

Anhang D

EXPERIMENTELLE DATEN ZU KAPITEL 5

Alle experimentellen Daten zu Kapitel 5, den spektroskopischen Untersuchungen am Cyanofulminat-Molekül (NCCNO) im Bereich zwischen 1400 bis 2500 cm^{-1} , sind auf einer beigefügten separaten *Compact Disc* unter dem File NCCNO.a.zip abgespeichert. Dieses File wurde mit dem Programm WinZIP 5.6 für Windows/NT erstellt.

Die verschiedenen Dateien sind in den Verzeichnissen FTIR/Zelle/NCCNO/ BG (Hintergrundspektren), Meas (Meßblöcke), Calib (Kalibration), Doc (Datendokumentation), Peakl (Peaklisten) und TFILE (Transmissionsfiles) abgespeichert. Bei der Benennung der Dateinamen wurde die folgende Systematik angewandt:

JET	:	Name des Spektrums,
Dateiendung 1,2,3,...	:	Nummerierung der Meßblöcke,
Suffix B	:	Hintergrundspektrum,
Suffix A,B,C,...	:	Meßserie,
Präfix T	:	Transmissionsspektrum,
Präfix Z	:	zerogefülltes Transmissionsspektrum,
Dateiendung doc	:	Dokumentationsdatei,
Dateiendung cal	:	Kalibrationsdatei,
Dateiendung pli	:	Peakliste.

Die Transmissionsspektren der Messungen die mit der 3 m-Zelle durchgeführt wurden tragen die Bezeichnung ZTJETBGS.1 (2 100 – 2 500 cm^{-1}) bzw. ZTJETBDS.1 (1 400 – 1 500 cm^{-1}), die der Messungen an den NCCNO-Molekularstrahlen die Bezeichnung ZTJETADF.1 (2 100 – 2 500 cm^{-1}) bzw. ZTJETBBS.1 (1 400 – 1 500 cm^{-1}). Die dazugehörigen kalibrierten Linienlisten tragen die Endung PLI. Die mit der Spektroskopiesoftware HILRAPSS99 erstellte Linienliste im Bereich zwischen 1400 und 1500 cm^{-1} trägt die Bezeichnung ZTJETBDH.ASC und befindet sich in dem Verzeichnis HILRAPSS/NCCNO. In der Tabelle D.1 sind die Dateien der einzelnen Meßserien an NCCNO aufgeführt. Die Tabelle D.2 beinhaltet eine Zusammenstellung der Transmissionsfiles sowie Angaben über die Kalibration dieser Spektren.

Im Verzeichnis Dissertation/NCCNO/Rek befinden sich schließlich die für jeden Subzustand erstellten Eingabefiles zur Bestimmung der Reihenentwicklungskonstanten. Die Reihenentwicklungskonstanten wurden mit dem Programm linc96 berechnet. In den Dateinamen bezeichnen die ersten sieben Ziffern die Vibrationsquantenzahlen $v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6, v_7$ und die letzte Ziffer steht für den Betrag der l_7 -Quantenzahl. Zusätzlich ist die Parität der an dem Übergang beteiligten Niveaus angegeben. Die Dateinamen der mit dem Programm HILRAPSS99 erstellten Linienlisten, die zur Anpassung von spektroskopischen oder Reihenentwicklungskonstanten ver-

Tabelle D.1 Die verschiedenen Meßblöcke der FTIR-Messungen an NCCNO.

Substanz	Meßbereich /cm ⁻¹	Scans pro Block	Zahl der Blöcke	Auflösung /cm ⁻¹	<i>P</i> /mbar	Dateiname	Messung
NCCNO+Ar	1950 – 2750	4	1	0.008	160	JETAD.5	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	4	1	0.008	160	JETAD.6	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	4	1	0.008	160	JETAD.7	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	16	1	0.008	150	JETAD.9	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	32	1	0.008	150	JETAD.10	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	4	1	0.008	150	JETAE.6	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	4	1	0.008	150	JETAE.7	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	4	1	0.008	150	JETAE.9	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	4	1	0.008	150	JETAE.10	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	4	1	0.008	150	JETAF.2	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	16	1	0.008	150	JETAF.3	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	4	1	0.008	150	JETAF.4	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	16	1	0.008	150	JETAF.5	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	4	1	0.008	150	JETAF.6	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	4	1	0.008	150	JETAF.7	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	8	1	0.008	150	JETAF.8	Jet
NCCNO+Ar	1950 – 2750	24	1	0.008	0.055	JETAF.9	Jet
NCCNO	1950 – 2750	50	7	0.003	0.055	JETBG.1-7	Zelle
NCCNO	1950 – 2750	47	1	0.003	150	JETBG.8	Zelle
NCCNO+Ar	1100 – 1800	4	2	0.008	165	JETBB.1-2	Jet
NCCNO+Ar	1100 – 1800	8	1	0.008	190	JETBB.3	Jet
NCCNO+Ar	1100 – 1800	8	1	0.008	190	JETBB.5	Jet
NCCNO+Ar	1100 – 1800	8	1	0.008	165	JETBB.6	Jet
NCCNO+Ar	1100 – 1800	4	1	0.008	165	JETBB.7	Jet
NCCNO+Ar	1100 – 1800	8	2	0.008	165	JETBB.8-9	Jet
NCCNO+Ar	1100 – 1800	8	1	0.008	165	JETBB.11	Jet
NCCNO	1100 – 1800	10	2	0.002	0.030	JETBC.2-3	Zelle
NCCNO	1100 – 1800	10	30	0.002	0.030	JETBD.1-10	Zelle

Tabelle D.2 Zusammenstellung der verschiedenen Transmissionsfiles von NCCNO.

Messung	Meßbereich /cm ⁻¹	Scans	Single-Beam- Spektren	Transmissions- file	Kalib.	Kalib.- messung	BG- File
NCCNO- Jet	1950 – 2750	160	JETAD.9-10 JETAE.6-7 JETAE.9-10 JETAF.2-8	ZTJETADF.1	CO ₂ über CO (extern)	ZTJETV11.1	JETADB.1
NCCNO- Zelle	1950 – 2750	397	JETBG.1-7 JETBG.8	ZTJETBGS.1	CO (intern)		JETBFB.1
NCCNO- Jet	1100 – 1800	60	JETBB.1-11	ZTJETBBS.1	OCS (extern)	ZTJETBES.1	JETBBB.1
NCCNO- Zelle	1100 – 1800	320	JETBC.2-3 JETBD.1-10	ZTJETBDS.1	OCS (extern)	ZTJETBES.1	JETBCB.1

wendet wurden, weisen zusätzlich ein h auf. Die Dateinamen der im ν_1 -Bandensystem erhaltenen Q-Zweige weisen sowohl die Parität des oberen als auch des unteren Subzustandes auf, zudem sind die Filenamen durch ein q gekennzeichnet.

Neben den Reihenentwicklungskonstanten wurden für das *Fermi*-Typ-Resonanzpaar $(\nu_3 + \nu_7)/-(2\nu_4 + \nu_7)$ spektroskopische Konstanten angepaßt und das Matrixelement W_F bestimmt. Diese Berechnung wurde mit dem Programm lincx22 durchgeführt. Die Ein- und Ausgabefiles befinden sich im Verzeichnis DISSERTATION/NCCNO/SK. Die Dateinamen der Eingabedateien für linc96 und lincx22 weisen die Endung .lin auf, wohingegen die Dateinamen der entsprechenden Ausgabedateien mit der Endung .lot enden.

Sämtliche experimentellen Übergangswellenzahlen $\tilde{\nu}_{\text{obs}}$ sind in den nun folgenden Tabellen zusammengestellt, wobei immer auch deren Abweichungen von den berechneten Übergangswellenzahlen $(\tilde{\nu}_{\text{obs}} - \tilde{\nu}_{\text{calc}})$ angegeben sind, wie sie sich aus den mit linc96 bestimmten Reihenentwicklungskonstanten in Tabelle 5.16 und 5.17 ergeben. Ein (J) kennzeichnet eine Linienposition, die dem Spektrum einer Molekularstrahlungsmessung entnommen wurde. Ein Asterix hinter einer Abweichung deutet an, daß der betreffende Übergang bei der Anpassung der Konstanten nicht berücksichtigt wurde.

Tabelle D.3 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge (ν_1) – (GS) von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0			2353.791 555(J)	-0.000 988
1	2353.482 726(J)	-0.001 264	2353.946 233(J)	-0.000 895
2	2353.328 907(J)	-0.001 117	2354.101 160(J)	-0.000 755
3	2353.175 476(J)	-0.000 786	2354.256 225(J)	-0.000 677
4	2353.022 017(J)	-0.000 687	2354.411 896(J)	-0.000 187
5	2352.868 891(J)	-0.000 456	2354.567 321	-0.000 133
6	2352.715 792	-0.000 393	2354.723 134	0.000 127
7	2352.563 188	-0.000 025	2354.878 920	0.000 185
8	2352.410 588	0.000 163	2355.035 453	0.000 824
9	2352.258 209	0.000 395	2355.191 709	0.001 030
10	2352.105 858	0.000 487	2355.347 882	0.001 006
11	2351.953 487	0.000 400	2355.504 581	0.001 374
12	2351.801 657	0.000 706	2355.663 472*	0.003 811
13	2351.645 124*	-0.003 828	2355.816 706	0.000 481
14	2351.501 912*	0.004 833	2355.976 012*	0.003 127
15	2351.345 792	0.000 473	2356.129 772	0.000 144
16	2351.193 635	-0.000 024	2356.286 887	0.000 448
17	2351.041 754	-0.000 330	2356.443 503	0.000 201
18	2350.890 843	0.000 262	2356.600 784	0.000 582
19	2350.739 655	0.000 520	2356.757 677	0.000 552
20	2350.588 274	0.000 543	2356.914 515	0.000 462
21	2350.436 892	0.000 539	2357.071 380	0.000 410
22	2350.285 455	0.000 470	2357.228 135	0.000 274
23	2350.133 962	0.000 350	2357.384 612	-0.000 097
24	2349.982 719	0.000 502	2357.541 118	-0.000 380
25	2349.830 700	-0.000 084	2357.698 066	-0.000 146
26	2349.679 401	0.000 103	2357.854 793	-0.000 041
27	2349.527 770	0.000 027	2358.011 105	-0.000 245
28	2349.376 001	-0.000 102	2358.167 499	-0.000 245
29	2349.224 176	-0.000 186	2358.323 755	-0.000 246
30			2358.479 652	-0.000 454
31	2348.920 166	-0.000 353	2358.635 575	-0.000 470
32	2348.768 313	-0.000 074	2358.791 305	-0.000 499
33	2348.615 464	-0.000 633	2358.946 897	-0.000 473
34	2348.463 113	-0.000 521	2359.102 322	-0.000 409
35	2348.310 180	-0.000 806	2359.257 470	-0.000 403
36	2348.158 355	0.000 215	2359.412 425	-0.000 360
37	2348.004 675	-0.000 409	2359.567 490	0.000 034
38	2347.851 437	-0.000 370	2359.721 641	-0.000 234
39	2347.697 978	-0.000 318	2359.875 903	-0.000 127
40	2347.544 326	-0.000 216	2360.029 833	-0.000 079
41	2347.390 368	-0.000 166	2360.183 541	0.000 030
42	2347.235 968	-0.000 293	2360.336 945	0.000 129
43	2347.081 789	0.000 074	2360.490 044	0.000 226
44	2346.927 139	0.000 255	2360.642 727	0.000 221
45	2346.771 880	0.000 120	2360.795 189	0.000 320
46	2346.616 731	0.000 399	2360.947 291	0.000 395
47	2346.460 974	0.000 384	2361.099 005	0.000 429
48	2346.304 939	0.000 416	2361.250 359	0.000 463
49	2346.148 600	0.000 481	2361.401 270	0.000 429
50	2345.991 845	0.000 480	2361.551 904	0.000 508
51	2345.834 177	-0.000 071	2361.704 228*	0.002 684
52	2345.677 173	0.000 420	2361.850 957	-0.000 307
53	2345.521 554*	0.002 693	2362.000 372	-0.000 162

Fortsetzung Tabelle D.3

54	2345.360 146	-0.000 408	2362.149 317	-0.000 012
55	2345.201 508	-0.000 301	2362.297 818	0.000 198
56	2345.042 732	0.000 131	2362.446 070	0.000 697
57	2344.881 851	-0.001 050	2362.594 904*	0.002 352
58	2344.723 434	0.000 757	2362.735 374*	-0.003 740
59			2362.880 137*	-0.004 873
60	2344.396 742*	-0.003 759	2363.028 444	-0.001 741
61	2344.233 590*	-0.004 869		
62	2344.074 038	-0.001 671		
63	2343.911 190	-0.001 002		
64	2343.748 675	0.000 839		
65	2343.584 360	0.001 796		
66	2343.419 574*	0.003 286		

Tabelle D.4 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_1 + \nu_7)^{1e} - (\nu_7)^{1e}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1			2345.593 118	0.000 340
2	2344.973 605	-0.000 280	2345.747 463	0.000 801
3	2344.817 958	-0.000 366	2345.901 005	0.000 795
4	2344.661 868	-0.000 559	2346.054 215	0.000 794
5	2344.505 252	-0.000 944	2346.207 092	0.000 798
6	2344.349 023	-0.000 605	2346.359 665	0.000 835
7	2344.192 546	-0.000 178	2346.512 210	0.001 184
8	2344.035 209	-0.000 275		
9	2343.720 260	0.000 268		
10	2343.562 979	0.001 240		
11	2343.405 283	0.002 130		
12	2343.248 030*	0.003 810	2347.265 435	-0.001 450
13	2342.765 109*	-0.000 250	2347.415 986	-0.001 038
14			2347.566 122	-0.000 693
15			2347.715 676	-0.000 581
16	2342.605 059	0.000 006	2347.864 897	-0.000 452
17	2342.444 731	0.000 330	2348.013 786	-0.000 302
18	2342.283 795	0.000 395		
19	2342.121 806	-0.000 245		
20	2341.960 066	-0.000 284	2348.458 405	.000 233
21	2341.798 575	0.000 279	2348.605 355	-0.000 128
22	2341.635 894	0.000 005	2348.752 389	-0.000 043
23	2341.472 908	-0.000 217	2348.898 952	-0.000 064
24	2341.309 645	-0.000 358	2349.045 210	-0.000 025
25	2341.146 659	0.000 137	2349.191 191	0.000 106
26	2340.982 759	0.000 081	2349.336 674	0.000 109
27	2340.818 526	0.000 055	2349.481 741	0.000 069
28	2340.654 156	0.000 257	2349.626 088	-0.000 316
29	2340.488 954	-0.000 005	2349.771 045	0.000 287
30	2340.323 891	0.000 242		
31	2339.825 184	-0.000 298		
32			2350.201 234	-0.000 302
33			2350.344 058	-0.000 300
34	2339.658 376	-0.000 298	2350.486 771	-0.000 021
35	2339.491 263	-0.000 223	2350.628 875	0.000 040
36	2339.324 151	0.000 235	2350.770 342	-0.000 143

Fortsetzung Tabelle D.4

37	2339.155 847	-0.000 115	2350.911 864	0.000 125
38	2338.987 516	-0.000 107	2351.052 666	0.000 070
39	2338.818 935	0.000 039	2351.193 635	0.000 582
40	2338.649 635	-0.000 145	2351.333 135	0.000 026
41	2338.480 445	0.000 173	2351.472 996	0.000 235
42	2338.310 563	0.000 191	2351.612 053	0.000 046
43	2338.140 127	0.000 050	2351.751 055	0.000 208
44	2337.968 805	-0.000 581	2351.889 365	0.000 088
45	2337.798 673	0.000 375	2352.027 508	0.000 212
46	2337.626 935	0.000 124	2352.164 987	0.000 084
47	2337.454 755	-0.000 168	2352.302 245	0.000 148
48	2337.282 657	0.000 023	2352.438 892	0.000 016
49	2337.110 033	0.000 090	2352.575 291	0.000 052
50	2336.937 27	0.000 422	2352.711 496	0.000 311
51	2336.763 345	-0.000 005	2352.846 732	0.000 019
52	2336.589 696	0.000 249	2352.981 884	0.000 060
53	2336.414 94	-0.000 200	2353.116 372	-0.000 143
54	2336.240 515	0.000 088	2353.251 081	0.000 294
55	2336.065 648	0.000 339	2353.384 212	-0.000 428
56	2335.713 615	-0.000 245	2353.517 730	-0.000 344
57			2353.650 750	-0.000 340
58	2335.537 224	-0.000 305	2353.783 216	-0.000 472
59	2335.360 252	-0.000 543	2353.915 543	-0.000 326
60	2335.183 391	-0.000 268	2354.047 483	-0.000 150
61	2335.005 976	-0.000 147	2354.179 395	0.000 411
62	2334.827 702	-0.000 486	2354.311 612	0.0016 91

Tabelle D.5 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_1 + \nu_7)^{\text{lf}} - (\nu_7)^{\text{lf}}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{\text{obs}}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig $(\tilde{\nu}_{\text{obs}} - \tilde{\nu}_{\text{calc}})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{\text{obs}}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig $(\tilde{\nu}_{\text{obs}} - \tilde{\nu}_{\text{calc}})/\text{cm}^{-1}$
0				
1			2345.593 118	-0.000 193
2	2344.973 605	0.000 452	2345.747 463	-0.000 184
3	2344.817 958	0.000 547	2345.901 005	-0.000 695
4	2344.661 868	0.000 480	2346.054 215	-0.001 255
5	2344.505 252	0.000 169	2346.207 092*	-0.001 863
6	2344.349 023	0.000 527	2346.359 665*	-0.002 490
7	2344.192 546	0.000 919	2346.512 210*	-0.002 859
8	2344.035 209	0.000 735		
9				
10	2343.720 260	0.000 946		
11	2343.562 979	0.001 674		
12	2343.405 283*	0.002 275		
13	2343.248 030*	0.003 609		
14			2347.575 981	-0.001 330
15			2347.727 197	-0.000 675
16			2347.877 471	-0.000 659
17			2348.027 219	-0.000 863
18			2348.177 409	-0.000 316
19			2348.326 382	-0.000 676
20			2348.475 576	-0.000 501
21	2341.964 940	-0.000 156	2348.624 631	-0.000 148
22	2341.803 616	-0.000 204		
23	2341.642 015	-0.000 219		

Fortsetzung Tabelle D.5

24	2341.480 053	-0.000 282	2349.069 969	0.001 010
25	2341.318 230	0.000 110		
26	2341.155 577	-0.000 012	2349.363 815	0.000 370
27	2340.992 729	-0.000 007	2349.509 907	-0.000 282
28	2340.829 882	0.000 321		
29	2340.666 148	0.000 088	2349.802 451	-0.000 212
30				
31	2340.337 849	-0.000 222	2350.093 333	-0.000 436
32			2350.238 650	-0.000 151
33	2340.008 498	-0.000 251	2350.383 357	-0.000 126
34	2339.843 380	-0.000 201	2350.527 732	-0.000 079
35	2339.677 763	-0.000 310	2350.671 775	-0.000 009
36	2339.512 035	-0.000 186	2350.815 457	0.000 058
37	2339.345 947	-0.000 078	2350.958 780	0.000 126
38	2339.179 499	0.000 018	2351.101 687	0.000 140
39	2339.012 303	-0.000 285	2351.244 123	0.000 047
40	2338.845 440	0.000 095	2351.386 476	0.000 237
41	2338.677 967	0.000 218	2351.528 331	0.000 296
42			2351.669 770	0.000 307
43	2338.510 051	0.000 253	2351.810 849	0.000 328
44	2338.341 748	0.000 255	2351.951 901	0.000 692
45	2338.173 140	0.000 308	2352.091 817	0.000 291
46	2338.003 950	0.000 136	2352.231 705	0.000 232
47	2337.834 788	0.000 349	2352.371 316	0.000 267
48	2337.494 719	0.000 103	2352.510 374	0.000 120
49	2337.324 476	0.000 307	2352.649 265	0.000 174
50	2337.153 708	0.000 342	2352.787 519	-0.000 040
51	2336.982 580	0.000 372	2352.925 580	-0.000 081
52	2336.810 703	0.000 007	2353.063 169	-0.000 230
53	2336.638 495	-0.000 338	2353.200 482	-0.000 292
54	2336.466 425	-0.000 196	2353.337 684	-0.000 107
55	2336.293 745	-0.000 318	2353.473 750	-0.000 703
56	2336.120 955	-0.000 206		
57	2335.947 307	-0.000 613	2353.745 661	-0.001 067
58			2353.881 617	-0.000 733
59	2335.599 732	-0.000 706	2354.017 628	-0.000 009
60	2335.425 280	-0.000 927	2354.154 303	0.001 709
61	2335.251 659	0.000 002	2354.294 136*	0.006 907
62	2335.078 426	0.001 631		

Tabelle D.6 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_1 + \nu_7)^{1f} - (GS)$ von NC-CNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	Q-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0		
1		
2		
3		
4	2425.737 78	-0.000 025
5	2425.741 62	0.000 183
6	2425.745 84	0.000 044
7	2425.751 07	0.000 198
8	2425.757 58	0.000 905
9	2425.763 90	0.000 697
10	2425.771 68*	0.001 240

Fortsetzung Tabelle D.6

11	2425.779 52*	0.001 121
12	2425.797 02*	0.009 954
13	2425.797 02	0.000 571
14	2425.806 34	-0.000 205
15	2425.815 77	-0.001 570
16	2425.827 54	-0.001 302
17	2425.840 59	-0.000 462
18	2425.853 46	-0.000 486
19	2425.867 12	-0.000 429
20	2425.881 60	-0.000 232
21	2425.896 14	-0.000 669
22	2425.912 07	-0.000 406
23	2425.928 38	-0.000 436
24	2425.945 58	-0.000 257
25	2425.963 33	-0.000 200
26	2425.981 97	0.000 075
27	2426.001 02	0.000 098
28	2426.020 47	-0.000 154
29	2426.041 38	0.000 403
30	2426.061 34	-0.000 637
31	2426.080 34*	-0.003 298
32	2426.105 55	-0.000 402
33	2426.128 45	-0.000 45
34	2426.152 52	0.000 023
35	2426.176 75	0.000 026
36	2426.201 48	-0.000 107
37	2426.227 35	0.000 264
38	2426.253 08	-0.000 132
39	2426.280 33	0.000 370
40	2426.307 58	0.000 249
41	2426.335 36	0.000 034
42	2426.364 27	0.000 336
43	2426.393 96	0.000 797
44	2426.423 54	0.000 532
45	2426.453 40	-0.000 070
46	2426.485 02	0.000 487
47	2426.516 49	0.000 266
48	2426.548 78	0.000 263
49	2426.581 79	0.000 368
50	2426.615 22	0.000 275
51	2426.648 98	-0.000 102
52	2426.684 21	0.000 375
53	2426.718 83	-0.000 377
54	2426.754 78	-0.000 421
55	2426.791 39	-0.000 425
56	2426.828 22	-0.000 836
57	2426.864 50*	-0.002 435
58	2426.903 75*	-0.001 709
59	2426.943 32*	-0.001 294
60	2426.983 32*	-0.001 116
61	2427.023 74*	-0.001 160
62	2427.064 57*	-0.001 471
63	2427.107 94	0.000 084
64	2427.150 40	0.000 037
65	2427.194 41	0.000 845

Tabelle D.7 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_1 + 2\nu_7)^{0e} - (2\nu_7)^{0e}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>P-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>R-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7	2337.979 301	0.000 535		
8	2337.820 497	-0.000 110		
9				
10	2337.503 720	0.000 459		
11	2337.344 306	0.000 233		
12	2337.184 727	0.000 187		
13	2337.024 759	0.000 098		
14	2336.864 598	0.000 162	2341.372 208	0.000 060
15	2336.704 243	0.000 380	2341.522 621	0.000 165
16	2336.542 947	0.000 005	2341.672 452	0.000 036
17	2336.381 816	0.000 146	2341.821 701	-0.000 326
18	2336.220 326	0.000 279	2341.971 144	-0.000 144
19	2336.057 672	-0.000 399		
20	2335.896 043	0.000 302	2342.268 590	-0.000 161
21	2335.733 472	0.000 417	2342.416 842	-0.000 110
22	2335.569 849	-0.000 162	2342.564 790	-0.000 006
23	2335.406 531	-0.000 078	2342.712 156	-0.000 126
24	2335.243 129	0.000 284	2342.859 466	0.000 058
25			2343.006 251	0.000 078
26	2334.914 111	-0.000 116	2343.152 758	0.000 183
27	2334.749 214	-0.000 155	2343.298 656	0.000 045
28	2334.584 427	0.000 284	2343.444 222	-0.000 059
29	2334.418 450	-0.000 096	2343.589 428	-0.000 153
30	2334.252 529	-0.000 047	2343.734 329	-0.000 181
31	2334.086 164	-0.000 067	2343.877 956	-0.001 110
32	2333.919 688	0.000 178	2344.023 162	-0.000 084
33	2333.751 468	-0.000 941	2344.167 038	-0.000 011
34	2333.584 604	-0.000 323	2344.310 582	0.000 109
35	2333.417 021	-0.000 041	2344.453 379	-0.000 136
36	2333.248 911	0.000 100	2344.596 230	0.000 057
37	2333.080 109	-0.000 063		
38	2332.911 279	0.000 135		
39	2332.741 923	0.000 198	2345.021 130	-0.000 697
40	2332.572 097	0.000 185	2345.162 597	-0.000 335
41	2332.400 885	-0.000 819	2345.303 537	-0.000 106
42	2332.230 809	-0.000 290	2345.443 813	-0.000 147
43	2332.059 958	-0.000 137	2345.583 895	0.000 014
44	2331.888 857	0.000 165	2345.723 313	-0.000 091
45	2331.715 734	-0.001 155	2345.862 592	0.000 063
46	2331.544 523	-0.000 160	2346.001 345	0.000 090
47	2331.371 954	-0.000 120	2346.139 682	0.000 102
48	2331.198 998	-0.000 065	2346.277 632	0.000 127
49			2346.415 194	0.000 166
50	2330.852 088	0.000 258	2346.552 589	0.000 437
51			2346.689 542	0.000 668
52	2330.503 074	0.000 089		
53			2346.961 259	0.000 136

Fortsetzung Tabelle D.7				
54	2330.152 121	-0.000 414		
55	2329.977 336	0.000 623		
56	2329.800 613	0.000 119		
57	2329.624 278	0.000 395	2347.500 955	0.000 082
58	2329.447 085	0.000 204	2347.635 027	0.000 192
59	2329.269 586	0.000 093	2347.768 684	0.000 269
60	2329.091 811	0.000 089	2347.902 119	0.000 504
61	2328.914 119	0.000 545	2348.034 779	0.000 338
62	2328.734 903	-0.000 150	2348.167 190	0.000 293
63	2328.556 574	0.000 409		
64			2348.430 765	0.000 041
65	2328.198 143	0.000 832	2348.562 428	0.000 321
66			2348.692 983	-0.000 164
67	2327.837 275	0.000 206	2348.823 787	-0.000 063
68			2348.953 373	-0.000 853
69	2327.475 715	0.000 213	2349.083 263	-0.001 020
70	2327.293 481	-0.000 763		
71	2327.112 604	-0.000 078	2349.343 653	0.000 176
72	2326.930 729	-0.000 097		
73	2326.747 969	-0.000 719	2349.601 052	-0.000 461
74	2326.566 012	-0.000 267	2349.729 557	-0.000 567
75	2326.383 418	-0.000 192	2349.858 201	-0.000 279
76				
77	2326.017 841	0.000 297		
78	2325.834 832	0.000 659		
79	2325.651 434	0.000 840		
80			2350.501 339*	0.004 460

Tabelle D.8 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_1 + 2\nu_7)^{0e} - (\nu_7)^{1f}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	$\frac{\text{Q-Zweig}}{(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}}$
0		
1		
2		
3	2424.749 562	0.000 346
4		
5		
6	2424.753 135	0.000 035
7		
8	2424.756 956	-0.000 041
9		
10		
11		
12	2424.767 398	-0.000 578
13	2424.771 275	-0.000 120
14	2424.774 377	-0.000 711
15	2424.777 894	-0.001 163
16	2424.784 375	0.001 070
17	2424.788 113	0.000 278
18	2424.792 240	-0.000 409
19	2424.798 471	0.000 720
20		
21	2424.809 494	0.000 663
22	2424.814 701	-0.000 115

Fortsetzung Tabelle D.8

23	2424.821 985	0.000 882
24	2424.828 576	0.000 881
25	2424.834 835	0.000 237
26	2424.841 953	0.000 139
27	2424.849 569	0.000 220
28	2424.857 379	0.000 171
29	2424.864 608	-0.000 786
30	2424.874 107	0.000 194
31	2424.882 526	-0.000 245
32	2424.891 361	-0.000 611
33	2424.901 636	0.000 114
34	2424.910 803	-0.000 623
35	2424.921 493	-0.000 198
36	2424.932 350	0.000 028
37	2424.943 622	0.000 296
38	2424.954 838	0.000 130
39	2424.965 806	-0.000 670
40	2424.978 850	0.000 214
41	2424.990 177	-0.001 017
42	2425.003 277	-0.000 881
43	2425.016 959	-0.000 576
44	2425.031 139	-0.000 194
45	2425.045 402	-0.000 156
46	2425.060 440	0.000 222
47		
48	2425.091 542	0.000 667
49	2425.106 829	-0.000 060
50	2425.123 751	0.000 381
51	2425.140 673	0.000 346
52	2425.158 370	0.000 602
53	2425.175 486	-0.000 217
54	2425.194 208	0.000 069
55	2425.213 428	0.000 340
56	2425.233 009	0.000 453
57	2425.252 977	0.000 422
58	2425.273 111	0.000 018
59	2425.294 298	0.000 117
60	2425.315 845	0.000 018
61	2425.337 364	-0.000 679
62	2425.360 850	0.000 012
63	2425.384 723	0.000 500
64	2425.408 430	0.000 222
65		
66	2425.457 063	-0.000 958

Tabelle D.9 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_1 + 2\nu_7)^{2e} - (2\nu_7)^{2e}$ von NCCNO.

J''	P-Zweig		R-Zweig	
	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4				
5			2339.091 484	-0.000 391
6			2339.245 109	-0.000 461
7			2339.398 623	-0.000 333
8	2336.907 110	-0.000 900	2339.552 110	0.000 077
9	2336.749 414	-0.000 326	2339.705 042	0.000 242
10			2339.857 089	-0.000 167
11	2336.432 692	0.000 399		
12	2336.273 140	0.000 024		
13	2336.113 921	0.000 283	2340.312 453	-0.000 301
14	2335.954 203	0.000 346	2340.463 973	0.000 011
15	2335.793 986	0.000 211	2340.615 050	0.000 195
16	2335.633 687	0.000 295	2340.766 183	0.000 748
17	2335.473 055	0.000 347	2340.916 457	0.000 757
18	2335.311 786	0.000 063		
19	2335.150 711	0.000 273	2341.215 731	0.000 446
20	2334.988 361	-0.000 492	2341.364 564	-0.000 040
21			2341.513 924	0.000 317
22	2334.664 633	-0.000 152	2341.662 454	0.000 160
23	2334.502 339	0.000 036	2341.811 094	0.000 429
24	2334.339 353	-0.000 171		
25	2334.176 062	-0.000 386	2342.106 490	0.000 030
26			2342.253 745	-0.000 140
27	2333.847 902	-0.001 506	2342.401 056	0.000 062
28	2333.684 334	-0.001 112	2342.548 145	0.000 355
29	2333.520 102	-0.001 090	2342.694 320	0.000 048
30	2333.355 870	-0.000 777	2342.841 077	0.000 636
31	2333.190 557	-0.001 255	2342.987 557	0.001 257
32	2333.025 910	-0.000 778	2343.132 347	0.000 499
33			2343.278 051	0.000 963
34	2332.696 005	0.000 420		
35	2332.530 609	0.001 000		
36			2343.707 354*	-0.003 621
37	2332.198 489	0.001 670	2343.851 369*	-0.003 631
38	2332.032 179	0.002 168	2343.994 858*	-0.003 870
39	2331.866 341*	0.003 409	2344.136 878*	-0.005 283
40			2344.281 142*	-0.004 159
41			2344.423 246*	-0.004 907
42			2344.565 073*	-0.005 647
43			2344.710 750	-0.002 255
44			2344.849 536*	-0.005 477
45			2344.996 481	-0.000 267
46	2330.684 020	-0.002 024		
47	2330.516 977	0.000 061		
48	2330.343 910*	-0.003 641	2345.418 417	-0.001 942
49			2345.560 410	-0.000 638
50	2330.006 887	-0.001 243	2345.701 323	-0.000 167
51	2329.837 670	-0.000 414	2345.841 599	-0.000 090

Fortsetzung Tabelle D.9

52	2329.667 483	-0.000 338	2345.982 872	0.001 221
53	2329.497 878	0.000 530	2346.122 373	0.000 989
54	2329.327 497	0.000 827	2346.260 765	-0.000 129
55	2329.156 950	0.001 157	2346.400 875	0.000 688
56	2328.985 323	0.000 598	2346.538 714	-0.000 558
57	2328.814 361	0.000 890	2346.678 048	-0.000 107
58	2328.642 014	-0.000 025	2346.816 524	-0.000 321
59	2328.471 135	0.000 698	2346.955 111	-0.000 238
60	2328.298 649	-0.000 021		
61	2328.125 721	-0.001 028		
62	2327.954 897	0.000 217		
63	2327.782 799	0.000 327	2347.507 131	-0.000 564
64	2327.611 781	0.001 646	2347.644 582	-0.000 829
65	2327.437 634	-0.000 044	2347.782 005	-0.000 996
66	2327.264 373	-0.000 737	2347.920 509	0.000 034
67	2327.092 525	0.000 082	2348.058 016	0.000 171
68	2326.920 538	0.000 852		

Tabelle D.10 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_1 + 2\nu_7)^{2f} - (2\nu_7)^{2f}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>P-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>R-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4				
5			2339.091 484	-0.000 884
6			2339.245 109	-0.000 944
7			2339.398 623	-0.000 805
8	2336.907 110	-0.001 348	2339.552 110	-0.000 383
9	2336.749 414	-0.000 746	2339.705 042	-0.000 204
10			2339.857 089	-0.000 599
11	2336.432 692	0.000 050		
12	2336.273 140	-0.000 280		
13	2336.113 921	0.000 032	2340.312 453	-0.000 683
14	2335.954 203	0.000 154	2340.463 973	-0.000 350
15	2335.793 986	0.000 087	2340.615 050	-0.000 145
16	2335.633 687	0.000 249	2340.766 183	0.000 434
17	2335.473 055	0.000 389	2340.916 457	0.000 470
18	2335.311 786	0.000 203		
19	2335.150 711	0.000 524	2341.215 731	0.000 226
20	2334.988 361	-0.000 118	2341.364 564	-0.000 221
21			2341.513 924	0.000 181
22	2334.664 633	0.000 511	2341.662 454	0.000 074
23	2334.502 339	0.000 867	2341.811 094	0.000 401
24	2334.339 353	0.000 846		
25	2334.176 062	0.000 836	2342.106 490	0.000 141
26			2342.253 745	0.000 055
27	2333.847 902	0.000 186	2342.401 056	0.000 351
28	2333.684 334	0.000 849	2342.548 145	0.000 751
29	2333.520 102	0.001 165	2342.694 320	0.000 564
30	2333.355 870	0.001 798	2342.841 077	0.001 286
31	2333.190 557	0.001 668	2342.987 557*	0.002 058
32	2333.025 910	0.002 522	2343.132 347	0.001 468

Fortsetzung Tabelle D.10

33			2343.272 097	-0.003 834
34	2332.686 007*	-0.005 425		
35	2332.520 861*	-0.004 116		
36	2332.355 382*	-0.002 823	2343.707 354	-0.001 769
37			2343.851 369	-0.001 497
38	2332.022 015	-0.001 697	2343.994 858	-0.001 425
39	2331.854 487	-0.001 505	2344.136 878*	-0.002 498
40	2331.686 627	-0.001 331	2344.281 142	-0.001 002
41	2331.517 215*	-0.002 396	2344.423 246	-0.001 344
42	2331.349 244	-0.001 708	2344.565 073	-0.001 642
43	2331.181 550	-0.000 433		
44	2331.012 526	-0.000 179	2344.849 530	-0.000 480
45			2344.990 748	-0.000 436
46			2345.131 716	-0.000 329
47			2345.272 796	0.000 198
48			2345.413 072	0.000 228
49			2345.552 821	0.000 032
50			2345.694 150	0.001 716
51				
52			2345.971 462	0.000 613
53	2329.475 721	-0.000 055	2346.109 273	-0.000 355
54	2329.304 316	0.000 736	2346.248 053	-0.000 075
55	2329.131 332	0.000 217	2346.386 003	-0.000 353
56	2328.958 847	0.000 459	2346.525 033	0.000 715
57	2328.785 336	-0.000 069	2346.662 899	0.000 879
58	2328.613 211	0.001 038	2346.799 492	0.000 020
59				
60			2347.073 480	-0.000 173
61	2328.089 800	-0.001 256	2347.210 710	0.000 310
62	2327.917 065	0.000 160	2347.347 385	0.000 454
63	2327.743 167	0.000 621	2347.483 313	0.000 056
64	2327.569 075	0.001 086	2347.617 939	-0.001 448
65	2327.394 540	0.001 294	2347.754 366	-0.000 969
66			2347.890 183	-0.000 928

Tabelle D.11 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_1 + 2\nu_7)^{2e} - (\nu_7)^{1f}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	$\frac{\text{Q-Zweig}}{(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}}$
0		
1		
2		
3	2422.011 784	-0.000 227
4		
5		
6		
7	2422.019 760	0.000 053
10		
11	2422.032 389	-0.000 520
12	2422.037 651	0.000 596
13		
14	2422.045 489	-0.000 852
15	2422.052 274	0.000 799

Fortsetzung Tabelle D.11		
16	2422.057 370	0.000 437
17		
18	2422.068 947	0.000 147
19	2422.076 009	0.000 808
20		
21	2422.087 585	-0.001 334
22		
23	2422.103 732	-0.000 091
24	2422.112 511	0.000 805
25	2422.119 186	-0.000 684
26		
27		
28	2422.145 025	-0.000 957
29	2422.155 854	0.000 649
30	2422.164 883	0.000 207
31		
32		
33		
34		
35	2422.215 897	0.000 398

Tabelle D.12 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_1 + 2\nu_7)^{2f} - (\nu_7)^{1e}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	Q-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0		
1		
2	2422.011 784	-0.000 077
3		
4		
5		
6		
7	2422.027 902	-0.000 114
10	2422.045 489	0.000 062
11	2422.052 274	-0.000 236
12		
13	2422.068 947	0.000 362
14		
15	2422.087 585	0.000 393
16	2422.097 445	0.000 006
17		
18	2422.119 186	-0.000 624
19	2422.131 787	-0.000 142
20	2422.145 025	0.000 360
21		
22		
23	2422.186 873	0.000 323
24	2422.201 966	0.000 240
25		
26	2422.233 262	-0.000 615
27	2422.250 627	-0.000 218
28		
29		
30	2422.305 546	0.000 279

Tabelle D.13 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge (ν_2) – (GS) von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1			2192.769 319(J)	0.000 184
2	2192.152 943(J)	-0.000 351	2192.922 246(J)	0.000 216
3	2191.998 453(J)	0.000 184	2193.074 611(J)	0.000 114
4	2191.842 612(J)	-0.000 207	2193.226 203	-0.000 333
5	2191.686 974	0.000 032	2193.378 748	0.000 603
6	2191.531 591	0.000 954	2193.529 769	0.000 447
7	2191.374 130	0.000 226	2193.679 586	-0.000 481
8	2191.217 057	0.000 317	2193.830 539	0.000 162
9	2191.059 028	-0.000 118	2193.981 173	0.000 922
10	2190.901 013	-0.000 106	2194.130 214	0.000 526
11	2190.742 375	-0.000 283	2194.278 453	-0.000 233
12	2190.582 976	-0.000 787	2194.427 037	-0.000 206
13	2190.424 047	-0.000 383	2194.575 276	-0.000 083
14	2190.264 108	-0.000 553	2194.722 711	-0.000 323
15	2190.104 168	-0.000 285	2194.870 091	-0.000 177
16	2189.943 564	-0.000 244	2195.017 027	-0.000 033
17	2189.782 433	-0.000 291	2195.162 981	-0.000 432
18	2189.621 053	-0.000 150	2195.309 073	-0.000 256
19	2189.459 147	-0.000 100	2195.454 653	-0.000 157
20	2189.296 840	-0.000 017	2195.599 762	-0.000 100
21	2189.133 937	-0.000 101	2195.744 690	0.000 201
22	2188.970 439	-0.000 355	2195.888 830	0.000 130
23	2188.806 954	-0.000 177	2196.032 374	-0.000 127
24	2188.643 206	0.000 151	2196.175 876	-0.000 028
25	2188.478 877	0.000 301	2196.319 420	0.000 499
26	2188.313 592	-0.000 112	2196.461 815	0.000 249
27	2188.148 709	0.000 257	2196.604 210	0.000 355
28	2187.983 106	0.000 272	2196.746 092	0.000 283
29	2187.817 309	0.000 442	2196.887 781	0.000 333
30	2187.650 875	0.000 305	2197.029 109	0.000 312
31	2187.484 648	0.000 682	2197.170 091	0.000 207
32	2187.317 328	0.000 249	2197.310 783	0.000 043
33	2187.149 384	-0.000 552	2197.451 294	-0.000 106
34	2186.982 576	0.000 005	2197.591 501	-0.000 402
35	2186.815 048	0.000 031	2197.731 819	-0.000 471
36	2186.646 856	-0.000 456	2197.871 942	-0.000 667
37	2186.479 175	-0.000 326	2198.012 744	-0.000 167
38	2186.310 802	-0.000 828	2198.152 799	-0.000 453
39	2186.143 634	-0.000 117	2198.295 664*	0.001 969
40	2185.976 356	0.000 437	2198.439 915*	0.005 610
41	2185.809 700	0.001 502	2198.586 256*	0.011 101
42	2185.645 814*	0.005 161		
43	2185.479 104*	0.005 746		

Tabelle D.14 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_2 + \nu_7)^{1e} - (\nu_7)^{1e}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
20				
21				
22				
23				
24				
25				
26				
27				
28			2197.199 601	0.000 720
29			2197.340 458	-0.000 258
30			2197.479 903*	-0.002 183
31			2197.623 932	0.000 944
32	2187.722 037*	-0.003 283	2197.762 384	-0.001 036
33	2187.552 183*	-0.004 391	2197.904 041	0.000 659
34	2187.386 843	-0.000 524	2198.045 993*	0.003 122
35	2187.218 650	0.000 952	2198.180 716	-0.001 170
36	2187.050 416*	0.002 851	2198.320 078	-0.000 346
37	2186.875 853	-0.001 113	2198.458 512	0.000 026
38	2186.704 877	-0.001 025	2198.596 877	0.000 807
39	2186.534 413	0.000 043		
40	2186.362 703	0.000 333	2198.870 228	0.000 428
41	2186.189 733	-0.000 168	2199.006 004	0.000 059
42	2186.017 524	0.000 561	2199.141 696	0.000 086
43	2185.843 696	0.000 140		
44	2185.669 784	0.000 104	2199.411 572	0.000 072
45	2185.495 207	-0.000 128	2199.545 700	-0.000 026
46	2185.320 119	-0.000 402	2199.679 550	0.000 077
47	2185.145 071	-0.000 169	2199.812 750	0.000 006
48	2184.969 581	0.000 088	2199.945 438	-0.000 102
49	2184.794 021	0.000 740	2200.078 292	0.000 429
50			2200.209 331	-0.000 384
51			2200.341 160	0.000 060
52	2184.262 149	0.000 269	2200.471 660	-0.000 360
53	2184.083 640	-0.000 194		
54	2183.905 366	0.000 030		
55	2183.726 566	0.000 174	2200.861 026	-0.001 010
56	2183.547 074	0.000 068	2200.990 654	-0.000 489
57	2183.367 388	0.000 205	2201.119 450	-0.000 360
58	2183.187 438	0.000 510	2201.247 111	-0.000 933
59	2183.006 450	0.000 201	2201.375 436	-0.000 415
60	2182.825 795	0.000 644	2201.503 776	0.000 535
61	2182.643 851	0.000 209	2201.630 329	0.000 109
62	2182.461 922	0.000 192	2201.757 090	0.000 291
63	2182.279 937	0.000 513	2201.883 269	0.000 282
64	2182.096 512	-0.000 221		
65	2181.913 848	0.000 180	2202.134 215	-0.000 020
66	2181.730 202	-0.000 038	2202.258 746	-0.000 573
67	2181.546 292	-0.000 167	2202.383 956	-0.000 103
68	2181.361 662	-0.000 677	2202.509 193	0.000 722
69	2181.177 434	-0.000 459		
70	2180.993 538	0.000 403		

Tabelle D.15 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_2 + \nu_7)^{1f} - (\nu_7)^{1f}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
20				
21				
22				
23				
24				
25				
26				
27				
28				
29	2188.217 559*	-0.002 779		
30	2188.051 942	-0.000 552		
31	2187.885 865*	0.001 675		
32			2197.772 073	0.000 356
33	2187.545 107	-0.001 085	2197.912 225	0.000 480
34	2187.376 720	0.000 223	2198.052 515	0.001 219
35	2187.206 838	0.000 503	2198.191 434	0.001 065
36	2187.036 457	0.000 750	2198.328 345	-0.000 618
37	2186.866 229*	0.001 619	2198.466 544	-0.000 533
38	2186.692 193	-0.000 852	2198.604 659	-0.000 051
39	2186.520 455	-0.000 556	2198.742 124	0.000 261
40	2186.348 551	0.000 043	2198.878 302	-0.000 233
41	2186.175 553	0.000 018	2199.014 520	-0.000 207
42	2186.001 849	-0.000 245	2199.149 894	-0.000 546
43	2185.828 339	0.000 154	2199.285 628	-0.000 046
44	2185.653 582	-0.000 227	2199.420 975	0.000 544
45	2185.479 103	0.000 136	2199.554 161	-0.000 552
46	2185.303 598	-0.000 063	2199.688 385	-0.000 136
47	2185.127 443	-0.000 450	2199.821 751	-0.000 108
48	2184.952 479	0.000 814	2199.954 522	-0.000 208
49	2184.774 981	0.000 001	2200.087 542	0.000 406
50	2184.597 690	-0.000 151	2200.218 568	-0.000 514
51	2184.420 026	-0.000 227	2200.350 438	-0.000 135
52	2184.242 707	0.000 487	2200.481 713	0.000 099
53	2184.063 866	0.000 120	2200.612 725	0.000 515
54	2183.884 997	0.000 160	2200.742 020	-0.000 348
55	2183.705 504	0.000 005	2200.872 104	0.000 009
56			2201.001 801	0.000 403
57	2183.345 855	0.000 293	2201.130 625	0.000 339
58	2183.164 853	-0.000 125	2201.259 172	0.000 404
59	2182.984 308	0.000 312	2201.386 417	-0.000 437
60	2182.802 863	0.000 238	2201.514 438	-0.000 115
61	2182.620 809	-0.000 065	2201.641 822	-0.000 057
62	2182.438 533	-0.000 221	2201.768 708	-0.000 135
63	2182.256 091	-0.000 187	2201.895 205	-0.000 252
64	2182.073 096	-0.000 362	2202.021 703	-0.000 035
65	2181.889 643	-0.000 664	2202.148 519	0.000 821
66	2181.706 550	-0.000 290	2202.277 773*	0.004 417
67	2181.523 485	0.000 413		
68	2181.343 231*	0.004 212		

Tabelle D.16 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_2 + 2\nu_7)^{0e} - (GS)$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0			2363.134 184	0.000 170
1	2362.825 245	0.000 087	2363.289 333	0.000 126
2	2362.671 398	-0.000 096	2363.445 506	0.000 592
3	2362.517 995	-0.000 347		
4	2362.365 588	-0.000 116	2363.757 713	-0.000 172
5	2362.213 403	-0.000 180	2363.915 354	0.000 196
6	2362.061 911	-0.000 075	2364.072 995	0.000 029
7	2361.910 750	-0.000 167	2364.231 329	0.000 014
8	2361.760 310	-0.000 074	2364.390 050	-0.000 162
9	2361.610 369	-0.000 025	2364.549 740	0.000 076
10			2364.709 790	0.000 112
11	2361.312 147	0.000 076	2364.869 564	-0.000 696
12	2361.163 923	0.000 171	2365.031 497	0.000 081
13	2361.016 141	0.000 137	2365.193 237	0.000 084
14	2360.868 914	0.000 080	2365.355 531	0.000 057
15	2360.722 323	0.000 077	2365.518 434	0.000 049
16	2360.576 287	0.000 040	2365.681 808	-0.000 082
17	2360.430 915	0.000 074	2365.845 818	-0.000 178
18	2360.286 013	-0.000 020	2366.010 660	-0.000 050
19	2360.141 832	0.000 002	2366.175 972	-0.000 070
20	2359.998 178	-0.000 061	2366.342 005	0.000 000
21	2359.855 464	0.000 194	2366.508 647	0.000 028
22	2359.713 000	0.000 063	2366.675 981	0.000 069
23			2366.844 063	0.000 142
24	2359.429 845	-0.000 423	2367.012 893	0.000 197
25	2359.290 068	0.000 072	2367.182 387	0.000 082
26	2359.150 401	-0.000 095	2367.352 906	0.000 072
27	2359.011 953	0.000 117	2367.524 367	-0.000 031
28	2358.874 335	0.000 232	2367.696 936	-0.000 203
29	2358.737 327	-0.000 083	2367.871 249	0.000 012
30	2358.601 649	-0.000 252	2368.046 947	0.000 033
31	2358.467 244	-0.000 511	2368.225 166	0.000 721
32	2358.334 944	-0.000 252	2368.403 467	-0.000 694
33	2358.205 248	0.000 751		

Tabelle D.17 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_3) - (GS)$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0			1447.616 586	-0.000 403
1	1447.309 649	0.000 583	1447.770 558	0.000 242
2	1447.154 537	0.000 067	1447.922 673	-0.000 547
3	1446.999 178	-0.000 273	1448.076 064	0.000 362
4	1446.844 268	0.000 258	1448.227 921	0.000 160
5	1446.687 887	-0.000 259	1448.379 561	0.000 164
6	1446.531 774	-0.000 088	1448.530 550	-0.000 063
7	1446.374 800	-0.000 356	1448.681 171	-0.000 237
8	1446.217 694	-0.000 337	1448.831 796	0.000 013
9	1446.060 926	0.000 439	1448.981 807	0.000 068
10	1445.902 526	0.000 001	1449.130 453	-0.000 824
11	1445.743 941	-0.000 205	1449.279 566	-0.000 832
12	1445.587 306	0.001 954	1449.429 492	0.000 388
13	1445.425 664	-0.000 479	1449.577 211	-0.000 185
14	1445.267 212	0.000 690	1449.724 975	-0.000 300

Tabelle D.18 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_3 + \nu_7)^{1e} - (\nu_7)^{1e}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4				
5				
6	1447.518 369	-0.000 191	1449.527 115	0.000 048
7	1447.361 590	0.000 255	1449.679 066	0.000 227
8	1447.203 895	0.000 173	1449.829 871	-0.000 350
9	1447.046 468	0.000 747	1449.981 143	-0.000 069
10	1446.887 375	0.000 044	1450.131 725	-0.000 087
11	1446.728 476	-0.000 077	1450.281 524	-0.000 498
12	1446.569 323	-0.000 065	1450.431 710	-0.000 130
13	1446.409 704	-0.000 130	1450.581 163	-0.000 105
14	1446.249 800	-0.000 093	1450.730 155	-0.000 150
15	1446.089 261	-0.000 304	1450.878 916	-0.000 034
16	1445.927 661	-0.001 188	1451.026 957	-0.000 247
17	1445.767 714	-0.000 032	1451.175 037	-0.000 029
18	1445.606 267	0.000 011	1451.322 499	-0.000 038
19	1445.444 692	0.000 313		
20	1445.281 982	-0.000 133	1451.616 310	0.000 006
21	1445.119 427	-0.000 038	1451.762 654	0.000 054
22	1444.956 460	0.000 031	1451.908 588	0.000 084
23	1444.793 040	0.000 034	1452.054 319	0.000 303
24	1444.629 213	0.000 016	1452.199 214	0.000 079
25	1444.465 294	0.000 291	1452.344 224	0.000 361
26			1452.488 633	0.000 435
27			1452.632 461	0.000 320
28	1443.970 379	0.000 274	1452.776 080	0.000 389
29	1443.804 681	0.000 313	1452.919 683	0.000 834
30	1443.638 596	0.000 350	1453.062 203	0.000 589

Fortsetzung Tabelle D.18

31	1443.472 172	0.000 432	1453.204 647	0.000 661
32	1443.305 441	0.000 593	1453.346 913	0.000 947
33	1443.138 609	0.001 037	1453.489 192*	0.001 640
34	1442.970 919	0.001 007		
35	1442.803 003*	0.001 135		
36	1442.635 586*	0.002 147		
37				
38			1454.188 423*	-0.001 167
39	1442.124 147*	-0.001 705	1454.327 721	-0.001 097
40	1441.954 191	-0.001 699	1454.466 774	-0.000 879
41	1441.784 239	-0.001 305	1454.605 875	-0.000 219
42	1441.613 846	-0.000 970	1454.743 786	-0.000 356
43	1441.443 196	-0.000 509	1454.881 160	-0.000 636
44	1441.271 847	-0.000 364	1455.018 947	-0.000 110
45	1441.099 973	-0.000 363	1455.155 202	-0.000 722
46	1440.927 879	-0.000 199	1455.292 061	-0.000 337
47	1440.754 841	-0.000 598	1455.428 229	-0.000 249
48	1440.581 912	-0.000 506	1455.563 921	-0.000 244
49	1440.408 790	-0.000 225	1455.699 282	-0.000 176
50	1440.235 034	-0.000 198	1455.834 279	-0.000 078
51	1440.060 992	-0.000 075	1455.968 766	-0.000 097
52			1456.102 949	-0.000 025
53	1439.711 369	-0.000 228	1456.236 668	-0.000 025
54	1439.536 125	-0.000 166	1456.369 861	-0.000 156
55	1439.360 587	-0.000 018	1456.503 170	0.000 222
56	1439.184 433	-0.000 106	1456.635 656	0.000 171
57	1439.007 933	-0.000 161	1456.767 619	-0.000 009
58	1438.831 304	0.000 034		
59	1438.653 997	-0.000 069	1457.031 185	0.000 452
60	1438.476 647	0.000 163	1457.162 207	0.000 512
61	1438.298 321	-0.000 203	1457.292 949	0.000 685
62	1438.120 404	0.000 219	1457.422 959	0.000 520
63	1437.941 658	0.000 190	1457.552 680	0.000 460
64	1437.762 457	0.000 084	1457.681 921	0.000 313
65	1437.583 240	0.000 339	1457.810 965	0.000 362
66	1437.403 201	0.000 149	1457.939 270	0.000 066
67	1437.222 664	-0.000 162	1458.067 301	-0.000 110
68	1437.042 322	0.000 098	1458.194 993	-0.000 233
69	1436.861 515	0.000 270	1458.322 316	-0.000 331
70	1436.680 267	0.000 377	1458.449 263	-0.000 412
71	1436.498 541	0.000 381	1458.576 316	0.000 006
72	1436.316 352	0.000 297		
73	1436.134 274	0.000 700		
74	1435.951 041	0.000 323		
75	1435.768 451	0.000 962		
76			1459.203 149	-0.000 444
77			1459.327 396	-0.000 476
78	1435.214 775	-0.000 782	1459.451 681	-0.000 078
79	1435.030 727	-0.000 106	1459.575 495	0.000 242
80	1434.845 568	-0.000 169	1459.698 517	0.000 161
81	1434.660 442	0.000 174	1459.821 045	-0.000 022
82	1434.474 907	0.000 480	1459.943 450	0.000 064
83	1434.288 502	0.000 287	1460.065 304	-0.000 009
84	1434.101 724	0.000 092	1460.186 766	-0.000 083
85	1433.914 818	0.000 140	1460.307 759	-0.000 235
86	1433.727 493	0.000 139	1460.428 697	-0.000 051
87	1433.539 020	-0.000 639	1460.549 020	-0.000 092

Fortsetzung Tabelle D.18

88	1433.351 019	-0.000 577	1460.669 080	-0.000 005
89	1433.163 324	0.000 161	1460.788 753	0.000 086
90	1432.974 488	0.000 127	1460.907 826	-0.000 034
91			1461.026 514	-0.000 148
92			1461.145 046	-0.000 029
93			1461.262 801	-0.000 298
94			1461.380 644	-0.000 090
95			1461.497 822	-0.000 158
96			1461.615 293	0.000 456
97			1461.731 430	0.000 124
98			1461.847 453	0.000 066
99			1461.963 058	-0.000 023
100			1462.078 399	0.000 012
101			1462.193 192	-0.000 115
102			1462.307 669	-0.000 171
103			1462.422 238	0.000 252
104			1462.535 711	-0.000 036
105			1462.648 993	-0.000 130
106			1462.762 018	-0.000 095
107			1462.874 504	-0.000 215
108			1462.987 369	0.000 428
109			1463.097 951	-0.000 827
110			1463.210 265	0.000 032
111			1463.321 234	-0.000 070
112				
113			1463.542 013	-0.000 288
114			1463.652 441	0.000 214
115			1463.762 433	0.000 661

Tabelle D.19 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_3 + \nu_7)^{1f} - (\nu_7)^{1f}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>P-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>R-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4				
5				
6	1447.516 034	-0.000 735	1449.529 123	0.000 194
7	1447.359 086	-0.000 120	1449.681 062	0.000 138
8	1447.200 781	-0.000 466	1449.832 357	-0.000 163
9	1447.042 754	-0.000 137	1449.983 828	0.000 110
10	1446.884 151	0.000 012	1450.134 537	0.000 021
11	1446.724 701	-0.000 290	1450.285 001	0.000 086
12	1446.565 339	-0.000 108	1450.434 550	-0.000 365
13	1446.404 943	-0.000 565	1450.584 481	-0.000 035
14	1446.245 230	0.000 058	1450.733 605	-0.000 112
15	1446.083 930	-0.000 512	1450.882 673	0.000 155
16	1445.923 113	-0.000 203	1451.030 963	0.000 043
17	1445.761 609	-0.000 186	1451.178 866	-0.000 056
18	1445.599 793	-0.000 086		
19	1445.437 405	-0.000 163	1451.473 757	0.000 032
20	1445.274 570	-0.000 293	1451.620 505	-0.000 021
21	1445.112 017	0.000 254	1451.766 930	0.000 004

Fortsetzung Tabelle D.19

22	1444.948 341	0.000 072	1451.912 969	0.000 042
23			1452.058 717	0.000 191
24	1444.620 327	0.000 228	1452.203 808	0.000 083
25	1444.455 436	0.000 013	1452.348 543	0.000 020
26	1444.290 414	0.000 060	1452.493 093	0.000 173
27	1444.125 243	0.000 351	1452.636 959	0.000 043
28	1443.959 072	0.000 036	1452.780 678	0.000 167
29	1443.793 054	0.000 266	1452.923 918	0.000 213
30	1443.626 336	0.000 190	1453.066 699	0.000 202
31	1443.459 252	0.000 140	1453.209 299	0.000 411
32	1443.292 150	0.000 464	1453.351 344	0.000 467
33	1443.124 182	0.000 314	1453.492 915	0.000 450
34	1442.956 024	0.000 367	1453.634 488	0.000 837
35	1442.787 493	0.000 438	1453.774 931	0.000 496
36	1442.618 482	0.000 421	1453.915 723	0.000 905
37	1442.449 405	0.000 729	1454.055 893	0.001 090
38	1442.279 608	0.000 708	1454.195 993*	0.001 610
39	1442.109 998	0.001 265	1454.336 698*	0.003 140
40	1441.939 793*	0.001 610		
41	1441.770 210*	0.002 980		
42			1454.746 985*	-0.001 680
43			1454.885 005	-0.001 233
44	1441.250 122*	-0.001 910	1455.022 500	-0.000 904
45	1441.078 127*	-0.001 400	1455.159 379	-0.000 788
46	1440.905 933	-0.000 701	1455.296 087	-0.000 441
47	1440.732 728	-0.000 619	1455.432 110	-0.000 376
48	1440.559 174	-0.000 497	1455.567 904	-0.000 139
49	1440.384 754	-0.000 853	1455.702 834	-0.000 362
50	1440.210 959	-0.000 195	1455.837 896	-0.000 051
51	1440.036 069	-0.000 244	1455.972 085	-0.000 211
52	1439.860 593	-0.000 492	1456.106 092	-0.000 150
53	1439.685 165	-0.000 303	1456.239 760	-0.000 026
54	1439.509 254	-0.000 211	1456.372 735	-0.000 192
55	1439.332 912	-0.000 162	1456.506 120	0.000 454
56	1439.156 314	0.000 017	1456.638 102	0.000 100
57	1438.978 996	-0.000 137	1456.769 787	-0.000 149
58	1438.801 361	-0.000 221		
59	1438.623 547	-0.000 099	1457.032 808	0.000 211
60	1438.445 414	0.000 089	1457.163 437	0.000 113
61	1438.266 551	-0.000 067	1457.292 949	-0.000 700
62	1438.087 473	-0.000 052	1457.422 959	-0.000 613
63	1437.907 969	-0.000 080	1457.552 680	-0.000 412
64	1437.727 925	-0.000 263	1457.681 921	-0.000 290
65	1437.548 042	0.000 100	1457.810 965	0.000 037
66	1437.367 209	-0.000 105	1457.939 270	0.000 028
67	1437.186 505	0.000 204	1458.067 301	0.000 146
68	1437.004 955	0.000 049	1458.194 993	0.000 326
69	1436.823 220	0.000 092	1458.322 316	0.000 539
70	1436.641 035	0.000 067	1458.449 263	0.000 778
71	1436.458 287	-0.000 139	1458.574 501	-0.000 291
72	1436.275 565	0.000 062	1458.700 819	0.000 121
73	1436.092 596	0.000 398	1458.826 440	0.000 236
74	1435.908 318	-0.000 194		
75	1435.724 991	0.000 545	1459.076 238	0.000 226
76	1435.540 004	0.000 003	1459.200 608	0.000 293
77	1435.355 547	0.000 372	1459.324 618	0.000 400
78	1435.170 217	0.000 246	1459.447 854	0.000 133
79	1434.984 390	0.000 002	1459.571 055	0.000 231

Fortsetzung Tabelle D.19				
80	1434.798 718	0.000 291	1459.693 634	0.000 106
81	1434.612 252	0.000 165	1459.816 086	0.000 254
82	1434.425 487	0.000 116	1459.938 099	0.000 362
83				
84			1460.179 682	-0.000 669
85			1460.300 566	-0.000 494
86			1460.421 389	0.000 018
87			1460.541 223	-0.000 062
88			1460.660 650	-0.000 151
89			1460.779 911	-0.000 009
90			1460.898 547	-0.000 096
91			1461.017 402	0.000 433
92			1461.134 863	-0.000 036
93			1461.252 217	-0.000 217
94			1461.369 328	-0.000 246
95			1461.486 141	-0.000 178
96			1461.602 751	0.000 082
97			1461.718 590	-0.000 036
98			1461.834 005	-0.000 184
99			1461.949 500	0.000 140
100			1462.063 838	-0.000 300
101			1462.178 420	-0.000 104
102			1462.292 383	-0.000 136
103			1462.405 743	-0.000 380
104			1462.519 541	0.000 204
105			1462.632 035	-0.000 126
106			1462.743 809	-0.000 788
107			1462.856 718	0.000 074
108			1462.968 352	0.000 049
109			1463.079 786	0.000 211
110			1463.191 261	0.000 801

Tabelle D.20 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_3 + 2\nu_7)^{0e} - (2\nu_7)^{0e}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4				
5	1437.277 286	-0.000 422		
6				
7				
8				
9			1439.597 565	0.000 263
10				
11	1436.326 109	0.000 158		
12				
13				
14			1440.351 587	-0.000 046
15	1435.684 012	0.000 129	1440.501 071	-0.000 310
16	1435.522 537	0.000 110	1440.650 615	-0.000 145
17	1435.360 586	-0.000 009	1440.800 033	0.000 264
18	1435.198 522	0.000 132	1440.948 378	-0.000 033

Fortsetzung Tabelle D.20

19	1435.036 038	0.000 225		
20	1434.872 992	0.000 128	1441.244 541	-0.000 056
21	1434.709 563	0.000 018	1441.391 807	-0.000 338
22	1434.546 145	0.000 288	1441.539 596	0.000 265
23	1434.381 517	-0.000 285	1441.686 503	0.000 346
24	1434.217 621	0.000 241		
25	1434.051 783	-0.000 810	1441.978 645	-0.000 092
26	1433.887 401	-0.000 042	1442.124 194	-0.000 301
27	1433.721 828	-0.000 105	1442.269 864	-0.000 037
28	1433.556 103	0.000 041	1442.415 332	0.000 375
29	1433.389 805	-0.000 030	1442.558 218	-0.001 440
30	1433.223 246	-0.000 006	1442.703 870	-0.000 162
31	1433.056 536	0.000 219	1442.848 043	-0.000 013
32	1432.889 046	0.000 014		
33				
34	1432.553 500	0.000 077	1443.277 683	-0.000 428
35	1432.385 095	-0.000 010	1443.421 154	0.000 352
36	1432.216 428	-0.000 021		
37	1432.047 632	0.000 173		
38	1431.877 891	-0.000 248		
39	1431.708 279	-0.000 214	1443.988 552	0.000 186
40	1431.538 277	-0.000 249	1444.129 426	-0.000 054
41	1431.368 422	0.000 180		
42	1431.197 659	0.000 012	1444.410 923	0.000 108
43	1431.026 932	0.000 185		
44	1430.855 860	0.000 313		
45	1430.683 816	-0.000 239		
46	1430.512 525	0.000 248		
47	1430.340 233	0.000 013		
48	1430.167 925	0.000 031		
49	1429.995 266	-0.000 040		
50	1429.822 277	-0.000 188		
51	1429.649 198	-0.000 184		
52	1429.476 007	-0.000 060		
53	1429.302 275	-0.000 256		
54	1429.128 917	0.000 132		
55	1428.955 052	0.000 208		

Tabelle D.21 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_3 + 2\nu_7)^{2e} - (2\nu_7)^{2e}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	$\frac{\text{P-Zweig}}{(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	$\frac{\text{R-Zweig}}{(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}}$
0				
1				
2				
3				
4			1439.142 405	0.001 185
5			1439.295 735	0.001 038
6			1439.448 397	0.000 619
7	1437.269 237	0.000 437	1439.600 771	0.000 311
8	1437.110 734	0.000 516	1439.753 048	0.000 304
9	1436.951 328	0.000 084	1439.904 790	0.000 163
10	1436.792 312	0.000 433		
11	1436.632 623	0.000 503	1440.207 556	0.000 369
12	1436.471 991	0.000 022	1440.357 751	-0.000 110

Fortsetzung Tabelle D.21

13	1436.310 859	-0.000 565	1440.508 011	-0.000 118
14	1436.150 374	-0.000 111	1440.657 831	-0.000 160
15	1435.988 914	-0.000 237	1440.807 234	-0.000 209
16	1435.827 235	-0.000 186	1440.956 492	0.000 007
17	1435.665 027	-0.000 269	1441.105 264	0.000 148
18	1435.502 460	-0.000 314	1441.253 452	0.000 119
19	1435.339 448	-0.000 406	1441.401 091	-0.000 045
20	1435.176 133	-0.000 403	1441.548 567	0.000 044
21	1435.012 339	-0.000 481	1441.695 569	0.000 076
22	1434.848 288	-0.000 417	1441.842 016	-0.000 029
23	1434.683 830	-0.000 360	1441.988 196	0.000 019
24	1434.518 675	-0.000 600	1442.134 321	0.000 432
25	1434.353 353	-0.000 607		
26	1434.187 523	-0.000 721	1442.423 282	-0.000 766
27	1434.021 417	-0.000 710	1442.568 158	-0.000 336
28	1433.854 849	-0.000 761	1442.712 204	-0.000 313
29	1433.688 067	-0.000 625	1442.855 897	-0.000 220
30	1433.520 964	-0.000 410	1442.999 209	-0.000 085
31	1433.353 107	-0.000 550	1443.142 023	-0.000 025
32	1433.185 201	-0.000 340	1443.284 281	-0.000 099
33	1433.016 716	-0.000 311	1443.426 082	-0.000 208
34	1432.847 920	-0.000 197	1443.567 559	-0.000 220
35	1432.678 758	-0.000 052	1443.708 810	-0.000 039
36	1432.508 911	-0.000 200	1443.849 106	-0.000 396
37	1432.339 249	0.000 230		
38	1432.168 827	0.000 289		
39	1431.998 221	0.000 551		
40	1431.827 505	0.001 087	1444.408 198	0.000 217
41	1431.655 459	0.000 675	1444.546 675	0.000 093
42	1431.483 464	0.000 691	1444.685 185	0.000 402
43	1431.310 880	0.000 493	1444.822 757	0.000 170
44	1431.138 040	0.000 408	1444.960 456	0.000 456
45	1430.965 078	0.000 566	1445.097 098	0.000 072
46	1430.791 402	0.000 371	1445.233 885	0.000 213
47	1430.617 634	0.000 439	1445.370 335	0.000 393
48	1430.443 542	0.000 533	1445.506 197	0.000 353
49	1430.268 799	0.000 319	1445.641 973	0.000 589
50	1430.094 270	0.000 655	1445.777 560	0.000 989
51	1429.918 956	0.000 536		
52	1429.743 910	0.001 008		
53	1429.567 871	0.000 801	1446.178 991	-0.001 099
54	1429.391 310	0.000 377	1446.312 972	-0.000 975
55	1429.213 827	-0.000 672	1446.446 753	-0.000 743
56	1429.036 879	-0.000 899	1446.579 934	-0.000 815
57	1428.860 242	-0.000 538	1446.712 606	-0.001 110
58	1428.682 878	-0.000 638	1446.845 009	-0.001 402
59	1428.505 172	-0.000 826	1446.978 645	-0.000 201
60	1428.327 664	-0.000 572	1447.110 466	-0.000 570
61	1428.150 456	0.000 210	1447.242 544	-0.000 452
62	1427.971 654	-0.000 385	1447.374 752	0.000 012
63	1427.793 760	0.000 130	1447.507 809	0.001 523
64	1427.615 670	0.000 635	1447.641 338*	0.003 688
65	1427.438 065	0.001 796		
66	1427.261 173*	0.003 824		

Tabelle D.22 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(\nu_3 + 2\nu_7)^{2f} - (2\nu_7)^{2f}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>P-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>R-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4			1439.142 405	0.001 295
5			1439.295 735	0.001 147
6			1439.448 397	0.000 727
7	1437.269 237	0.000 570	1439.600 771	0.000 414
8	1437.110 734	0.000 659	1439.753 048	0.000 400
9	1436.951 328	0.000 238	1439.904 790	0.000 248
10	1436.792 312	0.000 601		
11	1436.632 623	0.000 685		
12			1440.357 751	-0.000 090
13			1440.508 011	-0.000 133
14	1436.150 374	0.000 118	1440.657 831	-0.000 217
15	1435.988 914	0.000 007	1440.807 234	-0.000 318
16	1435.827 235	0.000 073	1440.956 492	-0.000 164
17	1435.665 027	0.000 004	1441.105 264	-0.000 095
18	1435.502 460	-0.000 029	1441.253 452	-0.000 209
19	1435.339 448	-0.000 112	1441.401 091	-0.000 471
20	1435.176 133	-0.000 102	1441.548 567	-0.000 494
21	1435.012 339	-0.000 175	1441.695 569	-0.000 590
22	1434.848 288	-0.000 111	1441.842 016	-0.000 838
23	1434.683 830	-0.000 057	1441.988 196	-0.000 951
24	1434.518 675	-0.000 306	1442.134 321	-0.000 718
25	1434.353 353	-0.000 327	1442.279 608	-0.000 920
26	1434.187 523	-0.000 461	1442.424 853	-0.000 764
27	1434.021 417	-0.000 478	1442.569 992	-0.000 312
28	1433.854 849	-0.000 563	1442.714 411	-0.000 181
29	1433.688 067	-0.000 469	1442.858 146	-0.000 334
30	1433.520 964	-0.000 306	1443.001 770	-0.000 201
31	1433.353 107	-0.000 506	1443.145 173	0.000 109
32	1433.185 201	-0.000 366	1443.287 913	0.000 150
33	1433.016 716	-0.000 418	1443.429 756	-0.000 312
34	1432.847 920	-0.000 396	1443.571 780	-0.000 202
35	1432.678 758	-0.000 356	1443.712 734	-0.000 774
36	1432.508 911	-0.000 621	1443.855 065	0.000 418
37	1432.339 249	-0.000 323	1443.995 678	0.000 274
38	1432.168 827	-0.000 410	1444.136 250	0.000 468
39	1431.998 221	-0.000 310	1444.275 978	0.000 194
40	1431.827 505	0.000 048	1444.415 715	0.000 300
41	1431.655 459	-0.000 560	1444.554 677	-0.000 002
42	1431.485 336	0.001 114	1444.694 262	0.000 680
43	1431.313 175	0.001 104	1444.833 101	0.000 971
44	1431.140 592	0.001 020	1444.970 591	0.000 263
45	1430.967 724	0.000 994		
46	1430.794 346	0.000 794		
47	1430.621 055	0.001 010	1445.383 791	0.000 896
48	1430.447 484	0.001 267	1445.520 552	0.000 783
49	1430.273 015	0.000 940	1445.657 488	0.001 156
50	1430.098 504	0.000 876		
51	1429.924 207	0.001 321		
52			1446.064 026	-0.000 238
53	1429.573 846	0.001 288	1446.199 060	-0.000 632

Fortsetzung Tabelle D.22

54	1429.397 162	0.000 168	1446.334 289	-0.000 578
55	1429.220 967	-0.000 212	1446.469 027	-0.000 775
56	1429.044 924	-0.000 203	1446.603 640	-0.000 872
57	1428.868 625	-0.000 227	1446.737 933	-0.001 078
58	1428.692 049	-0.000 318	1446.872 409	-0.000 908
59	1428.515 181	-0.000 509	1447.006 646	-0.000 800
60	1428.338 263	-0.000 573	1447.139 998	-0.001 419
61	1428.161 039	-0.000 784	1447.273 721	-0.001 528
62	1427.983 393	-0.001 276	1447.407 965	-0.000 997
63	1427.806 686	-0.000 709	1447.542 080	-0.000 498
64	1427.629 695	-0.000 325	1447.677 337	0.001 218
65	1427.453 195	0.000 628	1447.812 722*	0.003 112
66	1427.276 819	0.001 761	1447.947 800*	0.004 726
67	1427.101 146*	0.003 629		

Tabelle D.23 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge ($2\nu_4$) – (GS) von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig
		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$		$(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7	1420.970 956	0.000 280		
8	1420.814 988	-0.000 185		
9	1420.659 663	0.000 182		
10	1420.503 904	0.000 304		
11	1420.347 293	-0.000 236		
12	1420.191 165	-0.000 104		
13	1420.034 730	-0.000 089		
14	1419.878 008	-0.000 173		
15	1419.721 297	-0.000 056		
16	1419.564 197	-0.000 139		
17	1419.407 003	-0.000 127		
18	1419.249 721	-0.000 015		
19	1419.092 003	-0.000 149		
20				
21	1418.776 315	-0.000 103		
22	1418.618 303	0.000 035	1425.547 413	0.000 368
23	1418.459 829	-0.000 100	1425.697 188	0.000 579
24	1418.301 129	-0.000 272	1425.846 042	0.000 064
25	1418.142 539	-0.000 145	1425.995 547	0.000 394
26	1417.983 621	-0.000 158	1426.144 410	0.000 277
27	1417.824 542	-0.000 142	1426.292 788	-0.000 130
28	1417.665 263	-0.000 138	1426.441 862	0.000 355
29	1417.505 675	-0.000 255	1426.590 243	0.000 342
30	1417.346 163	-0.000 106	1426.737 870	-0.000 229
31	1417.186 258	-0.000 161	1426.886 226	0.000 125
32	1417.026 204	-0.000 177	1427.033 958	0.000 051
33	1416.866 079	-0.000 074	1427.181 498	-0.000 018
34	1416.705 741	0.000 004	1427.329 127	0.000 200
35	1416.544 962	-0.000 170	1427.475 817	-0.000 325
36	1416.384 289	-0.000 048	1427.623 339	0.000 180
37	1416.223 367	0.000 013	1427.770 247	0.000 268
38	1416.062 031	-0.000 150	1427.917 019	0.000 419
39	1415.900 760	-0.000 058	1428.063 316	0.000 294
40	1415.739 156	-0.000 111		
41	1415.577 415	-0.000 111	1428.355 359	0.000 088
42	1415.415 468	-0.000 127		
43	1415.253 383	-0.000 091	1428.646 672	-0.000 050
44	1415.091 148	-0.000 016		
45	1414.928 566	-0.000 098	1428.937 410	0.000 039
46	1414.765 785	-0.000 188	1429.082 589	0.000 194
47	1414.602 959	-0.000 134	1429.227 579	0.000 362
48	1414.439 979	-0.000 042	1429.371 872	0.000 034
49	1414.276 664	-0.000 096	1429.517 007	0.000 750
50	1414.113 272	-0.000 035	1429.660 959	0.000 486
51	1413.949 736	0.000 072	1429.804 093	-0.000 393
52	1413.785 649	-0.000 180	1429.948 376	0.000 081
53	1413.621 659	-0.000 144	1430.091 793	-0.000 108

Fortsetzung Tabelle D.23

54	1413.457 469	-0.000 116	1430.235 358	0.000 056
55	1413.293 103	-0.000 073	1430.378 639	0.000 140
56	1413.128 506	-0.000 069	1430.521 643	0.000 153
57	1412.963 706	-0.000 075	1430.663 889	-0.000 387
58	1412.798 636	-0.000 158	1430.807 110	0.000 255
59	1412.633 584	-0.000 031	1430.949 326	0.000 098
60	1412.468 096	-0.000 147	1431.090 933	-0.000 460
61	1412.302 557	-0.000 120	1431.233 150	-0.000 201
62	1412.136 755	-0.000 162	1431.375 227	0.000 127
63	1411.970 889	-0.000 075	1431.516 796	0.000 156
64	1411.804 942	0.000 126	1431.658 262	0.000 292
65	1411.638 532	0.000 059		
66	1411.471 751	-0.000 184	1431.940 162	0.000 161
67	1411.305 060	-0.000 141		
68	1411.138 215	-0.000 056		
69	1410.971 037	-0.000 109		
70	1410.803 780	-0.000 043		
71	1410.636 403	0.000 100		
72	1410.468 637	0.000 052		
73	1410.300 814	0.000 144		

Tabelle D.24 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(2\nu_4 + \nu_7)^{1e} - (\nu_7)^{1e}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>P-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>R-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3	1432.027 186	0.000 703		
4	1431.870 455	-0.000 262		
5	1431.714 314	-0.000 346		
6	1431.558 437	0.000 126		
7	1431.401 791	0.000 120	1433.722 120	0.001 484
8	1431.245 118	0.000 378	1433.873 635	0.000 741
9	1431.087 473	-0.000 045	1434.025 719	0.000 861
10	1430.929 964	-0.000 040	1434.176 789	0.000 260
11			1434.327 780	-0.000 126
12	1430.613 715	-0.000 389	1434.478 850	-0.000 138
13	1430.455 458	-0.000 260	1434.629 497	-0.000 280
14	1430.296 903	-0.000 138	1434.780 167	-0.000 104
15	1430.137 922	-0.000 152	1434.930 435	-0.000 035
16	1429.978 751	-0.000 064	1435.080 030	-0.000 344
17	1429.819 326	0.000 060	1435.230 149	0.000 166
18			1435.379 698	0.000 402
19			1435.528 684	0.000 370
20	1429.339 328	0.000 454	1435.677 234	0.000 198
21	1429.178 433	0.000 270	1435.825 440	-0.000 021
22	1429.017 039	-0.000 121	1435.973 821	0.000 230
23			1436.121 195	-0.000 228
24	1428.694 570	0.000 286	1436.268 893	-0.000 066
25	1428.532 138	-0.000 272	1436.415 947	-0.000 250
26	1428.369 990	-0.000 255	1436.562 744	-0.000 394
27	1428.207 618	-0.000 172	1436.709 181	-0.000 600
28	1428.044 960	-0.000 084	1436.855 249	-0.000 878
29	1427.881 930	-0.000 078	1437.001 538	-0.000 636
30	1427.718 451	-0.000 231	1437.148 010	0.000 087
31	1427.554 601	-0.000 464	1437.293 395	0.000 021
32	1427.390 875	-0.000 283	1437.438 122	-0.000 403
33	1427.227 009	0.000 049	1437.583 240	-0.000 138
34	1427.062 454	-0.000 018	1437.727 925	-0.000 007
35	1426.897 398	-0.000 296	1437.872 013	-0.000 174
36	1426.732 536	-0.000 090	1438.016 057	-0.000 085
37	1426.567 272	0.000 005	1438.159 622	-0.000 176
38	1426.401 435	-0.000 184	1438.303 267	0.000 113
39	1426.235 687	0.000 006		
40	1426.069 149	-0.000 304	1438.588 932	-0.000 034
41	1425.902 775	-0.000 161	1438.731 382	-0.000 041
42	1425.736 048	-0.000 081	1438.873 354	-0.000 225
43	1425.568 951	-0.000 083	1439.015 358	-0.000 077
44	1425.401 601	-0.000 048		
45	1425.233 745	-0.000 230	1439.298 564	0.000 316
46	1425.065 980	-0.000 033	1439.439 528	0.000 324
47	1424.897 831	0.000 069	1439.579 725	-0.000 135
48	1424.729 160	-0.000 063	1439.720 379	0.000 162
49	1424.560 094	-0.000 303	1439.860 593	0.000 319
50	1424.391 254	-0.000 030	1440.000 301	0.000 270
51	1424.221 920	0.000 037	1440.139 541	0.000 052
52	1424.052 187	-0.000 009	1440.278 909	0.000 261

Fortsetzung Tabelle D.24				
53	1423.882 232	0.000 009	1440.417 817	0.000 309
54	1423.711 938	-0.000 026	1440.556 118	0.000 049
55	1423.541 383	-0.000 037		
56	1423.370 608	0.000 016	1440.832 543	0.000 245
57	1423.199 532	0.000 053		
58	1423.028 079	-0.000 005		
59	1422.856 588	0.000 183	1441.244 487	0.000 074
60	1422.684 626	0.000 181	1441.381 484	0.000 292
61	1422.512 440	0.000 236	1441.518 682	0.001 005
62	1422.340 182	0.000 500		
63	1422.167 032	0.000 151		
64	1421.993 865	0.000 064		
65	1421.821 130	0.000 687		
66	1421.646 829	0.000 019		
67	1421.473 048	0.000 148		
68	1421.298 758	0.000 041		
69	1421.124 442	0.000 182		
70	1420.949 524	-0.000 008		
71	1420.774 521	-0.000 012		
72	1420.599 257	-0.000 009		
73	1420.423 780	0.000 049		
74	1420.247 707	-0.000 223		
75	1420.071 681	-0.000 184		
76	1419.895 271	-0.000 266		
77	1419.718 675	-0.000 274		
78	1419.541 938	-0.000 163		
79	1419.364 748	-0.000 249		
80	1419.187 249	-0.000 390		
81	1419.009 536	-0.000 491		
82	1418.832 018	-0.000 148		
83	1418.653 836	-0.000 220		
84	1418.474 784	-0.000 917		
85	1418.296 882	-0.000 221		
86	1418.117 747	-0.000 517		
87	1417.938 962	-0.000 227		
88	1417.760 208	0.000 330		
89	1417.580 735	0.000 399		
90	1417.401 915	0.001 350		

Tabelle D.25 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(2\nu_4 + \nu_7)^{1f} - (\nu_7)^{1f}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7			1433.720 947	0.000 180
8			1433.873 635	0.000 488
9			1434.025 719	0.000 504
10			1434.176 789	-0.000 181
11			1434.327 780	-0.000 632

Fortsetzung Tabelle D.25

12			1434.478 850	-0.000 691
13			1434.629 497	-0.000 860
14			1434.780 167	-0.000 693
15			1434.930 435	-0.000 613
16			1435.080 030	-0.000 893
17			1435.230 149	-0.000 333
18			1435.379 698	-0.000 030
19	1429.489 569	0.000 440	1435.528 684	0.000 026
20	1429.328 345	0.000 278	1435.677 234	-0.000 039
21	1429.167 111	0.000 415	1435.825 440	-0.000 132
22	1429.005 416	0.000 400	1435.973 821	0.000 266
23	1428.843 353	0.000 327	1436.121 195	-0.000 027
24			1436.268 893	0.000 320
25	1428.518 625	0.000 505	1436.415 947	0.000 340
26	1428.355 359	0.000 156	1436.562 744	0.000 419
27	1428.192 413	0.000 437	1436.709 181	0.000 456
28	1428.028 627	0.000 186	1436.855 249	0.000 441
29	1427.864 671	0.000 075	1437.000 238	-0.000 335
30	1427.700 468	0.000 025	1437.146 242	0.000 221
31	1427.535 895	-0.000 086	1437.291 287	0.000 137
32	1427.371 200	-0.000 010	1437.435 648	-0.000 314
33	1427.206 268	0.000 138	1437.580 268	-0.000 188
34	1427.041 322	0.000 580		
35	1426.875 100	0.000 054	1437.868 963	0.000 474
36	1426.709 139	0.000 097	1438.011 915	-0.000 113
37	1426.542 683	-0.000 047	1438.155 461	0.000 212
38	1426.375 760	-0.000 350	1438.298 321	0.000 169
39	1426.209 167	-0.000 017	1438.440 170	-0.000 568
40	1426.041 824	-0.000 126	1438.582 725	-0.000 280
41	1425.874 418	0.000 008	1438.724 724	-0.000 231
42	1425.706 356	-0.000 208	1438.866 706	0.000 119
43	1425.538 157	-0.000 256	1439.007 933	0.000 030
44	1425.369 751	-0.000 206	1439.149 028	0.000 126
45	1425.201 048	-0.000 148	1439.290 407	0.000 822
46	1425.031 923	-0.000 209	1439.429 913	-0.000 039
47	1424.862 720	-0.000 045	1439.569 923	-0.000 081
48	1424.692 712	-0.000 383		
49	1424.522 851	-0.000 273	1439.848 988	-0.000 177
50	1424.352 370	-0.000 483	1439.987 755	-0.000 521
51	1424.182 212	-0.000 071	1440.126 501	-0.000 574
52	1424.011 152	-0.000 262	1440.265 777	0.000 214
53	1423.840 079	-0.000 169	1440.404 351	0.000 611
54	1423.668 690	-0.000 095		
55	1423.496 784	-0.000 245	1440.680 014	0.000 844
56	1423.324 981	0.000 002	1440.816 905	0.000 480
57	1423.152 575	-0.000 062	1440.953 370	-0.000 005
58	1422.980 014	0.000 009	1441.089 927	-0.000 094
59	1422.807 093	0.000 008	1441.226 126	-0.000 240
60	1422.633 859	-0.000 019	1441.362 575	0.000 164
61	1422.460 427	0.000 041	1441.497 976	-0.000 182
62	1422.286 534	-0.000 078	1441.633 468	-0.000 141
63	1422.112 765	0.000 207		
64	1421.938 510	0.000 285		
65	1421.763 936	0.000 319		
66	1421.588 879	0.000 144		
67	1421.413 722	0.000 139		
68	1421.238 281	0.000 117		
69	1421.062 498	0.000 018		

Fortsetzung Tabelle D.25		
70	1420.886 499	-0.000 036
71	1420.710 260	-0.000 071
72	1420.533 869	-0.000 004
73	1420.357 181	0.000 017
74	1420.180 157	-0.000 050
75	1420.002 810	-0.000 198
76	1419.825 430	-0.000 139
77	1419.647 962	0.000 066

Tabelle D.26 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(2\nu_4 + 2\nu_7)^{0e} - (2\nu_7)^{0e}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4				
5			1453.273 348	-0.001 040
6			1453.427 213	-0.000 801
7			1453.580 997	-0.000 340
8			1453.734 260	-0.000 095
9			1453.886 917	-0.000 155
10			1454.039 246	-0.000 242
11			1454.191 668	0.000 064
12			1454.343 689	0.000 266
13			1454.495 036	0.000 091
14	1450.137 839	0.000 472	1454.646 397	0.000 225
15	1449.977 233	-0.000 082	1454.797 175	0.000 069
16	1449.817 321	0.000 355	1454.947 830	0.000 081
17	1449.656 232	-0.000 088	1455.098 426	0.000 325
18	1449.495 316	-0.000 063		
19	1449.334 494	0.000 348	1455.398 037	0.000 091
20	1449.172 843	0.000 223	1455.547 714	0.000 273
21	1449.010 839	0.000 034	1455.696 332	-0.000 322
22	1448.848 943	0.000 242	1455.845 850	0.000 263
23	1448.686 859	0.000 548	1455.994 625	0.000 383
24	1448.523 603	-0.000 033	1456.142 398	-0.000 223
25	1448.360 929	0.000 251	1456.291 093	0.000 368
26	1448.197 748	0.000 309	1456.438 619	0.000 063
27	1448.034 666	0.000 745	1456.585 591	-0.000 526
28	1447.870 304	0.000 180	1456.732 771	-0.000 639
29	1447.706 376	0.000 324	1456.880 101	-0.000 334
30	1447.542 080	0.000 375		
31	1447.377 376	0.000 291	1457.173 241	-0.000 449
32	1447.212 518	0.000 324	1457.319 449	-0.000 475
33			1457.465 088	-0.000 809
34	1446.881 697	0.000 092	1457.611 295	-0.000 315
35	1446.715 925	0.000 016		
36	1446.549 918	-0.000 030		
37	1446.384 037	0.000 314		

Fortsetzung Tabelle D.26

38				
39	1446.050 618	0.000 133		
40	1445.884 043	0.000 569		
41	1445.717 371	0.001 167		
42				
43				
44			1459.052 890	-0.001 815
45			1459.196 979	-0.000 646
46			1459.339 944	-0.000 349
47			1459.483 120	0.000 411
48				
49			1459.764 550*	-0.002 236
50	1444.197 886	-0.001 313	1459.907 216	-0.001 229
51	1444.027 622	-0.001 744	1460.049 113	-0.000 737
52	1443.858 339	-0.000 939	1460.190 698	-0.000 302
53	1443.688 339	-0.000 596	1460.331 760	-0.000 135
54	1443.517 731	-0.000 607	1460.472 526	-0.000 006
55	1443.347 188	-0.000 297	1460.613 115	0.000 203
56	1443.176 545	0.000 169	1460.754 029	0.000 998
57	1443.005 506	0.000 495	1460.892 881	-0.000 008
58	1442.833 687	0.000 298	1461.032 768	0.000 284
59			1461.172 361	0.000 548
60	1442.490 183	0.000 812	1461.311 555	0.000 681
61	1442.317 865	0.000 893	1461.450 544	0.000 880
62	1442.144 966	0.000 654	1461.589 245	0.001 063
63	1441.972 135	0.000 747	1461.727 809	0.001 387
64	1441.799 112	0.000 912	1461.866 080	0.001 697
65			1462.004 286*	0.002 227
66			1462.142 825*	0.003 378
67			1462.283 234*	0.006 691
68			1462.422 238*	0.008 897
69				
70			1462.683 645	-0.002 376
71			1462.820 482	-0.001 408
72			1462.956 321	-0.001 116
73			1463.092 130	-0.000 522
74			1463.227 036	-0.000 492
75			1463.362 257	0.000 203
76			1463.496 998	0.000 776
77			1463.631 844*	0.001 823
78			1463.767 202*	0.003 765
79				
80				
81				
82			1464.287 834*	-0.005 183
83			1464.421 231*	-0.003 082
84			1464.553 868	-0.001 267
85			1464.686 061	0.000 598
86			1464.816 435	0.001 160

Tabelle D.27 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(2\nu_4 + 2\nu_7)^{2e} - (2\nu_7)^{2e}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>P-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	<u>R-Zweig</u> $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4				
5	1452.313 114	0.000 283		
6	1452.155 337	0.000 041		
7	1451.997 424	0.000 004		
8	1451.839 350	0.000 147	1454.483 232	0.000 631
9	1451.680 711	0.000 069	1454.635 168	0.000 178
10	1451.521 478	-0.000 258	1454.786 824	-0.000 197
11	1451.362 253	-0.000 230	1454.938 659	-0.000 032
12	1451.202 814	-0.000 067	1455.089 831	-0.000 165
13	1451.043 016	0.000 088	1455.240 736	-0.000 197
14			1455.391 637	0.000 140
15	1450.721 238	-0.000 716	1455.541 701	0.000 017
16	1450.560 967	0.000 039	1455.691 873	0.000 383
17	1450.399 663	0.000 126	1455.841 469	0.000 559
18	1450.237 873	0.000 094	1455.990 434	0.000 495
19	1450.075 347	-0.000 301	1456.138 759	0.000 188
20	1449.913 205	0.000 063	1456.286 256	-0.000 545
21	1449.750 458	0.000 203	1456.433 856	-0.000 768
22	1449.587 501	0.000 518	1456.581 952	-0.000 081
23	1449.422 437	-0.000 884	1456.728 959	-0.000 064
24	1449.259 058	-0.000 205	1456.875 516	-0.000 070
25	1449.094 736	-0.000 069	1457.021 519	-0.000 198
26	1448.929 847	-0.000 094	1457.167 296	-0.000 113
27	1448.764 651	-0.000 014	1457.312 446	-0.000 208
28	1448.598 928	-0.000 042	1457.457 115	-0.000 331
29	1448.433 170	0.000 318	1457.601 781	0.000 004
30	1448.265 535	-0.000 768	1457.745 628	-0.000 012
31	1448.099 335	0.000 018	1457.889 267	0.000 241
32	1447.932 133	0.000 246	1458.032 441	0.000 513
33	1447.764 025	0.000 020		
34	1447.596 263	0.000 599	1458.316 792	0.000 547
35				
36	1447.258 240	0.000 663		
37			1458.738 766	-0.000 110
38			1458.878 558	-0.000 133
39			1459.018 172	0.000 212
40				
41			1459.295 123	0.000 305
42			1459.432 911	0.000 525
43				
44			1459.705 246	-0.000 503
45			1459.841 270	-0.000 251
46			1459.976 611	-0.000 061
47			1460.110 967	-0.000 223
48			1460.244 934	-0.000 128
49			1460.378 083	-0.000 193
50			1460.510 873	0.000 054
51			1460.643 208	0.000 530
52			1460.775 303*	0.001 465
53			1460.907 826*	0.003 539

Tabelle D.28 Zugeordnete Rotations-Vibrations-Übergänge $(2\nu_4 + 2\nu_7)^{2f} - (2\nu_7)^{2f}$ von NCCNO.

J''	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	P-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$	$\tilde{\nu}_{obs}/\text{cm}^{-1}$	R-Zweig $(\tilde{\nu}_{obs} - \tilde{\nu}_{calc})/\text{cm}^{-1}$
0				
1				
2				
3				
4				
5	1452.313 114	0.000 504		
6	1452.155 337	0.000 269		
7	1451.997 424	0.000 238		
8	1451.839 350	0.000 386		
9	1451.680 711	0.000 310	1454.635 168	0.000 312
10	1451.521 478	-0.000 019	1454.786 824	-0.000 110
11	1451.362 253	0.000 001	1454.938 659	-0.000 007
12	1451.202 814	0.000 148	1455.089 831	-0.000 222
13	1451.043 016	0.000 278	1455.240 736	-0.000 356
14	1450.882 673	0.000 205	1455.391 637	-0.000 148
15	1450.721 238	-0.000 617	1455.541 701	-0.000 428
16	1450.560 967	0.000 067	1455.691 873	-0.000 252
17	1450.399 663	0.000 062	1455.841 469	-0.000 302
18	1450.237 873	-0.000 086	1455.990 434	-0.000 632
19	1450.075 347	-0.000 625	1456.138 759	-0.001 251
20	1449.913 205	-0.000 435	1456.288 362	-0.000 240
21	1449.750 458	-0.000 504	1456.436 236	-0.000 604
22	1449.587 501	-0.000 438	1456.585 591	0.000 866
23	1449.424 570	0.000 001	1456.732 771	0.000 517
24	1449.261 527	0.000 675	1456.880 101	0.000 673
25	1449.096 793	0.000 006		
26	1448.932 758	0.000 384	1457.173 241	0.000 535
27	1448.767 909	0.000 297	1457.319 449	0.000 641
28	1448.602 854	0.000 353	1457.465 088	0.000 537
29	1448.437 217	0.000 177	1457.611 295	0.001 361
30	1448.271 257	0.000 028	1457.755 144	0.000 187
31	1448.105 025	-0.000 042	1457.899 647	0.000 028
32	1447.937 858	-0.000 696	1458.044 225	0.000 305
33	1447.771 161	-0.000 528	1458.187 350	-0.000 508
34	1447.604 424	-0.000 049	1458.331 097	-0.000 337
35			1458.474 630	-0.000 016
36			1458.616 542	-0.000 954
37	1447.100 814	0.000 103	1458.759 671	-0.000 311
38	1446.931 556	-0.000 530	1458.902 438	0.000 334
39	1446.762 808	-0.000 300	1459.043 499	-0.000 363
40	1446.593 229	-0.000 550	1459.185 293	0.000 036
41	1446.424 026	-0.000 071	1459.327 396	0.001 108
42	1446.254 388	0.000 324	1459.467 191	0.000 234
43			1459.608 180	0.000 918
44			1459.745 607*	-0.001 599
45			1459.885 775	-0.001 014
46			1460.025 434	-0.000 577
47			1460.164 477	-0.000 397
48			1460.303 096	-0.000 283
49			1460.441 243	-0.000 285
50			1460.579 115	-0.000 207
51			1460.716 672	-0.000 091
52	1444.535 201	0.000 615	1460.853 645	-0.000 209
53	1444.361 301	0.000 548	1460.990 298	-0.000 298

Fortsetzung Tabelle D.28

54	1444.186 878	0.000 294	1461.126 640	-0.000 352
55	1444.012 472	0.000 389	1461.262 801	-0.000 245
56	1443.837 580	0.000 328	1461.398 417	-0.000 343
57	1443.662 282	0.000 187	1461.533 836	-0.000 301
58			1461.669 122	-0.000 060
59			1461.804 307	0.000 409
60			1461.940 024*	0.001 734