\Delta$ ) from methane in an argon flowing afterglow. *Chem. Phys. Lett.* **56**, 50–53 (1978).
172. Chen, P., Pallix, J. B., Chupka, W. A. & Colson, S. D. Resonant multiphoton ionization spectrum and electronic structure of CH radical. New states and assignments above 50 000  $\text{cm}^{-1}$ . *J. Chem. Phys.* **86**, 516–520 (1986).
173. Bernath, P. F. *et al.* Spectroscopy of the CH free radical. *J. Mol. Spectrosc.* **147**, 16–26 (1991).
174. Hung, W. C., Huang, M. L., Lee, Y. C. & Lee, Y. P. Detection of CH in an oxyacetylene flame using two-color resonant four-wave mixing technique. *J. Chem. Phys.* **103**, 9941–9946 (1995).
175. Bembenek, Z., Kępa, R. & Rytel, M. Analysis of the 0-0 Band of the  $\text{C}2\Sigma^+-\text{X}2\Pi$  Band System in the  $^{12}\text{CH}$  and  $^{13}\text{CH}$  Isotopic Radicals. *J. Mol. Spectrosc.* **183**, 1–5 (1997).
176. Zachwieja, M. The A  $2\text{D} - \text{X} 2\text{P}$  Band System of the  $^{13}\text{CH}$  Radical. *J. Mol. Spectrosc.* **182**, 18–33 (1997).

177. Chen, Y., Jin, J., Pei, L., Ma, X. & Chen, C. Resonance multiphoton ionization spectroscopy of the  $D2\Pi(v = 2) \leftarrow A2\Delta$  of CH radicals. *J. Electron Spectros. Relat. Phenomena* **108**, 221–224 (2000).
178. Amano, T. The Lowest Submillimeter-Wave Transitions of CH: The Laboratory Measurement of the Rest Frequencies. *Astrophys. J.* **531**, L161–L164 (2000).
179. Davidson, S. A., Evenson, K. M. & Brown, J. M. A Measurement of the Rotational Spectrum of the CH Radical in the Far-Infrared. *Astrophys. J.* **546**, 330–337 (2001).
180. Czyzewski, A. *et al.* Investigation of kinetics of CH-radical decay by cavity ring-down spectroscopy. *Chem. Phys. Lett.* **357**, 477–482 (2002).
181. Davidson, S. A., Evenson, K. M. & Brown, J. M. The far-infrared laser magnetic resonance spectrum of the  $^{13}\text{CH}$  radical. *J. Mol. Spectrosc.* **223**, 20–30 (2004).
182. Jackson, M., Zink, L. R., McCarthy, M. C., Perez, L. & Brown, J. M. The far-infrared and microwave spectra of the CH radical in the  $v = 1$  level of the  $X2\Pi$  state. *J. Mol. Spectrosc.* **247**, 128–139 (2008).
183. Truppe, S., Hendricks, R. J., Hinds, E. A. & Tarbutt, M. R. Measurement of the lowest millimeter-wave transition frequency of the CH radical. *Astrophys. J.* **780**, 10–13 (2014).
184. Gans, B. *et al.* Synchrotron-based valence shell photoionization of CH radical. *J. Chem. Phys.* **144**, 0–6 (2016).
185. Carre, M. Analysis of two band systems of  $\text{CH}^+$ :  $1\Delta \rightarrow 1\Pi$  and  $3\Sigma \rightarrow 3\Pi$ . *Physica* **41**, 63–66 (1969).
186. Carrington, A. & Ramsay, D. A. Some New Emission Bands of the  $A\ 1\ \Pi - X\ 1\ \Sigma +$  System of  $\text{CH}^+$ . *Phys. Scr.* **25**, 272–274 (1982).
187. Carozza, J. & Anderson, R. Radiative lifetime of the  $A2\Delta$  state of CH. *J. Opt. Soc. Am.* **67**, 118 (1977).
188. Jorgensen, U. G., Larsson, M., Iwamae, A. & Yu, B. Line intensities for CH and their application to stellar atmospheres. *Astron. Astrophys.* **315**, 204–211 (1996).
189. Martin, J. M. L. Spectroscopic quality ab initio potential curves for CH, NH, OH and

- HF. A convergence study. *Chem. Phys. Lett.* **292**, 411–420 (1998).
190. Kalemios, A., Mavridis, A. & Metropoulos, A. An accurate description of the ground and excited states of CH. *J. Chem. Phys.* **111**, 9536–9548 (1999).
191. Ghosh, P. N., Deo, M. N. & Kawaguchi, K. Vibrational Transition Moment of the CH Radical Determined from the Herman-Wallis Effect. *Astrophys. J.* **525**, 539–542 (1999).
192. Metropoulos, A. & Mavridis, A. Predissociation lifetimes of the e 2Π and F 2Π states of CH. *Chem. Phys. Lett.* **331**, 89–94 (2000).
193. Heryadi, D., Mahalakshmi, S. & Yeager, D. L. The direct determination of the ionization potentials of CH and CH<sub>3</sub> using the electron propagator method with a multiconfigurational second-order perturbation theory wavefunction as the initial state (EPCASPT2). *Chem. Phys. Lett.* **351**, 92–98 (2002).
194. Reddy, R. R., Nazeer Ahammed, Y., Rama Gopal, K. & Baba Basha, D. Spectroscopic investigations on cometary molecules CO<sup>+</sup>, CH and CH<sup>+</sup>. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **85**, 105–113 (2004).
195. Vázquez, G. J., Amero, J. M., Liebermann, H. P., Buenker, R. J. & Lefebvre-Brion, H. Insight into the Rydberg states of CH. *J. Chem. Phys.* **126**, (2007).
196. Lavín, C., Velasco, A. M. & Martín, I. Oscillator strength distribution in the discrete and continuum regions of the spectrum of CH molecule (oscillator strength distribution of CH). *Astrophys. J.* **692**, 1354–1359 (2009).
197. Masseron, T. *et al.* CH in stellar atmospheres: An extensive linelist. *Astron. Astrophys.* **571**, (2014).
198. Swings, P. & Rosenfeld, L. Considerations Regarding Interstellar Molecules. *Astrophys. J.* **86**, 483 (1937).
199. Swings, P. & Nicolet, M. On the Intensity Distribution in the Bands of Cometary Spectra. *Astrophys. J.* **88**, 173 (1938).
200. Wildt, R. The Continuous Spectrum of Stellar Atmospheres Consisting Only of Atoms and Negative Ions of Hydrogen. *Astrophys. J.* **93**, 47 (1941).

201. Douglas, A. E. & Morton, J. R. An Extension of the  $\Pi-\Sigma$  System of  $\text{CH}^+$  and the Identification of the  $\lambda$  3579 Interstellar Line. *Astrophys. J.* **131**, 1 (1960).
202. Watson, J. K. G. Assignment of the  $\lambda$ 1369.13 Diffuse Interstellar Absorption Band and Three Other Far-Ultraviolet Interstellar Absorption Lines to the CH Molecule. *Astrophys. J.* **555**, 472–476 (2001).
203. Mélen, F. *et al.* A new analysis of the vibration-rotation spectrum of CH from solar spectra. *J. Mol. Spectrosc.* **134**, 305–313 (1989).
204. Zachwieja, M. New Investigations of the  $A_2\Delta-X_2\Pi$  band system in the ch radical and a new reduction of the vibration-rotation spectrum of CH from the ATMOS spectra. *Journal of Molecular Spectroscopy* **170**, 285–309 (1995).
205. Ferus, M. Time-Resolved FT Spectroscopy. (2013). Available at: <http://www.jh-inst.cas.cz/~ftirlab/brukertimeres>. (Accessed: 1st February 2015)
206. Pastorek, A. Infračervená emisní spektra plazmatu vzácných plynů ve vzbuzených Rydbergovských stavech. (Czech Technical University in Prague, 2015).
207. Brauer, G. *Handbook of preparative inorganic chemistry*. (Academic Press, 1963).
208. Guelachvili, G. & Narahari Rao, K. *Handbook of infrared standards*. (ACADEMIC PRESS INC. LTD., 1986).
209. Ionin, A. A. *et al.* Pulsed first-overtone CO laser: Effective source of IR radiation in spectral range of 2.5–4.0  $\mu\text{m}$ . *Opt. Commun.* **160**, 255–260 (1999).
210. Ionin, A. A. *et al.* Q-switched slab RF discharge CO laser. *Laser Phys. Lett.* **14**, 2–6 (2017).
211. Caledonia, G. E. & Center, R. E. Vibrational distribution functions in anharmonic oscillators. *J. Chem. Phys.* **55**, 552–561 (1971).
212. Chen, C.-C. The Carbon Monoxide Laser: A Review. (1974).
213. Pastorek, A., Civiš, S., Clark, V. H. J., Yurchenko, S. N. & Ferus, M. Time-resolved Fourier transform infrared emission spectroscopy of CO  $\Delta v = 1$  and  $\Delta v = 2$  extended bands in the ground  $X^1\Sigma^+$  state produced by formamide glow discharge. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **262**, 107521 (2021).

214. Farmer, C. B. & Norton, R. H. A high-resolution atlas of the infrared spectrum of the sun and the earth atmosphere from space. A compilation of ATMOS spectra of the region from 650 to 4800 cm<sup>-1</sup> (2.3 to 16 microns). *NASA Ref. Publ. 1224* **2**, (1989).
215. Geller, M., Sauval, A. J., Grevesse, N., Farmer, C. B. & Norton, R. H. First identification of pure rotation lines of NH in the infrared solar spectrum. *Astron. Astrophys.* **249**, 550–552 (1991).
216. Tennyson, J. *et al.* The 2020 release of the ExoMol database: Molecular line lists for exoplanet and other hot atmospheres. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **255**, (2020).
217. Bernath, P. F. MoLLIST: Molecular Line Lists, Intensities and Spectra. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **240**, (2020).
218. Costes, M., Naulin, C. & Dorthe, G. The dissociation energy of the CN radical determined from the CN internal energy release of the C + NO yielding CN + O reaction. *Astron. Astrophys.* **232**, 270–276 (1990).