

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITÉ MOULOU D MAMMERI TIZI-OUZOU  
FACULTÉ DES SCIENCES  
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



## Thèse de Doctorat LMD

SPÉCIALITÉ :

**Physique**

OPTION :

**Physique des Matériaux et des Composants**

PRÉSENTÉE PAR :

**Anis CHIKH**

---

---

# Etude des propriétés radiatives d'ions de terres rares : cas des ions $Er^{3+}$ , $Dy^{3+}$ et $Ho^{3+}$

---

---

SOUTENU LE --/--/--- DEVANT LE JURY COMPOSÉ DE :

ABDELHAMID ZIANE	PROFESSEUR	UMMTO	PRÉSIDENT
DJAMEL DEGHICHE	MCA	UMMTO	RAPPORTEUR
W-Û LYDIA TCHANG-BRILLET	PROFESSEUR	SORBONNE UNIVERSITÉ	CO-RAPPORTEUR
ABDELHAKIM GHERBI	PROFESSEUR	UAMB	EXAMINATEUR
HOCINE AOUCHICHE	PROFESSEUR	UMMTO	EXAMINATEUR

**Année universitaire 2020/2021**

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMERI, TIZI-OUZOU

FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



## THÈSE DE DOCTORAT LMD

Filière : Physique

Spécialité: Physique des matériaux et des composants

Présentée par :

**CHIKH Anis**

Sujet :

**Etude des propriétés radiatives d'ions de terres rares : cas des ions  $Er^{+3}$ ,  $Dy^{+3}$  et  $Ho^{+3}$ .**

Devant le jury d'examen composé de :

Mr. ZIANE Abdelhamid	Professeur	UMMTO	Président(e)
Mr. DEGHICHE Djamel	MCA	UMMTO	Rapporteur
Mme. TCHANG-BRILLET W-Ü Lydia	Professeur	SORBONNE UNIVERSITE (France)	Co- Rapporteur
Mr. GHERBI Abdelhakim	Professeur	UAMB	Examineur
Mr. AOUCHICHE Hocine	Professeur	UMMTO	Examineur

Année universitaire 2020/2021

*Je dédie ce travail à ma mère  
1959-2015.*



# Remerciements

Cette thèse est le fruit d'un travail de collaboration entre le Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'Université de Mouloud MAMMARI de Tizi-Ouzou (UMMTO), sous la direction de Dr. Djamel DEGHCHE, et le Laboratoire d'Études du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique et Atmosphères (LERMA) de l'observatoire de Paris-Meudon ex-Sorbonne Université, France sous la direction du Pr. W-Ü Lydia TCHANG-BRILLET.

Je tiens à remercier Monsieur DEGHCHE pour sa grande patience, sa disponibilité et ses encouragements qui m'ont permis de surmonter toutes les difficultés que j'ai rencontrées durant ma thèse. Je tiens également à remercier Madame W-Ü Lydia TCHANG-BRILLET, professeur émérite à l'Observatoire de Paris-Meudon (Sorbonne Université), qui m'a accueilli chaleureusement dans son équipe de recherche et dirigé le travail de cette thèse. Ses conseils, sa compétence, sa sympathie et son expérience ont été précieux. Je tiens à lui dire merci pour toute l'aide qu'elle m'a apportée tout au long de mon séjour en France.

J'exprime ma reconnaissance à Monsieur Hamid BOUZAR Professeur à l'UMMTO et Directeur du LPCQ, de m'avoir accueilli dans de bonnes conditions au sein de son laboratoire.

Je remercie Monsieur Abdelhamid ZIANE de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance. Mes vifs remerciements s'adressent à tous les membres du jury, qui m'ont fait l'honneur d'examiner et d'évaluer la qualité de ce travail : les Professeurs Abdelhakim GHERBI de l'Université de Bejaia, Hocine AOUCHICHE de l'UMMTO.

Mes remerciements vont également au Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique et au programme de bourse Franco-Algérien (PROFAS B+), de m'avoir octroyé une bourse d'étude à l'étranger, d'une durée de sept mois, séjour que j'ai apprécié et trouvé extrêmement enrichissant tant sur le plan scientifique que personnel.

Je remercie également mes camarades et amis doctorants du LPCQ pour leur bonne humeur, leur aide et leur soutien tout au long de ces années de thèse.

Mes remerciements vont également à Norbert Champion et Christophe Blaess, ingénieur et technicien au LERMA, J.F WYART, A. MEFTAH, N. FEAUTRIER et C. BALANÇA pour l'aide et le soutien qu'ils m'ont apporté.

Je remercie ma famille et mes proches, en particulier mon très cher père, Nouara, ma sœur, mon frère et leurs familles, pour leur soutien indéfectible, pour m'avoir accompagné et vécu cette expérience à mes côtés.

Je tiens à remercier ma mère, qui sans elle rien de cela n'aurait pu se produire. Repose en paix.

Enfin, depuis que je t'ai connue, tu n'as cessé de me soutenir et de m'épauler. Tu me voulais toujours le meilleur. Tu as partagé avec moi les meilleurs moments et surtout les plus difficiles de ma vie, tu étais toujours à mes côtés. Je te remercie Silya de ne m'avoir jamais déçu. Je remercie le bon dieu qui a croisé nos chemins. Puisse-t-il nous procurer santé, bonheur et longue vie.

Merci à tous mes enseignants, à toutes les personnes de Tizi-Ouzou et les membres de l'observatoire avec lesquelles j'ai pu échanger, partager des moments et qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail de thèse.

# Table des matières

<b>INTRODUCTION GENERALE</b>	<b>3</b>
<b>I Méthode de production expérimentale et de mesure de spectres atomiques</b>	<b>7</b>
<b>I Méthode expérimentale de production de spectres d'émissions en laboratoire</b>	<b>9</b>
I.1 Introduction . . . . .	9
I.2 Spectroscopie de laboratoire . . . . .	10
I.2.1 Les sources lumineuses . . . . .	10
I.2.1.1 Sources lumineuses d'émission de laboratoire . . . . .	11
I.2.2 Les spectromètres . . . . .	16
I.2.2.1 Spectromètre à Réseau . . . . .	16
I.2.2.2 Spectromètre à Transformée de Fourier . . . . .	18
I.2.3 Les détecteurs . . . . .	20
I.2.3.1 Les plaques photographiques (PP) . . . . .	20
I.2.3.2 Les écrans phosphore photostimulables ou <i>Image Plates</i> (IP) . . . . .	21
I.3 Conclusion . . . . .	22
<b>II Méthode de mesure de spectres d'émission de laboratoire</b>	<b>23</b>
II.1 Introduction . . . . .	23
II.2 Scanner de digitalisation . . . . .	24
II.2.1 Scanner optique <b>iQsmart</b> <sup>1</sup> . . . . .	24
II.2.2 Scanner de nouvelle génération <b>STARION FLA-9000 de FUJI-FILM</b> . . . . .	24
II.3 Logiciels de mesure et de dépouillement des spectres atomiques . . . . .	26
II.3.1 Le logiciel <i>SPECTRA</i> . . . . .	26
II.3.2 Le logiciel GFit.10 . . . . .	27

---

---

II.4	Calibration des spectres atomiques . . . . .	28
II.5	Mesure des longueurs d'onde . . . . .	29
II.6	Conclusion . . . . .	29
<b>II</b>	<b>Formalisme théorique de la Spectroscopie Atomique</b>	<b>31</b>
<b>III</b>	<b>Méthode théorique de l'analyse des spectres atomiques</b>	<b>33</b>
III.1	Introduction . . . . .	33
III.2	Rappels des notations . . . . .	33
III.2.1	Grandeurs radiatives. Fréquence, nombre d'ondes et longueur d'onde . . . . .	33
III.2.2	Atome d'hydrogène et "hydrogénoïdes" . . . . .	34
III.2.3	Principe d'exclusion de Pauli . . . . .	36
III.3	Systèmes polyélectronique . . . . .	37
III.3.1	Expression de l'hamiltonien . . . . .	37
III.3.2	Approximation du champ central . . . . .	38
III.3.3	Calcul au premier ordre des perturbations. Schémas de couplage des moments cinétiques . . . . .	40
III.3.4	Partie radiale. Méthode Hartree-Fock . . . . .	42
III.3.5	Partie angulaire. Algèbre de Racah - Théorème de Wigner-Eckart	44
III.3.6	Forme générale des éléments de matrice . . . . .	45
III.3.7	Énergie moyenne d'une configuration et énergie totale . . . . .	47
III.4	Probabilité de transition. Élément de matrice de transition . . . . .	48
III.4.1	Facteur de Landé . . . . .	49
III.4.2	Probabilités de transition . . . . .	49
III.4.3	Règles de sélection . . . . .	50
III.4.4	Durée de vie radiative . . . . .	51
III.5	Méthode paramétrique - Code Cowan . . . . .	52
III.6	Analyse spectrale . . . . .	54
III.6.1	Recherche de niveaux d'énergie expérimentaux - Principe de com- binaison de Ritz . . . . .	54
III.6.2	Programme Recher . . . . .	56
III.6.3	Programme IDEN . . . . .	56
III.6.4	Optimisation des énergies des niveaux - Programme LOPT . . . . .	59
III.7	Conclusion . . . . .	59

---



---

<b>III Résultats et discussion</b>	<b>61</b>
<b>IV Étude des Configurations de l'ion libre <math>Er^{3+}</math></b>	<b>63</b>
IV.1 Introduction . . . . .	63
IV.2 Analyse et détermination des niveaux d'énergie . . . . .	65
IV.3 Validations des résultats . . . . .	69
IV.4 Calcul paramétrique . . . . .	72
IV.5 Conclusion . . . . .	76
<b>V Étude des Configurations des ions libres <math>Dy^{3+}</math> et <math>Ho^{3+}</math></b>	<b>77</b>
V.1 Introduction . . . . .	77
V.2 Étude préliminaire de l'ion $Dy^{3+}$ (Dy IV) . . . . .	77
V.3 Étude théorique de l'ion $Ho^{3+}$ (Ho IV) . . . . .	82
V.4 Conclusion . . . . .	85
<b>CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVE</b>	<b>89</b>
<b>A Niveaux identifiés de <math>Er^{3+}</math></b>	<b>91</b>
<b>B Raies classées de <math>Er^{3+}</math></b>	<b>121</b>
<b>C Publication</b>	<b>165</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>175</b>

---



# Table des figures

1	Tableau périodique des éléments et leurs origines. Les couleurs indiquant les différents milieux astrophysiques où les éléments sont présents. . . .	3
I.1	Circuit électrique (a) et schéma de principe (b) de la source à étincelle glissante . . . . .	12
I.2	Spacer en Alumine séparant l'anode et la cathode . . . . .	12
I.3	Circuit électrique (a) et schéma de principe (b) de la source à étincelle initiée . . . . .	13
I.4	Schéma d'un tube à décharge cathodique. (G : Générateur ; R : Résistance tampon ; 1 : Espace d'Aston ; 2 : Émissions cathodiques ; 3 et 8 : Espace sombre ; 4 : Émissions négatives ; 5 : Espace de Faraday ; 6 : Colonne positive ; 7 : Émissions anodiques.) . . . . .	15
I.5	Géométrie du <i>Cercle de Rowland</i> de 10.7 m du spectromètre UV sous vide de l'Observatoire de Paris-Meudon. . . . .	17
I.6	Spectrographe de 10.7 m UV sous vide de l'Observatoire de Paris-Meudon.	18
I.7	Représentation schématique de l'interféromètre de Michelson. . . . .	19
I.8	Comparaison de la réponse en intensité entre IP et PP soumis à un rayonnement d'un échantillon de $^{32}\text{P}$ de 1.7 MeV. . . . .	22
II.1	Scanner Optique <i>iQsmart</i> <sup>1</sup> de 7500dpi . . . . .	24
II.2	Le scanner STARION FLA-9000 de FUJIFILM. . . . .	25
II.3	principe de lecture de l'IP par le scanner STARION FLA-9000 de FUJIFILM. . . . .	25
II.4	Principe de fonctionnement du logiciel <i>MultiGauge</i> . . . . .	26
II.5	Logiciel Spectra : en rouge la position de la raie et en vert le triangle délimitant la surface sous le profil qui mesure l'intensité expérimentale de la raie. . . . .	27
II.6	Le logiciel GFit.10 pour la mesure des positions et les intensités des raies spectrales. . . . .	28

---

II.7 Les différents profils utilisés par le logiciel GFit.10. . . . .	28
III.1 Organigramme de fonctionnement du Code R.D. Cowan. . . . .	53
III.2 Evolution des Facteurs d'échelle $F^2(ff), F^4(ff), F^6(ff)$ et $\xi_f$ le long de la séquence de LnIV. . . . .	54
III.3 Principe de combinaison Ritz pour la recherche des niveaux d'énergie. . . . .	55
III.4 Schéma de fonctionnement du logiciel IDEN. . . . .	57
III.5 Interface graphique du logiciel IDEN pour la recherche des niveaux d'énergie. . . . .	58
IV.1 Diagramme de transition de $Er^{3+}$ . . . . .	66
IV.2 Niveaux d'énergie de l'ion $ErIV$ en fonction de $J$ des configurations de parité impaire $4f^{11}$ et $4f^{10}6p$ . En noir : calculés, en rouge et décalé à droite : expérimentaux. . . . .	67
IV.3 Niveaux d'énergie de l'ion $ErIV$ en fonction de $J$ des configurations de parité paire $4f^{10}5d$ et $4f^{10}6s$ . En noir : calculés; en rouge et décalé à droite : expérimentaux. . . . .	67
IV.4 Progrès dans l'identification des raies $ErIV$ : (I) Le spectre total entre 705 et 2460 Å , (II) Agrandissement entre 800 et 1100 Å. (a) Raies précédemment identifiées [22]; (b) Transitions identifiées actuellement, noir : $4f^{11} - 4f^{10}5d$ , bleu : $4f^{11} - 4f^{10}6s$ , rouge : $4f^{10}5d - 4f^{10}6p$ , vert : $4f^{10}6s - 4f^{10}6s$ ; (c) Spectre expérimental à étincelles sous vide. Les intensités sont données en unités arbitraires et les longueurs d'onde en Å. . . . .	68
IV.5 Écarts $\Delta\lambda_{exp-Ritz}$ en fonction de la longueur d'onde $\lambda$ . . . . .	69
IV.6 Courbe de Boltzmann pour la détermination de la température effective de l'ion $Er^{3+}$ . . . . .	70
IV.7 Vérification de la linéarité de l'échelle des probabilités de transition de raies $Er^{3+}$ entre les valeurs de notre travail $gA_{TW}$ et $gA_{[22]}$ avant (à droite) et après correction (à gauche). . . . .	71
IV.8 Estimation des incertitudes des valeurs $A_{TW}$ calculées pour l'ErIV. $S$ est la force de raie et $A_{[22]}$ les valeurs de référence. . . . .	72
V.1 Comparaison entre le spectre expérimental fourni par NIST (en noir) et le spectre théorique (en rouge) de l'ion $Dy^{3+}$ . Les intensités sont en unité arbitraire. . . . .	78

---

V.2	Niveaux d'énergie de l'ion $DyIV$ en fonction de $J$ des configurations de parité impaire $4f^9$ et $4f^86p$ . En noir et décalé à gauche : HFR; en couleurs : calculés. . . . .	80
V.3	Niveaux d'énergie de l'ion $DyIV$ en fonction de $J$ des configurations de parité paire $4f^85d$ et $4f^86s$ . En noir et décalé à gauche : HFR; en couleurs : calculés. . . . .	80
V.4	Comparaison entre le spectre HFR et Calculé de l'ion $Ho^{3+}$ des différents faisceaux de transition. . . . .	82
V.5	Niveaux d'énergie HFR de l'ion $HoIV$ en fonction de $J$ des configurations de parité paire $4f^{10}$ et $4f^96p$ . . . . .	84
V.6	Niveaux d'énergie HFR de l'ion $HoIV$ en fonction de $J$ des configurations de parité impaire $4f^95d$ et $4f^96s$ . . . . .	85

---



# Liste des tableaux

III.1 Notations des orbitales électroniques. . . . .	36
III.2 Règles de sélection pour différents types de transitions discrètes. . . . .	51
IV.1 Paramètres ajustés (en $\text{cm}^{-1}$ ) pour les configurations de parité paire $4f^{11}$ et $4f^{10}6p$ d'Er IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 5 et 9 donnent les facteurs d'échelle $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$ sauf pour les énergies moyennes $E_{av}$ où $P_{fit} - P_{HFR}$ sont donnés. Les contraintes sur certains paramètres sont indiquées dans les colonnes de l'incertitude «Unc». : f comme "fixe" ou r comme "rapport fixe" . A titre de comparaison, les paramètres ajustés précédemment [22] avec des niveaux moins expérimentaux sont donnés dans les colonnes 6 et 11 suivis de leurs incertitudes entre parenthèses. . . . .	74
IV.2 Paramètres ajustés (en $\text{cm}^{-1}$ ) pour les configurations de parité paire $4f^{10}5d$ et $4f^{10}6s$ d'Er IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 5 et 9 donnent les facteurs d'échelle $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$ sauf pour les énergies moyennes $E_{av}$ où $P_{fit} - P_{HFR}$ sont donnés. Les contraintes sur certains paramètres sont indiquées dans les colonnes de l'incertitude «Unc». : f comme "fixe" ou r comme "rapport fixe" . A titre de comparaison, les paramètres ajustés précédemment [22] avec des niveaux moins expérimentaux sont donnés dans les colonnes 6 et 11 suivis de leurs incertitudes entre parenthèses. . . . .	75
V.1 Paramètres ajustés (en $\text{cm}^{-1}$ ) pour les configurations de parité paire $4f^9$ et $4f^86p$ du Dy IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 4 et 7 donnent les facteurs d'échelle $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$ sauf pour les énergies moyennes $E_{av}$ où $P_{fit} - P_{HFR}$ sont donnés. . . . .	79

---

- 
- V.2 Paramètres ajustés (en  $\text{cm}^{-1}$ ) pour les configurations de parité paire  $4f^85d$  et  $4f^86s$  du Dy IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 4 et 7 donnent les facteurs d'échelle  $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$  sauf pour les énergies moyennes  $E_{av}$  où  $P_{fit} - P_{HFR}$  sont donnés. . . . . 79
- V.3 Paramètres ajustés (en  $\text{cm}^{-1}$ ) pour les configurations de parité paire  $4f^{10}$  et  $4f^96p$  du Ho IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 4 et 7 donnent les facteurs d'échelle  $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$  sauf pour les énergies moyennes  $E_{av}$  où  $P_{fit} - P_{HFR}$  sont donnés. . . . . 83
- V.4 Paramètres ajustés (en  $\text{cm}^{-1}$ ) pour les configurations de parité impaire  $4f^95d$  et  $4f^96s$  du Ho IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 4 et 7 donnent les facteurs d'échelle  $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$  sauf pour les énergies moyennes  $E_{av}$  où  $P_{fit} - P_{HFR}$  sont donnés. . . . . 83
- A.1 Niveaux d'énergie de parité impaire des deux configurations  $4f^{11}$  et  $4f^{10}6p$  de l'ion  $Er^{3+}$ . Les énergies sont données en  $\text{cm}^{-1}$  par ordre croissant de  $E_{calc}$ . Pour chaque niveau sont donnés, la configuration, le moment cinétique total  $J$ , la valeur de l'énergie expérimentale lorsqu'elle est disponible, ainsi que les incertitudes correspondantes entre parenthèses, le symbole (\*) pour un niveau préalablement déterminé dans [22], la valeur de l'énergie calculée  $E_{calc}$  résultant du Code Cowan correspondant aux paramètres donnés dans IV.1,  $\Delta E = E_{exp} - E_{calc}$ ,  $N_{cl}$ , le nombre total de transitions impliquant la détermination expérimentale du niveau, le facteur de Landé calculé et les premières composantes de la fonction propre et leurs pourcentages correspondants au couplage LS et JJ. . . . . 92
-



- 
- A.2 Niveaux d'énergie de parité paire des deux configurations  $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$  de l'ion  $Er^{3+}$ . Les énergies sont données en  $cm^{-1}$  par ordre croissant de  $E_{calc}$ . Pour chaque niveau sont donnés, la configuration, le moment cinétique total  $J$ , la valeur de l'énergie expérimentale lorsqu'elle est disponible, ainsi que les incertitudes correspondantes entre parenthèses, le symbole (\*) pour un niveau préalablement déterminé dans [22], la valeur de l'énergie calculée  $E_{calc}$  résultant du Code Cowan correspondant aux paramètres donnés dans IV.1,  $\Delta E = E_{exp} - E_{calc}$ ,  $N_{cl}$ , le nombre total de transitions impliquant la détermination expérimentale du niveau, le facteur de Landé calculé et les premières composantes de la fonction propre et leurs pourcentages correspondants au couplage LS et JJ. . . . . 99
- B.1 Raies identifiées de Er IV.  $\lambda_{obs}$  Longueurs d'onde observées,  $\lambda_{Ritz}$  sont issues des niveaux d'énergie optimisés avec  $\lambda_{Ritz} = (E_{upper} - E_{lower})^{-1}$ .  $\Delta\lambda = \lambda_{exp} - \lambda_{Ritz}$ ; Les intensités  $I$  en unités arbitraires (PP : plaques photographique, IP : image plates); Probabilités de transition calculées  $gA$  de ce travail (TW) et de Meftah et al 2016 [22],  $g$  est le poids statistique du niveau supérieur,  $A$  est le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée. CF (cancellation factor) facteur d'annulation, il est défini par l'équation (14.107), p. 432 in [23]. Toutes les énergies et les nombres d'onde sont en  $cm^{-1}$ . La Col. 2 montre les incertitudes des longueurs d'onde expérimentales introduites dans le code LOPT [59] pour l'optimisation des valeurs des énergies. La Col. 11 montre les incertitudes des longueurs d'onde de Ritz estimées par le code LOPT. . . . . 122
-



# **Introduction Générale**





# Introduction Générale

L'étude des lanthanides (ou terres rares), a pris beaucoup d'ampleur ces dernières années, essentiellement en raison de leurs propriétés optiques. Les lanthanides sont utilisés dans un très grand nombre de domaines, à savoir, dans le magnétisme, le domaine médical, l'optique et l'opto-électronique, mais aussi en astrophysique. Ces éléments au nombre de 15, appartenant à la première période du bloc  $f$  du tableau périodique des éléments, comme on peut le voir sur la Figure 1, allant du Lanthane ( $Z=57$ ) au Lutécium ( $Z=71$ ). Hormis le Lanthane  $La$ , ils adoptent majoritairement la configuration fondamentale  $[Xe]4f^n6s^2$ . La perte d'un électron  $4f$  et deux électrons  $6s$  conduit à un ion trivalent de lanthanides qui est le degré d'oxydation le plus stable de toute la série. C'est à ces ions de lanthanides  $Ln^{3+}$  dont les spectres sont notés  $LnIV$  que nous nous intéresserons tout le long de ce travail.

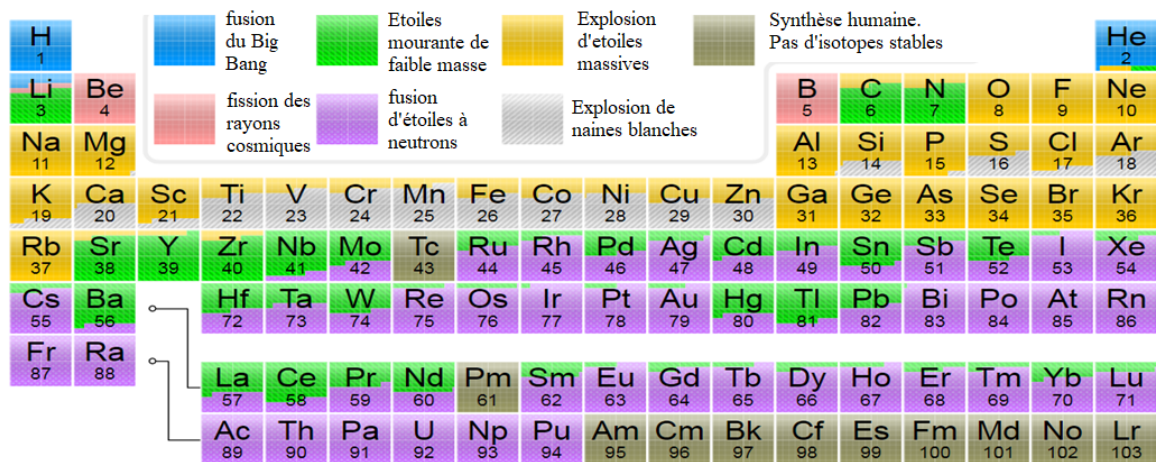


FIGURE 1 – Tableau périodique des éléments et leurs origines. Les couleurs indiquant les différents milieux astrophysiques où les éléments sont présents.

Dans des domaines tels que le magnétisme, ces éléments sont utilisés pour la fabrication d'aimants permanents, car ils augmentent la force d'aimantation par rapport aux éléments traditionnels à base de ferrite et permettant la miniaturisation des objets

dont les quel ils sont insérés. Ils entrent aussi dans la fabrication de supraconducteurs. En 1986, Johannes Bednorz et Karl Müller obtiennent le prix Nobel de physique (1987) pour la découverte des supraconducteurs à la température de  $-238,15\text{ °C}$  en ajoutant du lanthane à une structure pérovskite à base de cuivre[1]. Cette propriété est une conséquence directe de la faible extension radiale des orbitales  $4f$  mais aussi du fait que celles-ci sont protégées des perturbations extérieures par les couches externes à savoir  $5s^25p^6$  [2].

Dans les applications médicales, les lanthanides sont utilisés comme produits de contrastes construits à partir de leurs cations, se présentant le plus souvent sous la forme de complexes en raison de la toxicité des ions libres pour l'organisme, en particulier dans le cas du gadolinium  $Gd^{+3}$ . Mais ils sont utilisés dans une technique bio analytique basée sur l'utilisation des interactions anticorps-antigène où soit l'anticorps ou l'antigène peuvent être « marqués » par greffage sur un complexe lanthanide luminescent ou radioactif, à savoir  $Er^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$  et  $Ho^{3+}$ [3]. Les lasers à base de lanthanides, par exemple le laser  $Er :YAG$ , est utilisé en parodontologie pour les chirurgies et pour les traitements d'assainissement en dentisterie [4].

Les propriétés optiques des terres rares sont une partie intégrante des technologies les plus modernes des télécommunications et de la reproduction des images et de leur transmission. Les complexes luminescents de lanthanides font l'objet d'une recherche importante dans le domaine de l'opto-électronique du fait de leur couleur pure et de leurs rendements quantiques importants[5]. Dans la mesure où les transitions  $f \rightarrow f$  sont interdites, la relaxation d'un électron excité vers son état fondamental est plutôt lente, ce qui rend les lanthanides intéressants pour réaliser des lasers, puisque l'inversion de population est alors aisément réalisable. Les amplificateurs optiques à fibres dopées à l'erbium  $Er$  sont des composants importants dans les systèmes de télécommunications à fibres optiques [6].

En astrophysique, les sources lumineuses sont nombreuses et variées : étoiles, supernova ...etc. Comme on peut le voir sur la Figure 1, les lanthanides sont présents dans les atmosphères stellaires, en particulier des étoiles en extinction de masse faible, ou bien, dans la matière éjectée par la fusion d'étoiles à neutrons. Leur spectre peut contenir une composante continue, mais aussi présenter des raies d'absorption ou des raies d'émission comme pour les étoiles chimiquement particulières [7]. L'étude de ces raies et de leurs profils spectrales nous renseigne sur les conditions physiques et la composition chimiques des milieux.

L'utilisation d'ions de terres rares dans les différents domaines passe avant tout par la connaissance de leurs propriétés intrinsèques comme ions libres. La connaissance des

---

énergies des niveaux des configurations est déterminante pour conforter les probabilités de transition et les intensités des raies émises par ces ions. En effet, cette connaissance est aussi déterminante qu'elle l'a été pour la conception par exemple du laser Nd :YAG [8]. Ainsi, déterminer les énergies de niveaux et les nombres quantiques associés est une étape cruciale pour une telle étude.

Dans ce travail, nous allons exposer les différentes étapes de l'étude des propriétés radiatives d'ions lourds et notamment des ions de lanthanides trivalents et plus particulièrement les ions  $Er^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$  et  $Ho^{3+}$ . Le spectre d'émission de l'ion trivalent  $Er^{3+}$  a reçu une attention particulière lorsque l'oxyde d'erbium fut un candidat pour les systèmes de fuselage de réacteurs à fusion [9] et plus récemment pour leurs possibles applications pour l'information quantique en dopant des matrices de silicium [10].

Les premières recherches sur les ions d'erbium ont été initiées par N. Spector dans les années 70 où il étudiait le spectre de l'ion  $Er^{2+}$  ( $ErIII$ ) produit en laboratoire [11]. Puis ce fut le tour de J-F Wyart & al. [12] de s'intéresser aux spectres une fois chargé de lanthanides. Ces études ont ouvert la voie à des recherches similaires pour une analyse complète en laboratoire des ions d'erbium [13, 14] basée sur la liste de raies de Becher [15], en particulier, après l'observation de raies d'  $ErIII$  dans des étoiles chimiquement particulières.

Le spectre de l'ion libre  $Er^{3+}$  ( $ErIV$ ) a fait l'objet d'une thèse de doctorat par Carter [16] à l'université Johns Hopkins en 1966, mais au terme de cette thèse, ces travaux n'aboutissent pas à des résultats concluants. En se basant sur des considérations semi-empiriques des propriétés thermodynamiques des lanthanides, L. Brewer [17, 18] prédit une différence d'énergie de  $75000 \pm 3000 \text{ cm}^{-1}$  entre les niveaux les plus bas des configurations  $4f^{11}$  et  $4f^{10}5d$ . La compilation critique de Martin, Zalubas et Hangan [19] ne retient aucun niveau d'énergie d'  $ErIV$  donnés par [16]. En 2015, une étude théorique sur les niveaux d'énergie de l'ion d'  $Er^{3+}$  fut menée par Radzute & al. [20]. avec la méthode multiconfigurationnelle Dirac-Hatree-Fock (MCDHF). En l'absence de niveaux d'énergie expérimentaux corrects de la configuration fondamentale  $4f^{11}$ , les niveaux théoriques ont été comparés avec les valeurs erronées de [16] et les valeurs théoriques des ions dans des cristaux de [19]. Par conséquent, une révision complète de l'analyse du spectre d'émission de l'ion  $Er^{3+}$  fut entamée par notre équipe de collaboration. Les résultats de l'étude préliminaire sur le spectre Er IV, ont été présentés à la conférence APIP en 2016 [21] puis ils ont fait l'objet d'une publication [22] décrivant quelques caractéristiques du spectre enregistré dans la région spectrale allant de 705 à 2460 Å, où les configurations  $4f^{11}$ ,  $4f^{10}6p$ ,  $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$  ont été situées en énergie. Cette étude a abouti à l'identification de 591 raies spectrales dans la région 850-2276 Å, soit environ

6% du spectre expérimental observé, et à la détermination de 120 niveaux d'énergie des différentes parités. Le travail que nous avons entrepris consiste en l'extension de l'analyse de ce spectre en nous basant sur la conclusion de [22], i.e., en cherchant des niveaux d'énergie de grandes valeurs du moment  $J$  connectés avec très peu de transitions très intenses ou bien des niveaux de faibles valeurs de  $J$  connectés avec plusieurs transitions de faibles intensités.

Le manuscrit est structuré en trois parties majeures, lesquelles sont subdivisées en chapitres, qui suivent les étapes de l'étude des propriétés radiatives en général. Nous commençons par une introduction générale, nous enchaînons avec la partie expérimentale : le premier chapitre est dédié à la méthode de production en laboratoire de spectres atomiques en développant les différents composants d'un spectrographe (sources, réseaux et systèmes d'enregistrement) et nous nous focalisons sur le spectrographe de 10.7 m de l'observatoire de Paris-Meudon avec lequel nous avons produit les spectres utilisés dans notre étude. Dans la continuité, dans deuxième chapitre, nous allons passer à la méthode de mesure et de dépouillement des spectres d'émission de laboratoire, en parlant des différents scanners de numérisation et des logiciels de dépouillement. Puis nous exposerons la méthode de calibration et le programme de mesure des longueurs d'ondes.

La deuxième partie composée du chapitre III, traite l'aspect théorique de la spectroscopie atomique, en développant le formalisme utilisé durant nos recherches, à savoir la méthode paramétrique de Racah Slater pour l'étude des systèmes polyélectronique en passant par l'approximation du champ central. Cette méthode a été implémentée dans la série de codes de Cowan [23] pour le calcul des différentes grandeurs physiques recherchées. La fin du chapitre est consacrée aux principaux programmes de recherche des niveaux d'énergies qui s'appuient sur le principe de combinaison de Ritz et le Programme LOPT pour l'optimisation des niveaux des longueurs d'onde. Dans la dernière partie, nous exposerons nos résultats pour les différents ions étudiés. le chapitre IV est dédié exclusivement à l'étude des configurations à cœur plein ( $4f^{11}$ ,  $4f^{10}6p$ ,  $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$ ) de l'ion libre  $Er^{3+}$  où nous parlerons de l'analyse des niveaux déterminés et des raies identifiées dans notre étude donnant lieu à un jeu de paramètres définissant de façon plus précise les niveaux inconnus. Dans le chapitre V, dédié aux ions  $Dy^{3+}$  et  $Ho^{3+}$ , nous faisons une étude théorique des probabilités de transition en utilisant les résultats obtenues dans les cas des ions de la même séquence isoélectrique ou isoionique. Nous terminerons notre manuscrit par une conclusion générale qui résume les principaux résultats de nos travaux et les perspectives de recherche à venir.

---



## Première partie

# Méthode de production expérimentale et de mesure de spectres atomiques

---



# Chapitre I

## Méthode expérimentale de production de spectres d'émissions en laboratoire

### I.1 Introduction

L'étude des spectres atomiques passe nécessairement par leurs productions en laboratoire. Les spectres des ions de lanthanide trivalents, c'est-à-dire modérément chargés, sont produits dans l'ultraviolet sous vide (VUV) couvrant une gamme spectrale allant de 200 à 2000 Å.

Afin d'obtenir un spectre d'émission, il faut porter l'ion qui se trouve dans son état électronique fondamental vers des états électroniques d'énergies supérieures (ou états excités), et cela, par les processus collisionnels mis en jeu dans le plasma formé dans la source. En se retrouvant dans un état électronique excité, l'ion se désexcite vers un niveau d'énergie inférieur en émettant de la lumière. Ce spectre de lumière, spécifique à chaque ion, est composé d'un très grand nombre de raies qui sont enregistrées par un détecteur. L'analyse du spectre à haute résolution spectrale nous permettra d'identifier des raies d'émissions de l'ion étudié et de remonter à ses niveaux d'énergie.

Dans ce chapitre, nous allons présenter les différents dispositifs expérimentaux utilisés pour la production de spectres atomiques, en se focalisant sur le spectrographe de 10.7 m de l'Observatoire de Paris-Meudon qui nous a permis d'enregistrer les spectres d'émissions de haute résolution dans l'Ultraviolet du Vide (VUV) pour les ions d' $Er^{3+}$  et du  $Dy^{3+}$ .

Le domaine VUV concerne les rayonnements de longueurs d'onde inférieures à 2000 Å qui ne se propagent que dans le vide. Les matériaux transparents dans le domaine visible ne le sont pas dans le VUV en général, sauf pour le quartz au-dessus de 1600

---

Å , le  $MgF_2$  au-dessus de 1150 Å et le  $LiF$  au-dessus de 1050 Å. Pour cela nous faisons appel à des réseaux concaves de diffraction par réflexion et non aux systèmes optiques.

## I.2 Spectroscopie de laboratoire

Pour produire des spectres au laboratoire, nous avons besoin de dispositifs expérimentaux nous permettent la dispersion en longueurs d'onde de la lumière. À l'exception de la spectrographie laser, l'équipement nécessaire pour toute mesure spectroscopique est composée de trois éléments, *la source de radiation, le spectromètre* en lui-même et *le détecteur*. Dans cette section, on décrira quelques types de sources lumineuses utilisées en spectroscopie de laboratoire, puis on fera un aperçu des deux spectromètres, et on terminera la description des différents types de détecteurs utilisés dans notre recherche, à savoir, les plaques photographiques (PP) et les écrans phosphore photostimulables (IP).

Dans nos travaux, nous avons utilisé une source d'émission à étincelles glissantes ou initiées sous vide et un spectromètre à réseau holographique concave. Ce dispositif est parfaitement adapté pour correspondre au degré d'excitation des ions étudiés et pour l'acquisition de nos spectres. On développera tout cela en détails dans la suite de ce chapitre.

### I.2.1 Les sources lumineuses

Généralement, les sources lumineuses peuvent être classées comme des sources discrètes ou continues en longueur d'onde. En effet, les solides et les liquides portés à incandescence peuvent émettre un spectre continu dont le maximum de la distribution d'intensité est déterminée par la Loi de Planck dont les caractéristiques ne dépendent que de la température et non de la nature de l'émetteur. Cette émission a lieu surtout dans le domaine du visible et de l'infrarouge. Par exemple, si l'on produit une décharge dans un tube d'hydrogène caractérisé par une pression de l'ordre du *mmHg*, on obtient un noircissement continu sur une plaque photographique dans la gamme allant de 2000 et 4000 Å.

Dans la plupart des cas, les gaz donneront lieu à des spectres discrets, à savoir, un spectre de bande ou un spectre de raies selon que les émetteurs soient des molécules ou des atomes. Pour obtenir des spectres VUV de lanthanides plusieurs fois ionisés, les étincelles produites entre deux électrodes placées sous vide ont été le moyen utilisé. Selon l'étude que l'on fait, le choix de la source est très important, car il va conditionner

---

les paramètres physiques de l'expérience (température, degrés d'ionisation, pression, domaine spectral...).

Dans les paragraphes suivants, nous allons décrire brièvement un certain nombre de sources lumineuses utilisées en spectroscopie atomique.

### I.2.1.1 Sources lumineuses d'émission de laboratoire

L'obtention de spectres d'éléments plusieurs fois ionisés nécessite la création d'un plasma suffisamment énergétique. En admettant que les ionisations se font de manière successive, plusieurs critères pourraient être déterminants pour la classification des différents types de sources lumineuses pour la spectroscopie d'émission. D'une part, selon leurs utilisations (analyse spectrochimique, recherche de la structure moléculaire ou atomique, détermination des probabilités de transition), d'autre part, pour leur condition physique (plasma, faisceaux d'atomes ou d'ions) ou encore selon le mécanisme d'excitation (décharge électrique ou collision thermique) et l'état de charge (neutre, faiblement ou très ionisé). Au lieu d'utiliser un tel schéma de classification, on énumère un certain nombre de sources et on décrit leurs propriétés caractéristiques. Nous nous focaliserons sur celle utilisée dans notre recherche à savoir : *la source d'émission à étincelles sous vide*.

#### a) Les Étincelles sous vide

Ces sources furent développées par Millikan et Sawyer dès 1918. Elles nécessitaient une tension élevée pour franchir un espace isolant (gap) situé entre les électrodes. Pour les étincelles utilisées dans l'analyse spectroscopique des matériaux, un générateur peut être connecté directement à travers l'éclateur, pour charger un condensateur. L'énergie stockée est déchargée à travers l'intervalle isolant. Plusieurs degrés d'ionisation peuvent être atteints, à la fois dans les atomes des matériaux formant les électrodes de l'étincelle et dans le gaz à travers lequel elle passe. Cependant, si l'on opère dans l'air, le spectre d'étincelle contient toujours des raies d'oxygène et d'azote.

Traditionnellement, les sources à étincelles chaudes ou *sous vide* sont utilisées pour produire des spectres d'ions très fortement chargés à partir d'un système constitué de deux électrodes placées sous un vide poussé ( $10^{-5} - 10^{-6}$  torr) et séparées d'un espacement de quelques mm. Les électrodes sont connectées à un condensateur (0.1 à 0.5  $\mu F$ ) qui est chargé par une alimentation électrique à haute tension. Un court-circuit se produit dans l'éclateur généralement entre 50-100 kV produisant un courant dans l'étincelle pouvant atteindre des valeurs comprises

---

entre 50-100 kA. Le condensateur est rechargé davantage et la procédure se répète avec une fréquence limitée qui dépend du courant de recharge fourni par l'alimentation. Des degrés d'ionisation de 10 à 20 peuvent être produits par ce type d'étincelle. On peut alors contrôler le degré d'ionisation en faisant varier l'inductance du circuit et donc le courant de crête.

Dans notre recherche, nous étudions des ions trivalents (trois fois ionisés). Ce qui voudrait dire que les sources à étincelles traditionnelles ne sont pas adaptées, puisque celles-ci fournissent des degrés d'ionisations plus élevés. Pour cela, nous avons utilisé des variantes de ce type de source appelées **sources à étincelle glissante** (ou *sliding spark source*) dont le schéma de principe et le circuit électrique correspondant sont donnés ci-dessous Figure I.1.

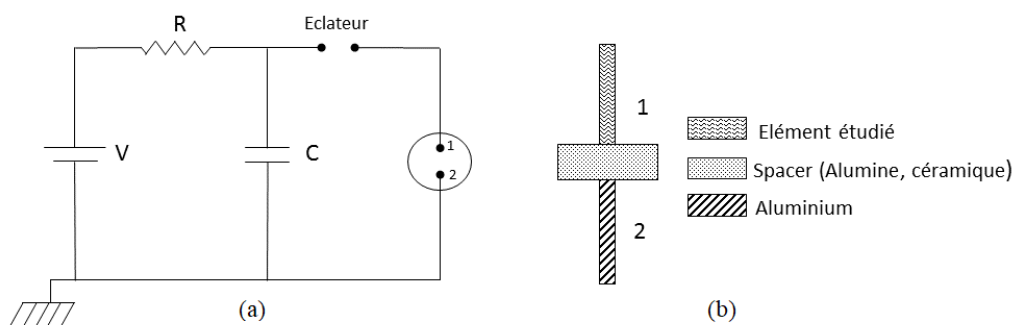


FIGURE I.1 – Circuit électrique (a) et schéma de principe (b) de la source à étincelle glissante

Dans la source à étincelle glissante, les électrodes s'appuient de part et d'autre sur un disque d'espacement "Spacer" en alumine ou en céramique ( $Al_2O_3$  ou  $SiO_2$ ) par exemple, et comportant une fente suivant le rayon, comme on peut le voir sur la Figure I.2.

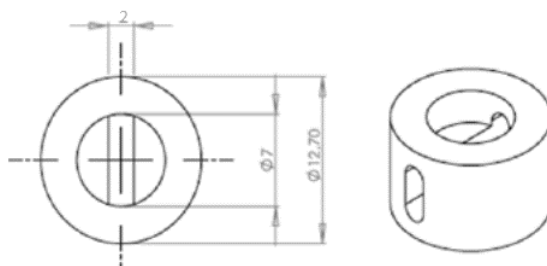


FIGURE I.2 – Spacer en Alumine séparant l'anode et la cathode

Des particules métalliques arrachées à l'anode se déposent sur les parois de la fente et servent alors à transporter les étincelles qui "glissent" ainsi tout le long. Cette source convient par sa simplicité et sa bonne reproductibilité, mais aussi, car elle nous permet de produire des spectres d'ions dont les degrés d'ionisation sont entre 2 et 5, idéal pour notre étude ( $Er^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$ ,  $Ho^{3+}$ ).

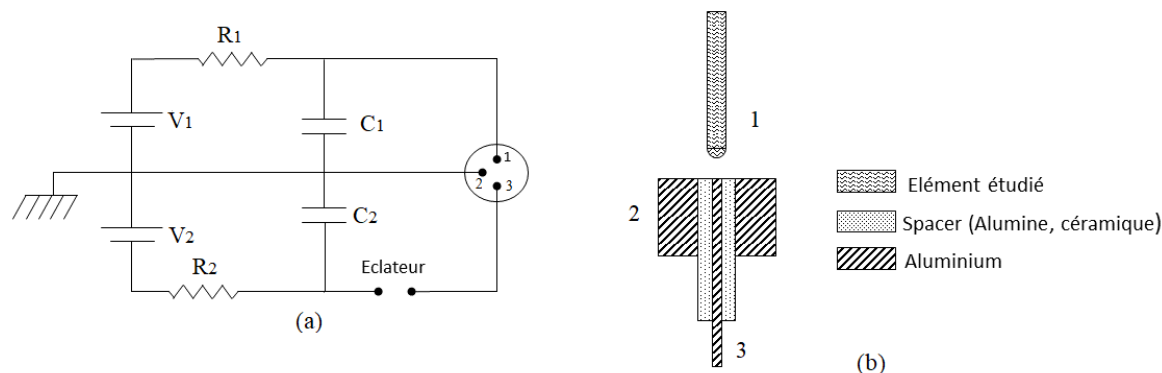


FIGURE I.3 – Circuit électrique (a) et schéma de principe (b) de la source à étincelle initiée

Dans ce type d'étincelles, l'intensité de courant est relativement plus faible que dans une étincelle sous vide simple et l'élargissement Stark des raies dû aux ions environnants est fortement diminué. Néanmoins, le spectre contiendra des raies d'impuretés qui deviennent de plus en plus intenses et nombreuses dès que l'on augmente l'énergie de la source pour atteindre des degrés d'ionisation plus importants ou pour observer des transitions entre configurations plus excitées. Le dispositif le plus adéquat pour l'étude de la lumière émise par intermittence par cette source est un spectromètre muni de plaques de détection permettant les enregistrements des raies sur des temps de pose suffisants.

## b) Autres sources d'émission

**Cas particulier de décharge dans un gaz :** Un bombardement par ions positifs provoque l'échauffement de la cathode et permettant d'atteindre ainsi de hautes densités de courant ( $1kV$  et plus). Cela produit une importante émission d'électrons et une chute de la différence de potentiel (DDP) entre la cathode et la colonne positive. On se retrouve alors dans *le régime d'arc*. Cette source peu coûteuse et d'un emploi commode a trouvé de multiples applications jadis pour la détermination de probabilités de transition atomiques. Il existe une grande

variété d'arcs émettant à partir du plasma produit entre les électrodes. Les mi-lieux émetteurs sont généralement des gaz (xénon, hydrogène) ou des vapeurs métalliques sous forme libre. Les premiers arcs produits comportaient des gaz à faible pression et émettaient un spectre de raies fines. Puis, viennent des arcs dont les gaz sont sous haute pression afin d'améliorer la luminescence et produire des faisceaux lumineux polychromatiques. La température du plasma produit dépasse alors couramment 10000 K. Le principal inconvénient des arcs traditionnels résulte du fait que l'équilibre thermodynamique n'est pas réalisé.

**Les plasmas produits par Laser :** Une impulsion de haute énergie produite par un laser, à rubis ou à Néodyme à commutation Q par exemple, focalisée sur une cible solide provoque l'émission d'ions et d'électrons depuis la surface. Après l'émission initiale, l'énergie de l'impulsion électromagnétique est absorbée par les électrons libres en augmentant la température du plasma et augmentant, en conséquence, l'ionisation par collision électron-ion. À une énergie de quelques joules, la température peut être comprise entre 100 eV et 1 keV, et une densité électronique de l'ordre de  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  et des degrés d'ionisations allant jusqu'à environ 20 peuvent alors être atteints. Des spectres d'atomes de plus de 50 fois ionisés ont été enregistrés dans de grands systèmes laser à faisceaux multiples avec une énergie de faisceau de plusieurs centaines de joules [24]. La production la plus efficace de spectres d'ions hautement chargés est obtenue avec des durées d'impulsion laser de 0.1 à 10 ns. Afin d'obtenir un spectre de raies fortes avec un laser de haute puissance ayant une durée d'impulsion de l'ordre du femto-seconde, une impulsion plus faible peut être utilisée pour produire le plasma, qui est ensuite chauffé par l'impulsion courte et de haute puissance.

**Les décharges lumineuses :** Les gaz et les vapeurs sont excités de manière pratique dans la colonne positive de la décharge luminescente, ou dans une décharge sans électrode, à des pressions de quelques torrs. Les spectres moléculaires, atomiques et ioniques peuvent tous être excités de cette manière. L'excitation se fait par bombardement d'électrons sur toute la longueur de la colonne positive, qui peut s'étendre sur un mètre de longueur environ si c'est nécessaire. Une décharge de ce type doit être exécutée à partir d'une source à haute tension avec une résistance tampon pour la stabiliser et limiter le courant de l'ordre d'un ampère. Le schéma d'un tube à décharge cathodique (faible pression), fonctionnant dans le régime de décharge normale, est représenté sur la Figure I.4.

---



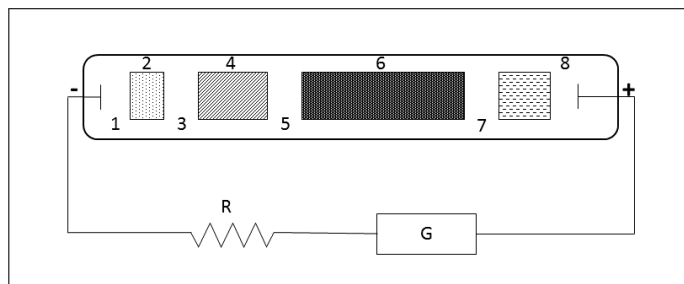


FIGURE I.4 – Schéma d’un tube à décharge cathodique. (G : Générateur ; R : Résistance tampon ; 1 : Espace d’Aston ; 2 : Émissions cathodiques ; 3 et 8 : Espace sombre ; 4 : Émissions négatives ; 5 : Espace de Faraday ; 6 : Colonne positive ; 7 : Émissions anodiques.)

Un autre type de décharge lumineuse, *la cathode creuse* [25], est utilisée au lieu de la colonne positive. Les cathodes creuses furent employées par Paschen dès 1916, notamment pour les travaux de classification spectrale ou les études des structures hyperfines. Cette cathode est sous forme d’un cylindre creux de quelques *mm* de diamètre intérieur. La pression appropriée de l’ordre de quelques *mbars* est définie par la loi de Paschen, mise en place en 1889. Elle donne la tension nécessaire pour démarrer une décharge ou arc électrique entre deux électrodes dans un gaz en fonction de la pression et de la longueur de la fente, Paschen a constaté que la tension de claquage  $V_B$  est donnée par l’équation suivante :

$$V_B = \frac{Bpd}{\ln(Apd) - \ln[\ln(1 + \frac{1}{\gamma_{se}})]} \quad (\text{I.1})$$

avec  $A$  une constante de saturation de l’ionisation,  $B$  est en relation avec les énergies d’excitation et d’ionisation qui dépendent du gaz,  $p$  la pression et  $d$  la distance entre les électrodes.

La lumière émise au niveau de la cathode remplit complètement la partie creuse, faisant office d’une source lumineuse intense. Un gaz inerte ou un mélange gazeux d’une pression allant de 1 – 5 *torrs* assure la décharge et permet de faire varier la pulvérisation du métal et son excitation [26] pour que des spectres d’atomes neutres ou d’ions une fois chargés, et dans certains cas, deux fois ionisés peuvent être observés. Le voltage entre l’anode et la cathode peut varier entre 100V et une centaine de volts et cela dépend du matériau de la cathode, du gaz vecteur et de sa pression. La cathode creuse peut également fonctionner comme une décharge condensée. Un condensateur d’environ 10 $\mu$ F est chargé pour produire une tension de l’ordre de 500V et se décharge rapidement dans le creux

de la cathode au moyen d'un commutateur mécanique ou électrique. Le pic de courant peu atteindre plusieurs centaines d'ampères. De cette façon, l'excitation des spectres ioniques est renforcée, plus particulièrement vers les hautes énergies. Mais des états de charge plus élevés qu'en mode de décharge continue ne sont généralement pas observés[27].

Une autre variante de décharge lumineuse est *la décharge de Penning*[28]. Elle produit le spectre d'émission du matériau pulvérisé à partir de la cathode, mais dans ce cas, un champ magnétique axial est appliqué. La pression du gaz vecteur peut être inférieure de deux ordres de grandeur celle d'une décharge lumineuse standard, car les électrons qui tournent en spirale autour des lignes de champ magnétiques ont un trajet beaucoup plus long à travers le gaz. Cette décharge permet de produire des spectres d'atomes plusieurs fois ionisés.

## I.2.2 Les spectromètres

Les spectromètres (ou spectrographes) sont des éléments incontournables dans les dispositifs expérimentaux de production de spectres atomiques. Les techniques d'enregistrement de spectres dans l'ultraviolet lointain sont limitées essentiellement par l'opacité des matériaux solides et de l'air. En effet, en dessous de 2000 Å, le coefficient d'absorption de l'air composé essentiellement de  $O_2$  et  $N_2$ , impose l'utilisation de spectrographe fonctionnant sous vide. On peut classer les spectromètres en deux catégories principales : les spectromètres interférométriques (Fabry-Pérot ou à transformée de Fourier), qui, pour distinguer les longueurs d'onde, ils imposent au signal non dispersé une modulation dépendante de celles-ci et les spectromètres dispersifs (prisme ou à réseau), qui font propager les longueurs d'onde dans l'espace. Dans cette section, nous discuterons le spectromètre à transformée de Fourier et à réseau. Ce dernier dispositif est celui utilisé à l'*Observatoire de Paris-Meudon* où nous avons produit nos spectres. La même technique est utilisée au *NIST* (National Institute of Standards and Technology) du Maryland aux États-Unis.

### I.2.2.1 Spectromètre à Réseau

Un spectromètre à réseau est composé d'un réseau de diffraction doté d'un grand nombre de « rainures » rapprochées et à des distances égales sur une surface plane ou concave. Celles-ci peuvent être générées mécaniquement sur la surface ou générées optiquement puis gravées chimiquement avec un revêtement convenablement préparé comme dans un réseau holographique. Contrairement aux réseaux plans, dans

---

les concaves, les rainures sont réglées sur un miroir concave vierge, et le réseau agit comme un élément dispersif et focalisateur en même temps. Dans la théorie des réseaux concaves, on peut montrer que la fente, le réseau et le récepteur doivent être situés sur le même cercle appelé *cercle de Rowland*. Ce cercle est tangent au réseau et a un diamètre égal au rayon de courbure du réseau comme on peut le voir sur la Figure I.5.

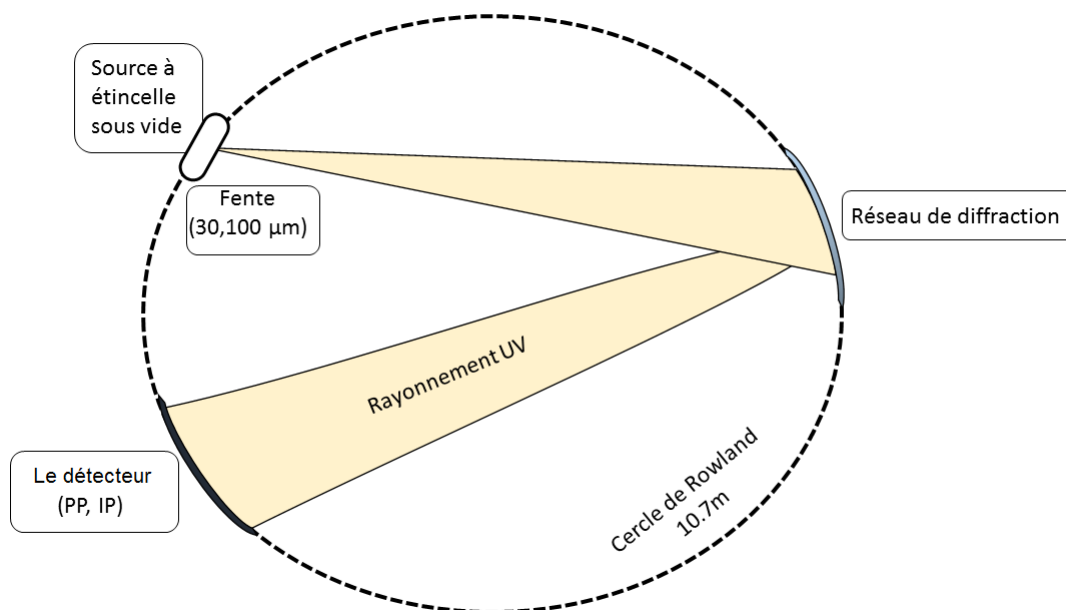


FIGURE I.5 – Géométrie du *Cercle de Rowland* de 10.7 m du spectromètre UV sous vide de l’Observatoire de Paris-Meudon.

Dans notre recherche, nous avons utilisé le spectromètre de l’Observatoire de Paris-Meudon Figure I.6 pour produire des spectres d’émission VUV de  $Er^{3+}$  et  $Dy^{3+}$ . Cet instrument est actuellement unique en Europe. Il est équipé de deux pompes turbomoléculaires qui permettent d’atteindre un vide de  $10^6 torr$  et est doté d’un réseau holographique concave de 3600 traits par millimètre avec un rayon de courbure de 10.7m. Une fente de  $30\mu m$  est souvent utilisée, ce qui correspond à un pouvoir de résolution égal à 150000. La dispersion linéaire dans le plan focal du réseau est de  $0.25\text{\AA}/mm$  au premier ordre.

Cet instrument reste incontournable et incomparable, car il permet d’une part, d’étudier en émission dans l’ultraviolet sous vide jusqu’à  $200\text{\AA}$  avec des sources pulsées, et d’autre part, d’enregistrer à haute résolution en une seule exposition un intervalle spectral de  $240\text{\AA}$  contenant un grand nombre de raies. Un autre spectrographe de ce type existe au NIST avec une dispersion linéaire dans le plan focal de  $0.78\text{\AA}/mm$ ,



FIGURE I.6 – Spectrographe de 10.7 m UV sous vide de l'Observatoire de Paris-Meudon.

c'est-à-dire environ trois fois plus grande que celle de l'instrument de l'Observatoire de Paris-Meudon.

### I.2.2.2 Spectromètre à Transformée de Fourier

La spectroscopie par transformée de Fourier (STF) est une technique qui permet de mesurer un spectre d'absorption, de diffusion, ou d'émission d'un solide, d'un liquide ou d'un gaz. Comme son nom l'indique, elle exploite le concept d'espace de Fourier. Si d'un point de vue technique, elle est moins intuitive, elle offre deux avantages importants comparativement aux méthodes dispersives : l'avantage de Fellgett (amélioration du rapport signal sur bruit)[29] et de Jacquinot (permettent de mesurer rapidement des spectres avec une excellente résolution). La spectroscopie par transformée de Fourier est la technique de choix pour mesurer un spectre infrarouge, de l'infrarouge lointain ( $100\text{cm}^{-1}$ ) jusqu'à environ  $10000\text{cm}^{-1}$ . Ces avantages comparativement aux méthodes dispersives, comme les spectromètres à réseau, sont moins évidents à des longueurs d'onde de moins de  $\lambda = 1\mu\text{m}$  [30]. De façon générale, la STF est très utilisée pour l'étude des excitations de basses et moyennes énergies telles que les excitations vibrationnelles et rotationnelles.

Le principe de fonctionnement de ce spectromètre a très peu évolué depuis son invention par Michelson. La figure ci-dessous représente l'interféromètre composé d'une

lame séparatrice, d'un miroir fixe et d'un miroir mobile dont le déplacement est précisément contrôlé. Pour en faire un spectromètre, on place une source dont l'émission est collimatée et dirigée vers le port d'entrée de l'interféromètre. Un détecteur est placé au port de sortie.

Comme on peut le voir sur la Figure I.7, l'onde issue de la source lumineuse (stable et non pulsée) est décomposée comme suit :

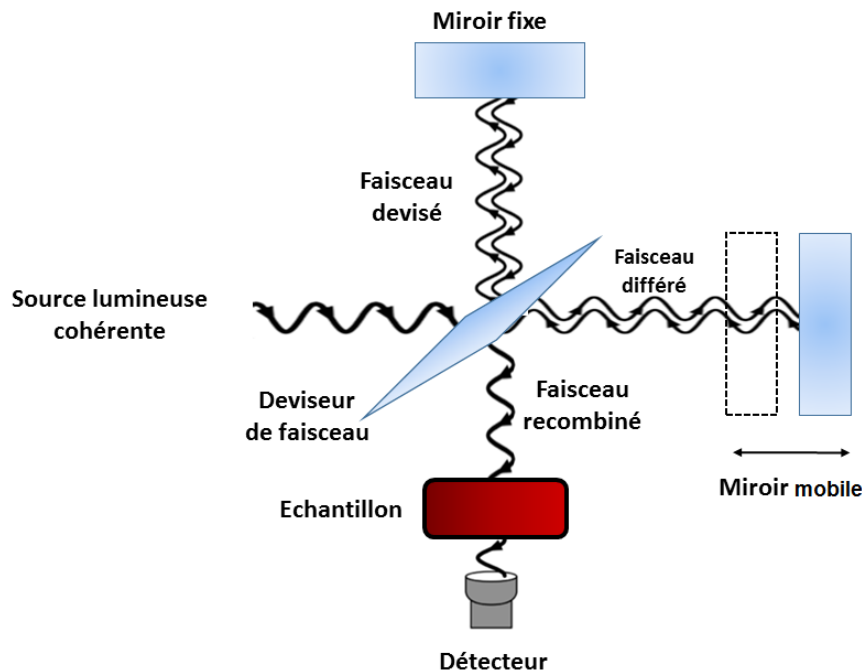


FIGURE I.7 – Représentation schématique de l'interféromètre de Michelson.

1. L'onde est réfléchiée par la lame, puis par le miroir fixe, et de nouveau par la lame et sort par l'entrée de l'interféromètre.
2. L'onde est réfléchiée par la lame, puis par le miroir fixe. Elle est transmise par la lame et se dirige vers le détecteur.
3. L'onde est transmise par la lame et est réfléchiée par le miroir Mobile, puis par la lame. Elle se dirige vers le détecteur.
4. L'onde est transmise par la lame et est réfléchiée par le miroir Mobile, puis elle est transmise. Elle quitte par l'entrée de l'interféromètre.

Si les deux miroirs (fixe et mobile) sont exactement à la même distance par rapport au diviseur de faisceau, la phase relative entre les deux ondes est nulle. Ainsi, les deux ondes sont en phase et l'interférence est constructive, d'où l'intensité est maximale. Selon ce que nous voulons avoir comme spectre (absorption, émission, ...) l'échantillon

absorbe ou émet du rayonnement, et en comparant numériquement l'interférogramme avec et sans l'échantillon. Si c'est ce dernier est homogène à une ( $[L]$ ), la Transformée de Fourier (FT) inverse la dimension. Elle est dans l'espace réciproque, homogène à ( $[L^{-1}]$ ), dimension du nombre d'onde. On obtient donc un spectre en nombres (ou longueurs) d'onde et intensité.

Néanmoins, la non-transparence de la lame séparatrice limite l'utilisation du STF dans l'UV, Ce dernier est limité au proche UV. Le seul spectromètre à transformée de Fourier qui descend en longueurs d'onde à  $1400 \text{ \AA}$  utilise une lame en  $MgF_2$  et se trouve à l'Impérial Collège à Londres. Dans le cas de l'étude d'ions moins chargés, on peut utiliser ce genre de spectromètre pour obtenir des données en longueurs d'ondes plus grandes ( $> 2000 \text{ \AA}$ ).

### I.2.3 Les détecteurs

Le troisième composant que tout spectrographe doit avoir sont les détecteurs. Ce dispositif placé en face d'un faisceau lumineux, absorbe la lumière totalement ou partiellement et émet un signal ou garde la trace (image) de la radiation lumineuse. Dans notre travail, on a utilisé des détecteurs dit *sélectifs*, i.e., chaque fois qu'un photon est absorbé, on observe un accroissement de l'énergie d'un seul électron. Cette transformation d'énergie lumineuse en énergie électrique ou chimique est très efficace. Parmi cette catégorie de détecteurs, on peut trouver la Plaque Photographique (PP) et l'écran phosphore photostimulable ou *Image Plate*. Ces détecteurs sont placés à l'autre extrémité du faisceau comme on le voit sur la Figure 1.5 à l'aide d'un porte-plaque prévu pour cela. Ces deux derniers types de détecteurs ont été utilisés dans notre recherche pour l'enregistrement de spectre de lanthanides trois fois ionisé ( $Er^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$ ).

#### I.2.3.1 Les plaques photographiques (PP)

Depuis de longues années, les plaques photographiques (PP) ont joué le rôle de détecteur dans la spectroscopie à réseau VUV, et cela, pour leur bon contraste et leur sensibilité aux rayonnements VUV et XUV. Ces plaques photographiques sont utilisées pour la mesure des longueurs d'onde dans l'ultraviolet sous vide avec une précision de  $\frac{\delta\lambda}{\lambda} \simeq 3.10^6$ . Les intensités des raies sont estimées visuellement à partir du noircissement de la plaque. Elles sont recouvertes d'une couche de gélatine particulièrement mince (un support sur lequel est déposée une émulsion dite photographique) de façon à diminuer l'absorption des rayonnements ultraviolets. Dans notre travail, elles sont de type Short-Wave-Radiation (SWR - Kodak) de dimension  $45 \times 5cm$ . Ces spectres peuvent être

enregistrés simultanément sur deux plaques en une seule exposition, soit un intervalle de 240Å. Le souci majeur de ces plaques est que le domaine où elles ont une réponse linéaire en intensité est restreint, mais aussi, elles ne sont plus fabriquées.

### I.2.3.2 Les écrans phosphore photostimulables ou *Image Plates* (IP)

Les écrans phosphore photostimulables ont remplacé graduellement les anciennes plaques photographiques à l'Observatoire à partir de l'année 2007. Ils sont devenus le remplacement de choix pour l'enregistrement des spectres atomiques. Ils sont caractérisés par leur souplesse puisqu'ils épousent parfaitement le cercle de Rowland et par leur grande sensibilité aux rayons XUV et VUV.

**Composition et processus d'enregistrement des IP :** les IP sont constitués d'une couche protectrice recouvrant une couche active de particules photoluminescentes mélangées dans un liant (la taille des grains est de l'ordre de  $5\mu m$ ), qui est ensuite déposée sur un support opaque de polyéthylène. Les particules photoluminescentes sont constituées de cristaux de fluoro-halogénure de baryum dopé avec une très faible concentration d'ions d'euprium bivalents ( $BaFBr : Eu^{2+}$ ). Les rayonnements UV incidents génèrent dans le cristal dopé une avalanche d'excitons. Les ions d'euprium bivalents jouent le rôle d'activateurs en libérant un électron dans la bande de conduction du cristal ( $Eu^{2+} \rightarrow Eu^{3+}$ ). Ces porteurs de charge vont pour la plupart être piégés dans des sites métastables. La concentration de ces derniers est proportionnelle à l'énergie déposée par les radiations. L'énergie ainsi stockée constitue l'image latente. Après lecture, l'énergie résiduelle contenue dans les sites métastables qui n'ont pas été relaxés par le laser (entre 10 à 50 %) est totalement libérée par photostimulation en exposant l'écran à une lumière blanche intense (typiquement une rangée de tubes néons ou une lampe flash). L'IP ainsi réinitialisé peut-être réutilisé plusieurs fois.

L'avantage le plus intéressant qu'offre ce genre de plaques est leur réponse linéaire en intensité. En effet, les écrans phosphore photostimulables ont une dynamique de l'ordre de  $10^5$ , beaucoup plus importante que celle des PP qui est de l'ordre de  $10^2$  comme on peut le voir sur la Figure I.8.

De plus, leur résolution spatiale est plus élevée par rapport à d'autres systèmes électroniques. Une densité de pixels plus élevée peut être conçue pour répondre à l'objectif du système bien que moins librement que les PP. Le détecteur photostimulable permet de convertir le spectre de rayonnements incidents en un motif optique visible

---



via un processus purement électronique, ce qui rend leur résolution dépendante de celle du système de lecture.

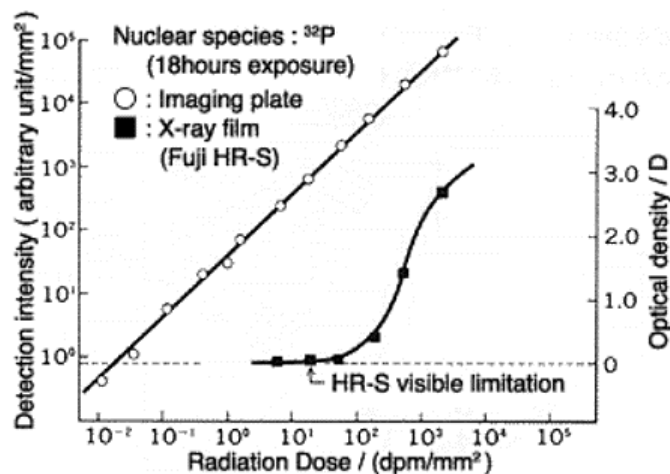


FIGURE I.8 – Comparaison de la réponse en intensité entre IP et PP soumis à un rayonnement d'un échantillon de  $^{32}\text{P}$  de 1.7 MeV.

### I.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la méthode expérimentale de production de spectres d'émission VUV en explicitant les différents types de sources, le spectrographe et les détecteurs d'enregistrement. En conclusion, notre étude de spectres atomiques notamment dans le cas des lanthanides trivalents ( $\text{Er}^{3+}$ ,  $\text{Dy}^{3+}$  et  $\text{Ho}^{3+}$ ) fut réalisée avec une source à étincelles glissantes sous vide qui fournit le degré d'ionisation recherché et le spectrographe VUV à haute résolution de l'Observatoire de Paris-Meudon (unique en Europe). Ce spectrographe sous vide de distance focale de 10.7 m à incidence normale. Il est doté d'un réseau holographique concave de 3600 traits/mm, d'un pouvoir de résolution de 150000 avec une dispersion linéaire de 0.25 Å/mm dans le plan focal. On peut l'équiper de deux différents détecteurs complémentaires : les plaques photographiques avec une précision sur les longueurs d'onde de l'ordre d'environ  $3 \cdot 10^{-6}$  et les écrans phosphore photostimulables avec une réponse linéaire en intensité de l'ordre de  $10^5$ . Dans le chapitre suivant, nous allons montrer comment les enregistrements réalisés avec cette méthode sont mesurés et exploités pour la recherche des niveaux d'énergie des ions.



# Chapitre II

## Méthode de mesure de spectres d'émission de laboratoire

### II.1 Introduction

La spectroscopie atomique s'appuie sur des outils très sophistiqués, aussi bien expérimentaux comme on l'a présenté au chapitre précédent, que théoriques pour la détermination des propriétés spectroscopiques des éléments (chapitre suivant). Cependant, le traitement des enregistrements produits par le spectromètre est un facteur déterminant pour assurer la complémentarité des études expérimentale et théorique de notre travail. Ce traitement consiste en le dépouillement des enregistrements qui permet de passer d'une plaque (IP ou PP) à des données numériques utilisables dans notre recherche. Pour mesurer les longueurs d'onde des raies spectrales enregistrées sur une plaque, il faudrait, en premier lieu, mesurer leurs positions. Pour cela, les enregistrements sont digitalisés et deux scanners de type (*iQsmart*<sup>1</sup> 7500dpi et *STARION FLA – 9000* de Fujifilm) sont utilisés. Ces scanners sont dotés de logiciels de traitement de données (*SPECTRA* et *GFit.10*). Au terme de ce traitement, nous obtenons les listes de raies expérimentales nécessaires à l'analyse des spectres atomiques des lanthanides. Et comme ces spectres sont en général très denses, des logiciels comme les programmes *RECHER* et *IDEN* [31], [32] ont été conçus pour la recherche des niveaux d'énergie des différentes configurations et permettant l'identification des raies observées.

---

## II.2 Scanner de digitalisation

Dans cette section, nous donnerons un aperçu de l'étape de digitalisation des plaques afin de mesurer les positions des raies spectrales ainsi que les logiciels utilisés.

### II.2.1 Scanner optique *iQsmart*<sup>1</sup>

La numérisation des spectres expérimentaux sur plaque photographique (PP) se fait au moyen du scanner *iQsmart*<sup>1</sup> [Figure II.1] présenté ci-dessous.



FIGURE II.1 – Scanner Optique *iQsmart*<sup>1</sup> de 7500dpi

Ce scanner fonctionne sous Windows, il possède une résolution optique de 3200dpi (dot per inch) et de 7500dpi après interpolation. Cela nous permet d'avoir des captures d'image de haute qualité et à grande vitesse quel que soit le format d'origine. La (PP) est numérisée simultanément avec une règle optique de grande précision graduée en millimètre pour toute éventuelle correction de non-linéarité du déplacement de la tête optique. Ce scanner nous fournira à la fin une image numérisée de notre spectre. Celle-ci doit être convertie sous un format spécifique (.spe) pour qu'il soit lu par le programme SPECTRA (voir description ci-dessous) et ainsi avoir la liste des positions en fonction des intensités (X,I).

### II.2.2 Scanner de nouvelle génération STARION FLA-9000 de FUJIFILM

Le scanner d'image de FUJIFILM de type STARION FLA-9000 [Figure II.2] est souvent utilisé en imagerie radio-isotopique, chimiluminescence, fluorescence et tout autre type de numérisation. Il nous a été d'une importance capitale dans nos recherches utilisant l'imagerie au phosphore (IP).

---



FIGURE II.2 – Le scanner STARION FLA-9000 de FUJIFILM.

**Mécanismes de lecture du scanner :** Le scanner équipé d'un laser *He/Ne* de longueur d'onde précise ( $\approx 632nm$ ) qui balaye la surface de la plaque et réalise la lecture de l'enregistrement [Figure II.3]. La plupart des électrons ainsi photostimulés dans l'IP sont libérés de leurs pièges et se recombinent en émettant un signal de luminescence. La lumière est guidée vers un tube photomultiplicateur pour être à nouveau transformée en électrons. Le signal électrique est ensuite amplifié et numérisé par des composants électroniques. La matrice image obtenue ainsi, avec une taille minimale des pixels de l'ordre de 10 à 50  $\mu m$  est encodée sous le format *prof.txt* ou autre pour pouvoir être lue par un logiciel spécifique.

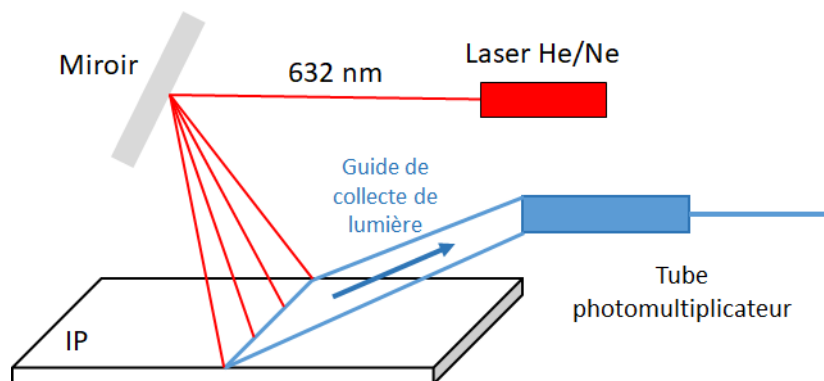


FIGURE II.3 – principe de lecture de l'IP par le scanner STARION FLA-9000 de FUJIFILM.

Ce scanner est fourni avec un logiciel de traitement d'images et d'analyse appelé *MultiGauge*. Il permet de donner des images en mode multicanaux où la lecture des données est plus détaillée. Le fichier de sortie qui sera lu par le logiciel *GFit.10* (le fonctionnement sera détaillé ci-dessous) est sous le format *prof.txt* qui renseigne sur les positions en pixels et les amplitudes (en U.A).

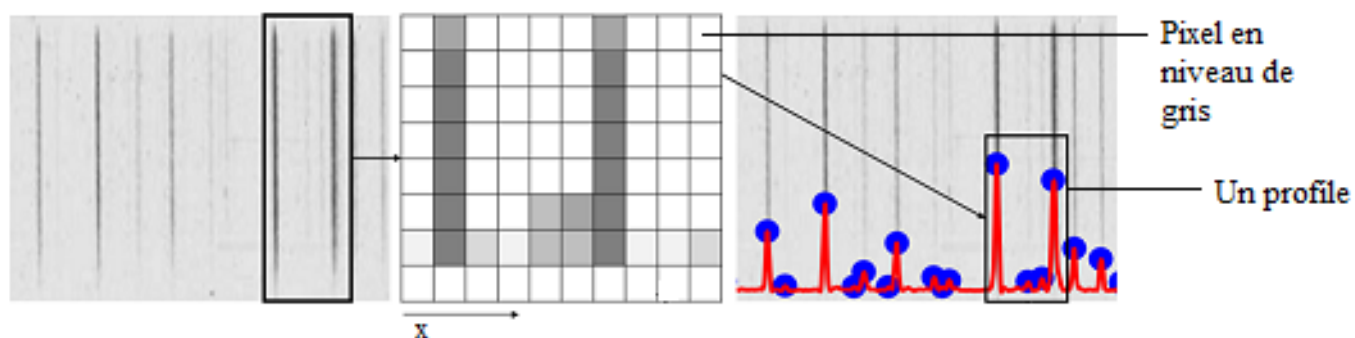


FIGURE II.4 – Principe de fonctionnement du logiciel *MultiGauge*.

Le logiciel *MultiGauge* divise une plaque de  $100\text{\AA}$  en 40000 pixels suivant l'axe des X (chaque pixel =  $10\mu$ ), et pour chaque pixel de  $x$  donné, il enregistre la somme des intégrales linéaires de chaque pixel ayant un niveau de gris homogène. Ce qui permet de déterminer l'amplitude de chaque position  $x$ , comme le montre la figure II.4. En dernier lieu, un fichier de type *prof.txt* est généré pour le logiciel *GFit.10*.

## II.3 Logiciels de mesure et de dépouillement des spectres atomiques

Le dépouillement des spectres atomiques est une étape indispensable pour la suite de l'analyse. Après la digitalisation des plaques d'enregistrement (PP ou IP), donc après l'obtention des données issues des scanners (images en format ".spe" ou "prof.txt"), nous pouvons entamer la mesure des positions des raies de nos spectres. Pour cela, nous utilisons deux logiciels *SPECTRA* et *GFit.10*.

### II.3.1 Le logiciel *SPECTRA*

Conçu par C. BLAESS du groupe "Spectroscopie atomique et moléculaire" du LERMA à l'Observatoire de Paris-Meudon, le logiciel *SPECTRA* s'inspire directement du "comparateur de plaques de spectres" utilisé auparavant à l'observatoire dont le fonctionnement est détaillé dans [33-35]. Le Comparateur a été longtemps utilisé par les chercheurs de l'Observatoire de Paris-Meudon pour la mesure des positions et des intensités des raies de spectres atomiques et moléculaires. Les plaques (PP ou IP) numérisées à l'aide d'un scanner doivent être converties en format spécifique de type ".spe" pour qu'elles soient lues par ce logiciel. Ce dernier est équipé d'une règle très précise qui permet de déterminer les positions des raies spectrales avec une précision de l'ordre

de  $4\mu$ . La position d'une raie est repérée par la coïncidence de son profil avec son image miroir et son intensité expérimentale correspond à la mesure de sa surface géométrique délimitant le profil comme le montre la figure II.5.

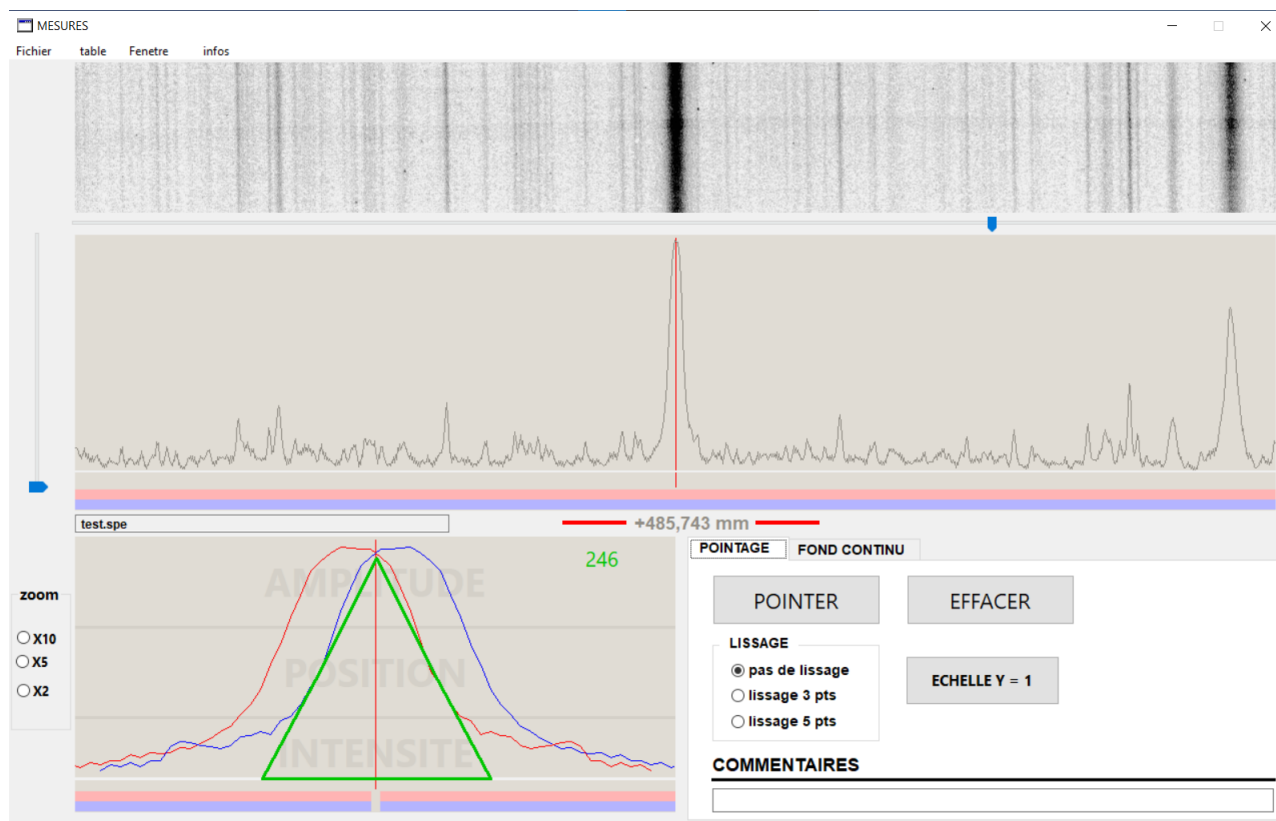


FIGURE II.5 – Logiciel Spectra : en rouge la position de la raie et en vert le triangle délimitant la surface sous le profil qui mesure l'intensité expérimentale de la raie.

### II.3.2 Le logiciel GFit.10

Conçu par Lars Engström de l'université de Lund en Suède, il est utilisé seulement sur des enregistrements sur écrans phosphore photostimulables scanné avec le STARION FLA-9000 de FUJIFILM. À l'aide du logiciel MultiGauge, l'image est convertie en fichier de type *Prof.txt*. Contrairement au logiciel Spectra, Gfit.10 fonctionne de manière automatique sous surveillance manuelle (Figure II.6). Il effectue un ajustement pondéré non linéaire des moindres carrés d'une somme de profils (13 profils) dérivant de trois profils distincts : Gaussien, Lorentzien ou de produit de convolution de Voigt (voir la Figure II.7). L'accès à plusieurs types de profils nous permet de palier aux problèmes d'élargissement de raies, (effet Doppler, élargissement collisionnel) dûs à l'agitation thermique ou aux collisions entre les électrons du plasma et l'ion émetteur.

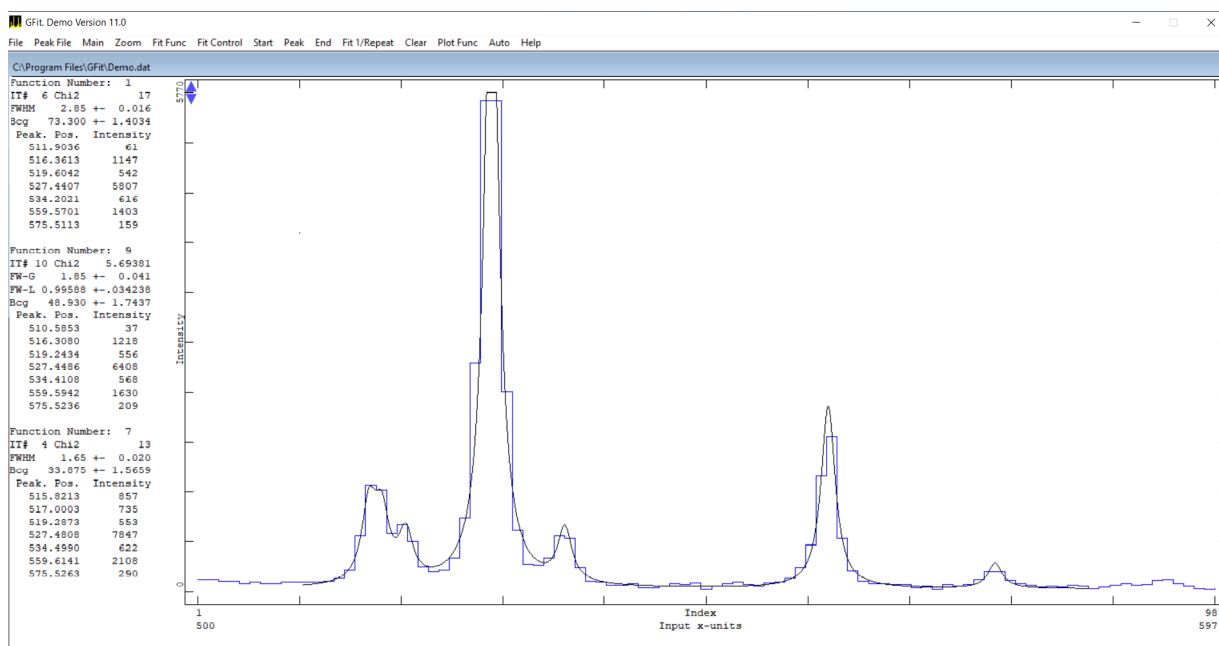


FIGURE II.6 – Le logiciel GFit.10 pour la mesure des positions et les intensités des raies spectrales.

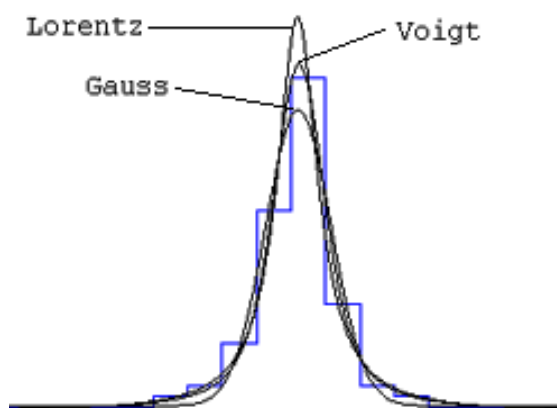


FIGURE II.7 – Les différents profils utilisés par le logiciel GFit.10.

## II.4 Calibration des spectres atomiques

Les fichiers de sortie des logiciels Specta et GFit.10 sont composés de deux colonnes comportant les positions et les intensités des raies spectrales. Pour cela, une calibration en longueur d'onde est nécessaire. Les positions ou abscisses des raies seront converties en longueurs d'onde en utilisant des longueurs d'onde connues d'ions légers faiblement ionisés (O I, O II, C II, Si I, Si II, Al II, Al III, N II,...) présents comme impuretés dans les spectres d'étincelles pour servir de références de calibration. Ces éléments

sont choisis de manière à être nombreux et répartis sur la gamme spectrale enregistrée pour tenir compte des écarts de la dispersion linéaire. Plus de 5000 longueurs d'onde de référence comprises entre 15 et 25000Å ont été rassemblées par Kaufman et Edlén dans leur compilation [36] sur les éléments neutres ou faiblement ionisés avec une incertitude inférieure à 0.002Å. D'autres raies ont été compilées par L. Kelly [37] avec une incertitude variable. L'*Atomic Spectra Database* (ADS) est une base de données du *NIST* qui est utilisée aussi comme une source de longueurs d'onde de référence. Nous obtenons dans ce processus de calibration une très bonne concordance entre les longueurs d'onde mesurées et celles connues.

## II.5 Mesure des longueurs d'onde

Comme nous l'avons évoqué dans les paragraphes précédents, la digitalisation du spectre nous fournit une liste de positions et d'intensités de raies spectrales et la calibration nous fournit des raies de référence de  $\lambda$  connues réparties le long du spectre. Avec l'interpolation de deux d'entre elles nous pouvons obtenir une première liste de longueurs d'onde approchées. Après identification des raies de référence le long du spectre, le programme de J. TECH du National Bureau of Standards (NBS, NIST) nous permet d'ajuster par moindres carrés un polynôme de dispersion (généralement de degré deux) en utilisant la liste des raies de références. Le polynôme permet de calculer les longueurs d'onde de toutes les raies à partir de la liste des positions des raies. Nous obtenons ainsi une liste finale de raies et d'intensités avec une précision allant jusqu'à 0.005Å pour entamer la recherche des niveaux d'énergie et les propriétés spectroscopiques de l'élément étudié.

## II.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la méthode de mesure des enregistrements réalisée sur un spectrographe à réseau comme celui de l'observatoire de Paris-Meudon. Cette étape est incontournable pour l'étude des spectres d'émission VUV des ions libres, car elle nous permet d'extraire les données nécessaires à la recherche des niveaux d'énergie, à savoir, la liste des longueurs d'onde et donc des nombres d'ondes des raies et leurs intensités. La prochaine étape de ce travail sera consacrée au formalisme théorique basé sur l'approche paramétrique de Racah-Slater implémenté dans la chaîne des codes dûs à R.D. Cowan dans le but de calculer les niveaux d'énergie et les probabilités de transition d'ions de lanthanide faiblement ionisés.

---





## Deuxième partie

# Formalisme théorique de la Spectroscopie Atomique

---



# Chapitre III

## Méthode théorique de l'analyse des spectres atomiques

### III.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons exposer le formalisme théorique de l'analyse de spectre atomique en rappelons les notions de base de la spectroscopie atomique et l'étude des systèmes polyélectronique par le biais de l'approximation du champ central et de la méthode paramétrique de Racah-Slater. Ces formalismes sont implémentés dans le code R.D Cowan, et cela, pour l'étude des spectres trivalents de lanthanides qui fait l'objet de cette thèse. Puis nous enchaînerons sur l'application du principe de combinaison de Ritz mise en œuvre dans les différents programmes de recherche des niveaux d'énergie expérimentaux (Recher et IDEN) et enfin, sur l'optimisation des valeurs d'énergie qui est une étape incontournable dans la recherche des niveaux d'énergie afin d'améliorer leurs précisions. On terminera ce chapitre par une conclusion.

### III.2 Rappels des notations

#### III.2.1 Grandeurs radiatives. Fréquence, nombre d'ondes et longueur d'onde

L'énergie d'un photon émis par l'atome lors d'une d'une transition électronique entre un niveau supérieur  $k$  d'énergie  $E_k$  et d'un niveau inférieur  $i$  d'énergie  $E_i$  est :

$$\Delta E = E_k - E_i = h\nu = hc\sigma = \frac{hc}{\lambda_{vide}} \quad (\text{III.1})$$

---

où  $\nu$  est la fréquence,  $\sigma$  le nombre d'ondes dans le vide et  $\lambda_{vide}$  la longueur d'onde dans le vide. Les mesures spectroscopiques les plus précises sont des déterminations de fréquences dont l'unité étant le Hertz ( $1\text{Hz} = \text{cycle}/\text{sec}$ ). Une mesure de la fréquence ou de l'une des entités, nombre d'ondes ou longueur d'onde (dans le vide) est une détermination toute aussi précise que celle des autres grandeurs puisque la vitesse de la lumière est exactement définie. Les unités les plus communes de longueurs d'onde est le nanomètre ( $nm$ ), le micromètre ( $\mu m$ ) et dans notre recherche l'angström ( $1\text{\AA} = 10^{-1}nm$ ). Le nombre d'ondes dans le Système International (SI) est l'inverse du mètre ( $m^{-1}$ ), mais dans la pratique on utilise l'inverse du centimètre ( $cm^{-1}$ ). À titre d'exemple :  $1eV = 8065.541cm^{-1}$ .

### III.2.2 Atome d'hydrogène et "hydrogéoïdes"

Le système le plus simple dans lequel cette structure en couches peut être mise en évidence est l'atome d'hydrogène. En effet, il n'est possible de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger que pour le cas de deux particules en interaction, ou de manière équivalente d'une particule (ici l'électron) dans un potentiel bien conditionné (ici celui créé par le noyau). En plus de son caractère fondamental et historique (la mécanique quantique s'est en grande partie développée en tentant d'expliquer le spectre d'émission que l'on a associé aux niveaux d'énergie de l'hydrogène atomique), son étude a pour intérêts dans ce chapitre de faire un certain nombre de rappels comme : les nombres quantiques introduits pour caractériser les orbitales de l'atome d'hydrogène forment les briques de base pour décrire les atomes à plusieurs électrons en termes de *configurations*.

Nous allons dans cette partie rappeler rapidement les données et résultats importants, sans toutefois reprendre la résolution complète de la structure en couche de l'atome d'hydrogène.

Dans le repère du noyau, l'Hamiltonien non-relativiste et indépendant du temps de l'atome d'hydrogène s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{\vec{r}} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (\text{III.2})$$

Où  $\vec{r}$  est la distance entre le noyau et l'électron,  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  avec  $h$  la constante de Planck,  $m_e$  est la masse réduite de l'électron,  $e$  la charge de l'électron et  $\epsilon_0$  la permittivité du vide.

La fonction d'onde de l'électron dans l'atome isolé est  $\psi(\vec{r}, \sigma) = u(\vec{r})\xi_s(\sigma)$  ( $\sigma$  étant le spin de l'électron de module  $1/2$ ). La densité de probabilité de présence  $|\psi(\vec{r}, \sigma)|^2$  doit être dans l'ensemble des fonctions de carré sommable et de norme 1. La fonction d'onde doit satisfaire à l'équation de Schrödinger

$$H\psi(\vec{r}, \sigma) = E\psi(\vec{r}, \sigma) \quad (\text{III.3})$$

Pour cela, elle doit être fonction propre de l'opérateur Hamiltonien avec la valeur propre  $E$  associé à son énergie.

La résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps ( $H\psi = E\psi$ ) pour l'atome d'hydrogène donne un ensemble infini dénombrable d'états propres

$$\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \theta, \phi, \sigma) = u_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi)\xi_{m_s}(\sigma) \text{ d'énergie } E_{n,l,m_l,m_s} \quad (\text{III.4})$$

Où  $r$ ,  $\theta$  et  $\phi$  sont les coordonnées sphériques par rapport au noyau et à un repère ortho-normé.  $u_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$  est la partie d'espace de la fonction d'onde et  $\xi_s(\sigma)$  sa partie spin.

Il découle de l'étude de l'atome d'hydrogène (ou hydrogénoïdes) que les états propres sont caractérisés par quatre nombres quantiques  $n, l, m_l, m_s$  :  $n$ , le nombre quantique principal, un entier positif ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) qui définit la notion de *couche*,  $l$ , le module du moment cinétique orbital,  $l = 0, 1, \dots, n - 1$ ,  $m_l$  et  $m_s$  sont les nombres quantiques qui caractérisent respectivement les projections de  $\vec{l}$  et de  $\vec{s}$  sur l'axe de quantification.  $m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$  et  $m_s = \pm 1/2$ . On introduit le nombre quantique  $j$  représente le moment angulaire obtenu avec le couplage du moment cinétique orbital et de spin d'un électron, i.e.,  $j = l + s$ , avec  $j = l \pm 1/2$  [38, 39].

On utilise la notation Tableau III.1 en généralisant au cas d'un atome à plusieurs électrons dans l'approximation du champ central (voir plus loin) afin de décrire les orbitales électroniques. Chaque couche est associée à une lettre ( $K, L, M, N, \dots$ ) dans l'ordre croissant de  $n$  et chaque sous-couche est associée à une lettre ( $s, p, d, f, \dots$ ) dans l'ordre croissant des  $l$ . Cette distribution d'électrons constitue une configuration électronique.

Pour un atome à plusieurs électrons, le remplissage successif des différentes sous-couches électroniques suit les règles de Madelung [40] pour obtenir ainsi **la configuration électronique de l'état fondamental**. Elle représente la répartition des électrons dans les différentes orbitales. Toute autre configuration génère un état excité qui n'est accessible que lorsque l'atome est perturbé

Couche	$n$	$l$	Notation
K	1	0	1s
L	2	0	2s
		1	2p
M	3	0	3s
		1	3p
		2	3d
N	4	0	4s
		1	4p
		2	4d
		3	4f
O	5	0	5s
		1	5p
		2	5d
		3	5f
		4	5g

Pour les valeurs les plus élevées de  $l$ , on utilise les notations suivantes :

$l$	5	6	7	8	9	10
Notations	h	i	k	l	m	n

TABLE III.1 – Notations des orbitales électroniques.

### III.2.3 Principe d'exclusion de Pauli

En 1925, Wolfgang Pauli proposa le principe selon lequel les électrons ne peuvent se trouver au même endroit dans le même état quantique. Par la suite, ce principe est généralisé à tout fermion (ou particule de spin demi-entier), tel que le proton, le neutron, le neutrino et les quarks. Ce principe devint ensuite un théorème de la mécanique quantique relativiste, élaborée par Dirac en 1930 : les particules de spin demi-entier sont des fermions, ils obéissent à la statistique de Fermi-Dirac, donc au principe d'exclusion de Pauli [41]. Cela revient à dire que deux électrons d'un atome ne peuvent être caractérisés par les mêmes valeurs des nombres quantiques  $(n, l, m_l, m_s)$  car même s'ils sont équivalents (de même  $n$  et  $l$ ),  $m_l$  ou  $m_s$  est forcément différent.

### III.3 Systèmes polyélectronique

L'analyse de tout spectre atomique repose sur la résolution de l'équation de Schrödinger. Cependant, à l'exception des cas simples de l'atome d'hydrogène ou des ions atomiques hydrogénoïdes, cette équation n'a aucune solution analytique. Pour cela, nous faisons appel à des approximations adaptées au système complexe [42]. Le point de départ des calculs relatifs à un système complexe est l'approximation du champ central en se basant sur la théorie des perturbations pour finir avec la méthode paramétrique de Racah-Slater adaptées aux ions faiblement chargés à sous-couche ouverte  $4f^N$ . Cela nous permettra d'accéder à des grandeurs physiques telles que les niveaux d'énergie, les probabilités de transition...etc, indispensables pour l'analyse des spectres atomiques expérimentaux [31].

En général, un spectre dit "complexe" peut définir un atome comportant deux électrons. Hormis pour l'hydrogène l'équation de Schrödinger ne peut être résolue de façon exacte. Pour les cas des atomes comportant plus de deux électrons le point de départ des calculs est *l'approximation du champ centrale* [43] qui décrit qualitativement les observations effectuées dans le cas des systèmes polyélectronique, et cela, sans avoir plus de précision sur le potentiel qui intervient dans l'équation de Schrödinger.

#### III.3.1 Expression de l'hamiltonien

Les systèmes polyélectronique comportant un noyau de charge  $Z$  ( $Z$  protons) et  $N$  électrons imposent de prendre en considération plusieurs effets [44, 45]. L'hamiltonien d'un système à  $N$  électrons s'écrit alors comme la somme de toutes les interactions tel que :

$$\begin{aligned}
 H &= H_c + H_{N-e} + H_{e-e} + H_{S-O} \\
 \Rightarrow H &= \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right] + \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \sum_i^N \zeta(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i \quad (\text{III.5})
 \end{aligned}$$

Avec :

**Les termes d'énergie cinétique :** qui sont donnés par :

$$H_c = H_a = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i}$$

**L'interaction électrostatique entre le noyau et les électrons :** le noyau supposé ponctuel et de masse infinie, le terme s'écrit :

$$H_{N-e} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right)$$

**L'interaction électron-électron :** c'est l'interaction d'un électron avec les  $(N - 1)$  autres électrons de l'atome, on la définit comme suit :

$H_{e-e} = \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$  avec  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ , la distance entre les deux électrons  $i$  et  $j$ .

**L'interaction Spin-Orbite :** qui s'écrit :

$$H_{S-O} = \sum_i^N \zeta(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i \text{ avec } \zeta(r_i) = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r_i} \frac{dV(r_i)}{dr_i}$$

L'équation de Schrödinger associée à ce hamiltonien s'écrit :

$$H\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (\text{III.6})$$

Ce problème à N corps ne peut être résolu exactement ni en mécanique classique ni en mécanique quantique. Les solutions dépendent d'une séparation de variables pour engendrer des équations moins compliquées, chaque équation comportant les coordonnées d'une seule particule(électron). Le terme  $H_{e-e}$  dans (III.5) empêche la séparation de variables, mais étant trop grand pour être traité comme une perturbation. On suppose alors que les électrons sont indépendants les uns des autres et soumis à un potentiel effectif qui ne dépend que de "r" et qui représente le mieux les termes  $H_{N-e}$  et  $H_{e-e}$  [43], cette hypothèse porte le nom d'*Approximation du champ central*.

### III.3.2 Approximation du champ central

La séparation des variables étant impossible comme on vient de le voir, on suppose alors que le potentiel électrique dans lequel un électron se déplace peut être remplacé par un potentiel effectif à symétrie sphérique  $V(r)$  indépendant des angles  $\theta$  et  $\phi$  [43, 44]. On écrira alors dans le cadre de la théorie des perturbations stationnaires,  $H = H_0 + H_p$  avec  $H_p = H_b + H_{S-O}$

L'hamiltonien d'ordre zéro :

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2m} + V(r_i) \right] = \sum_i h_i(\vec{r}_i) \quad (\text{III.7})$$

et l'hamiltonien de perturbation :

$$H_p = \underbrace{\sum_{i=1}^N \left[ -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} - V(r_i) \right]}_{H_b} + \underbrace{\sum_{i<j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \sum_i^N \zeta(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i}_{H_{S-O}} \quad (\text{III.8})$$

Avec un bon choix du potentiel, le terme  $H_b$  dans  $H_p$  peut être traité comme la perturbation qui tient compte des effets de répulsion électronique.

L'équation de Schrödinger à l'ordre zéro est maintenant

$$H_0\psi_0 = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(r_i) \right] \psi_0 = E_0\psi_0 \quad (\text{III.9})$$



telle que l'on puisse la séparer en  $N$  équations, une pour chaque électron. Pour résoudre cette équation, on pose :

$$\psi_0 = \prod_{i=1}^N u_{n_i l_i m_i m_{s_i}}(r) \quad (\text{III.10})$$

avec les fonctions d'onde angulaires qui doivent être identiques à celle de l'atome d'hydrogène, car  $V(r_i)$  ne dépend que de  $r_i$ . On aura donc les fonctions d'onde spin-orbitales caractérisées par quatre nombres quantiques  $n, l, m_l, m_s$  qui s'écrivent

$$u_{nlm_l m_s}(r) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) X_{sm_s} \quad (\text{III.11})$$

**Les harmonique sphérique :** sont définies par :

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\omega, \theta) e^{im\phi} \quad (\text{III.12})$$

**Les partie radiale des spin-orbitales :** sont définies comme :

$$R_{nl}(r) = \frac{P_l^m(r)}{r} \quad (\text{III.13})$$

où le **polynôme de Legendre** est défini par

$$P_l^m(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l \quad (\text{III.14})$$

**Les fonction Spin :**  $X_{sm_s}$  qui ajoute les effets relativistes aux fonctions d'onde totales.

L'équation (III.10) donnera alors :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i + V(r_i) \right] \prod_{i=1}^N u_{n_i l_i m_i m_{s_i}}(r) &= \sum_{i=1}^N E_{n_i l_i} \prod_{i=1}^N u_{n_i l_i m_i m_{s_i}} \\ &= \sum_{i=1}^N E_{n_i l_i} \psi_0 \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

pour un système à  $N$  électrons, la fonction d'onde  $\psi_0$  doit être antisymétrique par rapport aux échanges de deux électrons, elle peut s'écrire sous la forme d'un déterminant de Slater et satisfaire ainsi au *Principe d'exclusion de Pauli* :

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_\alpha(q_1) & \dots & u_\sigma(q_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ u_\alpha(q_j) & \dots & u_\sigma(q_j) \end{vmatrix} \quad (\text{III.16})$$

Où les indices  $\alpha \dots \sigma$  représentent des ensemble de nombre quantique caractérisant les

spin-orbitales et  $q_i \dots q_j$  sont les coordonnées des électrons individuels.

La donnée de  $n_i$  et  $l_i$  définit une configuration. L'énergie d'une configuration est donnée par :

$$E_0 = \sum_i E_{n_i, l_i} \quad (\text{III.17})$$

Où  $E_{n_i, l_i}$  ne dépendent que des  $n_i$  et  $l_i$  et pas des  $m_{l_i}$  et  $m_{s_i}$ . L'énergie d'une configuration est alors fortement dégénérée. Selon le nombre d'électrons des configurations, on peut classer ces dernières en deux catégories selon leur parité  $P$  qu'on peut définir comme :

$$P = (-1)^{\sum_i l_i} \quad (\text{III.18})$$

**Exemple :** Pour l'ion d'erbium trivalent dont la configuration fondamentale est  $[Xe]4f^{11}$ ,  $l = 3$ ,  $P = (-1)^{3 \cdot 11} = -1$ , donc sa parité est impaire.

Afin de répartir tous les électrons d'un atome dans les différentes orbitales atomiques, celles-ci sont classées par énergie croissante et les électrons sont répartis prioritairement dans les orbitales d'énergie les plus faibles (utilisation de **la règle de Klechkowski**). On obtient alors la répartition électronique pour l'atome dans son état fondamental.

La seconde partie de l'hamiltonien est traitée comme une perturbation stationnaire. elle nous introduira le schéma de couplage des moments cinétiques et va lever partiellement des dégénérescences.

### III.3.3 Calcul au premier ordre des perturbations. Schémas de couplage des moments cinétiques

Le calcul des énergies au premier ordre des perturbations consiste à diagonaliser la matrice de l'hamiltonien  $H_p$  à l'intérieur d'un sous-espace constitué par une configuration pour obtenir les énergies et les vecteurs propres de l'hamiltonien. Le moment cinétique total  $J$  étant conservé, cette diagonalisation doit être effectuée pour chaque valeur de  $J$  donnée. On doit alors choisir une base appropriée pour représenter cette matrice avant diagonalisation. Plusieurs bases de vecteurs propres de  $H_0$  sont possibles, correspondant à des schémas de couplage de moments cinétiques différents.

Selon la nature des interactions mises en jeu (voir section ??). Le schéma de couplage électronique adopté dépendra du rapport entre les différentes composantes de l'hamiltonien, i. e., :

$$H_T = H_0 + H_{N-e} + H_{e-e} + H_{S-O} = H_0 + H_p = H_0 + H_b + H_{S-O} \quad (\text{III.19})$$

- Si  $H_0 \gg H_b \gg H_{S-O}$  on se retrouve dans l'hypothèse d'un **couplage LS** ou de **Russel-Saunders**, il en résulte que les états propres du système sont décrits par les nombres quantiques  $S$  et  $L$  et la dégénérescence de la configuration n'est que partiellement levée, car à chaque valeur de  $L$  correspondra  $2L + 1$  orientations par rapport à l'axe de quantification et pour une valeur de  $S$  donnée correspondrait  $2S + 1$  orientations du moment de spin. Cette dégénérescence sera levée par l'introduction du terme spin-orbite, dans ce cas,  $[H, \vec{L}] \neq 0$  et  $[H, \vec{S}] \neq 0$ , mais  $H$  commute avec  $\vec{J}$  ( $[H, \vec{J}] = 0$ ) alors, les états propres du système seront caractérisés par les valeurs de  $J$  dont la dégénérescence est de  $2J + 1$  (l'introduction du terme spin-orbite permet de décrire *la structure fine* des termes considérés). Dans ce schéma couplage, le terme spectral s'écrira alors :

$$^{(2S+1)}L \quad (\text{III.20})$$

En ajoutant l'effet du couplage spin-orbite dont les niveaux sont distingués par leurs valeurs de  $J$ , la notation devient :

$$^{(2S+1)}L_J \quad (\text{III.21})$$

où  $(2S + 1)$  est la multiplicité du terme et  $J$  le moment angulaire total.

- Si  $H_0 \gg H_{S-O} \gg H_b$ , dans cette hypothèse on se retrouve dans le cas du **couplage jj**, l'interaction spin-orbite lève partiellement la dégénérescence des niveaux d'énergies, pour chaque niveau de  $l \neq 0$  correspond deux valeurs d'énergies où  $j = l \pm \frac{1}{2}$ , si  $l = +\frac{1}{2}$  la dégénérescence sera égale à  $2l + 2$  et si  $j = -\frac{1}{2}$ , elle vaudra  $2l$ , en ajoutant la contribution de  $H_b$ , les valeurs propres seront séparés en plusieurs niveaux correspondant aux différentes valeurs de  $J$  qui conservent une dégénérescence égale à  $2J + 1$ . Le résultat s'obtient du couplage des moments angulaires individuels de tous les électrons, il se traduit comme suit :

$$(\vec{l}_1, \vec{s}_1)(\vec{l}_2, \vec{s}_2)(\vec{l}_3, \vec{s}_3) \dots = (\vec{j}_1, \vec{j}_2, \vec{j}_3 \dots) = \vec{J} \quad (\text{III.22})$$

et  $\vec{j}_1 + \vec{j}_2 + \vec{j}_3 + \dots = \vec{J}$ .

La notation consacrée aux niveaux issus du couplage jj est  $(j_1, j_2)_J$ ,  $(j_1, j_2)$  étant un terme.

Cependant, il existe d'autres schémas de couplage plus réels appelé **couplage intermédiaire** (où  $H_b \approx H_{S-O}$ ) où il faudra considérer les deux contributions simultanément. Le passage d'un couplage vers l'autre dépendra de l'accroissement du terme

spin-orbite qui lui de l'augmentation de  $Z$  de l'atome ou de l'ion (plus l'élément est lourd mais le couplage LS est valable et on passe progressivement a des couplages jj ou intermédiaire).

Quand l'on tient compte de l'interaction coulombienne entre les électrons, ou de l'interaction spin-orbite, les différents termes émanant d'une même configuration n'ont plus la même énergie. En couplage LS, **les règles de Hund** établissent que :

- Le terme de plus basse énergie pour une configuration donnée est le terme de plus grande multiplicité de spin (caractérisé par la plus grande valeur de  $S$ ).
- Parmi les termes de même multiplicité de spin (de même  $S$ ), le terme caractérisé par la plus grande valeur de  $L$  est de plus basse énergie.
- Si l'on tient compte du couplage spin-orbite, alors, parmi les termes de même  $L$  et  $S$ , celui de plus basse énergie est celui caractérisé par la plus petite valeur de  $J$  si la configuration contient une sous couche moins qu'à demi remplie. celui caractérisé par le plus grand  $J$  dans le cas contraire.

### III.3.4 Partie radiale. Méthode Hartree-Fock

De manière générale, le calcul du potentiel effectif passe par la méthode variationnelle, et cela, en utilisant la Méthode Hartree-Fock. Avec un bon choix du potentiel  $V(r_i)$  on pourra traiter un système à  $N$  fermions identiques au tour d'un noyau de façon perturbative, ce potentiel peut être obtenu par deux modèles :

- Le modèle de Tomas-Fermi
- **Le modèle de Hartree-Fock**

Dans notre travail, on s'intéresse à celle de Hartree-Fock qui nous permet de calculer le potentiel  $V(r_i)$  par une méthode variationnelle. La fonction d'onde d'essai est un déterminant de Slater optimisé avec les meilleures orbitales de spin et est fonction des quatre nombres quantiques  $(n, l, m_l, m_s)$ .

on notera  $\epsilon_0$  l'énergie de l'état fondamentale. Tel que

$$\epsilon_0 \leq E(\psi)$$

Pour un hamiltonien  $H = H_1 + H_2 =$  avec

- $H_1 = \sum_{i=1}^N [\frac{p_i^2}{2m} + V(r_i)]$

et

- $H_2 = \sum_{i=1}^N [-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} - V(r_i)] + \sum_{i < j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$

En calculant  $E(\psi)$  et en scindant l'équation en deux, on obtient :

$$\begin{aligned}
 E(\psi) &= \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | H_1 | \psi \rangle + \langle \psi | H_2 | \psi \rangle \\
 &= \sum_{\lambda} \underbrace{\langle u_{\lambda}(q_i) | H_1 | u_{\lambda}(q_i) \rangle}_{I_{\lambda}} \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} \left[ \underbrace{\langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) | H_2 | u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) \rangle}_{\text{Terme directe } \gamma_{\lambda\mu}} - \underbrace{\langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) | H_2 | u_{\mu}(q_i) u_{\lambda}(q_j) \rangle}_{\text{Terme d'change } \kappa_{\lambda\mu}} \right]
 \end{aligned} \tag{III.23}$$

qu'on pourra réécrire sous la forme

$$E(\psi) = \sum_{\lambda} I_{\lambda} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} (\gamma_{\lambda\mu} - \kappa_{\lambda\mu}) \tag{III.24}$$

Il nous reste à minimiser  $E(\psi)$  en variant  $u_{\lambda}$ . En tenant compte des  $N^2$  relations d'orthogonalisation nous introduisant le même nombre de multiplicateurs de Lagrange pour avoir

$$\delta E - \sum E_{\lambda} \delta \langle u_{\lambda} | u_{\lambda} \rangle = 0 \tag{III.25}$$

où on pourra traiter indépendamment les variations de  $\delta u_{\lambda}, \dots$  et  $\delta u_{\lambda}^*, \dots$  pour obtenir  $N$  équations intégrales-différentielles. Qu'on définit comme

*Les équations de Hartree-Fock*, elles s'écrivent comme suit :

**L'opérateur direct de la répulsion électrostatique** qui est une moyenne sur  $u_{\lambda}$  qui s'écrit

$$V_{\lambda}^d(q_i) = \int u_{\lambda}^*(q_j) \frac{1}{r_{ij}} u_{\lambda}(q_j) dq_j \tag{III.26}$$

**L'opérateur d'échange** : agissant sur une fonction  $u_{\mu}$  arbitraire peut s'écrire comme

$$V_{\lambda}^e(q_i) = \int u_{\lambda}^*(q_j) \frac{1}{r_{ij}} u_{\mu}(q_j) dr_j \tag{III.27}$$

À partir des équations précédentes (III.26)(III.27), on pourra écrire les termes des composants du potentiel de H-F qui sont :

- Potentiel direct  $V^d = \sum_{\lambda \neq \mu} V_{\lambda}^d(q_i)$ .
- Potentiel d'échange  $V^e = \sum_{\lambda \neq \mu} V_{\lambda}^e(q_i)$ .

Le potentiel de Hartree-Fock  $v$  s'écrira alors :

$$v = -\frac{Z}{r_i} + V^d(q_i) + V^e(q_i) \tag{III.28}$$

L'équation de Schrödinger devient alors :

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + v\right]u_\lambda(q_i) = E_\lambda \quad (\text{III.29})$$

En prenant par la suite le produit scalaire, on obtient

$$E(\psi) = \sum_\lambda E_\lambda - \langle \psi | H_2 | \psi \rangle \quad (\text{III.30})$$

L'énergie totale du système n'est pas égale à la somme des énergies individuelles, car on prend en compte deux fois les interactions. Pour un état donné de l'atome, tous les électrons baignent dans un même potentiel de Hartree-Fock qui est à symétrie sphérique pour les systèmes à couches complètes. La self consistance des équations précédente est due à leurs couplages les une aux autres, vue que le potentiel direct et d'échange dépendent de toutes les orbitales pour cela on procède par itération pour des solutions numérique.

### III.3.5 Partie angulaire. Algèbre de Racah - Théorème de Wigner-Eckart

Très utilisé pour l'évaluation des éléments de matrice dans le cas de configuration complexes, ce formalisme algébrique très élégant a été développé par G.Racah [46-48]. elle concerne notamment l'évaluation de la composante angulaire des éléments de matrice. Généralement utile lorsqu'on est face à la complexité du couplage de plusieurs moments cinétiques.

Racah introduit l'opérateur tensoriel irréductible  $T^k$  comme ensemble de  $2k + 1$  composantes  $T_q^k$  avec  $-k \leq q \leq k$ , vérifiant les règles de commutation suivante :

$$[J_{\pm 1}, T_q^k] = \mp \hbar \sqrt{\frac{1}{2}[k(k+1) - q(q \pm 1)]} T_{q \pm 1}^k \quad (\text{III.31})$$

$$[J_z, T_q^k] = \hbar q T_q^k \quad (\text{III.32})$$

Le produit scalaire de deux tenseurs irréductibles  $T^k, R^k$  est défini par

$$T^k \cdot R^k = \sum_q (-1)^q T_q^k R_{-q}^k \quad (\text{III.33})$$

On introduit le produit scalaire entre tenseurs de rang égal ou supérieur à 1, car nous avons vu précédemment l'interaction spin-orbite et l'interaction coulombienne électronique correspondant respectivement à

$$H_{S-O} = \sum_i^N \zeta(r_i) \vec{l}_i^{(1)} \cdot \vec{s}_i^{(1)} \quad (\text{III.34})$$

$$H_{e-e} = \sum_{i < j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$$

qui s'exprime dans le formalisme des opérateurs tensoriel introduit par Racah sous la forme

$$H_{e-e} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_k \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} C_i^{(k)} \cdot C_i^{(k)} \quad \text{ou} \quad C_q^{(k)} = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} Y_k^q(\theta, \phi) \quad (\text{III.35})$$

Ce résultat n'aurait pu être résolu sans un théorème très important en spectroscopie atomique celui de *Wigner-Eckart*. Son intérêt réside dans le fait qu'il permet de séparer les facteurs dépendant de l'axe de quantification, c'est-à-dire la géométrie du système et les autres facteurs représentant un contenu physique. Il peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \langle \alpha j m | T_q^k | \alpha' j' m' \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} C_{m' q m}^{j' k j} \langle \alpha j || T^k || \alpha' j' \rangle \\ &= (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & k & j' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \langle \alpha j || T^k || \alpha' j' \rangle \end{aligned} \quad (\text{III.36})$$

$T_q^k$  : Un opérateur tensoriel irréductible dont les éléments de matrices sont calculés entre les états  $|\alpha j m\rangle$  et  $|\alpha' j' m'\rangle$ .  $\alpha$  et  $\alpha'$  définissent respectivement les états initiaux et finaux du système.

$\langle \alpha j || T^k || \alpha' j' \rangle$  : Un **élément de matrice réduite**

dans le second membre, on voit apparaître un symbole  $3j$  ou symbole de *Clebsch-Gordan* qu'on peut définir par

$$|j_1 j_2 m\rangle = (-1)^{j_1 - j_2 - m} \sum_{m_1, m_2} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \quad (\text{III.37})$$

avec  $m = m_1 + m_2, j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} = \frac{-C^{j_1 - j_2 - m}}{\sqrt{2j+1}} C_{m_1, m_2, -m}^{j_1, j_2, j} \quad (\text{III.38})$$

on notera que ces symboles de deux moments  $j_1$  et  $j_2$  ont été tabulés.

### III.3.6 Forme générale des éléments de matrice

En se basant sur les deux théories annoncées précédemment (Algèbre de Racah et de Wigner -Eckart), les interactions électrostatiques et de spin-orbite peuvent se réécrire

- **L'interaction électrostatique** pour une configuration à deux électrons non-équivalent, elle s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{LSJM} | H_{e-e} | \psi_{L'S'J'M'} \rangle &= \langle \psi_{LSJM} | \sum_{i < j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} | \psi_{L'S'J'M'} \rangle \\ &= \delta_{LSJML'S'J'M'} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_k [f_k F^k(n_i, l_i, n_j, l_j) + g_k G^k(n_i, l_i, n_j, l_j)] \end{aligned} \quad (\text{III.39})$$

Où  $F^k, G^k$  sont les intégrales radiales de Slater d'interaction électrostatique directe et d'échange respectivement et  $f_k, g_k$  sont des matrices dont les éléments sont calculés avec l'algèbre de Racah.  $F^k$  et  $f_k$  s'écrivent :

$$F^k(n_i, l_i, n_j, l_j) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} |P_{nl}^i(r_1)|^2 |P_{nl}^j(r_2)|^2 dr_1 dr_2 \quad (\text{III.40})$$

et

$$f_k = (-1)^L [l_i, l_j] \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_j & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} l_i & l_j & L \\ l_j & l_i & k \end{matrix} \right\} \quad (\text{III.41})$$

avec  $k = 0, 2, \dots, \min(2l_i, 2l_j)$ ,  $r_{<} = \inf(r_1, r_2)$  et  $r_{>} = \sup(r_1, r_2)$

L'intégrale d'échange  $G^k$  et l'élément de matrice  $g_k$  s'écrivent :

$$G^k(n_i, l_i, n_j, l_j) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_{nl}^{i*}(r_1) P_{nl}^{j*}(r_2) P_{nl}^j(r_1) P_{nl}^i(r_2) dr_1 dr_2 \quad (\text{III.42})$$

et

$$g_k = (-1)^L [l_i, l_j] \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} l_i & l_j & L \\ l_i & l_j & k \end{matrix} \right\} \quad (\text{III.43})$$

Avec  $k = |l_i - l_j|, |l_i - l_j| + 2, |l_i - l_j| + 4, \dots, |l_i + l_j|$ .

- **L'interaction spin-orbite** dont les éléments de matrice sont associé au terme d'interaction spin-orbite qui s'écrit comme suit

$$\begin{aligned} \langle \psi_{LSJM} | H_{S-O} | \psi_{L'S'J'M'} \rangle &= \langle \psi_{LSJM} | \sum_i^N \xi(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i | \psi_{L'S'J'M'} \rangle \\ &= d_i \xi_{l_i} \end{aligned} \quad (\text{III.44})$$



Avec  $\xi_{l_i}$  l'intégrale radiale associée a l'interaction spin-orbite qui s'écrit

$$\xi_{l_i} = \frac{1}{2m^2c^2} \int_0^\infty \frac{1}{r} \left( \frac{dV}{dr} \right) |P_{l_i}(r)|^2 dr \quad (\text{III.45})$$

et  $d_i$  la partie angulaire associée a l'interaction spin-orbite s'écrit alors

$$\begin{aligned} \langle \psi_{L'S'J'M'} | \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i | \psi_{L'S'J'M'} \rangle &= (-1)^{J+L'+S} \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \\ &\cdot \left\{ \begin{array}{ccc} L' & S' & J \\ S & L & 1 \end{array} \right\} \langle L || \vec{l}_i || L' \rangle \langle S || \vec{s}_i || S' \rangle \end{aligned} \quad (\text{III.46})$$

Le symbole 6j présent dans l'équation précédente , nous impose les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} \Delta L &= 0, \pm 1 & L' + L &\geq 1 \\ \Delta S &= 0, \pm 1 & S' + S &\geq 1 \end{aligned}$$

On remarque d'après ces conditions que si  $\Delta S = \pm 1$ , les éléments de matrice traduisant l'interaction spin-orbite différent de zéro, c'est-à-dire que cette interaction est responsable des transitions d'intercombinaison que l'on observe dans certains spectres[42].

- **Interaction de Configuration :** Une méthode pour réduire l'erreur sur les fonctions d'ondes et les éléments de matrice induite par l'approximation du champ central, requit dans le but d'étudier les transitions radiatives par exemple, est de tenir compte des interactions de configurations en écrivant les fonctions d'onde totale comme une combinaison linéaires des fonctions d'onde associées à des états purs. L'intégrale radiale issue du terme d'interaction électrostatique entre ces configurations s'écrit alors :

$$R^k(l_i, l_j, l_{i'}, l_{j'}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r^k}{r^{k+1}} P^{i*}(r_1) P^{j*}(r_2) P^{i'}(r_2) P^{j'}(r_1) dr_1 dr_2 \quad (\text{III.47})$$

Avec  $R^k$  est l'intégrale radiale d'interaction de configurations.

### III.3.7 Énergie moyenne d'une configuration et énergie totale

Pour un système à N électrons, l'énergie totale du système s'exprime en fonction de l'énergie moyenne  $E_{av}$  qui est la valeur propre de l'hamiltonien  $H_0$ , introduit par Slater

en 1960 [49], elle est obtenue en divisant la somme de la trace de la matrice d'énergie par le nombre de fonctions de base  $A$  appartenant à la configuration choisie :

$$E_{av} = \sum_a \frac{\langle a|H|a \rangle}{A} = \frac{\sum_i (2j_i + 1) E_i}{\sum_i (2j_i + 1)} \quad (\text{III.48})$$

Comme la somme dans la seconde expression s'étend à tous les niveaux, Slater propose différente expression permettant de calculer l'énergie moyenne dans le cas d'une configuration comportant deux électrons.

**Pour des électrons équivalent** l'énergie moyenne s'écrit :

$$\begin{aligned} E_{av} &= F^0(l, l) - \frac{1}{4l+1} [c^2(l0, l0)F^2(l, l) + c^4(l0, l0)F^4(l, l) + \dots] \\ &= F^0(l, l) - \frac{2l+1}{4l+1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l & k & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(l, l) \end{aligned} \quad (\text{III.49})$$

**Pour des électrons non-équivalent** l'expression s'écrit

$$\begin{aligned} E_{av} &= F^0(l_1, l_2) - \frac{1}{2\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)}} [c^k(l_10, l_20)G^k(l_1, l_2) + \\ &= F^0(l_1, l_2) - \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} l_1 & k & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k(l_1, l_2) \end{aligned} \quad (\text{III.50})$$

Les coefficients  $c^k$  ont été tabulés par Slater à partir de la formule de Gaunt, ils sont donnés par l'expression suivante

$$c^k(lm, l'm') = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} \langle Y_{l,m} | Y_{k,m-m'} | Y_{l',m'} \rangle = (-1)^{m-m'} c^k(l'm', lm) \quad (\text{III.51})$$

L'énergie totale du système alors va s'écrire en fonction de l'énergie moyenne et intégrales de Slater :

$$E = E_{av} + \sum_{i,j=1}^N \sum_k [f_k F^k(l_i, l_j) + g_k G^k(l_i, l_j)] + \sum_{i=1}^N d_i \zeta_i + \sum_k \theta_k R^k \quad (\text{III.52})$$

Où  $\theta_k$  est la partie angulaire associée aux interactions des configurations.

### III.4 Probabilité de transition. Élément de matrice de transition

L'analyse des spectres d'éléments du tableau périodique a pour but de mieux comprendre ceux-ci et de caractériser leurs propriétés spectroscopiques pour une meilleure

application. Les grandeurs physiques (Énergie, facteur de Landé, probabilité de transition, durée de vie radiative, ...) sont les principales qui caractérisent un élément du point de vue spectroscopique. L'énergie du système identifié dans l'équation (III.52) est l'une des plus importantes dans l'analyse spectroscopique d'un élément donnée.

### III.4.1 Facteur de Landé

Introduit pour la première fois par le physicien germano-américain Alfred Landé en 1921, le facteur de Landé ( $g_L$ ) est une grandeur physique sans dimension qui relie le moment magnétique de l'atome à son moment cinétique dans un état quantique donné. Sous l'effet d'un champ magnétique  $B$ , un niveau de  $j$  donné éclate en  $2j + 1$  sous niveaux de  $M_j$  différents. Ce phénomène, appelé effet Zeeman, induit un même écart entre les  $2j + 1$  sous niveaux  $M_j$  et l'écart entre deux niveaux consécutifs vaut  $g_L \mu_B B$  où  $\mu_B$  est le magnéton de Bohr et  $B$ , le champ magnétique.

L'expression analytique de  $g_L$  dépend du schéma de couplage. En couplage  $LS$  elle est donnée par :

$$g_L = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (\text{III.53})$$

Pour des ions de lanthanides, le programme RCG du code Cowan (section III.5) qu'on détaillera par la suite, les calcules en couplage intermédiaire à partir des fonctions d'onde des niveaux. La levée de dégénérescence d'un niveau  $J$  a une grande importance pratique dans l'étude des spectres atomique, où on peut observer à haute résolution dans les domaines du visible et proche ultraviolet les raies fines. En Astrophysique, ils ont déjà été utilisés pour déterminer le champ magnétique de certaines étoiles [50, 51].

### III.4.2 Probabilités de transition

L'intensité d'une transition observée dans un spectre est liée directement à la population du niveau émetteur d'une part et d'une caractéristique intrinsèque de l'atome en question qui est *la probabilité de transition*. Cette notion a été introduite la première fois au début du  $XX^e$  siècle par A. Einstein, elle peut être reliée directement à d'autres paramètres comme la force d'oscillation, la force de raie et la durée de vie radiative. Un atome porté dans un état excité tend à perdre son énergie pour revenir spontanément vers un état plus stable.

Le calcul des probabilités de transition entre états stationnaires  $|\psi\rangle$  et  $|\psi'\rangle$  d'énergies  $E_1$  et  $E_2$  fait intervenir la théorie des perturbations dépendant du temps [52] ayant pour résultat principal que la probabilité de transition,  $P_{\psi \rightarrow \psi'}$ , est proportionnelle au

---

carré de l'élément de matrice de l'hamiltonien  $H_{int}$  d'interaction atome-rayonnement, et au premier ordre cela donne :

$$P_{\psi \rightarrow \psi'} \propto | \langle \psi' | H_{int} | \psi \rangle |^2 \quad (\text{III.54})$$

Pour calculer les intensités des transitions radiatives entre deux états  $\psi$  et  $\psi'$  on est donc amené à calculer les éléments de matrice des composantes des opérateurs moments multipolaires de l'atome qui interagit avec le rayonnement : moment dipolaire, quadripolaire électrique ou dipolaire magnétique. Ces éléments de matrice ne sont non nuls que si les nombres quantiques associés aux états  $\psi$  et  $\psi'$  satisfont entre eux certaines relations que l'on appelle *règles de sélection*.

Généralement, les éléments de matrice de l'opérateur dipolaire électrique  $\vec{D} = -e \sum_i \vec{r}_i$ , lorsqu'ils sont non nuls, sont bien plus grands que ceux de l'opérateur dipolaire magnétique (lorsqu'ils sont non nuls), les transitions radiatives habituellement observées connectent des états de parités opposées.

Dans le cas de spectre d'ions de lanthanides faiblement chargés, les transitions radiatives les plus probables sont de type dipolaire électrique, il est montré que pour une transition  $\sigma$  partant d'un état excité, et d'un poids statistique  $g = 2J + 1$ , peut être définie par l'expression :

$$gA = \frac{64\pi^4 e^2 a_0}{3h} S \sigma^3 \quad (\text{III.55})$$

Où  $A$  : le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée.

Et  $S$  la force de raie d'une transition entre deux niveaux  $\psi$  et  $\psi'$  définie par

$$S = | \langle \psi | \sum_i \vec{r}_i | \psi' \rangle |^2.$$

Les intensités de raies sont proportionnelles à  $gA$  et à un facteur de population de niveaux qui dépend de nombreux processus élémentaires comme l'excitation et la désexcitation radiatives ou collisionnelles.

Une autre quantité très utilisée, notamment en astrophysique, pour la détermination de l'abondance des éléments dans les étoiles est *la force d'oscillation* qui s'exprime par  $f = (mc/8\pi^2 e^2 \sigma^2) A$ .

### III.4.3 Règles de sélection

Une transition électronique est analysée comme un changement de population entre un niveau d'énergie fondamentale occupée et un autre excitée vacante. Mais toutes les

transitions énergétiquement possibles ne sont pas permises. Les règles de sélection déterminent si une transition est permise ou interdite. Ces règles découlent des propriétés angulaires des éléments de matrice de transition qui font intervenir des opérateurs moments multipolaires de l'atome. Les transitions ne sont possibles que si l'élément de matrice correspondant est non nul. Dans le tableau (III.2), nous exposons les règles de sélections pour les différents types de transitions et dans le cas d'un schéma de couplage LS.

	Dipolaire électrique (E1) Permise	Dipolaire magnétique (M1) Interdite	Quadripolaire électrique (E2) Interdite
Règles rigoureuses	Changement de parité $\Delta l = 0, \pm 1$ $\Delta J = 0, \pm 1$ $0 \nrightarrow 0$	Pas de changement de parité $\Delta l = 0, \pm 1$ $\Delta J = 0, \pm 1$ $0 \nrightarrow 0$	Pas de changement de parité $\Delta l = 0, \pm 1, \pm 2$ $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ $0 \nrightarrow 0, \frac{1}{2} \nrightarrow \frac{1}{2}, 0 \nrightarrow 1$
Couplage LS	$\Delta S = 0$ $\Delta L = 0, \pm 1$ $0 \nrightarrow 0$	$\Delta S = 0$ $\Delta L = 0$ $\Delta J = \pm 1$	$\Delta S = 0$ $\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$ $0 \nrightarrow 0, 0 \nrightarrow 1$

TABLE III.2 – Règles de sélection pour différents types de transitions discrètes.

### III.4.4 Durée de vie radiative

La détermination de la durée de vie radiative dans les atomes constitue un domaine très important dans la physique. Différentes techniques (spectroscopie laser, par faisceau-lame, déplacement de phase, ...) ont été mises au point pour la détermination de cette grandeur. C'est une grandeur intrinsèque d'un niveau  $k$  liée aux probabilités de transition. Si l'on considère ce niveau est peuplé, à l'instant  $t$ , la variation de population du niveau  $k$  est supposé due uniquement aux émissions spontanées et que le phénomène de cascades est inexistant, on écrira alors

$$\frac{dN_k(t)}{dt} = - \sum_i A_{ki} N_k(t) \quad (\text{III.56})$$

et

$$N_k(t) = N_k(0) e^{-\sum_i A_{ki} t} = N_k(0) e^{-\frac{t}{\tau_k}} \quad (\text{III.57})$$

Où  $N_k(0)$  et  $\tau_k$  sont respectivement la population initiale et la *durée de vie radiative* du niveau  $k$  définie, avec

$$\tau_k = \frac{1}{\sum_i A_{ki}} \quad (\text{III.58})$$

$$A_{ki} = \sum_{M_i} a_{ki} \quad (\text{III.59})$$

### III.5 Méthode paramétrique - Code Cowan

Dans notre travail d'interprétation des spectres d'émission de lanthanides faiblement ionisés ( $Er^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$  et  $Ho^{3+}$ ), nous appliquons la méthode paramétrique de Racah-Slater[53] à travers la chaîne de codes R.D Cowan [54] en considérant les intégrales de Slater comme des paramètres ajustables à partir des valeurs d'énergies expérimentales. Le Code R.D Cowan nous permettent de résoudre l'équation de Schrödinger pour un atome (ion) mono ou polyélectronique. Les valeurs propres sont alors utilisées pour évaluer les transitions radiatives dipolaires ou quadripolaires électriques ou magnétiques puis de pouvoir étudier les propriétés radiatives, les niveaux d'énergie et les probabilités de transition de l'atome (ion) en question. Le calcul paramétrique se fait avec le choix initial d'un ensemble de paramètres  $P_0$  et la diagonalisation de l'hamiltonien du système, nous donne les valeurs propres et les vecteurs propres de celui-ci en fonction des  $P_0$ . En introduisant les niveaux d'énergies expérimentaux, les paramètres sont calculés itérativement par un ajustement par moindres carées *Least Square*(LSQ) pour nous donnés un nouvel ensemble de paramètre  $P_1$  de façon a minimisé l'écart quadratique moyen entre les valeurs des énergies calculées  $E_{cal}$  et expérimentales  $E_{exp}$  :

$$\langle \Delta E \rangle = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (E_{exp}^i - E_{cal}^i)^2}{(N - P)}} \quad (\text{III.60})$$

Où  $N$  est le nombre de niveaux expérimentaux et  $P$  le nombre de paramètres. Le cycle (diagonalisation LSQ) est répété jusqu'à ce que la convergence soit atteinte. Ce calcul fournit aussi les énergies niveaux théoriques calculées inconnues de la configuration. N.B : Le calcul paramétrique ne peut se faire si le nombre de niveaux expérimentaux est inférieur au nombre de paramètres laissés libres ou sous le même rapport.

La chaîne de code Cowan est composée de quatre routines (RCN, RCN2, RCG, RCE) (Figure III.1(en bleu)), utilisé pour calculer les structures et les spectres atomiques via la méthode de superposition des configurations.

- RCN : Utilise la méthode Hartee-Fock avec une correction relativiste pour calcul les fonctions d'onde monoconfigurationnelle, les intégrales de Slater ou parties radiales électrostatiques( $F^k$  et  $G^k$ ), de spin-orbite ( $\xi$ ), c'est-à-dire les paramètres  $P_{HFR}$ . En somme, toutes les intégrales nécessaires pour le calcul des niveaux énergies.
- RCN2 : En utilisant les données de sorties de RCN, elle calcul les intégrales de Coulomb ( $R^k$ ) d'interactions de configurations et prépare les fichiers d'entrées (out2ing  $\implies$  ING11) pour la routine suivante.

- RCG : Les données (ING11) de la routine précédente sont utilisées pour la mise en place des matrices énergies pour chaque valeur de moment angulaire total  $J$  en calculant les différents coefficients angulaires des différents éléments de matrice hamiltonien puis de diagonaliser cette dernière pour chaque parité. Finalement, on obtient les valeurs propres des niveaux d'énergie et les vecteurs propres qui sont utilisé pour le calcul des probabilités de transitions et donc toutes les observables physiques (facteur de Landé, durée de vie, ...).
- RCE : Cette routine dépend essentiellement de la disponibilité des données expérimentales, car c'est avec ces dernières que les valeurs des énergies moyennes et les paramètres radiaux sont ajustés pour obtenir des  $P_{fit}$  en minimisant par moindres carrés (LSQ) les écarts entres les énergies expérimentales et calculées. Les nouveaux paramètres obtenus sont introduit dans la routine RCG pour améliorer les fonctions d'onde.

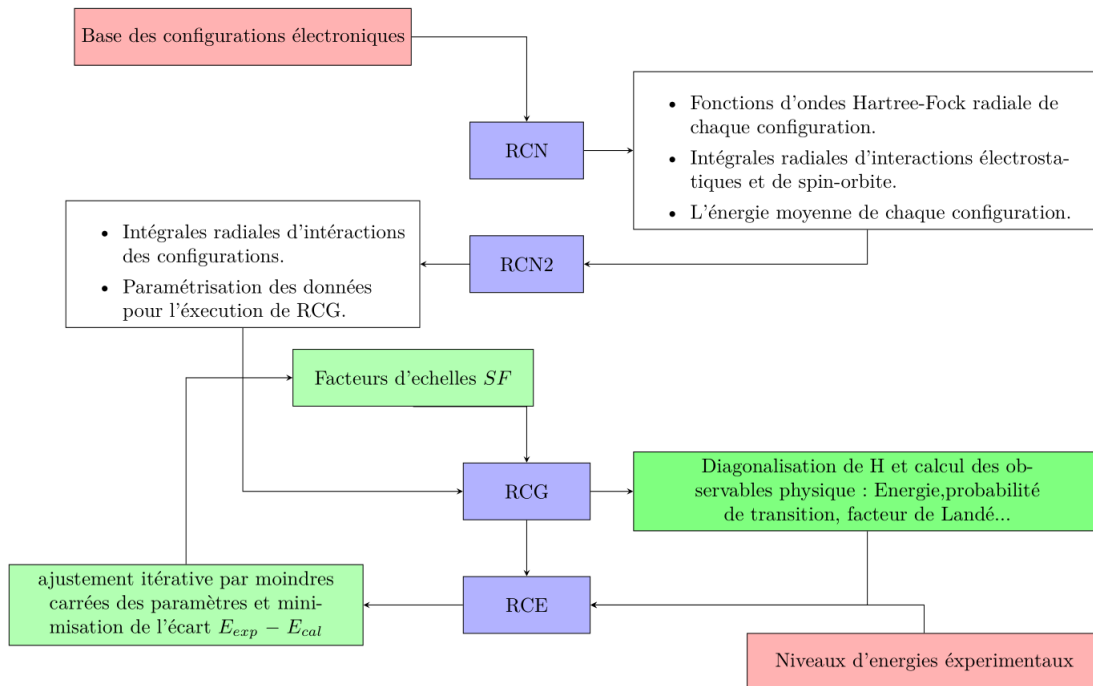


FIGURE III.1 – Organigramme de fonctionnement du Code R.D. Cowan.

Les paramètres radiaux et les énergies moyennes peuvent être mis à l'échelle à l'aide des *facteurs d'échelle* ( $SF = P_{fit}/P_{HFR}$ ) avant l'introduction des données expérimentales. En utilisant des  $SF$  estimé à partir de spectres voisins par comparaison isoélectrique ou isoionique avec un autre ion. Ces facteurs suivent une évolution régulière tout au long de la séquence de spectre de lanthanides trois fois ionisés (Ln IV) comme le montre la Figure III.2 pour les intégrales radiales de Slater  $F^2(ff)$ ,  $F^4(ff)$ ,  $F^6(ff)$  et  $\zeta_f$  [55, 56], [57].

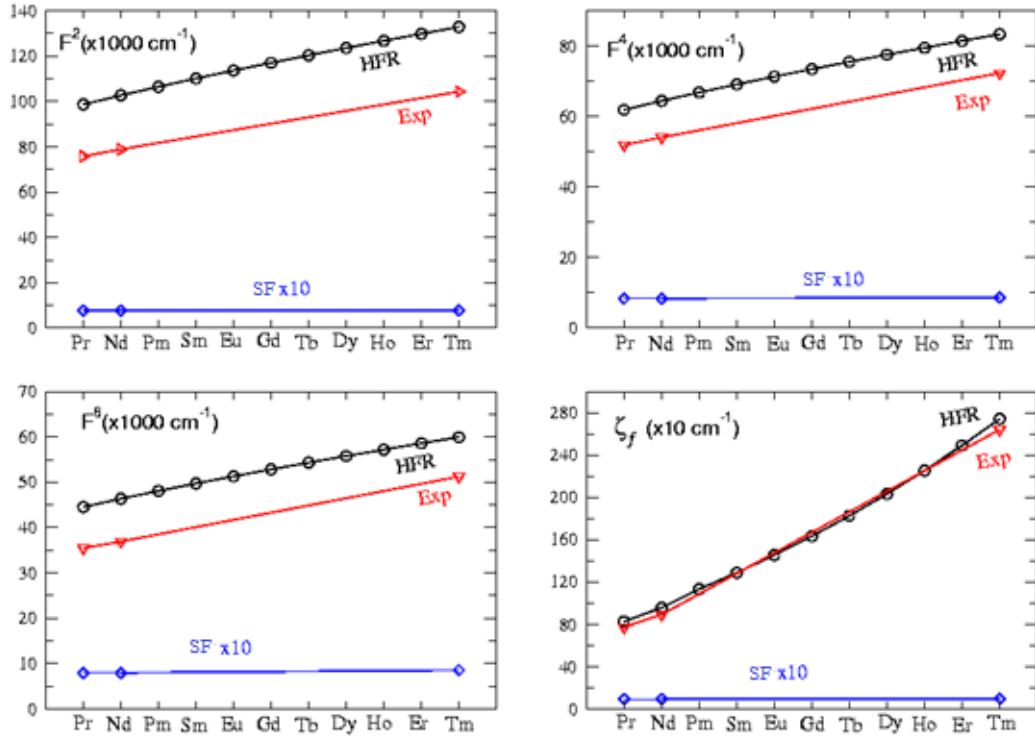


FIGURE III.2 – Evolution des Facteurs d'échelle  $F^2(ff)$ ,  $F^4(ff)$ ,  $F^6(ff)$  et  $\zeta_f$  le long de la séquence de LnIV.

## III.6 Analyse spectrale

### III.6.1 Recherche de niveaux d'énergie expérimentaux - Principe de combinaison de Ritz

Les niveaux d'énergies sont les principales observables qu'on cherche en se basant sur les listes de raies expérimentales et guidées par les prédictions théoriques afin d'assurer la cohérence entre les intensités des raies spectrales et des probabilités de transition  $gA$ .



Cette recherche est basée sur le fait que chaque raie observée représente une transition radiative entre deux niveaux d'énergie de parités opposées. Le Principe de combinaison de Ritz [58] exprime la conservation de l'énergie et peut être écrit comme le calcul d'écart entre les niveaux, en unité de nombres d'ondes comme suit :

$$\sigma_{ji} = \sigma_{ij} = |E_j^{sup} - E_i^{inf}| \quad (\text{III.61})$$

Ce qui nous permettra, comme le montre la Figure III.3, d'identifier un niveau inconnu  $E_j^{sup}$  lié par une transition  $\sigma_{ji}$  à un niveau  $E_i^{inf}$  déterminé, et cela, en obéissant aux règles de sélection énoncées avant ( $\Delta l = \pm 1; \Delta J = \pm 1, 0$  et  $0 \rightarrow 0$ ).

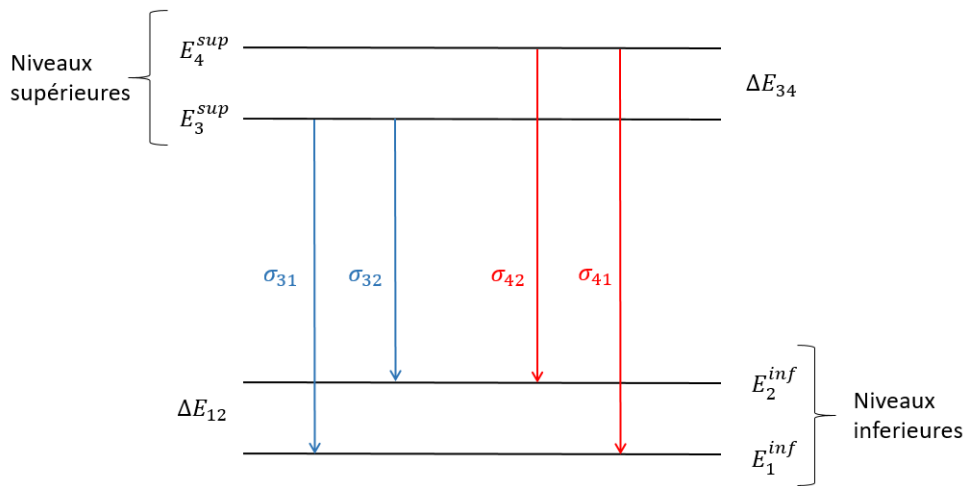


FIGURE III.3 – Principe de combinaison Ritz pour la recherche des niveaux d'énergie.

Il faut noter que la recherche des niveaux passe obligatoirement par l'identification des raies spectrales, cette dernière est une étape très délicate, les concordances fortuites de longueurs d'onde mal mesurées sont observées à cause de la forte densité de raies et la limite de résolution de spectrographe qui est de l'ordre de  $0.008 \text{ \AA}$ . Par conséquent, la cohérence entre les intensités observées et les probabilités de transition calculées doit intervenir pour confirmer les identifications.

Cette recherche peut se faire de manière manuelle, mais la densité des niveaux d'énergie des spectres et le très grand nombre de raies de transitions rend la tâche ardue. Pour cela nous utilisons des programmes informatiques basés sur ce principe, à savoir les programmes *Recher* et *Iden*.

### III.6.2 Programme Recher

Ce programme basé sur le principe de combinaison de Ritz est généralement utilisé dans la recherche des premiers niveaux d'un spectre inconnu. Il calcule systématiquement les écarts entre les nombres d'ondes de transitions de forte intensités (Figure III.3), pour faire apparaître les écarts entre les niveaux éventuels de mêmes parités. Schématiquement le calcul se fait comme suit :

$$\begin{aligned} \Delta E_{34} &= |\sigma_{41} - \sigma_{31}| = |\sigma_{42} - \sigma_{32}| \\ \Delta E_{21} &= |\sigma_{41} - \sigma_{42}| = |\sigma_{31} - \sigma_{32}| \end{aligned} \quad . \quad (\text{III.62})$$

Le programme Recher peut aussi calculer les niveaux de spectre partiellement connu en appliquant de manière directe le principe de combinaison de Ritz. Il utilise les données d'entrées suivantes :

- La liste de longueurs d'onde expérimentale fournie par la mesure issue par Spectra ou GFit.10.
- Une liste de niveaux d'énergie expérimentaux connus de la parité opposée au niveau rechercher et leurs nombres quantique  $J$ .
- Un fichier d'entrée spécifique où l'on doit spécifier la gamme de nombre d'ondes de recherche des combinaisons possibles avec le niveau connu, le nombre quantique  $J$  du niveau recherché ainsi que l'écart maximum permis entre deux valeurs du même niveau (erreur sur le niveau).

L'exécution du programme nous donnera un fichier de sortie contenant tous les niveaux d'énergie avec au moins deux transitions vers deux niveaux connus dans la gamme précisée auparavant. Dans la liste des niveaux sortie, la présence de concordances fortuites nous oblige à comparer les intensités expérimentales avec les probabilités de transitions  $gA$  calculées théoriquement (Étape RCG, code R.D Cowan) pour identifier le bon niveau. Ce dernier est finalement introduit dans la routine RCE (Figure III.1) pour ajustement.

### III.6.3 Programme IDEN

La recherche des niveaux d'énergies d'ion de lanthanides est rendu très délicate à cause de la densité des raies spectrale dans les spectres d'émission, on peut voir dans le chapitre précédant la figure II.5, un aperçu du nombre de raies dans une petite portion

du spectre expérimentale de  $Dy^{3+}$ . Pour palier à cela, V. I. Azarov a conçu un logiciel [31, 32] comportant une interface graphique permettant de visualiser une très grande quantité de données expérimentale et théoriques simultanément.

Afin de chercher les niveaux d'énergies et identifier les raies spectrales, le logiciel IDEN compile les données théoriques et expérimentales avec des fichiers d'entrées spécifiques

- Une liste de niveaux d'énergie calculés (ou théoriques), de leurs nombres quantiques et de leurs états électroniques (*enlev.dat*).
- Une liste de nombres d'ondes calculés (ou théoriques) et de leurs probabilités de transition ( $gA$ ) (*trans.dat*).
- Une liste de longueurs d'onde de raies expérimentale mesurées et de leurs intensités correspondantes (*dlv.dat*).

Le principe de fonctionnement de ce logiciel s'appuie sur le principe de combinaison de Ritz, mais de manière très astucieuse, comme le montre la Figure III.4 schématique ci-dessous

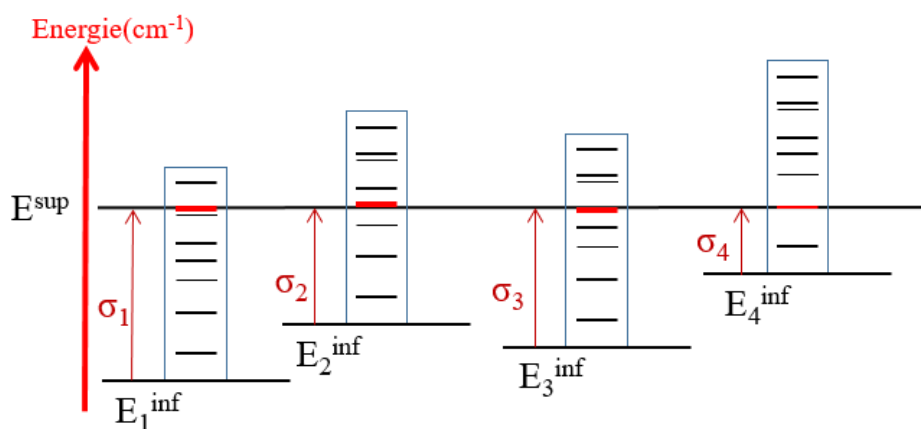


FIGURE III.4 – Schéma de fonctionnement du logiciel IDEN.

L'interface est divisée en plusieurs colonnes où chacune d'entre elles comporte l'image totale du spectre expérimental enregistré (PP ou PP) dans l'échelle des nombres d'ondes et dont l'origine est l'énergie d'un niveau fixé. L'alignement des raies au niveau supérieur (inconnu) signifie l'identification d'un niveau possible.

L'interface graphique du logiciel IDEN, nous permet de manipuler et visualiser une grande quantité de données, et cela, en visualisant les niveaux (identifiés ou non) et les raies de transitions (attribuées ou non). La Figure III.5 montre un aperçu de l'interface de ce logiciel.

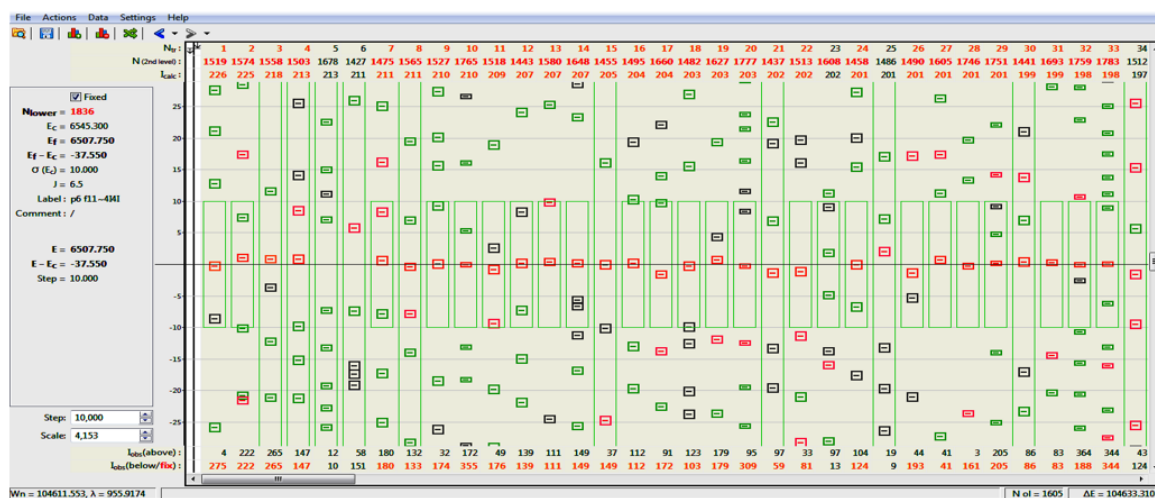


FIGURE III.5 – Interface graphique du logiciel IDEN pour la recherche des niveaux d'énergie.

On peut voir sur la figure ci-dessus que l'interface est composée de deux parties distinctes :

**A gauche (en gris) : les informations du niveaux rechercher (de haut en bas) :** Le numéro du niveau ( $N_{lower}$ ), son énergie calculée ( $E_c$ ), son énergie expérimentale (qui peut varier selon la recherche) ( $E_f$ ), l'écart entre les deux énergies, le nombre d'onde ( $\sigma(E_c)$ ), le nombre quantique  $J$ , la configuration et le terme spectral du niveau.

**A droite (en jaune) :** On retrouve toutes les colonnes des niveaux couplés au niveau rechercher par une transition où chaque transition est sous la forme d'une boîte (box) de couleur verte, rouge ou gris pour des raies spectrale non attribuées, attribués ou commentées respectivement, la hauteur de cette boîte représente l'incertitude de la raie en question. En haut de cette colonne on retrouve le numéro des niveaux d'énergies et la probabilité de transition de chacune des raies calculées par la routine RCG du code R.D. Cowan et en bas on retrouve la valeur de l'intensité expérimentale mesurée de chaque raie présente sur le spectrogramme de l'élément étudié.

Après avoir fixé l'énergie d'un niveau connu auparavant, on déplace l'image du spectrogramme jusqu'à avoir un bon alignement des transitions avec une bonne concordance entre les valeurs des intensités mesurées et des probabilités de transitions ce qui n'est pas systématique à cause des coïncidences fortuites qui peuvent exister, au contraire on peut omettre un bon niveau à cause d'une grande incertitude due au mauvais pointage

de la raie qui se retrouve décalée significativement du curseur (ligne noire au milieu qui est l'origine du niveau recherché).

### III.6.4 Optimisation des énergies des niveaux - Programme LOPT

Une étape incontournable dans la recherche des niveaux d'énergie, est l'optimisation des valeurs d'énergie en améliorant leurs précisions. Elle consiste à trouver les valeurs qui correspondent le mieux aux nombres d'ondes observés expérimentalement reliant deux niveaux de parités opposées. Cette méthode est basée sur un ajustement par moindres carrés, où l'on doit minimiser la somme des carrés des déviations entre les nombres d'ondes observés et leurs valeurs calculées dites de Ritz [59].

Il existait des outils mathématiques adaptés pour l'optimisation des niveaux d'énergies. Malgré des erreurs dans la programmation ou dans le calcul relative aux incertitudes sur les transitions [60, 61], le Programme ELCALC de Radziemski et al. [62] basé sur une méthode itérative fut l'un des outils les plus fiables et utilisé pour l'optimisation pendant de longues années comme pour l'étude des ions *ErII* [14], *NdIV* [63, 64], *TmII* [65], ... Ce pendant ce programme présente deux limitations majeures, la première, est qu'il ne calcula pas les incertitudes sur les nombres d'ondes prédis par Ritz des transitions entre les niveaux optimisés, la deuxième, est qu'il sépare l'ensemble des niveaux en deux sous-ensembles correspondant au deux parités et donc inclue uniquement les transitions autorisées, c'est-à-dire qu'entre des niveaux de parités opposés.

En 2006, A.E. Kramida utilise une version d'un programme d'optimisation intitulé LOPT pour *levels optimisation* pour améliorer l'optimisation des niveaux de l'ion *NeII* [66], ce programme a été créé 1995 au NIST (*National Institute of Standard and Technology*). La dernière version de ce programme a été écrit en 2011 [59] sous un langage *perl* et remédie aux problèmes d'optimisation. Généralement, les longueurs d'onde de Ritz calculées à partir des énergies optimisées des niveaux expérimentaux présentent une incertitude réduite par rapport aux longueurs d'onde mesurées.

## III.7 Conclusion

Le long de ce chapitre, nous avons présenté la démarche théorique et les principaux programmes et logiciels utilisés dans notre recherche. En commençant par l'approximation du champ central, la méthode paramétrique de Racah-Slater en passant par la méthode Hatree-Fock, cela nous permet de calculer les niveaux d'énergies et les différentes observables physiques des spectres complexes de lanthanides, tout cela im-

---

plémenté dans le code R.D Cowan, puis nous avons vu les différents programmes et logiciels nécessaires à la recherche et l'optimisation des niveaux d'énergies identifiés le long de notre recherche. Dans la partie suivante, nous allons discuter les résultats obtenus dans notre recherche sur les différents ions de lanthanides ( $Er^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$  et  $Ho^{3+}$ ) à l'aide de ces outils.

---

**Troisième partie**

**Résultats et discussion**

---





# Chapitre IV

## Étude des Configurations de l'ion libre

### $Er^{3+}$

#### IV.1 Introduction

Le spectre de l'ion libre  $Er^{3+}$  (Er IV) a fait l'objet de plusieurs études à commencer par la thèse de doctorat de Carter [16] de l'Université Johns Hopkins en 1966. Mais dans la conclusion de ces travaux, l'auteur estimait que le travail est incomplet. Sur la base de considérations semi-empiriques sur les propriétés thermodynamiques des lanthanides, Brewer [17] a prédit une différence d'énergie de  $75000 \pm 3000 \text{ cm}^{-1}$  entre les niveaux les plus bas des deux configurations  $4f^{11}$  et  $4f^{10}5d$ , ce qui était supérieure à la valeur de  $52481 \text{ cm}^{-1}$  donnée par Carter [16]. La compilation critique de Martin, Zalubas et Hagan [19] n'a retenu aucun des niveaux d'ErIV de [16] en raison d'incohérences avec la séparation d'énergie qui dérive du comportement systématique des configurations similaires dans les terres rares. Au lieu de cela, les valeurs théoriques calculées à partir d'études paramétriques des ions d'  $Er^{3+}$  dans les cristaux ont été répertoriées pour les niveaux les plus bas de  $4f^{11}$  dans [19] (maintenant transférées dans la base de données du NIST [67]). En 2015, une étude théorique des niveaux d'énergie d'  $Er^{3+}$  a été publiée par Radziute et al. [20] rapportant des énergies issues de calculs relativistes utilisant la méthode Multiconfigurationnelle Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) et d'interaction de configurations [68]. Cependant, en l'absence de niveaux d'énergie expérimentaux de la configuration fondamentale  $4f^{11}$ , les niveaux d'énergie théoriques ont été comparés aux valeurs  $E_{Exp}$  erronées de [16] et aux valeurs  $E_{Tho}$  d'ions dans le cristal recueillies dans [19].

Par conséquent, une analyse complètement révisée du spectre d'émission  $Er^{3+}$  était

---

indispensable. Elle a été entreprise par notre équipe de collaboration de l'observatoire de Paris-Meudon. Une première analyse de ce spectre d'Er IV a conduit à des résultats préliminaires rapportés lors de la conférence APIP en 2016 [21] et à une publication dans laquelle sont décrites les principales caractéristiques du spectre [22].

Le spectre d'émission d'étincelles sous vide de l'erbium a été enregistré dans la région de longueurs d'onde  $705 - 2460 \text{ \AA}$  où des transitions entre les quatre configurations de plus basses  $4f^{11}$ ,  $4f^{10}5d$ ,  $4f^{10}6s$  et  $4f^{10}6p$  ont lieu. Sur la base des prédictions théoriques des niveaux d'énergie et des probabilités de transition dipolaires électriques issues des codes Cowan [23], cette analyse révisée [22] a conduit à l'identification de 591 raies spectrales dans la gamme des longueurs d'onde  $850 - 2276 \text{ \AA}$  comme transitions entre les niveaux les plus bas de ces quatre configurations, et à la détermination de 120 niveaux d'énergie dans les deux parités. Les paramètres radiaux ont été obtenus par ajustement des moindres carrés dans les deux parités, minimisant les différences entre les énergies calculées et expérimentales. Ils ont été comparés aux intégrales Hartree-Fock *ab-initio* initiales, ainsi les corrections relativistes (*HFR*) et les facteurs d'échelle correspondants ont été dérivés. Les déviations moyennes de l'ajustement étaient respectivement de  $41 \text{ cm}^{-1}$  pour 38 niveaux connus des configurations de parité impaire  $4f^{11} + 4f^{10}6p$  et de  $49 \text{ cm}^{-1}$  pour 82 niveaux connus des configurations paires  $4f^{10}5d + 4f^{10}6s$ . Cette première analyse d'Er IV révisée dans [22] fait partie de nos études systématiques des spectres d'ions lanthanides menées pendant plusieurs années dans l'équipe, on cite entre autres, l'Yb V [69], le Nd IV [63, 64] et le Tm IV [70]. Les avancées connues dans la recherche des spectres de Nd IV [63] et de Tm IV [70] ont permis de montrer les régularités dans les sauts d'énergie électronique  $4f^{n-1}(5d - 6p)$  et  $4f^{n-1}(6s - 6p)$  le long de la période des lanthanides et ont confirmé les corrections suggérées à apporter pour les niveaux d'énergie de l'ion  $Er^{3+}$  (Er IV) [22]. Cependant, ces corrections ne remettaient pas en question les mesures des longueurs d'onde des raies d'Er IV présumées classées au-dessus de  $2000 \text{ \AA}$  rapportées dans [16], qui pourraient éventuellement être conservées.

En raison de la complexité du spectre Er IV et de la présence dans les expositions expérimentales de nombreuses raies inconnues, éventuellement d'autres degrés d'ionisation, l'analyse révisée précédente [22] s'est limitée à l'identification des raies observées les plus intenses et à la détermination des niveaux d'énergie en dessous  $176000 \text{ cm}^{-1}$ , mais cela a ouvert la voie à une analyse plus poussée. L'analyse approfondie présente a conduit à la détermination de 166 nouveaux niveaux d'énergie de  $Er^{3+}$ , en plus des 120 niveaux précédemment connus. L'augmentation du nombre de niveaux expérimentalement connus conduit à des paramètres mieux définis et à des prédictions améliorées

des niveaux d'énergie inconnus et des probabilités de transition dipolaires électriques. Les paramètres ajustés sont comparés aux intégrales *ab-initio* Hartree-Fock, y compris les corrections relativistes (HFR). Les déviations moyennes de l'ajustement sont respectivement de  $51 \text{ cm}^{-1}$  pour 65 niveaux connus des configurations impaires  $4f^{11} + 4f^{10}6p$  avec 9 paramètres, et de  $55 \text{ cm}^{-1}$  pour 221 niveaux connus des configurations paires  $4f^{10}5d + 4f^{10}6s$  avec 17 paramètres [71].

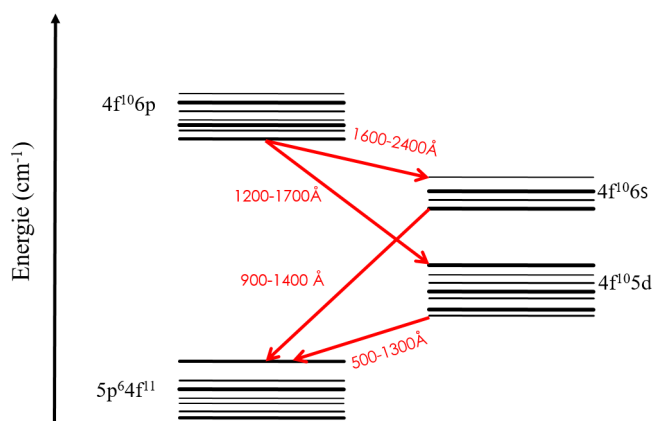
## IV.2 Analyse et détermination des niveaux d'énergie

l'ion d' $Er^{3+}$  contient 11 électrons de valence de la sous-couche  $4f$ , soit une configuration fondamentale  $4f^{11}$  impaire. Les premières configurations excitées considérées sont la configuration  $4f^{10}6p$  de même parité que la configuration fondamentale, et  $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$  de parité paire. La Figure IV.1 ci-dessous montre le diagramme des transitions inter-configurations de l'ion  $Er^{3+}$  et la gamme spectrale des transitions entre chacune des paires de configurations.

Dans le travail précédent, mené sur l'ion libre d'Er IV [22], à cause de la complexité du spectre, les auteurs se sont limités à l'identification des raies les plus intenses. Ce qui a permis de classer dans la gamme 850 - 2276 Å environ 6% du spectre expérimental de  $Er^{3+}$ , totalisant l'identification de 591 raies et la détermination de 120 niveaux d'énergie inférieurs  $176000 \text{ cm}^{-1}$  pour les différentes configurations. La déviation moyenne calculée avec la formule III.60 est de  $41 \text{ cm}^{-1}$  pour 38 niveaux des configurations impaires ( $4f^{11}$ , et  $4f^{10}6p$ ) et de  $49 \text{ cm}^{-1}$  pour 82 niveaux des configurations paires ( $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$ ). Dans ce travail, la même base de calcul a été utilisée pour l'extension de l'étude de l'ion  $Er^{3+}$ . Cela en insérant à l'entrée du code R.D Cowan les quatre configurations à cœur plein ( $4f^{11}$ ,  $4f^{10}6p$ ,  $4f^{10}5d$ , et  $4f^{10}6s$ .) et le jeu de paramètres (partie radiale des intégrales de Slater) dans la routine RCG.

Le but étant de déterminer des niveaux d'énergie ayant d'une part des  $J$  élevés, y compris ceux connectés avec un faible nombre de transitions, mais intenses, d'autre part des niveaux avec des  $J$  plus faibles avec des prévisions d'intensités très faibles. Nous avons commencé par élargir la gamme spectrale de recherche à 705 - 2460 Å pour exploiter tout le spectre enregistré et utilisé lors de l'étude précédente.

La recherche fut entamée par la recherche des premiers niveaux en déterminant des écarts entre différents niveaux totalement inconnus avec le programme Recher et de là nous avons pu, progressivement, construire une base de niveaux d'énergie exploitable sur le logiciel IDEN. Cela nous a permis d'identifier 166 nouveaux niveaux d'énergie de l'ion libre  $Er^{3+}$  dont 9 de la configuration fondamentale  $4f^{11}$  et 18 de la configuration

FIGURE IV.1 – Diagramme de transition de  $Er^{3+}$ .

$4f^{10}6p$ , ce qui ramène le nombre de niveaux identifiés des configurations impaires de 38 à 65 (27 nouveaux) et de déterminer 139 nouveaux niveaux des configurations paires ( $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$ ). Les figures ci-dessous IV.2 et IV.3 représentent en fonction de  $J$  les niveaux d'énergie expérimentaux déterminés (en rouge) comparés à ceux calculés (en noir) par le code R.D. Cowan après ajustement des paramètres de Slater des différentes configurations. On peut voir que la densité des niveaux déterminés est plus grande pour des  $J = 4.5, 5.5, 6.5$ . Cela est dû à l'étude de Meftah & al. qui se sont essentiellement intéressés à ces niveaux, caractérisés par un nombre important de transitions d'intensités mesurées et de probabilités de transitions élevées. Dans notre travail d'extension, nous avons pu identifier des niveaux dont les  $J$  sont supérieurs ou inférieurs à ceux trouvés précédemment. Dans le tableau A en annexe, nous présentons les valeurs optimisées des énergies de 286 niveaux déterminés en spécifiant pour chaque niveau l'incertitude, le nombre quantique  $J$ , le nombre de transitions classées impliquant sa détermination et les pourcentages de sa composition dans les cas de couplages  $LS$  et  $JJ$ .

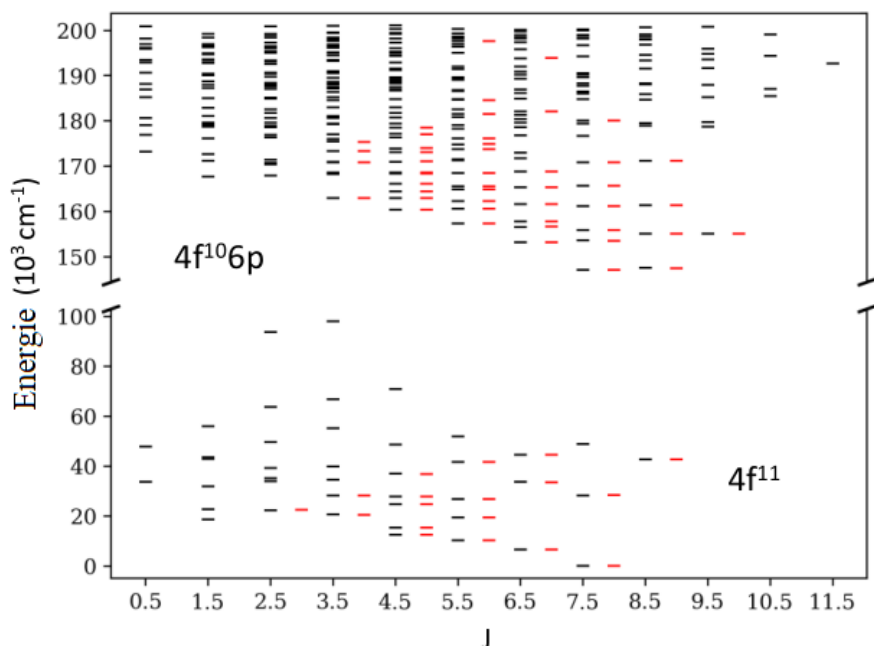


FIGURE IV.2 – Niveaux d'énergie de l'ion  $ErIV$  en fonction de  $J$  des configurations de parité impaire  $4f^{11}$  et  $4f^{10}6p$ . En noir : calculés, en rouge et décalé à droite : expérimentaux.

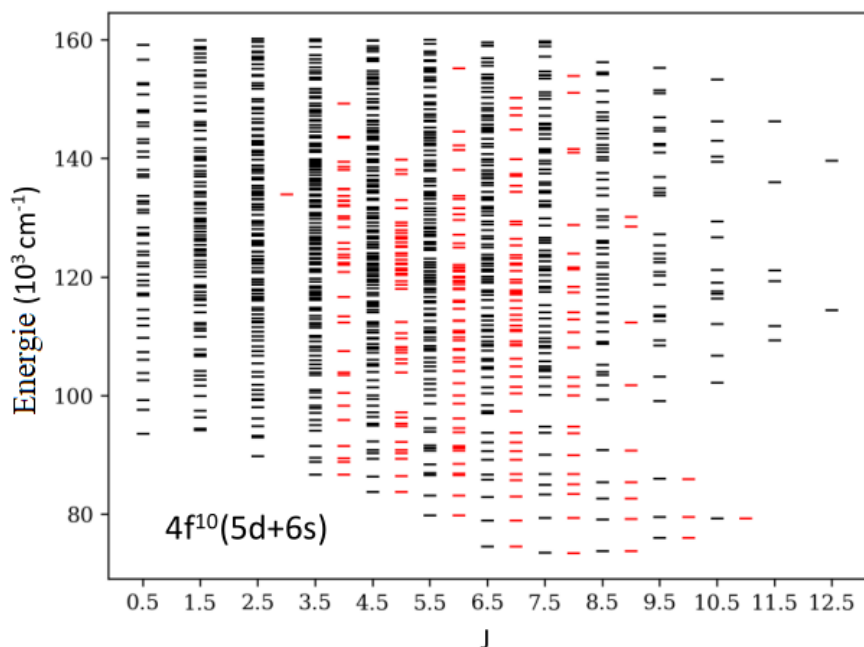


FIGURE IV.3 – Niveaux d'énergie de l'ion  $ErIV$  en fonction de  $J$  des configurations de parité paire  $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$ . En noir : calculés; en rouge et décalé à droite : expérimentaux.

Le passage d'un nombre total de niveaux déterminés de 120 à 286 (166 nouveaux) a conduit à la classification de 1045 raies spectrales ce qui représente  $\approx 11\%$  du spectre expérimental observé de l'ion  $ErIV$ . La figure ci-dessous IV.4 (I : de 705-2460 Å, II : 800-1100 Å) montre le progrès apporté par notre travail (b) dans l'identification des raies d'Er IV, comparé à l'identification précédente (a) et au spectre total (c).

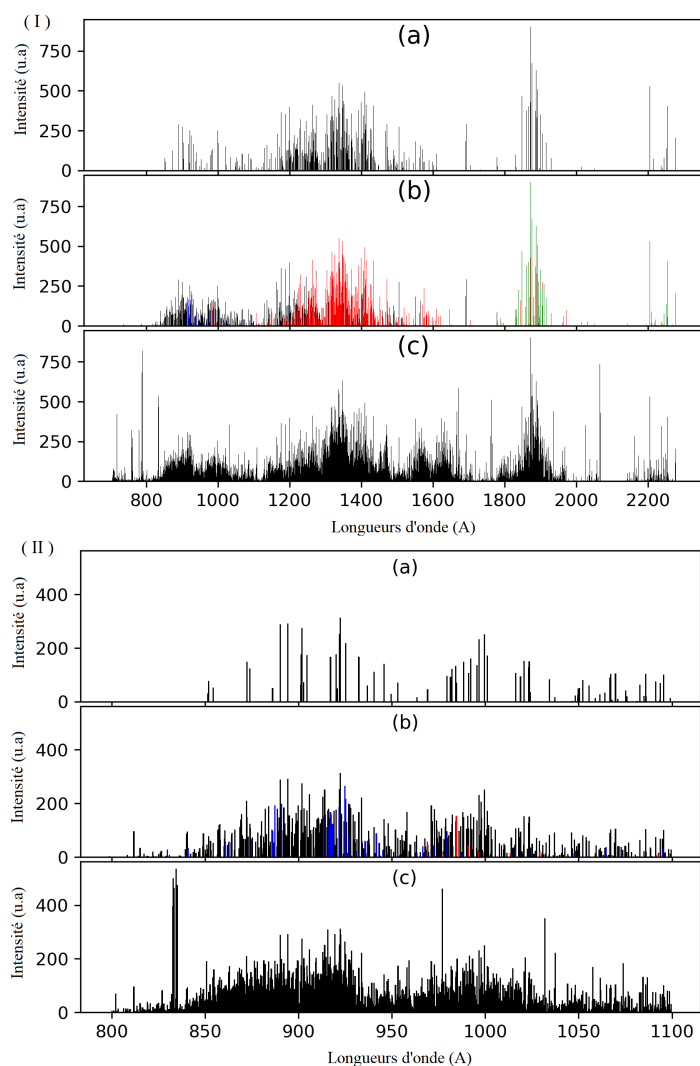


FIGURE IV.4 – Progrès dans l'identification des raies  $ErIV$  : (I) Le spectre total entre 705 et 2460 Å, (II) Agrandissement entre 800 et 1100 Å. (a) Raies précédemment identifiées [22]; (b) Transitions identifiées actuellement, noir :  $4f^{11} - 4f^{10}5d$ , bleu :  $4f^{11} - 4f^{10}6s$ , rouge :  $4f^{10}5d - 4f^{10}6p$ , vert :  $4f^{10}6s - 4f^{10}6s$ ; (c) Spectre expérimental à étincelles sous vide. Les intensités sont données en unités arbitraires et les longueurs d'onde en Å.

### IV.3 Validations des résultats

Dans notre travail, une évaluation critique des niveaux d'énergie et des raies spectrales identifiées est primordiale vu le nombre important de transitions classées. Pour ce faire, nous nous sommes appuyés sur les travaux de A. Kramida [72, 73].

Cette évaluation des résultats commence par la validation des écarts  $\Delta\lambda_{exp-Ritz}$  entre les longueurs d'onde expérimentales et celles de Ritz calculées par programme LOPT [59] comme le montre la Figure IV.5 suivante :

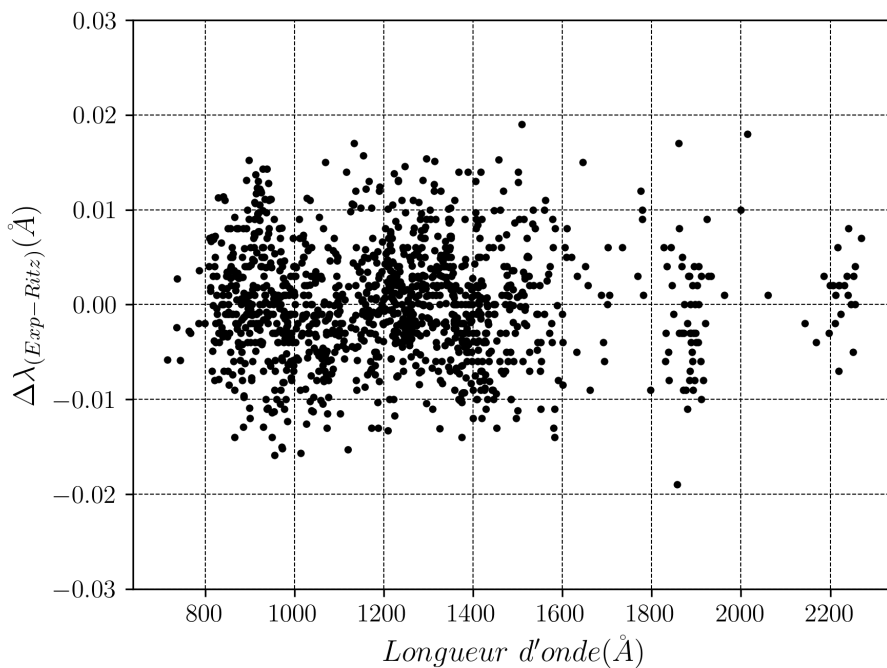


FIGURE IV.5 – Écarts  $\Delta\lambda_{exp-Ritz}$  en fonction de la longueur d'onde  $\lambda$

Pour toutes les raies entrant dans le processus d'optimisation, on constate que l'écart entre les valeurs des longueurs d'onde expérimentales et calculés (Ritz)  $|\Delta\lambda_{exp-Ritz}| < 0.02 \text{ \AA}$  dont environ 94%  $< 0.01 \text{ \AA}$ . Notons que la déviation standard (ou écart quadratique moyen) est de  $\approx 0.007 \text{ \AA}$ . ce qui dénote la précision de nos résultats.

La validation des intensités des raies spectrales est une étape incontournable. Comme ces dernières sont proportionnelles aux probabilités de transition ( $gA$ ) et à un facteur dépendant des populations des niveaux, elles dépendent de nombreux processus élémentaires tel que l'excitation par collisions électroniques des niveaux profonds ou la désexcitation des niveaux les plus élevés. Si l'on suppose que l'équilibre thermodynamique local est atteint dans les processus d'excitation de l'étincelle, on peut alors

écrire :

$$I_{obs} \propto (gA/\lambda)exp(-E_{sup}/kT) \quad (IV.1)$$

Où  $I_{obs}$  est l'intensité observée d'une raie spectrale,  $gA$  : la probabilité de transition,  $\lambda$  la longueur d'onde,  $E_{sup}$  : l'énergie du niveau supérieur,  $T$  : la température et  $k$  la constante de Boltzmann.

La température effective peut être facilement déterminée à partir de la courbe de Boltzmann, c'est-à-dire à partir de la pente linéaire de  $\ln(I_{obs}\lambda/gA)$  en fonction de l'énergie du niveau supérieur  $E_{sup}$  (Figure IV.6).

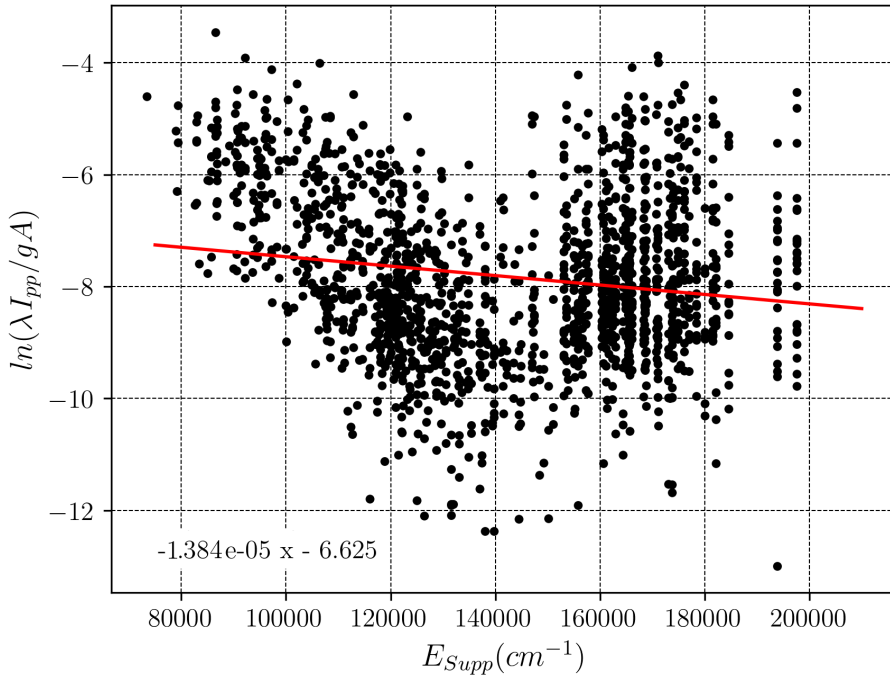


FIGURE IV.6 – Courbe de Boltzmann pour la détermination de la température effective de l'ion  $Er^{3+}$

Dans ce cas, nous obtenons une température effective de  $T_{eff} = 1.88 eV$ . Cette température est une fraction raisonnable de l'énergie d'ionisation de l' $Er^{3+}$  ( $42.42 eV$ ) [22].

Une autre validation de nos résultats consiste à comparer les  $gA_{TW}$  de notre travail avec celles calculées auparavant par Meftah & al. (voir Figure IV.7). On remarque sur la courbe de gauche que la majorité des raies sont en bonne concordance, hormis 11 raies dont l'erreur de transcription fut corrigée dans [71]. Après correction (à droite),



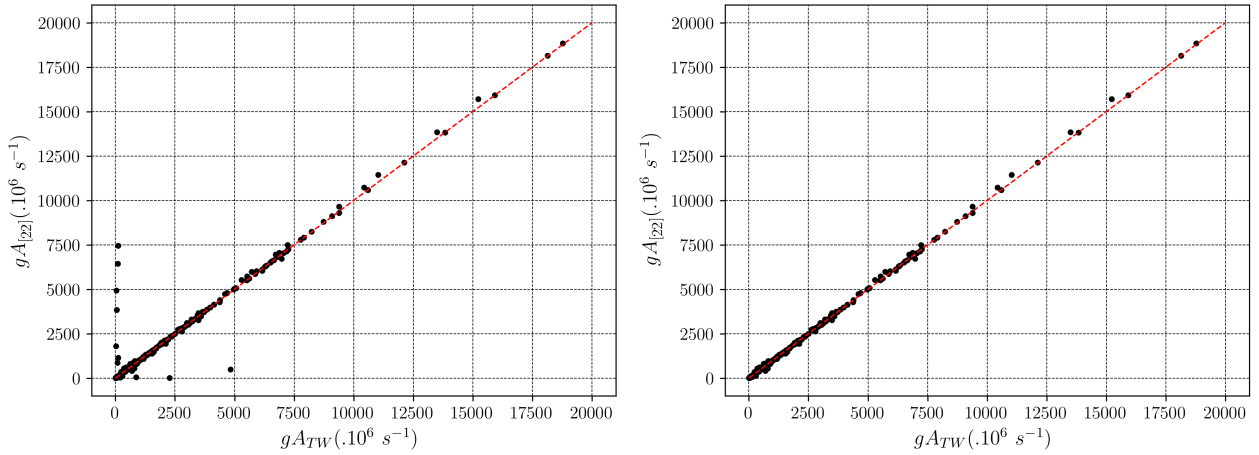


FIGURE IV.7 – Vérification de la linéarité de l'échelle des probabilités de transition de raies  $Er^{3+}$  entre les valeurs de notre travail  $gA_{TW}$  et  $gA_{[22]}$  avant (à droite) et après correction (à gauche).

on constate que toutes les raies sont au tour de la droite  $f(x) = x$ .

Après cette correction des  $gA$ , on a estimé les probabilités de transition en utilisant les raies de référence de Meftah & al. en fonction des forces de raies  $S$ , qu'on définit comme suit :

$$A_{ki} = \frac{16\pi^3}{2h\epsilon_0\lambda^3g_k} S = \frac{2.0261 \cdot 10^{18}}{\lambda^3g_k} S \quad (\text{IV.2})$$

On remarque de la Figure IV.8 que la plupart des raies spectrales sont autour de  $\ln(A_{TW}/A_{[22]}) = 0$  et que seulement 8% des raies dévient de cette valeur. Cette déviation est due à une meilleure estimation des valeurs des probabilités de transition dans notre calcul. L'introduction des nouveaux  $SF$  calculés à partir de la routine RCE du code Cowan, notamment celles des interactions de configuration ( $IC$ ), fait augmenter sensiblement la précision de ces probabilités, ce qui engendre ce type de déviation.

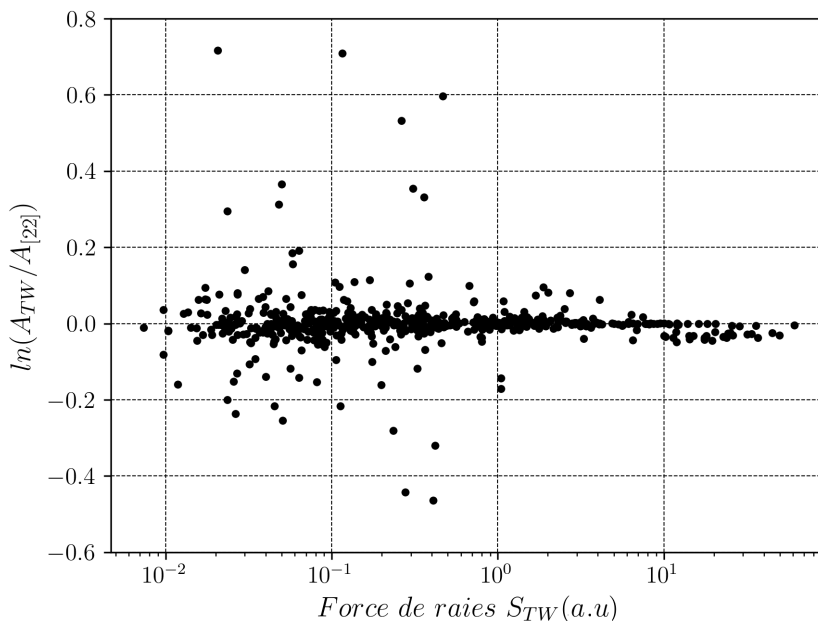


FIGURE IV.8 – Estimation des incertitudes des valeurs  $A_{TW}$  calculées pour l'ErIV.  $S$  est la force de raie et  $A_{[22]}$  les valeurs de référence.

## IV.4 Calcul paramétrique

L'extension de l'étude sur l'ion libre  $Er^{3+}$  avec l'ajout de 166 nouveaux niveaux d'énergie, induit aussi un meilleur ajustement des paramètres de Racah-Slater. Cela implique une meilleure précision des niveaux calculés ( $E_{calc}$ ). Dans les tableaux IV.1 et IV.2 qui suivent, nous comparons les paramètres radiaux de l'ion libre d' $Er^{3+}$  pour les deux parités, les écarts par rapport aux paramètres  $HFR$  et aussi une comparaison avec ceux de [22].

Dans le tableau IV.1, nous exposons les paramètres radiaux des configurations impaires  $4f^{11}$  et  $4f^{10}6p$  dont l'ajout de 27 nouveaux niveaux (9 de la configuration fondamentale) a eu pour effet une légère augmentation des 9 valeurs des paramètres laissés libres ou laissés varier dans le même rapport ( $r$ ), à l'exception du paramètre  $F^4(ff)$  qui a vu sa valeur dans les deux configurations diminuée de  $\approx 1100 \text{ cm}^{-1}$  en comparaison avec l'étude précédente ( $P_{prev}(unc.)$ ) (colonne 6 et 11 du tableau). On peut remarquer aussi sur ce même tableau, la réduction des incertitudes sur les paramètres comparativement à l'étude de Meftah & al.(entre parenthèses) de tous les paramètres de  $40 \pm 1 \%$  et une réduction 62% pour le paramètre d'interaction directe inter-configurations du deuxième ordre  $F^2(fp)$ .

---

Pour les interactions de configurations (IC), nous avons fait le choix gardé la même valeur  $SF$  utilisée auparavant, à savoir, 70% de leurs valeurs  $HFR$  ( $SF = 0.70$ ), qui, à notre échelle, fut la valeur la plus adéquate pour l'interaction entre la configuration fondamentale et la configuration  $4f^{10}6p$ .

---

TABLE IV.1 – Paramètres ajustés (en cm<sup>-1</sup>) pour les configurations de parité paire 4f<sup>11</sup> et 4f<sup>10</sup>6p d'Er IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 5 et 9 donnent les facteurs d'échelle  $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$  sauf pour les énergies moyennes  $E_{av}$  où  $P_{fit} - P_{HFR}$  sont donnés. Les contraintes sur certains paramètres sont indiquées dans les colonnes de l'incertitude «Unc.» : f comme "fixe" ou r comme "rapport fixe". A titre de comparaison, les paramètres ajustés précédemment [22] avec des niveaux moins expérimentaux sont donnés dans les colonnes 6 et 11 suivis de leurs incertitudes entre parenthèses.

Param. $P$	4f <sup>11</sup>					4f <sup>10</sup> 6p				
	$P_{fit}$	Unc.	$P_{HFR}$	$SF$	$P_{prev}$	$P_{fit}$	Unc.	$P_{HFR}$	$SF$	$P_{prev}$
$E_{av}$	36095	19	0		35997(44)	207157	31	152888	54270	207022(76)
$F^2(ff) (r)$	100610	169	129798	0.775	99750(428)	105888	178	136606	0.775	104983(450)
$F^4(ff) (r)$	71615	301	81425	0.880	72727(768)	75682	318	86049	0.880	76857(811)
$F^6(ff) (r)$	51221	212	58575	0.874	50541(516)	54218	224	62003	0.874	53498(546)
$\alpha$	24.5	f			24.5(3)	17.3	f			17.3(f)
$\beta$	-500	f			-500(f)	-500	f			-500(f)
$\gamma$	1480	f			1480(f)	1480	f			1480(f)
$\zeta_f (r)$	2406	4	2438	0.987	2407(4)	2551	4	2586	0.986	2552(4)
$\zeta_p$						5311	13	4525	1.174	5310(12)
$F^1(fp)$						280	55			292(51)
$F^2(fp)$						7706	282	9398	0.820	7543(451)
$G^2(fp)$						2264	f	2405	0.941	2264(f)
$G^4(fp)$						2053	f	2181	0.941	2053(f)
Interaction de configuration										
$f^{11} - f^{10}p$										
$R^2(ff,fp)$	-3701	f	-2591	0.70						
$R^4(ff,pf)$	-2008	f	-1406	0.70						

r : Tous les paramètres du même nom sont liés par un même rapport constant

f : paramètres fixé

TABLE IV.2 – Paramètres ajustés (en  $\text{cm}^{-1}$ ) pour les configurations de parité paire  $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$  d’Er IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 5 et 9 donnent les facteurs d’échelle  $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$  sauf pour les énergies moyennes  $E_{av}$  où  $P_{fit} - P_{HFR}$  sont donnés. Les contraintes sur certains paramètres sont indiquées dans les colonnes de l’incertitude «Unc.» : f comme ”fixe” ou r comme ”rapport fixe” . A titre de comparaison, les paramètres ajustés précédemment [22] avec des niveaux moins expérimentaux sont donnés dans les colonnes 6 et 11 suivis de leurs incertitudes entre parenthèses.

Param. $P$	$4f^{10}5d$				$4f^{10}6s$					
	$P_{fit}$	Unc.	$P_{HFR}$	$SF$	$P_{prev}$	$P_{fit}$	Unc.	$P_{HFR}$	$SF$	$P_{prev}$
$E_{av}$	133469	8	78792	54677	133502(67)	156904	23	104113	52791	156929(76)
$F^2(ff)$ (r)	105796	77	136066	0.778	106024(601)	106174	77	136550	0.778	106402 (r)
$F^4(ff)$ (r)	75813	150	85682	0.885	75440(1152)	76104	150	86011	0.885	75730(r)
$F^6(ff)$ (r)	53947	127	61731	0.874	54152(879)	54159	128	61975	0.874	54365(r)
$\alpha$	17.6	f			17.6(1)	17.6	f			17.6(f)
$\beta$	-500	f			-500(f)	-500	f			-500(f)
$\gamma$	1480	f			1480(f)	1400	f			1400(f)
$\zeta_f$	2550	4	2579	0.989	2555(5)	2557	4	2585	0.989	2562(r)
$\zeta_d$ (r)	1630	8	1755	0.929	1635(11)					
$F^1(fd)$	1142	80			1066(109)					
$F^2(fd)$	24419	135	30311	0.806	24370(218)					
$F^4(fd)$	16266	222	14390	1.130	16574(423)					
$G^1(fd)$	8598	40	12410	0.693	8697(88)					
$G^2(fd)$ ( $r_1$ )	1733	140			1939(232)					
$G^3(fd)$	10045	189	10500	0.957	10139(291)					
$G^4(fd)$ ( $r_1$ )	1733	140			1939(232)					
$G^5(fd)$	6571	170	8108	0.810	6661(224)					
$G^3(fs)$						2703	109	3286	0.822	2734(112)
Interaction de configuration										
$f^{10}d - f^{10}s$										
$R^2(fd,fs)$ ( $r_2$ )	1232	110	1379	0.893	965(f)					
$R^3(fd,sf)$ ( $r_2$ )	2762	246	3091	0.894	2164(f)					

r : Tous les paramètres du même nom sont liés par un même rapport constant

f : paramètres fixé

## IV.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étendu l'analyse précédente du spectre d'Er IV [22] conduisant à l'identification de 1022 nouvelles raies d'Er IV (sur 1647 transitions) dans la gamme UV de 715-2277 Å et à la détermination de 168 nouveaux niveaux d'énergie appartenant aux configurations  $4f^{11}$ ,  $4f^{10}5d$ ,  $4f^{10}6s$  et  $4f^{10}6p$ , atteignant ainsi un total de 288 niveaux d'énergie de cet ion. La forte augmentation du nombre de niveaux d'énergie a conduit à des paramètres d'énergie mieux définis des configurations électroniques impliquées, ce qui améliore la prédiction des niveaux d'énergie inconnus.

---

# Chapitre V

## Étude des Configurations des ions libres $Dy^{3+}$ et $Ho^{3+}$

### V.1 Introduction

La deuxième partie de notre travail est consacrée à l'étude préliminaire de deux autres ions de lanthanides trois fois ionisés : le dysprosium ( $Dy^{3+}$ ) et l'holmium ( $Ho^{3+}$ ), avec respectivement  $Z = 63$  pour une configuration fondamentale est  $[Xe]4f^9$  et  $Z = 64$  avec une configuration  $[Xe]4f^{10}$ . Du fait d'appartenir à la fin de la séquence des lanthanides, le couplage spin-orbite est supérieur ou de même ordre de grandeur que le couplage électronique ( $H_{so} \geq \approx H_{e-e}$ ), ce qui rend les règles de sélection du couplage  $LS$  moins respectées.

### V.2 Étude préliminaire de l'ion $Dy^{3+}$ (Dy IV)

Le spectre d'émission de l'ion libre  $Dy^{3+}$  (DyIV) est jusqu'à présent complètement inconnu. Des spectres expérimentaux ont été enregistrés au NIST. Mais les premiers essais furent infructueux, et ceci est dû probablement à la complexité du spectre et au domaine restreint de longueurs d'onde enregistré.

Pour entamer la recherche des premiers niveaux du spectre de  $Dy^{3+}$ , la partie manquante, à courtes longueurs d'onde, de 400 à 1000Å a été récemment enregistrée à l'Observatoire de Paris-Meudon. Le dispositif comprend une source à étincelle initiée et des écrans phosphore photostimulable (IP) comme support d'enregistrement pour une meilleure mesure des intensités. Les spectres sont scannés avec le scanner STA-

---

RION (FLA-9000) de FUJIFILM, complétant alors celles déjà fournies par le NIST qui s'étendent de 950-2100Å, comme le montre la Figure V.1.

En prévision de la mesure et de dépouillement de ces nouveaux spectres expérimentaux on cherche une meilleure prédiction théorique des niveaux d'énergie et des probabilités de transition. Une étude préliminaire sur l'ion de  $Dy^{3+}$  en utilisant les facteurs d'échelle de l'ion  $Er^{3+}$  a été menée en utilisant le code R.D. Cowan [23]. La base de calcul comporte quatre configurations  $4f^9$ ,  $4f^86p$  de parité impaire (Figure V.2) et  $4f^85d$ ,  $4f^86s$  de parité paire (Figure V.3). Cette étude nous montre la complexité de la structure de cet ion. En effet, le nombre de niveaux est 198 dans la configuration fondamentale  $4f^9$ , 1697 dans la configuration  $4f^86p$ , 2728 et 573 pour les configurations paires  $4f^85d$  et  $4f^86s$  respectivement. À titre d'exemple, les raies théoriques les plus intenses seront recherchés dans les faisceaux de transitions  $4f^9-4f^85d$  et  $4f^85d-4f^86p$ . Ces derniers sont composés respectivement de 35429 et 75698 (avec des  $gA \geq 10^{+8}s^{-1}$ ). Cela confirme l'évolution de la complexité des spectres de lanthanides en allant progressivement vers le milieu de la couche  $4f^n$ .

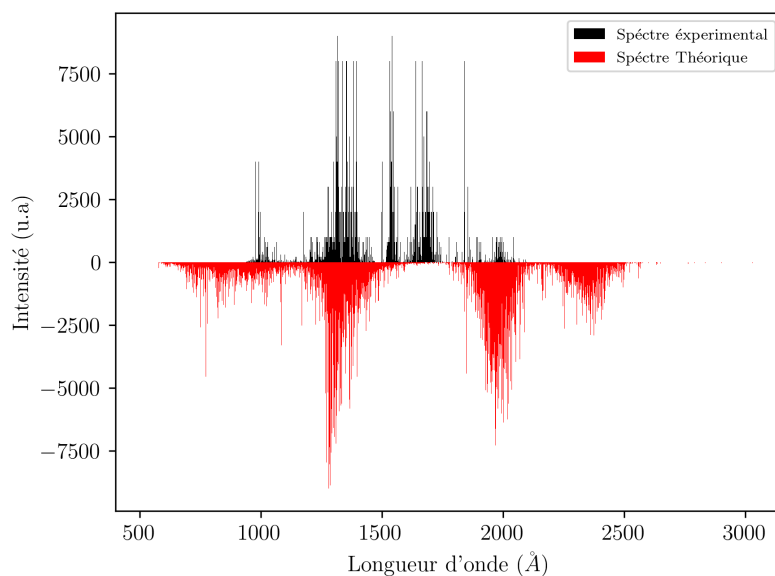


FIGURE V.1 – Comparaison entre le spectre expérimental fourni par NIST (en noir) et le spectre théorique (en rouge) de l'ion  $Dy^{3+}$ . Les intensités sont en unité arbitraire.

Dans les tableaux V.1 et V.2, nous présentons les paramètres utilisés dans nos calculs pour les configurations impaires et paires respectivement de l'ion  $Dy^{3+}$ , en multipliant les paramètres  $HFR$  de ce dernier par les  $SF$  de  $Er^{3+}$ . (Les énergies moyennes  $E_{av}$  ont été estimées d'après les prédictions de L.Brewer [18])



TABLE V.1 – Paramètres ajustés (en cm<sup>-1</sup>) pour les configurations de parité paire 4f<sup>9</sup> et 4f<sup>8</sup>6p du Dy IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 4 et 7 donnent les facteurs d'échelle  $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$  sauf pour les énergies moyennes  $E_{av}$  où  $P_{fit} - P_{HFR}$  sont donnés.

Param. $P$	4f <sup>9</sup>			4f <sup>8</sup> 6p		
	$P_{fit}$	$P_{HFR}$	$SF$	$P_{fit}$	$P_{HFR}$	$SF$
$E_{av}$	57742	0		208292	150549	57743
$F^2(ff)$	95000	123535	0.769	100386	130541	0.769
$F^4(ff)$	69223	77517	0.893	73472	82276	0.893
$F^6(ff)$	48130	55769	0.863	51174	59298	0.863
$\alpha$	24.5			17.3		
$\beta$	-500			-500		
$\gamma$	1480			1480		
$\zeta_f$	1960	1985	0.987	2093	2120	0.987
$\zeta_p$				4796	4088	1.173
$F^1(fp)$				292		
$F^2(fp)$				7627	9498	0.803
$G^2(fp)$				2280	2422	0.941
$G^4(fp)$				2047	2203	0.941
Interaction de configuration						
4f <sup>9</sup> -4f <sup>8</sup> 6p						
$R^2(ff,fp)$	-1929	-2757	0.70			
$R^4(ff,fp)$	-1093	-1562	0.70			

TABLE V.2 – Paramètres ajustés (en cm<sup>-1</sup>) pour les configurations de parité paire 4f<sup>8</sup>5d et 4f<sup>8</sup>6s du Dy IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 4 et 7 donnent les facteurs d'échelle  $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$  sauf pour les énergies moyennes  $E_{av}$  où  $P_{fit} - P_{HFR}$  sont donnés.

Param. $P$	4f <sup>8</sup> 5d			4f <sup>8</sup> 6s		
	$P_{fit}$	$P_{HFR}$	$SF$	$P_{fit}$	$P_{HFR}$	$SF$
$E_{av}$	133265	75523	57742	161109	103966	52791
$F^2(ff)$	101123	129954	0.778	101646	130483	0.778
$F^4(ff)$	72050	81875	0.880	72368	82236	0.880
$F^6(ff)$	51744	59001	0.877	51979	59269	0.877
$\alpha$	17.6			17.6		
$\beta$	-500			-500		
$\gamma$	1480			1400		
$\zeta_f$	2094	2112	0.991	2100	2119	0.991
$\zeta_d$	1488	1596	0.932			
$F^1(fd)$	1066					
$F^2(fd)$	24500	30472	0.804			
$F^4(fd)$	16820	14601	1.152			
$G^1(fd)$	8710	12567	0.693			
$G^2(fd)$	1939					
$G^3(fd)$	10304	10667	0.966			
$G^4(fd)$	1939					
$G^5(fd)$	6782	8250	0.822			
$G^3(fs)$				2736	3289	0.832
Interaction de configuration						
4f <sup>8</sup> 5d-4f <sup>8</sup> 6s						
$R^2(fd,fs)$	679	970	0.700			
$R^3(fd,sf)$	1515	2165	0.700			

Dans les Figure V.2 et Figure V.3, nous schématisons en fonction de  $J$  les niveaux d'énergie de l'ion  $Dy^{3+}$  pour les différentes configurations et ceux dans le cas d'un calcul purement *ab-initio* (HFR) et un calcul où les paramètres ont été ajustés en les multipliant par un facteur d'échelle.

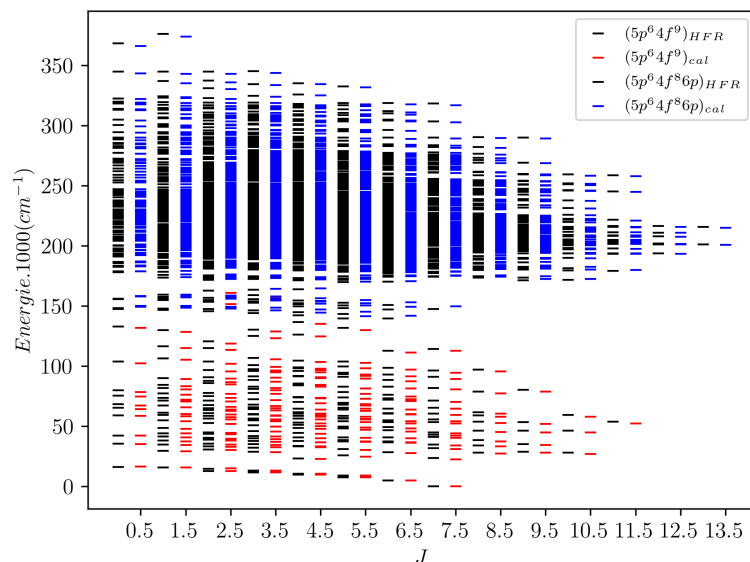


FIGURE V.2 – Niveaux d'énergie de l'ion  $DyIV$  en fonction de  $J$  des configurations de parité impaire  $4f^9$  et  $4f^8 6p$ . En noir et décalé à gauche : HFR ; en couleurs : calculés.

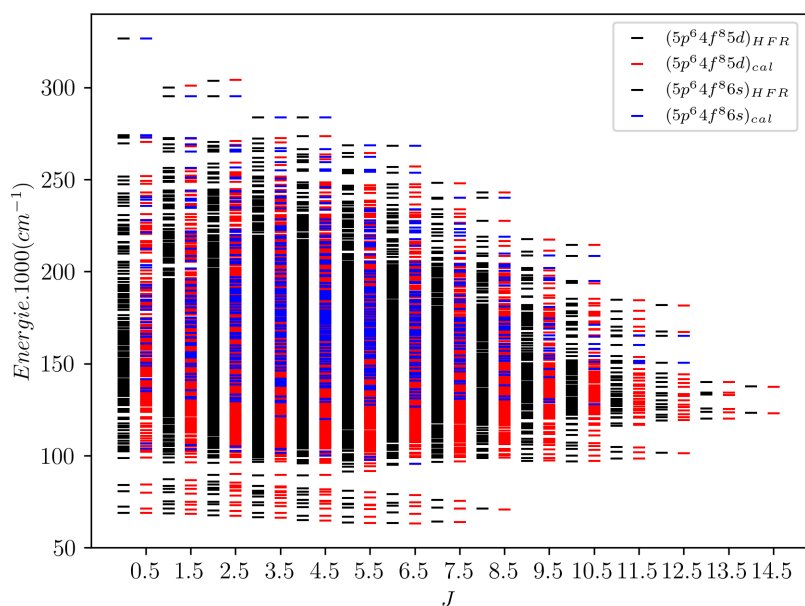


FIGURE V.3 – Niveaux d'énergie de l'ion  $DyIV$  en fonction de  $J$  des configurations de parité paire  $4f^8 5d$  et  $4f^8 6s$ . En noir et décalé à gauche : HFR ; en couleurs : calculés.

---

L'étape suivante de notre recherche sur l'ion  $DY^{3+}$  est de mesurer les positions des raies enregistrées (au NIST et 10.7m de l'Observatoire de Paris-Meudon), de corriger leurs intensités, et de calibrer le spectre en utilisant comme références des longueurs d'onde d'éléments connus (C, O, N, Si, ...). Nous utiliserons les prédictions théoriques des niveaux d'énergies et des probabilités de transitions, parallèlement à la liste des raies générée, afin de rechercher les niveaux d'énergies expérimentaux par le principe de combinaison de Ritz à l'aide des programmes Recher et IDEN. Puis nous optimiserons les valeurs de ces niveaux à l'aide du programme LOPT. Enfin les énergies optimisées seront introduites dans le code R.D. Cowan dans le but de minimiser par moindres carrés l'écart entre les énergies expérimentales et calculées et de déterminer les grandeurs physiques telles que les :  $gA$ ,  $J$ ,  $CF$ , ... mais aussi cela nous permettra d'obtenir un nouveau jeu de paramètres, et donc de facteurs d'échelles (SF) qui décriront le mieux les configurations de l'ion  $DY^{3+}$ .

---

### V.3 Étude théorique de l'ion $Ho^{3+}$ (Ho IV)

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'ion libre d'Holmium ( $Ho^{3+}$ ). L' $Ho^{3+}$  a 64 électrons, sa configuration fondamentale est  $[Xe]4f^{10}$ . Il a des applications en magnétisme, car c'est l'élément qui possède le moment magnétique le plus élevé ( $10.6 \mu_B$ ) et dans les domaines des lasers médicaux et de l'information quantique.

Les résultats obtenus sur l'ion isoionique  $Er^{3+}$ , en particulier les facteurs d'échelle des paramètres d'énergie, nous ont permis d'entreprendre une étude théorique de l'ion  $Ho^{3+}$ , en prévision des données expérimentales à obtenir ultérieurement. Nous présentons ci-dessous la Figure V.4 de comparaison entre le spectre purement *ab-initio* (HFR) et le spectre calculé en utilisant les facteurs d'échelle (tableaux V.3 et V.4) de l'ion  $Er^{3+}$  de [22]. On remarque à partir des deux spectres (HFR et calculé), contraire-

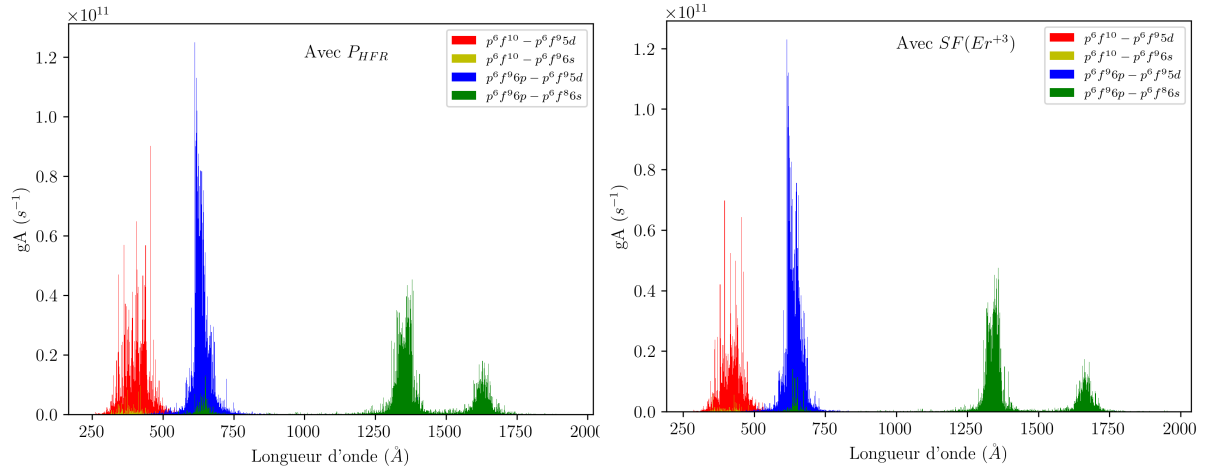


FIGURE V.4 – Comparaison entre le spectre HFR et Calculé de l'ion  $Ho^{3+}$  des différents faisceaux de transition.

ment au spectre théorique du  $Dy^{3+}$  (Figure V.1 en rouge), que les faisceaux de transition ne se recouvrent pas ou très peu, mais aussi, que le spectre théorique s'étend de 250 à 1750 Å ce qui est dû probablement aux énergies moyennes ( $E_{av}$ ) utilisées, qui sont données par L.Brewer [18] et qui sont des prévisions purement théoriques. Un grand écart entre les énergies moyenne des configurations induit une séparation des faisceaux de transition et l'extension ou le décalage du domaine des longueurs d'onde. On remarque aussi que les probabilités de transition subissent une légère variation selon les configurations (i.e., le faisceau  $4f^{10}-4f^95d$  en rouge a diminué alors que le faisceau  $4f^96p-4f^96s$  a augmenté légèrement) en passant des valeurs HFR aux valeurs corrigées avec les SF de Meftah & al [22].

TABLE V.3 – Paramètres ajustés (en cm<sup>-1</sup>) pour les configurations de parité paire 4f<sup>10</sup> et 4f<sup>9</sup>6p du Ho IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 4 et 7 donnent les facteurs d'échelle  $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$  sauf pour les énergies moyennes  $E_{av}$  où  $P_{fit} - P_{HFR}$  sont donnés.

Param. $P$	4f <sup>9</sup>			4f <sup>8</sup> 6p		
	$P_{fit}$	$P_{HFR}$	$SF$	$P_{fit}$	$P_{HFR}$	$SF$
$E_{av}$	49725	0		200315	151868	48447
$F^2(ff)$	97431	126699	0.769	102736	133597	0.769
$F^4(ff)$	70986	79492	0.893	75170	84177	0.893
$F^6(ff)$	49353	57188	0.863	52350	60661	0.863
$\alpha$	24.5			17.3		
$\beta$	-500			-500		
$\gamma$	1480			1480		
$\zeta_f$	2175	2204	0.987	2314	2345	0.987
$\zeta_p$				5052	4307	1.173
$F^1(fp)$				292		
$F^2(fp)$				7589	9451	0.803
$G^2(fp)$				2272	2415	0.941
$G^4(fp)$				2063	2193	0.941
Interaction de configuration						
4f <sup>9</sup> -4f <sup>8</sup> 6p						
$R^2(ff, fp)$	-1869	-2671	0.70			
$R^4(ff, pf)$	-1063	-1481	0.70			

TABLE V.4 – Paramètres ajustés (en cm<sup>-1</sup>) pour les configurations de parité impaire 4f<sup>9</sup>5d et 4f<sup>9</sup>6s du Ho IV par rapport aux intégrales radiales HFR. Les colonnes 4 et 7 donnent les facteurs d'échelle  $SF(P) = P_{fit}/P_{HFR}$  sauf pour les énergies moyennes  $E_{av}$  où  $P_{fit} - P_{HFR}$  sont donnés.

Param. $P$	4f <sup>8</sup> 5d			4f <sup>8</sup> 6s		
	$P_{fit}$	$P_{HFR}$	$SF$	$P_{fit}$	$P_{HFR}$	$SF$
$E_{av}$	126847	77277	49570	153673	104199	49474
$F^2(ff)$	103500	133034	0.778	103893	133539	0.778
$F^4(ff)$	73738	83794	0.880	74041	84138	0.880
$F^6(ff)$	52950	60377	0.877	53174	60632	0.877
$\alpha$	17.6			17.6		
$\beta$	-500			-500		
$\gamma$	1480			1400		
$\zeta_f$	2316	2338	0.991	2323	2344	0.991
$\zeta_d$	1560	1674	0.932			
$F^1(fd)$	1066					
$F^2(fd)$	24435	30393	0.804			
$F^4(fd)$	16697	14494	1.152			
$G^1(fd)$	8903	12848	0.693			
$G^2(fd)$	1939					
$G^3(fd)$	10221	10581	0.966			
$G^4(fd)$	1939					
$G^5(fd)$	6721	8177	0.822			
$G^3(fs)$				2734	3286	0.832
Interaction de configuration						
4f <sup>8</sup> 5d-4f <sup>8</sup> 6s						
$R^2(fd, fs)$	681	973	0.700			
$R^3(fd, sf)$	1516	2166	0.700			

Les figures V.5 et V.6 représentent les niveaux d'énergie théoriques de l'ion  $Ho^{3+}$ , des configurations paires ( $4f^{10}$  et  $4f^9 6p$ ) et les configurations impaires ( $4f^9 5d$  et  $4f^9 6s$ ). On remarque là aussi qu'en se rapprochant du milieu de la séquence des lanthanides, le spectre devient très complexe, i.e., le nombre de niveaux total est de 3549 dont 107 de la configuration fondamentale  $4f^{10}$ , 1168 de  $4f^9 6p$ , 1878 de la configuration  $4f^9 5d$  et 396 de  $4f^9 6s$ . Ce qui engendre un très grand nombre de transitions, au total 109457 transitions entre les différentes configurations ayant une probabilité de transition  $gA \geq 10^{+8}s^{-1}$ , pour les faisceaux les plus intenses ( $4f^{10}$ - $4f^9 5d$  et  $4f^9 6p$ - $4f^9 5d$ ) il y a 22264 et 76817 transitions respectivement.

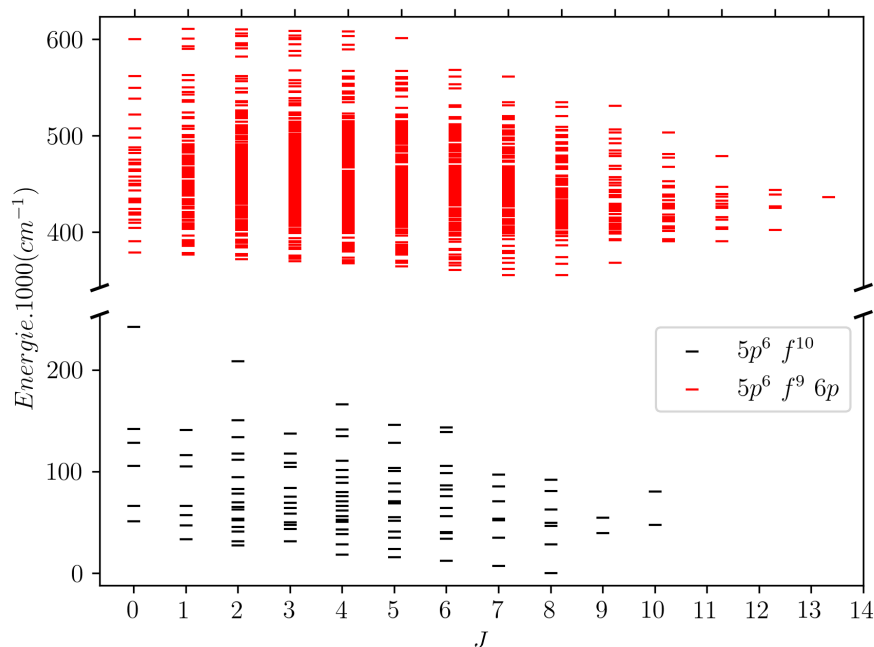


FIGURE V.5 – Niveaux d'énergie HFR de l'ion  $HoIV$  en fonction de  $J$  des configurations de parité paire  $4f^{10}$  et  $4f^9 6p$ .

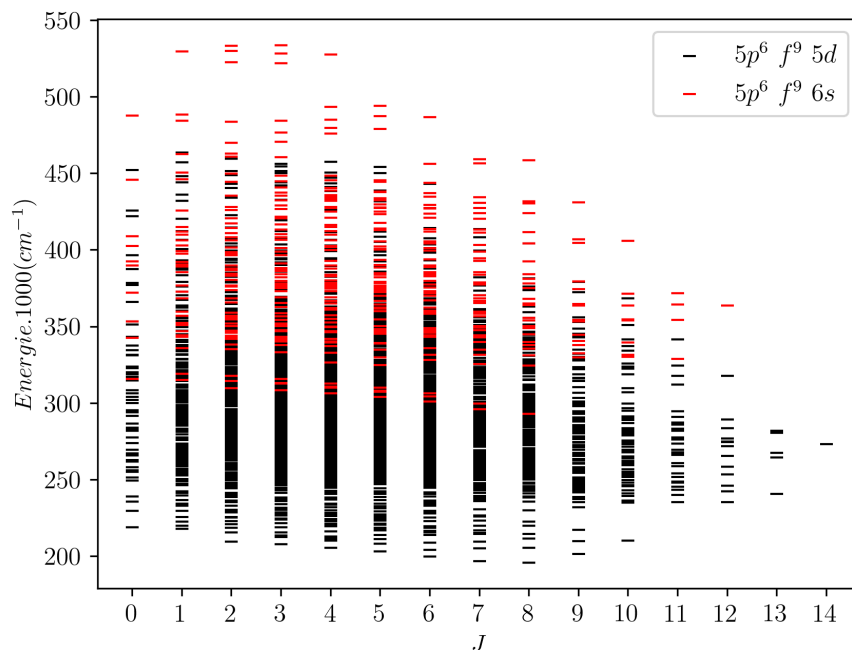


FIGURE V.6 – Niveaux d'énergie HFR de l'ion  $HoIV$  en fonction de  $J$  des configurations de parité impaire  $4f^9 5d$  et  $4f^9 6s$ .

## V.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exposé l'étude théorique des configurations des ions  $Dy^{3+}$  et  $Ho^{3+}$ . En l'absence des données expérimentales sur ses ions, les résultats des calculs *ab-initio* HFR ont été améliorés en corrigeant les paramètres d'énergie par les facteurs d'échelle découlant de l'étude du spectre expérimental de l'ion isoionique  $Er^{3+}$ . Ces calculs apportent des données précieuses sur les niveaux d'énergie et les probabilités de transitions de ces ions et ouvrant la voie pour l'analyse des spectres expérimentaux d'une grande complexité. Notre perspective à venir sera, en premier lieu, d'analyser les spectres de l'ion  $Dy^{3+}$  qui ont été générés à l'observatoire de Paris pour compléter le spectre enregistré au NIST, puis de produire les spectres de  $Ho^{3+}$  pour entamer l'étude de cet ion complètement inconnu à ce jour.





## **Conclusion générale et perspectives**





# Conclusion générale et perspectives

Dans cette thèse, nous avons étudié les propriétés optiques de trois ions trivalents de lanthanides,  $Er^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$  et  $Ho^{3+}$  en nous consacrant aux niveaux d'énergie des configurations de basses énergies et aux probabilités de transition des deux parités paire et impaire.

Les données expérimentales à la base de cette étude sont des spectres d'émission. Les spectres ErIV et DyIV ont été produits par une source à étincelles sous vide glissantes ou initiées dans le domaine allant de 600-2700 Å à l'aide du spectrographe à haute résolution de 10.7 m de l'Observatoire de Paris-Meudon en utilisant deux types de détecteurs, les plaques photographiques (PP) ou les écrans phosphore photostimulables (*Image Plate (IP)*).

L'analyse des spectres de ces ions a été confortée par des calculs théoriques basés sur la méthode paramétrique de Racah-Slater permettant de déterminer les niveaux d'énergie et les probabilités de transition. Ce formalisme, implémenté dans la série des codes de Cowan, tient compte des interactions électrostatiques et de spin-orbite au premier ordre. Les autres interactions d'ordres supérieurs prises en compte par l'introduction des paramètres effectifs.

Le spectre expérimental de l'ion  $Er^{3+}$  contient environ 10000 raies. Nous avons réussi à étendre la première étude de Meftah & al. [22] en passant de 591 raies identifiées entre 850-2276 Å à 1647 raies entre 460-2460 Å. Cette analyse a conduit à la détermination de 18 niveaux de la configuration  $4f^{11}$  (9 nouveaux), 47 niveaux de la configuration  $4f^{10}6p$  (18 nouveaux) et 223 niveaux des configurations paires  $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$  (141 nouveaux). En somme, la diagonalisation finale de l'hamiltonien construit avec ces paramètres fournit des prévisions améliorées pour les niveaux inconnus et des fonctions d'onde améliorées. Par conséquent, elle aboutit à des probabilités de transition et des facteurs de Landé plus fiables. Ces résultats nouveaux ont donné lieu à une publication dans le *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* [71].

---

Le spectre de  $Dy^{3+}$  a été enregistré récemment pour compléter des données anciennes obtenues au NIST. Une étude paramétrique a été réalisée sur les configurations ( $4f^9$ ,  $4f^86p$ ,  $4f^85d$  et  $4f^86s$ ) de DyIV en utilisant les facteurs d'échelle de  $Er^{3+}$ . Cependant, le dépouillement du spectre expérimental et l'analyse de ce dernier est l'une de nos futures perspectives au sein de notre groupe.

Enfin, nous avons réalisé une étude théorique sur les configurations  $4f^{10}$ ,  $4f^96p$ ,  $4f^95d$   $4f^96s$  l'ion  $Ho^{3+}$  en utilisant les facteurs d'échelle de l'ion  $Er^{3+}$ . Dans l'attente de l'enregistrement des spectres expérimentaux de cet ion, nous sommes persuadés que les paramètres utilisés améliorent la prédiction des niveaux d'énergie et des probabilités de transitions.

L'engouement suscité par l'étude des spectres complexes des lanthanides dans leurs différents états d'ionisation ouvre la voie à réaliser des applications sur le plan industriel et fondamental. La détermination des spectres des ions  $Dy^{3+}$  et le  $Ho^{3+}$  dont les propriétés radiatives sont complètement inconnues jusque-là et qui font partie de nos perspectives à moyen terme, contribuera à une connaissance précieuse de la séquence des lanthanides et des actinides.

---

## **Annexe A**

**Niveaux identifiés de  $Er^{3+}$**



TABLE A.1 – Niveaux d'énergie de parité impaire des deux configurations  $4f^{11}$  et  $4f^{10}6p$  de l'ion  $Er^{3+}$ . Les énergies sont données en  $cm^{-1}$  par ordre croissant de  $E_{calc}$ . Pour chaque niveau sont donnés, la configuration, le moment cinétique total  $J$ , la valeur de l'énergie expérimentale lorsqu'elle est disponible, ainsi que les incertitudes correspondantes entre parenthèses, le symbole (\*) pour un niveau préalablement déterminé dans [22], la valeur de l'énergie calculée  $E_{calc}$  résultant du Code Cowan correspondant aux paramètres donnés dans IV.1,  $\Delta E = E_{exp} - E_{calc}$ ,  $N_{cl}$ , le nombre total de transitions impliquant la détermination expérimentale du niveau, le facteur de Landé calculé et les premières composantes de la fonction propre et leurs pourcentages correspondants au couplage LS et JJ.

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	org	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition						
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3
4f <sup>11</sup>	7.5	0.00	*	-16.6	17	52	1.197	<sup>4</sup> I	97	<sup>2</sup> K	3							
4f <sup>11</sup>	6.5	6507.80 (09)	*	6546.7	-39	80	1.107	<sup>4</sup> I	99	<sup>2</sup> K	1							
4f <sup>11</sup>	5.5	10171.71 (09)	*	10194.1	-22	90	0.989	<sup>4</sup> I	82	<sup>2</sup> H2	15	<sup>4</sup> G	1					
4f <sup>11</sup>	4.5	12468.41 (10)	*	12384.3	84	75	0.903	<sup>4</sup> I	51	<sup>2</sup> H2	17	<sup>4</sup> F	14					
4f <sup>11</sup>	4.5	15404.86 (09)	*	15310.4	95	65	1.133	<sup>4</sup> F	58	<sup>4</sup> I	28	<sup>2</sup> G1	8					
4f <sup>11</sup>	1.5	-	-	18519.0	-	-	1.704	<sup>4</sup> S	69	<sup>2</sup> P	18	<sup>2</sup> D1	8					
4f <sup>11</sup>	5.5	19331.60 (09)	*	19411.4	-80	76	1.133	<sup>2</sup> H2	48	<sup>4</sup> G	34	<sup>4</sup> I	15					
4f <sup>11</sup>	3.5	20454.36 (11)	-	20556.8	-102	35	1.213	<sup>4</sup> F	92	<sup>2</sup> G1	5	<sup>2</sup> G2	3					
4f <sup>11</sup>	2.5	22416.32 (13)	-	22225.3	191	22	1.052	<sup>4</sup> F	85	<sup>2</sup> D1	13	<sup>2</sup> D2	2					
4f <sup>11</sup>	1.5	-	-	22566.3	-	-	0.747	<sup>4</sup> F	63	<sup>2</sup> D1	21	<sup>4</sup> S	16					
4f <sup>11</sup>	4.5	24735.89 (09)	*	24671.7	64	64	1.073	<sup>4</sup> F	24	<sup>2</sup> G1	19	<sup>2</sup> H2	16					
4f <sup>11</sup>	5.5	26707.75 (08)	*	26807.6	-100	68	1.201	<sup>4</sup> G	62	<sup>2</sup> H2	25	<sup>2</sup> H1	10					
4f <sup>11</sup>	4.5	27766.78 (09)	*	27840.8	-74	60	1.110	<sup>4</sup> G	79	<sup>2</sup> H2	14	<sup>4</sup> I	5					
4f <sup>11</sup>	7.5	28312.67 (11)	-	28230.2	82	25	1.064	<sup>2</sup> K	92	<sup>2</sup> I	6	<sup>4</sup> I	3					
4f <sup>11</sup>	3.5	28239.76 (13)	-	28232.9	7	26	0.954	<sup>4</sup> G	40	<sup>2</sup> G1	27	<sup>2</sup> G2	24					
4f <sup>11</sup>	1.5	-	-	31902.0	-	-	1.049	<sup>2</sup> P	36	<sup>4</sup> F	24	<sup>2</sup> D1	21					
4f <sup>11</sup>	6.5	33556.00 (12)	-	33571.5	-16	28	0.948	<sup>2</sup> K	90	<sup>2</sup> I	10	<sup>4</sup> I	1					
4f <sup>11</sup>	0.5	-	-	33695.3	-	-	0.613	<sup>2</sup> P	92	<sup>4</sup> D	8							
4f <sup>11</sup>	2.5	-	-	33815.2	-	-	0.603	<sup>4</sup> G	91	<sup>2</sup> F2	3	<sup>2</sup> F1	3					
4f <sup>11</sup>	3.5	-	-	34397.0	-	-	0.953	<sup>4</sup> G	56	<sup>2</sup> G1	26	<sup>2</sup> G2	14					
4f <sup>11</sup>	2.5	-	-	35111.6	-	-	1.195	<sup>2</sup> D1	59	<sup>2</sup> D2	14	<sup>4</sup> F	14					
4f <sup>11</sup>	4.5	36814.75 (12)	-	36860.6	-46	25	1.031	<sup>2</sup> H2	32	<sup>2</sup> G1	24	<sup>2</sup> G2	15					
4f <sup>11</sup>	2.5	-	-	39155.8	-	-	1.263	<sup>4</sup> D	46	<sup>2</sup> D2	25	<sup>2</sup> D1	25					
4f <sup>11</sup>	3.5	-	-	39803.4	-	-	1.412	<sup>4</sup> D	95	<sup>2</sup> F1	3	<sup>4</sup> G	1					
4f <sup>11</sup>	5.5	41609.39 (11)	-	41678.1	-69	20	0.982	<sup>2</sup> I	66	<sup>2</sup> H1	31	<sup>2</sup> H2	2					
4f <sup>11</sup>	8.5	42581.21 (22)	-	42547.9	33	7	1.059	<sup>2</sup> L	100									
4f <sup>11</sup>	1.5	-	-	42793.5	-	-	1.037	<sup>4</sup> D	43	<sup>2</sup> D1	35	<sup>2</sup> P	15					
4f <sup>11</sup>	1.5	-	-	43480.0	-	-	1.104	<sup>4</sup> D	33	<sup>2</sup> P	28	<sup>2</sup> D2	27					
4f <sup>11</sup>	6.5	44390.30 (13)	-	44416.0	-26	22	1.064	<sup>2</sup> I	90	<sup>2</sup> K	9							
4f <sup>11</sup>	0.5	-	-	47797.3	-	-	0.050	<sup>4</sup> D	92	<sup>2</sup> P	8							
4f <sup>11</sup>	4.5	-	-	48537.0	-	-	0.917	<sup>2</sup> H1	77	<sup>2</sup> H2	19	<sup>2</sup> G2	3					
4f <sup>11</sup>	7.5	-	-	48826.0	-	-	0.948	<sup>2</sup> L	94	<sup>2</sup> K	6							
4f <sup>11</sup>	2.5	-	-	49659.6	-	-	1.209	<sup>2</sup> D2	45	<sup>4</sup> D	39	<sup>2</sup> F2	8					
4f <sup>11</sup>	5.5	-	-	51764.2	-	-	1.038	<sup>2</sup> H1	55	<sup>2</sup> I	33	<sup>2</sup> H2	10					
4f <sup>11</sup>	3.5	-	-	55142.0	-	-	1.147	<sup>2</sup> F2	53	<sup>2</sup> F1	36	<sup>4</sup> D	4					
4f <sup>11</sup>	1.5	-	-	55883.3	-	-	0.894	<sup>2</sup> D2	69	<sup>4</sup> D	22	<sup>2</sup> D1	6					

TABLE A.1 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition					JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	
4f <sup>11</sup>	2.5	-		63728.9	-		0.907	<sup>2</sup> F <sub>2</sub>	61	<sup>2</sup> F <sub>1</sub>	19	<sup>2</sup> D <sub>2</sub>	13							
4f <sup>11</sup>	3.5	-		66679.9	-		0.897	<sup>2</sup> G <sub>2</sub>	57	<sup>2</sup> G <sub>1</sub>	39	<sup>2</sup> F <sub>2</sub>	3							
4f <sup>11</sup>	4.5	-		70873.6	-		1.106	<sup>2</sup> G <sub>2</sub>	56	<sup>2</sup> G <sub>1</sub>	40	<sup>2</sup> H <sub>1</sub>	2							
4f <sup>11</sup>	2.5	-		93661.4	-		0.857	<sup>2</sup> F <sub>1</sub>	74	<sup>2</sup> F <sub>2</sub>	26									
4f <sup>11</sup>	3.5	-		97870.8	-		1.140	<sup>2</sup> F <sub>1</sub>	58	<sup>2</sup> F <sub>2</sub>	40	<sup>2</sup> G <sub>2</sub>	1							
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	147031.55(09)	*	147068.9	-37	9	1.278	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	57	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	18	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	15	( <sup>5</sup> I <sub>8</sub> ) 1/2	92	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	6	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	147458.23(10)	*	147476.9	-19	10	1.218	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	40	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	35	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	17	( <sup>5</sup> I <sub>8</sub> ) 1/2	92	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	5	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	153114.25(08)	*	153154.9	-41	18	1.208	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	49	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	29	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	12	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	92	( <sup>5</sup> I <sub>8</sub> ) 3/2	4	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	153525.47(08)	*	153545.8	-20	18	1.152	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	34	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	30	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	22	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	94	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	2	( <sup>5</sup> I <sub>8</sub> ) 3/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	155006.42(10)	*	155023.1	-17	13	1.240	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	56	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	34	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K <sub>2</sub>	3	( <sup>5</sup> I <sub>8</sub> ) 3/2	91	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	5	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	1	
4f <sup>10</sup> 6p	9.5	155098.30(14)	*	155112.9	-15	6	1.256	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	93	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L <sub>2</sub>	6	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L <sub>1</sub>	2	( <sup>5</sup> I <sub>8</sub> ) 3/2	92	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	6	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	155801.91(09)	*	155802.1	-0	21	1.234	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	60	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	29	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	3	( <sup>5</sup> I <sub>8</sub> ) 3/2	90	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	5	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	156582.93(09)	*	156571.9	11	17	1.212	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	77	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	8	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	4	( <sup>5</sup> I <sub>8</sub> ) 3/2	83	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	5	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	5	
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	157327.86(08)	*	157352.5	-25	19	1.098	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	38	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	32	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	14	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	90	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	3	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	157754.95(09)	*	157751.4	4	17	1.062	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	44	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	17	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	14	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	88	( <sup>5</sup> I <sub>8</sub> ) 3/2	4	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	160371.71(10)	*	160365.1	7	14	0.931	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	41	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	22	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	19	( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	83	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	5	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	3	
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	160606.66(09)	*	160586.8	20	16	0.907	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	52	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	21	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	7	( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	86	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	5	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	161112.89(09)	*	161132.7	-20	19	1.183	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	53	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	28	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	7	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	95	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	2	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	1	
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	161334.75(11)	*	161353.9	-19	10	1.200	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	76	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	18	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	2	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	96	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	2	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	1	
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	161611.15(09)	*	161617.4	-6	21	1.174	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	47	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	35	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	13	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	94	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	2	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	162312.03(09)	*	162306.1	6	23	1.143	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	70	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	23	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	1	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	89	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	2	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	162977.18(10)	*	162944.5	33	11	0.596	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	47	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	31	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	9	( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 1/2	84	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 1/2	6	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 1/2	3	
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	162983.42(10)	*	162954.9	29	11	0.634	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	62	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	22	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I <sub>4</sub>	4	( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 1/2	87	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 1/2	6	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 1/2	3	
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	164408.01(09)	*	164427.0	-19	16	1.420	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	48	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	14	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	11	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 1/2	76	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	10	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	4	
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	164899.06(08)	*	164887.0	12	25	1.280	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	33	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	20	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	19	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 1/2	71	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	11	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	3	
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	165336.40(08)	*	165353.1	-17	27	1.098	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	42	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	19	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	19	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	90	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	2	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	165545.96(09)	*	165550.1	-4	26	1.088	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	32	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	31	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	21	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	86	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 1/2	3	( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	3	
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	165670.30(09)	*	165677.2	-7	15	1.120	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	54	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	37	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I <sub>4</sub>	2	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	93	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	2	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	1	
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	166070.22(09)	*	166063.4	7	24	1.022	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	46	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	46	( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> G <sub>4</sub>	2	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	87	( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	4	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-		167642.9	-		2.007	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> P	56	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	10	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P <sub>2</sub>	7	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 1/2	66	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	16	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	6	
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-		167936.3	-		1.531	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> P	34	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	28	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D <sub>2</sub>	7	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 1/2	61	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	16	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	7	
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-		168231.7	-		1.422	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	35	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	30	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	12	( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	88	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	4	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	2	
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	168322.50(10)	*	168306.8	16	21	1.051	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	18	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	15	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	13	( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	50	( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	32	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	3	
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	168464.06(09)	*	168459.0	5	24	0.969	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	32	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	28	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	15	( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	83	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	4	( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	3	
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-		168555.8	-		0.813	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	67	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	20	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G <sub>4</sub>	3	( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	80	( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	5	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	4	
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	168566.05(10)	*	168558.5	8	17	1.137	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	24	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	16	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	11	( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	55	( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	32	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	3	
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	168839.86(10)	*	168821.3	18	19	1.011	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	52	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	32	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I <sub>4</sub>	3	( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	84	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	5	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	3	
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-		170413.4	-		0.328	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	86	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G <sub>4</sub>	6	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G <sub>3</sub>	3	( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	86	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	6	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	3	
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-		170720.1	-		1.248	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	31	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	22	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	15	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	78	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	6	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	4	
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	170771.11(12)	*	170801.9	-31	9	1.135	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	34	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>1</sub>	11	( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K <sub>2</sub>	9	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	53	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	17	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	11	
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	170862.86(11)	*	170837.4	25	12	0.701	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	35	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	30	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	9	( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	68	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	14	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	4	
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-		170928.5	-		1.088	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	42	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	12	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	11	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	72	( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	13	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	4	
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	170987.39(10)	*	170974.1	13	17	0.736	( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	46	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	22	( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	17	( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	85	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	6	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	3	
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-		171106.5	-		1.254	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	22	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	18	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> P	14	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	54	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 1/2	17	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	14	

TABLE A.1 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	171139.70(18)	-	171133.8	6	5	1.080	( <sup>3</sup> K) 2L2	22	( <sup>3</sup> K) 4K2	16	( <sup>3</sup> K) 4L2	15	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	54	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	17	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	171221.1	-	-	1.357	( <sup>5</sup> G) 6F	38	( <sup>5</sup> F) 6F	16	( <sup>5</sup> G) 4G	9	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 1/2	56	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	22	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	171330.8	-	-	1.217	( <sup>5</sup> F) 6G	23	( <sup>5</sup> F) 6P	12	( <sup>5</sup> F) 4F	12	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	48	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 1/2	19	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	171540.2	-	-	0.809	( <sup>5</sup> I) 4K	70	( <sup>5</sup> I) 6K	16	( <sup>3</sup> H) 4I4	4	( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	85	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	6	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	3
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	171765.2	-	-	1.317	( <sup>5</sup> F) 6G	51	( <sup>5</sup> G) 6G	11	( <sup>5</sup> G) 6H	9	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	51	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 1/2	27	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	172630.5	-	-	0.363	( <sup>5</sup> F) 6G	52	( <sup>5</sup> F) 4F	13	( <sup>3</sup> D) 4F1	12	( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 1/2	74	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	16	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	172962.2	-	-	1.277	( <sup>5</sup> F) 6G	28	( <sup>5</sup> G) 4H	27	( <sup>5</sup> G) 6G	13	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 1/2	48	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	28	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	173049.60(10)	-	173033.7	10	17	1.313	( <sup>5</sup> F) 4F	32	( <sup>5</sup> F) 6D	27	( <sup>3</sup> G) 2G2	10	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	57	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	10	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	173132.3	-	-	0.002	( <sup>5</sup> F) 4F	37	( <sup>5</sup> F) 4D	36	( <sup>3</sup> D) 4D1	9	( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 1/2	75	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	17	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	5
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	173338.31(12)	-	173330.5	12	8	1.371	( <sup>5</sup> F) 4D	59	( <sup>5</sup> F) 6D	12	( <sup>3</sup> G) 2F2	6	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	72	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	10	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	173736.44(09)	-	173699.5	37	29	1.318	( <sup>5</sup> F) 4G	29	( <sup>5</sup> F) 6F	22	( <sup>5</sup> G) 6G	13	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	50	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 1/2	20	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	173914.65(10)	-	173877.3	37	16	1.341	( <sup>5</sup> G) 6F	21	( <sup>5</sup> F) 6F	17	( <sup>5</sup> F) 4F	17	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	29	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	13	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 1/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	174831.61(09)	-	174730.4	101	19	1.186	( <sup>5</sup> G) 6H	13	( <sup>5</sup> G) 4H	11	( <sup>3</sup> G) 2H2	10	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	33	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	20	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 1/2	17
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	175352.06(16)	-	175413.7	-62	5	1.578	( <sup>5</sup> F) 6P	65	( <sup>3</sup> P) 4D2	15	( <sup>3</sup> D) 4F1	3	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	65	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	14	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	176017.7	-	-	1.221	( <sup>5</sup> G) 6G	16	( <sup>5</sup> F) 4F	13	( <sup>5</sup> G) 4F	11	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	42	( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	15	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	176063.5	-	-	1.587	( <sup>5</sup> F) 4P	41	( <sup>3</sup> P) 2P2	10	( <sup>5</sup> F) 6P	9	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	50	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	15	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	176107.07(09)	-	176120.8	-14	26	1.335	( <sup>5</sup> F) 6G	63	( <sup>5</sup> F) 6F	14	( <sup>5</sup> F) 4G	8	( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	84	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	4	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	2
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	176293.7	-	-	1.576	( <sup>5</sup> F) 4P	35	( <sup>5</sup> F) 6P	27	( <sup>3</sup> P) 2D2	8	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	61	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	14	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	176355.3	-	-	1.191	( <sup>5</sup> F) 4G	19	( <sup>5</sup> F) 6F	15	( <sup>5</sup> G) 6H	12	( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	39	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	25	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	176700.0	-	-	0.992	( <sup>3</sup> K) 4L2	33	( <sup>3</sup> K) 4K2	12	( <sup>3</sup> K) 2L2	12	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	61	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	19	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	176749.8	-	-	1.037	( <sup>3</sup> K) 4I2	28	( <sup>3</sup> K) 4K2	19	( <sup>3</sup> K) 4I2	9	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	61	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	19	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	176846.7	-	-	1.416	( <sup>5</sup> F) 4D	57	( <sup>5</sup> F) 6D	24	( <sup>5</sup> F) 4F	3	( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	81	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	5	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	176894.3	-	-	2.169	( <sup>5</sup> F) 4P	61	( <sup>3</sup> P) 2S2	8	( <sup>5</sup> F) 4D	4	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	61	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	16	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	176962.6	-	-	1.361	( <sup>5</sup> F) 4F	34	( <sup>5</sup> F) 6D	27	( <sup>5</sup> F) 6F	14	( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	60	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	10	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	5
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	177002.62(11)	-	177064.7	-62	12	1.181	( <sup>5</sup> G) 6H	16	( <sup>5</sup> F) 6F	16	( <sup>5</sup> F) 4G	9	( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	29	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	26	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	178269.9	-	-	1.227	( <sup>3</sup> H) 4G4	16	( <sup>5</sup> G) 6F	15	( <sup>3</sup> H) 4G3	12	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	31	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	22	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 1/2	16
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	178415.84(10)	-	178409.4	6	21	1.215	( <sup>5</sup> F) 6G	26	( <sup>5</sup> F) 4G	24	( <sup>5</sup> G) 6F	9	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	44	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	16	( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	178596.5	-	-	1.140	( <sup>3</sup> H) 4I4	13	( <sup>3</sup> H) 4H4	9	( <sup>3</sup> H) 4I3	8	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	29	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	20	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 1/2	17
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	178618.3	-	-	1.297	( <sup>5</sup> F) 6D	28	( <sup>5</sup> F) 4F	18	( <sup>5</sup> F) 6F	12	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	51	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	10	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	9.5	-	-	178634.9	-	-	1.136	( <sup>3</sup> K) 4L2	49	( <sup>3</sup> L) 4M	16	( <sup>3</sup> K) 4L1	15	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	49	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	15	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	178692.9	-	-	1.492	( <sup>5</sup> F) 6D	41	( <sup>5</sup> F) 4P	16	( <sup>5</sup> F) 6F	9	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	37	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	16	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	14
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	178863.8	-	-	1.144	( <sup>5</sup> F) 6F	16	( <sup>5</sup> F) 6G	12	( <sup>5</sup> F) 6P	9	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	27	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	11	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	178929.0	-	-	1.127	( <sup>3</sup> K) 4K2	29	( <sup>3</sup> L) 4K	19	( <sup>3</sup> K) 2L2	10	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	40	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 1/2	22	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	179009.2	-	-	2.654	( <sup>5</sup> F) 6D	54	( <sup>5</sup> F) 4P	16	( <sup>3</sup> D) 4P1	11	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	35	( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	27	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	16
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	179044.9	-	-	1.144	( <sup>5</sup> G) 6H	21	( <sup>5</sup> G) 4H	15	( <sup>5</sup> G) 6G	10	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	45	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	13	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	179194.7	-	-	1.184	( <sup>5</sup> F) 4D	16	( <sup>5</sup> F) 6F	16	( <sup>5</sup> F) 6D	10	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	20	( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	11	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	179200.0	-	-	1.094	( <sup>5</sup> F) 4G	49	( <sup>5</sup> F) 6F	13	( <sup>5</sup> G) 6H	6	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	56	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	10	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	179317.0	-	-	1.276	( <sup>5</sup> F) 6G	21	( <sup>5</sup> F) 6F	18	( <sup>5</sup> G) 6F	14	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	40	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	30	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	179318.9	-	-	1.095	( <sup>3</sup> K) 2K2	29	( <sup>3</sup> K) 4I2	18	( <sup>3</sup> K) 2K1	10	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	52	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	17	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	179390.4	-	-	1.259	( <sup>5</sup> F) 6F	19	( <sup>5</sup> F) 6G	17	( <sup>5</sup> F) 4F	14	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	43	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	11	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	179445.9	-	-	1.128	( <sup>3</sup> L) 4K	44	( <sup>3</sup> L) 4I	17	( <sup>3</sup> K) 4K2	9	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 1/2	65	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	14	( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	179533.9	-	-	1.079	( <sup>3</sup> K) 4I2	31	( <sup>3</sup> K) 4I2	10	( <sup>3</sup> K) 4I1	10	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	41	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	12	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	179614.4	-	-	0.972	( <sup>5</sup> F) 4F	24	( <sup>5</sup> F) 4D	18	( <sup>5</sup> F) 6F	16	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	38	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	23	( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	14
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	179624.0	-	-	0.902	( <sup>5</sup> F) 4F	19	( <sup>5</sup> G) 6H	12	( <sup>5</sup> G) 6G	10	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	25	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	15	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 1/2	8



TABLE A.1 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$\mathcal{S}_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 6p	9.5	-	-	179682.9	-	-	1.079	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> M	43	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	22	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	17	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 1/2	82	( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 1/2	10	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	180068.36(12)	-	180002.3	66	10	1.304	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	79	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I <sub>4</sub>	10	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I <sub>1</sub>	6	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	79	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	10	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	180346.1	-	-	1.293	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	50	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	22	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H <sub>4</sub>	7	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	72	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	10	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	180574.4	-	-	0.839	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	42	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> F <sub>1</sub>	10	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	10	( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	24	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	16	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	14
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	180600.0	-	-	0.466	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	36	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	24	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	12	( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	49	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	22	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	180616.7	-	-	0.950	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	37	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	12	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	7	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	55	( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	11	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	180701.5	-	-	1.137	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	21	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G <sub>4</sub>	6	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F <sub>4</sub>	5	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	24	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	16	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	180772.7	-	-	1.282	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	50	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	20	( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> H <sub>4</sub>	7	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	71	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	13	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	181003.9	-	-	1.122	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D <sub>4</sub>	9	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F <sub>4</sub>	6	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F <sub>4</sub>	5	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	20	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	9	( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	181094.7	-	-	0.968	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	19	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	15	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D <sub>1</sub>	12	( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	54	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	10	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	181291.8	-	-	0.863	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L <sub>2</sub>	53	( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K <sub>2</sub>	12	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L <sub>1</sub>	12	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 1/2	71	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 1/2	16	( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	3
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	181498.39(09)	-	181540.9	-42	22	0.889	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K <sub>2</sub>	30	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	26	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	16	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 1/2	72	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 1/2	16	( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	3
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	181681.2	-	-	0.980	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	18	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	13	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	13	( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	44	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	20	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	181691.1	-	-	1.184	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	46	( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> G <sub>4</sub>	5	( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> G <sub>2</sub>	4	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	45	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	6	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	182111.38(11)	-	182076.9	34	16	1.250	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	28	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H <sub>2</sub>	19	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	14	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	36	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	19	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	14
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	182511.8	-	-	0.711	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	34	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	10	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G <sub>4</sub>	9	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 1/2	45	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	11	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	182557.2	-	-	1.259	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	18	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G <sub>2</sub>	14	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	12	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	32	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	19	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	19
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	182869.9	-	-	0.628	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	20	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	17	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	10	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 1/2	38	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	12	( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	182924.3	-	-	1.242	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	14	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	13	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	10	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	29	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	17	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	17
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	182966.2	-	-	1.203	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	23	( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F <sub>2</sub>	16	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	10	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	33	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	18	( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	184564.7	-	-	1.152	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	20	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	14	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	5	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	41	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	13	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	184561.88(10)	-	184666.4	-105	14	1.167	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	28	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	19	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H <sub>2</sub>	10	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	52	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	16	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	184696.0	-	-	1.069	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L <sub>2</sub>	40	( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> L <sub>2</sub>	20	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L <sub>1</sub>	13	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	62	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	19	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	184717.8	-	-	1.040	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K <sub>2</sub>	35	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K <sub>1</sub>	11	( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> L <sub>2</sub>	9	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	57	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	18	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	184767.4	-	-	1.157	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	27	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	14	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G <sub>2</sub>	7	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	51	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	15	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	184793.1	-	-	0.944	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	37	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	24	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	12	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	59	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	18	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	184883.7	-	-	1.000	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K <sub>2</sub>	20	( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K <sub>2</sub>	20	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	18	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	62	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	19	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	184914.4	-	-	1.362	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> P <sub>1</sub>	31	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D <sub>1</sub>	14	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> D <sub>1</sub>	9	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	56	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	15	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	184993.7	-	-	0.973	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D <sub>2</sub>	29	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F <sub>1</sub>	14	( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P <sub>2</sub>	12	( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 1/2	53	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	18	( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 1/2	14
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	185072.0	-	-	1.062	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	29	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	13	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F <sub>2</sub>	10	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	39	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	16	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	9.5	-	-	185191.9	-	-	1.133	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> I	73	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> M	12	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	8	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 1/2	92	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	3	( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 1/2	2
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	185213.6	-	-	1.164	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F <sub>1</sub>	18	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> F <sub>1</sub>	13	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	11	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	36	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	9	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	185234.4	-	-	1.058	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P <sub>2</sub>	26	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D <sub>2</sub>	23	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D <sub>1</sub>	10	( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 1/2	57	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	18	( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 1/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	10.5	-	-	185456.4	-	-	1.074	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> N	39	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	33	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	21	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 1/2	92	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	4	( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 1/2	2
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	185895.4	-	-	0.990	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	34	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> M	14	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	13	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	64	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 1/2	15	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	185962.1	-	-	1.044	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	39	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	18	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	9	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	54	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 1/2	14	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	186136.0	-	-	1.203	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H <sub>4</sub>	19	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	16	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H <sub>3</sub>	13	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	27	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	20	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	17
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	186333.5	-	-	1.231	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	17	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F <sub>2</sub>	7	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	6	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	15	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	13	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	186459.9	-	-	1.215	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I <sub>4</sub>	37	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I <sub>3</sub>	26	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	17	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	37	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	26	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	16
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	186587.4	-	-	1.171	( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> H <sub>4</sub>	15	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	13	( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> H <sub>3</sub>	10	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	23	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	16	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	15
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	186719.6	-	-	1.155	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	19	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	15	( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> G <sub>4</sub>	8	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	37	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	10	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	186822.4	-	-	1.204	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	19	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	16	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H <sub>4</sub>	11	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	38	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	10	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	186854.1	-	-	0.417	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	25	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D <sub>4</sub>	12	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D <sub>2</sub>	8	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	25	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	12	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	186908.7	-	-	1.200	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	29	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I <sub>4</sub>	11	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	9	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	37	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	11	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	8

TABLE A.1 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$\mathcal{S}_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	186911.1	-	-	1.138	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	20	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	14	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G4	4	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	24	( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	9	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	187003.9	-	-	1.037	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F4	12	( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F2	12	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	9	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	23	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	18	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	14
4f <sup>10</sup> 6p	10.5	-	-	187045.4	-	-	1.130	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	85	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> N	12	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	2	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	85	( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 3/2	10	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	187151.7	-	-	1.032	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H2	12	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F4	5	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	5	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	13	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	13	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	187253.0	-	-	1.033	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	20	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	11	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	7	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	20	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	12	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	187410.4	-	-	1.098	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	7	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G2	6	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	6	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	14	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	9	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	187435.4	-	-	1.151	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G4	10	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	8	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	7	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	14	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	12	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	187541.2	-	-	1.131	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	11	( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	10	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	6	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	27	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	11	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	187644.1	-	-	1.054	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> K	68	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	12	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> I	7	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	76	( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 3/2	11	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	187909.4	-	-	0.781	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	19	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	17	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D4	6	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	37	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	6	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 6p	9.5	-	-	187957.3	-	-	1.120	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	63	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> M	20	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	8	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	86	( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 3/2	10	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 1/2	3
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	187989.6	-	-	0.826	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	16	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G2	10	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	9	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	19	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 1/2	14	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	187994.7	-	-	1.033	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> I	24	( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M2	16	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	16	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	54	( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	21	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 1/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	188058.6	-	-	1.069	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	11	( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> G4	8	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H4	6	( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	12	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	10	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	188147.9	-	-	0.898	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	39	( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> S2	16	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	12	( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 1/2	76	( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 1/2	5	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	188246.0	-	-	1.012	( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> K2	37	( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> L2	16	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> I	11	( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	52	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 1/2	21	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	17
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	188256.1	-	-	1.057	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	10	( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> H4	9	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I4	9	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	10	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	10	( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	188267.3	-	-	1.178	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	28	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	8	( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> P	7	( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	19	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	16	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	188269.2	-	-	1.007	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> I	27	( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M2	24	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	10	( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	32	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	30	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	16
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	188324.2	-	-	0.918	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	25	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	11	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	9	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	47	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	9	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	188560.1	-	-	1.078	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	32	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	14	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	8	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	57	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	8	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	188614.7	-	-	1.038	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	23	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	15	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	8	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	57	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	6	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	3
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	188725.6	-	-	0.937	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	17	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	13	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	8	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	15	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	14	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 1/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	188852.8	-	-	0.902	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I2	41	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I1	9	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G4	4	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	41	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	9	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	189032.1	-	-	0.985	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	20	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	8	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I2	7	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	33	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	8	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	189127.4	-	-	0.993	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I2	25	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> F	10	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G4	8	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	25	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	10	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	189300.1	-	-	0.928	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	24	( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K2	22	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L2	16	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	61	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	14	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	189413.6	-	-	1.078	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	12	( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> H2	10	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I4	6	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	12	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	9	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	189457.5	-	-	1.047	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F4	10	( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> F4	7	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> D	6	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	16	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	9	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	189552.4	-	-	1.092	( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> G4	9	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F2	7	( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> G3	7	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	16	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	13	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	189568.4	-	-	0.970	( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> L2	46	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L2	23	( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> L1	10	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	71	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	16	( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	3
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	189624.6	-	-	1.006	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	14	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H2	8	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I2	7	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	25	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	13	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	189676.0	-	-	0.983	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D4	12	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G4	7	( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> F3	6	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	12	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	11	( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	190033.5	-	-	1.443	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	13	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> S2	12	( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P3	10	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	33	( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	14	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	190120.7	-	-	0.942	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	40	( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> I	10	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> I	9	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	51	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	16	( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	190140.8	-	-	1.115	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	30	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	14	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H2	9	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	50	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	15	( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	190348.8	-	-	1.121	( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D2	15	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	9	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	7	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	21	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	15	( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	190442.7	-	-	0.762	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	26	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	16	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F4	7	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	36	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	9	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	190535.3	-	-	1.190	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D3	21	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	9	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D1	7	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	33	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	15	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	190548.0	-	-	1.031	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	22	( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> K1	19	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	14	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	47	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	30	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	16
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	190565.5	-	-	0.909	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	28	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	6	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	6	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	31	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	11	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	190586.2	-	-	0.579	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	37	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> P1	8	( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P3	6	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	37	( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	14	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	190859.8	-	-	0.962	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> K	25	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	22	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	18	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	64	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	14	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	190915.6	-	-	1.070	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	24	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D3	10	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	6	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	32	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	16	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	8

TABLE A.1 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$\delta_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	191164.1	-		1.094	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G3	16	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G3	14	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	8	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	38	( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	11	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	191423.1	-		0.896	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> K1	31	( <sup>1</sup> H) <sup>4</sup> I1	9	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> K2	7	( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	40	( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	12	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	191498.4	-		1.008	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	13	( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> H1	11	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	6	( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	30	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	13	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	191556.5	-		1.057	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> I	58	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	16	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	7	( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 1/2	79	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 1/2	9	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	9.5	-	-	191649.5	-		0.997	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	53	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> N	16	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	13	( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 1/2	86	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 1/2	11	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 3/2	1
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	191954.0	-		1.002	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> K1	29	( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> K1	10	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> K2	10	( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	53	( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	19	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	192001.9	-		1.052	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	23	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	15	( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> H1	12	( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	55	( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	19	( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	192574.7	-		1.274	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	24	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	7	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> P1	6	( <sup>5</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	40	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	10	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	11.5	-	-	192659.6	-		1.129	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	97	( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> O	2	-	-	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> )3/2	97	( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> )3/2	2	-	-
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	192774.2	-		0.989	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F1	23	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	15	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> S2	9	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	21	( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 3/2	18	( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 1/2	15
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	192833.1	-		1.215	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	19	( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	18	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	15	( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 3/2	24	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	22	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	192859.3	-		1.282	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F1	56	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F2	15	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	5	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	56	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	15	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	193046.3	-		1.233	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	20	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> D1	16	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	11	( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 3/2	35	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	20	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	193180.7	-		1.258	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	27	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> F1	21	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D2	7	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	48	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	12	( <sup>5</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	193268.3	-		1.231	( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D2	16	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	13	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> D1	13	( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 3/2	31	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	13	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	193326.7	-		1.235	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> D1	18	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> F1	8	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	8	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	29	( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 3/2	18	( <sup>5</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	193371.8	-		1.057	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> I	76	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> I	12	-	-	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> )3/2	84	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	5	( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	193417.9	-		1.110	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H2	16	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> F	14	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> D	12	( <sup>5</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	36	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	15	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	193430.9	-		1.361	( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	19	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> P1	11	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	11	( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 3/2	26	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	15	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	193571.6	-		1.086	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> P1	29	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> P2	7	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	6	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	35	( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	9	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	9.5	-	-	193587.8	-		1.061	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	46	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> M	17	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> N	15	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	64	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	16	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	193862.34(10)	-	193777.7	85	23	0.954	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	31	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> K	21	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> I	19	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	51	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	19	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	194241.5	-		0.994	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	25	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> I	19	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	14	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	61	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	16	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	10.5	-	-	194302.5	-		1.120	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	75	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> N	17	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	5	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> )3/2	96	( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> )3/2	2	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 1/2	1
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	194345.4	-		1.204	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	31	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G2	10	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	9	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	18	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	17	( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	15
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	194417.0	-		1.247	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	13	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> P	12	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	9	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	27	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	20	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	194516.1	-		1.041	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	28	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> I	18	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> M	9	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	60	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	15	( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	194693.7	-		1.446	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	40	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> F	11	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> P	7	( <sup>5</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	57	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	7	( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	9.5	-	-	194739.7	-		1.075	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> M	55	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> I	21	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	19	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> )3/2	90	( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> )1/2	2	( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> )3/2	2
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	194914.9	-		1.179	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	16	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> F	10	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	10	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	28	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	16	( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	194922.4	-		0.784	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F2	20	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D2	10	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F3	8	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	20	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	13	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	194998.5	-		1.110	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> F	23	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> F	9	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F2	7	( <sup>5</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	42	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	8	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	195029.8	-		1.134	( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> G2	9	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	6	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D4	6	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	15	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	8	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	195045.7	-		1.222	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	19	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> F	19	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	11	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	32	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	19	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	195075.6	-		1.122	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	12	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F2	7	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	5	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	13	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	11	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	195199.5	-		1.114	( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> H2	12	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> F	11	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G2	9	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	20	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	18	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	15
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	195340.1	-		1.074	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> D	24	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	9	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	8	( <sup>5</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	18	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	14	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	195740.1	-		0.915	( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> K2	48	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> I	20	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> K	14	( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	48	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	23	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	20
4f <sup>10</sup> 6p	9.5	-	-	195896.8	-		1.041	( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M2	52	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> N	14	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	12	( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	52	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	22	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	18
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	195920.5	-		0.137	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> F	25	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	20	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> P1	8	( <sup>5</sup> D <sub>0</sub> ) 1/2	24	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	20	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	196026.2	-		1.121	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> F	22	( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> G4	5	( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> H4	5	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	20	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	10	( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	196032.8	-		1.169	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	14	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	11	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> P	9	( <sup>5</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	21	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	19	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	196171.3	-		1.191	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> P	17	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> F	16	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F4	9	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	28	( <sup>5</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	14	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	196179.9	-		1.655	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	36	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> F	11	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> D	11	( <sup>5</sup> D <sub>0</sub> ) 1/2	54	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	8	( <sup>5</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	8

TABLE A.1 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$\delta_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	196187.7	-		1.301	( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D2	28	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	21	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	17	( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 3/2	75	( <sup>5</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	8	( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	196276.2	-		1.104	( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F2	14	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	12	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	7	( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	15	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	10	( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	196408.8	-		1.161	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> F	21	( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> H4	9	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I4	7	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	21	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	12	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	196481.7	-		1.005	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	21	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D4	8	( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	6	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	22	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	14	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	196491.6	-		1.004	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F2	7	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G2	7	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	7	( <sup>3</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	20	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	20	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	196494.0	-		1.104	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> D	19	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G2	14	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G3	4	( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	14	( <sup>5</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	12	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	196680.5	-		0.968	( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> L2	36	( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> K2	16	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	12	( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	52	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	19	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	18
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	196771.6	-		1.016	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G2	20	( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	9	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G3	7	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	17	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	15	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	196811.6	-		1.021	( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> L2	43	( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M2	8	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	8	( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	49	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	20	( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	14
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	196923.7	-		1.110	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	9	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I4	9	( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> H2	8	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	16	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	16	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	196962.9	-		0.473	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> F	21	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> D	12	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> D	10	( <sup>5</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	37	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	11	( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	196968.9	-		1.037	( <sup>5</sup> D) <sup>6</sup> F	34	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> D	12	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F1	6	( <sup>5</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	58	( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	10	( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 1/2	5
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	197224.7	-		1.065	( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> G2	10	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F2	7	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	6	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	20	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	14	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	197248.2	-		1.054	( <sup>5</sup> D) <sup>4</sup> P	22	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G4	11	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G3	10	( <sup>5</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	19	( <sup>5</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	11	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	197325.8	-		1.132	( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H2	20	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I3	11	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I4	10	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	20	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	16	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	15
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	197554.5	-		1.073	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	12	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	12	( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F2	9	( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	12	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	12	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	197550.52(10)	-	197578.7	-28	28	0.846	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	63	( <sup>1</sup> K) <sup>4</sup> I	11	( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I2	6	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	63	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	11	( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	197913.0	-		1.106	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> K1	43	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> M	14	( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> I	13	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	43	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	16	( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	197969.9	-		1.196	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	22	( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> F3	8	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	6	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	22	( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	8	( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	198103.6	-		1.125	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	39	( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> K1	14	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I2	13	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	56	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	18	( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	0.5	-	-	198146.7	-		1.121	( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> S2	22	( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P3	20	( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	12	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	39	( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	20	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	198164.3	-		1.065	( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> K3	13	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	11	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I2	11	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	28	( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	17	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	16
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	198188.1	-		1.100	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G2	16	( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> H3	11	( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> H1	9	( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	29	( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	17	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	198191.1	-		0.905	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I2	34	( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> H2	9	( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> H2	6	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 1/2	47	( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	9	( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	198325.5	-		0.933	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	37	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	10	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> K	8	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	54	( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	9	( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	198365.5	-		0.931	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	25	( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> G2	22	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G2	6	( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 1/2	53	( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	9	( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	198372.5	-		1.321	( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	25	( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> D3	15	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> S2	12	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	40	( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	14	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	198379.7	-		1.293	( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	20	( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D2	10	( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> D3	8	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	31	( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	13	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	198437.5	-		1.031	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> M	41	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> K1	23	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	19	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	62	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	23	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	198516.4	-		1.061	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	22	( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> H1	21	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	11	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	39	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	13	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	198604.3	-		1.233	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G3	46	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G1	14	( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	6	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	46	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	14	( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	198670.2	-		0.960	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> I	20	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	17	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> I	16	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	44	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 1/2	21	( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	198914.8	-		0.977	( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> F3	22	( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F1	10	( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> D3	5	( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	27	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	15	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	6.5	-	-	198958.9	-		1.052	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	15	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	15	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	13	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	31	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	23	( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 6p	7.5	-	-	198963.7	-		0.977	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> I	38	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> I	12	( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> I	10	( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 3/2	52	( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	18	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	8.5	-	-	199023.6	-		0.920	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	40	( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M2	23	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	9	( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 1/2	55	( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	23	( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	10.5	-	-	199083.4	-		1.066	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	59	( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> N	29	( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	11	( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 3/2	89	( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	11	-	-
4f <sup>10</sup> 6p	2.5	-	-	199138.6	-		1.161	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D3	19	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D3	10	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D1	6	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	32	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	9	( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	199159.6	-		1.004	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	24	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	13	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	8	( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	28	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	11	( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6p	1.5	-	-	199161.7	-		1.070	( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P3	21	( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> D3	10	( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> P1	7	( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	30	( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	17	( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 6p	5.5	-	-	199282.2	-		1.007	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	24	( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> H1	10	( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	10	( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	32	( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	10	( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	4.5	-	-	199345.9	-		1.178	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	31	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G3	12	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F1	9	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	43	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	13	( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6p	3.5	-	-	199421.2	-		1.113	( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F3	16	( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D3	12	( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	7	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	36	( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	11	( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	7

TABLE A.2 – Niveaux d’énergie de parité paire des deux configurations  $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$  de l’ion  $Er^{3+}$ . Les énergies sont données en  $cm^{-1}$  par ordre croissant de  $E_{calc}$ . Pour chaque niveau sont donnés, la configuration, le moment cinétique total  $J$ , la valeur de l’énergie expérimentale lorsqu’elle est disponible, ainsi que les incertitudes correspondantes entre parenthèses, le symbole (\*) pour un niveau préalablement déterminé dans [22], la valeur de l’énergie calculée  $E_{calc}$  résultant du Code Cowan correspondant aux paramètres donnés dans IV.1,  $\Delta E = E_{exp} - E_{calc}$ ,  $N_{cl}$ , le nombre total de transitions impliquant la détermination expérimentale du niveau, le facteur de Landé calculé et les premières composantes de la fonction propre et leurs pourcentages correspondants au couplage LS et JJ.

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	org	$E_{calc}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition								
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	
$4f^{10}5d$	7.5	73426.42(12)	*	73462.9	-36	10	1.275	$d(5I)^6H$	49	$d(5I)^6I$	29	$d(5I)^4I$	7	$d(5I_8)3/2$	83	$d(3K_8)3/2$	5	$d(5I_8)5/2$	4	
$4f^{10}5d$	8.5	73708.09(16)	*	73716.2	-8	4	1.259	$d(5I)^6I$	67	$d(5I)^6K$	17	$d(5I)^4K$	8	$d(5I_8)3/2$	72	$d(5I_8)5/2$	1	$d(3K_8)3/2$	4	
$4f^{10}5d$	6.5	74536.35(15)	*	74502.4	34	7	1.327	$d(5I)^6G$	59	$d(5I)^6H$	22	$d(3K)^4H2$	5	$d(5I_8)3/2$	86	$d(3K_8)3/2$	6	$d(5I_7)3/2$	2	
$4f^{10}5d$	9.5	75983.07(19)	*	75997.0	-14	3	1.217	$d(5I)^6K$	54	$d(5I)^4L$	20	$d(5I)^6L$	19	$d(5I_8)3/2$	70	$d(5I_8)5/2$	2	$d(3K_8)3/2$	4	
$4f^{10}5d$	6.5	78916.85(12)	*	78917.7	-1	13	1.230	$d(5I)^6I$	37	$d(5I)^6G$	25	$d(5I)^6H$	20	$d(5I_7)3/2$	63	$d(5I_8)5/2$	5	$d(3K_7)3/2$	2	
$4f^{10}5d$	8.5	79154.28(12)	*	79122.6	32	10	1.198	$d(5I)^4K$	36	$d(5I)^6I$	24	$d(5I)^6K$	22	$d(5I_8)5/2$	61	$d(5I_8)3/2$	7	$d(5I_7)5/2$	8	
$4f^{10}5d$	10.5	79275.80(30)	*	79271.8	4	1	1.231	$d(5I)^6L$	92	$d(3K)^4M2$	6	$d(3K)^4M1$	2	$d(5I_8)5/2$	92	$d(3K_8)5/2$	6	$d(3K_8)5/2$	2	
$4f^{10}5d$	7.5	79362.25(11)	*	79349.2	13	11	1.227	$d(5I)^6H$	32	$d(5I)^6I$	29	$d(5I)^6K$	23	$d(5I_7)3/2$	49	$d(5I_8)5/2$	2	$d(5I_7)5/2$	12	
$4f^{10}5d$	9.5	79522.46(16)	*	79498.0	24	4	1.194	$d(5I)^4L$	45	$d(5I)^6K$	37	$d(5I)^6L$	11	$d(5I_8)5/2$	69	$d(5I_8)3/2$	0	$d(3K_8)5/2$	4	
$4f^{10}5d$	5.5	79743.18(12)	*	79754.9	-12	13	1.233	$d(5I)^6G$	42	$d(5I)^6H$	35	$d(5I)^6I$	11	$d(5I_7)3/2$	69	$d(5I_8)5/2$	8	$d(5I_6)3/2$	4	
$4f^{10}5d$	8.5	82610.46(12)	*	82638.5	-28	7	1.133	$d(5I)^6L$	38	$d(5I)^4K$	35	$d(5I)^4L$	15	$d(5I_7)3/2$	82	$d(5I_8)5/2$	7	$d(5I_7)5/2$	4	
$4f^{10}5d$	6.5	82921.57(10)	*	82914.0	8	19	1.171	$d(5I)^6K$	21	$d(5I)^6I$	20	$d(5I)^4H$	18	$d(5I_6)3/2$	30	$d(5I_8)5/2$	2	$d(5I_7)5/2$	16	
$4f^{10}5d$	5.5	83109.98(11)	*	83097.8	12	12	1.131	$d(5I)^6I$	45	$d(5I)^6G$	28	$d(5I)^6K$	7	$d(5I_6)3/2$	59	$d(5I_7)5/2$	9	$d(5I_8)5/2$	9	
$4f^{10}5d$	7.5	83376.77(11)	*	83337.4	39	11	1.157	$d(5I)^4I$	33	$d(5I)^6K$	31	$d(5I)^6L$	9	$d(5I_7)3/2$	39	$d(5I_8)5/2$	6	$d(5I_7)5/2$	12	
$4f^{10}5d$	4.5	83708.77(13)	*	83749.7	-41	8	1.058	$d(5I)^6H$	41	$d(5I)^6I$	6G	23	$d(5I)^6I$	23	$d(5I_6)3/2$	60	$d(5I_7)5/2$	8	$d(5I_5)3/2$	10
$4f^{10}5d$	7.5	84992.74(10)	*	84972.9	20	13	1.172	$d(5I)^4I$	35	$d(5I)^6I$	29	$d(5I)^4K$	18	$d(5I_7)5/2$	55	$d(5I_8)5/2$	7	$d(5I_6)5/2$	4	
$4f^{10}5d$	8.5	85345.66(12)	*	85355.4	-10	8	1.157	$d(5I)^6K$	47	$d(5I)^4L$	24	$d(5I)^6L$	11	$d(5I_7)5/2$	80	$d(5I_6)5/2$	6	$d(5I_7)3/2$	6	
$4f^{10}5d$	6.5	85740.44(9)	*	85802.5	-62	19	1.166	$d(5I)^4H$	50	$d(5I)^6K$	18	$d(5I)^6H$	12	$d(5I_8)5/2$	33	$d(5I_6)3/2$	2	$d(5I_7)5/2$	20	
$4f^{10}5d$	9.5	85914.96(20)	*	85951.3	-36	2	1.174	$d(5I)^6L$	67	$d(5I)^4L$	27	$d(5I)^6K$	2	$d(5I_7)5/2$	93	$d(3K_7)5/2$	2	$d(5I_8)5/2$	2	
$4f^{10}5d$	4.5	86400.97(12)	*	86351.4	50	11	1.004	$d(5I)^6I$	41	$d(5I)^6G$	35	$d(5I)^6K$	6	$d(5I_5)3/2$	50	$d(5I_6)5/2$	6	$d(5I_7)5/2$	12	
$4f^{10}5d$	5.5	86559.39(9)	*	86540.2	19	23	1.107	$d(5I)^6H$	26	$d(5I)^6K$	22	$d(5I)^6G$	11	$d(5I_5)3/2$	26	$d(5I_6)5/2$	5	$d(5I_7)5/2$	14	
$4f^{10}5d$	3.5	86639.37(17)	*	86671.2	-32	4	0.781	$d(5I)^6H$	38	$d(5I)^6I$	29	$d(5I)^6G$	12	$d(5I_5)3/2$	46	$d(5I_6)5/2$	6	$d(5I_4)3/2$	14	
$4f^{10}5d$	6.5	86744.84(11)	*	86674.9	70	13	1.100	$d(5I)^6K$	26	$d(5I)^4I$	18	$d(5I)^6H$	17	$d(5I_6)3/2$	26	$d(5I_6)5/2$	5	$d(5I_7)5/2$	23	
$4f^{10}5d$	7.5	86757.32(11)	*	86758.5	-1	11	1.034	$d(5I)^6L$	53	$d(5I)^4K$	25	$d(5I)^4L$	11	$d(5I_6)3/2$	82	$d(5I_7)5/2$	5	$d(5I_5)5/2$	3	
$4f^{10}5d$	5.5	86871.98(10)	*	86904.5	-33	15	1.246	$d(5I)^4G$	64	$d(5I)^6G$	10	$d(5I)^4H$	10	$d(5I_8)5/2$	49	$d(5I_7)3/2$	9	$d(5I_7)5/2$	16	
$4f^{10}5d$	5.5	88456.82(11)	*	88414.8	42	15	0.951	$d(5I)^6K$	42	$d(5I)^6I$	12	$d(5I)^4I$	7	$d(5I_5)3/2$	47	$d(5I_5)5/2$	8	$d(5I_4)5/2$	5	
$4f^{10}5d$	3.5	88834.18(14)	*	88798.2	36	6	0.762	$d(5I)^6I$	46	$d(5I)^6G$	21	$d(5I)^6H$	7	$d(5I_4)3/2$	43	$d(5I_4)5/2$	3	$d(5I_6)5/2$	11	
$4f^{10}5d$	6.5	89157.94(12)	*	89144.5	13	9	0.907	$d(5I)^6L$	60	$d(5I)^4K$	13	$d(5I)^4L$	5	$d(5I_5)3/2$	77	$d(3H_5)3/2$	4	$d(5I_5)5/2$	2	
$4f^{10}5d$	4.5	89335.18(12)	*	89301.4	34	11	0.970	$d(5I)^6K$	27	$d(5I)^6G$	24	$d(5I)^6H$	20	$d(5I_5)5/2$	28	$d(5I_4)3/2$	6	$d(5I_6)5/2$	17	
$4f^{10}5d$	3.5	89394.63(15)	*	89505.5	-111	6	1.560	$d(5F)^6P$	59	$d(5F)^6D$	14	$d(3G)^4D2$	5	$d(5F_5)3/2$	67	$d(5F_5)5/2$	6	$d(3G_5)3/2$	6	
$4f^{10}5d$	2.5	-	-	89734.4	-	-	0.430	$d(5I)^6H$	60	$d(5I)^6G$	13	$d(5G)^6H$	7	$d(5I_4)3/2$	40	$d(5I_5)5/2$	5	$d(5I_4)5/2$	10	
$4f^{10}5d$	7.5	89948.90(10)	*	89986.2	-37	12	1.096	$d(5I)^4K$	38	$d(5I)^6K$	31	$d(5I)^4L$	11	$d(5I_6)5/2$	74	$d(5I_7)5/2$	9	$d(5I_5)5/2$	5	
$4f^{10}5d$	4.5	90271.60(12)	*	90243.5	28	10	0.810	$d(5I)^6K$	43	$d(5I)^6I$	13	$d(5I)^4I$	6	$d(5I_4)3/2$	44	$d(5I_4)5/2$	9	$d(5F_5)3/2$	9	
$4f^{10}5d$	6.5	90598.57(9)	*	90600.8	-2	17	1.097	$d(5I)^4I$	42	$d(5I)^4K$	21	$d(5I)^6I$	12	$d(5I_6)5/2$	46	$d(5I_7)5/2$	0	$d(5I_7)3/2$	5	
$4f^{10}5d$	5.5	90711.64(18)	*	90736.7	-25	3	1.202	$d(5I)^4H$	20	$d(5F)^6F$	19	$d(5I)^4I$	12	$d(5I_7)5/2$	21	$d(5F_5)3/2$	6	$d(5I_6)5/2$	14	
$4f^{10}5d$	8.5	90703.66(9)	*	90756.5	-53	22	1.097	$d(5I)^4L$	51	$d(5I)^6L$	39	$d(3H)^4K4$	2	$d(5I_6)5/2$	87	$d(5I_7)5/2$	4	$d(5I_7)3/2$	2	

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$\delta_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	90799.26(11)		90789.1	10	13	1.354	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	30	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	17	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	7	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	42	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	3	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	91169.48(13)	*	91156.5	13	9	0.686	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> L	71	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K <sub>4</sub>	5	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	80	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	91468.54(14)		91476.5	-8	7	1.010	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	49	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	20	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	5	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	36	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	91511.23(10)	*	91545.0	-34	18	1.238	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	21	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	20	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	13	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	22	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	9	d( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	92064.62(11)	*	92106.4	-42	10	1.213	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	33	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	20	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	9	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	55	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	7	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	92187.69(11)		92217.5	-30	13	1.149	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> G	70	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	10	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H <sub>2</sub>	2	d( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	53	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	2	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		92906.0	-		1.038	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	51	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> P	8	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	7	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	32	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	3	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	19
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		93162.8	-		1.433	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> P	29	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	21	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	20	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	43	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	6	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-		93514.0	-		2.877	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	54	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P <sub>2</sub>	13	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	8	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	53	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	4	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	93641.94(12)		93689.6	-48	7	1.207	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	50	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> L	21	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	6	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	50	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	2	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	93697.98(10)		93720.1	-22	15	1.017	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	44	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	17	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	8	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	68	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	5	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	93829.64(10)	*	93877.2	-48	16	1.184	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	25	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	9	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	30	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	8	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		94073.8	-		1.431	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	40	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	17	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	11	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	45	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	1	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-		94129.7	-		0.441	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	63	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	14	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F <sub>4</sub>	4	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	63	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	4	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	90799.26(11)		90789.1	10	13	1.354	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	30	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	17	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	7	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	42	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	3	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	91169.48(13)	*	91156.5	13	9	0.686	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> L	71	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K <sub>4</sub>	5	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	80	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	91468.54(14)		91476.5	-8	7	1.010	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	49	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	20	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	5	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	36	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	91511.23(10)	*	91545.0	-34	18	1.238	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	21	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	20	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	13	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	22	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	9	d( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	92064.62(11)	*	92106.4	-42	10	1.213	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	33	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	20	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	9	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	55	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	7	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	92187.69(11)		92217.5	-30	13	1.149	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> G	70	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	10	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H <sub>2</sub>	2	d( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	53	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	2	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		92906.0	-		1.038	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	51	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> P	8	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	7	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	32	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	3	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	19
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		93162.8	-		1.433	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> P	29	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	21	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	20	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	43	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	6	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-		93514.0	-		2.877	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	54	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P <sub>2</sub>	13	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	8	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	53	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	4	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	93641.94(12)		93689.6	-48	7	1.207	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	50	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> L	21	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	6	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	50	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	2	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	93697.98(10)		93720.1	-22	15	1.017	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	44	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	17	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	8	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	68	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	5	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	93829.64(10)	*	93877.2	-48	16	1.184	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	25	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	9	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	30	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	8	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		94073.8	-		1.431	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	40	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	17	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	11	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	45	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	1	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-		94129.7	-		0.441	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	63	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	14	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F <sub>4</sub>	4	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	63	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	4	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	90799.26(11)		90789.1	10	13	1.354	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	30	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	17	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	7	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	42	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	3	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	91169.48(13)	*	91156.5	13	9	0.686	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> L	71	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K <sub>4</sub>	5	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	80	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	91468.54(14)		91476.5	-8	7	1.010	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	49	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	20	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	5	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	36	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	91511.23(10)	*	91545.0	-34	18	1.238	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	21	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	20	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	13	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	22	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	9	d( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	92064.62(11)	*	92106.4	-42	10	1.213	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	33	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	20	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	9	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	55	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	7	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	92187.69(11)		92217.5	-30	13	1.149	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> G	70	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	10	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H <sub>2</sub>	2	d( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	53	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	2	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		92906.0	-		1.038	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	51	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> P	8	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	7	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	32	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	3	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	19
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		93162.8	-		1.433	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> P	29	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	21	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	20	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	43	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	6	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-		93514.0	-		2.877	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	54	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P <sub>2</sub>	13	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	8	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	53	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	4	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	93641.94(12)		93689.6	-48	7	1.207	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	50	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> L	21	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	6	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	50	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	2	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	93697.98(10)		93720.1	-22	15	1.017	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	44	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> K	17	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	8	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	68	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	5	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	93829.64(10)	*	93877.2	-48	16	1.184	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	25	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	9	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	30	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	8	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		94073.8	-		1.431	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	40	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	17	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	11	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	45	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	1	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-		94129.7	-		0.441	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	63	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	14	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F <sub>4</sub>	4	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	63	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	4	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-		94384.5	-		1.329	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	50	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> G	22	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P <sub>2</sub>	5	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	49	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	2	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	94476.72(10)	*	94499.0	-22	19	1.008	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	31	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> K	16	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	15	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	36	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	9	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	94777.48(13)	*	94733.1	44	6	1.095	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> L	44	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	26	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> L	15	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	59	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	6	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	2
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		94855.7	-		1.419	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	43	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	11	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	7	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	46	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	2	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	94874.18(10)	*	94892.1	-18	22	1.073	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	27	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	16	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	9	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	28	d( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	7	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		95000.8	-		1.395	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	39	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	7	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> F <sub>2</sub>	7	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	35	d			

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	97612.7	-	-	0.867	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	39	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	20	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	9	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	42	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	1	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	97832.7	-	-	1.304	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	18	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	15	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	8	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	23	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	2	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	98016.3	-	-	0.515	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	50	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> G1	9	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	7	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	26	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	9	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	98251.93(13)	*	98279.2	-27	11	0.785	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> H	47	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> G	18	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	6	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	41	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	9	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	98313.3	-	-	1.447	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	49	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> F2	9	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	8	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	49	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	3	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	98387.1	-	-	1.321	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	56	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	7	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	6	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	39	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	4	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	98664.45(19)	*	98630.1	34	15	1.245	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	36	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	19	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	14	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	24	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	9	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	15
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	99074.2	-	-	1.058	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M2	21	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> M2	19	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L2	10	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	49	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	99223.3	-	-	1.808	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	32	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	20	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	9	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	40	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	7	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	99257.9	-	-	0.767	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> G	57	d( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> H	5	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	5	d( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	24	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 3/2	3	d( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 5/2	15
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	99293.8	-	-	1.087	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	22	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L2	17	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> L2	11	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	51	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	99426.0	-	-	1.385	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	25	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	14	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> G	9	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	22	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	4	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	99426.3	-	-	1.286	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> D	9	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	9	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	22	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	5	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	99631.2	-	-	1.206	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	42	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	9	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	6	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	36	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	0	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	99931.5	-	-	1.450	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> P	23	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	18	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	11	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	21	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	0	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	99976.3	-	-	1.277	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	36	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	12	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	9	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	24	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	2	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	99987.88(13)	*	99977.9	10	8	1.222	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	23	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	20	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	11	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	36	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	1	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	100035.04(16)	*	100051.2	-16	4	1.109	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	19	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I2	19	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	8	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	44	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	3	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	100182.5	-	-	1.175	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	23	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	19	d( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> G	7	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	20	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	5	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	15
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	100337.07(10)	*	100338.0	-1	7	1.197	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	27	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	19	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H2	6	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	41	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	0	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	100445.94(11)	-	100525.1	-79	4	1.372	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	17	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	15	d( <sup>3</sup> S) <sup>4</sup> D	9	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 3/2	16	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	5	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	100949.0	-	-	1.320	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	30	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	11	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	7	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	23	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	0	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	100988.7	-	-	1.158	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	16	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	14	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	8	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	20	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	2	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	101048.4	-	-	1.315	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	22	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	19	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	9	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	33	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	3	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	101427.28(09)	-	101388.3	39	13	1.263	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	29	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	9	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	41	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	0	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	101404.9	-	-	1.362	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> D	28	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	18	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F4	5	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	23	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	8	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	101555.93(11)	*	101570.3	-14	6	1.211	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> I	32	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	23	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	12	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	66	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	1	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	101619.4	-	-	0.635	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	41	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	12	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F1	12	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	38	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	8.5	101710.03(09)	*	101689.7	20	8	1.286	s( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	92	s( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	5	s( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K1	2	s( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	86	d( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	2	s( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	2
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	101806.4	-	-	1.345	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	35	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	33	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> D	5	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	28	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	1	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	102033.51(12)	-	101955.9	78	11	1.209	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	26	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	8	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	6	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	22	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	0	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-	-	102170.9	-	-	1.125	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M2	50	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	16	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> N	12	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	50	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	102584.6	-	-	1.130	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	26	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	15	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	12	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	25	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	5	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	102602.8	-	-	1.523	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	19	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	12	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	7	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	41	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	1	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	102665.8	-	-	1.351	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	26	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	25	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	12	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	27	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	5	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	102786.0	-	-	1.170	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H2	15	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	10	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	7	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	11	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	7.5	103116.36(15)	*	103069.8	47	7	1.190	s( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	63	s( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	21	s( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K2	3	s( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	52	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	103183.16(15)	*	103080.6	103	10	1.126	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	16	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	15	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I	8	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	22	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	3	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	103148.6	-	-	1.116	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L2	42	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L1	14	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> M2	11	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	53	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	103175.0	-	-	1.229	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	18	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	16	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	13	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	10	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	0	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	103369.5	-	-	1.341	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	28	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	16	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	10	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	29	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	4	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	103420.9	-	-	1.093	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	33	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M2	10	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K1	9	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	42	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	3	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	103414.24(12)	-	103458.8	-45	6	1.350	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	14	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> D	13	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	9	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	20	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	1	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	103810.6	-	-	0.377	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	70	d( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	7	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	6	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	70	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 5/2	3	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	5

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition								JJ percentage composition				
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	103899.30(10)	*	103857.8	41	6	1.215	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	10	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	10	d( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> D	9	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	19	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	9	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	103946.3	-	-	1.267	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	78	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K <sub>4</sub>	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K <sub>1</sub>	5	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	78	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	5	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	103907.86(12)	*	103962.3	-54	11	1.158	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	20	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	14	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	6	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	26	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	3	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	103992.5	-	-	1.268	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	13	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	11	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	10	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	15	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	4	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	10	
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	104096.8	-	-	1.419	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	29	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	7	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> D	6	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	34	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	8	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	104157.88(12)	*	104117.9	40	14	1.187	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	23	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H <sub>2</sub>	15	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	7	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	20	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 3/2	0	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	10	
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	104176.6	-	-	1.142	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	24	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	11	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>1</sub>	7	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	33	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	3	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	11	
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	104441.2	-	-	1.032	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K <sub>2</sub>	24	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	15	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	8	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	31	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	9	
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	104489.2	-	-	1.149	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	16	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	11	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K <sub>2</sub>	11	d( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	21	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	9	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	104538.9	-	-	0.914	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	36	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> G <sub>1</sub>	5	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> G <sub>1</sub>	4	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	16	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	1	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	104900.66(12)	*	104831.7	69	11	1.124	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	16	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> I <sub>2</sub>	14	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H <sub>2</sub>	7	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	15	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	3	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	104940.8	-	-	1.096	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L <sub>2</sub>	18	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	16	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	6	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	30	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	5	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	10	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	104949.5	-	-	1.039	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	36	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	9	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> I	8	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	35	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	4	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	10	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	104957.7	-	-	1.260	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> D	18	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	15	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	7	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	14	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	1	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	105126.4	-	-	1.003	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M <sub>2</sub>	28	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> L <sub>2</sub>	22	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M <sub>1</sub>	9	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	44	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	4	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	11	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	105220.2	-	-	1.192	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	16	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> D	11	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	9	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	9	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	9	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	105421.96(14)	*	105355.9	66	10	1.217	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	20	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	10	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	10	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	26	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	0	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	9	
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	105422.0	-	-	1.022	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	16	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> G	11	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	8	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	23	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	5	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	5	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	105647.78(12)	*	105586.9	61	8	1.253	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	19	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	9	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	31	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	2	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	105797.1	-	-	1.171	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	25	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	12	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	10	d( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	22	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	10	
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	105830.7	-	-	1.220	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	27	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	9	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	33	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	3	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	6	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	105919.0	-	-	1.099	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	18	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	7	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> H	7	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	19	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	2	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 3/2	5	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	106082.87(11)	*	106040.2	43	7	1.103	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	14	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	11	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	10	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	29	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	5	
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	106065.8	-	-	0.662	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	43	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> D	7	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	40	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	6	
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	106211.44(17)	*	106187.7	24	9	1.178	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	12	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I <sub>3</sub>	10	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	8	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	15	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	2	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	9	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	106390.74(13)	*	106355.8	35	12	1.236	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G	23	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G <sub>4</sub>	14	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G <sub>3</sub>	9	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	25	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	0	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	7	
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	106665.1	-	-	0.549	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	31	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	10	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F <sub>4</sub>	10	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	17	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	5	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	11	
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	106690.6	-	-	0.795	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	39	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> F <sub>1</sub>	11	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	8	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	15	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	3	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	11	
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-	-	106690.8	-	-	1.050	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> N	46	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> N	28	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> O	9	d( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	79	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 3/2	2	d( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 3/2	3	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	106733.9	-	-	1.058	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	13	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F <sub>4</sub>	7	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	13	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	0	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	9	
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	106973.2	-	-	1.090	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	18	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	12	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> D	10	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	13	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	6	
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	107177.9	-	-	1.144	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	13	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> K <sub>4</sub>	13	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K <sub>4</sub>	11	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	25	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	6	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	14	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	107194.38(13)	*	107202.8	-8	5	1.096	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	8	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G <sub>4</sub>	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F <sub>4</sub>	7	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	16	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	8	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	107352.3	-	-	0.912	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	30	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	19	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D <sub>1</sub>	7	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	23	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	7	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	6	
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	107525.2	-	-	1.110	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> D	18	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	9	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	8	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	14	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	9	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	9	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	107500.09(12)	*	107540.4	-40	8	1.141	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	12	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	10	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	9	d( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 5/2	12	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	9	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	107546.3	-	-	1.096	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	23	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	8	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K <sub>4</sub>	6	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	27	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	2	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	107671.69(11)	*	107617.7	54	8	1.131	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	11	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> H <sub>2</sub>	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	7	d( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	9	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	7	
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	107714.8	-	-	0.983	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P	12	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D <sub>2</sub>	10	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> D	10	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	17	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	2	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	107754.54(09)	*	107796.8	-42	8	1.258	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F <sub>2</sub>	22	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F <sub>3</sub>	16	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	9	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	20	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	5	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	6	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	107867.56(18)	*	107910.9	-43	10	0.965	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K <sub>2</sub>	20	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I <sub>2</sub>	14	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> H <sub>2</sub>	10	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	20	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	5	
4f <sup>10</sup> 6s	7.5	108065.07(11)	*	108073.1	-8	6	1.220	s( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	66	s( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	20	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	3	s( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	80	s( <sup>5</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	6	s( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	2	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	108125.0	-	-	0.880	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	24	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H <sub>4</sub>	7	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	14	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	4	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	13	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	108210.60(09)	*	108172.1	38	5	1.096	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	27	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	8	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	8	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	29	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	3	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	6	



TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$\mathcal{G}_{Landé}$	LS percentage composition					JJ percentage composition						
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	108252.3	-	-	0.962	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	26	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F4	12	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	7	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	26	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	108288.6	-	-	1.077	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F2	7	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> G4	6	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	5	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	7	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	5	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	108361.5	-	-	1.135	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	23	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	6	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	6	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	11	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	1	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	108402.71(08)	*	108391.6	11	10	1.143	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	15	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> I	11	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H3	11	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	0	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	108392.5	-	-	1.017	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M2	24	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	19	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	6	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	25	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	5	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	108413.0	-	-	1.079	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	20	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> M2	14	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	13	d( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	42	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 6s	6.5	108590.96(14)	*	108632.6	-42	10	1.060	s( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	27	s( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	26	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L2	12	s( <sup>5</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	82	s( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	4	s( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 1/2	2
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	108703.1	-	-	1.092	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H2	18	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F2	7	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	6	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	10	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	108730.7	-	-	1.138	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	64	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	9	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> L	8	d( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	71	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	109049.6	-	-	1.164	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I2	18	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	16	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I3	11	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	3	s( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	109056.2	-	-	1.054	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L2	33	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L1	11	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> L2	11	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	57	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	109125.73(13)	-	109091.5	34	13	1.014	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L2	23	s( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	22	s( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	15	s( <sup>5</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	34	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	109095.5	-	-	1.151	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	12	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> D	10	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	17	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	3	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	109305.86(15)	-	109296.2	10	7	1.066	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	9	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> H	6	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	14	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	11.5	-	-	109320.8	-	-	1.117	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> N	78	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> O	18	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	4	d( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 5/2	78	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 5/2	1	d( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	109321.2	-	-	1.065	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M2	26	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> M	16	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	14	d( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 3/2	42	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	4	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	109325.4	-	-	0.879	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F	13	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	10	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	9	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	15	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	2	d( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 5/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	109642.73(15)	-	109581.5	61	8	1.122	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	9	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> G2	6	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	6	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	109679.0	-	-	0.944	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M2	28	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> L2	19	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	10	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	36	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	109695.4	-	-	1.475	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> P	19	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	18	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> P1	11	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	23	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	1	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	109756.9	-	-	1.078	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	14	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H2	9	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	7	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	14	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	4	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	109789.7	-	-	0.917	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	25	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F2	7	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> G1	6	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	17	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	8	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	109848.10(13)	-	109856.7	-9	7	1.060	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	8	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	7	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> H2	6	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	16	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	1	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	109904.7	-	-	0.973	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	18	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> S1	10	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> F2	7	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	11	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	8	d( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	109927.7	-	-	1.054	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K2	13	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L2	8	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> I	7	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	16	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	3	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	110029.9	-	-	1.163	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	20	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	9	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D2	8	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	10	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	110048.1	-	-	1.087	d( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	8	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	8	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F2	4	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	110538.96(17)	-	110576.4	-37	5	1.162	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	32	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> G4	8	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	4	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	30	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	5	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	110614.38(19)	*	110589.3	25	8	1.084	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	15	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> H4	7	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	7	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	18	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	110683.65(16)	-	110699.1	-15	4	1.157	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> I	38	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	9	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	8	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	20	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	8	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	110733.1	-	-	1.222	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> D	10	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D4	8	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> G1	4	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	20	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	110750.2	-	-	1.181	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K2	34	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	26	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	12	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	34	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	6	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	110835.28(13)	-	110806.1	29	4	1.180	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	26	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	16	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	9	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	35	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	1	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	110962.65(10)	*	110927.2	35	7	0.994	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> I2	18	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I2	10	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	29	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	110962.3	-	-	0.874	d( <sup>5</sup> S) <sup>4</sup> D	10	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	10	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	8	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 5/2	11	d( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 5/2	0	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	111026.1	-	-	1.123	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> G1	12	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	10	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> F2	9	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	1	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	111139.74(19)	-	111148.9	-9	6	1.090	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I2	14	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	10	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	18	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	9	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	111335.3	-	-	1.123	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	21	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> D	13	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> P1	10	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	21	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	5	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	111464.1	-	-	1.073	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	13	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> I	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	7	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	8	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	111481.3	-	-	1.153	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> D	20	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	11	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> F	7	d( <sup>5</sup> G <sub>6</sub> ) 5/2	18	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	8	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	111559.9	-	-	0.920	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	19	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> D	12	d( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> G	7	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	20	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 5/2	2	d( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	111703.7	-	-	1.147	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> H	12	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> I	12	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> K4	10	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	20	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	1	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	11.5	-	-	111717.4	-	-	1.053	d( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> O	62	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> O	25	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> N	8	d( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 3/2	83	d( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	111732.2	-	-	1.095	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	7	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	7	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I2	6	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	23	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	7

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
$4f^{10}5d$	0.5	-		111812.5	-		1.789	$d(^5G) ^6D$	35	$d(^5F) ^6F$	9	$d(^3D) ^4P1$	5	$d(^5G_3) 5/2$	19	$d(^5G_2) 5/2$	7	$d(^5F_2) 5/2$	5
$4f^{10}5d$	6.5	111812.26(24)	*	111847.3	-35	8	1.160	$d(^5G) ^4H$	37	$d(^3G) ^4H2$	7	$d(^5G) ^4I$	5	$d(^5G_6) 5/2$	20	$d(^5G_5) 3/2$	9	$d(^5G_6) 3/2$	9
$4f^{10}5d$	3.5	-		111849.0	-		1.095	$d(^5G) ^6G$	8	$d(^5G) ^6I$	8	$d(^5G) ^6H$	7	$d(^5G_5) 5/2$	14	$d(^5G_2) 3/2$	0	$d(^5G_3) 5/2$	6
$4f^{10}5d$	1.5	-		111938.0	-		1.410	$d(^5G) ^6D$	25	$d(^3D) ^4S1$	11	$d(^3P) ^4F2$	8	$d(^3D_3) 3/2$	17	$d(^5G_3) 5/2$	2	$d(^5G_2) 5/2$	9
$4f^{10}5d$	10.5	-		112079.0	-		1.123	$d(^3L) ^4M$	79	$d(^3L) ^2N$	9	$d(^3M) ^4N$	5	$d(^3L_9) 5/2$	86	$d(^3M_9) 5/2$	0	$d(^3L_9) 3/2$	1
$4f^{10}5d$	4.5	-		112106.5	-		1.101	$d(^5G) ^4F$	7	$d(^3H) ^2G3$	7	$d(^3H) ^2G4$	6	$d(^3H_6) 5/2$	12	$d(^5G_6) 5/2$	2	$d(^3H_6) 5/2$	10
$4f^{10}5d$	1.5	-		112231.0	-		1.124	$d(^3D) ^4P1$	9	$d(^3P) ^4P2$	8	$d(^5G) ^6F$	8	$d(^3F_2) 5/2$	9	$d(^5G_2) 3/2$	6	$d(^3G_4) 5/2$	5
$4f^{10}5d$	3.5	112279.09(13)		112266.4	13	4	0.892	$d(^3K) ^4H2$	31	$d(^3K) ^4H1$	6	$d(^3G) ^4H2$	5	$d(^3K_6) 5/2$	31	$d(^5G_5) 5/2$	8	$d(^3K_6) 5/2$	6
$4f^{10}5d$	2.5	-		112270.7	-		1.157	$d(^5G) ^6D$	17	$d(^5G) ^6G$	7	$d(^5F) ^4G$	6	$d(^5G_3) 5/2$	12	$d(^5F_2) 5/2$	0	$d(^5G_4) 3/2$	9
$4f^{10}5d$	8.5	112331.20(09)	*	112394.9	-64	2	1.155	$d(^3M) ^4K$	70	$d(^3M) ^4L$	4	$d(^3L) ^4L$	4	$d(^3M_{10}) 3/2$	71	$d(^3L_9) 5/2$	6	$d(^3M_{10}) 5/2$	5
$4f^{10}5d$	4.5	112363.67(09)		112403.9	-40	9	1.034	$d(^3K) ^4I2$	13	$d(^5G) ^4G$	7	$d(^3H) ^2G4$	5	$d(^5G_5) 5/2$	9	$d(^3K_6) 3/2$	9	$d(^3H_6) 5/2$	9
$4f^{10}5d$	2.5	-		112526.0	-		1.057	$d(^3F) ^4F2$	7	$d(^3G) ^2D2$	6	$d(^3G) ^4G2$	5	$d(^5G_5) 5/2$	8	$d(^3G_4) 3/2$	8	$d(^3G_3) 3/2$	6
$4f^{10}5d$	9.5	-		112533.2	-		1.018	$d(^3L) ^4N$	34	$d(^3L) ^4L$	24	$d(^3M) ^4O$	12	$d(^3L_8) 3/2$	43	$d(^3L_9) 5/2$	2	$d(^3K_8) 3/2$	11
$4f^{10}6s$	5.5	112531.23(09)		112559.5	-28	11	1.021	$s(^5I) ^6I$	65	$s(^5I) ^4I$	21	$s(^3H) ^4H4$	1	$s(^3I_5) 1/2$	52	$d(^3D_3) 3/2$	8	$d(^3D_4) 3/2$	5
$4f^{10}5d$	5.5	112645.41(18)	*	112579.3	66	12	1.075	$d(^3F) ^4G2$	12	$d(^3D) ^6F$	11	$d(^5G) ^4I$	8	$d(^3G_4) 5/2$	13	$d(^5G_4) 5/2$	8	$d(^3D_4) 5/2$	7
$4f^{10}6s$	6.5	112699.99(30)	*	112664.2	36	9	1.130	$s(^5I) ^4I$	47	$s(^5I) ^6I$	40	$s(^3H) ^4H4$	2	$s(^3I_5) 1/2$	70	$s(^3I_6) 1/2$	6	$s(^3H_5) 1/2$	4
$4f^{10}5d$	3.5	-		112920.6	-		1.113	$d(^5G) ^4D$	10	$d(^3D) ^4F1$	7	$d(^5G) ^6F$	7	$d(^5G_6) 5/2$	11	$d(^5G_3) 5/2$	9	$d(^3D_2) 5/2$	5
$4f^{10}5d$	7.5	112844.37(10)	*	112973.9	-130	5	1.056	$d(^3L) ^4I$	8	$d(^3K) ^2L2$	8	$d(^3K) ^4L2$	8	$d(^3L_9) 5/2$	24	$d(^3K_6) 5/2$	3	$d(^1L_8) 3/2$	6
$4f^{10}5d$	2.5	-		112984.6	-		1.315	$d(^3D) ^4P1$	21	$d(^3F) ^4P4$	9	$d(^3D) ^4P2$	7	$d(^3D_3) 3/2$	14	$d(^3D_3) 5/2$	8	$d(^5F_2) 5/2$	6
$4f^{10}5d$	0.5	-		112989.2	-		0.568	$d(^3P) ^4D2$	30	$d(^3D) ^4D1$	13	$d(^5F) ^6F$	8	$d(^3P_1) 3/2$	36	$d(^5F_1) 3/2$	1	$d(^3D_1) 3/2$	11
$4f^{10}5d$	9.5	-		113319.0	-		1.124	$d(^3M) ^4L$	56	$d(^3M) ^4M$	12	$d(^3L) ^2M$	9	$d(^3M_{10}) 3/2$	64	$d(^3L_9) 5/2$	7	$d(^3M_{10}) 5/2$	7
$4f^{10}5d$	6.5	-		113328.3	-		0.999	$d(^3K) ^2K2$	15	$d(^3K) ^4K2$	10	$d(^3K) ^4L2$	10	$d(^3K_6) 5/2$	32	$d(^3K_6) 5/2$	7	$d(^5G_4) 5/2$	4
$4f^{10}5d$	3.5	113371.90(23)	*	113467.4	-96	3	1.218	$d(^3D) ^4D1$	13	$d(^5G) ^4G$	6	$d(^5G) ^4D$	4	$d(^3D_3) 3/2$	12	$d(^5G_6) 5/2$	6	$d(^3D_2) 5/2$	5
$4f^{10}5d$	6.5	113593.80(15)		113521.9	72	11	1.075	$d(^3L) ^4I$	28	$d(^5G) ^4I$	10	$d(^3M) ^4K$	10	$d(^3L_9) 5/2$	27	$d(^5G_5) 5/2$	1	$d(^3L_8) 3/2$	10
$4f^{10}5d$	5.5	-		113540.8	-		1.122	$d(^5G) ^6I$	15	$d(^5G) ^4I$	12	$d(^5G) ^4G$	12	$d(^5G_3) 5/2$	33	$d(^5G_6) 5/2$	8	$d(^3H_5) 5/2$	3
$4f^{10}5d$	9.5	-		113586.3	-		1.051	$d(^3L) ^4L$	23	$d(^3M) ^4L$	16	$d(^3L) ^2M$	16	$d(^3L_9) 5/2$	40	$d(^3M_8) 3/2$	6	$d(^3M_{10}) 3/2$	11
$4f^{10}5d$	2.5	-		113698.3	-		0.918	$d(^3P) ^4F2$	15	$d(^3H) ^4G4$	5	$d(^3G) ^2F2$	5	$d(^3P_1) 3/2$	22	$d(^3H_4) 5/2$	7	$d(^5F_1) 3/2$	7
$4f^{10}5d$	8.5	-		113733.5	-		1.061	$d(^3L) ^4L$	30	$d(^3L) ^4M$	12	$d(^3L) ^2L$	11	$d(^3L_9) 5/2$	42	$d(^3L_8) 3/2$	7	$d(^3M_{10}) 3/2$	11
$4f^{10}5d$	5.5	-		113740.9	-		1.056	$d(^3K) ^4I2$	13	$d(^3K) ^2I2$	12	$d(^3D) ^6F$	10	$d(^3K_6) 5/2$	33	$d(^3D_4) 5/2$	7	$d(^3K_6) 5/2$	7
$4f^{10}5d$	8.5	-		113970.0	-		0.977	$d(^3K) ^2M2$	45	$d(^3K) ^4M2$	17	$d(^3K) ^2M1$	10	$d(^3K_6) 5/2$	66	$d(^3K_6) 5/2$	5	$d(^3L_8) 3/2$	4
$4f^{10}5d$	1.5	-		114004.0	-		1.003	$d(^3P) ^4F2$	18	$d(^5G) ^6D$	10	$d(^3P) ^2P2$	7	$d(^3P_1) 3/2$	18	$d(^5G_2) 5/2$	7	$d(^3P_0) 3/2$	5
$4f^{10}5d$	4.5	-		114015.3	-		1.072	$d(^3K) ^2H2$	13	$d(^3F) ^4F4$	8	$d(^5G) ^6H$	8	$d(^3D_4) 3/2$	7	$d(^3K_6) 3/2$	7	$d(^3G_4) 5/2$	6
$4f^{10}5d$	7.5	114016.89(13)		114030.9	-14	4	1.013	$d(^3L) ^4K$	23	$d(^3K) ^2L2$	16	$d(^3L) ^4L$	8	$d(^3K_6) 5/2$	29	$d(^3L_8) 3/2$	4	$d(^3K_6) 5/2$	9
$4f^{10}5d$	4.5	-		114048.3	-		0.948	$d(^5G) ^4I$	17	$d(^5G) ^6H$	15	$d(^5G) ^4H$	6	$d(^5G_3) 5/2$	39	$d(^3F_3) 5/2$	5	$d(^1G_4) 3/2$	5
$4f^{10}5d$	12.5	-		114338.6	-		1.118	$d(^3M) ^4O$	97	$d(^1N) ^2Q$	3	-	-	$d(^3M_{10}) 5/2$	97	$d(^1N_{10}) 5/2$	3	-	-
$4f^{10}5d$	3.5	-		114352.3	-		1.117	$d(^5G) ^6H$	8	$d(^3F) ^4D4$	7	$d(^3K) ^4H2$	7	$d(^3D_4) 3/2$	8	$d(^3H_6) 5/2$	7	$d(^3K_6) 5/2$	7
$4f^{10}5d$	2.5	-		114398.3	-		1.107	$d(^3D) ^4F1$	11	$d(^3D) ^2D1$	7	$d(^3D) ^4D1$	7	$d(^3D_3) 3/2$	21	$d(^5G_3) 5/2$	5	$d(^3D_3) 3/2$	5
$4f^{10}5d$	0.5	-		114452.3	-		1.534	$d(^5G) ^6D$	19	$d(^3F) ^2P2$	14	$d(^3P) ^4P2$	9	$d(^5G_2) 5/2$	24	$d(^3F_2) 3/2$	5	$d(^3P_2) 3/2$	11
$4f^{10}5d$	4.5	-		114475.5	-		0.908	$d(^3K) ^4I2$	18	$d(^3K) ^4H2$	12	$d(^3K) ^2H2$	7	$d(^3K_6) 5/2$	35	$d(^3K_6) 5/2$	8	$d(^3L_7) 5/2$	6
$4f^{10}5d$	5.5	114642.30(20)		114633.5	9	5	1.103	$d(^5G) ^4H$	15	$d(^5G) ^6I$	6	$d(^3D) ^4G1$	5	$d(^5G_5) 5/2$	10	$d(^5G_3) 5/2$	8	$d(^3H_6) 5/2$	7
$4f^{10}5d$	3.5	-		114670.9	-		1.064	$d(^3P) ^4F2$	7	$d(^5G) ^4F$	6	$d(^3H) ^4F3$	6	$d(^5G_3) 5/2$	10	$d(^5G_4) 5/2$	6	$d(^3H_6) 5/2$	5
$4f^{10}5d$	6.5	114722.40(09)		114795.7	-73	8	1.066	$d(^3F) ^4H2$	13	$d(^5G) ^4I$	7	$d(^3K) ^2K2$	7	$d(^3G_4) 5/2$	13	$d(^3K_6) 5/2$	2	$d(^5G_4) 5/2$	8
$4f^{10}5d$	2.5	-		114802.0	-		1.091	$d(^5F) ^4F$	7	$d(^3P) ^2D2$	6	$d(^5G) ^4D$	5	$d(^3G_4) 3/2$	6	$d(^3P_1) 3/2$	6	$d(^5G_4) 3/2$	6

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	114825.9	-	-	0.993	d(³K) ⁴H2	11	d(³D) ⁶F	8	d(⁵G) ⁴H	6	d(³K₆) 5/2	11	d(³D₃) 3/2	6	d(³D₃) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	114993.8	-	-	0.978	d(¹L) ²N2	34	d(³M) ⁴O	16	d(³L) ⁴N	14	d(¹L₈) 3/2	35	d(³L₈) 3/2	4	d(³M₈) 3/2	16
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	115108.7	-	-	1.024	s(⁵I) ⁶I	28	d(³D) ²G1	8	d(⁵G) ⁴F	7	s(⁵I₅) 1/2	30	d(³D₃) 3/2	4	d(³D₄) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	115214.8	-	-	0.746	d(³P) ⁴F2	12	d(⁵G) ⁶G	10	d(⁵G) ⁴F	7	d(³P₁) 3/2	15	d(⁵G₃) 5/2	9	d(⁵G₂) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	115274.2	-	-	0.954	s(⁵I) ⁶I	50	s(⁵I) ⁴I	5	d(³D) ²G1	5	s(⁵I₄) 1/2	75	s(³H₄) 1/2	5	s(³H₄) 1/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	115275.8	-	-	1.027	d(³M) ²K	17	d(¹L) ²K2	12	d(³K) ²L2	11	d(³M₁₀) 5/2	24	d(³K₆) 5/2	9	d(¹L₈) 3/2	18
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	115422.6	-	-	0.953	d(³L) ⁴N	27	d(³L) ²L	13	d(³M) ⁴N	13	d(³L₇) 3/2	22	d(³L₈) 3/2	6	d(³M₈) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	115515.1	-	-	0.960	d(³G) ⁴J2	14	d(³F) ⁴H2	12	d(³F) ⁴H4	10	d(³G₃) 3/2	19	d(³F₃) 3/2	2	d(³F₃) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	115759.86(16)	-	115670.1	90	5	1.047	d(³L) ⁴I	12	d(⁵G) ⁴H	9	d(⁵G) ⁶I	7	d(⁵G₄) 3/2	12	d(³L₈) 5/2	8	d(³G₄) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	115854.1	-	-	1.079	d(⁵G) ⁴I	7	d(³D) ⁶F	6	d(⁵G) ⁴G	5	d(⁵G₂) 5/2	16	d(⁵G₅) 3/2	6	d(³H₄) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	5.5	115983.11(25)	*	115931.9	51	8	1.019	s(⁵I) ⁴I	57	s(⁵I) ⁶I	18	s(³H) ⁴H4	2	s(⁵I₄) 1/2	41	d(³L₇) 5/2	4	s(³H₄) 1/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	115992.7	-	-	0.997	d(³P) ⁴P2	14	d(⁵G) ⁶H	14	d(⁵G) ⁴G	9	d(⁵G₂) 5/2	14	d(⁵G₃) 5/2	3	d(³P₂) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	116022.41(17)	-	116076.7	-54	9	1.032	d(³L) ²I	14	d(³M) ²K	14	d(³K) ²I2	12	d(³L₉) 5/2	13	d(³M₈) 3/2	3	d(¹L₈) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	116095.8	-	-	1.069	d(⁵G) ⁴G	13	d(³P) ⁴F2	10	d(³G) ²G2	5	d(³P₁) 5/2	7	d(⁵G₅) 5/2	6	d(³G₃) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	116119.9	-	-	1.179	d(³P) ⁴P2	12	d(³P) ⁴D2	12	d(³P) ²P2	11	d(³P₀) 3/2	28	d(³P₁) 5/2	7	d(³P₁) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	116197.2	-	-	1.115	d(⁵G) ⁴F	12	d(³D) ⁴D1	7	d(³G) ⁴G2	7	d(³D₃) 3/2	12	d(³G₄) 3/2	6	d(³F₂) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	116254.1	-	-	1.091	d(³G) ⁴G2	13	d(³P) ⁴P2	6	d(³F) ⁴P3	5	d(³G₃) 3/2	12	d(³G₄) 5/2	2	d(³D₄) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-	-	116329.9	-	-	1.051	d(³L) ²N	28	d(³M) ⁴O	20	d(³L) ⁴N	19	d(³L₈) 5/2	46	d(³M₈) 5/2	7	d(³K₈) 5/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	116384.3	-	-	1.082	d(³D) ⁶F	13	d(⁵G) ⁴F	9	d(⁵G) ⁴D	7	d(³F₃) 3/2	11	d(³F₃) 3/2	9	d(³D₃) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	116619.90(40)	-	116562.7	57	4	1.107	d(³D) ⁶F	14	d(³D) ²F1	6	d(⁵G) ⁴H	6	d(³D₄) 3/2	14	d(⁵G₅) 5/2	6	d(³H₄) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	116614.2	-	-	0.967	d(³L) ⁴N	18	d(³L) ⁴M	17	d(³L) ²M	10	d(³L₈) 3/2	25	d(³L₇) 3/2	2	d(¹L₈) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	116637.9	-	-	1.281	d(⁵G) ⁴D	13	d(³F) ⁴P3	9	d(³F) ⁴D3	6	d(³G₄) 3/2	16	d(⁵G₄) 5/2	8	d(³G₄) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	116653.8	-	-	1.081	d(³D) ⁴G1	17	d(³L) ⁴I	10	d(⁵G) ⁴I	7	d(³D₃) 5/2	17	d(³L₇) 3/2	8	s(⁵I₅) 1/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	116869.2	-	-	1.671	d(³P) ⁴P2	19	d(¹D) ²S3	15	d(³D) ⁴P1	6	d(³P₂) 3/2	22	d(¹D₂) 3/2	8	d(⁵F₂) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	116891.3	-	-	1.041	d(³G) ²H2	8	d(³K) ²H2	7	d(³D) ²G1	7	d(³G₃) 5/2	8	d(³F₃) 5/2	7	d(³D₃) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	116915.4	-	-	0.969	d(⁵G) ⁴D	15	d(³D) ⁶F	10	d(⁵G) ⁴F	7	d(⁵G₄) 5/2	16	d(³P₁) 5/2	9	d(³G₃) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	116957.2	-	-	0.955	d(³F) ⁴H2	11	d(⁵G) ⁶I	6	d(³P) ⁴D2	5	d(³F₂) 3/2	10	d(⁵G₂) 3/2	8	d(³I₅) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	117050.53(40)	*	116989.1	61	7	1.027	d(³L) ²I	17	d(³M) ⁴L	12	d(³L) ⁴I	9	d(³L₈) 5/2	20	d(³M₈) 5/2	2	d(³L₈) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-	-	117097.7	-	-	1.089	d(³M) ⁴M	41	d(³M) ⁴N	27	d(³M) ²N	19	d(³M₁₀) 3/2	83	d(³M₈) 5/2	4	d(³L₈) 5/2	2
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	117141.5	-	-	1.141	d(⁵G) ⁴F	15	d(³D) ⁴P1	12	d(³D) ²F1	8	d(³D₃) 5/2	23	d(⁵G₄) 5/2	8	d(³D₃) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	117186.0	-	-	0.544	d(³D) ⁶F	13	d(³F) ⁴D4	9	d(³G) ⁴D2	8	d(³P₁) 3/2	12	d(³D₂) 3/2	9	d(⁵G₂) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	117193.3	-	-	0.957	d(⁵G) ⁴H	16	s(⁵I) ⁶I	12	d(³F) ⁴H2	5	d(⁵G₂) 5/2	15	s(⁵I₄) 1/2	12	d(³D₄) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	117265.1	-	-	1.116	d(³G) ⁴G2	14	d(³D) ⁴F1	8	d(³G) ⁴G3	6	d(³G₄) 5/2	10	d(⁵G₄) 5/2	8	d(³D₃) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	117350.3	-	-	0.558	s(³I) ⁶I	75	s(³H) ⁴H4	5	s(³H) ⁴H3	3	s(⁵F₅) 1/2	50	s(³G₅) 1/2	6	s(⁵I₅) 1/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	117369.9	-	-	1.208	d(³D) ⁶F	20	d(³D) ⁴G1	14	d(⁵G) ⁴H	5	d(³D₄) 3/2	15	d(³D₃) 5/2	4	d(³D₄) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	117384.30(19)	*	117441.4	-57	3	1.081	d(³M) ⁴K	34	d(³I) ⁴K1	12	d(³I) ⁴I1	7	d(³M₆) 3/2	30	d(³I₇) 3/2	19	d(³L₈) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	117481.6	-	-	1.092	d(³D) ⁶F	9	d(³F) ²P4	8	d(³F) ²P2	6	d(⁵G₂) 5/2	11	d(³D₂) 3/2	8	d(³G₄) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	117429.10(14)	*	117497.7	-69	3	1.055	d(³L) ⁴K	8	d(³I) ⁴H1	7	d(³L) ²I2	6	d(³I₇) 3/2	14	d(³L₈) 3/2	9	d(³K₇) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	117560.3	-	-	1.131	d(³P) ⁴D2	9	d(³D) ⁴G1	5	d(³P) ²F2	5	d(³P₁) 5/2	14	d(³D₃) 5/2	8	d(⁵F₁) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-	-	117575.3	-	-	0.997	d(³M) ⁴O	49	d(³L) ⁴N	24	d(³M) ²O	20	d(³M₆) 3/2	64	d(³L₈) 5/2	5	d(³L₉) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	117636.2	-	-	1.116	d(³D) ⁶F	19	d(³G) ⁴F2	9	d(³P) ⁴F2	6	d(³D₃) 3/2	13	d(³G₃) 5/2	9	d(³D₁) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	117768.28(12)	-	117730.0	38	6	0.968	d(³L) ⁴K	18	d(³I) ⁴L1	13	d(³L) ⁴L	9	d(³L₇) 3/2	17	d(³I₅) 3/2	5	d(³I₇) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	117797.3	-	-	1.048	d(³M) ⁴L	32	d(¹L) ²L2	8	d(³L) ⁴N	7	d(³M₁₀) 5/2	32	d(¹L₈) 3/2	13	d(³M₉) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	117942.87(20)	-	117812.0	131	7	0.971	d(³I) ⁴K1	20	d(³I) ⁴K2	4	d(³G) ⁴H2	4	d(³I₅) 3/2	22	d(⁵G₅) 5/2	6	d(¹H₅) 3/2	5

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	117883.0	-		1.122	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> D	23	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> F2	9	d( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	5	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	13	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	1	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	118047.83(30)	-	118068.4	-21	7	1.046	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	7	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	6	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> K1	5	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	118087.5	-		0.973	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	30	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	15	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	8	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	25	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> L <sub>6</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	118023.44(10)	-	118092.9	-69	6	0.938	s( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	16	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	6	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	5	s( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 1/2	18	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	0	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	118121.7	-		1.084	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> F2	14	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> G1	6	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D3	6	d( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	118268.3	-		1.126	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> P1	15	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P3	10	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D2	9	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	24	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	8	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	118288.8	-		0.970	d( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D2	19	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> D	11	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	5	d( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 5/2	15	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	1	d( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	118329.10(12)	-	118350.2	-21	3	1.079	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> K	17	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	15	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> L	11	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	29	d( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	118444.5	-		1.124	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> G1	10	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	7	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> F1	6	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	12	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	118565.0	-		1.040	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	20	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> P1	10	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D2	8	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	19	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	16	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	118574.2	-		1.172	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	13	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	9	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D2	8	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	118659.43(21)	-	118654.7	5	8	0.903	s( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	38	s( <sup>5</sup> I) <sup>6</sup> I	5	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	4	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	63	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	118693.6	-		1.061	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	37	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> M	20	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> N	8	d( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 5/2	21	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	118706.3	-		1.160	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	18	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> D1	6	d( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> F2	6	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	26	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	24	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	118771.4	-		1.001	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> N	19	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> L1	13	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M2	10	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	7	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	118788.75(10)	-	118797.9	-9	7	1.081	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> I	6	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H2	6	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> I2	6	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	44	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 5/2	20	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	16
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-	-	118991.8	-		1.030	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> N2	44	d( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> O	27	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> N	8	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	15	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	9	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	118984.89(24)	-	119003.2	-18	5	1.086	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> H1	11	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> I	7	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I2	7	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	119133.8	-		1.082	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	13	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> F	6	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	6	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	17	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	119212.0	-		1.170	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F1	16	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	13	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> I	9	s( <sup>3</sup> F <sub>5</sub> ) 1/2	25	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> L <sub>6</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	119215.3	-		1.038	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> K1	16	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> I2	9	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	8	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	9	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	119204.05(10)	*	119215.4	-11	10	1.154	s( <sup>3</sup> F) <sup>6</sup> F	25	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H4	5	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	21	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	6	d( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	119231.4	-		1.094	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	7	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H2	5	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	4	d( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 5/2	88	d( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 3/2	4	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 5/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	11.5	-	-	119266.8	-		1.126	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	92	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> O	2	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> N	2	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	30	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	2	d( <sup>3</sup> L <sub>6</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	119295.6	-		0.943	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	28	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> L1	16	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> L	10	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	16	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	3	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	119336.8	-		0.596	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D2	16	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	10	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	6	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	5.5	119344.62(10)	-	119345.6	-1	4	1.269	s( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	50	s( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	6	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H4	4	s( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 1/2	58	s( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	9	s( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	119310.44(16)	-	119350.9	-40	9	1.054	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	8	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	6	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F1	4	d( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	119386.56(17)	-	119413.6	-27	8	1.043	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> H	8	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I2	6	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> I	6	d( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	119552.6	-		1.153	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> F2	10	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D2	9	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	8	s( <sup>5</sup> I <sub>4</sub> ) 1/2	16	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	5	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	119575.6	-		0.995	s( <sup>5</sup> I) <sup>4</sup> I	16	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> H2	6	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	5	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	119577.58(17)	-	119626.1	-49	8	1.031	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> K	17	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	6	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	6	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	14	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 3/2	9	d( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	119666.1	-		1.067	d( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	19	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> P	10	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F2	6	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 3/2	30	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	15	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	14
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	119693.9	-		1.034	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> L	22	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	12	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M2	11	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	12	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	119705.3	-		1.217	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F2	10	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D3	8	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F	6	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	11	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	119850.67(10)	-	119904.2	-54	7	1.059	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	9	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> H4	7	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	31	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	120076.91(11)	-	120000.5	76	9	1.122	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> G1	25	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> G2	8	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> K	7	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	14	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 5/2	5	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	120022.0	-		1.059	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> I1	12	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	9	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> F2	5	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	11	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	120023.6	-		1.099	d( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D2	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D2	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	7	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	19	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	13	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	120096.6	-		0.969	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L1	20	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	12	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> I2	5	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	32	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	20	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 5/2	15
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	120264.5	-		1.015	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M2	21	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> N	19	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> N	10	s( <sup>3</sup> F <sub>5</sub> ) 1/2	12	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	120278.44(30)	-	120268.9	10	11	1.123	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F	9	s( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	5	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	15	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	13	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	120280.0	-		0.957	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> L2	25	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	14	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	13	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	120365.1	-		1.031	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	9	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> I2	7	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> I	6	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	53	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	9

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-		120380.3	-		1.044	d(³L) ⁴L	26	d(³L) ²L	24	d(³L) ⁴M	9	d(⁵G₃) 5/2	25	d(³D₁) 3/2	1	d(³F₂) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-		120435.7	-		0.644	d(³D) ⁶F	16	d(⁵G) ⁴D	14	d(³D) ²S1	10	d(³P₀) 5/2	23	d(³D₂) 3/2	6	d(¹D₂) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	120602.37(14)		120689.2	-87	7	1.264	s(⁵F) ⁴F	42	s(⁵F) ⁶F	20	s(³G) ²G2	6	s(⁵S₂) 1/2	64	s(³P₂) 1/2	14	s(³D₂) 1/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		120740.6	-		1.092	d(³P) ²F2	12	d(³P) ⁴P2	9	d(³P) ⁴D2	5	d(³M₁₀) 5/2	50	d(³M₉) 3/2	21	d(³M₁₀) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-		120792.5	-		1.050	d(³M) ⁴M	40	d(³M) ²M	17	d(³M) ⁴N	16	d(⁵G₃) 5/2	10	d(⁵G₂) 3/2	0	d(³D₂) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-		120797.7	-		1.161	d(⁵G) ⁴F	16	d(³D) ⁶P	12	d(⁵G) ⁴D	7	d(⁵G₂) 5/2	11	d(³F₂) 5/2	6	d(⁵G₅) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		120830.1	-		1.146	d(⁵G) ⁴G	7	d(³D) ⁶P	7	d(⁵G) ⁴D	5	d(⁵G₄) 5/2	8	d(³P₂) 3/2	5	d(³D₃) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	120803.10(22)		120851.9	-49	4	1.140	d(³D) ⁶F	6	d(³D) ²F1	5	d(³P) ⁴D2	5	d(³D₄) 3/2	7	d(³P₀) 5/2	7	d(³D₃) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		120895.5	-		1.104	d(³D) ⁶P	10	d(³P) ²F2	9	d(³D) ²D1	6	d(³G₄) 3/2	8	d(³L₇) 3/2	7	d(¹L₈) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	120929.37(22)	*	120897.5	32	10	0.988	d(³L) ⁴K	11	d(³F) ²H3	10	d(¹L) ²I2	6	d(⁵G₄) 5/2	12	d(³D₄) 5/2	11	d(³G₄) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	121043.08(13)		120961.9	81	4	1.133	d(⁵G) ⁴I	13	d(³D) ⁶G	11	d(³F) ⁴H4	11	d(³M₈) 5/2	12	d(³I₇) 3/2	7	d(¹L₈) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	121140.05(18)	*	121027.0	113	8	1.042	d(³M) ⁴K	12	d(³I) ⁴I1	8	d(³I) ⁴G1	8	d(³I₇) 5/2	18	d(³I₆) 3/2	12	d(³I₅) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-		121067.4	-		1.068	d(³I) ⁴I1	19	d(³I) ⁴L1	19	d(³M) ²K	8	d(³F₂) 5/2	9	d(³I₅) 5/2	8	d(³D₄) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	121102.40(24)		121088.9	14	12	1.035	d(³F) ⁴H2	9	d(³I) ⁴I1	7	d(⁵G) ⁶I	5	d(³M₉) 5/2	86	d(³L₉) 5/2	2	d(³M₁₀) 5/2	2
4f <sup>10</sup> 5d	11.5	-		121116.3	-		1.060	d(³M) ⁴O	53	d(³M) ²O	34	d(³L) ⁴N	12	d(³M₁₀) 5/2	86	d(³M₉) 5/2	5	d(¹N₁₀) 5/2	2
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-		121140.6	-		1.098	d(³M) ⁴M	50	d(³M) ²N	25	d(³M) ⁴N	18	d(³G₃) 3/2	12	d(³D₁) 5/2	6	d(³D₃) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		121193.4	-		1.042	d(³G) ⁴H2	11	d(³D) ⁶F	6	d(³D) ⁶D	6	d(³H₅) 5/2	14	d(³I₆) 3/2	6	d(³G₄) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-		121251.7	-		1.091	d(³H) ⁴I2	9	d(³F) ⁴H3	9	d(³H) ⁴I3	8	d(³M₁₀) 5/2	15	d(³M₉) 3/2	12	d(³L₉) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	121281.63(15)		121271.0	11	5	1.038	d(³M) ²K	25	d(³L) ²K	16	d(³M) ⁴L	5	d(³P₂) 5/2	13	d(³D₄) 5/2	1	d(³F₂) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		121333.5	-		1.155	d(³P) ⁴D2	10	d(⁵G) ⁴F	8	d(³F) ⁴G2	5	d(³G₄) 3/2	14	d(³I₇) 5/2	9	d(³I₆) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	121459.62(18)		121434.4	25	5	1.125	d(³I) ²G1	14	d(³F) ⁴G3	7	d(³F) ²G4	4	d(¹D₂) 3/2	9	d(³P₂) 5/2	8	d(⁵G₄) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		121489.8	-		1.126	d(³P) ²D2	13	d(¹D) ²F3	11	d(¹G) ²D4	5	d(³D₄) 5/2	9	d(³G₄) 5/2	8	d(³H₄) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-		121570.9	-		1.246	d(³D) ⁶P	13	d(³F) ²P2	8	d(³F) ²P3	7	d(³L₇) 5/2	14	d(³M₈) 5/2	7	d(³G₄) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	121572.85(17)		121624.6	-52	9	0.988	d(³L) ⁴K	16	d(³G) ²H2	8	d(³M) ⁴K	7	d(¹L₈) 5/2	39	d(³M₉) 3/2	5	d(³M₈) 5/2	13
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-		121661.5	-		1.028	d(¹L) ²L2	27	d(³M) ⁴M	16	d(¹L) ²M2	12	d(³I₆) 3/2	14	d(¹L₈) 5/2	14	d(³L₈) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	121639.41(40)		121723.0	-84	6	1.031	d(³L) ⁴L	11	d(³M) ⁴K	10	d(¹L) ²L2	8	d(⁵G₂) 3/2	17	d(³F₂) 3/2	14	d(³P₂) 5/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-		121743.1	-		0.950	d(⁵G) ⁴D	28	d(³P) ²P2	10	d(³F) ⁴D2	8	d(³G₄) 3/2	13	d(³G₅) 5/2	5	d(³D₂) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-		121824.9	-		1.087	d(³F) ⁴F3	5	d(³F) ²G3	5	d(³I) ⁴G1	4	d(³L₇) 5/2	23	d(³L₇) 3/2	9	d(³I₇) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	122013.09(20)		121902.6	110	6	0.991	d(³L) ⁴L	26	d(³I) ⁴H1	7	d(³L) ⁴K	6	d(³L₇) 5/2	24	d(¹K₇) 5/2	9	d(³I₆) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	122046.50(22)		122048.3	-2	2	0.981	d(³L) ⁴K	13	d(³L) ⁴I	10	d(³I) ⁴H1	9	d(³D₁) 3/2	21	d(³P₂) 5/2	9	d(³D₁) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-		122115.4	-		1.114	d(³D) ⁶D	8	d(³D) ⁴F1	8	d(³P) ⁴F2	7	d(³P₂) 3/2	7	d(³I₅) 5/2	5	d(³D₄) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	122066.09(20)		122136.1	-70	7	1.118	d(³I) ²G1	8	d(³D) ⁶P	6	d(³P) ⁴F2	5	d(³P₁) 3/2	13	d(³D₁) 3/2	11	d(³F₂) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		122190.1	-		1.023	d(³P) ²F2	11	d(³D) ²F1	8	d(³D) ⁴D	7	d(³I₆) 3/2	7	d(³G₄) 5/2	5	d(³I₅) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	122141.88(19)		122209.7	-68	5	1.062	d(⁵G) ⁴H	9	d(³D) ²G1	8	d(³I) ⁴H1	7	d(³D₄) 5/2	12	d(³I₆) 5/2	9	d(¹G₄) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	122256.91(30)		122255.2	2	5	1.111	d(³D) ⁶G	12	d(³I) ⁴I1	9	d(¹G) ²I4	7	d(³L₇) 5/2	18	d(³K₇) 5/2	6	d(³G₃) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	122283.10(14)		122325.2	-42	6	0.953	d(³L) ⁴I	18	d(⁵G) ⁴H	7	d(³G) ⁴I1	5	d(¹D₂) 5/2	22	d(³P₂) 5/2	21	d(³F₂) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-		122396.4	-		1.203	d(³P) ²P2	16	d(¹D) ²P3	12	d(¹D) ²S3	11	d(³I₇) 5/2	55	d(³I₇) 5/2	16	d(¹L₈) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-		122403.9	-		1.116	d(³I) ⁴K1	39	d(³I) ²L1	16	d(³I) ⁴K2	12	d(³L₇) 3/2	8	d(³L₇) 5/2	6	d(³F₃) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-		122416.6	-		1.785	s(⁵S) ⁶S	64	s(³P) ⁴P2	14	s(³D) ⁴D1	4	s(⁵F₄) 1/2	85	s(³G₄) 1/2	4	s(⁵F₅) 1/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-		122434.4	-		1.074	d(³L) ²I	17	d(³I) ⁴H1	5	d(³F) ⁴H3	4	d(³I₇) 5/2	53	d(³I₇) 5/2	12	d(³M₁₀) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-		122455.2	-		1.129	d(³I) ⁴L1	53	d(³I) ⁴L2	12	d(³M) ²M	7	d(³G₅) 5/2	7	d(³D₃) 5/2	6	d(³P₂) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	122383.10(20)		122462.9	-80	4	1.115	d(³G) ²G2	7	d(³G) ²G2	7	d(³P) ²F2	5	d(³H₅) 5/2	16	d(³H₅) 5/2	12	d(³H₅) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-		122640.4	-		1.066	d(³M) ⁴L	18	d(³H) ⁴K3	8	d(³H) ⁴K4	8	d(³G₄) 5/2	14	d(³F₃) 3/2	9	d(³P₁) 5/2	8

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$\delta_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	122736.6	-	-	1.190	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D3	11	d( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D2	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P3	9	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	122780.1	-	-	1.213	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> P	6	s( <sup>5</sup> S) <sup>6</sup> S	4	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	3	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	18	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	122892.5	-	-	0.984	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	20	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	9	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> L	7	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	20	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	122922.65(30)	-	122897.3	25	7	1.058	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> G1	16	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	6	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> H2	6	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	4	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	122959.2	-	-	1.156	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F2	9	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	7	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F3	7	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 5/2	5	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	122967.1	-	-	1.114	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	9	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	6	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D	6	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 3/2	14	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	123043.2	-	-	1.040	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> I	17	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	7	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	5	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	44	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	23	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	123046.0	-	-	1.009	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> N	31	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M2	24	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> N	13	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	5	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	123213.30(30)	-	123177.3	36	7	1.037	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	7	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	6	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	5	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	29	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	123171.49(21)	-	123233.5	-62	5	1.168	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H3	29	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H1	9	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> G	5	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	19	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	3	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	123272.3	-	-	1.388	s( <sup>3</sup> F) <sup>6</sup> F	65	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F	23	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	4	s( <sup>5</sup> S <sub>2</sub> ) 1/2	48	s( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	15	s( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	123435.0	-	-	1.067	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	16	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> K1	14	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> L1	9	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	123494.8	-	-	0.963	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> G1	10	d( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D2	10	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F3	4	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	123584.30(30)	-	123603.7	-19	5	1.076	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> G1	9	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> I	9	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	6	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	123626.8	-	-	1.102	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> P2	9	d( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> D2	5	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F2	5	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	13	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	12	d( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	123701.5	-	-	1.230	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	21	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	8	d( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	7	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	123739.20(20)	-	123790.0	-51	5	1.029	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H2	8	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> G1	8	d( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> F2	6	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	123711.58(24)	-	123792.0	-80	5	1.014	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> L	11	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> I1	7	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> K	6	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	21	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 5/2	2	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	123896.64(24)	-	123799.2	97	4	1.010	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> L1	16	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> L	10	d( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> K1	9	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	51	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	16	d( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	123806.3	-	-	0.987	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> M	45	d( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> M	11	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> L1	10	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 3/2	56	d( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 5/2	10	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	123823.8	-	-	1.542	s( <sup>3</sup> S) <sup>4</sup> S	48	s( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	12	s( <sup>3</sup> F) <sup>6</sup> F	10	s( <sup>5</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	73	s( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	4	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	123954.7	-	-	1.016	d( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> M	30	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	26	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M2	11	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	5	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	124047.34(20)	-	123981.9	65	6	1.103	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	7	d( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> G1	5	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F	5	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	17	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	5	d( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	124018.2	-	-	1.317	s( <sup>3</sup> F) <sup>6</sup> F	57	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F	30	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	2	s( <sup>5</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	31	s( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	26	s( <sup>3</sup> S <sub>2</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	124186.8	-	-	1.201	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P3	10	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D3	6	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F	6	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	124258.1	-	-	1.392	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> P1	17	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	8	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P4	7	d( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	124296.6	-	-	1.298	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	15	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	11	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D2	11	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	14	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	124390.9	-	-	0.998	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F	11	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	8	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F2	8	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	29	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	124425.8	-	-	1.029	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> L1	18	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> K1	12	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> K2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	18	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	124547.6	-	-	1.093	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G3	18	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G1	5	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	11	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	124717.40(18)	-	124588.1	129	5	1.035	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> G3	8	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	7	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	7	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 3/2	7	d( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	124682.9	-	-	0.914	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F1	12	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	7	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F4	6	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	17	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	13	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	124958.38(20)	-	124839.6	119	6	1.033	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> H2	7	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K2	7	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> H1	6	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	17	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	124859.2	-	-	1.050	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F	11	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> G	10	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I2	9	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	124874.9	-	-	1.113	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> G1	10	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> G1	4	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	4	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	43	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	124919.6	-	-	1.054	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> L1	26	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> L1	14	d( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> M	8	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	125027.65(18)	-	124989.3	38	7	1.131	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	12	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I2	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G2	6	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	17	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	125005.1	-	-	0.980	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> K1	26	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> K2	8	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> L1	7	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	48	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	26	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	125337.4	-	-	0.921	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> O	44	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> N2	31	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> N1	7	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	18	d( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	125341.8	-	-	0.950	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> G1	18	d( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> F1	7	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F3	5	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	125248.63(30)	-	125378.1	-130	6	1.034	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> H2	8	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I2	5	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I	5	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	10	d( <sup>3</sup> D <sub>0</sub> ) 3/2	10	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	125390.2	-	-	1.227	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P2	10	d( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	9	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> D3	8	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 3/2	14	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	125449.1	-	-	1.095	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G3	9	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> G	9	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> G	7	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	10	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	125450.1	-	-	1.076	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> G	9	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> G1	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	6	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 5/2	16	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	12	d( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 5/2	9

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition					JJ percentage composition						
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	125346.73(24)		125511.4	-165	6	1.007	d(³M) ⁴K	13	d(³L) ²K	11	d(³H) ²I2	8	d(³D₂) 3/2	17	d(³D₁) 3/2	16	d(³D₁) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-		125627.2	-		1.273	s(⁵F) ⁶F	56	s(⁵S) ⁶S	8	s(³D) ⁴D1	7	s(³K₈) 1/2	54	s(³K₈) 1/2	17	s(³L₈) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-		125631.4	-		2.237	d(³D) ⁶D	31	d(³F) ⁴P2	9	d(⁵G) ⁶D	8	d(³D₃) 5/2	18	d(³G₄) 5/2	15	d(³I₇) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	125659.80(30)		125711.2	-51	4	1.170	d(³D) ⁶G	11	d(³F) ⁴G4	11	d(³D) ⁶F	10	d(³D₂) 3/2	26	d(³I₆) 5/2	9	d(¹D₂) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	8.5	-		125739.6	-		1.158	s(³K) ⁴K2	54	s(³K) ⁴K1	17	s(¹L) ²L2	8	s(⁵F₃) 1/2	71	s(⁵F₄) 1/2	13	s(³D₃) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	125748.25(30)		125749.2	-1	6	1.051	d(³D) ⁶G	25	d(³I) ⁴G1	12	d(³F) ⁴H2	7	s(⁵F₂) 1/2	8	d(³I₅) 5/2	7	s(⁵F₃) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		125777.5	-		1.034	s(⁵F) ⁶F	14	d(³I) ⁴G1	7	d(⁵G) ⁴G	5	d(³L₇) 5/2	24	d(¹L₈) 5/2	8	d(³M₉) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-		125781.7	-		0.992	d(³L) ²L	20	d(³H) ²K2	7	d(¹I) ²L3	6	d(³D₃) 3/2	18	d(³H₄) 3/2	8	d(³L₇) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	125848.90(14)		125793.1	56	4	1.034	d(³D) ⁶G	13	d(³H) ⁴I2	9	d(³L) ⁴I	7	d(³H₄) 3/2	12	d(³I₆) 5/2	11	d(³I₇) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-		125935.2	-		1.001	d(³I) ²H1	9	d(³H) ²I2	7	d(³H) ⁴K2	6	d(³D₁) 3/2	19	d(³G₄) 3/2	9	d(³I₅) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		125956.3	-		1.044	d(³D) ⁶G	22	d(³D) ⁶P	7	d(³I) ⁴G1	7	d(³D₂) 3/2	13	d(³G₅) 5/2	7	d(³G₄) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		126042.2	-		1.246	d(³D) ⁶D	12	d(³D) ⁴D	5	d(³G) ²D2	5	d(³M₉) 5/2	64	d(³L₉) 5/2	9	d(³M₉) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-		126060.3	-		0.988	d(³M) ⁴M	38	d(³M) ²M	13	d(³M) ⁴L	11	d(³D₀) 3/2	24	d(³D₂) 2/2	2	d(³D₂) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-		126069.8	-		1.670	d(³D) ⁶P	31	d(³D) ⁶D	26	d(³D) ⁶G	7	d(³H₆) 3/2	18	d(¹I₆) 3/2	3	s(³K₈) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-		126169.4	-		1.035	d(³L) ²L	9	d(¹I) ²L3	8	d(³H) ²K2	7	d(³I₅) 5/2	8	d(³H₄) 3/2	7	d(³D₁) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-		126194.2	-		1.284	s(⁵F) ⁴F	54	s(⁵F) ⁶F	30	s(³D) ⁴D1	4	s(⁵F₂) 1/2	41	s(⁵S₂) 1/2	27	s(⁵F₁) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		126347.4	-		1.028	d(³H) ⁴H2	8	d(³F) ²F2	8	d(³F) ⁴D2	6	d(³D₁) 3/2	40	d(³D₀) 3/2	19	d(³F₃) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-		126377.7	-		0.421	d(³D) ⁶G	44	d(³D) ⁴F	17	d(⁵G) ⁶G	4	d(³I₆) 5/2	12	d(³D₄) 5/2	9	d(³G₄) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	126400.40(17)		126386.2	14	4	1.133	d(³F) ²G3	11	d(³I) ⁴H1	7	d(³D) ⁶D	7	d(³I₇) 5/2	11	d(³D₄) 5/2	10	d(¹K₇) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	126426.00(30)		126414.3	12	8	1.089	d(³I) ²I1	15	d(³D) ⁶G	10	d(³H) ⁴H2	9	d(³L₇) 5/2	10	d(³H₅) 3/2	10	d(³M₈) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-		126468.5	-		1.000	d(³L) ²K	18	d(³H) ⁴I2	10	d(³I) ²I1	9	d(³G₃) 5/2	11	d(³G₄) 5/2	7	d(³F₃) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-		126503.7	-		1.246	s(⁵F) ⁶F	47	s(⁵S) ⁴S	27	s(³D) ⁴D1	8	s(³K₈) 1/2	35	s(³K₈) 1/2	11	d(³L₇) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-		126554.2	-		1.104	d(³G) ⁴H2	7	d(³F) ⁴H2	5	d(³F) ⁴F3	5	d(³D₄) 5/2	9	d(³D₂) 3/2	8	d(³G₃) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		126555.8	-		1.133	d(³D) ⁶P	12	d(³D) ⁴F	5	d(³G) ⁴G2	5	d(³M₉) 5/2	76	d(³L₉) 5/2	8	d(³M₉) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	7.5	-		126593.2	-		1.042	s(³K) ²K2	21	s(³K) ⁴K2	15	d(³L) ²L	11	s(⁵G₆) 1/2	77	s(³H₆) 1/2	10	s(³H₆) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-		126677.4	-		1.057	d(³M) ²N	43	d(³M) ⁴N	41	d(³L) ⁴M	6	d(¹D₂) 3/2	8	d(³I₆) 5/2	8	d(³D₂) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		126782.8	-		1.067	d(³I) ²G1	9	d(³D) ⁶G	7	d(¹D) ²G3	6	d(³D₃) 5/2	8	d(³D₂) 5/2	7	d(³G₄) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	6.5	-		126815.6	-		1.340	s(⁵G) ⁶G	77	s(³H) ⁴H4	10	s(³H) ⁴H1	6	s(⁵F₃) 1/2	46	s(⁵F₂) 1/2	21	s(³D₂) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	126798.91(30)		126878.9	-80	8	1.203	d(³D) ⁶D	19	d(³F) ⁴F2	10	d(³F) ⁴F4	7	d(³H₅) 3/2	10	d(³H₆) 3/2	10	d(³H₄) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-		126880.4	-		1.024	d(³H) ⁴H2	10	d(³D) ⁶G	10	d(³H) ⁴I2	9	d(³D₁) 3/2	25	d(³D₂) 3/2	7	d(³D₁) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		126934.6	-		1.003	d(³D) ⁶G	25	d(³D) ⁴F	7	d(³D) ⁶P	4	d(³F₃) 5/2	17	d(³G₃) 5/2	8	d(³F₂) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-		127003.0	-		0.363	d(³F) ⁴D2	17	d(³F) ⁴D4	12	d(⁵G) ⁶F	10	d(³P₁) 5/2	13	d(³F₃) 3/2	12	d(³D₁) 5/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-		127057.6	-		1.206	d(³P) ⁴D2	11	d(³D) ⁴D1	6	d(³F) ⁴P3	5	d(³M₉) 5/2	80	d(³L₉) 5/2	6	d(³M₁₀) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-		127157.5	-		1.125	s(³F) ⁴F	67	s(³D) ²D1	7	s(⁵S) ⁶S	5	s(⁵F₁) 1/2	77	s(³D₁) 1/2	16	s(³D₁) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-		127160.7	-		1.039	d(³M) ⁴M	36	d(³M) ²M	23	d(³M) ²N	14	d(³I₇) 5/2	16	d(³H₆) 3/2	5	d(³D₃) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	127125.50(30)		127170.9	-45	6	1.113	d(³I) ²H1	15	d(³H) ⁴G2	8	d(³D) ⁶G	7	d(³D₀) 5/2	15	d(³G₄) 3/2	6	d(³D₃) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-		127279.6	-		1.189	d(³D) ⁴F	9	d(³F) ⁴P2	6	d(³D) ⁶D	6	d(³D₃) 5/2	22	d(³D₂) 5/2	7	d(³G₄) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	0.5	-		127361.4	-		-0.486	s(³F) ⁶F	77	s(³D) ²D1	16	s(³D) ⁴D2	4	s(⁵G₆) 1/2	64	s(³H₆) 1/2	10	s(⁵G₅) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		127411.4	-		1.245	d(³D) ⁶D	12	d(³D) ⁶P	11	d(³D) ⁴F	6	d(³H₆) 3/2	7	d(¹I₆) 3/2	5	d(³D₄) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	127414.20(30)		127505.1	-91	6	1.105	d(³D) ⁶G	8	d(³I) ²H1	6	d(³H) ⁴H2	5	d(³F₃) 3/2	12	d(⁵G₃) 3/2	5	d(³D₁) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-		127594.1	-		1.169	d(³D) ⁴D	12	d(³F) ⁴P2	8	d(³G) ²D2	7	d(³G₃) 5/2	12	d(³F₃) 5/2	9	d(³I₇) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-		127658.6	-		1.076	d(³D) ⁴G	13	d(³F) ⁴H2	11	d(³D) ²I2	11	d(³G₄) 5/2	30	d(³D₄) 5/2	20	d(³H₄) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-		127857.8	-		1.173	d(³F) ⁴H2	30	d(³D) ⁶G	20	d(³H) ²K4	4	d(³D₂) 5/2	15	d(³D₁) 5/2	9	d(³H₄) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-		127912.2	-		1.103	d(³H) ⁴H2	8	d(³D) ⁶P	7	d(³D) ⁶D	7	d(³H₅) 3/2	8	d(³H₆) 3/2	6	d(³D₃) 5/2	4

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$\delta_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	127929.20(30)	-	127930.9	-2	5	1.122	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	10	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F	8	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F2	7	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	128034.8	-	-	0.981	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G2	6	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> F1	5	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	5.5	-	-	128144.9	-	-	1.242	s( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	43	s( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	28	s( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> H4	8	s( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 1/2	59	s( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	14	s( <sup>5</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	128270.4	-	-	0.983	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> D3	13	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D2	7	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	5	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	18	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	128286.8	-	-	1.031	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	31	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P3	12	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> S3	8	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	17	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	128389.30(30)	-	128369.6	20	4	1.132	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F	23	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	5	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> F	5	d( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 5/2	25	d( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 3/2	21	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	128525.20(30)	-	128371.0	154	2	1.052	d( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> L	49	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> L2	7	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> L3	6	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	19	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	13	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	128421.8	-	-	0.960	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I2	29	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K2	13	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> I2	5	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	19	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	11	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	128703.10(30)	-	128622.7	80	5	1.044	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	36	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> G	8	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	4	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	10	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	128658.5	-	-	0.662	s( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	56	s( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> D1	13	s( <sup>5</sup> F) <sup>6</sup> F	9	s( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	32	s( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	19	s( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 1/2	14
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	128757.20(30)	-	128700.7	56	2	1.040	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> K1	19	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> K2	14	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I2	8	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	19	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	128710.9	-	-	1.179	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P2	19	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F2	5	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	4	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 5/2	24	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	11	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	128864.50(17)	-	128834.3	30	3	1.011	d( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> K	15	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> K	14	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> I2	14	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	10	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	129112.0	-	-	1.058	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	8	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> G3	6	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> G1	5	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 5/2	16	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	5.5	-	-	129121.2	-	-	1.287	s( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	19	s( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	19	s( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	18	s( <sup>5</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	32	s( <sup>5</sup> F <sub>5</sub> ) 1/2	16	s( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	16
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	129139.8	-	-	1.249	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	33	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D2	9	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	8	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	10	d( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	129189.00(19)	-	129184.0	5	6	1.037	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G2	12	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> H1	11	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> H3	5	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 5/2	14	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	129277.1	-	-	1.140	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	18	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	6	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> S	5	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	8	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	129318.95(30)	-	129371.7	-53	7	1.028	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K2	10	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	8	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> I1	7	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 5/2	55	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	29	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-	-	129383.9	-	-	1.005	d( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> O	37	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> N2	29	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> O	17	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	25	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	6	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	129409.9	-	-	0.955	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G2	13	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F2	8	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F	7	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	11	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	129536.6	-	-	1.325	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> S	16	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> P4	10	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> P3	7	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	28	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	13	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	129588.4	-	-	0.989	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	27	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K2	13	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M2	8	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	19	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	18	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	129653.33(30)	-	129706.8	-54	7	1.139	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> G	16	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H2	13	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> G	11	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	129783.10(30)	-	129787.6	-5	4	1.157	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F2	7	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> P	6	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	22	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	13	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	129840.4	-	-	1.192	s( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	26	s( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	15	s( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	12	s( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	43	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	3	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	129867.3	-	-	1.062	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I2	19	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> L3	10	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> K3	7	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	129870.1	-	-	1.140	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	11	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> D1	8	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P3	8	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	17	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	130175.6	-	-	1.027	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H3	12	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> G3	11	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G3	6	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	23	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	21	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	130106.60(30)	-	130183.3	-77	2	1.031	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K2	21	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	15	d( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> M	9	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	130235.40(15)	-	130277.8	-42	5	1.006	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	6	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H1	5	d( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	31	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	20	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	130390.7	-	-	0.956	d( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> K1	23	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K2	22	d( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> I1	9	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	11	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> D <sub>0</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	130434.3	-	-	1.100	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> D3	15	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> P	8	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F2	6	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	130522.10(30)	-	130507.5	15	5	1.084	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G2	9	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> G	6	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> H3	6	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	27	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	4	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	130537.0	-	-	1.023	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G2	13	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> G2	10	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> F2	6	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	130732.4	-	-	1.112	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> G	19	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F2	7	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> H1	5	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 5/2	21	d( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	130799.1	-	-	0.840	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F	14	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> P	8	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> F1	7	d( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 5/2	7	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	130810.0	-	-	1.005	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> G	14	d( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> G1	9	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> G	4	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	26	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	130827.2	-	-	1.018	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	33	d( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> P1	15	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P3	13	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	22	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	15	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	130955.8	-	-	1.030	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	16	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K2	8	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> K2	7	d( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	11	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	131072.4	-	-	1.035	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> K	15	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	13	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> I2	9	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	14	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	12	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	131292.8	-	-	1.161	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P2	14	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> P	12	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P4	10	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	18	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	15	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	131294.8	-	-	1.124	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> G	23	d( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> G	12	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> G3	10	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	7	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	131357.2	-	-	0.998	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G1	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F2	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	7	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	50	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	7



TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	132381.2	-	-	1.062	d(1K) 2H	15	d(1G) 2H4	7	d(3L) 2I	5	d(3G3) 3/2	14	d(3H4) 5/2	10	d(3D4) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	132563.0	-	-	0.863	d(3D) 4P	15	d(3H) 4F2	10	d(3G) 4F1	9	d(3D2) 5/2	21	d(3D1) 5/2	16	d(3H5) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	132803.70(30)	-	132647.4	156	3	1.027	d(3D) 4G	38	d(3H) 4G2	8	d(3H) 2F2	5	d(1D2) 3/2	18	d(1D2) 5/2	11	d(3D2) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	132821.8	-	-	1.176	d(1D) 2P3	19	d(3D) 4P	19	d(1D) 2P2	8	d(3H5) 5/2	27	d(1K7) 3/2	21	d(3H6) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	132835.1	-	-	1.047	d(3H) 4K2	32	d(1K) 2L	15	d(3H) 4I2	7	d(3H5) 3/2	12	d(3H4) 5/2	8	d(3H6) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	132976.9	-	-	0.990	d(3H) 2K2	18	d(1I) 2K2	9	d(3H) 2I2	9	d(1H5) 3/2	19	d(1K7) 5/2	7	d(3I5) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	133000.00(18)	-	132977.4	23	5	1.020	d(1H) 2G1	10	d(1H) 2H1	9	d(1K) 2H	7	d(3F3) 3/2	16	d(3F3) 3/2	8	d(3H6) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	132919.60(12)	-	132981.5	-62	4	0.986	d(3F) 4H3	10	d(3F) 2F3	6	d(3F) 4G3	5	d(3D1) 5/2	11	d(3F3) 3/2	8	d(3F3) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	133063.3	-	-	0.966	d(3D) 4G	20	d(3F) 2D3	10	d(3G) 2F1	7	d(3F3) 5/2	20	d(1I6) 5/2	8	d(3F3) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	133120.02(30)	-	133125.0	-5	7	1.085	d(3F) 4H3	13	d(1I) 2I3	6	d(3F) 4H4	5	d(3D2) 5/2	11	d(3D0) 5/2	10	d(3F3) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	133139.8	-	-	1.050	d(3D) 4G	20	d(3D) 6S	12	d(3F) 4G2	5	d(3H4) 3/2	12	d(3G4) 3/2	12	d(3G3) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 6s	6.5	-	-	133239.9	-	-	1.238	s(3H) 4H2	36	s(3H) 4H3	25	s(5G) 6G	17	s(5G5) 1/2	28	s(3H5) 1/2	8	d(3H5) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	133240.0	-	-	0.938	d(3G) 4I1	12	d(3H) 4I2	11	d(3G) 4H1	11	d(1K7) 3/2	12	d(1L8) 5/2	8	d(3H6) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	133513.2	-	-	1.031	d(1L) 2K2	10	d(1K) 2I	10	d(3H) 2K2	7	d(3D2) 5/2	16	d(3F2) 3/2	11	d(1D2) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	133535.8	-	-	1.180	d(3D) 4P	16	d(3D) 4S	11	d(1D) 2D2	6	s(5G5) 1/2	19	d(3H6) 3/2	7	d(1H5) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	133627.33(40)	-	133620.0	6	5	1.124	s(5G) 6G	15	d(3H) 4G2	6	d(3H) 4H2	5	d(3F3) 5/2	22	d(3D3) 5/2	11	d(3D1) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	133666.1	-	-	1.241	d(3D) 4P	19	d(3F) 4P2	16	d(3F) 4D2	6	d(3H5) 5/2	15	d(3G4) 3/2	6	d(1H5) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	133656.60(30)	-	133688.9	-32	4	1.027	d(1H) 2F1	8	d(3G) 4G1	7	d(3H) 2G2	6	d(3G4) 3/2	21	d(3G4) 3/2	6	d(1G4) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	133926.40(30)	-	133742.4	184	3	1.126	d(3G) 4D1	10	d(3F) 2F3	7	d(3G) 2D1	6	d(3M8) 5/2	45	d(1K7) 5/2	25	d(1L8) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	5.5	-	-	133746.1	-	-	1.151	s(5G) 6G	21	s(5G) 4G	8	d(3H) 2I2	7	s(3H6) 1/2	25	s(3H6) 1/2	18	s(5G6) 1/2	15
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	133764.4	-	-	1.009	d(3M) 2N	36	d(1K) 2M	25	d(3M) 4N	11	d(3M8) 5/2	52	d(1L8) 5/2	8	d(1L8) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	133774.3	-	-	0.979	d(3M) 2M	34	d(1L) 2L2	16	d(3M) 4M	14	d(3H5) 3/2	10	d(3F3) 3/2	6	d(3F3) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	133900.2	-	-	1.011	d(3H) 4G2	11	d(3F) 4G3	7	d(1D) 2G2	6	d(3G4) 3/2	9	d(1G4) 3/2	9	s(3H6) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	133973.3	-	-	1.034	d(1G) 2I2	9	d(3G) 4I1	8	s(5G) 4G	8	d(3H4) 5/2	11	d(3F3) 5/2	11	d(1D2) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	134061.2	-	-	1.113	d(3H) 4F2	11	d(3F) 4P3	7	d(3D) 4P	7	d(3F2) 3/2	7	d(3H5) 5/2	6	d(3D2) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	134097.0	-	-	0.956	d(3D) 4F	8	d(3H) 4G2	6	d(1D) 2F4	5	d(1H5) 5/2	13	d(3H5) 5/2	13	d(3H6) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	134184.6	-	-	1.069	d(3H) 2K2	15	d(1H) 2K1	13	d(3H) 4I2	10	s(5G5) 1/2	10	d(3G3) 3/2	7	d(3H5) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	5.5	-	-	134191.1	-	-	1.092	s(3H) 2H2	20	s(3H) 2H3	14	s(5G) 4G	11	s(3L9) 1/2	89	s(3M9) 1/2	10	-	-
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	134196.8	-	-	1.045	d(3H) 4G2	10	s(5G) 4G	8	d(3G) 4H1	6	d(1H5) 5/2	22	d(1K7) 3/2	11	d(3H5) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	9.5	-	-	134266.2	-	-	1.148	s(3L) 4L	89	s(3M) 4M	8	s(3M) 2M	2	s(5F2) 1/2	17	s(5G2) 1/2	0	s(5G3) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	134272.5	-	-	1.228	s(5G) 6G	15	s(5F) 6F	10	d(3D) 6S	8	s(5G5) 1/2	39	s(3H5) 1/2	1	s(3H5) 1/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	134313.5	-	-	1.087	s(5G) 4G	29	s(5G) 6G	11	s(3H) 4H4	9	s(5G2) 1/2	20	s(5F2) 1/2	19	s(5F2) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	134346.60(30)	-	134328.9	18	4	1.017	d(1H) 2K1	16	d(1K) 2I	15	d(3H) 2K2	13	d(3H5) 3/2	12	d(3F3) 5/2	7	d(1K7) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	134361.7	-	-	1.033	d(3F) 4G2	6	d(3F) 4H3	5	d(1K) 2H	5	d(3D3) 5/2	18	d(3D1) 5/2	11	d(3D4) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	134384.9	-	-	0.708	s(5G) 6G	20	s(3F) 4F4	11	s(5F) 6F	11	s(3L9) 1/2	86	s(3M9) 1/2	11	-	-
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	134464.8	-	-	1.451	d(3D) 6S	31	d(3D) 4P	6	d(3F) 4P2	5	d(3M8) 5/2	15	d(3H5) 5/2	13	d(3M8) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	134534.8	-	-	1.009	d(3M) 2L	30	d(3H) 2K2	8	d(3H) 4K2	7	d(3G3) 3/2	8	d(3F3) 3/2	7	d(1G4) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	134598.7	-	-	1.018	d(3G) 4H1	9	d(1G) 2G4	9	d(3G) 4I1	7	d(1H5) 3/2	15	d(3H5) 3/2	10	d(3H6) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	134817.70(30)	-	134723.6	94	4	0.992	d(3H) 2F2	17	d(1H) 2G1	15	d(1I) 2G3	6	d(3F3) 5/2	14	d(3F3) 5/2	9	d(3G4) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	134876.50(13)	-	134922.1	-46	5	1.133	d(3G) 4F1	10	d(3F) 4F3	10	d(3G) 4G1	5	d(3F2) 3/2	7	d(1H5) 5/2	5	d(3H5) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	134949.7	-	-	0.979	d(3F) 4G2	8	d(3H) 4F2	7	d(1H) 2F1	5	d(1K7) 5/2	32	d(3M8) 5/2	14	d(3K7) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	8.5	-	-	134972.3	-	-	1.054	s(3L) 2L	55	s(3L) 4L	31	s(3M) 4M	8	s(5G3) 1/2	32	d(3G3) 3/2	5	s(3F3) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	134983.7	-	-	1.040	d(1K) 2M	32	d(3M) 2N	14	d(3K) 4M1	13	d(1H5) 5/2	8	d(1G4) 3/2	8	d(3G4) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	135208.0	-	-	1.014	d(1G) 2H2	11	d(1H) 2H1	8	d(3H) 4F2	5	d(3F2) 5/2	10	d(1D2) 5/2	9	d(1D2) 5/2	6

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	135275.8	-	-	1.097	d(1D) 2G2	9	d(3G) 4F1	6	d(3G3) 3/2	14	d(3G4) 5/2	9	d(3D1) 5/2	8		
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	135325.7	-	-	1.316	d(3D) 4S	17	d(3G) 4D1	17	d(3D) 4P	14	s(5G3) 1/2	25	d(3G3) 3/2	9	d(1D2) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	135343.7	-	-	0.930	s(5G) 6G	18	s(5G) 4G	7	d(3G) 4G1	7	d(1G4) 3/2	11	d(3G4) 5/2	9	d(3G4) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	135356.3	-	-	1.025	d(3G) 4H1	8	d(1G) 2I2	8	d(3G) 4I3	6	d(1H5) 5/2	9	d(3G4) 3/2	8	d(3H5) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	135406.0	-	-	0.930	s(5G) 6G	23	s(5G) 4G	9	d(3G) 4G1	4	s(5G3) 1/2	31	d(3G3) 3/2	4	d(3G4) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	135419.4	-	-	1.048	d(1H) 2H1	13	d(3F) 2H2	7	d(3I) 2I1	6	d(1H5) 5/2	19	d(1K7) 5/2	8	d(1I6) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	135359.10(30)	-	135436.0	-77	5	1.071	d(1H) 2I1	17	d(3H) 4I2	7	d(1I) 2I3	6	s(5G3) 1/2	27	d(3F2) 5/2	4	s(3F3) 1/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	135467.2	-	-	1.080	s(5G) 6G	16	s(5G) 4G	11	s(3F) 4F4	5	d(3H6) 3/2	16	d(1I6) 3/2	12	d(1K7) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	135537.7	-	-	1.064	d(1K) 2K	17	d(1I) 2K3	11	d(3H) 2K2	11	d(3F3) 5/2	12	d(1D2) 5/2	12	d(1D2) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	135586.7	-	-	1.049	d(1D) 2G2	12	d(3F) 2H3	7	d(3G) 4H1	7	d(3G4) 5/2	19	d(1G4) 5/2	12	d(3H6) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	135670.2	-	-	1.066	s(5G) 4G	17	s(5G) 6G	14	s(3F) 4F4	4	s(3K6) 1/2	66	s(3K6) 1/2	15	d(1H5) 5/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	135894.5	-	-	1.092	d(3G) 4I1	14	d(1G) 2I4	12	d(3G) 4H1	8	d(3G3) 3/2	13	d(3D4) 5/2	9	d(3F3) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	135959.2	-	-	1.147	d(3D) 4S	15	d(3G) 4D1	8	d(3G) 2D1	7	d(1N10) 3/2	90	d(1N10) 5/2	7	d(3M10) 3/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	11.5	-	-	135997.2	-	-	0.964	d(1N) 2Q	95	d(1N) 2O	2	d(3M) 2O	2	d(1H5) 5/2	21	d(3H6) 5/2	8	d(3H5) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	136009.3	-	-	1.035	d(1H) 2K1	21	d(3M) 2L	13	d(3H) 2K2	13	d(1H5) 5/2	31	s(3K6) 1/2	6	d(1I6) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	136040.3	-	-	1.023	d(1H) 2I1	16	d(1H) 2H1	16	s(3K) 4K2	6	d(1K7) 5/2	9	d(1G4) 5/2	7	d(1G4) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	136048.6	-	-	1.039	d(1K) 2H	9	d(1G) 2H2	7	d(3H) 2H2	6	d(3F3) 5/2	10	d(1H5) 5/2	7	d(3G4) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	136089.0	-	-	1.098	d(3H) 4F2	10	d(3F) 2G3	8	d(1H) 2F1	7	d(1H5) 5/2	19	d(3H5) 5/2	14	d(3H6) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 6s	5.5	-	-	136129.6	-	-	0.817	s(3K) 4K2	66	s(3K) 4K1	15	s(1I) 2I3	2	s(3G4) 1/2	14	s(3D4) 1/2	7	s(3G4) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	136187.5	-	-	1.131	s(3F) 4F2	14	s(3D) 6D	7	s(1G) 2G4	5	s(3G4) 1/2	18	s(3H4) 1/2	10	s(1G4) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	136354.6	-	-	0.959	s(3F) 2F2	16	s(5G) 4G	13	s(3H) 4H4	10	s(3K6) 1/2	36	s(3K6) 1/2	8	d(3G5) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	136371.4	-	-	1.074	d(3H) 4G2	11	d(1H) 2G1	10	d(1H) 2H1	9	d(1K7) 5/2	32	d(3H6) 5/2	15	d(3K8) 3/2	13
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	136411.9	-	-	1.082	d(1K) 2L	24	d(3H) 4K2	15	d(1K) 2M	8	d(1H5) 5/2	13	d(3G4) 5/2	8	d(3G4) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	136453.9	-	-	1.013	d(1H) 2F1	13	d(3G) 4D1	12	d(3G) 4D3	6	d(3F2) 3/2	14	d(3G5) 3/2	8	d(3F2) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	136558.8	-	-	0.960	d(3F) 4H2	15	d(3F) 4G3	6	d(3H) 4H2	6	d(1G4) 5/2	10	d(3H6) 3/2	7	d(3G4) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	136578.4	-	-	1.051	d(1G) 2H2	7	d(3H) 2I2	5	d(3F) 4G2	5	s(3K6) 1/2	34	d(3G5) 3/2	9	s(3K6) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	136590.3	-	-	0.987	s(3K) 2K2	24	d(1K) 2K	12	s(3K) 4K2	10	d(3G4) 3/2	10	d(3F2) 3/2	5	d(3H4) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	136764.4	-	-	0.989	d(3F) 4G3	10	d(3F) 4D2	9	d(3H) 2F3	7	d(3F2) 3/2	13	d(3F2) 5/2	13	d(3F2) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	136818.1	-	-	1.359	d(3F) 4D3	16	d(1D) 2S2	11	d(1D) 2S4	8	d(3K8) 3/2	49	d(1L8) 3/2	16	d(3K8) 3/2	14
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	136857.9	-	-	1.038	d(3K) 2M1	32	d(1L) 2N1	18	d(3K) 4M1	14	d(1D2) 5/2	9	d(3F2) 5/2	7	d(3H4) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	136892.8	-	-	0.950	d(3F) 4D2	9	d(3F) 4F3	9	d(1D) 2P2	8	d(3H6) 3/2	13	d(1K7) 5/2	10	d(3F3) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	137008.28(30)	-	137047.9	-40	4	0.979	s(3K) 2K2	26	d(1K) 2K	12	s(3K) 4K2	10	d(3F3) 5/2	8	d(3G4) 3/2	8	d(1G4) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	137015.70(30)	-	137090.8	75	7	1.086	d(1K) 2H	10	d(3H) 4G2	7	d(1I) 2G3	6	d(3G3) 5/2	24	d(3F2) 3/2	17	d(1D2) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	137156.2	-	-	1.009	d(1G) 2F2	7	d(3F) 2G3	5	d(3F) 4D2	5	d(1I6) 5/2	15	d(1I6) 5/2	10	d(1K7) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	137259.3	-	-	0.582	d(3G) 4D1	24	d(3F) 4D4	22	d(3F) 4D2	9	d(3K8) 3/2	25	d(3H6) 5/2	9	d(3K8) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	137317.6	-	-	0.609	s(5G) 6G	40	s(3D) 4D1	8	s(3F) 4F4	7	s(5G2) 1/2	40	s(3D2) 1/2	11	s(5F2) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	137403.0	-	-	1.071	d(1I) 2K3	12	d(1I) 2K2	11	d(1K) 2K	10	d(3H5) 5/2	13	d(1H5) 5/2	8	d(1G4) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	137377.10(23)	-	137416.7	-40	4	1.118	d(3K) 4H1	16	d(3K) 4I1	14	d(3H) 4H2	7	d(1N10) 3/2	43	d(1K7) 5/2	8	d(3K8) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	137505.1	-	-	0.996	d(3H) 2F1	8	d(3H) 4G2	5	d(3H) 2F2	5	d(3G3) 5/2	18	d(1H5) 5/2	11	d(3G5) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	137559.6	-	-	1.061	d(1N) 2I	46	d(1K) 2L	12	d(3K) 2L1	6	d(3H6) 3/2	11	d(1K7) 5/2	6	d(3H4) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	137666.9	-	-	1.086	d(3G) 4G1	16	d(1H) 2F1	7	d(3G) 4D1	6	d(3G4) 5/2	19	d(3G3) 5/2	16	d(3F3) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	137865.1	-	-	1.065	d(3H) 2H2	10	d(3G) 4H1	7	d(3G) 4G1	7	d(3F2) 3/2	20	d(3F2) 3/2	13	d(3F2) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	137866.3	-	-	1.070	d(3G) 4H1	24	d(3F) 4H4	6	d(3G) 4G1	6	d(3G3) 5/2	16	d(3G4) 5/2	12	d(3F3) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	137909.7	-	-	0.890	d(3F) 2D2	21	d(3F) 2D3	6	d(3F) 4F4	6	d(1I6) 5/2	10	d(3G4) 5/2	9	d(3G4) 5/2	8

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition						JJ percentage composition					
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	137923.7	-	-	0.916	s( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	39	s( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F4	9	s( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	9	s( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 1/2	44	s( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	13	s( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	138070.20(30)	-	137992.6	78	4	1.107	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G1	24	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G2	13	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	7	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	19	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	18	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	138001.6	-	-	1.099	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> I3	9	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> I2	8	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> I	7	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	17	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	13	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	138064.53(30)	-	138037.8	27	7	1.073	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> I	16	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G1	10	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> H2	5	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	14	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	11	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	138080.3	-	-	0.887	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> P2	22	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D1	17	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P3	8	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	6	d( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	138109.6	-	-	0.988	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	14	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> L2	12	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K1	6	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	12	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	138036.50(30)	-	138139.4	-103	6	1.108	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D1	10	d( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> G1	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	9	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	138198.7	-	-	1.045	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F1	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G2	8	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D4	6	d( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	138484.2	-	-	1.090	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> H1	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G2	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F2	8	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	138562.90(30)	-	138539.9	23	4	1.058	d( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> G1	10	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F4	8	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> F2	6	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	8	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	138754.0	-	-	0.947	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F2	9	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G1	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F4	7	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	13	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	138760.4	-	-	1.103	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> H3	11	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> H1	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G2	7	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	12	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	138774.4	-	-	0.806	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	10	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> D2	10	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D4	8	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	138809.0	-	-	1.059	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> I2	12	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H1	7	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> K	7	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	138851.2	-	-	1.083	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F2	11	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P2	10	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> F2	8	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	16	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	138869.5	-	-	1.081	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> G2	19	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	6	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F1	6	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	22	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	16	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	139080.9	-	-	1.042	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> I	14	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H1	6	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> I1	5	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	139081.3	-	-	1.104	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I1	22	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K1	10	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	9	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	139225.8	-	-	1.056	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> G2	12	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F2	8	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G2	6	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	17	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	139338.6	-	-	1.021	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F2	8	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> I1	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H3	5	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	53	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	18	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	16
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	139406.1	-	-	1.024	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	9	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> K	9	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> I	8	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	14	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	1	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-	-	139412.1	-	-	1.121	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	53	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> N1	18	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M2	16	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 5/2	97	d( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 5/2	3	-	-
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	139451.80(30)	-	139525.0	-73	4	0.936	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H1	19	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G2	14	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G4	8	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	16	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	12	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	12.5	-	-	139587.0	-	-	1.042	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> Q	97	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> O	3	-	-	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	139595.2	-	-	1.065	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> H1	14	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> H2	9	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> I	5	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	25	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	139602.5	-	-	1.045	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I1	12	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> K2	9	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> L	8	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	11	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	139687.5	-	-	0.809	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F1	20	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P2	8	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> D1	8	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	10	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	139692.7	-	-	1.061	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> L	20	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	18	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> L	13	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	139699.8	-	-	1.040	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> H2	17	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> G2	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> H2	6	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	11	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	139787.7	-	-	0.892	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G2	9	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F1	6	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G1	6	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	18	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	11	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	139785.30(16)	-	139827.2	-42	6	1.018	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H2	15	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H2	6	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> H1	6	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	15	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	139880.5	-	-	1.369	s( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	58	s( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D2	15	s( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	4	s( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	58	s( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	15	s( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	139837.90(30)	-	139896.6	-59	5	1.134	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H1	21	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> I2	10	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	23	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	13	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	140042.8	-	-	1.025	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> D1	11	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D1	11	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D3	8	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	0.5	-	-	140165.0	-	-	0.984	s( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	28	s( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	25	s( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	20	s( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 1/2	50	s( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	20	s( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 1/2	13
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	140203.1	-	-	1.048	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> L3	13	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	10	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> M	9	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	140245.3	-	-	1.304	s( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	42	s( <sup>5</sup> F) <sup>4</sup> F	11	s( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	10	s( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 1/2	52	s( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	15	s( <sup>5</sup> F <sub>1</sub> ) 1/2	13
4f <sup>10</sup> 6s	10.5	-	-	140304.7	-	-	1.139	s( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	93	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	3	s( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> N	2	s( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 1/2	93	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	3	s( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 1/2	2
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	140552.4	-	-	1.052	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> I1	12	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G3	12	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> H4	6	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	140584.8	-	-	1.133	s( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> D1	42	s( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> D2	11	s( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	10	s( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	52	s( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	13	s( <sup>5</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	140692.1	-	-	1.060	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F3	8	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G1	7	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F2	5	s( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	23	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	13	s( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 1/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	140699.6	-	-	1.121	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H2	14	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> K2	11	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H3	9	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	9	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	140991.12(30)	-	140959.7	31	4	1.062	s( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	17	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I2	11	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I3	8	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	140989.2	-	-	1.139	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> D2	13	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P4	8	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F2	7	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	31	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	10

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$\delta_{Landé}$	LS percentage composition						JJ percentage composition					
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 6s	9.5	-	-	141001.7	-		1.056	s( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> M	60	s( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	35	s( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> N	2	s( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 1/2	94	s( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 1/2	2	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 3/2	1
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	141031.0	-		1.042	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F2	14	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G2	11	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H3	5	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	33	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	7.5	-	-	141070.7	-		1.017	s( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	28	s( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> L	10	s( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	10	s( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	38	s( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 1/2	0	s( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	8.5	-	-	141070.8	-		1.065	s( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	38	s( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> L	24	s( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	12	s( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	62	s( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 1/2	14	s( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 1/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	141106.5	-		1.117	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	17	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P2	12	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P4	11	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	9	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	141187.2	-		1.780	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P2	28	d( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> P	12	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P2	10	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	14	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	141431.40(30)	-	141313.7	118	6	1.093	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> I2	9	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G1	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G2	7	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	35	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	22	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	141324.1	-		1.008	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	25	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	19	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> D2	7	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	141338.0	-		0.959	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	37	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	13	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> K3	9	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	141413.4	-		1.055	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F2	13	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> G1	12	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F2	7	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 5/2	41	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	5	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	141460.5	-		1.104	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H2	6	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	6	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> G2	5	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 3/2	17	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	141566.40(30)	-	141585.2	-19	3	0.996	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> L	41	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> L	7	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K1	6	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	11	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	8	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	141632.6	-		1.091	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K1	19	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K2	13	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	11	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 3/2	12	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	141746.5	-		1.077	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> H2	10	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F1	5	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> H3	5	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	12	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	141789.0	-		1.096	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> D1	13	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P3	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	7	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	18	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	141919.3	-		0.984	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L1	15	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> L2	7	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> K2	5	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 3/2	52	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	11	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	141965.3	-		1.245	s( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	19	s( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	18	s( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	10	s( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	29	s( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	8	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	142031.9	-		1.055	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> G2	13	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G2	6	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> F2	6	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	22	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	13	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	142173.8	-		1.042	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> M	41	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> N	14	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> M1	10	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	31	d( <sup>1</sup> I <sub>6</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	142174.50(50)	-	142182.4	-8	4	1.054	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> H2	23	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H1	11	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> H1	5	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	10	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	142201.6	-		1.133	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	14	s( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	14	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	12	s( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	22	s( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	19	s( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	15
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	142236.6	-		0.892	s( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	22	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F4	11	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	10	s( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	22	s( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	19	s( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 1/2	14
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	142298.1	-		1.111	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	31	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> L2	13	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K1	10	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	24	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	13	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	142447.9	-		1.070	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I1	17	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> I2	6	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	6	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	142466.0	-		1.071	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L1	24	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> N1	17	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	9	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	142500.9	-		1.088	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H1	12	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I1	11	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G1	9	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	10	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	142531.5	-		1.077	s( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	17	s( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	13	s( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> G4	8	s( <sup>5</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	30	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	13	s( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	142647.1	-		1.140	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> D1	11	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D4	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D2	8	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	142652.6	-		1.698	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> P2	16	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P3	12	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> S2	12	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 3/2	88	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	4	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	2
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	142921.8	-		1.041	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F1	13	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> D1	7	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F3	7	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-	-	142972.1	-		0.990	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> O	69	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> N	20	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	4	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	12	s( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	12	s( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	143006.9	-		1.054	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> H1	13	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K1	7	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G3	7	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	27	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	143140.2	-		1.163	s( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	21	s( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> G4	12	s( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H4	8	s( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	21	s( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	12	s( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	143181.1	-		0.758	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F2	12	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	12	s( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	10	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>1</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	0.5	-	-	143210.5	-		1.842	s( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	48	s( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	31	s( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P3	3	s( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 1/2	78	s( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 1/2	5	s( <sup>3</sup> P <sub>0</sub> ) 1/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	143262.4	-		1.087	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H1	19	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> I1	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I2	8	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	8	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	7.5	-	-	143285.3	-		0.925	s( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> L2	52	s( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	22	s( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	14	s( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	52	s( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 1/2	2	s( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	18
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	143329.5	-		0.721	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	15	s( <sup>5</sup> G) <sup>6</sup> G	11	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F2	10	s( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	15	s( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 1/2	11	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	143365.6	-		1.079	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F3	6	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	6	d( <sup>1</sup> G) <sup>2</sup> G2	4	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	23	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	8.5	-	-	143373.5	-		1.044	s( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> L2	54	s( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	12	s( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	12	s( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	54	s( <sup>3</sup> M <sub>8</sub> ) 1/2	1	s( <sup>3</sup> L <sub>8</sub> ) 1/2	16
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	143471.00(24)	-	143457.6	13	4	0.909	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> G1	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G4	6	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> G3	6	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	143507.2	-		0.922	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	23	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K2	8	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K4	8	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	143665.10(16)	-	143628.6	37	2	1.027	s( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	24	s( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H4	11	s( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F4	9	s( <sup>3</sup> D <sub>4</sub> ) 1/2	26	s( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 1/2	11	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	143698.5	-		0.894	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I1	13	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I3	10	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> H1	9	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	9

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition						
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	143744.2	-	0.999	s( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F2	14	s( <sup>5</sup> G) <sup>4</sup> G	14	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	8	s( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	22	s( <sup>5</sup> G <sub>2</sub> ) 1/2	21	s( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	143807.6	-	0.993	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> H3	5	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F3	5	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F2	5	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	8	d( <sup>1</sup> L <sub>6</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	143883.9	-	1.059	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D2	17	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D2	16	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	11	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	9	d( <sup>1</sup> L <sub>6</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	143916.2	-	1.003	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> H1	8	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> I2	8	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> I1	6	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 5/2	25	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	22	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	17
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	144049.1	-	1.030	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> K	15	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L1	12	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> K3	8	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	13	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	11	d( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	144190.8	-	1.032	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M1	22	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> M	19	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K1	11	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	17	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	5.5	-	-	144295.2	-	1.167	s( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	20	s( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H4	12	s( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H3	11	s( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	20	s( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	19	s( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	17
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	144314.3	-	1.026	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> H1	13	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> H1	5	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> G3	4	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	15	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	11	d( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	144370.6	-	0.998	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H1	32	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H2	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> H3	5	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 3/2	29	d( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	144457.1	-	0.994	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L1	17	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H3	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	7	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	144513.69(14)	-	144528.9	-15	0.978	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K1	21	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> I	7	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I1	7	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	46	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	144537.7	-	1.120	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F3	14	d( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> F1	5	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F1	5	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	144587.0	-	1.093	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> M1	30	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L1	22	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> M1	10	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	9	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 3/2	9	d( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	144663.6	-	1.010	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> P2	10	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> D1	8	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D3	7	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	13	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	8	s( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	144717.7	-	0.987	s( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> G2	16	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	14	s( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> G3	8	s( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 1/2	17	s( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	14	s( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	144853.75(40)	-	144762.0	92	1.028	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> I1	11	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	8	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> K2	7	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	39	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	7.5	-	-	144810.2	-	1.116	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	27	s( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> I	8	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> L	7	s( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	27	s( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	8	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	144836.2	-	1.074	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F3	10	s( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	7	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G3	5	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	34	d( <sup>1</sup> L <sub>6</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	144940.7	-	1.010	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> M1	32	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> M	11	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	10	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 5/2	46	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	11	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	145037.5	-	1.366	s( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	33	s( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> D3	12	s( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	5	s( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	33	s( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	12	s( <sup>3</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	6.5	-	-	145081.9	-	0.882	s( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	58	s( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> K	10	s( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K2	6	s( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	58	s( <sup>1</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	10	s( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	145128.7	-	0.837	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H1	34	d( <sup>1</sup> I) <sup>2</sup> G2	11	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H2	11	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	145134.2	-	1.025	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> M	37	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> N1	17	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> N	13	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	10	d( <sup>1</sup> L <sub>6</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	145141.4	-	1.041	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F1	8	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> H3	8	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> H2	4	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	145169.9	-	1.043	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> I2	9	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G1	8	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> I1	6	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	7.5	-	-	145201.6	-	1.136	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	34	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I2	11	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> L	6	s( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	34	s( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	11	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	145205.0	-	0.997	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K1	27	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> K	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> I3	6	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	16	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	145491.0	-	0.785	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> P3	16	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> D4	9	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	16	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 3/2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	145521.6	-	1.135	s( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	24	s( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> D3	11	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D2	6	s( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	29	s( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	11	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	145619.0	-	0.875	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H3	16	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H1	7	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F1	6	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	145672.8	-	1.058	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I3	13	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L1	9	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K1	9	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	17	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	17	s( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	13
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	145675.5	-	1.011	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G2	6	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H1	6	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I1	5	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	6.5	-	-	145720.2	-	1.046	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	35	s( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> I1	23	s( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	15	s( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	52	s( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	18	s( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	15
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	145728.8	-	1.282	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	49	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F1	15	s( <sup>3</sup> F) <sup>6</sup> F	6	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	49	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	15	s( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	145748.3	-	1.078	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D2	11	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D4	10	s( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	21	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	7.5	-	-	145899.8	-	0.985	s( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> L	54	s( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	19	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	5	s( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	72	s( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	5	s( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	145932.8	-	1.025	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F1	11	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F3	10	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G1	6	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	32	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	146053.5	-	0.958	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F3	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F3	6	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G3	5	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	26	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	26	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	145521.6	-	1.135	s( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	24	s( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> D3	11	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D2	6	s( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	29	s( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 1/2	11	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	145619.0	-	0.875	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H3	16	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H1	7	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> F1	6	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	145672.8	-	1.058	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I3	13	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L1	9	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K1	9	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	17	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	17	s( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 1/2	13
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	145675.5	-	1.011	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> G2	6	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H1	6	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I1	5	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	6.5	-	-	145720.2	-	1.046	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	35	s( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> I1	23	s( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	15	s( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	52	s( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	18	s( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	15
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	145728.8	-	1.282	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	49	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F1	15	s( <sup>3</sup> F) <sup>6</sup> F	6	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	49	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	15	s( <sup>3</sup> F <sub>4</sub> ) 1/2	8

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$\delta_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	145748.3	-	-	1.078	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D2	11	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D4	10	s( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	21	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	7.5	-	-	145899.8	-	-	0.985	s( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> L	54	s( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	19	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	5	s( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	72	s( <sup>3</sup> L <sub>7</sub> ) 1/2	5	s( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 1/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	145932.8	-	-	1.025	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F1	11	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F3	10	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G1	6	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	32	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	15	d( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 5/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	146053.5	-	-	0.958	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F3	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F3	8	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G3	5	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	26	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	26	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	146078.4	-	-	0.888	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> P2	16	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> P4	12	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> D3	8	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 5/2	91	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 3/2	7	d( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 5/2	2
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	146113.3	-	-	1.128	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D1	16	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D3	11	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P3	9	s( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	22	s( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	6	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	11.5	-	-	146201.5	-	-	1.044	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> O	96	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> Q	2	d( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> N	2	s( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	13	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	4	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	146220.8	-	-	0.932	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	22	s( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> H1	6	d( <sup>1</sup> K) <sup>2</sup> H	5	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 5/2	57	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	25	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	146228.6	-	-	1.031	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	9	s( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> I1	5	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> I3	4	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	20	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> F <sub>3</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-	-	146253.1	-	-	1.036	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> N	32	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> O	25	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> N1	25	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 5/2	27	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	146316.4	-	-	1.070	s( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F3	14	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F2	7	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	6	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	20	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	146394.4	-	-	1.015	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> M	30	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> M1	11	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> L1	8	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	18	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	7	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	146420.1	-	-	0.930	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	21	s( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> H1	6	s( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H4	5	s( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	21	s( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	8	s( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	5.5	-	-	146436.7	-	-	1.022	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	37	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I2	10	s( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> H1	6	s( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	22	s( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	16	s( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	146475.4	-	-	1.072	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H3	15	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K1	7	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I3	6	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	10	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	146506.6	-	-	1.103	s( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F3	23	s( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	10	s( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F1	7	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	32	s( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 1/2	10	d( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	146617.4	-	-	0.961	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> G3	9	d( <sup>3</sup> F) <sup>4</sup> F3	7	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> F2	7	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	11	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	11	s( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	9.5	-	-	146884.8	-	-	1.071	s( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	54	s( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> M	35	s( <sup>3</sup> L) <sup>4</sup> L	10	s( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 1/2	88	s( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 1/2	10	s( <sup>3</sup> M <sub>10</sub> ) 1/2	1
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	146962.8	-	-	1.019	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I3	11	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> H1	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> I1	6	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	18	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	11	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	8.5	-	-	146964.7	-	-	0.982	s( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> M	49	s( <sup>3</sup> M) <sup>2</sup> M	29	s( <sup>3</sup> L) <sup>2</sup> L	7	s( <sup>3</sup> M <sub>9</sub> ) 1/2	78	s( <sup>3</sup> L <sub>9</sub> ) 1/2	10	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	3
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	147032.0	-	-	1.086	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> I1	21	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> I1	13	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> I2	6	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	16	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>5</sub> ) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	147163.7	-	-	1.070	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	14	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> K1	8	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K1	7	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	147208.0	-	-	1.056	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F3	23	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H1	9	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F1	5	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	17	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	147270.0	-	-	1.017	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> H1	10	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G3	6	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H3	5	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	5	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	6.5	147217.39(40)	-	147274.5	-57	4	1.087	s( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> I1	33	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	19	s( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> I2	11	s( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	47	s( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	16	s( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	147391.2	-	-	1.080	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H3	12	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G3	9	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I1	5	d( <sup>3</sup> H <sub>6</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	5.5	-	-	147465.6	-	-	0.957	s( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> I1	44	s( <sup>3</sup> I) <sup>2</sup> I2	13	s( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> I1	9	s( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	43	s( <sup>3</sup> I <sub>6</sub> ) 1/2	15	s( <sup>3</sup> I <sub>5</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	147562.0	-	-	1.064	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> F3	8	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D1	6	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> F2	4	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	16	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	13	d( <sup>1</sup> N <sub>10</sub> ) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	147677.6	-	-	1.024	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G3	9	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> H1	6	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> G1	5	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	26	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	24	d( <sup>1</sup> D <sub>2</sub> ) 3/2	14
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	147763.6	-	-	1.040	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> L1	20	d( <sup>1</sup> N) <sup>2</sup> M	10	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> L2	9	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	21	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	147800.8	-	-	1.707	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P3	19	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P1	19	d( <sup>1</sup> D) <sup>2</sup> P2	8	d( <sup>3</sup> F <sub>2</sub> ) 5/2	7	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	147942.5	-	-	0.668	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> F3	21	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> F1	11	d( <sup>3</sup> F) <sup>2</sup> D3	7	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	14	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	147966.8	-	-	1.116	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D1	7	d( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> D3	6	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G3	5	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	25	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	8	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	148046.7	-	-	1.025	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> K1	18	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I1	7	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K1	6	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	26	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	10	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	0.5	-	-	148116.3	-	-	0.893	s( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D1	26	s( <sup>3</sup> P) <sup>2</sup> P2	21	s( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	15	s( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	26	s( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 1/2	25	s( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	23
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	148117.1	-	-	1.326	s( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	28	s( <sup>3</sup> D) <sup>2</sup> D1	16	s( <sup>3</sup> P) <sup>4</sup> P2	12	s( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	32	s( <sup>3</sup> D <sub>1</sub> ) 1/2	25	s( <sup>3</sup> P <sub>1</sub> ) 1/2	17
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	148207.1	-	-	1.297	s( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	45	s( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> G2	8	s( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G	6	s( <sup>3</sup> D <sub>3</sub> ) 1/2	49	s( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	13	s( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	148277.9	-	-	0.903	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G3	18	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G1	8	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> G4	7	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	13	d( <sup>3</sup> G <sub>4</sub> ) 3/2	6	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	148303.6	-	-	1.171	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> G2	29	d( <sup>3</sup> I) <sup>4</sup> P2	12	d( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G3	4	d( <sup>3</sup> K <sub>7</sub> ) 5/2	14	d( <sup>3</sup> K <sub>8</sub> ) 5/2	11	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	148389.0	-	-	1.068	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> G3	11	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> H1	8	d( <sup>3</sup> G) <sup>2</sup> G3	7	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	20	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 3/2	11	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	148468.4	-	-	1.060	d( <sup>3</sup> K) <sup>2</sup> K1	13	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> K3	9	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> L1	8	d( <sup>3</sup> G <sub>5</sub> ) 5/2	9	d( <sup>3</sup> K <sub>6</sub> ) 5/2	8	d( <sup>1</sup> H <sub>5</sub> ) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	148458.80(30)	-	148474.2	-15	3	1.041	d( <sup>3</sup> H) <sup>2</sup> K3	9	d( <sup>1</sup> L) <sup>2</sup> I1	7	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> K3	7	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	6	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 3/2	5	d( <sup>3</sup> P <sub>2</sub> ) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	148555.1	-	-	1.083	s( <sup>3</sup> D) <sup>4</sup> D	23	s( <sup>3</sup> D) <sup>6</sup> D	22	s( <sup>3</sup> G) <sup>4</sup> G2	16	s( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	41	s( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	16	s( <sup>3</sup> G <sub>3</sub> ) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	148641.5	-	-	0.997	d( <sup>3</sup> K) <sup>4</sup> I1	9	d( <sup>1</sup> H) <sup>2</sup> H1	7	d( <sup>3</sup> H) <sup>4</sup> H3	5	d( <sup>1</sup> L <sub>8</sub> ) 5/2	12	d( <sup>3</sup> H <sub>4</sub> ) 5/2	10	d( <sup>3</sup> I <sub>7</sub> ) 3/2	9

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	148838.6	-	1.016	d(³H) ⁴G3	6	d(³H) ⁴H3	6	d(³G) ²F1	5	d(³H₅) 5/2	17	d(³I₇) 3/2	10	d(³H₅) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	149060.8	-	1.006	d(¹L) ²I1	12	d(³K) ⁴I1	6	d(³H) ²I3	6	d(³P₂) 3/2	6	d(³P₂) 3/2	6	d(¹D₂) 3/2	5	
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	149199.2	-	1.076	d(³H) ²K3	8	d(³I) ⁴H2	7	d(³H) ²I3	7	d(¹D₂) 3/2	13	d(¹D₂) 3/2	8	d(³F₂) 3/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	149218.80(40)	-	149270.9	-52	3	1.037	d(³G) ²G3	6	d(³G) ²G1	5	d(³F) ²G3	5	d(³K₇) 5/2	27	d(³K₆) 5/2	16	d(³K₆) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	148468.4	-	1.060	d(³K) ²K1	13	d(³H) ²K3	9	d(¹L) ²L1	8	d(³G₅) 5/2	9	d(³K₆) 5/2	8	d(¹H₅) 5/2	6	
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	148458.80(30)	-	148474.2	-15	3	1.041	d(³H) ²K3	9	d(¹L) ²I1	7	d(³H) ⁴K3	7	d(³H₄) 5/2	6	d(³H₄) 3/2	5	d(³P₂) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	148555.1	-	1.083	s(³D) ⁴D	23	s(³D) ⁶D	22	s(³G) ⁴G2	16	s(³D₃) 1/2	41	s(³G₃) 1/2	16	s(³G₃) 1/2	11	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	148641.5	-	0.997	d(³K) ⁴I1	9	d(¹H) ²H1	7	d(³H) ⁴H3	5	d(¹L₈) 5/2	12	d(³H₄) 5/2	10	d(³I₇) 3/2	9	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	148838.6	-	1.016	d(³H) ⁴G3	6	d(³H) ⁴H3	6	d(³G) ²F1	5	d(³H₅) 5/2	17	d(³I₇) 3/2	10	d(³H₅) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	149060.8	-	1.006	d(¹L) ²I1	12	d(³K) ⁴I1	6	d(³H) ²I3	6	d(³P₂) 3/2	6	d(³P₂) 3/2	6	d(¹D₂) 3/2	5	
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	149199.2	-	1.076	d(³H) ²K3	8	d(³I) ⁴H2	7	d(³H) ²I3	7	d(¹D₂) 3/2	13	d(¹D₂) 3/2	8	d(³F₂) 3/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	149218.80(40)	-	149270.9	-52	3	1.037	d(³G) ²G3	6	d(³G) ²G1	5	d(³F) ²G3	5	d(³K₇) 5/2	27	d(³K₆) 5/2	16	d(³K₆) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	148303.6	-	1.171	d(³I) ⁴G2	29	d(³I) ⁴G1	12	d(³G) ⁴G3	4	d(³K₇) 5/2	14	d(³K₈) 5/2	11	d(¹L₈) 3/2	10	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	148389.0	-	1.068	d(³H) ²G3	11	d(³K) ²H1	8	d(³G) ²G3	7	d(³H₄) 5/2	20	d(¹L₈) 3/2	11	d(³H₄) 5/2	7	
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	148468.4	-	1.060	d(³K) ²K1	13	d(³H) ²K3	9	d(¹L) ²L1	8	d(³G₅) 5/2	9	d(³K₆) 5/2	8	d(¹H₅) 5/2	6	
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	148458.80(30)	-	148474.2	-15	3	1.041	d(³H) ²K3	9	d(¹L) ²I1	7	d(³H) ⁴K3	7	d(³H₄) 5/2	6	d(³H₄) 3/2	5	d(³P₂) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	148555.1	-	1.083	s(³D) ⁴D	23	s(³D) ⁶D	22	s(³G) ⁴G2	16	s(³D₃) 1/2	41	s(³G₃) 1/2	16	s(³G₃) 1/2	11	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	148641.5	-	0.997	d(³K) ⁴I1	9	d(¹H) ²H1	7	d(³H) ⁴H3	5	d(¹L₈) 5/2	12	d(³H₄) 5/2	10	d(³I₇) 3/2	9	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	148838.6	-	1.016	d(³H) ⁴G3	6	d(³H) ⁴H3	6	d(³G) ²F1	5	d(³H₅) 5/2	17	d(³I₇) 3/2	10	d(³H₅) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	149060.8	-	1.006	d(¹L) ²I1	12	d(³K) ⁴I1	6	d(³H) ²I3	6	d(³P₂) 3/2	6	d(³P₂) 3/2	6	d(¹D₂) 3/2	5	
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	149199.2	-	1.076	d(³H) ²K3	8	d(³I) ⁴H2	7	d(³H) ²I3	7	d(¹D₂) 3/2	13	d(¹D₂) 3/2	8	d(³F₂) 3/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	149218.80(40)	-	149270.9	-52	3	1.037	d(³G) ²G3	6	d(³G) ²G1	5	d(³F) ²G3	5	d(³K₇) 5/2	27	d(³K₆) 5/2	16	d(³K₆) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	149289.8	-	0.895	d(¹D) ²D2	14	d(³F) ²D3	8	d(³H) ⁴F3	7	d(³I₇) 3/2	42	d(³I₇) 3/2	12	d(¹N₁₀) 5/2	9	
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	149373.6	-	1.205	s(³D) ⁶D	20	s(³F) ⁴F2	17	s(³F) ⁴F4	10	s(³D₄) 1/2	20	s(³G₄) 1/2	17	s(³G₄) 1/2	10	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	149379.6	-	0.958	d(³K) ²I1	52	d(³K) ²I2	10	d(³I) ²H1	4	s(³D₄) 1/2	11	s(³G₄) 1/2	10	d(³K₆) 5/2	7	
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	149475.2	-	1.054	d(³I) ²L2	30	d(³I) ⁴L2	16	d(³K) ⁴L1	11	d(³G₅) 5/2	12	d(³H₅) 5/2	12	d(¹H₅) 5/2	9	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	149515.0	-	1.111	s(³D) ⁶D	11	s(³F) ⁴F2	10	s(³F) ⁴F4	6	d(³K₆) 5/2	23	d(¹N₁₀) 5/2	12	d(³K₇) 5/2	5	
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	149612.6	-	0.927	d(³G) ²D1	9	d(¹H) ²F1	9	d(³H) ²F3	8	d(³I₆) 3/2	29	d(³I₆) 3/2	6	d(³I₇) 5/2	5	
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	149973.8	-	1.402	s(³D) ⁶D	53	s(³D) ⁴D	11	s(³F) ⁴F2	11	s(³D₂) 1/2	64	s(³F₂) 1/2	6	s(¹D₂) 1/2	6	
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	149985.2	-	1.000	d(³K) ²L1	31	d(¹N) ²L	12	d(³K) ²L2	6	d(³I₇) 3/2	16	d(³K₇) 3/2	11	d(³K₈) 5/2	7	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	150020.5	-	1.105	d(³I) ⁴G2	30	d(³I) ⁴G1	8	d(³I) ⁴H2	6	d(³I₅) 5/2	9	d(³H₄) 5/2	8	d(³G₄) 5/2	7	
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	150159.5	-	1.176	s(³D) ⁴D	29	s(³F) ⁴F2	13	s(³F) ²F2	11	s(³D₄) 1/2	33	s(³G₄) 1/2	22	s(³G₄) 1/2	11	
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	150174.50(40)	-	150246.7	-72	4	1.066	d(³K) ²I1	20	d(³I) ⁴H2	14	d(³K) ²K1	10	d(³H₅) 5/2	15	d(³I₆) 3/2	12	d(³I₇) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	150407.0	-	0.923	d(³H) ²G3	10	d(³G) ²G1	9	d(³I) ⁴H2	6	d(³I₆) 3/2	24	d(¹L₈) 3/2	17	d(¹L₈) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	150430.9	-	1.050	d(³H) ²H3	9	d(³I) ⁴H2	9	d(³I) ⁴I2	7	d(³H₅) 5/2	9	d(³G₄) 3/2	8	d(³I₆) 3/2	7	
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	150485.0	-	1.446	s(³D) ⁶D	45	s(³D) ⁴D	24	s(³D) ⁴D1	7	s(³D₂) 1/2	60	s(³D₁) 1/2	8	s(³D₁) 1/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	150602.6	-	1.038	d(¹L) ²K1	24	d(³I) ⁴L2	14	d(¹L) ²K2	5	d(³H₄) 5/2	11	d(³H₅) 5/2	8	d(³H₄) 3/2	6	
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	150646.2	-	1.049	d(³H) ⁴H3	11	d(³G) ⁴I3	6	d(³H) ⁴H1	6	d(¹L₈) 3/2	28	d(¹N₁₀) 5/2	24	d(¹N₁₀) 3/2	23	
4f <sup>10</sup> 6s	0.5	-	-	150791.0	-	2.790	s(³D) ⁶D	75	s(³D) ⁴D1	7	s(³P) ⁴P2	6	s(³D₀) 1/2	63	s(³D₁) 1/2	15	s(³D₁) 1/2	7	
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	150905.1	-	0.955	d(³H) ²H3	19	d(³H) ²H1	9	d(³H) ²H2	5	d(³P₂) 5/2	13	d(³P₂) 5/2	11	s(³F₃) 1/2	6	
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	150949.0	-	0.991	d(¹N) ²N	46	d(¹L) ²N1	21	d(³I) ⁴L2	7	d(³I₆) 3/2	20	d(³I₇) 3/2	13	d(³K₇) 3/2	12	
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	151033.1	-	1.139	d(³P) ²F1	10	d(³P) ²F3	9	d(³H) ⁴D1	6	d(³I₇) 3/2	8	d(¹L₈) 3/2	8	d(³K₈) 5/2	8	
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	151003.00(40)	-	151096.5	-93	3	1.017	d(³I) ⁴L2	20	d(³K) ⁴L1	15	d(¹L) ²K1	14	d(¹L₈) 3/2	43	d(³K₈) 3/2	15	d(¹L₈) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	151150.4	-	1.154	s(³F) ⁴F2	11	s(³D) ⁶D	9	s(³F) ²F2	8	s(³F₃) 1/2	18	s(³D₃) 1/2	13	s(³G₃) 1/2	9	

TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	151201.2	-	-	1.095	d(1L) 2I1	14	d(3I) 4H2	9	d(3K) 2K1	7	d(3I7) 5/2	47	d(3I7) 5/2	14	d(1N10) 5/2	13
4f <sup>10</sup> 5d	8.5	-	-	151426.1	-	-	1.044	d(1L) 2L1	37	d(1L) 2M1	14	d(3K) 2L1	8	d(1G4) 3/2	9	d(3G4) 3/2	7	d(3G4) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	9.5	-	-	151518.4	-	-	1.105	d(3I) 4L2	47	d(3I) 4L1	14	d(1N) 2N	11	d(3I5) 3/2	7	d(3G4) 3/2	7	d(3P2) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	151663.8	-	-	1.136	d(1G) 2F2	9	d(1G) 2F4	7	s(3F) 2F2	4	d(3P2) 5/2	18	d(3P2) 5/2	18	d(3I6) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	2.5	-	-	151734.0	-	-	1.097	s(3D) 4D	42	s(3F) 2F2	17	s(3F) 4F2	10	s(3D3) 1/2	34	s(3F3) 1/2	25	s(3F3) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	151756.5	-	-	1.029	d(3I) 4G2	13	d(3G) 4G3	9	d(3P) 4D1	6	d(3G3) 3/2	11	d(3P2) 5/2	8	d(3G3) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	151769.8	-	-	1.163	d(3P) 4F1	18	d(3P) 4F3	18	d(3I) 4H2	7	d(3I5) 3/2	33	d(3I6) 3/2	11	d(3I5) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	151771.8	-	-	0.920	d(3G) 4G3	14	d(3D) 4G2	9	d(3G) 4G2	7	d(1L8) 5/2	26	d(3I6) 3/2	7	d(1L8) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	151865.7	-	-	0.868	d(3I) 4L2	40	d(3K) 4L1	16	d(3I) 4L1	8	d(3G4) 3/2	8	d(3P2) 3/2	6	d(1G4) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	151954.5	-	-	0.999	d(1L) 2I1	26	d(3I) 4H2	7	d(3F) 2H2	5	s(3D1) 1/2	27	d(3P2) 5/2	12	s(3D0) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	151987.6	-	-	1.265	s(3D) 4D	48	s(3D) 6D	15	s(3D) 4D1	6	s(3D1) 1/2	49	s(3D2) 1/2	13	s(3D1) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	152257.1	-	-	1.033	d(3G) 4G3	7	d(1G) 2D4	7	d(1G) 2D2	6	d(3I6) 5/2	10	d(3G3) 3/2	8	d(3I5) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	152430.7	-	-	0.575	s(3D) 4D	37	d(3P) 4D1	6	d(3P) 2P1	5	d(3P2) 5/2	15	d(3P2) 5/2	13	d(3P1) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	151769.8	-	-	1.163	d(3P) 4F1	18	d(3P) 4F3	18	d(3I) 4H2	7	d(3I5) 3/2	33	d(3I6) 3/2	11	d(3I5) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	151771.8	-	-	0.920	d(3G) 4G3	14	d(3D) 4G2	9	d(3G) 4G2	7	d(1L8) 5/2	26	d(3I6) 3/2	7	d(1L8) 5/2	4
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	151865.7	-	-	0.868	d(3I) 4L2	40	d(3K) 4L1	16	d(3I) 4L1	8	d(3G4) 3/2	8	d(3P2) 3/2	6	d(1G4) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	151954.5	-	-	0.999	d(1L) 2I1	26	d(3I) 4H2	7	d(3F) 2H2	5	s(3D1) 1/2	27	d(3P2) 5/2	12	s(3D0) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	151987.6	-	-	1.265	s(3D) 4D	48	s(3D) 6D	15	s(3D) 4D1	6	s(3D1) 1/2	49	s(3D2) 1/2	13	s(3D1) 1/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	152257.1	-	-	1.033	d(3G) 4G3	7	d(1G) 2D4	7	d(1G) 2D2	6	d(3I6) 5/2	10	d(3G3) 3/2	8	d(3I5) 3/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	0.5	-	-	152430.7	-	-	0.575	s(3D) 4D	37	d(3P) 4D1	6	d(3P) 2P1	5	d(3P2) 5/2	15	d(3P2) 5/2	13	d(3P1) 3/2	11
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	152477.9	-	-	0.943	d(3G) 4I3	8	d(3G) 4I2	7	d(3I) 4I2	6	d(3I6) 3/2	9	d(1G4) 5/2	9	d(1G4) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	152646.5	-	-	1.069	d(3P) 4P3	15	d(3P) 4P1	11	d(3D) 4F2	10	d(3P2) 5/2	14	d(3P2) 5/2	13	d(1G4) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 6s	0.5	-	-	152670.5	-	-	0.529	s(3D) 4D	41	d(3P) 2P1	6	d(3P) 4D1	5	s(3D1) 1/2	27	s(3D0) 1/2	14	d(3P2) 5/2	13
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	152682.7	-	-	1.070	d(3G) 4I3	10	d(1G) 2I2	9	d(1G) 2I4	8	d(3I7) 5/2	23	d(1G4) 5/2	7	d(3I7) 5/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	152715.6	-	-	1.135	d(3P) 2D3	7	d(3P) 2D1	7	d(3F) 4P4	5	d(3I6) 5/2	8	d(1G4) 5/2	7	d(3G4) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	152832.0	-	-	1.090	d(3I) 2G2	17	d(1G) 2H2	8	d(3I) 2G1	6	d(1L8) 5/2	43	d(1N10) 5/2	38	d(1N10) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	152998.5	-	-	1.036	d(3I) 4H2	12	d(3F) 2H4	5	d(3G) 2I1	5	d(3G5) 3/2	12	d(3G5) 3/2	12	d(3I5) 3/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	10.5	-	-	153248.6	-	-	1.051	d(1L) 2N1	43	d(1N) 2N	43	d(1L) 2N2	4	d(3I5) 3/2	17	d(3H4) 5/2	9	d(3I5) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	153249.1	-	-	1.135	d(3I) 2G2	16	d(3G) 4D3	9	d(3G) 4D2	8	d(1G4) 5/2	10	d(3I7) 5/2	9	d(3G4) 3/2	7
4f <sup>10</sup> 5d	5.5	-	-	153319.1	-	-	0.943	d(3I) 4K2	12	d(3G) 4I3	7	d(3H) 2I3	6	d(1L8) 5/2	25	d(1L8) 3/2	10	d(3K8) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 6s	6.5	-	-	153351.3	-	-	1.147	s(3H) 4H2	42	s(1I) 2I3	25	s(1I) 2I2	14	s(3H6) 1/2	42	s(1I6) 1/2	25	s(1I6) 1/2	14
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	153381.3	-	-	1.083	d(1G) 2G2	14	d(3G) 2G3	8	d(3I) 2G2	8	d(3G4) 3/2	12	d(3G5) 3/2	12	d(3I6) 3/2	10
4f <sup>10</sup> 6s	3.5	-	-	153383.5	-	-	0.773	s(3H) 4H2	61	s(1G) 2G2	10	s(3H) 4H3	5	s(3H4) 1/2	61	s(1G4) 1/2	10	s(3G4) 1/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	-	-	153418.2	-	-	0.986	d(1L) 2L1	33	d(3K) 2K1	14	d(1L) 2L2	8	d(3I6) 3/2	21	d(1G4) 5/2	8	d(3G4) 5/2	6
4f <sup>10</sup> 5d	4.5	-	-	153524.0	-	-	1.036	d(3G) 4H3	17	d(3G) 4H2	8	d(3G) 2H3	5	d(3I5) 3/2	25	d(3G5) 3/2	8	d(3I5) 3/2	5
4f <sup>10</sup> 5d	6.5	-	-	153605.3	-	-	1.056	d(3I) 4K2	15	d(1G) 2I4	8	d(3F) 4H4	6	d(3G4) 3/2	15	d(3G4) 3/2	13	d(3G4) 3/2	12
4f <sup>10</sup> 5d	3.5	-	-	153649.8	-	-	1.003	d(3I) 4H2	16	d(3G) 4F3	11	d(3I) 4G2	8	d(3G3) 3/2	10	d(3D1) 3/2	9	d(3P2) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	4.5	-	-	153685.3	-	-	1.028	s(3H) 4H2	32	s(3H) 2H2	27	s(1G) 2G2	11	s(3H4) 1/2	58	s(1G4) 1/2	11	s(3G4) 1/2	8
4f <sup>10</sup> 6s	5.5	-	-	153703.9	-	-	1.001	s(1I) 2I3	27	s(3H) 2H2	24	s(3H) 4H2	16	s(3H6) 1/2	39	s(1I6) 1/2	27	s(1I6) 1/2	15
4f <sup>10</sup> 5d	2.5	-	-	153898.8	-	-	1.097	d(3G) 4F3	9	d(3G) 4D2	9	d(3G) 4D3	9	d(1L8) 5/2	19	d(3I7) 3/2	14	d(3G5) 5/2	8
4f <sup>10</sup> 5d	1.5	-	-	153906.5	-	-	0.685	d(3G) 4F3	16	d(3D) 4F2	10	d(3G) 4F2	9	d(1L8) 5/2	28	d(3I7) 5/2	25	d(3I7) 5/2	9
4f <sup>10</sup> 5d	7.5	153894.10(40)	-	153928.8	-35	3	1.103	d(1L) 2K1	16	d(3I) 4K2	15	d(3G) 4I3	8	d(3I7) 5/2	8	d(3G5) 3/2	7	d(3I6) 3/2	6
4f <sup>10</sup> 6s	1.5	-	-	154024.4	-	-	0.777	s(1D) 2D3	28	s(3D) 2D1	13	s(3D) 4D	8	s(1D2) 1/2	28	s(3D2) 1/2	20	s(3D2) 1/2	7



TABLE A.2 – (suite)

Conf	J	$E_{exp}$ (unc.)	Flag	$E_{cal}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition				JJ percentage composition							
								Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%
$4f^{10}6s$	2.5	-	-	154031.4	-		1.174	$s(^1D) ^2D3$	33	$s(^3D) ^4D1$	13	$s(^3D) ^2D1$	5	$s(^1D_2) 1/2$	33	$s(^3D_2) 1/2$	19	$s(^3F_2) 1/2$	7
$4f^{10}6s$	7.5	-	-	154073.9	-		0.888	$s(^3M) ^4M$	55	$s(^1L) ^2L2$	25	$s(^1L) ^2L1$	7	$s(^3M_8) 1/2$	55	$s(^1L_8) 1/2$	25	$s(^1L_8) 1/2$	7
$4f^{10}5d$	8.5	-	-	154150.1	-		1.082	$d(^3I) ^4K2$	30	$d(^1L) ^2M1$	16	$d(^1L) ^2L1$	13	$d(^3G_5) 3/2$	11	$d(^3G_5) 3/2$	7	$d(^3G_4) 5/2$	6
$4f^{10}5d$	6.5	-	-	154157.6	-		1.065	$d(^3G) ^4I2$	10	$d(^3G) ^4I3$	9	$d(^3I) ^4K2$	8	$d(^3G_5) 3/2$	8	$d(^1G_4) 5/2$	7	$d(^3G_4) 5/2$	7
$4f^{10}5d$	4.5	-	-	154256.2	-		1.099	$d(^3G) ^4G3$	11	$d(^3I) ^4H2$	8	$d(^3G) ^4F3$	7	$d(^3I_6) 5/2$	37	$s(^3M_8) 1/2$	14	$d(^3I_6) 5/2$	8
$4f^{10}5d$	3.5	-	-	154318.6	-		1.055	$d(^3G) ^4H3$	7	$d(^3G) ^4D1$	6	$d(^3G) ^4D2$	6	$d(^3G_5) 3/2$	16	$d(^1G_4) 5/2$	9	$d(^3G_5) 3/2$	8
$4f^{10}5d$	8.5	-	-	154472.4	-		1.059	$d(^3I) ^4L2$	20	$d(^3I) ^2L2$	13	$s(^3M) ^2M$	10	$d(^3I_7) 5/2$	20	$d(^3I_6) 5/2$	18	$d(^3I_7) 5/2$	12
$4f^{10}6s$	8.5	-	-	154520.0	-		1.026	$s(^3M) ^2M$	32	$s(^1L) ^2L2$	18	$s(^3M) ^4M$	13	$s(^3M_8) 1/2$	45	$s(^1L_8) 1/2$	18	$d(^3I_6) 5/2$	12
$4f^{10}5d$	5.5	-	-	154543.6	-		1.069	$d(^3G) ^4H3$	17	$d(^1G) ^2H2$	12	$d(^3G) ^4H2$	7	$d(^3I_5) 5/2$	9	$d(^3I_6) 5/2$	9	$d(^3G_5) 3/2$	5
$4f^{10}5d$	7.5	-	-	154643.0	-		1.122	$d(^3I) ^4K2$	27	$d(^3I) ^4I2$	11	$d(^3I) ^4K1$	10	$d(^3G_5) 3/2$	23	$d(^3I_6) 5/2$	11	$d(^3G_3) 3/2$	10
$4f^{10}5d$	4.5	-	-	154721.3	-		1.021	$d(^3I) ^4H2$	16	$d(^3G) ^4I3$	7	$d(^3G) ^4I2$	5	$d(^1F_3) 3/2$	16	$d(^1G_4) 5/2$	11	$d(^3G_4) 5/2$	10
$4f^{10}5d$	3.5	-	-	154782.4	-		0.842	$d(^3G) ^4H3$	28	$d(^3G) ^4H2$	12	$d(^3I) ^4G2$	9	$d(^3I_5) 3/2$	24	$d(^1L_8) 5/2$	12	$d(^3H_5) 3/2$	6
$4f^{10}5d$	1.5	-	-	154867.4	-		0.932	$d(^1G) ^2D2$	11	$d(^1F) ^2D$	9	$d(^1G) ^2D2$	7	$d(^1G_4) 5/2$	12	$d(^3G_4) 5/2$	11	$d(^3G_4) 5/2$	11
$4f^{10}5d$	5.5	-	-	154959.6	-		0.913	$d(^3I) ^4K2$	28	$d(^1L) ^2I1$	12	$d(^3I) ^4K1$	6	$d(^3G_5) 3/2$	21	$d(^3G_5) 3/2$	12	$d(^1G_4) 5/2$	7
$4f^{10}5d$	2.5	-	-	155083.0	-		0.959	$d(^1G) ^2F2$	12	$d(^3I) ^4G2$	10	$d(^3F) ^2D2$	8	$d(^1L_8) 5/2$	49	$d(^3K_8) 5/2$	11	$d(^1L_8) 5/2$	10
$4f^{10}5d$	5.5	155175.10(40)	-	155226.9	-52	4	1.120	$d(^3G) ^4H3$	13	$d(^1G) ^2H2$	9	$d(^3I) ^4H2$	8	$d(^3I_6) 5/2$	10	$d(^3G_5) 5/2$	6	$d(^1G_4) 5/2$	5
$4f^{10}5d$	9.5	-	-	155235.4	-		1.073	$d(^1L) ^2M1$	48	$d(^3K) ^4L1$	12	$d(^1L) ^2M2$	10	$d(^1L_8) 5/2$	18	$d(^3I_5) 5/2$	14	$d(^3K_6) 5/2$	7
$4f^{10}5d$	3.5	-	-	155348.2	-		1.102	$d(^3G) ^4D3$	8	$d(^3I) ^2G2$	8	$d(^3G) ^4D2$	6	$d(^3I_5) 5/2$	17	$d(^1G_4) 5/2$	7	$d(^3P_1) 3/2$	5
$4f^{10}5d$	6.5	-	-	155586.1	-		0.981	$d(^1L) ^2K1$	18	$d(^3I) ^4K2$	15	$d(^3K) ^2K1$	10	$d(^3I_5) 5/2$	19	$d(^3G_3) 5/2$	6	$d(^3I_6) 5/2$	6
$4f^{10}5d$	2.5	-	-	155861.5	-		0.955	$d(^3I) ^4G2$	17	$d(^3P) ^2D3$	5	$d(^3P) ^2D1$	5	$d(^3I_7) 5/2$	24	$d(^1L_8) 5/2$	15	$d(^3K_8) 5/2$	10



# Annexe B

## Raies classées de $Er^{3+}$

\* : Les longueurs d'ondes inférieures à 2000 Å sont dans le vide et celles supérieures à 2000 Å sont dans l'air [74]. \*\* : Valeurs affichant une erreur de transcription dans [22].

\*\*\* : Le nombre après la désignation d'un terme est l'indice de Nielson-Koster pour la répétition des termes [75]. Il est donné par le code Cowan.

\*\*\*\* : D : double identification ; T : triple identification ; asym : raies asymétriques ; bl : masquée par une autre raie ; p : raie perturbée, f : raie floue. Les raies marquées par "Q" sont exclues dans l'optimisation des niveaux d'énergie.

---

TABLE B.1 – Raies identifiées de Er IV.  $\lambda_{obs}$  Longueurs d’onde observées,  $\lambda_{Ritz}$  sont issues des niveaux d’énergie optimisés avec  $\lambda_{Ritz} = (E_{upper} - E_{lower})^{-1}$ .  $\Delta\lambda = \lambda_{exp} - \lambda_{Ritz}$ ; Les intensités  $I$  en unités arbitraires (PP : plaques photographique, IP : image plates); Probabilités de transition calculées  $gA$  de ce travail (TW) et de Meftah et al 2016 [22],  $g$  est le poids statistique du niveau supérieur,  $A$  est le coefficient d’Einstein pour l’émission spontanée. CF (cancellation factor) facteur d’annulation, il est défini par l’équation (14.107), p. 432 in [23]. Toutes les énergies et les nombres d’onde sont en  $cm^{-1}$ . La Col. 2 montre les incertitudes des longueurs d’onde expérimentales introduites dans le code LOPT [59] pour l’optimisation des valeurs des énergies. La Col. 11 montre les incertitudes des longueurs d’onde de Ritz estimées par le code LOPT.

$\lambda_{obs}(\text{\AA})^*$	Unc.	$Wn (cm^{-1})$	$\lambda_{Ritz}$	$\Delta \lambda$	$I_{PP}$	$I_{IP}$	$gA_{TW}$	$gA_{[22]}^{**}$	CF	$Unc\lambda_{Ritz}$	$Wn_{Calc.}$	$Conf_{inf}$	$Term_{inf}^{***}$	$J_{inf}$	$Conf_{sup}$	$Term_{sup}^{***}$	$J_{sup}$	$E_{inf}$	$E_{sup}$	Comm.****
715.716	0.006	139720.1	715.7218	-0.0058	3	11	61.16		-0.01	0.0019	139719.1	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3K4H1	6.5	0	139719.1	
736.142	0.006	135843.4	736.1444	-0.0024	65	128	85.82		0.01	0.0025	135842.9	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3G4H3	5.5	19331.49	155174.4	
737.107	0.006	135665.5	737.1043	0.0027	10	30	93.8		0.04	0.0021	135666	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3H2H2	5.5	6507.79	142173.8	
744.338	0.006	134347.6	744.3439	-0.0059	8	25	98.39		-0.06	0.0025	134346.5	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	1H2K1	6.5	0	134346.5	
764.12	0.006	130869.6	764.1228	-0.0028	3	37	159.8		0.04	0.0021	130869	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3K4H1	6.5	6507.79	137376.8	
766.641	0.006	130439.1	766.644	-0.003	9	42	19.46		0	0.003	130438.6	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3G4H3	5.5	24735.79	155174.4	
785.442	0.006	127316.8	785.444	-0.002	5		72.51		-0.01	0.002	127316.5	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3F4H4	4.5	12468.47	139785	
786.667	0.006	127118.6	786.6634	0.0036	12	13	185.7		-0.12	0.0008	127119.18	p6f11	4I4I	6.5	p6fs	5G6G	5.5	6507.79	133626.97	
789.817	0.013	126611.5	789.8147	0.0023	23	9	282.6		0.12	0.0014	126611.97	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3F4H3	5.5	6507.79	133119.76	fw
798.838	0.006	125181.8	798.84	-0.002	3	6	11.94		0	0.0022	125181.5	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3K4K1	5.5	19331.49	144513	
806.152	0.013	124046.1	806.146	0.006	2		19.29		-0.01	0.003	124047	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3G4H1	3.5	15404.76	139451.8	p
808.335	0.006	123711.1	808.331	0.004	7	16	105.9		0.03	0.0022	123711.7	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3M4L	6.5	0	123711.7	
809.943	0.006	123465.5	809.936	0.007	2	8	303.5		0.06	0.003	123466.5	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3K2I1	6.5	26707.61	150174.1	
811.879	0.006	123171	811.8776	0.0014	96	106	1736		0.23	0.0016	123171.28	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3F4H3	6.5	0	123171.28	
812.049	0.006	123145.3	812.0472	0.0018	3		84.41		0.09	0.0015	123145.55	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5D6G	5.5	6507.79	129653.34	
813.359	0.006	122946.9	813.3523	0.0067	2	12	146.4		-0.04	0.0015	122947.95	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3F4H3	5.5	10171.81	133119.76	
815.065	0.006	122689.6	815.072	-0.007	2		56.82		0.02	0.003	122688.6	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3I4L2	7.5	28312.44	151001	
815.236	0.006	122663.9	815.2289	0.0071	34	58	60.61		0.02	0.0023	122664.9	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3G4G1	4.5	15404.76	138069.7	
815.273	0.013	122658.3	815.2628	0.0102	2		385.1		-0.12	0.002	122659.8	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	1K2I	5.5	15404.76	138064.6	f
816.939	0.006	122408.1	816.9439	-0.0049	2		102		0.02	0.0022	122407.4	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3G4F1	3.5	12468.47	134875.9	
817.339	0.006	122348.2	817.336	0.003	13	25	143.2		0.03	0.003	122348.6	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3H2F2	3.5	12468.47	134817.1	
817.951	0.006	122256.7	817.9511	-1.00E-04	2		26.26		0.01	0.0017	122256.7	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5D6G	6.5	0	122256.7	
819.011	0.006	122098.5	819.0041	0.0069	4	28	26.64		0	0.0021	122099.5	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3H2I2	5.5	19331.49	141431	
819.581	0.006	122013.6	819.5848	-0.0038	3	18	29.91		-0.02	0.0018	122013	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3L4L	6.5	0	122013	
820.595	0.006	121862.8	820.603	-0.008	5	13	10.03		0	0.003	121861.7	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3K2I1	6.5	28312.44	150174.1	
821.353	0.006	121750.3	821.349	0.004	1	8	71.25		-0.02	0.003	121750.9	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3H2K3	6.5	26707.61	148458.5	
822.114	0.006	121637.7	822.1068	0.0072	20	20	102		-0.04	0.0017	121638.7	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3L4L	7.5	0	121638.7	
822.247	0.006	121618	822.242	0.005	4	25	49.38		0.02	0.003	121618.7	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3G4H3	5.5	33555.7	155174.4	
823.369	0.013	121452.3	823.372	-0.003	2	14	114.6		-0.03	0.005	121451.8	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3G2G3	3.5	27766.68	149218.5	p
823.601	0.006	121418.1	823.603	-0.002	1	19	122.1		0.04	0.003	121417.7	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	1H2I1	5.5	10171.81	131589.5	
823.657	0.006	121409.8	823.661	-0.004	3	10	439.6		0.09	0.0012	121409.17	p6f11	4I4I	5.5	p6fs	5G6G	4.5	10171.81	131580.98	
825.168	0.006	121187.4	825.167	0.001	11	22	104.4		0.02	0.004	121187.6	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	1H2F1	3.5	12468.47	133656.1	
826.076	0.006	121054.3	826.073	0.003	11	44	105.8		0.09	0.003	121054.7	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	3G2G1	3.5	22416.28	143471	
826.153	0.006	121043	826.1534	-0.0004	17	164	95.47		0.02	0.0018	121042.9	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5G4I	6.5	0	121042.9	
826.589	0.006	120979.1	826.59	-0.001	23	38	190.4		-0.02	0.005	120978.9	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	3G2G3	3.5	28239.56	149218.5	
829.079	0.006	120615.7	829.0677	0.0113	5	17	113.2		-0.13	0.0022	120617.4	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3I2H1	5.5	6507.79	127125.2	
829.802	0.006	120510.7	829.8099	-0.0079	28	31	83.95		0.1	0.0011	120509.53	p6f11	4G4G	5.5	p6fs	3I2I1	6.5	26707.61	147217.14	

TABLE B.1 – suite

830.647	0.006	120388.1	830.65	-0.003	4	15	782.3		0.12	0.003	120387.6	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3K4H1	6.5	19331.49	139719.1	
830.908	0.006	120350.3	830.9099	-0.0019	3	18	42.63		0.01	0.0024	120350	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3H4G2	5.5	10171.81	130521.8	
830.987	0.006	120338.9	830.991	-0.004	8	27	41.99		-0.03	0.005	120338.2	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	1L2K1	7.5	33555.7	153893.9	
836.286	0.006	119576.3	836.2795	0.0065	6	7	56.19		-0.02	0.0013	119577.25	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3M4K	6.5	0	119577.25	
836.837	0.006	119497.6	836.837	0	1	9	121.3		0.03	0.004	119497.6	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3H4F2	3.5	12468.47	131966.1	
836.947	0.006	119481.9	836.9494	-0.0024	4	7	70.21		-0.04	0.0016	119481.53	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5D6G	5.5	10171.81	129653.34	
837.024	0.006	119470.9	837.0222	0.0018	3	3	39.56		-0.01	0.0023	119471.1	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3G4F1	3.5	15404.76	134875.9	
839.483	0.006	119120.9	839.482	0.001	29	37	151.6		-0.03	0.003	119121	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	1H2I1	5.5	12468.47	131589.5	
839.539	0.006	119113	839.5424	-0.0034	8	3	22.49		0	0.0013	119112.51	p6f11	4I4I	4.5	p6fs	5G6G	4.5	12468.47	131580.98	
840.213	0.006	119017.5	840.213	0	87	54	588.9		-0.22	0.003	119017.5	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3H4G2	4.5	10171.81	129189.3	
840.448	0.006	118984.1	840.4463	0.0017	94	74	978.5		-0.34	0.0019	118984.4	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3I4H1	6.5	0	118984.4	
840.838	0.006	118928.9	840.838	0	25	19	56.85		-0.03	0.004	118928.9	p6f11	4F4F	4.5	p6fs	5D4D	3.5	24735.79	143664.7	
841.021	0.006	118903	841.0096	0.0114	34	47	192.8		0.16	0.0015	118904.7	p6f11	2K2K	7.5	p6fs	3I2I1	6.5	28312.44	147217.14	
842.203	0.006	118736.2	842.21	-0.007	13	125	60.29		0.01	0.003	118735.2	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3G2G1	3.5	24735.79	143471	
843.192	0.013	118596.9	843.181	0.011	4	7	186.3		-0.03	0.004	118598.5	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3M2K	6.5	10171.81	128770.3	p
843.659	0.006	118531.2	843.662	-0.003	18	22	60.02		0.02	0.003	118530.9	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3H4H2	4.5	10171.81	128702.7	
844.249	0.006	118448.5	844.238	0.011	30	21	67.23		-0.04	0.0018	118450.01	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3F2H2	5.5	6507.79	124957.8	
845.103	0.006	118328.7	845.104	-0.001	15	10	220.7		0.09	0.003	118328.6	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3M4K	7.5	0	118328.6	
846.674	0.013	118109.2	846.683	-0.009	20	21	142.1		-0.06	0.006	118108	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	1H2G1	3.5	20454.19	138562.2	asym
847.135	0.006	118044.9	847.132	0.003	32	28	408.6		0.1	0.003	118045.3	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3K4H1	6.5	19331.49	137376.8	
848.861	0.006	117804.9	848.8576	0.0034	41	35	53.54		-0.01	0.0024	117805.4	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3K4K1	5.5	26707.61	144513	
849.138	0.006	117766.5	849.1363	0.0017	88	65	592.6		-0.11	0.0023	117766.7	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D4D	3.5	12468.47	130235.2	
849.215	0.013	117755.9	849.205	0.01	32	24	153.8		0.05	0.003	117757.2	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3H4H2	4.5	10171.81	127929	asym
849.734	0.006	117683.8	849.7374	-0.0034	35	20	413.4		-0.1	0.0024	117683.4	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	1K2H	4.5	19331.49	137014.9	
850.227	0.006	117615.6	850.228	-0.001	28	18	159.4		0.08	0.003	117615.5	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3G4G1	4.5	20454.19	138069.7	
850.482	0.006	117580.4	850.474	0.008	13	21	15.95		0	0.003	117581.5	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3G4D1	3.5	20454.19	138035.7	
850.953	0.006	117515.3	850.96	-0.007	47	24	478.7		-0.1	0.0024	117514.3	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3F4H3	3.5	15404.76	132919.1	
851.58	0.006	117428.8	851.58	0	30	11	88.27	100.6	-0.04	0.003	117428.8	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3L4K	6.5	0	117428.8	
851.871	0.006	117388.7	851.8718	-0.0008	38	19	56		0.05	0.0017	117388.56	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3I2L1	7.5	6507.79	123896.35	
851.908	0.006	117383.6	851.907	0.001	77	32	277.6	288	-0.1	0.0024	117383.7	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3M4K	7.5	0	117383.7	
852.938	0.006	117241.8	852.9346	0.0034	60	32	205.4		-0.08	0.0021	117242.3	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5D6G	4.5	10171.81	127414.1	
853.082	0.006	117222.1	853.083	-0.001	62	31	147.8		0.08	0.003	117221.8	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D4G	3.5	15404.76	132626.6	
853.344	0.006	117186	853.3525	-0.0085	24	20	23.14		0.01	0.0016	117184.87	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D6G	5.5	12468.47	129653.34	
854.339	0.006	117049.6	854.3355	0.0035	53	26	302.2	317.5	-0.13	0.0016	117050.04	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3L2I	6.5	0	117050.04	
854.438	0.006	117035.9	854.441	-0.003	7	5	214.1		-0.27	0.003	117035.5	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	3G4H1	3.5	22416.28	139451.8	
856.553	0.006	116747	856.558	-0.005	10	15	252		-0.08	0.0025	116746.3	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3K4K1	5.5	27766.68	144513	
856.75	0.006	116720.2	856.745	0.005	47	47	33.43		0	0.003	116720.8	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3H4G2	4.5	12468.47	129189.3	
856.8	0.006	116713.4	856.792	0.008	102	61	742.7		-0.2	0.003	116714.4	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3F4H4	3.5	15404.76	132119.2	
856.936	0.006	116694.9	856.9332	0.0028	36	16	18.74		0	0.0023	116695.2	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3H2I2	5.5	24735.79	141431	
857.17	0.006	116663	857.1662	0.0038	69	55	211.9		-0.15	0.0017	116663.49	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3F4H3	6.5	6507.79	123171.28	
857.435	0.006	116626.9	857.433	0.002	120	137	139.3		-0.05	0.003	116627.2	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5D6D	4.5	10171.81	126799	
857.502	0.006	116617.8	857.498	0.004	34	17	514.9		-0.1	0.004	116618.4	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3K2I1	6.5	33555.7	150174.1	
857.927	0.013	116560	857.917	0.01	123	85	443.3		-0.15	0.004	116561.3	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3H4F2	3.5	15404.76	131966.1	D
857.927	0.013	116560	857.922	0.005	123	85	599.5		0.21	0.003	116560.7	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	1K2H	4.5	20454.19	137014.9	D
858.028	0.013	116546.4	858.031	-0.003	14	20	99.95		-0.06	0.005	116546	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3K2M1	8.5	28312.44	144858.4	f
858.683	0.006	116457.4	858.684	-0.001	17	16	341.9		0.04	0.003	116457.3	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3G2I1	6.5	28312.44	144769.7	

TABLE B.1 – suite

860.334	0.013	116233.9	860.332	0.002	69	65	113.4		-0.03	0.003	116234.2	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3H4H2	4.5	12468.47	128702.7	asym	
860.704	0.006	116184	860.698	0.006	99	177	300.2		0.12	0.003	116184.7	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	1H2I1	5.5	15404.76	131589.5		
860.754	0.006	116177.2	860.7614	-0.0074	57	48	69.45		0.02	0.0013	116176.22	p6f11	4F4F	4.5	p6fs	5G6G	4.5	15404.76	131580.98		
861.407	0.006	116089.1	861.402	0.005	23	37	808.1		0.25	0.003	116089.8	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	1H2I1	6.5	19331.49	135421.3		
861.909	0.006	116021.5	861.9036	0.0054	45	57	343.1		-0.12	0.0016	116022.25	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3L2I	6.5	0	116022.25		
862.665	0.013	115919.9	862.662	0.003	54	23	72.07		-0.03	0.003	115920.2	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D4F	3.5	12468.47	128388.7	p	
862.827	0.006	115898.1	862.828	-0.001	58	85	100.7		0.16	0.004	115898	p6f11	4G4G	4.5	p6fs	5D4D	3.5	27766.68	143664.7		
863.933	0.006	115749.7	863.939	-0.006	56	61	55.88		-0.03	0.0018	115748.91	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5D6G	6.5	6507.79	122256.7		
864.279	0.013	115703.3	864.272	0.007	84	63	1110		-0.31	0.003	115704.3	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3G2G1	3.5	27766.68	143471	f	
864.485	0.006	115675.8	864.4814	0.0036	90	71	686.8		0.27	0.0021	115676.3	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5D6G	4.5	10171.81	125848.1		
865.771	0.006	115504	865.7618	0.0092	27	49	59.71		-0.03	0.002	115505.2	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L4L	6.5	6507.79	122013		
865.885	0.006	115488.8	865.894	-0.009	69	80	108.5		-0.04	0.003	115487.6	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5D6G	5.5	10171.81	125659.4		
866.04	0.006	115468.1	866.054	-0.014	103	135	1059		-0.23	0.003	115466.2	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3H2H2	5.5	26707.61	142173.8		
867.453	0.006	115280	867.45	0.003	152	137	744.6		0.14	0.003	115280.4	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3M4K	6.5	10171.81	125452.2		
868.578	0.006	115130.7	868.5765	0.0015	86	85	516.8		0.17	0.0018	115130.91	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L4L	7.5	6507.79	121638.7		
868.679	0.006	115117.3	868.681	-0.002	112	109	945.3		-0.22	0.003	115117	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3H4G2	5.5	15404.76	130521.8		
869.074	0.006	115064.9	869.075	-0.001	139	123	1086		0.42	0.0013	115064.87	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L4K	5.5	6507.79	121572.66		
869.454	0.006	115014.8	869.452	0.002	160	182	728.3		0.25	0.003	115015	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	1H2K1	6.5	19331.49	134346.5		
869.977	0.006	114945.5	869.9765	0.0005	80	61	539.4		0.09	0.0022	114945.6	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D6G	4.5	12468.47	127414.1		
870.309	0.006	114901.7	870.301	0.008	22	41	250.6		-0.05	0.003	114902.8	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3H2K3	6.5	33555.7	148458.5		
870.654	0.013	114856.3	870.6578	-0.0038	69	86	88.78		-0.05	0.0018	114855.69	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3F4F3	4.5	10171.81	125027.5	p	
871.67	0.006	114722.2	871.6722	-0.0022	67	114	134.4		0.07	0.0015	114722.02	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3F4H4	6.5	0	114722.02		
872.166	0.006	114657.1	872.1686	-0.0026	210	311	195.2		-0.04	0.0024	114656.7	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3I2H1	5.5	12468.47	127125.2		
872.354	0.013	114632.4	872.3562	-0.0022	149	174	898.2	807.9	-0.37	0.0011	114632.08	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3M4K	5.5	6507.79	121139.87	asym	
873.098	0.006	114534.7	873.0947	0.0033	76	63	368		-0.12	0.002	114535.1	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5G4I	6.5	6507.79	121042.9		
873.962	0.009	114421.5	873.96	0.002	124	138	36.86		0.01	0.003	114421.7	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3G4F1	3.5	20454.19	134875.9	D	
873.962	0.009	114421.5	873.9615	0.0005	124	138	603	708.2	0.01	0.0014	114421.51	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L4K	5.5	6507.79	120929.3	D	
874.079	0.006	114406.1	874.071	0.008	104	133	1311		-0.35	0.003	114407.1	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3H2H2	5.5	27766.68	142173.8		
874.286	0.006	114379	874.29	-0.004	108	154	74.7		0.02	0.003	114378.5	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D4D	3.5	15404.76	129783.3		
874.407	0.006	114363.2	874.409	-0.002	6	16	96.71		0.05	0.003	114362.9	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3H2F2	3.5	20454.19	134817.1		
874.665	0.013	114329.5	874.657	0.008	11		34.5		0.01	0.003	114330.5	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D6D	4.5	12468.47	126799	bl	
874.928	0.006	114295.1	874.9252	0.0028	66	76	380.6		-0.2	0.001	114295.48	p6f11	2H2H2	5.5	p6fs	5G6G	5.5	19331.49	133626.97		
875.28	0.006	114249.1	875.2844	-0.0044	73	86	256.2		0.16	0.0017	114248.58	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6G	5.5	15404.76	129653.34		
877.053	0.013	114018.2	877.0676	-0.0146	57	48	69.17		-0.05	0.0023	114016.3	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3L4K	7.5	0	114016.3		bl
878.15	0.006	113875.8	878.1559	-0.0059	91	83	158		0.04	0.0023	113875	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5D6F	4.5	10171.81	124046.8		
878.527	0.013	113827	878.531	-0.004	10		33.43		-0.01	0.006	113826.4	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	1H2G1	3.5	24735.79	138562.2	bl	
878.829	0.013	113787.8	878.8252	0.0038	36	64	90.46		0.02	0.0017	113788.27	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3F4H3	5.5	19331.49	133119.76	asym	
879.755	0.006	113667.9	879.758	-0.003	80	106	373		-0.08	0.003	113667.6	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	1H2G1	4.5	19331.49	132999.1		
880.322	0.006	113594.8	880.329	-0.007	134	96	203.9		-0.09	0.001	113593.9	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3L4I	6.5	0	113593.9		
880.523	0.006	113568.8	880.5224	0.0006	33		43.31		-0.03	0.0016	113568.94	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3I4G1	5.5	6507.79	120076.73		
880.741	0.013	113540.8	880.748	-0.007	13		243.6		-0.08	0.003	113539.9	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3M4L	6.5	10171.81	123711.7	bl	
881.273	0.006	113472.2	881.273	0	76	83	174.6		0.07	0.004	113472.2	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3G4D1	2.5	20454.19	133926.4		
881.991	0.006	113379.8	881.9926	-0.0016	54	26	252.7		-0.05	0.0022	113379.6	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D6G	4.5	12468.47	125848.1		
882.283	0.006	113342.4	882.2801	0.0029	180	182	1649		-0.5	0.0015	113342.69	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3I4I1	5.5	6507.79	119850.48		
882.343	0.006	113334.6	882.348	-0.005	58	36	122.7		0.02	0.003	113333.9	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3G4G1	4.5	24735.79	138069.7		
882.405	0.013	113326.7	882.3882	0.0168	38	51	467.8		-0.08	0.0023	113328.8	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	1K2I	5.5	24735.79	138064.6	asym	

TABLE B.1 – suite

882.605	0.006	113301	882.613	-0.008	11		387		0.07	0.003	113299.9	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3G4D1	3.5	24735.79	138035.7	
882.767	0.006	113280.2	882.7712	-0.0042	86	94	20.43		-0.01	0.0022	113279.6	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D6G	3.5	12468.47	125748.1	
883.008	0.006	113249.3	883.003	0.005	86	100	57.4		-0.02	0.005	113249.9	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	1N2L	7.5	28312.44	141562.3	
884.415	0.006	113069.1	884.4121	0.0029	9		55.46		-0.02	0.0014	113069.46	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3M4K	6.5	6507.79	119577.25	
884.874	0.006	113010.4	884.866	0.008	128	85	2730		0.4	0.003	113011.5	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3K4H1	6.5	26707.61	139719.1	
884.947	0.006	113001.1	884.9599	-0.0129	57	41	226.9		0.15	0.0018	112999.47	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3F4H3	6.5	10171.81	123171.28	
885.906	0.006	112878.8	885.9074	-0.0014	103	72	652.5		-0.19	0.0009	112878.62	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5G4H	5.5	6507.79	119386.41	
886.168	0.006	112845.4	886.1778	-0.0098	51	50	244.9	253	-0.06	0.0018	112844.17	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3L4I	7.5	0	112844.17	
886.238	0.006	112836.5	886.2378	0.0002	97	92	224		0.32	0.001	112836.53	p6f11	4I4I	6.5	p6fs	5F6F	5.5	6507.79	119344.32	
886.683	0.006	112779.9	886.6818	0.0012	19		287.4		0.06	0.0019	112780.03	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3F2H2	4.5	12468.47	125248.5	
886.904	0.006	112751.8	886.9136	-0.0096	55	27	291.9		0.08	0.0014	112750.56	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3I4G1	4.5	10171.81	122922.37	
887.341	0.006	112696.3	887.3423	-0.0013	193	166	562.8		-0.26	0.0009	112696.08	p6f11	4I4I	6.5	p6fs	5F6F	5.5	6507.79	119203.87	
887.487	0.006	112677.7	887.4811	0.0059	44	57	377.2		0.16	0.0018	112678.46	p6f11	2K2K	7.5	p6fs	3L4L	7.5	28312.44	140990.9	
888.536	0.013	112544.6	888.534	0.002	38		179.5		-0.18	0.003	112544.9	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	1H2G1	4.5	20454.19	132999.1	asym
888.698	0.013	112524.1	888.697	0.001	180	142	1331		0.21	0.003	112524.2	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3H4H2	4.5	15404.76	127929	asym
888.967	0.006	112490.1	888.9732	-0.0062	30	28	27.47		0.01	0.002	112489.33	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3F2H2	5.5	12468.47	124957.8	
889.069	0.013	112477.3	889.0737	-0.0047	66	46	166		0.07	0.0021	112476.6	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3I4H1	6.5	6507.79	118984.4	asym
889.17	0.006	112464.4	889.166	0.004	100	98	240.6		0.12	0.003	112464.9	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3F4H3	3.5	20454.19	132919.1	
889.656	0.013	112403	889.649	0.007	147	188	1699		0.16	0.006	112403.9	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3G2G3	3.5	36814.62	149218.5	p
889.674	0.006	112400.7	889.673	0.001	89	142	266.5		-0.15	0.003	112400.8	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	3H2F2	3.5	22416.28	134817.1	
890.226	0.006	112331	890.2284	-0.0024	289	296	9383	9292	0.86	0.0023	112330.7	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3M4K	8.5	0	112330.72	
890.631	0.009	112280	890.6235	0.0075	112	101	816.3		-0.21	0.0011	112280.89	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L2I	5.5	6507.79	118788.68	D
890.631	0.009	112280	890.638	-0.007	112	101	1206		-0.11	0.003	112279.1	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	1K2H	4.5	24735.79	137014.9	D
890.872	0.009	112249.6	890.8726	-0.0006	199	146	627.8		-0.15	0.0014	112249.49	p6f11	2H2H2	5.5	p6fs	5G6G	4.5	19331.49	131580.98	D
890.872	0.009	112249.6	890.8803	-0.0083	199	146	642.2		-0.15	0.0023	112248.5	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	1D2G3	3.5	12468.47	124717	D
891.476	0.013	112173.5	891.485	-0.009	11	21	141.6		-0.09	0.003	112172.4	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5D4G	3.5	20454.19	132626.6	bl
891.973	0.006	112111	891.974	-0.001	99	68	110.9		0.03	0.0017	112110.89	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3L4I	4.5	10171.81	122282.7	
892.194	0.006	112083.2	892.1809	0.0131	184	166	91.96		0.09	0.0019	112084.89	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5D6G	6.5	10171.81	122256.7	
892.719	0.006	112017.3	892.711	0.008	32	30	283.8		-0.08	0.003	112018.3	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3F4H4	4.5	27766.68	139785	
892.783	0.006	112009.4	892.7827	0.0003	125	58	1440		0.3	0.0024	112009.3	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6G	4.5	15404.76	127414.1	
893.097	0.006	111969.9	893.098	-0.001	84	58	3039		-0.53	0.0022	111969.8	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G4H	4.5	10171.81	122141.6	
893.863	0.006	111874	893.859	0.004	79	38	149.6		-0.03	0.004	111874.5	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3L4K	5.5	10171.81	122046.3	
894.121	0.006	111841.6	894.125	-0.004	16	24	36.77		0.01	0.0021	111841.2	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3L4L	6.5	10171.81	122013	
894.298	0.006	111819.6	894.288	0.01	147	125	1854		0.47	0.003	111820.8	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3M4K	7.5	6507.79	118328.6	
894.359	0.006	111811.9	894.3581	0.0009	292	306	7187	7144	-0.76	0.001	111812.03	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5G4H	6.5	0	111812.03	
895.092	0.006	111720.4	895.091	0.001	155	87	1108		-0.27	0.003	111720.4	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I2H1	5.5	15404.76	127125.2	
895.373	0.006	111685.3	895.374	-0.001	5	4	151.3		-0.13	0.003	111685.1	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3G4H1	3.5	27766.68	139451.8	
896.231	0.006	111578.4	896.2314	-0.0004	93	54	666.7		0.11	0.0024	111578.3	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D6F	4.5	12468.47	124046.8	
896.495	0.006	111545.5	896.496	-0.001	28	52	259.3		-0.05	0.003	111545.4	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	3F4H4	4.5	28239.56	139785	
896.539	0.006	111540	896.5393	-0.0003	74	57	167.5		0.1	0.002	111540	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3I4H1	5.5	6507.79	118047.8	
896.787	0.013	111509.2	896.765	0.022	145	107	1151		-0.34	0.004	111511.9	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3H4F2	3.5	20454.19	131966.1	D
896.787	0.013	111509.2	896.78	0.007	145	107	1068		-0.39	0.004	111510.1	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	3G4D1	2.5	22416.28	133926.4	D
897.612	0.013	111406.7	897.612	0	33	61	267.8		0.05	0.003	111406.7	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3K4H1	6.5	28312.44	139719.1	p
897.655	0.013	111401.4	897.6592	-0.0042	33	29	89.22		-0.02	0.0014	111400.85	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3L4K	6.5	10171.81	121572.66	p
897.716	0.006	111393.8	897.712	0.004	32	48	43.46		0.02	0.003	111394.2	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6D	4.5	15404.76	126799	
897.809	0.013	111382.3	897.8204	-0.0114	61	59	352.4		0.16	0.0018	111380.85	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3I4K1	5.5	6507.79	117888.64	p

TABLE B.1 – suite

897.981	0.006	111361	897.972	0.009	87	76	318.1		0.13	0.003	111362.1	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3G4G1	4.5	26707.61	138069.7	
898.028	0.006	111355.1	898.0128	0.0152	20		45.44		-0.01	0.0023	111357	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	1K2I	5.5	26707.61	138064.6	
898.379	0.013	111311.6	898.368	0.011	62	29	1063		0.5	0.006	111313	p6f11	2L2L	8.5	p6fd	1L2K1	7.5	42580.9	153893.9	p
898.573	0.006	111287.6	898.5728	0.0002	124	104	1191		-0.27	0.0023	111287.6	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3I2G1	4.5	10171.81	121459.4	
898.709	0.006	111270.7	898.71	-0.001	165	147	1424		-0.26	0.003	111270.6	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3G4H2	3.5	12468.47	123739.1	
898.792	0.006	111260.4	898.795	-0.003	81	50	625.8		-0.52	0.0018	111260.08	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L4K	6.5	6507.79	117767.87	
898.96	0.013	111239.6	898.959	0.001	128		186.1		0.07	0.005	111239.8	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	1H2F1	3.5	22416.28	133656.1	asym
899.168	0.006	111214	899.167	0.001	10		310.7		-0.1	0.003	111214	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3G2I1	6.5	33555.7	144769.7	
899.36	0.006	111190.2	899.359	0.001	135	107	1126		0.18	0.003	111190.3	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3H4G2	5.5	19331.49	130521.8	
899.759	0.006	111140.8	899.7699	-0.0109	126	136	1047		0.38	0.0011	111139.53	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3K4I2	6.5	0	111139.53	
899.953	0.006	111116.9	899.965	-0.012	193	156	561.1		0.09	0.0025	111115.4	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3I4G1	4.5	12468.47	123583.9	
901.16	0.006	110968.1	901.1602	-0.0002	64	18	133.3	97.47	0.03	0.0012	110968.06	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3M4K	5.5	10171.81	121139.87	
901.254	0.006	110956.6	901.248	0.006	32	20	78.47		-0.04	0.003	110957.3	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3K4K1	5.5	33555.7	144513	
901.469	0.006	110930.1	901.4695	-0.0005	75	38	75.91		0.04	0.0024	110930	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3F4H2	4.5	10171.81	121101.8	
901.538	0.006	110921.6	901.542	-0.004	176	136	1265	1331	0.34	0.004	110921	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L4K	6.5	6507.79	117428.8	
901.907	0.006	110876.2	901.909	-0.002	275	243	6979	6712	0.95	0.003	110875.9	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3M4K	7.5	6507.79	117383.7	
902.134	0.006	110848.3	902.1298	0.0042	29		169.5		-0.02	0.0013	110848.79	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5G6H	6.5	0	110848.79	
902.57	0.013	110794.7	902.564	0.006	36	18	585.7		-0.19	0.007	110795.5	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	1H2G1	3.5	27766.68	138562.2	bl
902.654	0.006	110784.4	902.655	-0.001	92	78	2209		0.53	0.004	110784.3	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3G4H3	5.5	44390.14	155174.4	
902.882	0.013	110756.5	902.8735	0.0085	73	49	913.4	944.4	0.17	0.0015	110757.49	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3L4K	5.5	10171.81	120929.3	p
902.981	0.006	110744.3	902.981	0	181	120	324		0.05	0.003	110744.3	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3H4H4	3.5	12468.47	123212.8	
903.471	0.006	110684.2	903.4787	-0.0077	101	103	1168		-0.26	0.0022	110683.3	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5G4I	7.5	0	110683.3	
903.586	0.006	110670.1	903.594	-0.008	117	85	1088		0.28	0.003	110669.2	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3K4H1	6.5	26707.61	137376.8	
904.631	0.013	110542.3	904.6315	-0.0005	174	135	1313	1314	0.58	0.0018	110542.25	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L2I	6.5	6507.79	117050.04	asym
904.954	0.006	110502.9	904.954	0	39	23	107.1		-0.08	0.003	110502.8	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	3F4H3	3.5	22416.28	132919.1	
905.354	0.006	110454	905.3551	-0.0011	75	41	112.2		-0.02	0.0015	110453.9	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3I4G1	4.5	12468.47	122922.37	
906.267	0.006	110342.7	906.2622	0.0048	100		333.7		-0.15	0.0023	110343.3	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6G	3.5	15404.76	125748.1	
906.437	0.009	110322	906.432	0.005	93		705.4		-0.13	0.007	110322.6	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	1H2G1	3.5	28239.56	138562.2	D
906.437	0.009	110322	906.4388	-0.0018	93		32.06		-0.01	0.0018	110321.85	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5D6G	5.5	19331.49	129653.34	D
906.558	0.013	110307.3	906.558	0	44	8	386.8		0.11	0.003	110307.3	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	1K2H	4.5	26707.61	137014.9	p
906.587	0.006	110303.8	906.593	-0.006	80	9	490.4		0.18	0.003	110303	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3G4G1	4.5	27766.68	138069.7	
906.637	0.006	110297.7	906.6354	0.0016	101	41	737.1		0.3	0.0024	110297.9	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	1K2I	5.5	27766.68	138064.6	
906.871	0.006	110269.3	906.873	-0.002	85	8	209.7		0.08	0.003	110269	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3G4D1	3.5	27766.68	138035.7	
907.358	0.006	110210.1	907.356	0.002	142	79	738.7		-0.37	0.003	110210.3	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	5D4G	3.5	22416.28	132626.6	
907.941	0.006	110139.3	907.934	0.007	103	29	387		0.07	0.003	110140.1	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3G4F1	3.5	24735.79	134875.9	
908.418	0.006	110081.5	908.419	-0.001	36	6	57.17		-0.01	0.003	110081.3	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3H2F2	3.5	24735.79	134817.1	
909.203	0.006	109986.4	909.1955	0.0075	108	27	412		-0.15	0.0017	109987.35	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3H4K2	6.5	19331.49	129318.84	
909.808	0.006	109913.3	909.802	0.006	77	18	672.4		-0.15	0.003	109914	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3I4H1	3.5	12468.47	122382.5	



TABLE B.1 – suite

909.882	0.006	109904.3	909.8774	0.0046	141	29	734.4		0.17	0.0017	109904.92	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3I4G1	5.5	10171.81	120076.73	
910.395	0.006	109842.5	910.3842	0.0108	88	20	523.1		-0.14	0.002	109843.74	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3F2H2	4.5	15404.76	125248.5	
910.636	0.006	109813.3	910.6288	0.0072	147	53	813.7		-0.14	0.0018	109814.23	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3L4I	4.5	12468.47	122282.7	
910.78	0.006	109796	910.779	0.001	143	45	1312		-0.29	0.003	109796.1	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	3G4D1	3.5	28239.56	138035.7	
910.913	0.006	109780	910.904	0.009	94	28	201.8		0.14	0.003	109781	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5D4D	3.5	20454.19	130235.2	
911.549	0.006	109703.4	911.553	-0.004	91	23	437.6		0.31	0.003	109702.9	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	3F4H4	3.5	22416.28	132119.2	
911.765	0.006	109677.4	911.7543	0.0107	125	31	65.06		0.02	0.0016	109678.67	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3I4I1	5.5	10171.81	119850.48	
912.445	0.006	109595.6	912.4313	0.0137	141	65	353.9		-0.1	0.0019	109597.29	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3I2G1	3.5	12468.47	122065.76	
912.597	0.013	109577.4	912.593	0.004	93	30	235.1		0.04	0.004	109577.8	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3L4K	5.5	12468.47	122046.3	asym
912.795	0.006	109553.7	912.7999	-0.0049	89	17	85.87		0.03	0.0021	109553.04	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3F2H2	5.5	15404.76	124957.8	
913.137	0.013	109512.6	913.1214	0.0156	106	43	148.4		-0.13	0.0018	109514.46	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L2I	6.5	6507.79	116022.25	asym
913.219	0.013	109502.8	913.211	0.008	57	3	810.1		0.45	0.006	109503.8	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	1L2K1	7.5	44390.14	153893.9	asym
913.443	0.013	109475.9	913.4491	-0.0061	152	69	52.19		-0.24	0.0008	109475.18	p6f11	4I4I	6.5	p6fs	5I4I	5.5	6507.79	115982.97	asym
913.751	0.006	109439	913.753	-0.002	195	87	1804		0.4	0.005	109438.8	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3M2K	6.5	19331.49	128770.3	
914.043	0.006	109404	914.0313	0.0117	252	123	1853		0.37	0.0015	109405.44	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3M4K	6.5	10171.81	119577.25	
914.316	0.006	109371.4	914.317	-0.001	158	57	235.9		-0.09	0.003	109371.2	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3H4H2	4.5	19331.49	128702.7	
915.346	0.006	109248.3	915.347	-0.001	112	17	727.5		0.22	0.003	109248.2	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	1K2H	4.5	27766.68	137014.9	
915.634	0.006	109214	915.6285	0.0055	174	97	179.2		-0.06	0.001	109214.6	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G4H	5.5	10171.81	119386.41	
915.979	0.006	109172.8	915.9815	-0.0025	117	22	288.8		0.24	0.001	109172.51	p6f11	4I4I	5.5	p6fs	5F6F	5.5	10171.81	119344.32	
916.268	0.006	109138.4	916.2662	0.0018	180	56	584.3		-0.17	0.0024	109138.6	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5D6F	4.5	10171.81	119310.4	
916.388	0.006	109124.1	916.3757	0.0123	146	25	395.1		-0.3	0.0009	109125.55	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3K4L2	6.5	0	109125.55	
917.171	0.006	109030.9	917.1614	0.0096	167	38	690.4	405.5	-0.24	0.0009	109032.06	p6f11	4I4I	5.5	p6fs	5F6F	5.5	10171.81	119203.87	
917.517	0.006	108989.8	917.5075	0.0095	158	66	118.7		0.02	0.0024	108990.9	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3I2G1	4.5	12468.47	121459.4	
918.107	0.013	108919.8	918.102	0.005	122	27	147.7		0.03	0.005	108920.3	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	1H2F1	3.5	24735.79	133656.1	p
918.361	0.006	108889.7	918.348	0.013	124	32	466.2		-0.2	0.0011	108891.18	p6f11	4F4F	4.5	p6fs	5G6G	5.5	24735.79	133626.97	
919.019	0.006	108811.6	919.0113	0.0077	173	63	1321		0.41	0.0022	108812.6	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3I4H1	6.5	10171.81	118984.4	
919.324	0.006	108775.6	919.326	-0.002	47	3	355.1		0.09	0.003	108775.3	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	1K2H	4.5	28239.56	137014.9	
919.674	0.013	108734.2	919.666	0.008	43	4	333.7		-0.11	0.004	108735.1	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3H4G2	4.5	20454.19	129189.3	asym
919.843	0.006	108714.2	919.847	-0.004	9	4	292.8		0.1	0.003	108713.7	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	1H2I1	6.5	26707.61	135421.3	
920.215	0.006	108670.3	920.2053	0.0097	177	53	611.6	810.3	0.1	0.0013	108671.4	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3M4K	5.5	12468.47	121139.87	
920.458	0.013	108641.6	920.454	0.004	33	3	338.2		0.07	0.003	108642	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6F	4.5	15404.76	124046.8	asym
920.527	0.006	108633.5	920.5278	-0.0008	70	14	111.3		0.04	0.0025	108633.3	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3F4H2	4.5	12468.47	121101.8	
920.675	0.006	108616	920.6673	0.0077	66	13	112.6		0.05	0.0011	108616.87	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3L2I	5.5	10171.81	118788.68	
921.774	0.006	108486.4	921.7651	0.0089	186	69	568.4		-0.29	0.0009	108487.51	p6f11	4I4I	5.5	p6fs	5I4I	4.5	10171.81	118659.32	
922.004	0.006	108459.4	921.9918	0.0122	253	146	2786	2628	-0.54	0.0016	108460.83	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3L4K	5.5	12468.47	120929.3	
922.336	0.006	108420.4	922.338	-0.002	34		116.8		0.08	0.004	108420.1	p6f11	2L2L	8.5	p6fd	3I4L2	7.5	42580.9	151001	
922.499	0.006	108401.2	922.4885	0.0105	313	151	2303	2340	0.43	0.0013	108402.43	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3H4H4	6.5	0	108402.43	
922.58	0.006	108391.7	922.580 *	0	290	167	2835		-0.76	0.006	108391.7	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3K4M2	7.5	0	108391.7	

TABLE B.1 – suite

922.643	0.006	108384.3	922.6457	-0.0027	106	14	471.3		-0.09	0.0019	108383.97	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3F4H3	5.5	24735.79	133119.76		
923.074	0.009	108333.7	923.068	0.006	66	15	309.1		0.1	0.003	108334.3	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3G4H2	3.5	15404.76	123739.1	D	
923.074	0.009	108333.7	923.068	0.006	66	15	400.3		-0.1	0.003	108334.3	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D6F	3.5	12468.47	120802.8	D	
924.089	0.006	108214.7	924.0929	-0.0039	13	19	55.92		0.04	0.0016	108214.23	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3F4H4	6.5	6507.79	114722.02		
924.361	0.006	108182.9	924.357	0.004	133	37	948.2		0.13	0.003	108183.3	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3F4H3	3.5	24735.79	132919.1		
924.405	0.006	108177.7	924.393	0.012	83	8	197.1		-0.05	0.003	108179.1	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I4G1	4.5	15404.76	123583.9		
924.791	0.013	108132.5	924.7767	0.0143	265	158	2665		-0.69	0.0023	108134.2	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5G4H	5.5	6507.79	114642	D	
924.791	0.013	108132.5	924.7831	0.0079	265	158	115.8		-0.17	0.0012	108133.46	p6f11	4I4I	4.5	p6fs	5F4F	4.5	12468.47	120601.93	D	
925.382	0.006	108063.5	925.3702	0.0118	218	85	789	553.4	0.93	0.001	108064.86	p6f11	4I4I	7.5	p6fs	5I6I	7.5	0	108064.86		
925.854	0.013	108008.4	925.869	-0.015	72	8	1926		0.34	0.005	108006.6	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	1N2L	7.5	33555.7	141562.3	p	
926.493	0.006	107933.9	926.488	0.005	16		181.2		0.1	0.003	107934.5	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5D4F	3.5	20454.19	128388.7		
926.867	0.013	107890.4	926.863	0.004	55	14	53.19		0.01	0.003	107890.8	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D4G	3.5	24735.79	132626.6		
927.004	0.009	107874.4	926.9903	0.0137	198	70	2122		0.46	0.0022	107876	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3I4H1	5.5	10171.81	118047.8	D	
927.004	0.009	107874.4	926.996	0.008	198	70	368.7		0.17	0.003	107875.3	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3H2I2	5.5	33555.7	141431	D	
927.197	0.006	107851.9	927.2012	-0.0042	73	13	707.7		-0.2	0.0011	107851.46	p6f11	4I4I	5.5	p6fs	5I4I	4.5	10171.81	118023.27		
927.477	0.006	107819.4	927.481	-0.004	196	78	175.7		0.12	0.003	107818.9	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	5D4D	3.5	22416.28	130235.2		
927.569	0.013	107808.7	927.5546	0.0144	184	65	982.4		0.26	0.0011	107810.36	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D4F	4.5	12468.47	120278.83	D	
927.569	0.013	107808.7	927.575	-0.006	184	65	497.3		-0.11	0.004	107808	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3H4H4	3.5	15404.76	123212.8	D	
927.686	0.013	107795.1	927.698	-0.012	156	16	219.9		-0.05	0.003	107793.7	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3I2H1	5.5	19331.49	127125.2	asym	
928.366	0.006	107716.1	928.36	0.006	230	121	1381		-0.42	0.0019	107716.83	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3I4K1	5.5	10171.81	117888.64		
928.519	0.006	107698.4	928.519	0	5		880.7		0.17	0.003	107698.4	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3K4K1	5.5	36814.62	144513		
929.311	0.006	107606.6	929.2967	0.0143	149	100	1351		0.26	0.0018	107608.26	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3I4G1	5.5	12468.47	120076.73		
929.412	0.006	107594.9	929.4021	0.0099	158	123	1035		-0.44	0.0019	107596.06	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3L4K	6.5	10171.81	117767.87		
930.082	0.006	107517.4	930.0802	0.0018	66	31	399.8		0.12	0.0015	107517.61	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I4G1	4.5	15404.76	122922.37		
930.146	0.006	107510	930.1589	-0.0129	133	160	1367		-0.5	0.0025	107508.5	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L4K	7.5	6507.79	114016.3		
930.457	0.006	107474.1	930.451	0.006	55	34	290.7		-0.22	0.003	107474.8	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3H4H2	4.5	20454.19	127929		
930.507	0.006	107468.3	930.514	-0.007	35	16	1090		0.35	0.003	107467.5	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5D6D	4.5	19331.49	126799		
930.792	0.006	107435.4	930.7936	-0.0016	21	10	12.62		-0.03	0.0018	107435.2	p6f11	2K2K	6.5	p6fs	3L4L	7.5	33555.7	140990.9		
931.246	0.006	107383.1	931.243	0.003	21	10	150.1		0.03	0.003	107383.4	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3F4H4	3.5	24735.79	132119.2		
931.39	0.006	107366.5	931.385	0.005	67	28	209.3		-0.17	0.003	107367	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	5D4D	3.5	22416.28	129783.3		
932.345	0.006	107256.5	932.34	0.005	167	144	3592	3482	-0.71	0.004	107257	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3L4K	6.5	10171.81	117428.8		
933.641	0.013	107107.5	933.63	0.011	11	30	173.1		0.03	0.004	107108.9	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	1H2I1	6.5	28312.44	135421.3	p	
933.839	0.006	107084.9	933.8279	0.0111	222	249	5117		-0.75	0.001	107086.11	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L4I	6.5	6507.79	113593.9		
933.982	0.006	107068.5	933.981	0.001	59	46	528.3		0.14	0.003	107068.6	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3F2G3	4.5	19331.49	126400.1		
934.11	0.006	107053.8	934.109	0.001	17	13	204.5		0.1	0.004	107053.9	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3I2I1	6.5	19331.49	126385.4		
934.931	0.006	106959.8	934.93	0.001	32	30	192.8		-0.17	0.003	106959.9	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5D6G	4.5	20454.19	127414.1		
935.297	0.006	106917.9	935.2967	0.0003	19	14	29.5		0.02	0.0011	106917.94	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5G4H	5.5	12468.47	119386.41		
935.66	0.013	106876.4	935.6468	0.0132	61	41	613.1		0.18	0.0019	106877.94	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3L4I	4.5	15404.76	122282.7	D	
935.66	0.013	106876.4	935.6651	-0.0051	61	41	91.48		-0.15	0.0011	106875.85	p6f11	4I4I	4.5	p6fs	5F6F	5.5	12468.47	119344.32	D	

TABLE B.1 – suite

935.888	0.006	106850.4	935.898	-0.01	58	36	856.9		-0.35	0.004	106849.3	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3H2K3	6.5	41609.23	148458.5	
935.966	0.006	106841.5	935.9621	0.0039	14	7	77.28		-0.02	0.0025	106841.9	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D6F	4.5	12468.47	119310.4	
936.906	0.006	106734.3	936.8963	0.0097	60	47	285.4	140.4	0.19	0.001	106735.4	p6f11	4I4I	4.5	p6fs	5F6F	5.5	12468.47	119203.87	
937.549	0.006	106661.1	937.5498	-0.0008	20	9	42.61		-0.01	0.002	106661	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I2G1	3.5	15404.76	122065.76	
937.592	0.006	106656.2	937.59	0.002	97	83	1989		-0.25	0.004	106656.4	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3G2G1	3.5	36814.62	143471	
937.756	0.006	106637.5	937.767	-0.011	66	56	37.75		-0.01	0.003	106636.3	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	3G4F1	3.5	28239.56	134875.9	
937.998	0.006	106610.1	937.991	0.007	40	20	966.8		0.68	0.004	106610.9	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3I4L2	7.5	44390.14	151001	
938.835	0.006	106515	938.8207	0.0143	6	7	93.8		-0.04	0.0024	106516.6	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5D6G	4.5	19331.49	125848.1	
939.741	0.006	106412.3	939.7423	-0.0013	2		93.19		-0.03	0.0019	106412.15	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3F4H3	5.5	26707.61	133119.76	
940.401	0.006	106337.6	940.4119	-0.0109	111	98	925.3	912	-0.45	0.002	106336.38	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3L4I	7.5	6507.79	112844.17	
940.485	0.006	106328.1	940.487	-0.002	5	11	35.5		-0.01	0.003	106327.9	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5D6G	5.5	19331.49	125659.4	
940.803	0.006	106292.2	940.809	-0.006	9	9	149.7		0.05	0.004	106291.5	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	1H2G1	4.5	26707.61	132999.1	
941.702	0.006	106190.7	941.6892	0.0128	89	66	510.9		-0.79	0.0008	106192.15	p6f11	4I4I	6.5	p6fs	5I4I	6.5	6507.79	112699.94	
942.182	0.006	106136.6	942.1745	0.0075	2		78.79		0.05	0.0008	106137.45	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3F4G4	5.5	6507.79	112645.24	
942.331	0.006	106119.8	942.323	0.008	83	62	1008		-0.27	0.003	106120.7	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3M4K	6.5	19331.49	125452.2	
942.921	0.006	106053.4	942.91	0.011	35	22	276.4		-0.07	0.003	106054.6	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I2G1	4.5	15404.76	121459.4	
943.097	0.006	106033.6	943.093	0.004	20	8	36.89		-0.01	0.004	106034.1	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	1H2K1	6.5	28312.44	134346.5	
943.878	0.006	105945.9	943.878	0	4	9	676		0.33	0.003	105945.9	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3F2G3	4.5	20454.19	126400.1	
944.723	0.006	105851.1	944.7292	-0.0062	1		125.4		0.05	0.0019	105850.44	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3L2I	6.5	10171.81	116022.25	
945.091	0.006	105810	945.0799	0.0111	25	20	72.74		-0.14	0.0009	105811.16	p6f11	4I4I	5.5	p6fs	5I4I	5.5	10171.81	115982.97	
945.313	0.009	105785.1	945.305	0.008	28	18	360.4		0.06	0.003	105786	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3H4G2	5.5	24735.79	130521.8	D
945.313	0.009	105785.1	945.323	-0.01	28	18	1019		0.25	0.004	105784	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3K2I1	6.5	44390.14	150174.1	D
945.764	0.006	105734.6	945.7596	0.0044	141	95	1919	1991	-0.47	0.0013	105735.11	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3M4K	5.5	15404.76	121139.87	
946.103	0.006	105696.8	946.1095	-0.0065	47	22	913.4		-0.27	0.0021	105696.01	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3F4F3	4.5	19331.49	125027.5	
946.191	0.006	105686.9	946.192	-0.001	79	51	605.4		0.19	0.004	105686.8	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	3G4D1	2.5	28239.56	133926.4	
947.078	0.006	105587.9	947.0765	0.0015	3		41.07		-0.01	0.0021	105588.09	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3L4I	5.5	10171.81	115759.9	
947.148	0.013	105580.2	947.1551	-0.0071	40	15	77.56		-0.03	0.0023	105579.3	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3I4H1	5.5	12468.47	118047.8	asym
947.658	0.006	105523.3	947.6469	0.0111	5		121.6		0.05	0.0016	105524.54	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3L4K	5.5	15404.76	120929.3	
947.879	0.006	105498.7	947.873	0.006	9	11	196.2		-0.04	0.003	105499.4	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D4D	3.5	24735.79	130235.2	
948.589	0.006	105419.7	948.5851	0.0039	78	60	426.6		-0.18	0.002	105420.17	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3I4K1	5.5	12468.47	117888.64	
948.605	0.013	105418	948.618	-0.013	40	15	36.46		-0.01	0.006	105416.5	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	1H2F1	3.5	28239.56	133656.1	p
948.835	0.013	105392.4	948.821	0.014	8	34	57.37		-0.05	0.003	105393.9	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5D6G	4.5	20454.19	125848.1	p
949.618	0.006	105305.5	949.6294	-0.0114	29	8	101.6	104	0.05	0.0011	105304.24	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5G4H	6.5	6507.79	111812.03	
949.709	0.006	105295.4	949.723	-0.014	17	5	15.49		-0.01	0.003	105293.9	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5D6G	3.5	20454.19	125748.1	
950.997	0.006	105152.8	951	-0.003	18	8	162.6		-0.08	0.003	105152.4	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3F4H3	3.5	27766.68	132919.1	
951.949	0.006	105047.6	951.95	-0.001	103	69	1042		-0.19	0.003	105047.5	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D4D	3.5	24735.79	129783.3	
953.13	0.006	104917.5	953.1294	0.0006	4		45.46		0.02	0.002	104917.55	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6G	5.5	24735.79	129653.34	
953.292	0.013	104899.7	953.2876	0.0044	97	89	266.8	278.2	-0.08	0.0015	104900.14	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5G6I	6.5	0	104900.14	p

TABLE B.1 – suite

953.532	0.006	104873.3	953.5309	0.0011	3		416.7		0.15	0.0016	104873.37	p6f11	4G4G	5.5	p6fs	5G6G	4.5	26707.61	131580.98	
953.653	0.006	104860	953.653	0	21	6	145.3		-0.08	0.004	104859.9	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5D4G	3.5	27766.68	132626.6	
954.239	0.006	104795.6	954.2503	-0.0113	10		229.3		-0.15	0.0023	104794.3	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3F2H2	4.5	20454.19	125248.5	
954.576	0.006	104758.6	954.567	0.009	44	11	1000		0.23	0.004	104759.5	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	1H2G1	4.5	28239.56	132999.1	
954.961	0.006	104716.3	954.97	-0.009	10	4	543.4		0.1	0.003	104715.3	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5D6F	4.5	19331.49	124046.8	
955.371	0.006	104671.4	955.3656	0.0054	83	58	689		0.13	0.0019	104671.97	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I4G1	5.5	15404.76	120076.73	
955.717	0.006	104633.5	955.7329	-0.0159	41	25	456.6		0.16	0.0012	104631.74	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3K4I2	6.5	6507.79	111139.53	
955.87	0.006	104616.8	955.873	-0.003	62	35	87.34		-0.02	0.003	104616.4	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3H2I2	5.5	36814.62	141431	
956.261	0.006	104573.9	956.2669	-0.0059	28	9	179.9		0.15	0.0023	104573.3	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3F4F3	4.5	20454.19	125027.5	
956.849	0.006	104509.7	956.856	-0.007	59	31	200		0.1	0.003	104508.9	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	1K2I	5.5	33555.7	138064.6	
957.216	0.013	104469.6	957.2109	0.0051	40	41	164.3		-0.05	0.0025	104470.2	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G4H	5.5	10171.81	114642	p
957.359	0.009	104454	957.3539	0.0051	97	67	495.8		0.22	0.0014	104454.58	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3K2I2	5.5	6507.79	110962.37	D
957.359	0.009	104454	957.364	-0.005	97	67	551.3		0.07	0.004	104453.5	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3H4G2	4.5	24735.79	129189.3	D
958.033	0.006	104380.5	958.036	-0.003	168	139	955.6		0.31	0.003	104380.2	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3M4L	6.5	19331.49	123711.7	
959.211	0.006	104252.4	959.21	0.001	22	19	143.8		-0.04	0.003	104252.4	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3I4G1	4.5	19331.49	123583.9	
959.696	0.006	104199.7	959.698	-0.002	47	25	290.1		0.14	0.005	104199.4	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3H4F2	3.5	27766.68	131966.1	
960.131	0.006	104152.5	960.141	-0.01	46	25	128		-0.03	0.003	104151.3	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5D6F	3.5	12468.47	116619.8	
962.408	0.006	103906	962.412	-0.004	57	31	239.8		0.1	0.003	103905.6	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6F	4.5	15404.76	119310.4	
963.022	0.006	103839.7	963.022	0	17	5	74.98		-0.04	0.0021	103839.79	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3F4H3	6.5	19331.49	123171.28	
963.175	0.006	103823.2	963.179	-0.004	1		75.09		0.05	0.004	103822.8	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	1H2I1	5.5	27766.68	131589.5	
963.26	0.006	103814.1	963.259	0.001	81	49	376.6		-0.08	0.003	103814.2	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3H4G2	5.5	26707.61	130521.8	
963.4	0.006	103799	963.3994	0.0006	16	9	53.27	65.09	-0.07	0.001	103799.11	p6f11	4F4F	4.5	p6fs	5F6F	5.5	15404.76	119203.87	
964.766	0.013	103652.1	964.758	0.008	5		26.87		-0.01	0.003	103652.9	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D4F	3.5	24735.79	128388.7	asym
965.328	0.006	103591.7	965.32	0.008	11		54.5		0.04	0.003	103592.6	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5D6F	4.5	20454.19	124046.8	
966.624	0.006	103452.8	966.6267	-0.0027	40	19	256.7		-0.12	0.0017	103452.55	p6f11	2K2K	6.5	p6fs	3K2K2	6.5	33555.7	137008.25	
966.915	0.006	103421.7	966.9114	0.0036	18		60.69		-0.02	0.0011	103422.09	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3L4I	6.5	10171.81	113593.9	
967.268	0.006	103384	967.2684	-0.0004	2		131.1		-0.11	0.0013	103383.92	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3L2I	5.5	15404.76	118788.68	
967.66	0.013	103342	967.6662	-0.0062	3		122.1		-0.05	0.0019	103341.42	p6f11	4G4G	3.5	p6fs	5G6G	4.5	28239.56	131580.98	bl
967.688	0.006	103339.1	967.6835	0.0045	26		33.51		-0.02	0.0019	103339.57	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5G6H	5.5	6507.79	109847.36	
967.763	0.006	103331.1	967.756	0.007	70	37	313.7		-0.28	0.003	103331.8	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	5D6G	3.5	22416.28	125748.1	
968.124	0.006	103292.5	968.1345	-0.0105	38	23	42.47		-0.03	0.0022	103291.43	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3L4I	5.5	12468.47	115759.9	
968.481	0.006	103254.5	968.4802	0.0008	15		54.08		0.03	0.0011	103254.56	p6f11	4F4F	4.5	p6fs	5I4I	4.5	15404.76	118659.32	
969.158	0.006	103182.4	969.1524	0.0056	125	82	333.6	332.6	-0.09	0.0014	103182.95	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5G6I	6.5	0	103182.95	
969.364	0.006	103160.4	969.364	0	40	15	596		-0.28	0.004	103160.5	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3G2I1	6.5	41609.23	144769.7	
969.644	0.006	103130.6	969.653	-0.009	19		502.2		0.27	0.003	103129.7	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3I4G1	4.5	20454.19	123583.9	
971.138	0.006	102972	971.153	-0.015	192	147	833.4		-0.12	0.003	102970.4	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3F4H4	4.5	36814.62	139785	
971.342	0.006	102950.4	971.3339	0.0081	29	17	15.2		-0.01	0.002	102951.21	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3L4I	4.5	19331.49	122282.7	
971.38	0.006	102946.4	971.3856	-0.0056	16		90.35		0.04	0.0021	102945.73	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5D6G	5.5	26707.61	129653.34	
971.761	0.013	102906	971.782	-0.021	133	76	1210		0.34	0.003	102903.8	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3K4K1	5.5	41609.23	144513	asym Q
972.492	0.006	102828.6	972.5072	-0.0152	43	15	687		-0.68	0.0019	102827	p6f11	2I2I	6.5	p6fs	3I2I1	6.5	44390.14	147217.14	
972.661	0.013	102810.8	972.667	-0.006	18		60.36		-0.01	0.003	102810.1	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5G4H	4.5	19331.49	122141.6	asym
972.78	0.006	102798.1	972.783	-0.003	179	84	531.2		-0.18	0.0015	102797.85	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3K4K2	5.5	6507.79	109305.64	
973.158	0.006	102758.3	973.154	0.004	5		29.64		0.03	0.004	102758.6	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3H4H4	3.5	20454.19	123212.8	
973.238	0.006	102749.8	973.2439	-0.0059	5		95.88		0.11	0.0016	102749.17	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5G6H	6.5	79361.97	182111.14	
973.566	0.006	102715.2	973.569	-0.003	5		194.4		0.06	0.004	102714.8	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3L4K	5.5	19331.49	122046.3	
973.89	0.013	102681	973.885	0.005	21		24.26		0.01	0.003	102681.5	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3L4L	6.5	19331.49	122013	p
973.913	0.006	102678.6	973.916	-0.003	137	73	543.8		-0.08	0.003	102678.3	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6G	4.5	24735.79	127414.1	
974.242	0.006	102643.9	974.2502	-0.0082	102	57	40.52		-0.02	0.0024	102643	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I4H1	5.5	15404.76	118047.8	
974.308	0.006	102636.9	974.306	0.002	72	30	269.8		-0.09	0.004	102637.2	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3G4H1	3.5	36814.62	139451.8	

TABLE B.1 – suite

974.493	0.006	102617.4	974.4902	0.0028	53	16	190		-0.12	0.0009	102617.76	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3K4L2	6.5	6507.79	109125.55	
974.551	0.006	102611.3	974.5522	-0.0012	21		333.3		0.19	0.002	102611.23	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3H4K2	6.5	26707.61	129318.84	
975.755	0.006	102484.7	975.7632	-0.0082	36	24	171.8		0.15	0.0021	102483.88	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I4K1	5.5	15404.76	117888.64	
975.78	0.006	102482.1	975.784	-0.004	56	9	158.8		0.05	0.004	102481.7	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3H4G2	4.5	26707.61	129189.3	
975.862	0.006	102473.5	975.8627	-0.0007	77	44	472.7		-0.23	0.0009	102473.43	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3F4G4	5.5	10171.81	112645.24	
975.912	0.009	102468.3	975.909	0.003	46	20	271		0.13	0.003	102468.5	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5D4D	3.5	27766.68	130235.2	D
975.912	0.009	102468.3	975.9127	-0.0007	46	20	604		0.33	0.0019	102468.18	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3I4G1	4.5	20454.19	122922.37	D
976.665	0.006	102389.3	976.664	0.001	107	55	862.5		0.14	0.003	102389.4	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I2H1	5.5	24735.79	127125.2	
977.499	0.006	102301.9	977.751	-0.011	20	42	104.4		0.12	0.003	102300.7	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	1D2G3	3.5	22416.28	124717	
977.539	0.006	102297.7	977.5344	0.0046	12		21.26		0.13	0.0013	102298.19	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	3L4K	5.5	95252.01	197550.2	
977.733	0.006	102277.5	977.732	0.001	101	46	1214		-0.62	0.006	102277.5	p6f11	2L2L	8.5	p6fd	3K2M1	8.5	42580.9	144858.4	
978.076	0.006	102241.5	978.0796	-0.0036	67	53	303.7		-0.08	0.0016	102241.17	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3L4K	5.5	19331.49	121572.66	
978.553	0.006	102191.7	978.5545	-0.0015	113	58	20.98		0.01	0.0013	102191.55	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3K4I2	4.5	10171.81	112363.36	
979.174	0.013	102126.9	979.164	0.01	9	4	58.72		-0.01	0.003	102127.9	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3I2G1	4.5	19331.49	121459.4	p
979.598	0.006	102082.6	979.5957	0.0023	96	95	141.5	131.2	0.1	0.001	102082.93	p6f11	4I4I	6.5	p6fs	5I6I	6.5	6507.79	108590.72	
979.788	0.009	102062.9	979.785	0.003	30	6	280.3		-0.11	0.004	102063.2	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6D	4.5	24735.79	126799	D
979.788	0.009	102062.9	979.79	-0.002	30	6	293		-0.13	0.006	102062.7	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3M2K	6.5	26707.61	128770.3	D
980.233	0.006	102016.5	980.232	0.001	72	25	30.7		-0.02	0.003	102016.6	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5D4D	3.5	27766.68	129783.3	
980.424	0.006	101996.7	980.434	-0.01	80	29	162.3		-0.05	0.003	101995.6	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	5D4D	3.5	28239.56	130235.2	
981.399	0.006	101895.3	981.4059	-0.0069	93	39	74.31	81.51	-0.03	0.0014	101894.64	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3H4H4	6.5	6507.79	108402.43	
981.683	0.006	101865.8	981.686	-0.003	172	123	1406		-0.38	0.004	101865.6	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	1H2I1	6.5	33555.7	135421.3	
982.038	0.006	101829.1	982.0432	-0.0052	67	51	198.3		0.21	0.0022	101828.51	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3L4I	4.5	20454.19	122282.7	
982.235	0.006	101808.6	982.2374	-0.0024	122	99	201.9	26.54**	-0.06	0.0014	101808.38	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3M4K	5.5	19331.49	121139.87	
982.377	0.006	101793.9	982.378	-0.001	158	94	421.2		-0.16	0.004	101793.8	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3H4K2	8.5	28312.44	130106.2	
982.607	0.006	101770.1	982.605	0.002	41	12	260.1		0.12	0.003	101770.3	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3F4H2	4.5	19331.49	121101.8	
984.138	0.006	101611.8	984.1399	-0.0019	10		299.8		-0.17	0.0023	101611.57	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3I2G1	3.5	20454.19	122065.76	
984.271	0.006	101598	984.2732	-0.0022	133	85	513.6	546	-0.14	0.0017	101597.81	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3L4K	5.5	19331.49	120929.3	
984.669	0.006	101557	984.6813	-0.0123	71	26	44.42	44.56	0.02	0.0015	101555.7	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5G4I	7.5	0	101555.7	
985.924	0.006	101427.7	985.9303	-0.0063	98	58	167.4		-0.04	0.0012	101427.05	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5G6G	6.5	0	101427.05	
986.941	0.006	101323.2	986.945	-0.004	115	65	369.3		-0.28	0.003	101322.8	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	3G4H2	3.5	22416.28	123739.1	
987.452	0.006	101270.8	987.455	-0.003	11		51.36		0.07	0.0013	101270.44	p6f11	2H2H2	5.5	p6fs	5F4F	4.5	19331.49	120601.93	
987.602	0.013	101255.4	987.605	-0.003	13		99.91		0.02	0.003	101255.1	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3G4G1	4.5	36814.62	138069.7	p
987.652	0.006	101250.3	987.655	-0.003	18		25.79		-0.01	0.003	101250	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	1K2I	5.5	36814.62	138064.6	
987.934	0.006	101221.3	987.933	0.001	167	110	1800		-0.33	0.003	101221.4	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3H4H2	4.5	26707.61	127929	
988.496	0.006	101163.8	988.4971	-0.0011	149	108	780.5	769.8	0.39	0.0014	101163.68	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5F4H	5.5	6507.79	107671.47	
989.977	0.006	101012.4	989.978	-0.001	57	9	90.1		0.03	0.003	101012.3	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6G	3.5	24735.79	125748.1	
990.038	0.006	101006.2	990.0363	0.0017	106	48	418.5		-0.11	0.0024	101006.4	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3H4K2	6.5	28312.44	129318.84	
990.612	0.006	100947.7	990.6155	-0.0035	154	104	628		-0.15	0.0012	100947.34	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5D4F	4.5	19331.49	120278.83	

TABLE B.1 – suite

990.73	0.006	100935.7	990.727	0.003	8		166.9		-0.1	0.004	100936	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3H4H2	4.5	27766.68	128702.7	
990.848	0.013	100923.6	990.848	0	7		43.05		0.02	0.004	100923.6	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6G	5.5	24735.79	125659.4	bl
991.045	0.006	100903.6	991.051	-0.006	107	53	346.2	348.5	0.1	0.003	100903	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3D4D1	3.5	12468.47	113371.5	
992.15	0.009	100791.3	992.154	-0.004	161	97	1079		-0.27	0.004	100790.8	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	1H2K1	6.5	33555.7	134346.5	D
992.15	0.009	100791.3	992.1564	-0.0064	161	97	595.1	563.7	0.14	0.0015	100790.56	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3K2I2	5.5	10171.81	110962.37	D
992.595	0.006	100746	992.6027	-0.0077	39	25	31.73		-0.01	0.002	100745.24	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3I4G1	5.5	19331.49	120076.73	
992.984	0.006	100706.6	992.985	-0.001	104	55	169.3		0.05	0.003	100706.5	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5D6G	4.5	26707.61	127414.1	
993.563	0.006	100647.9	993.566	-0.003	29		25.11		0.04	0.003	100647.6	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	3F4H2	4.5	20454.19	121101.8	
993.81	0.006	100622.9	993.818	-0.008	149	87	977.9		-0.37	0.003	100622	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5D4F	3.5	27766.68	128388.7	
995.385	0.013	100463.7	995.39	-0.005	34		85.38		-0.07	0.004	100463.1	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	3H4H2	4.5	28239.56	128702.7	bl
995.582	0.009	100443.8	995.575	0.007	137	63	2695		-0.38	0.008	100444.5	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3I2K1	7.5	28312.44	128756.9	D
995.582	0.009	100443.8	995.5949	-0.0129	137	63	433.6	465.9	-0.16	0.0015	100442.46	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G6G	5.5	10171.81	110614.27	D
995.837	0.006	100418.1	995.841	-0.004	8		70.54		0.02	0.003	100417.6	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3I2H1	5.5	26707.61	127125.2	
996.332	0.006	100368.1	996.3384	-0.0064	21		123.4		-0.16	0.0013	100367.51	p6fd	5I4I	4.5	p6fp	3L4K	5.5	97182.69	197550.2	
996.533	0.006	100347.9	996.526	0.007	27		29.97		0.03	0.003	100348.6	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5D6F	3.5	20454.19	120802.8	
996.637	0.006	100337.4	996.6429	-0.0059	232	150	1082	1068	-0.21	0.0022	100336.84	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5F6H	6.5	0	100336.84	
997.103	0.013	100290.6	997.0914	0.0116	82		39.8		0.01	0.0024	100291.71	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3F4F3	4.5	24735.79	125027.5	asym
997.542	0.006	100246.4	997.5484	-0.0064	100	27	280.9		0.09	0.0018	100245.76	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3M4K	6.5	19331.49	119577.25	
997.787	0.013	100221.8	997.7848	0.0022	53	14	19.36		0	0.0025	100222.01	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3F2H2	5.5	24735.79	124957.8	asym
997.886	0.006	100211.9	997.883	0.003	206	151	3375		0.56	0.004	100212.2	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3M2L	8.5	28312.44	128524.6	
998.005	0.006	100199.9	998.001	0.004	145	84	146.1		0.02	0.003	100200.3	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	1K2H	4.5	36814.62	137014.9	
998.372	0.006	100163.1	998.379	-0.007	9		65.94		0.02	0.004	100162.3	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3H4H2	4.5	27766.68	127929	
998.512	0.006	100149	998.511	0.001	27		47.31		0.02	0.004	100149.1	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	5D4F	3.5	28239.56	128388.7	
998.775	0.013	100122.6	998.773	0.002	17		614.6		0.29	0.004	100122.9	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3K4K1	5.5	44390.14	144513	bl
999.652	0.006	100034.8	999.6507	0.0013	251	223	2006	2018	-0.41	0.0023	100034.94	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	3K4K2	7.5	0	100034.94	
1000.189	0.006	99981.1	1000.188	0.001	81	36	132.5		0.03	0.003	99981.2	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	1D2G3	3.5	24735.79	124717	
1000.337	0.006	99966.3	1000.338	-0.001	5		32.55		-0.03	0.004	99966.2	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	3I4H1	3.5	22416.28	122382.5	
1001.034	0.013	99896.7	1001.0522	-0.0182	104	59	394.2		0.1	0.0015	99894.89	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3K4I2	4.5	12468.47	112363.36	asym
1001.157	0.013	99884.5	1001.1743	-0.0173	172	113	546.8	553.1	0.31	0.0014	99882.71	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5G4G	5.5	6507.79	106390.5	asym
1001.785	0.006	99821.9	1001.785	0	119	63	1371		-0.4	0.003	99821.8	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3H2I2	5.5	41609.23	141431	
1001.902	0.006	99810.1	1001.898	0.004	79	9	31.62		0.02	0.003	99810.50	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3K4H2	3.5	12468.47	112279	
1002.973	0.006	99703.5	1002.97	0.003	12		77.91		0.03	0.0019	99703.88	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3H4I4	6.5	6507.79	106211.67	
1003.081	0.006	99692.9	1003.085	-0.004	113	65	64.58		0.02	0.004	99692.5	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3F2G3	4.5	26707.61	126400.1	
1003.259	0.006	99675.1	1003.2551	0.0039	104	22	120.7		-0.05	0.002	99675.55	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G6H	5.5	10171.81	109847.36	
1003.515	0.006	99649.7	1003.5175	-0.0025	67	7	45.87		-0.04	0.0025	99649.48	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	3I2G1	3.5	22416.28	122065.76	
1005.318	0.006	99471	1005.3236	-0.0056	103	14	263.9		-0.1	0.0016	99470.46	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G6F	4.5	10171.81	109642.27	
1007.684	0.006	99237.5	1007.686	-0.002	51	10	97.15		0.09	0.003	99237.2	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5G4H	5.5	15404.76	114642	
1008.673	0.006	99140.1	1008.6788	-0.0058	43	21	13.27		-0.01	0.0014	99139.59	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5G4G	5.5	6507.79	105647.38	
1010.063	0.013	99003.8	1010.067	-0.004	50	31	85.9		0.02	0.004	99003.3	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3G4H2	3.5	24735.79	123739.1	p

TABLE B.1 – suite

1010.602	0.006	98950.9	1010.593	0.009	44	25	652.4		0.22	0.004	98951.8	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5D6G	5.5	26707.61	125659.4	
1011.66	0.006	98847.4	1011.653	0.007	15	14	267		0.05	0.003	98848.1	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I4G1	4.5	24735.79	123583.9	
1012.705	0.006	98745.4	1012.714	-0.009	113	50	542.8		0.27	0.004	98744.6	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3M4K	6.5	26707.61	125452.2	
1014.624	0.006	98558.7	1014.6397	-0.0157	54	25	18.33		0.01	0.0023	98557.15	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3I4K1	5.5	19331.49	117888.64	
1015.288	0.006	98494.3	1015.2913	-0.0033	36		77.04		0.03	0.0016	98493.9	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3K2I2	5.5	12468.47	110962.37	
1015.47	0.013	98476.6	1015.465	0.005	32		92.47		-0.02	0.004	98477	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3H4H4	3.5	24735.79	123212.8	f
1015.889	0.006	98435.9	1015.8846	0.0044	46	25	62.65		-0.04	0.0023	98436.38	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3L4K	6.5	19331.49	117767.87	
1016.173	0.013	98408.4	1016.157	0.016	27	30	48.3		-0.02	0.004	98410	p6f11	2L2L	8.5	p6fs	3L4L	7.5	42580.9	140990.9	asym
1016.336	0.006	98392.7	1016.3392	-0.0032	107	39	95.38	97.77	-0.07	0.0016	98392.35	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5G6I	6.5	6507.79	104900.14	
1017.807	0.006	98250.5	1017.81	-0.003	109	45	234.5		0.1	0.003	98250.19	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3F2H2	5.5	26707.61	124957.8	
1018.011	0.006	98230.7	1018.0125	-0.0015	74	17	10.69		0.01	0.0015	98230.62	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3H4H4	6.5	10171.81	108402.43	
1018.468	0.006	98186.7	1018.4691	-0.0011	67	18	124.5		0.02	0.0018	98186.58	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I4G1	4.5	24735.79	122922.37	
1018.588	0.006	98175.1	1018.581	0.007	28		74.61		-0.02	0.003	98175.8	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3F4H4	4.5	41609.23	139785	
1018.748	0.013	98159.7	1018.739	0.009	30		18.96		0.09	0.004	98160.5	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3F2G3	4.5	28239.56	126400.1	asym
1018.891	0.006	98146	1018.8923	-0.0013	94	43	340.5	341.9	-0.13	0.0016	98145.8	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5G6G	5.5	12468.47	110614.27	
1019.562	0.006	98081.3	1019.561	0.001	21		15.96		0.01	0.003	98081.4	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5D6G	4.5	27766.68	125848.1	
1019.654	0.013	98072.4	1019.649	0.005	29	17	614.2		-0.2	0.004	98073	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3I2I1	6.5	28312.44	126385.4	asym
1019.775	0.006	98060.9	1019.77	0.005	12		32.69		0.01	0.003	98061.3	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3G4F1	3.5	36814.62	134875.9	
1020.013	0.006	98038	1020.0057	0.0073	14		15.77		-0.01	0.0023	98038.67	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G6I	4.5	10171.81	108210.48	
1020.607	0.006	97980.9	1020.602	0.005	46		183.1		-0.14	0.003	97981.4	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5D6G	3.5	27766.68	125748.1	
1020.756	0.006	97966.6	1020.755	0.001	152	113	745.3	748.8	0.21	0.003	97966.7	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3D4D1	3.5	15404.76	113371.5	
1022.668	0.006	97783.4	1022.666	0.002	31		295.6		-0.08	0.004	97783.7	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3H2H2	5.5	44390.14	142173.8	
1023.346	0.006	97718.6	1023.3472	-0.0012	128	70	668.7	650	-0.21	0.0022	97718.55	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3L2I	6.5	19331.49	117050.04	
1023.589	0.006	97695.4	1023.5903	-0.0013	150	121	975.1	979.4	-0.24	0.0014	97695.34	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3K4K2	5.5	10171.81	107867.15	
1024.073	0.006	97649.3	1024.0666	0.0064	35	23	29.73	27.91	0.02	0.0012	97649.9	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5F4G	5.5	6507.79	104157.69	
1024.099	0.013	97646.8	1024.1	-0.001	19		489.1		0.1	0.004	97646.7	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I4H1	3.5	24735.79	122382.5	f
1024.906	0.006	97569.9	1024.9149	-0.0089	32	17	11.26		0.01	0.0017	97569.08	p6f11	4F4F	4.5	p6fs	5I4I	4.5	20454.19	118023.27	
1025.151	0.006	97546.6	1025.1478	0.0032	49	21	339.4		-0.08	0.0022	97546.91	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3L4I	4.5	24735.79	122282.7	
1025.832	0.006	97481.8	1025.832	0	13		550.3		-0.18	0.003	97481.82	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3F2H2	4.5	27766.68	125248.5	
1026.632	0.006	97405.9	1026.633	-0.001	13		54.35		-0.01	0.003	97405.8	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5G4H	4.5	24735.79	122141.6	
1026.904	0.006	97380.1	1026.9166	-0.0126	23	11	56.63		0.02	0.0022	97378.89	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5G6H	5.5	12468.47	109847.36	
1027.444	0.006	97329	1027.4328	0.0112	71	58	295.8		0.07	0.0024	97329.97	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I2G1	3.5	24735.79	122065.76	
1028.165	0.006	97260.7	1028.163	0.002	2		279.8		0.15	0.003	97260.82	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3F4F3	4.5	27766.68	125027.5	
1029.096	0.013	97172.7	1029.101	-0.005	32	32	295.8		0.27	0.007	97172.2	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	1N2L	7.5	44390.14	141562.3	f
1029.368	0.006	97147	1029.3736	-0.0056	21	17	46.86		0.1	0.0018	97146.46	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5G6H	7.5	82921.38	180067.84	
1030.491	0.006	97041.1	1030.494	-0.003	13	29	237		-0.12	0.003	97040.9	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3H2I2	5.5	44390.14	141431	
1030.695	0.006	97021.9	1030.6893	0.0057	14	8	38.74		0.02	0.0024	97022.45	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G6G	4.5	10171.81	107194.26	
1030.88	0.006	97004.5	1030.884	-0.004	45	33	328.1		-0.16	0.004	97004.1	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3M4L	6.5	26707.61	123711.7	

TABLE B.1 – suite

1031.369	0.006	96958.5	1031.368	0.001	9		62.27		-0.02	0.0015	96958.6	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3K4I2	4.5	15404.76	112363.36	
1032.261	0.006	96874.8	1032.266	-0.005	13		24.94		-0.02	0.003	96874.2	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3K4H2	3.5	15404.76	112279	
1032.659	0.006	96837.4	1032.6613	-0.0023	54	29	15.53		0	0.0018	96837.17	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3K4K2	5.5	12468.47	109305.64	
1033.871	0.006	96723.9	1033.874	-0.003	1		62.28		0.01	0.003	96723.6	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I2G1	4.5	24735.79	121459.4	
1034.236	0.006	96689.8	1034.225	0.011	9		119.2		0.03	0.0023	96690.76	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3L2I	6.5	19331.49	116022.25	
1034.394	0.006	96675	1034.3919	0.0021	83	60	302.5	308.6	0.16	0.0015	96675.16	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5G6I	6.5	6507.79	103182.95	
1035.094	0.006	96609.5	1035.1042	-0.0102	16		23.21		0.16	0.0011	96608.63	p6f11	4I4I	6.5	p6fs	5I4I	7.5	6507.79	103116.42	
1036.512	0.006	96477.4	1036.512	0	6		14.62		0.01	0.003	96477.4	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	1D2G3	3.5	28239.56	124717	
1037.042	0.006	96428.1	1037.039	0.003	91	57	100.8		-0.05	0.003	96428.41	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3L4I	5.5	19331.49	115759.9	
1037.293	0.006	96404.8	1037.3005	-0.0075	17		72.19	69.07	-0.02	0.0016	96404.08	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3M4K	5.5	24735.79	121139.87	
1038.355	0.006	96306.2	1038.3662	-0.0112	3		132.2		0.04	0.0025	96305.14	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3F4H3	5.5	36814.62	133119.76	
1038.642	0.006	96279.5	1038.636	0.006	5		63.99		0.02	0.003	96280.1	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5D6F	4.5	27766.68	124046.8	
1039.873	0.006	96165.6	1039.873	0	7		25.11		0.02	0.003	96165.6	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5D6F	3.5	20454.19	116619.8	
1040.938	0.006	96067.2	1040.94	-0.002	16		67.72		-0.02	0.003	96067	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6F	3.5	24735.79	120802.8	
1041.223	0.006	96040.9	1041.2343	-0.0113	46	25	96.04		-0.15	0.002	96039.86	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	3H4I4	6.5	10171.81	106211.67	
1041.969	0.006	95972.2	1041.966	0.003	8		65.47		-0.03	0.004	95972.4	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3G4H2	3.5	27766.68	123739.1	
1042.596	0.013	95914.4	1042.5954	0.0006	4		11.74		0.02	0.0015	95914.48	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5G6H	5.5	78916.83	174831.31	f
1042.626	0.006	95911.7	1042.6358	-0.0098	35	8	16.66		0.01	0.0018	95910.77	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G6H	4.5	10171.81	106082.58	
1043.12	0.006	95866.3	1043.1212	-0.0012	3		49.02		0.07	0.0015	95866.14	p6f11	4F4F	4.5	p6fs	5F4F	4.5	24735.79	120601.93	
1044.242	0.006	95763.2	1044.2431	-0.0011	11		128.2		0.04	0.0025	95763.14	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3H4K2	6.5	33555.7	129318.84	
1044.469	0.006	95742.4	1044.4736	-0.0046	4		21.62		0.03	0.0024	95742.01	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5G6I	4.5	12468.47	108210.48	
1046.204	0.006	95583.6	1046.201	0.003	91	58	234.9		-0.09	0.003	95583.91	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3I2L1	7.5	28312.44	123896.35	
1046.486	0.006	95557.9	1046.4891	-0.0031	3		18.31	18.65	-0.02	0.0017	95557.61	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3K2I2	5.5	15404.76	110962.37	
1046.651	0.006	95542.8	1046.6487	0.0023	33	18	141.4		-0.04	0.0014	95543.04	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D4F	4.5	24735.79	120278.83	
1046.844	0.006	95525.2	1046.8405	0.0035	14		33.21		-0.02	0.0014	95525.54	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5F6G	5.5	6507.79	102033.33	
1047.391	0.006	95475.3	1047.3884	0.0026	2		24.91		0.02	0.0015	95475.57	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G4G	5.5	10171.81	105647.38	
1047.697	0.013	95447.5	1047.712	-0.015	65	51	125.5		0.08	0.005	95446.1	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3H4H4	3.5	27766.68	123212.8	asym
1048.163	0.013	95405	1048.156	0.007	102	83	125.1		0.05	0.004	95405.7	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	1K2H	4.5	41609.23	137014.9	asym
1048.23	0.009	95398.9	1048.2288	0.0012	23	12	295.8		0.27	0.002	95399.02	p6f11	2I2I	5.5	p6fs	3K2K2	6.5	41609.23	137008.25	D
1048.23	0.009	95398.9	1048.2325	-0.0025	23	12	75.42	73.44	-0.02	0.0015	95398.68	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3K4K2	5.5	12468.47	107867.15	D
1048.864	0.006	95341.2	1048.8674	-0.0034	41	26	161.7		0.03	0.0022	95340.94	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3I4G1	5.5	24735.79	120076.73	
1048.997	0.006	95329.2	1048.999	-0.002	35	27	1129		0.33	0.004	95329	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3K4H1	6.5	44390.14	139719.1	
1049.263	0.006	95305	1049.268	-0.005	14	10	110.6		0.03	0.004	95304.6	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3F4H4	3.5	36814.62	132119.2	
1049.471	0.006	95286.1	1049.4729	-0.0019	26	22	99.82	100.6	-0.09	0.0016	95285.93	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	3H4F4	4.5	12468.47	107754.4	
1049.86	0.006	95250.8	1049.868	-0.008	49	30	94.95	93.79	-0.07	0.0017	95250.07	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G6G	4.5	10171.81	105421.88	
1050.386	0.006	95203.1	1050.3871	-0.0011	51	38	231.9	236.4	0.09	0.0016	95203	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5F4H	5.5	12468.47	107671.47	
1052.283	0.006	95031.5	1052.2836	-0.0006	81	50	320.2	315	-0.14	0.0018	95031.42	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5F4F	3.5	12468.47	107499.89	
1054.124	0.006	94865.5	1054.129	-0.005	75	52	484.2		0.21	0.0019	94865.05	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3L4K	5.5	26707.61	121572.66	
1054.191	0.006	94859.5	1054.198	-0.007	63	44	108.7		-0.06	0.003	94858.8	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3F4H3	6.5	28312.44	123171.28	



TABLE B.1 – suite

1054.634	0.006	94819.6	1054.6394	-0.0054	1		124.7		-0.31	0.0014	94819.14	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5F4G	5.5	78916.83	173735.97		
1055.236	0.006	94765.5	1055.2268	0.0092	3		68.13		-0.02	0.0022	94766.36	p6f11	2H2H2	4.5	p6fs	5G6G	4.5	36814.62	131580.98		
1055.645	0.006	94728.8	1055.6504	-0.0054	60	39	176.5	178.4	-0.14	0.0018	94728.33	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G6I	6.5	10171.81	104900.14		
1055.666	0.013	94726.9	1055.679	-0.013	34		14.72		0.01	0.003	94725.79	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5G6G	4.5	12468.47	107194.26	P	
1058.95	0.006	94433.2	1058.9601	-0.0101	14	8	40.2	29.95	0.02	0.0016	94432.26	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3M4K	5.5	26707.61	121139.87		
1059.39	0.006	94393.9	1059.387	0.003	44	12	91.28		0.06	0.003	94394.2	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3F4H2	4.5	26707.61	121101.8		
1060.871	0.006	94262.2	1060.8683	0.0027	28	9	12.53		-0.01	0.0013	94262.41	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3L4I	6.5	19331.49	113593.9		
1061.321	0.006	94222.2	1061.3267	-0.0057	28	14	107.8	124.3	0.05	0.002	94221.69	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3L4K	5.5	26707.61	120929.3		
1061.53	0.006	94203.6	1061.531	-0.001	34	6	19.4		0.02	0.003	94203.5	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	5D6F	3.5	22416.28	116619.8		
1062.21	0.006	94143.3	1062.215	-0.005	22	10	148.5		-0.06	0.004	94142.9	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	3I4H1	3.5	28239.56	122382.5		
1063.221	0.006	94053.8	1063.2315	-0.0105	7		30.17		-0.01	0.0015	94052.89	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3L2I	5.5	24735.79	118788.68		
1063.904	0.006	93993.4	1063.9104	-0.0064	1		23.11		-0.08	0.0017	93992.88	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5F4G	5.5	79743.09	173735.97		
1063.985	0.006	93986.3	1063.9896	-0.0046	34	15	38.56	37.3	-0.02	0.0013	93985.88	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5F4G	5.5	10171.81	104157.69		
1064.688	0.006	93924.2	1064.6959	-0.0079	37	12	31.35		0.02	0.0013	93923.53	p6f11	4F4F	4.5	p6fs	5I4I	4.5	24735.79	118659.32		
1064.948	0.006	93901.3	1064.94	0.008	7		109		-0.05	0.003	93902	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	5G4H	4.5	28239.56	122141.6		
1065.8	0.006	93826.2	1065.8	0	3		20.35		0.01	0.003	93826.2	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	3I2G1	3.5	28239.56	122065.76		
1066.022	0.006	93806.7	1066.0301	-0.0081	8	4	74.96		0.04	0.0019	93805.98	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3L4K	5.5	27766.68	121572.66		
1066.823	0.006	93736.2	1066.8278	-0.0048	90	46	179.9	179.7	0.08	0.0016	93735.84	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5F4H	4.5	10171.81	103907.65		
1067.263	0.006	93697.6	1067.2627	0.0003	103	41	185.8	186.5	-0.25	0.0015	93697.64	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I4K	6.5	0	93697.64		
1067.52	0.006	93675.1	1067.527	-0.007	3		110		0.05	0.003	93674.5	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	1K2I	5.5	44390.14	138064.6		
1067.894	0.009	93642.3	1067.8906	0.0034	7		12.01		-0.04	0.0019	93642.55	p6fd	5F4H	4.5	p6fp	3L4K	5.5	103907.65	197550.2	D	
1067.894	0.009	93642.3	1067.9	-0.006	7		17.25	17.58	0.07	0.0017	93641.73	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5F6H	7.5	0	93641.73		D
1068.703	0.006	93571.4	1068.7047	-0.0017	5		35.34		-0.01	0.0014	93571.22	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5D4F	4.5	26707.61	120278.83		
1069.223	0.006	93525.9	1069.208	0.015	55	14	89.56		0.05	0.003	93527.15	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	3K4K2	7.5	6507.79	100034.94		
1069.743	0.006	93480.4	1069.7483	-0.0053	105	54	171	169.7	0.08	0.0019	93479.93	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5F4H	5.5	6507.79	99987.72		
1070.968	0.006	93373.5	1070.9712	-0.0032	10	10	29.24	28.56	-0.01	0.0016	93373.19	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3M4K	5.5	27766.68	121139.87		
1071.015	0.006	93369.4	1071.0179	-0.0029	40	16	155.2		0.05	0.0023	93369.12	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3I4G1	5.5	26707.61	120076.73		
1071.505	0.006	93326.7	1071.51	-0.005	18	7	48.78		-0.02	0.003	93326.3	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3L4L	7.5	28312.44	121638.7		
1071.646	0.006	93314.4	1071.6534	-0.0074	41	12	77.3		-0.05	0.001	93313.75	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3F4G4	5.5	19331.49	112645.24		
1072.72	0.006	93220.9	1072.733	-0.013	37	14	113.9		-0.07	0.003	93219.8	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	3I2G1	4.5	28239.56	121459.4		
1072.96	0.006	93200.1	1072.9649	-0.0049	30	5	15.57		0.12	0.001	93199.69	p6f11	2H2H2	5.5	p6fs	5I6I	5.5	19331.49	112531.18		
1073.386	0.006	93163.1	1073.3919	-0.0059	3		23.71		-0.02	0.002	93162.62	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3L4K	5.5	27766.68	120929.3		
1073.608	0.006	93143.9	1073.6195	-0.0115	26		10.93		0	0.0021	93142.87	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3I4I1	5.5	26707.61	119850.48		
1074.899	0.006	93032	1074.9005	-0.0015	42	26	26.96		-0.01	0.0016	93031.87	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3K4I2	4.5	19331.49	112363.36		
1075.134	0.006	93011.7	1075.14	-0.006	41	21	86.6	90.46	0.07	0.0016	93011.14	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G6I	6.5	10171.81	103182.95		
1075.429	0.006	92986.2	1075.423	0.006	2		131.3		-0.06	0.004	92986.7	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3K4H1	6.5	44390.14	137376.8		
1075.621	0.006	92969.5	1075.629	-0.008	5		67.4		-0.01	0.003	92968.85	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3M2K	7.5	28312.44	121281.29		
1075.798	0.006	92954.3	1075.8078	-0.0098	19		67.42	61.89	0.07	0.0018	92953.41	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5G6G	4.5	12468.47	105421.88		

TABLE B.1 – suite

1076.777	0.006	92869.8	1076.7782	-0.0012	54	13	147.1		-0.1	0.002	92869.64	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3M4K	6.5	26707.61	119577.25		
1077.241	0.006	92829.8	1077.241	0	16		775.3		-0.24	0.005	92829.7	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3I2I1	6.5	33555.7	126385.4		
1078.393	0.006	92730.6	1078.394	-0.001	18		102.5		0.06	0.003	92730.5	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	5G4I	6.5	28312.44	121042.9		
1079.707	0.006	92617.8	1079.7024	0.0046	1		119.5		-0.07	0.0022	92618.11	p6f11	2I2I	6.5	p6fs	3K2K2	6.5	44390.14	137008.25		
1080.339	0.006	92563.5	1080.342	-0.003	10		31.22		0.02	0.004	92563.2	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	5D6F	3.5	28239.56	120802.8		
1081.515	0.006	92462.9	1081.5208	-0.0058	3		15.57	15.01	-0.01	0.0016	92462.39	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3K4K2	5.5	15404.76	107867.15		
1082.834	0.006	92350.3	1082.8413	-0.0073	64		221.7	228	-0.11	0.0017	92349.64	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3H4F4	4.5	15404.76	107754.4		
1085.11	0.013	92156.6	1085.1107	-0.0007	22		61.22	62.32	0.11	0.0013	92156.5	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5F4G	5.5	6507.79	98664.29	p	
1085.831	0.006	92095.3	1085.8337	-0.0027	104	51	481	474	-0.19	0.0019	92095.13	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5F4F	3.5	15404.76	107499.89		
1085.973	0.006	92083.4	1085.9673	0.0057	5		28.64		-0.02	0.0022	92083.8	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3I4I1	5.5	27766.68	119850.48		
1086.192	0.006	92064.7	1086.1988	-0.0068	20		41.67	40.93	0.02	0.0019	92064.18	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5F6H	6.5	0	92064.18		
1088.008	0.013	91911.1	1088.0238	-0.0158	1		11.58	11.7	0	0.0019	91909.75	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I6I	6.5	73426.4	165336.15	bl	
1088.336	0.006	91883.3	1088.329	0.007	35		56.58		-0.01	0.003	91884	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5D6F	5D6F	3.5	24735.79	116619.8	
1088.595	0.006	91861.5	1088.5951	-1.00E-04	31		32.85		-0.02	0.0015	91861.52	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5F6G	5.5	10171.81	102033.33		
1089.444	0.006	91789.9	1089.449	-0.005	3		13.08		-0.01	0.003	91789.5	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5G6G	4.5	15404.76	107194.26		
1091.332	0.006	91631.2	1091.3351	-0.0031	75	20	165.2	181.7	-0.07	0.0018	91630.88	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3K2I2	5.5	19331.49	110962.37		
1091.466	0.006	91619.9	1091.468	-0.002	6		40.74		0.05	0.0013	91619.73	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5G4H	5.5	27766.68	119386.41		
1092.695	0.006	91516.8	1092.6896	0.0054	31		45.76		-0.03	0.0017	91517.3	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5G6H	6.5	19331.49	110848.79		
1092.744	0.006	91512.7	1092.7422	0.0018	11		25.67		-0.04	0.0016	91512.89	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5G6H	6.5	90598.25	182111.14		
1093.727	0.006	91430.5	1093.726	0.001	69	20	95.41	96.69	-0.05	0.0024	91430.58	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5S4D	3.5	12468.47	103899.05		
1094.811	0.006	91340	1094.808	0.003	68	20	272.2		-0.1	0.003	91340.19	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3I4H1	5.5	26707.61	118047.8		
1095.107	0.006	91315.3	1095.1024	0.0046	31	3	15.4		0.01	0.0015	91315.66	p6f11	4G4G	5.5	p6fs	5I4I	4.5	26707.61	118023.27		
1095.496	0.006	91282.9	1095.4969	-0.0009	101	21	284.3	278.6	-0.09	0.0017	91282.78	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5G6G	5.5	19331.49	110614.27		
1095.713	0.006	91264.8	1095.713	0	15		57.61		-0.03	0.003	91264.81	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3M4K	6.5	28312.44	119577.25		
1095.823	0.006	91255.6	1095.8275	-0.0045	4		19.02		-0.07	0.0014	91255.24	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5G6G	6.5	10171.81	101427.05		
1096.405	0.006	91207.2	1096.4047	0.0003	17		62.27		0.02	0.0023	91207.2	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5G4F	4.5	19331.49	110538.69		
1096.724	0.006	91180.6	1096.719	0.005	21		18.51		0.02	0.003	91181.03	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3I4K1	5.5	26707.61	117888.64		
1098.173	0.006	91060.3	1098.174	-0.001	29		106.2		0.11	0.003	91060.26	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3L4K	6.5	26707.61	117767.87		
1099.07	0.006	90986	1099.0733	-0.0033	13		49.67	52.28	-0.06	0.0016	90985.74	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5G4G	5.5	15404.76	106390.5		
1099.444	0.006	90955.1	1099.442	0.002	28		41.76		0.07	0.004	90955.2	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	3D4D1	3.5	22416.28	113371.5		
1100.199	0.006	90892.6	1100.1991	-1.00E-04	8		35.74		0.03	0.0013	90892.64	p6f11	4G4G	4.5	p6fs	5I4I	4.5	27766.68	118659.32		
1100.793	0.006	90843.6	1100.7957	-0.0027	5		21.74		-0.08	0.0019	90843.38	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4L	6.5	6507.79	97351.17		
1101.144	0.006	90814.7	1101.1447	-0.0007	2		225.3		-0.26	0.0014	90814.59	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5F4G	5.5	82921.38	173735.97		
1102.49	0.006	90703.8	1102.492	-0.002	21		23.25	23.53	-0.42	0.003	90703.58	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I4L	8.5	0	90703.58		
1102.794	0.006	90678.8	1102.8055	-0.0115	55	24	24.73		0.02	0.0021	90677.82	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5G6H	4.5	15404.76	106082.58		
1103.775	0.006	90598.1	1103.7741	0.0009	159	77	395.7	396.7	-0.19	0.0014	90598.25	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I4I	6.5	0	90598.25		
1106.654	0.006	90362.5	1106.6529	0.0011	81	42	11.9		0.05	0.0021	90362.57	p6fd	5I6G	6.5	p6fp	5F4G	5.5	74536.2	164898.77		
1106.898	0.006	90342.5	1106.9	-0.002	20		149.3	148.9	0.07	0.003	90342.43	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3L2I	6.5	26707.61	117050.04		
1107.948	0.006	90257	1107.9523	-0.0043	13		131.7		0.07	0.0015	90256.59	p6f11	4G4G	4.5	p6fs	5I4I	4.5	27766.68	118023.27		

TABLE B.1 – suite

1110.896	0.006	90017.4	1110.8998	-0.0038	46		154.4	138.5	0.12	0.0019	90017.12	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5G6G	4.5	15404.76	105421.88	
1111.74	0.006	89949.1	1111.7457	-0.0057	125	46	300.8	298.3	-0.28	0.0018	89948.63	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I4K	7.5	0	89948.63	
1112.806	0.006	89862.9	1112.809	-0.003	5		18.88		-0.06	0.004	89862.7	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	3K4H2	3.5	22416.28	112279	
1113.389	0.006	89815.9	1113.3885	0.0005	15		69.9	69.45	-0.09	0.0021	89815.91	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5F4H	5.5	10171.81	99987.72	
1115.494	0.006	89646.4	1115.4987	-0.0047	29		67.28	66.26	-0.17	0.0017	89646	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4K	5.5	6507.79	96153.79	
1115.891	0.006	89614.4	1115.877	0.014	14		21.87		0.05	0.003	89615.58	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3F4H3	6.5	33555.7	123171.28	
1116.728	0.013	89547.3	1116.726	0.002	83	42	50.85		-0.1	0.0014	89547.48	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5F6G	5.5	86559.22	176106.7	asym
1120.317	0.006	89260.4	1120.3323	-0.0153	6		28.63		-0.08	0.0013	89259.23	p6f11	2H2H2	5.5	p6fs	5I6I	6.5	19331.49	108590.72	
1121.228	0.006	89187.9	1121.2261	0.0019	23	12	13.32		0.03	0.0023	89188.08	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5G6F	4.5	20454.19	109642.27	
1122.696	0.009	89071.3	1122.697	-0.001	24	17	10.84		-0.01	0.005	89071.3	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3M4K	7.5	28312.44	117383.7	D
1122.696	0.009	89071.3	1122.7006	-0.0046	24	17	101.7	106.1	0.09	0.0018	89070.94	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3H4H4	6.5	19331.49	108402.43	D
1124.701	0.013	88912.5	1124.7	0.001	3		165.1		0.05	0.005	88912.6	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3H4G2	5.5	41609.23	130521.8	asym
1125.845	0.006	88822.1	1125.8352	0.0098	4		43.72		0.04	0.002	88822.95	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5F6G	4.5	79743.09	168566.04	
1126.721	0.006	88753.1	1126.7234	-0.0024	48	18	116.1	117	-0.15	0.0015	88752.93	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5F4G	5.5	15404.76	104157.69	
1128.943	0.006	88578.5	1128.9324	0.0106	8		12.09		-0.01	0.002	88579.26	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5I6I	4.5	79743.09	168322.35	
1129.484	0.006	88536	1129.4884	-0.0044	4		35.48	37.02	-0.01	0.0017	88535.66	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3K4K2	5.5	19331.49	107867.15	
1129.905	0.006	88503	1129.9066	-0.0016	47		64.86	62.88	0.06	0.0018	88502.89	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5F4H	4.5	15404.76	103907.65	
1130.014	0.013	88494.5	1130.016	-0.002	140	90	382.9	386.8	-0.16	0.003	88494.29	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5S4D	3.5	15404.76	103899.05	asym
1130.933	0.006	88422.6	1130.9286	0.0044	3		19.8	20	0.01	0.0017	88422.91	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3H4F4	4.5	19331.49	107754.4	
1132.908	0.006	88268.4	1132.8975	0.0105	20		15.8		-0.17	0.002	88269.24	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4L	7.5	6507.79	94777.03	
1133.638	0.013	88211.6	1133.621	0.017	3		14.97		-0.01	0.003	88212.9	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3F4F3	4.5	36814.62	125027.5	
1136.173	0.006	88014.7	1136.1776	-0.0046	41	9	22.44		-0.04	0.0023	88014.41	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3F4H4	6.5	26707.61	114722.02	
1136.246	0.013	88009.1	1136.245	0.001	5		15.24		-0.01	0.0024	88009.19	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5S4D	3.5	15404.76	103413.95	bl
1136.463	0.006	87992.3	1136.451	0.012	65	35	20.3		-0.02	0.003	87993.22	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3L4I	5.5	27766.68	115759.9	
1136.765	0.006	87968.9	1136.7676	-0.0026	161	114	322.9	321.1	-0.15	0.0014	87968.73	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4I	5.5	6507.79	94476.52	
1137.214	0.006	87934.2	1137.212	0.002	57	23	140.6		-0.06	0.003	87934.4	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5G4H	5.5	26707.61	114642	
1137.533	0.006	87909.5	1137.5341	-0.0011	49	16	90.21		0.08	0.0013	87909.45	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3F4G4	5.5	24735.79	112645.24	
1137.632	0.006	87901.9	1137.626	0.006	4		52.36		0.02	0.004	87902.4	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	1D2G3	3.5	36814.62	124717	
1138.13	0.006	87863.4	1138.138	-0.008	17	19	13.73		0.01	0.003	87862.77	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5G6G	4.5	19331.49	107194.26	
1139.428	0.006	87763.3	1139.437	-0.009	2		81.41		-0.12	0.003	87762.61	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	3K2L2	8.5	83376.61	171139.22	
1139.922	0.006	87725.3	1139.918	0.004	51	16	252.9		-0.12	0.003	87725.59	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3M2K	7.5	33555.7	121281.29	
1140.124	0.009	87709.8	1140.123	0.001	118	62	482.1		-0.13	0.003	87709.8	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3L2I	6.5	28312.44	116022.25	D
1140.124	0.009	87709.8	1140.126	-0.002	118	62	266.9		-0.16	0.003	87709.61	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3H4K2	6.5	41609.23	129318.84	D
1140.424	0.006	87686.7	1140.4299	-0.0059	12		106.2	107.7	0.01	0.0021	87686.23	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I6I	7.5	73426.4	161112.63	
1141.332	0.006	87616.9	1141.3364	-0.0044	41	21	62.77		0.03	0.0019	87616.59	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5F6G	4.5	90798.83	178415.42	
1142.528	0.006	87525.2	1142.527	0.001	104	69	923.7		0.32	0.005	87525.3	p6f11	2L2L	8.5	p6fd	3H4K2	8.5	42580.9	130106.2	
1144.533	0.013	87371.9	1144.51	0.023	33	26	46.42		0.03	0.003	87373.6	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3L4K	5.5	33555.7	120929.3	asym Q
1145.195	0.006	87321.4	1145.1916	0.0034	72	29	77.77	80.28	0.06	0.0016	87321.63	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5F6H	5.5	6507.79	93829.42	

TABLE B.1 – suite

1146.926	0.006	87189.6	1146.9225	0.0035	205	131	300.4	297.2	-0.18	0.0016	87189.85	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4K	6.5	6507.79	93697.64	
1148.643	0.006	87059.3	1148.6462	-0.0032	109	43	128.9	124.9	0.06	0.0017	87059.01	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5G4G	5.5	19331.49	106390.5	
1148.832	0.006	87044.9	1148.8218	0.0102	45		13.22		-0.01	0.0023	87045.7	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5F4F	3.5	20454.19	107499.89	
1149.278	0.006	87011.1	1149.2816	-0.0036	205	173	361.8	361.4	-0.2	0.0014	87010.88	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I4I	4.5	10171.81	97182.69	
1150.698	0.013	86903.8	1150.6908	0.0072	82	13	13.74		0.01	0.0016	86904.32	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5F6G	4.5	91511.1	178415.42	asym
1150.93	0.006	86886.2	1150.9296	0.0004	84	26	91.78		0.09	0.0015	86886.29	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3L4I	6.5	26707.61	113593.9	
1151.015	0.006	86879.8	1151.0105	0.0045	21		20.15		-0.02	0.0024	86880.18	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	3H4I4	6.5	19331.49	106211.67	
1151.233	0.013	86863.4	1151.2228	0.0102	13		41.51		-0.14	0.0015	86864.16	p6fd	5I4G	5.5	p6fp	5F4G	5.5	86871.81	173735.97	asym
1152.446	0.006	86772	1152.447	-0.001	58	30	10.78		0.03	0.0018	86771.89	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5F6G	5.5	89334.81	176106.7	
1152.643	0.006	86757.1	1152.6425	0.0005	166	125	129	126.2	-0.29	0.002	86757.17	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I6L	7.5	0	86757.17	
1152.726	0.006	86750.9	1152.7233	0.0027	37		19.29		-0.01	0.0022	86751.09	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5G6H	4.5	19331.49	106082.58	
1152.807	0.006	86744.8	1152.8077	-0.0007	33	6	10.16		0.03	0.002	86744.74	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I6K	6.5	0	86744.74	
1154.365	0.006	86627.7	1154.3493	0.0157	41		24.29		0.01	0.0016	86628.89	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5I6H	5.5	78916.83	165545.72	
1154.42	0.013	86623.6	1154.4117	0.0083	15		66.44		-0.14	0.0015	86624.21	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	3K4K2	5.5	94873.97	181498.18	bl
1155.045	0.006	86576.7	1155.0488	-0.0038	54	13	68.61	68.89	-0.02	0.0023	86576.43	p6fd	5I6G	6.5	p6fp	5I6I	7.5	74536.2	161112.63	
1156.209	0.006	86489.5	1156.204	0.005	37		50.71		0.12	0.0015	86489.93	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5F4F	4.5	86559.22	173049.15	
1157.055	0.006	86426.3	1157.0577	-0.0027	15		518.8		0.7	0.0024	86426.11	p6fd	5F6H	7.5	p6fp	5G6H	7.5	93641.73	180067.84	
1157.14	0.006	86420	1157.1487	-0.0087	70	19	109.6	109.9	-0.02	0.0016	86419.32	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5I6I	6.5	78916.83	165336.15	
1158.374	0.013	86327.9	1158.3875	-0.0135	13		23.12		0.02	0.002	86326.9	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5I6H	4.5	79743.09	166069.99	bl
1158.541	0.006	86315.4	1158.5352	0.0058	160	110	125.9		0.06	0.0018	86315.89	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5G4G	5.5	19331.49	105647.38	
1158.819	0.006	86294.8	1158.819	0	52	19	15.48		0.02	0.003	86294.78	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3I4I1	5.5	33555.7	119850.48	
1159.484	0.006	86245.3	1159.4718	0.0122	5		18.03		-0.12	0.0016	86246.17	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	3K4K2	5.5	95252.01	181498.18	
1159.734	0.006	86226.7	1159.7352	-0.0012	67		47.24	44.26	-0.02	0.0021	86226.58	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3K2I2	5.5	24735.79	110962.37	
1160.81	0.006	86146.8	1160.811	-0.001	31		94.22		-0.14	0.003	86146.7	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	3K2L2	8.5	84992.52	171139.22	
1160.943	0.006	86136.9	1160.9417	0.0013	70	12	33.6	33.68	0.05	0.0017	86136.97	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5F6H	4.5	10171.81	96308.78	
1161.571	0.006	86090.3	1161.5698	0.0012	79	14	68.82	64.46	-0.06	0.002	86090.39	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5G6G	4.5	19331.49	105421.88	
1163.027	0.006	85982.5	1163.0344	-0.0074	170	113	170.5	167.6	-0.13	0.0019	85981.98	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I4K	5.5	10171.81	96153.79	
1163.551	0.006	85943.8	1163.552	-0.001	278	226	2649		-0.32	0.005	85943.7	p6f11	2L2L	8.5	p6fd	3M2L	8.5	42580.9	128524.6	
1163.638	0.006	85937.3	1163.6346	0.0034	29		16.25		0.02	0.0012	85937.63	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3F4G4	5.5	26707.61	112645.24	
1164.441	0.006	85878.1	1164.4361	0.0049	71	34	107.1	109	0.04	0.002	85878.48	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5G6G	5.5	24735.79	110614.27	
1165.464	0.006	85802.7	1165.462	0.002	45	16	37.67		-0.01	0.003	85802.9	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5G4F	4.5	24735.79	110538.69	
1165.729	0.006	85783.2	1165.7296	-0.0006	228	196	389.4	391	-0.21	0.0017	85783.19	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I4H	3.5	12468.47	98251.66	
1166.315	0.006	85740.1	1166.3132	0.0018	332	367	680.8	679.3	-0.23	0.0016	85740.26	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I4H	6.5	0	85740.26	
1166.453	0.006	85730	1166.4549	-0.0019	36	33	124.7	123.3	-0.12	0.0019	85729.85	p6fd	5I6I	5.5	p6fp	5I4K	6.5	83109.77	168839.62	
1166.822	0.006	85702.9	1166.809	0.013	44	42	17.13		-0.02	0.004	85703.9	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	3L4K	7.5	28312.44	114016.3	
1168.316	0.006	85593.3	1168.319	-0.003	8		111.9	112.3	-0.03	0.0019	85593.06	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5I6I	6.5	79743.09	165336.15	
1168.651	0.006	85568.7	1168.6523	-0.0013	87	34	56.66	59.75	-0.03	0.0021	85568.65	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5G6I	6.5	19331.49	104900.14	
1170.021	0.006	85468.5	1170.027	-0.006	21		12.18		0	0.003	85468.08	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3L4I	4.5	36814.62	122282.7	
1170.56	0.006	85429.2	1170.567	-0.007	114	51	55.85		0.06	0.004	85428.7	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3I4H1	6.5	33555.7	118984.4	

TABLE B.1 – suite

1171.017	0.013	85395.8	1171.0255	-0.0085	52		40.06		-0.02	0.0015	85395.24	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5F6G	5.5	90711.46	176106.7	asym	
1171.58	0.013	85354.8	1171.5904	-0.0104	67		173.2	174.4	0.03	0.002	85354.06	p6fd	5I6I	5.5	p6fp	5I4I	5.5	83109.77	168463.83	f	
1171.709	0.006	85345.4	1171.7084	0.0006	148	114	78.23	79.02	0.38	0.0023	85345.47	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I6K	8.5	0	85345.47		
1171.959	0.006	85327.2	1171.962	-0.003	7		44.77		0.01	0.004	85327	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	5G4H	4.5	36814.62	122141.6		
1172.218	0.006	85308.3	1172.2248	-0.0068	17		20.45		0.01	0.002	85307.87	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5F6G	5.5	90798.83	176106.7		
1172.469	0.013	85290.1	1172.459	0.01	34		303		0.53	0.003	85290.81	p6fd	5I4L	7.5	p6fp	5G6H	7.5	94777.03	180067.84	bl	
1172.628	0.006	85278.5	1172.6178	0.0102	54		54.53		0.05	0.0018	85279.28	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5F4G	5.5	88456.69	173735.97		
1172.992	0.006	85252.1	1173.005	-0.013	88	10	55.21		-0.02	0.003	85251.14	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3I2G1	3.5	36814.62	122065.76		
1174.935	0.006	85111.1	1174.928	0.007	180	90	122.8		-0.05	0.003	85111.57	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5G6H	5.5	24735.79	109847.36		
1175.363	0.009	85080.1	1175.359	0.004	75	26	31.01		0.16	0.003	85080.42	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5S6P	3.5	90271.44	175351.86	D	
1175.363	0.009	85080.1	1175.3616	0.0014	75	26	43.17	44.78	-0.03	0.0016	85080.2	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5F6D	4.5	10171.81	95252.01	D	
1175.908	0.006	85040.7	1175.9028	0.0052	60	12	22.54		-0.02	0.0025	85041.04	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5F4D	3.5	15404.76	100445.8		
1176.424	0.006	85003.4	1176.4248	-0.0008	188	80	226.6	228.1	0.17	0.0015	85003.31	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4H	5.5	6507.79	91511.1		
1176.572	0.006	84992.7	1176.5741	-0.0021	364	197	1010	998.6	-0.32	0.0018	84992.52	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I4I	7.5	0	84992.52		
1177.771	0.013	84906.1	1177.7664	0.0046	27	2	177.5		-0.05	0.0023	84906.48	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5G6F	4.5	24735.79	109642.27	asym	
1178.883	0.006	84826.1	1178.8811	0.0019	91	12	79.02	81.74	0.04	0.0015	84826.2	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5F4G	5.5	19331.49	104157.69		
1179.617	0.006	84773.3	1179.622	-0.005	48		36.07		-0.05	0.005	84772.9	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3M4K	7.5	33555.7	118328.6		
1179.834	0.006	84757.7	1179.829	0.005	33		38.12		0.01	0.003	84758.04	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3L4K	5.5	36814.62	121572.66		
1179.869	0.006	84755.2	1179.8669	0.0021	30		152.4	153.4	-0.05	0.0022	84755.32	p6fd	5I6H	4.5	p6fp	5I4I	5.5	83708.51	168463.83		
1180.432	0.006	84714.7	1180.4394	-0.0074	264	104	513.9	518.6	-0.16	0.0016	84714.22	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I4I	4.5	12468.47	97182.69		
1180.601	0.006	84702.6	1180.6074	-0.0064	228	80	218.9	217.4	-0.12	0.0014	84702.16	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I4H	4.5	10171.81	94873.97		
1181.175	0.006	84661.5	1181.1781	-0.0031	61	4	28.13	28.44	-0.17	0.0022	84661.24	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I6L	5.5	6507.79	91169.03		
1182.08	0.006	84596.6	1182.0795	0.0005	18		20.71		-0.01	0.0019	84596.68	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3K4I2	4.5	27766.68	112363.36		
1182.224	0.009	84586.4	1182.2252	-0.0012	7		128	127.5	0.05	0.0021	84586.25	p6fd	5I6I	4.5	p6fp	5I4I	4.5	86400.9	170987.15	D	
1182.224	0.009	84586.4	1182.2287	-0.0047	7		21.92		0	0.0019	84586	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5F6G	4.5	93829.42	178415.42	D	
1182.367	0.006	84576.1	1182.3663	0.0007	19	8	21.21	19.89	-0.01	0.0019	84576.16	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5F4H	4.5	19331.49	103907.65		
1182.449	0.006	84570.2	1182.4545	-0.0055	72	13	54.58		-0.03	0.0023	84569.85	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3K4K2	5.5	24735.79	109305.64		
1182.643	0.006	84556.3	1182.6409	0.0021	20		17.7		0.03	0.0024	84556.52	p6fd	3K4K2	5.5	p6fp	3L4K	6.5	109305.64	193862.16		
1182.685	0.006	84553.4	1182.69	-0.005	8		114		0.23	0.003	84553.03	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5S6P	3.5	90798.83	175351.86		
1183.971	0.006	84461.5	1183.9666	0.0044	63	15	26.21		0.01	0.0022	84461.84	p6fd	5I6I	4.5	p6fp	5I6I	3.5	86400.9	170862.74		
1185.295	0.013	84367.2	1185.301	-0.006	41		782.8		-0.51	0.011	84366.8	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3I2K1	7.5	44390.14	128756.9	bl	
1185.564	0.006	84348	1185.565	-0.001	69	15	86.46		-0.05	0.003	84347.95	p6fd	5I6H	3.5	p6fp	5I4I	4.5	86639.2	170987.15		
1185.89	0.006	84324.9	1185.8844	0.0056	22		135.3		0.05	0.0023	84325.25	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3M4K	5.5	36814.62	121139.87		
1186.163	0.006	84305.5	1186.1733	-0.0103	279	130	494	495.8	-0.16	0.0015	84304.71	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I4I	5.5	10171.81	94476.52		
1187.087	0.006	84239.8	1187.1	-0.013	46		32.65		-0.03	0.004	84238.9	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	5D6G	4.5	41609.23	125848.1		
1187.476	0.006	84212.3	1187.477	-0.001	18		17.38		0.01	0.003	84212.17	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3L4K	6.5	33555.7	117767.87		
1187.593	0.006	84203.9	1187.5967	-0.0037	187	63	146.5	144.5	-0.09	0.0014	84203.67	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4H	5.5	6507.79	90711.46		
1188.478	0.006	84141.2	1188.4787	-0.0007	119	22	150.2		-0.15	0.002	84141.18	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5G6H	6.5	26707.61	110848.79		

TABLE B.1 – suite

1188.727	0.006	84123.6	1188.7242	0.0028	12		29.94		-0.02	0.0023	84123.8	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	3K4I2	4.5	28239.56	112363.36		
1189.19	0.006	84090.9	1189.1955	-0.0055	355	162	705.7	705.3	-0.18	0.0015	84090.46	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4I	6.5	6507.79	90598.25		
1189.877	0.006	84042.3	1189.8739	0.0031	67	14	470.6		0.05	0.0022	84042.52	p6fd	5F6H	6.5	p6fp	5F6G	5.5	92064.18	176106.7		
1190.008	0.006	84033	1190.0161	-0.0081	56		35.33		0.02	0.002	84032.48	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5G6H	5.5	90798.83	174831.31		
1190.116	0.006	84025.4	1190.104	0.012	32		31.14		-0.06	0.0025	84026.27	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	3K4I2	7.5	86744.74	170771.01		
1190.442	0.006	84002.4	1190.4296	0.0124	22		75.17		0.22	0.0023	84003.29	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5F4D	3.5	89334.81	173338.1		
1191.8	0.006	83906.7	1191.8005	-0.0005	126	20	105.5	106.3	0.06	0.002	83906.66	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5G6G	5.5	26707.61	110614.27		
1192.743	0.006	83840.4	1192.7437	-0.0007	63	4	18.42	19.27	-0.06	0.0018	83840.31	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5F6H	4.5	12468.47	96308.78		
1194.948	0.013	83685.6	1194.9527	-0.0047	127	37	59.86	59.37	-0.05	0.0021	83685.32	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I4K	5.5	12468.47	96153.79	asym	
1195.352	0.006	83657.4	1195.3485	0.0035	70	19	53.15	55.72	0.05	0.0017	83657.61	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5F6H	5.5	10171.81	93829.42		
1195.393	0.006	83654.5	1195.393	0	96	29	1044		0.35	0.003	83654.51	p6fd	5F6P	3.5	p6fp	5F4F	4.5	89394.64	173049.15		
1197.241	0.006	83525.4	1197.2344	0.0066	130	45	86.77	868.9**	-0.08	0.0017	83525.83	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I4K	6.5	10171.81	93697.64		
1197.966	0.006	83474.8	1197.968	-0.002	35		26.56		-0.03	0.003	83474.69	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5G6I	4.5	24735.79	108210.48		
1198.45	0.006	83441.1	1198.4539	-0.0039	188	74	131.5	132.3	-0.16	0.002	83440.84	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4K	7.5	6507.79	89948.63		
1198.98	0.006	83404.3	1198.9795	0.0005	155	12	108.1	108.6	0.14	0.0017	83404.26	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I4G	3.5	12468.47	95872.73		
1199.375	0.006	83376.7	1199.3771	-0.0021	398	258	947	961.4	-0.34	0.0021	83376.61	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I4I	7.5	0	83376.61		
1201.025	0.013	83262.2	1201.026	-0.001	13		108.5		0.04	0.003	83262.11	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3I4G1	5.5	36814.62	120076.73	f	
1201.063	0.006	83259.6	1201.0637	-0.0007	77	14	28.99	29.38	-0.09	0.0017	83259.53	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5F4G	5.5	15404.76	98664.29		
1201.878	0.006	83203.1	1201.8784	-0.0004	40	7	97.41		0.06	0.0016	83203.09	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5G6F	4.5	90711.46	173914.55		
1201.986	0.006	83195.6	1201.9853	0.0007	89	23	96.4	100.2	0.06	0.0021	83195.69	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3K2I2	5.5	27766.68	110962.37		
1202.559	0.006	83156	1202.5547	0.0043	83	16	515.8	514.3	-0.34	0.0022	83156.3	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I4H	6.5	73426.4	156582.7		
1202.917	0.006	83131.3	1202.9155	0.0015	124	45	175.1	173.5	0.07	0.0019	83131.36	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	3K4K2	5.5	24735.79	107867.15		
1203.384	0.013	83099	1203.3787	0.0053	15		171	169.8	0.09	0.0017	83099.36	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I4K	6.5	85740.26	168839.62	f	
1203.96	0.006	83059.2	1203.952	0.008	41	8	112.2	113.2	0.01	0.003	83059.81	p6fd	5I6L	8.5	p6fp	5I6K	7.5	82610.39	165670.2		
1204.469	0.006	83024.2	1204.4636	0.0054	12	2	263.5		-0.07	0.0015	83024.51	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5F4G	5.5	90711.46	173735.97		
1205.402	0.009	82959.9	1205.397	0.005	100	32	624	621.1	0.34	0.002	82960.22	p6fd	5I6I	5.5	p6fp	5I6H	4.5	83109.77	166069.99	D	
1205.402	0.009	82959.9	1205.404	-0.002	100	32	56.13		0.09	0.003	82959.76	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5S4D	3.5	20454.19	103413.95	D	
1205.767	0.006	82934.8	1205.7537	0.0133	30	9	37.13	38.99	-0.02	0.0021	82935.68	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5F4H	5.5	24735.79	107671.47	D	
1205.767	0.006	82934.8	1205.7685	-0.0015	30	9	20.79		0.01	0.0023	82934.66	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5G6F	4.5	26707.61	109642.27	D	
1205.963	0.006	82921.3	1205.9616	0.0014	247	90	198.5	203.2	0.14	0.0018	82921.38	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I6K	6.5	0	82921.38		
1207.044	0.006	82847	1207.0458	-0.0018	120	46	95.74	95.33	0.1	0.0017	82846.9	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4H	3.5	15404.76	98251.66		
1207.321	0.013	82828	1207.319	0.002	10	5	15.91		0.02	0.003	82828.18	p6fd	3F4H4	6.5	p6fp	3L4K	5.5	114722.02	197550.2	f	
1207.972	0.006	82783.3	1207.9696	0.0024	48	13	33.7	34.66	0.05	0.0017	82783.54	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5F6D	4.5	12468.47	95252.01		
1208.142	0.006	82771.7	1208.138	0.004	81	31	119.9		-0.1	0.003	82772.01	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5G4F	4.5	27766.68	110538.69		
1208.258	0.006	82763.8	1208.2533	0.0047	77	31	48.83	48.99	-0.02	0.0023	82764.1	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5F4F	3.5	24735.79	107499.89		
1208.482	0.006	82748.5	1208.4764	0.0056	77	25	635.3	628.5	-0.42	0.0017	82748.82	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6K	7.5	82921.38	165670.2		
1208.832	0.006	82724.5	1208.8453	-0.0133	59	13	111.5	109.6	-0.04	0.0017	82723.57	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I4I	5.5	85740.26	168463.83		
1209.173	0.006	82701.1	1209.1629	0.0101	14	1	12.25		-0.01	0.0017	82701.84	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5F6G	5.5	19331.49	102033.33		
1209.923	0.013	82649.9	1209.9209	0.0021	173	58	50.2	51.69	-0.13	0.0021	82650.03	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I6L	6.5	6507.79	89157.82	p	

TABLE B.1 – suite

1210.007	0.013	82644.2	1210.0107	-0.0037	126	28	26.7		-0.06	0.0019	82643.9	p6fd	5I4G	4.5	p6fp	5G6H	5.5	92187.41	174831.31	p
1210.508	0.006	82610	1210.501	0.007	243	114	205	204.5	-0.38	0.003	82610.39	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I6L	8.5	0	82610.39	
1211.117	0.006	82568.4	1211.115	0.002	85	21	626	624.8	0.21	0.0021	82568.54	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5I4H	5.5	79743.09	162311.63	
1211.5	0.006	82542.3	1211.4943	0.0057	15		36.48		0.07	0.0018	82542.69	p6fd	5I4G	3.5	p6fp	5F6G	4.5	95872.73	178415.42	
1211.678	0.006	82530.1	1211.6738	0.0042	4		104.1		-0.02	0.002	82530.46	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5I4I	4.5	88456.69	170987.15	
1212.603	0.006	82467.2	1212.613	-0.01	43		82.43		-0.03	0.003	82466.55	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3L2I	6.5	33555.7	116022.25	
1213.381	0.006	82414.3	1213.3747	0.0063	106	34	849.6	850.3	0.12	0.0016	82414.77	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6I	6.5	82921.38	165336.15	
1213.514	0.006	82405.3	1213.5112	0.0028	222	97	235.9	235	0.16	0.0016	82405.5	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I4H	4.5	12468.47	94873.97	
1213.75	0.006	82389.3	1213.7506	-0.0006	4		12.87		-0.02	0.002	82389.25	p6f11	2H2H2	4.5	p6fs	5F6F	5.5	36814.62	119203.87	
1213.954	0.006	82375.5	1213.9557	-0.0017	44		133.7	125.6	-0.02	0.0023	82375.33	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I4I	7.5	73426.4	155801.73	
1214.012	0.013	82371.5	1214.022	-0.01	54	52	23.1		0.03	0.004	82370.9	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	5G4I	7.5	28312.44	110683.3	p
1214.162	0.006	82361.3	1214.1598	0.0022	97	29	802.8	800.3	-0.24	0.0023	82361.48	p6fd	5I6H	4.5	p6fp	5I6H	4.5	83708.51	166069.99	
1214.512	0.006	82337.6	1214.5106	0.0014	4		14.74		0.01	0.0016	82337.69	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5F4F	4.5	90711.46	173049.15	
1215.169	0.006	82293.1	1215.1615	0.0075	176	31	849.5	835	-0.17	0.0021	82293.59	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6K	7.5	83376.61	165670.2	
1215.364	0.006	82279.9	1215.3563	0.0077	52	3	247.7	244.7	-0.32	0.0016	82280.4	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I4K	6.5	86559.22	168839.62	
1215.406	0.006	82277	1215.4024	0.0036	64	8	744.9		0.24	0.0019	82277.28	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5F6G	5.5	93829.42	176106.7	
1215.63	0.013	82261.9	1215.6336	-0.0036	69		14.9		0.02	0.0022	82261.63	p6fd	5I4K	5.5	p6fp	5F6G	4.5	96153.79	178415.42	asym
1215.795	0.006	82250.7	1215.8007	-0.0057	65		147.8		-0.05	0.0021	82250.32	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5F4F	4.5	90798.83	173049.15	
1216.149	0.006	82226.7	1216.1547	-0.0057	130	30	406.4	408.7	-0.13	0.0019	82226.38	p6fd	5I6I	5.5	p6fp	5I6I	6.5	83109.77	165336.15	
1216.174	0.013	82225.1	1216.1771	-0.0031	56		264.3		-0.07	0.0016	82224.87	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5F4G	5.5	91511.1	173735.97	p
1216.608	0.006	82195.8	1216.6072	0.0008	128	27	885.2	886.2	-0.21	0.0019	82195.8	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5I6I	7.5	78916.83	161112.63	
1216.839	0.006	82180.2	1216.837	0.002	144	34	834.1	826.5	-0.12	0.003	82180.25	p6fd	5I4K	8.5	p6fp	5I6K	8.5	79154.17	161334.42	
1217.043	0.013	82166.4	1217.0612	-0.0182	103	22	57.06	73.61	-0.02	0.0023	82165.14	p6fd	5I6I	4.5	p6fp	5F6G	4.5	86400.9	168566.04	asym
1217.934	0.006	82106.3	1217.9283	0.0057	48	10	417.5		0.17	0.002	82106.64	p6fd	5F6H	4.5	p6fp	5F6G	4.5	96308.78	178415.42	
1218.097	0.009	82095.3	1218.0927	0.0043	132	32	51.06		-0.09	0.0016	82095.56	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5G6G	6.5	19331.49	101427.05	D
1218.097	0.009	82095.3	1218.1028	-0.0058	132	32	528.4	528.9	0.16	0.0022	82094.88	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I4K	6.5	86744.74	168839.62	D
1218.293	0.013	82082.1	1218.2872	0.0058	25	2	202.6	202.2	-0.02	0.0022	82082.45	p6fd	5I6L	7.5	p6fp	5I4K	6.5	86757.17	168839.62	asym
1218.828	0.006	82046.1	1218.821	0.007	114	29	522.6	524	0.28	0.003	82046.5	p6fd	5I6G	6.5	p6fp	5I4H	6.5	74536.2	156582.7	
1219.085	0.006	82028.7	1219.0855	-0.0005	63	9	425.9	376.6	-0.11	0.0025	82028.7	p6fd	5I6I	3.5	p6fp	5I6I	3.5	88834.04	170862.74	
1219.283	0.006	82015.4	1219.2802	0.0028	140	38	64.34	63.85	0.11	0.0018	82015.6	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I4G	4.5	10171.81	92187.41	
1219.397	0.006	82007.8	1219.3925	0.0045	167	44	81.77	81.45	0.14	0.0017	82008.05	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I4I	5.5	12468.47	94476.52	
1219.859	0.006	81976.7	1219.8485	0.0105	40		97.81	100.3	0.11	0.0016	81977.39	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5F4G	5.5	82921.38	164898.77	
1219.924	0.006	81972.3	1219.922	0.002	218	70	1065	1059	0.55	0.003	81972.45	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I6K	8.5	79361.97	161334.42	
1220.127	0.006	81958.7	1220.1303	-0.0033	114	10	233.7	229.6	0.02	0.0022	81958.46	p6fd	5I4K	8.5	p6fp	5I6I	7.5	79154.17	161112.63	
1220.277	0.006	81948.6	1220.2726	0.0044	138	31	53.83	54.45	-0.07	0.0019	81948.9	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I6K	5.5	6507.79	88456.69	
1220.689	0.013	81921	1220.6815	0.0075	16		161.5		-0.05	0.0023	81921.45	p6fd	5I6I	4.5	p6fp	5I6I	4.5	86400.9	168322.35	p
1220.933	0.006	81904.6	1220.9325	0.0005	90		359.2	355.1	0.08	0.0017	81904.61	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I4I	5.5	86559.22	168463.83	
1221.3	0.006	81880	1221.2977	0.0023	31		18.06		0.07	0.0024	81880.12	p6fd	5I6L	5.5	p6fp	5F4F	4.5	91169.03	173049.15	

TABLE B.1 – suite

1221.442	0.013	81870.5	1221.454	-0.012	28		13.53		-0.03	0.003	81869.67	p6fd	5I6G	3.5	p6fp	5F4D	3.5	91468.43	173338.1	p
1221.484	0.006	81867.6	1221.4807	0.0033	129	23	591.4	586.2	0.09	0.0022	81867.85	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5I4I	6.5	79743.09	161610.94	
1221.928	0.006	81837.9	1221.938	-0.01	86		140.5	138.7	-0.03	0.0023	81837.21	p6fd	5I6H	4.5	p6fp	5I6H	5.5	83708.51	165545.72	
1222.313	0.006	81812.1	1222.314	-0.001	83	7	326.1	322.7	0.03	0.003	81812.05	p6fd	5I4L	9.5	p6fp	5I6K	8.5	79522.37	161334.42	
1222.821	0.006	81778.1	1222.8238	-0.0028	115	40	79.6	77.56	0.05	0.0016	81777.93	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4I	4.5	15404.76	97182.69	
1223.059	0.006	81762.2	1223.0452	0.0138	14		32.5		0.01	0.0017	81763.13	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I6I	4.5	86559.22	168322.35	
1223.232	0.006	81750.7	1223.2317	0.0003	204	61	1457	1459	-0.16	0.0023	81750.66	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I6I	7.5	79361.97	161112.63	
1224.069	0.006	81694.8	1224.0678	0.0012	95	13	62.34	59.65	0.06	0.0021	81694.82	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	3H4H4	6.5	26707.61	108402.43	
1224.136	0.006	81690.2	1224.1477	-0.0117	5		14.18	13.82	-0.01	0.0019	81689.49	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5I6K	5.5	78916.83	160606.32	
1225.033	0.006	81630.5	1225.0371	-0.0041	239	76	130.5		0.15	0.0017	81630.18	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5F6G	5.5	94476.52	176106.7	
1225.796	0.006	81579.6	1225.7936	0.0024	256	61	1833	1836	0.38	0.0024	81579.8	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I6I	8.5	73426.4	155006.2	
1226.272	0.006	81547.9	1226.2632	0.0088	86		64.65		-0.13	0.0018	81548.56	p6fd	5I4G	4.5	p6fp	5F4G	5.5	92187.41	173735.97	
1226.404	0.006	81539.2	1226.4076	-0.0036	120	15	65.28		-0.05	0.0024	81538.96	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	3K4K2	5.5	27766.68	109305.64	
1226.576	0.009	81527.7	1226.573	0.003	9		21.94		-0.04	0.003	81527.95	p6fd	3L2I	6.5	p6fp	3L4K	5.5	116022.25	197550.2	D
1226.576	0.009	81527.7	1226.5735	0.0025	9		35.63		0.01	0.0022	81527.93	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I6I	3.5	89334.81	170862.74	D
1227.253	0.006	81482.8	1227.253	0	58		12.02		0.03	0.003	81482.77	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	5S4D	3.5	22416.28	103899.05	
1227.722	0.013	81451.6	1227.7389	-0.0169	94	5	38.83		-0.11	0.0019	81450.54	p6fd	5I4G	5.5	p6fp	5I6I	4.5	86871.81	168322.35	asym
1228.651	0.006	81390.1	1228.648	0.003	263	81	2173	2170	0.99	0.003	81390.25	p6fd	5I6I	8.5	p6fp	5I6K	9.5	73707.86	155098.11	
1228.815	0.006	81379.2	1228.8226	-0.0076	22		104.8		0.02	0.0023	81378.71	p6fd	5G6I	6.5	p6fp	5G6H	5.5	103182.95	184561.66	
1229.416	0.006	81339.4	1229.4182	-0.0022	245	51	147.4	150.6	-0.14	0.0016	81339.29	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I4H	5.5	10171.81	91511.1	
1230.039	0.006	81298.2	1230.037	0.002	322	129	3036	3045	-0.29	0.003	81298.34	p6fd	5I6I	8.5	p6fp	5I6I	8.5	73707.86	155006.2	
1230.538	0.006	81265.3	1230.534	0.004	246	80	1411	1402	0.22	0.003	81265.53	p6fd	5I6G	6.5	p6fp	5I4I	7.5	74536.2	155801.73	
1231.03	0.006	81232.8	1231.0309	-0.0009	24		142.4		-0.17	0.0017	81232.73	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5F6G	5.5	94873.97	176106.7	
1231.263	0.006	81217.4	1231.2705	-0.0075	14		54.23		-0.08	0.0018	81216.92	p6fd	3F4G4	5.5	p6fp	3L4K	6.5	112645.24	193862.16	
1231.393	0.006	81208.9	1231.3959	-0.0029	48	4	16.46		-0.01	0.0023	81208.65	p6f11	2H2H2	4.5	p6fs	5I4I	4.5	36814.62	118023.27	
1231.664	0.013	81191	1231.67	-0.006	5		37.18		-0.18	0.004	81190.59	p6fd	5I4K	7.5	p6fp	3K2L2	8.5	89948.63	171139.22	bl
1232.051	0.006	81165.5	1232.038	0.013	36	3	50.92		0.03	0.003	81166.32	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3F4H4	6.5	33555.7	114722.02	
1232.547	0.006	81132.8	1232.5339	0.0131	52		18.62		0.02	0.0019	81133.67	p6fd	5I4K	6.5	p6fp	5G6H	5.5	93697.64	174831.31	
1232.605	0.006	81129	1232.5968	0.0082	50		13.76		0.02	0.0021	81129.53	p6fd	5I4G	3.5	p6fp	5G6H	4.5	95872.73	177002.26	
1234.293	0.013	81018	1234.294	-0.001	31		51.27		-0.03	0.004	81017.99	p6fd	3L4I	7.5	p6fp	3L4K	6.5	112844.17	193862.16	asym
1234.482	0.006	81005.7	1234.486	-0.004	112	7	14.63	14.2	-0.01	0.003	81005.35	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5F6H	6.5	19331.49	100336.84	
1234.607	0.006	80997.4	1234.603	0.004	31		31.66		-0.14	0.003	80997.67	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	5S4D	3.5	22416.28	103413.95	
1235.12	0.006	80963.8	1235.119	0.001	60	2	20.14	20.45	-0.01	0.0021	80963.86	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5F4H	5.5	26707.61	107671.47	
1236.036	0.006	80903.8	1236.0325	0.0035	131	30	23.48	23.17	0.09	0.0019	80904.02	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5F6H	4.5	15404.76	96308.78	
1236.653	0.013	80863.4	1236.656	-0.003	4		23.99	24.01	-0.02	0.0023	80863.23	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5I6K	5.5	79743.09	160606.32	bl
1236.789	0.006	80854.5	1236.7866	0.0024	125	18	413.2		0.32	0.0018	80854.69	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5F6G	5.5	95252.01	176106.7	
1237.279	0.006	80822.5	1237.281	-0.002	35		61.5	62.87	-0.12	0.003	80822.38	p6fd	5I4K	7.5	p6fp	3K4I2	7.5	89948.63	170771.01	
1238.417	0.013	80748.3	1238.405	0.012	66	22	12.02		0.02	0.0022	80749.03	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4K	5.5	15404.76	96153.79	p
1238.905	0.013	80716.4	1238.9162	-0.0112	142		204.9		0.05	0.0025	80715.71	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I4I	4.5	90271.44	170987.15	p



TABLE B.1 – suite

1239.259	0.006	80693.4	1239.2575	0.0015	98	13	422.2		0.22	0.0023	80693.48	p6fd	5F6H	4.5	p6fp	5G6H	4.5	96308.78	177002.26	
1239.498	0.006	80677.8	1239.5002	-0.0022	90		188.7	198.8	0.05	0.0019	80677.68	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6K	7.5	84992.52	165670.2	
1239.835	0.013	80655.9	1239.83	0.005	27		10.3	11.17	-0.01	0.003	80656.23	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5F4H	5.5	19331.49	99987.72	p
1239.976	0.006	80646.8	1239.965	0.011	10		16.76		-0.05	0.004	80647.47	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	5D6G	6.5	41609.23	122256.7	
1240.281	0.006	80626.9	1240.279	0.002	79		18.11		0.06	0.0021	80627.02	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5F6D	4.5	10171.81	90798.83	
1240.829	0.006	80591.3	1240.829	0	185	49	1684		0.41	0.003	80591.3	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I6I	3.5	90271.44	170862.74	
1241.62	0.006	80540	1241.6245	-0.0045	248	63	203.8	201.4	0.14	0.0015	80539.65	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I4H	5.5	10171.81	90711.46	
1242.228	0.006	80500.5	1242.234	-0.006	68	7	19.46		-0.05	0.003	80500.16	p6fd	3L2I	6.5	p6fp	3L4K	5.5	117050.04	197550.2	
1242.583	0.006	80477.5	1242.577	0.006	5		14.75		-0.05	0.003	80477.89	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5S6P	3.5	94873.97	175351.86	
1242.729	0.006	80468.1	1242.7305	-0.0015	107		28.45	27.76	-0.05	0.0017	80467.97	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4G	3.5	15404.76	95872.73	
1242.84	0.006	80460.9	1242.844	-0.004	58		77.22		-0.13	0.004	80460.6	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3L4K	7.5	33555.7	114016.3	
1243.099	0.013	80444.1	1243.104	-0.005	122	2	41.82		-0.06	0.003	80443.8	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5G6I	4.5	27766.68	108210.48	asym
1243.369	0.006	80426.6	1243.3722	-0.0032	210	52	142.7	142.5	0.19	0.0016	80426.44	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I4I	6.5	10171.81	90598.25	
1243.716	0.006	80404.2	1243.723	-0.007	73	10	78.16		-0.08	0.004	80403.8	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3L4L	6.5	41609.23	122013	
1244.051	0.006	80382.5	1244.0452	0.0058	70	4	89.81	94.7	0.08	0.0021	80382.93	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5I4K	6.5	88456.69	168839.62	
1244.336	0.006	80364.1	1244.338	-0.002	219	64	90.24	92.42	0.15	0.0017	80364.02	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4G	5.5	6507.79	86871.81	
1244.659	0.006	80343.3	1244.6537	0.0053	44		72.41	71.88	-0.01	0.0018	80343.63	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6I	6.5	84992.52	165336.15	
1244.948	0.006	80324.6	1244.9466	0.0014	103	39	424.8	421.5	0.04	0.0025	80324.73	p6fd	5I6K	8.5	p6fp	5I6K	7.5	85345.47	165670.2	
1245.82	0.006	80268.4	1245.8224	-0.0024	83		237		0.11	0.0021	80268.26	p6fd	3L4I	6.5	p6fp	3L4K	6.5	113593.9	193862.16	
1246.115	0.006	80249.4	1246.1155	-0.0005	176	41	62.16	62.81	-0.14	0.0022	80249.38	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I6L	7.5	6507.79	86757.17	
1246.305	0.006	80237.2	1246.3086	-0.0036	309	178	327.5	327.9	-0.23	0.0022	80236.95	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I6K	6.5	6507.79	86744.74	
1247.079	0.006	80187.4	1247.0644	0.0146	63		51.58		-0.09	0.0022	80188.32	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5I4I	4.5	90798.83	170987.15	
1248.291	0.006	80109.5	1248.2937	-0.0027	110		437.4	602.1	0.11	0.0021	80109.35	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5F6G	4.5	88456.69	168566.04	
1248.438	0.009	80100.1	1248.442	-0.004	73		227.3		0.2	0.003	80099.85	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5S6P	3.5	95252.01	175351.86	D
1248.438	0.009	80100.1	1248.4452	-0.0072	73		12.35	14.48	-0.03	0.0025	80099.63	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I6K	4.5	10171.81	90271.44	D
1248.681	0.006	80084.5	1248.6713	0.0097	64		44.91		-0.03	0.002	80085.13	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5G6F	4.5	93829.42	173914.55	
1249.021	0.013	80062.7	1249.0022	0.0188	44		161.6		-0.22	0.0025	80063.91	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5I6I	3.5	90798.83	170862.74	f
1249.196	0.006	80051.5	1249.1969	-0.0009	71		17.97	16.36	-0.04	0.0016	80051.43	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I6H	5.5	6507.79	86559.22	
1249.885	0.006	80007.4	1249.8884	-0.0034	93		346	338	0.05	0.0021	80007.14	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5I4I	5.5	88456.69	168463.83	
1250.591	0.006	79962.2	1250.572	0.019	73	1	43.57		0.04	0.003	79963.43	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3L4K	5.5	41609.23	121572.66	Q
1250.665	0.006	79957.5	1250.6669	-0.0019	51		71.94		0.08	0.0017	79957.34	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5G6H	5.5	94873.97	174831.31	
1250.722	0.013	79953.8	1250.7362	-0.0142	33		22.41		0.09	0.0023	79952.91	p6fd	5I4K	5.5	p6fp	5F6G	5.5	96153.79	176106.7	asym
1251.09	0.013	79930.3	1251.0956	-0.0056	58		68.11	73.07	-0.11	0.0017	79929.94	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I6K	7.5	85740.26	165670.2	bl
1251.491	0.006	79904.7	1251.4894	0.0016	129	28	109.8	106.2	0.12	0.0022	79904.79	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5F4H	5.5	27766.68	107671.47	
1252.1	0.006	79865.8	1252.1026	-0.0026	218	65	2124		0.45	0.0021	79865.66	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5I6I	4.5	88456.69	168322.35	
1252.381	0.013	79847.9	1252.3913	-0.0103	86		39.8	40.72	-0.09	0.0018	79847.25	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5F6D	4.5	15404.76	95252.01	p
1252.846	0.006	79818.3	1252.848	-0.002	176	11	1169	1168	-0.21	0.003	79818.12	p6fd	5I6L	5.5	p6fp	5I4I	4.5	91169.03	170987.15	
1253.046	0.013	79805.5	1253.0471	-0.0011	117	14	347.9	344.6	0.17	0.0016	79805.46	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I6H	5.5	85740.26	165545.72	asym

TABLE B.1 – suite

1253.165	0.006	79797.9	1253.1655	-0.0005	28		21.85		-0.03	0.0021	79797.92	p6fd	5F6H	4.5	p6fp	5F6G	5.5	96308.78	176106.7		
1253.416	0.006	79782	1253.41	0.006	47		43.8		-0.03	0.003	79782.33	p6fd	3L4K	6.5	p6fp	3L4K	5.5	117767.87	197550.2		
1253.901	0.006	79751.1	1253.9007	0.0003	93	4	584.3		0.15	0.0019	79751.13	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F6G	4.5	98664.29	178415.42		
1254.183	0.006	79733.2	1254.1825	0.0005	219	63	39.64	36.95	0.04	0.0024	79733.21	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5F4F	3.5	27766.68	107499.89		
1254.404	0.006	79719.1	1254.407	-0.003	165	23	47.15	47.45	-0.12	0.002	79718.94	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I4G	4.5	12468.47	92187.41		
1254.901	0.006	79687.6	1254.9026	-0.0016	63		100.7	100.9	-0.03	0.0024	79687.46	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I6H	6.5	73426.4	153113.86		
1254.981	0.006	79682.5	1254.9746	0.0064	154	24	10.68		0.01	0.002	79682.89	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5G4G	5.5	26707.61	106390.5	D	
1254.981	0.006	79682.5	1254.9917	-0.0107	154	24	795.3	791.6	-0.28	0.0023	79681.8	p6fd	5I6L	6.5	p6fp	5I4K	6.5	89157.82	168839.62	D	
1255.191	0.006	79669.2	1255.1919	-0.0009	48		141.3	139.3	0.07	0.0022	79669.09	p6fd	5I6I	4.5	p6fp	5I6H	4.5	86400.9	166069.99		
1257.561	0.013	79519	1257.566	-0.005	7		121.9		-0.13	0.003	79518.72	p6fd	5I6G	3.5	p6fp	5I4I	4.5	91468.43	170987.15	bl	
1257.687	0.006	79511	1257.6913	-0.0043	132		554.9	547.7	0.47	0.0016	79510.77	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I6H	4.5	86559.22	166069.99		
1257.768	0.006	79505.9	1257.763	0.005	42		59.14		0.13	0.004	79506.21	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3I2L1	7.5	44390.14	123896.35		
1258.043	0.006	79488.5	1258.047	-0.004	91	5	299.5		-0.14	0.003	79488.31	p6fd	5I6I	3.5	p6fp	5I6I	4.5	88834.04	168322.35		
1258.347	0.006	79469.3	1258.349	-0.002	169	40	73.62	73.01	-0.07	0.0017	79469.21	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4H	4.5	15404.76	94873.97		
1258.956	0.006	79430.9	1258.958	-0.002	167	23	823.7		-0.44	0.003	79430.79	p6fd	5I6H	3.5	p6fp	5I6H	4.5	86639.2	166069.99		
1259.014	0.006	79427.2	1259.009	0.005	60		20.95	10.23	-0.02	0.004	79427.58	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5G6G	4.5	27766.68	107194.26		
1259.1	0.006	79421.8	1259.0986	0.0014	57		10.86		-0.01	0.0018	79421.9	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5F4G	5.5	24735.79	104157.69		
1259.537	0.006	79394.2	1259.536	0.001	107		406.9		-0.19	0.003	79394.31	p6fd	5I6G	3.5	p6fp	5I6I	3.5	91468.43	170862.74		
1260.054	0.006	79361.7	1260.0494	0.0046	239	40	68.54	69.01	-0.37	0.0025	79361.97	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I6H	7.5	0	79361.97		
1260.512	0.006	79332.8	1260.5127	-0.0007	167	27	78.8	82.26	0.13	0.0017	79332.8	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5F4G	5.5	19331.49	98664.29		
1260.933	0.006	79306.4	1260.9385	-0.0055	197	34	1469	1468	-0.21	0.0023	79306.01	p6fd	5I6L	6.5	p6fp	5I4I	5.5	89157.82	168463.83		
1261.215	0.006	79288.6	1261.217	-0.002	178	32	46.05		0.05	0.004	79288.47	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3L4I	7.5	33555.7	112844.17		
1261.437	0.006	79274.7	1261.437	0	112	15	20.3	20.35	0.03	0.003	79274.69	p6fd	5I6H	4.5	p6fp	5I6K	4.5	83708.51	162983.2		
1262.11	0.006	79232.4	1262.1088	0.0012	301	142	146	146.2	0.26	0.0016	79232.47	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4H	6.5	6507.79	85740.26		
1262.309	0.006	79219.9	1262.3118	-0.0028	60	6	766.6		-0.46	0.002	79219.73	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5F4F	4.5	93829.42	173049.15		
1262.593	0.006	79202.1	1262.5966	-0.0036	66	8	437.4	436.6	0.22	0.0021	79201.86	p6fd	5I6I	5.5	p6fp	5I4H	5.5	83109.77	162311.63		
1262.653	0.006	79198.3	1262.6553	-0.0023	91	4	26.52	33.61	-0.11	0.0018	79198.18	p6fd	5I4G	5.5	p6fp	5I6H	4.5	86871.81	166069.99		
1263.082	0.006	79171.4	1263.082	0	50		113.4		-0.08	0.003	79171.4	p6fd	5F6P	3.5	p6fp	5F6G	4.5	89394.64	168566.04		
1263.215	0.006	79163.1	1263.212	0.003	65		17.75	16.68	-0.01	0.003	79163.26	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5S4D	3.5	24735.79	103899.05		
1263.29	0.006	79158.4	1263.2881	0.0019	97		130	124.8	0.17	0.0016	79158.51	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5F4G	5.5	85740.26	164898.77		
1263.36	0.006	79154	1263.3573	0.0027	346	174	238.2	239.2	-0.4	0.0025	79154.17	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I4K	8.5	0	79154.17		
1263.505	0.006	79144.9	1263.5066	-0.0016	148	28	934.7	933.9	-0.27	0.0022	79144.82	p6fd	5I6I	4.5	p6fp	5I6H	5.5	86400.9	165545.72		
1263.59	0.009	79139.6	1263.581	0.009	79		91.72		-0.14	0.003	79140.14	p6fd	3F4H4	6.5	p6fp	3L4K	6.5	114722.02	193862.16	D	
1263.59	0.009	79139.6	1263.587	0.003	79		19.96		0.02	0.003	79139.78	p6fd	5G6G	4.5	p6fp	5G6H	5.5	105421.88	184561.66	D	
1263.763	0.006	79128.8	1263.7589	0.0041	62		227.3		0.12	0.0022	79129.02	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I4I	5.5	89334.81	168463.83		
1263.982	0.006	79115.1	1263.979	0.003	412	223	6157	6133	-1	0.004	79115.21	p6fd	5I6K	9.5	p6fp	5I6K	9.5	75982.9	155098.11		
1264.673	0.006	79071.8	1264.674	-0.001	118	22	38.83	37.76	-0.1	0.0018	79071.76	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4I	5.5	15404.76	94476.52		
1264.888	0.013	79058.4	1264.897	-0.009	61		29.05		0.03	0.006	79057.8	p6f11	2L2L	8.5	p6fd	3L4L	7.5	42580.9	121638.7	bl	
1265.144	0.013	79042.4	1265.133	0.011	86	19	401.8		-0.31	0.003	79043.08	p6fd	5F6H	4.5	p6fp	5S6P	3.5	96308.78	175351.86		

TABLE B.1 – suite

1265.17	0.006	79040.8	1265.1729	-0.0029	66		526.1		0.22	0.0018	79040.58	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5G6F	4.5	94873.97	173914.55	
1265.449	0.006	79023.3	1265.45	-0.001	127	7	213.6	203.2	0.02	0.003	79023.3	p6fd	5I6K	9.5	p6fp	5I6I	8.5	75982.9	155006.2	
1265.915	0.006	78994.3	1265.9074	0.0076	98	7	256.4		-0.46	0.0021	78994.72	p6fs	5I4I	7.5	p6fp	5G6H	6.5	103116.42	182111.14	
1266.037	0.006	78986.7	1266.0391	-0.0021	261	81	1534	1516	-0.3	0.0015	78986.5	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I6H	5.5	86559.22	165545.72	
1266.968	0.013	78928.6	1266.974	-0.006	46		331.7		0.23	0.003	78928.19	p6fd	5G6I	6.5	p6fp	5G6H	6.5	103182.95	182111.14	p
1267.223	0.006	78912.7	1267.2178	0.0052	188	48	1084	1080	0.32	0.0023	78913.03	p6fd	5I6L	7.5	p6fp	5I6K	7.5	86757.17	165670.2	
1267.58	0.006	78890.5	1267.5719	0.0081	61	8	251.9	253.4	0.04	0.0023	78890.99	p6fd	5I4K	7.5	p6fp	5I4K	6.5	89948.63	168839.62	
1269.018	0.006	78801.1	1269.0198	-0.0018	285	129	2879	2874	0.65	0.0022	78800.98	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6H	5.5	86744.74	165545.72	
1269.337	0.006	78781.3	1269.339	-0.002	88	15	16.04		0.03	0.004	78781.14	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3F4H3	6.5	44390.14	123171.28	
1269.405	0.006	78777.1	1269.4072	-0.0022	53	5	246.4	235.3	0.08	0.0015	78776.93	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I6I	6.5	86559.22	165336.15	
1269.737	0.013	78756.5	1269.752	-0.015	26		41.11		0.18	0.003	78755.53	p6fd	5I4L	6.5	p6fp	5F6G	5.5	97351.17	176106.7	p
1270.258	0.006	78724.2	1270.26	-0.002	316	138	3124	3109	0.76	0.003	78724.03	p6fd	5I6L	8.5	p6fp	5I6K	8.5	82610.39	161334.42	
1270.416	0.006	78714.4	1270.4177	-0.0017	55		29.58	25.7	-0.04	0.0024	78714.27	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5G6G	4.5	26707.61	105421.88	
1270.64	0.009	78700.5	1270.639	0.001	61		16.08	15.64	-0.1	0.003	78700.56	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I6L	5.5	12468.47	91169.03	D
1270.64	0.009	78700.5	1270.642	-0.002	61		193.9		-0.07	0.006	78700.4	p6f11	2L2L	8.5	p6fd	3M2K	7.5	42580.9	121281.29	D
1270.822	0.006	78689.2	1270.8166	0.0054	240	62	1379	1358	0.28	0.0018	78689.56	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I4I	6.5	82921.38	161610.94	
1271.063	0.006	78674.3	1271.0694	-0.0064	105		111.1	138	0.09	0.0017	78673.91	p6fd	5I4G	5.5	p6fp	5I6H	5.5	86871.81	165545.72	
1271.255	0.006	78662.4	1271.2531	0.0019	96	12	552.4		-0.25	0.002	78662.54	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5G6F	4.5	95252.01	173914.55	
1271.611	0.006	78640.4	1271.605	0.006	31		948		0.91	0.003	78640.79	p6fd	5G6G	6.5	p6fp	5G6H	7.5	101427.05	180067.84	
1271.88	0.006	78623.7	1271.8792	0.0008	121	22	63.89	66.21	0.06	0.0021	78623.82	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5G4G	5.5	27766.68	106390.5	
1272.217	0.006	78602.9	1272.2141	0.0029	200	35	980.8	977.7	-0.58	0.0025	78603.12	p6fd	5I6H	4.5	p6fp	5I4H	5.5	83708.51	162311.63	
1272.407	0.013	78591.2	1272.4037	0.0033	301	121	1008	1006	-0.13	0.0022	78591.41	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6I	6.5	86744.74	165336.15	asym
1272.603	0.013	78579.1	1272.605	-0.002	232	53	1453	1452	0.21	0.0022	78578.98	p6fd	5I6L	7.5	p6fp	5I6I	6.5	86757.17	165336.15	p
1272.621	0.006	78578	1272.626	-0.005	123	17	340.1	340.1	0.07	0.003	78577.66	p6fd	5I6G	6.5	p6fp	5I6H	6.5	74536.2	153113.86	
1273.685	0.006	78512.4	1273.688	-0.003	229	49	2176		0.93	0.003	78512.14	p6fd	5G4I	7.5	p6fp	5G6H	7.5	101555.7	180067.84	
1273.87	0.013	78501	1273.849	0.021	294	66	173.2		0.02	0.003	78502.24	p6fd	5I6L	8.5	p6fp	5I6I	7.5	82610.39	161112.63	D
1273.87	0.013	78501	1273.8664	0.0036	294	66	1072	1064	-0.29	0.0022	78501.17	p6fd	5I6I	5.5	p6fp	5I4I	6.5	83109.77	161610.94	D
1274.131	0.006	78484.8	1274.1332	-0.0022	344	126	194.8	193.8	0.42	0.002	78484.73	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I4I	7.5	6507.79	84992.52	
1274.473	0.006	78463.8	1274.4677	0.0053	48		49.03	34.02	-0.11	0.0023	78464.13	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5F4D	3.5	94873.97	173338.1	
1275.062	0.006	78427.6	1275.06	0.002	140	34	1021		-0.19	0.003	78427.7	p6fd	5F4H	5.5	p6fp	5F6G	4.5	99987.72	178415.42	
1275.113	0.013	78424.4	1275.1091	0.0039	83		23.4	23.9	0.14	0.002	78424.66	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5F6H	5.5	15404.76	93829.42	p
1275.333	0.006	78410.9	1275.336	-0.003	46	8	45.33	44.77	-0.01	0.002	78410.71	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5I6I	5.5	78916.83	157327.54	
1276.198	0.006	78357.7	1276.195	0.003	60		562.5		-0.64	0.003	78357.95	p6fs	5I6I	8.5	p6fp	5G6H	7.5	101709.89	180067.84	
1276.315	0.013	78350.6	1276.324	-0.009	51	10	39.36		0.03	0.003	78349.99	p6fd	3H4I4	6.5	p6fp	5G6H	5.5	106211.67	184561.66	asym
1276.494	0.013	78339.6	1276.4944	-0.0004	74		355.2	338.7	-0.35	0.0016	78339.55	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5F4G	5.5	86559.22	164898.77	p
1277.386	0.006	78284.9	1277.3859	1.00E-04	112	22	45.8	46.2	-0.05	0.0021	78284.88	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I6K	5.5	10171.81	88456.69	
1278.069	0.013	78243	1278.0698	-0.0008	129	36	47.55	47.36	-0.17	0.0018	78242.99	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I4H	5.5	12468.47	90711.46	p
1278.123	0.006	78239.7	1278.122	0.001	54	10	203.7		-0.39	0.004	78239.8	p6fd	5D6F	4.5	p6fp	3L4K	5.5	119310.4	197550.2	

TABLE B.1 – suite

1278.217	0.006	78234	1278.2112	0.0058	252	81	2209	2173	0.69	0.0022	78234.33	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I4I	6.5	83376.61	161610.94	
1278.687	0.006	78205.2	1278.6762	0.0108	17		42.68		-0.07	0.0023	78205.88	p6fs	5F6F	5.5	p6fp	3L4K	5.5	119344.32	197550.2	
1278.897	0.009	78192.4	1278.895	0.002	92	4	39.71	40.75	0.03	0.003	78192.53	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5G6I	6.5	26707.61	104900.14	D
1278.897	0.009	78192.4	1278.897	0	92	4	51.23		-0.03	0.003	78192.39	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I4I	5.5	90271.44	168463.83	D
1278.916	0.013	78191.2	1278.9155	0.0005	37		120.1	113.3	-0.04	0.0019	78191.25	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6I	7.5	82921.38	161112.63	p
1279.17	0.006	78175.7	1279.1784	-0.0084	61	3	23.47		-0.02	0.0018	78175.18	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5F4F	4.5	94873.97	173049.15	
1279.247	0.006	78171	1279.2442	0.0028	40		59.11		0.05	0.0023	78171.16	p6fd	5G4G	5.5	p6fp	5G6H	5.5	106390.5	184561.66	
1279.941	0.006	78128.6	1279.9482	-0.0072	46		41.7	41.7	-0.07	0.0018	78128.16	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I4K	6.5	90711.46	168839.62	
1280.378	0.006	78102	1280.373	0.005	68	5	1034		0.78	0.004	78102.26	p6fd	3L4I	5.5	p6fp	3L4K	6.5	115759.9	193862.16	
1281.224	0.006	78050.4	1281.215	0.009	43		165.6		-0.04	0.003	78050.91	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I6I	4.5	90271.44	168322.35	
1281.359	0.006	78042.1	1281.3643	-0.0053	11		14.74		-0.03	0.002	78041.82	p6fd	5I4G	3.5	p6fp	5G6F	4.5	95872.73	173914.55	
1281.858	0.006	78011.8	1281.8613	-0.0033	73	14	128.5	125.4	0.07	0.0023	78011.56	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5I6K	6.5	79743.09	157754.65	
1282.489	0.006	77973.4	1282.496	-0.007	81	6	63.56		-0.08	0.003	77972.95	p6fd	3M4K	6.5	p6fp	3L4K	5.5	119577.25	197550.2	
1282.743	0.013	77957.9	1282.745	-0.002	45		86.56	92.01	-0.07	0.003	77957.81	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6K	8.5	83376.61	161334.42	p
1282.824	0.006	77953	1282.8169	0.0071	17		20.56		0.07	0.0023	77953.45	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5G6H	6.5	104157.69	182111.14	
1284.023	0.006	77880.2	1284.0152	0.0078	92	7	49.34		-0.08	0.0022	77880.7	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5G4G	5.5	27766.68	105647.38	
1284.439	0.006	77855	1284.446	-0.007	45		30.62	34.08	0.01	0.0018	77854.58	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5F6G	4.5	90711.46	168566.04	
1284.506	0.006	77850.9	1284.5017	0.0043	64		21.88	22.14	0.03	0.0017	77851.2	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5I4I	4.5	19331.49	97182.69	
1284.557	0.006	77847.9	1284.5474	0.0096	52		201.7	200.2	-0.45	0.0017	77848.43	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5F6D	4.5	86559.22	164407.65	
1284.643	0.006	77842.7	1284.637	0.006	22		10.36		0.02	0.003	77843.02	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	5G6H	4.5	28239.56	106082.58	
1284.688	0.006	77839.9	1284.688	0	1		562.4		-0.43	0.003	77839.91	p6fd	3L2I	6.5	p6fp	3L4K	6.5	116022.25	193862.16	
1285.296	0.006	77803.1	1285.298	-0.002	47	5	16.23		-0.03	0.003	77802.97	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I6K	4.5	12468.47	90271.44	
1285.393	0.006	77797.2	1285.3943	-0.0013	39	3	345.4		-0.2	0.002	77797.14	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5F4F	4.5	95252.01	173049.15	
1286.136	0.006	77752.3	1286.1344	0.0016	35		166	171.6	0.06	0.0018	77752.37	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I4I	5.5	90711.46	168463.83	
1287.013	0.006	77699.3	1287.006	0.007	34		366.4		-0.25	0.003	77699.72	p6fd	3I4I1	5.5	p6fp	3L4K	5.5	119850.48	197550.2	
1287.253	0.013	77684.8	1287.2508	0.0022	36		134.5	134.3	0.07	0.0019	77684.94	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6K	5.5	82921.38	160606.32	
1287.57	0.006	77665.7	1287.5669	0.0031	100	12	467.5	470	0.33	0.002	77665.87	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5I4H	6.5	78916.83	156582.7	
1287.866	0.006	77647.8	1287.8529	0.0131	19		15.57		0.05	0.0018	77648.62	p6fd	5I4I	4.5	p6fp	5G6H	5.5	97182.69	174831.31	
1288.435	0.013	77613.6	1288.439	-0.004	149	73	784.5	775.3	0.63	0.0022	77613.3	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5I6H	4.5	88456.69	166069.99	asym
1288.564	0.006	77605.8	1288.564	0	104	28	964.4		0.52	0.0022	77605.77	p6fd	5F6H	4.5	p6fp	5G6F	4.5	96308.78	173914.55	
1288.817	0.006	77590.5	1288.8171	-1.00E-04	63	10	133.6		0.41	0.0024	77590.53	p6fd	5F4H	4.5	p6fp	3K4K2	5.5	103907.65	181498.18	
1288.919	0.009	77584.4	1288.9181	0.0009	114	28	416.1	416.2	-0.07	0.0024	77584.45	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5I6I	5.5	79743.09	157327.54	D
1288.919	0.009	77584.4	1288.928	-0.009	114	28	51.19		-0.05	0.003	77583.83	p6f11	2K2K	6.5	p6fd	3K4I2	6.5	33555.7	111139.53	D
1291.29	0.006	77441.9	1291.2821	0.0079	18		190.8		0.06	0.002	77442.41	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F6G	5.5	98664.29	176106.7	
1291.543	0.006	77426.8	1291.536	0.007	113	30	301.1		-0.32	0.0021	77427.19	p6fd	5F6H	4.5	p6fp	5F4G	5.5	96308.78	173735.97	
1292.045	0.006	77396.7	1292.04	0.005	119	44	23.66		0.04	0.003	77397.01	p6fd	5I6L	5.5	p6fp	5F6G	4.5	91169.03	168566.04	
1292.407	0.006	77375	1292.404	0.003	38		78.15		0.12	0.004	77375.2	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3I4H1	6.5	41609.23	118984.4	
1292.992	0.006	77340	1292.9838	0.0082	74	8	10.09		0.02	0.002	77340.49	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	3K4K2	5.5	104157.69	181498.18	
1293.178	0.006	77328.9	1293.1839	-0.0059	41	7	22.37	22.32	-0.04	0.0019	77328.52	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I4K	6.5	91511.1	168839.62	

TABLE B.1 – suite

1294.302	0.006	77261.7	1294.3003	0.0017	30		79.43	78.56	-0.03	0.0023	77261.82	p6fd	5I6I	5.5	p6fp	5I6I	4.5	83109.77	160371.59	
1294.501	0.013	77249.8	1294.523	-0.022	47		38.52		-0.07	0.004	77248.6	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3L4L	7.5	44390.14	121638.7	p Q
1294.736	0.006	77235.8	1294.734	0.002	113	63	852.3	849.2	-0.52	0.003	77235.95	p6fd	5I6I	3.5	p6fp	5I6H	4.5	88834.04	166069.99	
1294.99	0.006	77220.7	1294.9891	0.0009	67	7	320.7	321.3	0.3	0.0025	77220.73	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I4H	6.5	79361.97	156582.7	
1295.161	0.006	77210.5	1295.152	0.009	3		273.8		0.25	0.003	77211	p6fd	5G6I	6.5	p6fp	5G6H	6.5	104900.14	182111.14	
1295.679	0.006	77179.6	1295.682	-0.003	30	6	13.23		0.01	0.003	77179.45	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3L2I	5.5	41609.23	118788.68	
1295.748	0.006	77175.5	1295.7326	0.0154	48	5	61.23		0.18	0.002	77176.42	p6fd	5I4G	3.5	p6fp	5F4F	4.5	95872.73	173049.15	
1296.036	0.006	77158.4	1296.0464	-0.0104	47	2	76.92	81.25	-0.1	0.0021	77157.73	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5I4I	4.5	93829.42	170987.15	
1296.133	0.013	77152.6	1296.121	0.012	56		96.33		0.15	0.003	77153.32	p6fd	5I6L	5.5	p6fp	5I6I	4.5	91169.03	168322.35	f
1297.2	0.006	77089.1	1297.2014	-0.0014	61	2	302.2	297.6	-0.08	0.0021	77089.03	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5I6H	5.5	88456.69	165545.72	
1299.492	0.013	76953.1	1299.4991	-0.0071	51	47	276.4	274.8	0.11	0.002	76952.73	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I4I	5.5	91511.1	168463.83	bl
1300.428	0.006	76897.8	1300.427	0.001	154	41	39.8	40.11	-0.03	0.003	76897.81	p6fd	5I6H	4.5	p6fp	5I6K	5.5	83708.51	160606.32	
1300.541	0.006	76891.1	1300.54	0.001	172	66	308		0.12	0.004	76891.15	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3M2K	7.5	44390.14	121281.29	
1300.644	0.006	76885	1300.6455	-0.0015	233	101	1502	1501	-0.55	0.0021	76884.9	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5I4I	7.5	78916.83	155801.73	
1301.181	0.013	76853.3	1301.17	0.011	33		916.7		0.33	0.003	76853.92	p6fd	5I6G	3.5	p6fp	5I6I	4.5	91468.43	168322.35	f
1301.412	0.006	76839.6	1301.4121	-1.00E-04	127	28	717.6	723.3	0.45	0.0024	76839.61	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5I4H	6.5	79743.09	156582.7	
1303.183	0.006	76735.2	1303.1832	-0.0002	143	63	1417		0.64	0.0022	76735.18	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I6H	4.5	89334.81	166069.99	
1303.791	0.006	76699.4	1303.781	0.01	227	130	56.9	57.18	-0.14	0.0019	76700	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I4G	5.5	10171.81	86871.81	
1304.209	0.006	76674.8	1304.2	0.009	40	6	206.7		-0.57	0.003	76675.35	p6fd	5F6P	3.5	p6fp	5I6H	4.5	89394.64	166069.99	
1304.414	0.013	76662.8	1304.409	0.005	134	63	813.9	818.8	0.17	0.003	76663.08	p6fd	5I6H	4.5	p6fp	5I6I	4.5	83708.51	160371.59	p
1304.676	0.013	76647.4	1304.673	0.003	351	216	5617	5608	0.95	0.0025	76647.56	p6fd	5I4K	8.5	p6fp	5I4I	7.5	79154.17	155801.73	asym
1305.127	0.013	76620.9	1305.127	0	16		368.2		-0.24	0.003	76620.9	p6fd	3L4K	5.5	p6fp	3L4K	5.5	120929.3	197550.2	p
1305.173	0.006	76618.2	1305.1692	0.0038	225	147	2903	2919	-0.61	0.002	76618.42	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I4I	6.5	84992.52	161610.94	
1305.673	0.01	76588.8	1305.693	-0.02	63	40	28.66		0.02	0.004	76587.7	p6f11	2K2K	7.5	p6fd	5G6I	6.5	28312.44	104900.14	f Q
1305.885	0.013	76576.4	1305.892	-0.007	192	84	59.82		-0.04	0.003	76576.02	p6fd	5I6I	4.5	p6fp	5I6I	3.5	86400.9	162976.92	asym
1306.223	0.006	76556.6	1306.225	-0.002	24		241.6		-0.18	0.003	76556.46	p6fd	5F4D	3.5	p6fp	5G6H	4.5	100445.8	177002.26	
1307.614	0.006	76475.2	1307.6111	0.0029	149	103	36.99	37	-0.04	0.0023	76475.34	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5G6I	6.5	26707.61	103182.95	
1308.218	0.006	76439.8	1308.22	-0.002	278	171	2348	2335	-0.69	0.003	76439.76	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I4I	7.5	79361.97	155801.73	
1308.661	0.006	76414	1308.6677	-0.0067	53	36	15.16	15.62	-0.04	0.0019	76413.59	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I6K	6.5	6507.79	82921.38	
1308.713	0.006	76410.9	1308.724	-0.011	37	7	282.3		0.32	0.003	76410.33	p6fd	3M4K	5.5	p6fp	3L4K	5.5	121139.87	197550.2	
1308.912	0.013	76399.3	1308.907	0.005	82	22	506.9	501.9	0.27	0.003	76399.65	p6fd	5F6H	6.5	p6fp	5I4I	5.5	92064.18	168463.83	asym
1309.093	0.013	76388.7	1309.1079	-0.0149	35		473.6	475.2	0.3	0.0024	76387.9	p6fd	5I6L	6.5	p6fp	5I6H	5.5	89157.82	165545.72	bl
1309.162	0.006	76384.7	1309.161	0.001	189	83	201.1		-0.37	0.003	76384.8	p6fd	5I4L	6.5	p6fp	5F4G	5.5	97351.17	173735.97	
1309.205	0.006	76382.2	1309.2074	-0.0024	186	76	818.6		0.21	0.0023	76382.09	p6fd	5F6G	5.5	p6fp	5F6G	4.5	102033.33	178415.42	
1309.899	0.006	76341.8	1309.897	0.002	137	51	690	684.6	-0.45	0.003	76341.9	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6K	8.5	84992.52	161334.42	
1309.971	0.006	76337.6	1309.968	0.003	205	119	899		0.28	0.003	76337.72	p6fd	5I6H	3.5	p6fp	5I6I	3.5	86639.2	162976.92	
1312.146	0.006	76211	1312.1481	-0.0021	160	66	874.5		-0.26	0.0021	76210.91	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I6H	5.5	89334.81	165545.72	
1312.722	0.006	76177.6	1312.7093	0.0127	137	71	23.4		-0.01	0.0023	76178.33	p6fd	5I6L	6.5	p6fp	5I6I	6.5	89157.82	165336.15	

TABLE B.1 – suite

1313.05	0.006	76158.6	1313.038	0.012	62		2165		-0.57	0.003	76159.23	p6fd	3H4H4	6.5	p6fp	5G6H	5.5	108402.43	184561.66	
1313.357	0.006	76140.8	1313.3534	0.0036	124	53	64.62	65.95	0.07	0.0024	76140.97	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5F4H	4.5	27766.68	103907.65	
1313.719	0.006	76119.8	1313.7133	0.0057	312	218	5025	5048	0.68	0.0021	76120.11	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6I	7.5	84992.52	161112.63	
1313.848	0.006	76112.3	1313.8329	0.0151	25	9	43.29		0.02	0.0019	76113.18	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5I4I	4.5	94873.97	170987.15	
1314.459	0.013	76076.9	1314.47	-0.011	99	64	119.6		-0.34	0.003	76076.3	p6fd	5G6G	4.5	p6fp	3K4K2	5.5	105421.88	181498.18	asym
1315.891	0.013	75994.1	1315.894	-0.003	127		23.09		0.2	0.003	75993.98	p6fd	5I4L	7.5	p6fp	3K4I2	7.5	94777.03	170771.01	asym
1315.982	0.006	75988.9	1315.981	0.001	336	162	3018	3039	-0.51	0.003	75988.95	p6fd	5I6K	8.5	p6fp	5I6K	8.5	85345.47	161334.42	
1316.187	0.006	75977	1316.178	0.009	107	37	922.7		-0.46	0.003	75977.54	p6fd	3L4K	5.5	p6fp	3L4K	5.5	121572.66	197550.2	
1316.242	0.006	75973.9	1316.248	-0.006	461	248	659.9		0.71	0.004	75973.52	p6fd	3I4K1	5.5	p6fp	3L4K	6.5	117888.64	193862.16	
1316.639	0.013	75950.9	1316.6391	-0.0001	95	61	42.47		-0.04	0.0023	75950.96	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5F6D	4.5	88456.69	164407.65	asym
1316.757	0.006	75944.2	1316.761	-0.004	232	123	188.8	183.6	0.21	0.003	75943.94	p6fd	5I4K	8.5	p6fp	5I6K	9.5	79154.17	155098.11	
1317.335	0.006	75910.8	1317.3368	-0.0018	180	50	883	886.3	-0.58	0.0024	75910.73	p6fd	5I6I	4.5	p6fp	5I4H	5.5	86400.9	162311.63	
1317.533	0.006	75899.5	1317.532	0.001	24	4	1017		-0.31	0.003	75899.47	p6fd	3H4I4	6.5	p6fp	5G6H	6.5	106211.67	182111.14	
1318.034	0.006	75870.6	1318.0322	0.0018	172	63	1193	1213	0.45	0.0018	75870.68	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I4I	6.5	85740.26	161610.94	
1318.101	0.006	75866.7	1318.1055	-0.0045	89	30	18.24		-0.03	0.0019	75866.46	p6fd	5I4I	4.5	p6fp	5F4F	4.5	97182.69	173049.15	
1318.36	0.006	75851.8	1318.356	0.004	467	255	4959	4985	-0.67	0.003	75852.03	p6fd	5I4K	8.5	p6fp	5I6I	8.5	79154.17	155006.2	
1318.648	0.006	75835.3	1318.646	0.002	162	81	147.4		-0.35	0.003	75835.38	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	5I4H	3.5	22416.28	98251.66	
1318.873	0.013	75822.3	1318.873 *	0	482	472	18130	18140	1	0.013	75822.3	p6fd	5I6L1	0.5	p6fp	5I6K	9.5	79275.8	155098.11	bl
1319.009	0.006	75814.5	1319.011	-0.002	145	13	357.7		-0.28	0.004	75814.36	p6fd	3I4H1	5.5	p6fp	3L4K	6.5	118047.8	193862.16	
1319.294	0.013	75798.1	1319.286	0.008	78	23	302.4		-0.27	0.003	75798.55	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I6H	4.5	90271.44	166069.99	p
1319.781	0.013	75770.2	1319.786	-0.005	295	139	5204		0.92	0.004	75769.86	p6fd	5F6H	6.5	p6fp	5F6G	5.5	100336.84	176106.7	p
1319.836	0.013	75767	1319.833	0.003	490	321	10600	10590	0.92	0.003	75767.16	p6fd	5I6K	8.5	p6fp	5I6I	7.5	85345.47	161112.63	p
1320.092	0.006	75752.3	1320.09	0.002	142	83	1318	1295	-0.51	0.0017	75752.41	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I4H	5.5	86559.22	162311.63	
1320.297	0.006	75740.5	1320.2898	0.0072	50	4	29.15		0.02	0.0024	75740.95	p6fd	5I6L	6.5	p6fp	5F4G	5.5	89157.82	164898.77	
1320.636	0.013	75721.1	1320.628	0.008	341	185	3725	3730	0.61	0.003	75721.57	p6fd	5I4K	7.5	p6fp	5I6K	7.5	89948.63	165670.2	D
1320.636	0.013	75721.1	1320.644	-0.008	341	185	327.8		-0.45	0.003	75720.64	p6fd	5G4G	5.5	p6fp	5G6H	6.5	106390.5	182111.14	D
1321.918	0.006	75647.7	1321.925	-0.007	110	18	18.23		-0.06	0.003	75647.27	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5S4D	3.5	27766.68	103413.95	
1321.978	0.013	75644.2	1321.978	0	245	108	1036	1041	0.39	0.003	75644.23	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I6I	8.5	79361.97	155006.2	p
1323.178	0.013	75575.6	1323.176	0.002	313	162	1892	1918	-0.54	0.004	75575.74	p6fd	5I4L	9.5	p6fp	5I6K	9.5	79522.37	155098.11	asym
1323.305	0.013	75568.4	1323.3036	0.0014	196	86	75.78	76.05	-0.28	0.0019	75568.45	p6f11	4I4I	5.5	p6fd	5I4H	6.5	10171.81	85740.26	p
1323.325	0.013	75567.2	1323.3309	-0.0059	26		771.8	771.3	0.39	0.0024	75566.89	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I4H	5.5	86744.74	162311.63	bl
1323.386	0.006	75563.8	1323.3822	0.0038	252	114	75.01		0.12	0.0022	75563.96	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5F4G	5.5	89334.81	164898.77	
1323.844	0.013	75537.6	1323.851	-0.007	71	27	1340		0.66	0.005	75537.2	p6fd	3L4L	6.5	p6fp	3L4K	5.5	122013	197550.2	bl
1324.787	0.006	75483.8	1324.787	0	844	397	12120	12130	1	0.003	75483.83	p6fd	5I4L	9.5	p6fp	5I6I	8.5	79522.37	155006.2	
1325.563	0.006	75439.7	1325.5599	0.0031	96	30	285.3	320.9	0.13	0.0019	75439.82	p6fd	5I4G	5.5	p6fp	5I4H	5.5	86871.81	162311.63	
1325.612	0.006	75436.9	1325.6251	-0.0131	151	49	567		0.34	0.002	75436.11	p6fd	3K4L2	6.5	p6fp	5G6H	5.5	109125.55	184561.66	
1325.911	0.006	75419.8	1325.91	0.001	456	421	15920	15930	1	0.004	75419.89	p6fd	5I6L	9.5	p6fp	5I6K	8.5	85914.53	161334.42	
1325.978	0.006	75416	1325.986	-0.008	162	41	102.3		0.3	0.003	75415.6	p6fd	5G6H	4.5	p6fp	3K4K2	5.5	106082.58	181498.18	
1326.489	0.013	75387	1326.4795	0.0095	446	235	7900	7900	-0.84	0.0024	75387.52	p6fd	5I4K	7.5	p6fp	5I6I	6.5	89948.63	165336.15	asym

TABLE B.1 – suite

1326.751	0.006	75372.1	1326.7461	0.0049	314	95	1293	1303	-0.72	0.0019	75372.37	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I6I	7.5	85740.26	161112.63	
1327.573	0.006	75325.4	1327.5678	0.0052	68	5	23.42		-0.02	0.0021	75325.72	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5F6G	5.5	26707.61	102033.33	
1328.148	0.006	75292.8	1328.136	0.012	226	100	415		0.6	0.004	75293.5	p6fd	5D6G	6.5	p6fp	3L4K	5.5	122256.7	197550.2	
1328.532	0.013	75271	1328.5301	0.0019	107	46	568.2		0.59	0.0025	75271.16	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5I6H	4.5	90798.83	166069.99	f
1328.597	0.006	75267.4	1328.595	0.002	226	70	2020		0.75	0.004	75267.5	p6fd	3L4I	4.5	p6fp	3L4K	5.5	122282.7	197550.2	
1328.913	0.013	75249.5	1328.8991	0.0139	239	85	1281		0.53	0.0022	75250.26	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5G6F	4.5	98664.29	173914.55	asym
1329.828	0.006	75197.7	1329.825	0.003	176	42	5920	6018	-0.99	0.003	75197.89	p6fd	5F6H	7.5	p6fp	5I4K	6.5	93641.73	168839.62	
1330.353	0.006	75168	1330.359	-0.006	20	2	179.6		0.5	0.003	75167.7	p6fd	5G6I	6.5	p6fp	5G6H	7.5	104900.14	180067.84	
1330.809	0.013	75142.2	1330.814	-0.005	335	139	2949	2952	-0.61	0.0023	75141.98	p6fd	5I4K	6.5	p6fp	5I4K	6.5	93697.64	168839.62	asym
1331.294	0.006	75114.9	1331.3023	-0.0083	229	94	35.29		-0.03	0.002	75114.42	p6fd	5I4G	3.5	p6fp	5I4I	4.5	95872.73	170987.15	
1332.053	0.009	75072.1	1332.0554	-0.0024	261	106	681.4	689	-0.52	0.002	75071.95	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5I6K	7.5	90598.25	165670.2	D
1332.053	0.009	75072.1	1332.0602	-0.0072	261	106	173.3		-0.07	0.002	75071.68	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F4G	5.5	98664.29	173735.97	D
1332.419	0.006	75051.5	1332.4145	0.0045	234	72	576.5	522.2	0.18	0.0018	75051.72	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I4I	6.5	86559.22	161610.94	
1333.101	0.013	75013	1333.102	-0.001	122	75	4677		0.96	0.003	75013.01	p6fd	5F6P	3.5	p6fp	5F6D	4.5	89394.64	164407.65	asym
1333.515	0.006	74989.8	1333.511	0.004	82	14	119	1146**	-0.08	0.0023	74990.01	p6fd	5I4G	3.5	p6fp	5I6I	3.5	95872.73	170862.74	
1333.932	0.006	74966.4	1333.927	0.005	714	376	13830	13830	-1	0.004	74966.62	p6fd	5I4L	8.5	p6fp	5I6K	7.5	90703.58	165670.2	
1334.265	0.006	74947.6	1334.2679	-0.0029	254	109	1924	1938	-0.52	0.0017	74947.47	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5I6H	5.5	90598.25	165545.72	
1334.766	0.006	74919.5	1334.768	-0.002	156	42	340.6		0.42	0.003	74919.39	p6fd	5G6F	4.5	p6fp	5G6H	5.5	109642.27	184561.66	
1335.11	0.013	74900.2	1335.096	0.014	396	116	31.49		0.32	0.003	74900.96	p6fd	5I6L	5.5	p6fp	5I6H	4.5	91169.03	166069.99	asym
1335.714	0.013	74866.4	1335.716	-0.002	395	152	2378	2375	-0.43	0.003	74866.2	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I4I	6.5	86744.74	161610.94	p
1335.941	0.006	74853.6	1335.9381	0.0029	278	70	1151	1167	0.58	0.0024	74853.77	p6fd	5I6L	7.5	p6fp	5I4I	6.5	86757.17	161610.94	
1336.124	0.006	74843.4	1336.12	0.004	85	11	201.3		0.08	0.003	74843.59	p6fd	5F4H	5.5	p6fp	5G6H	5.5	99987.72	174831.31	
1336.303	0.009	74833.3	1336.302	0.001	538	226	5508	5503	0.98	0.003	74833.36	p6fd	5I4K	5.5	p6fp	5I4I	4.5	96153.79	170987.15	D
1336.303	0.009	74833.3	1336.304	-0.001	538	226	1258	1258	-0.24	0.0019	74833.27	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6K	6.5	82921.38	157754.65	D
1336.939	0.006	74797.7	1336.9433	-0.0043	129	30	32.36		0.09	0.0022	74797.49	p6fd	5I4H	3.5	p6fp	5F4F	4.5	98251.66	173049.15	
1337.511	0.013	74765.8	1337.503	0.008	545	178	5871	5876	0.85	0.0023	74766.19	p6fd	5I4K	6.5	p6fp	5I4I	5.5	93697.64	168463.83	asym
1337.855	0.006	74746.5	1337.8483	0.0067	111	5	305.5		-0.2	0.0024	74746.89	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5I6H	5.5	90798.83	165545.72	
1338.02	0.05	74738	1337.9872	0.0328	550	247	1841		-0.78	0.002	74739.13	p6fd	5I4G	5.5	p6fp	5I4I	6.5	86871.81	161610.94	T
1338.02	0.05	74738	1338.0092	0.0108	550	247	4140	4137	0.71	0.0018	74737.9	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5I6I	6.5	90598.25	165336.15	T Q
1338.02	0.05	74738	1338.0321	-0.0121	550	247	3480	3268	0.64	0.0024	74736.62	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5F6G	4.5	93829.42	168566.04	T Q
1338.338	0.006	74719.6	1338.3398	-0.0018	120	32	49.43		-0.1	0.0019	74719.44	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5G6G	6.5	26707.61	101427.05	
1338.438	0.013	74714	1338.432	0.006	175	53	1130		-0.54	0.004	74714.3	p6fd	5G6H	5.5	p6fp	5G6H	5.5	109847.36	184561.66	
1339.053	0.006	74679.6	1339.0529	0.0001	402	188	1048		-0.46	0.0021	74679.65	p6fd	5G6G	6.5	p6fp	5F6G	5.5	101427.05	176106.7	
1339.441	0.006	74658	1339.436	0.005	143	42	248.8		0.23	0.0022	74658.29	p6fs	5F6F	5.5	p6fp	3L4K	6.5	119203.87	193862.16	
1339.682	0.006	74644.6	1339.6766	0.0054	273	152	1146	1149	0.48	0.0023	74644.88	p6fd	5I6I	5.5	p6fp	5I6K	6.5	83109.77	157754.65	
1339.866	0.013	74634.3	1339.8645	0.0015	185	71	675.1	707.6	0.34	0.0024	74634.41	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5I4I	5.5	93829.42	168463.83	f
1339.975	0.013	74628.3	1339.983	-0.008	188	87	563.5		0.62	0.003	74627.83	p6fd	3I4G1	4.5	p6fp	3L4K	5.5	122922.37	197550.2	D
1339.975	0.013	74628.3	1339.992	-0.017	188	87	203		-0.3	0.003	74627.33	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5F4G	5.5	90271.44	164898.77	D

TABLE B.1 – suite

1340.042	0.006	74624.5	1340.0391	0.0029	198	66	785.5	772.9	-0.59	0.0017	74624.69	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I6I	6.5	90711.46	165336.15	
1340.331	0.006	74608.4	1340.3333	-0.0023	360	194	2493	2489	0.75	0.0023	74608.31	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5I6K	7.5	78916.83	153525.14	
1340.459	0.006	74601.3	1340.455	0.004	152	14	1065		0.37	0.003	74601.56	p6fd	5I6G	3.5	p6fp	5I6H	4.5	91468.43	166069.99	
1341.224	0.006	74558.7	1341.2217	0.0023	135	29	219.6	225.9	0.25	0.0019	74558.89	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I6H	4.5	91511.1	166069.99	
1341.314	0.006	74553.8	1341.31	0.004	121	20	343.8	546.8	-0.31	0.003	74553.96	p6fd	5F6H	4.5	p6fp	5I6I	3.5	96308.78	170862.74	
1341.989	0.006	74516.2	1341.987	0.002	130	30	74.26		-0.07	0.004	74516.37	p6fd	5S4D	3.5	p6fp	5F6G	4.5	103899.05	178415.42	
1342.426	0.013	74492	1342.4093	0.0167	274	103	323.8		-0.07	0.0024	74492.93	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5I6I	4.5	93829.42	168322.35	p
1342.729	0.013	74475.2	1342.7189	0.0101	118	33	36.39		0.11	0.0024	74475.75	p6fd	5G4H	5.5	p6fp	3L4K	6.5	119386.41	193862.16	asym
1343.725	0.006	74420	1343.7288	-0.0038	85	8	46.66		-0.17	0.0025	74419.78	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5I4H	4.5	20454.19	94873.97	
1343.854	0.013	74412.9	1343.851	0.003	132	66	257		-0.15	0.004	74413.02	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3L2I	6.5	41609.23	116022.25	p
1343.985	0.013	74405.6	1343.9747	0.0103	184	153	1448	1433	0.35	0.002	74406.16	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6I	5.5	82921.38	157327.54	bl
1344.032	0.013	74403	1344.0257	0.0063	210	135	127.4	124.4	-0.23	0.0022	74403.34	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I4G	5.5	12468.47	86871.81	p
1344.353	0.006	74385.2	1344.3596	-0.0066	55	5	1609		0.64	0.0021	74384.86	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F4F	4.5	98664.29	173049.15	
1344.493	0.006	74377.5	1344.4829	0.0101	210	92	482.2	481.6	-0.08	0.0024	74378.04	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6K	6.5	83376.61	157754.65	
1344.618	0.013	74370.5	1344.611	0.007	290	211	1452	1454	-0.2	0.003	74370.97	p6fd	5I4K	8.5	p6fp	5I6K	7.5	79154.17	153525.14	p
1344.652	0.013	74368.7	1344.666	-0.014	383	106	650.9	648.7	0.25	0.003	74367.89	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6I	7.5	86744.74	161112.63	p
1344.758	0.006	74362.8	1344.753	0.005	127	23	457.6	459	0.48	0.0021	74363.1	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5I4K	6.5	94476.52	168839.62	
1344.9	0.006	74355	1344.891	0.009	82	13	187.2	195.1	-0.09	0.003	74355.46	p6fd	5I6L	7.5	p6fp	5I6I	7.5	86757.17	161112.63	
1346.508	0.006	74266.2	1346.4994	0.0086	245	107	26.25		0.04	0.0021	74266.65	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5F6G	5.5	27766.68	102033.33	
1346.665	0.006	74257.5	1346.6611	0.0039	110	37	1150		-0.45	0.0022	74257.73	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F6G	4.5	104157.69	178415.42	
1347.392	0.006	74217.5	1347.3862	0.0058	533	248	4141	4143	-0.7	0.0024	74217.77	p6fd	5I6I	5.5	p6fp	5I6I	5.5	83109.77	157327.54	
1347.619	0.006	74204.9	1347.61	0.009	248	103	1444	1440	0.82	0.003	74205.42	p6fd	5I6I	4.5	p6fp	5I6K	5.5	86400.9	160606.32	
1347.77	0.006	74196.7	1347.7628	0.0072	551	229	5073	5077	0.69	0.0022	74197.03	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5I6H	6.5	78916.83	153113.86	
1347.949	0.013	74186.8	1347.9394	0.0096	354	141	1940	1921	0.75	0.0018	74187.31	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5F4G	5.5	90711.46	164898.77	asym
1348.382	0.006	74163	1348.378	0.004	394	262	4383	4392	0.63	0.003	74163.17	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I6K	7.5	79361.97	153525.14	
1348.635	0.006	74149.1	1348.633	0.002	246	78	863	49.82**	0.84	0.003	74149.16	p6fd	5I6I	3.5	p6fp	5I6K	4.5	88834.04	162983.2	
1348.753	0.006	74142.5	1348.747	0.006	369	124	2200		-0.67	0.003	74142.88	p6fd	5I6I	3.5	p6fp	5I6I	3.5	88834.04	162976.92	
1348.862	0.006	74136.6	1348.869	-0.007	447	186	653		-0.44	0.003	74136.21	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5F6D	4.5	90271.44	164407.65	
1349.523	0.006	74100.3	1349.5288	-0.0058	86	5	1330		-0.82	0.0024	74099.94	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5F4G	5.5	90798.83	164898.77	
1349.705	0.006	74090.3	1349.6961	0.0089	142	18	21.12	24.58	-0.11	0.002	74090.75	p6f11	4I4I	4.5	p6fd	5I6H	5.5	12468.47	86559.22	
1350.023	0.006	74072.8	1350.0128	0.0102	35	2	92.25		-0.03	0.0023	74073.37	p6fd	5F6G	5.5	p6fp	5F6G	5.5	102033.33	176106.7	
1350.216	0.006	74062.2	1350.209	0.007	260	92	6154	6053	0.63	0.003	74062.59	p6fd	5I4L	7.5	p6fp	5I4K	6.5	94777.03	168839.62	
1350.499	0.006	74046.7	1350.4918	0.0072	304	135	1528	1498	0.51	0.0019	74047.1	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I6K	5.5	86559.22	160606.32	
1350.721	0.006	74034.5	1350.7194	0.0016	294	100	2102	2098	-0.56	0.0018	74034.62	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I6H	5.5	91511.1	165545.72	
1350.78	0.006	74031.3	1350.775	0.005	435	145	3226	3215	-1	0.003	74031.59	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I4K	8.5	73426.4	147457.99	
1351.134	0.006	74011.9	1351.138	-0.004	133	4	500.1		-0.41	0.003	74011.68	p6fd	3I4I1	5.5	p6fp	3L4K	6.5	119850.48	193862.16	
1351.592	0.013	73986.8	1351.5831	0.0089	299	153	3058	3018	-0.71	0.0022	73987.31	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5I4I	5.5	94476.52	168463.83	asym
1351.89	0.006	73970.5	1351.887	0.003	416	190	3097	3097	-0.73	0.003	73970.69	p6fd	5I6I	4.5	p6fp	5I6I	4.5	86400.9	160371.59	
1352.688	0.013	73926.9	1352.689	-0.001	37		35.75		0.02	0.003	73926.83	p6fd	5F4H	5.5	p6fp	5G6F	4.5	99987.72	173914.55	



TABLE B.1 – suite

1353.885	0.006	73861.5	1353.884	0.001	180	59	587.9	597.5	-0.17	0.003	73861.58	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6K	5.5	86744.74	160606.32		
1354.011	0.013	73854.6	1354.0056	0.0054	165	38	455.3		-0.32	0.0023	73854.94	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5I4H	5.5	88456.69	162311.63	asym	
1354.177	0.013	73845.6	1354.1726	0.0044	261	142	2267		-0.62	0.0022	73845.83	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5I6I	4.5	94476.52	168322.35	p	
1354.292	0.013	73839.3	1354.307	-0.015	71	25	157.9		0.19	0.006	73838.5	p6fd	3M4L	6.5	p6fp	3L4K	5.5	123711.7	197550.2	p	
1354.554	0.013	73825	1354.5538	0.0002	247	81	1013		0.53	0.0019	73825.05	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I6I	6.5	91511.1	165336.15	p	
1354.788	0.006	73812.3	1354.7865	0.0015	226	88	960.6	943.1	-0.34	0.0019	73812.37	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I6I	4.5	86559.22	160371.59		
1354.935	0.006	73804.3	1354.9317	0.0033	285	131	3327	3331	-0.78	0.002	73804.46	p6fd	5I4I	4.5	p6fp	5I4I	4.5	97182.69	170987.15		
1355.285	0.006	73785.2	1355.281	0.004	397	173	988.5		-0.54	0.004	73785.43	p6fd	3I4G1	5.5	p6fp	3L4K	6.5	120076.73	193862.16		
1355.896	0.013	73752	1355.897	-0.001	264	121	2350	2347	0.46	0.003	73751.89	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I6H	6.5	79361.97	153113.86	p	
1355.931	0.013	73750.1	1355.93	0.001	219	353	6334	6337	0.87	0.004	73750.13	p6fd	5I6I	8.5	p6fp	5I4K	8.5	73707.86	147457.99	p	
1355.968	0.013	73748.1	1355.964	0.004	223	148	1712		0.59	0.003	73748.25	p6fd	5F4H	5.5	p6fp	5F4G	5.5	99987.72	173735.97	p	
1356.257	0.006	73732.4	1356.256	0.001	396	169	3342		0.98	0.004	73732.39	p6fd	5I6H	3.5	p6fp	5I6I	4.5	86639.2	160371.59		
1356.613	0.013	73713	1356.615	-0.002	57	6	311.8		0.12	0.003	73712.87	p6fd	5G6H	6.5	p6fp	5G6H	5.5	110848.79	184561.66	p	
1356.692	0.006	73708.7	1356.692	0	280	126	1168		-0.62	0.003	73708.71	p6fd	3H4H4	6.5	p6fp	5G6H	6.5	108402.43	182111.14		
1356.923	0.006	73696.2	1356.9223	0.0007	140	48	680.4	688	0.37	0.0019	73696.19	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5F6D	4.5	90711.46	164407.65		
1356.997	0.006	73692.1	1356.9981	-0.0011	57	7	224.9	349.9	0.08	0.002	73692.07	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5F6G	4.5	94873.97	168566.04		
1357.217	0.006	73680.2	1357.2195	-0.0025	178	79	1528	1389	-0.86	0.0023	73680.05	p6fd	5I4I	4.5	p6fp	5I6I	3.5	97182.69	170862.74		
1357.568	0.013	73661.2	1357.5646	0.0034	327	175	2805	2817	0.75	0.0021	73661.32	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I4H	6.5	82921.38	156582.7	asym	
1357.801	0.006	73648.5	1357.803	-0.002	233	108	1273		-0.68	0.003	73648.39	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I6K	4.5	89334.81	162983.2		
1357.917	0.006	73642.2	1357.9187	-0.0017	201	72	998.1		0.55	0.0025	73642.11	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I6I	3.5	89334.81	162976.92		
1358.121	0.006	73631.2	1358.1231	-0.0021	225	87	1681		-0.51	0.0025	73631.03	p6fd	3K4K2	5.5	p6fp	3K4K2	5.5	107867.15	181498.18		
1358.167	0.006	73628.6	1358.156	0.011	78	8	19.81		-0.02	0.004	73629.23	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5F6H	6.5	26707.61	100336.84		
1358.344	0.006	73619.1	1358.344	0	412	270	4830	482.2	0.98	0.003	73619.03	p6fd	5I6H	4.5	p6fp	5I6I	5.5	83708.51	157327.54		
1358.542	0.013	73608.3	1358.533	0.009	147		2529		-0.56	0.003	73608.82	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5F6D	4.5	90798.83	164407.65	p	
1358.604	0.013	73605	1358.608	-0.004	479	401	6565	6577	-0.78	0.003	73604.74	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I6H	7.5	73426.4	147031.14	p	
1358.883	0.006	73589.9	1358.8829	1.00E-04	238	74	1229	1224	0.59	0.0021	73589.86	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5I4I	5.5	94873.97	168463.83		
1359.014	0.006	73582.8	1359.023	-0.009	129	22	57.68		-0.21	0.004	73582.28	p6fd	5F6P	3.5	p6fp	5I6I	3.5	89394.64	162976.92		
1360.247	0.006	73516	1360.2505	-0.0035	106	75	22.52	22.51	-0.03	0.0022	73515.87	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4H	3.5	24735.79	98251.66		
1361.043	0.006	73473.1	1361.0455	-0.0025	324	129	1426	1426	-0.77	0.0025	73472.93	p6fd	5I6I	5.5	p6fp	5I4H	6.5	83109.77	156582.7		
1361.123	0.006	73468.7	1361.123	0	114	122	1661		0.57	0.003	73468.75	p6fd	5F4D	3.5	p6fp	5G6F	4.5	100445.8	173914.55		
1361.353	0.006	73456.3	1361.351	0.002	293	151	245.8		-0.25	0.003	73456.45	p6f11	4F4F	2.5	p6fd	5I4G	3.5	22416.28	95872.73		
1361.5	0.013	73448.4	1361.5004	-0.0004	230	117	2196		0.59	0.0021	73448.38	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5I6I	4.5	94873.97	168322.35	asym	
1361.908	0.006	73426.4	1361.908	0	209	58	28.4	28.73	0.04	0.003	73426.4	p6f11	4I4I	7.5	p6fd	5I6H	7.5	0	73426.4		
1361.988	0.013	73422.1	1361.987	0.001	66		1249		0.64	0.003	73422.13	p6fd	3K4I2	6.5	p6fp	5G6H	5.5	111139.53	184561.66	bl	
1362.05	0.013	73418.7	1362.03	0.02	154	57	680.9		0.96	0.004	73419.84	p6fd	5I4L	6.5	p6fp	3K4I2	7.5	97351.17	170771.01	f Q	
1362.32	0.013	73404.2	1362.3188	0.0012	55	58	965.1		-0.25	0.0022	73404.26	p6fd	5G6G	6.5	p6fp	5G6H	5.5	101427.05	174831.31	bl	
1362.41	0.013	73399.4	1362.414	-0.004	95	63	720.6		-0.21	0.004	73399.13	p6fd	5F6H	6.5	p6fp	5F4G	5.5	100336.84	173735.97	bl	
1362.62	0.006	73388	1362.6267	-0.0067	125	83	757	756.6	0.25	0.0019	73387.67	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5F4G	5.5	91511.1	164898.77		

TABLE B.1 – suite

1362.934	0.006	73371.1	1362.941	-0.007	234	386	6649	6648	0.93	0.003	73370.77	p6fd	5I6G	5.5	p6fp	5I6H	6.5	79743.09	153113.86	
1363.166	0.013	73358.6	1363.1721	-0.0061	112	201	1309	1306	-0.86	0.0022	73358.31	p6fd	5I4G	4.5	p6fp	5I6H	5.5	92187.41	165545.72	asym
1363.82	0.006	73323.5	1363.823	-0.003	206	286	3281	3279	0.63	0.004	73323.28	p6fd	5I6I	8.5	p6fp	5I6H	7.5	73707.86	147031.14	
1363.994	0.006	73314.1	1363.9954	-0.0014	96	113	1602	1476	0.48	0.0022	73314.03	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5F6G	4.5	95252.01	168566.04	
1364.485	0.006	73287.8	1364.485	0	43	22	45.08		0.19	0.004	73287.7	p6fd	5G6I	4.5	p6fp	3K4K2	5.5	108210.48	181498.18	
1364.772	0.013	73272.3	1364.778	-0.006	71	117	167.8	169.6	-0.27	0.003	73271.97	p6fd	5F6H	6.5	p6fp	5I6I	6.5	92064.18	165336.15	p
1366.002	0.006	73206.4	1366.0066	-0.0046	223	127	1547	1558	0.58	0.0025	73206.09	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I4H	6.5	83376.61	156582.7	
1366.279	0.013	73191.5	1366.282	-0.003	134	115	1498	1496	0.57	0.003	73191.34	p6fd	5I6L	8.5	p6fp	5I4I	7.5	82610.39	155801.73	asym
1366.964	0.013	73154.8	1366.9746	-0.0106	71	26	63.16		0.06	0.0024	73154.25	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5I4I	6.5	88456.69	161610.94	D
1366.964	0.013	73154.8	1366.983	-0.019	71	26	293.2	298.7	0.59	0.003	73153.81	p6fd	5I6L	6.5	p6fp	5I4H	5.5	89157.82	162311.63	D
1367.745	0.006	73113.1	1367.75	-0.005	64	34	14.65		0.03	0.004	73112.79	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3F4H4	6.5	41609.23	114722.02	
1368.059	0.006	73096.3	1368.069	-0.01	57	11	264.2		0.29	0.003	73095.75	p6fd	3H4H4	6.5	p6fp	3K4K2	5.5	108402.43	181498.18	
1368.104	0.006	73093.9	1368.09	0.014	40	7	283.3		-0.11	0.003	73094.61	p6fd	5F4H	4.5	p6fp	5G6H	4.5	103907.65	177002.26	
1368.537	0.006	73070.7	1368.5443	-0.0073	131	81	265		-0.08	0.0023	73070.34	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5I6I	4.5	95252.01	168322.35	
1370.135	0.006	72985.5	1370.1335	0.0015	14	39	115.5		0.1	0.0023	72985.59	p6fd	3K4L2	6.5	p6fp	5G6H	6.5	109125.55	182111.14	
1370.288	0.006	72977.4	1370.2981	-0.0101	105	59	423.6		-0.25	0.0024	72976.82	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I4H	5.5	89334.81	162311.63	
1371.002	0.006	72939.3	1371.005	-0.003	51	21	18.08		-0.04	0.003	72939.22	p6fd	5I6G	3.5	p6fp	5F6D	4.5	91468.43	164407.65	
1371.596	0.013	72907.7	1371.6018	-0.0058	80	111	774.2		-0.2	0.0022	72907.46	p6fs	5I6I	6.5	p6fp	3K4K2	5.5	108590.72	181498.18	asym
1371.804	0.013	72896.7	1371.807	-0.003	94	66	859.7	833	0.39	0.0021	72896.55	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5F6D	4.5	91511.1	164407.65	asym
1372.109	0.013	72880.5	1372.112	-0.003	183	129	1390	1409	-0.52	0.0022	72880.35	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I4I	7.5	82921.38	155801.73	asym
1372.575	0.013	72855.7	1372.5721	0.0029	97	96	22.57	22.42	-0.07	0.0022	72855.92	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5I4G	4.5	19331.49	92187.41	asym
1372.596	0.013	72854.6	1372.605	-0.009	63	17	10.17		0.07	0.003	72854.18	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I6H	7.5	6507.79	79361.97	p
1372.776	0.006	72845.1	1372.786	-0.01	193	134	1177		-0.54	0.003	72844.57	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5G6H	4.5	104157.69	177002.26	
1372.972	0.006	72834.7	1372.974	-0.002	358	283	6274	6281	0.79	0.003	72834.59	p6fd	5F6H	6.5	p6fp	5F4G	5.5	92064.18	164898.77	
1373.263	0.006	72819.3	1373.263	0	35	8	157.1		-0.23	0.005	72819.3	p6fd	5G4I	6.5	p6fp	3L4K	6.5	121042.9	193862.16	
1373.658	0.006	72798.4	1373.6645	-0.0065	168	139	1749		0.59	0.0024	72797.98	p6fd	5F6G	5.5	p6fp	5G6H	5.5	102033.33	174831.31	
1374.216	0.006	72768.8	1374.23	-0.014	9		262.1		0.12	0.003	72768.04	p6fd	5G4G	5.5	p6fp	5F6G	4.5	105647.38	178415.42	
1374.331	0.006	72762.7	1374.3413	-0.0103	197	16	613.5	635	0.16	0.0022	72762.13	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6K	6.5	84992.52	157754.65	
1374.568	0.006	72750.1	1374.5774	-0.0094	62	52	1476		-0.55	0.0025	72749.63	p6fd	5G4H	6.5	p6fp	5G6H	5.5	111812.03	184561.66	
1374.841	0.006	72735.7	1374.8447	-0.0037	134	98	1294	1301	0.63	0.0022	72735.49	p6fd	5I4H	3.5	p6fp	5I4I	4.5	98251.66	170987.15	
1375.098	0.006	72722.1	1375.094	0.004	28	8	574.1		-0.27	0.003	72722.29	p6fd	3M4K	5.5	p6fp	3L4K	6.5	121139.87	193862.16	
1375.29	0.013	72712	1375.293	-0.003	145	90	1753		-0.63	0.003	72711.76	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I6K	4.5	90271.44	162983.2	D
1375.29	0.013	72712	1375.3009	-0.0109	145	90	45.21	37.56	-0.08	0.0022	72711.36	p6fd	5I4G	4.5	p6fp	5F4G	5.5	92187.41	164898.77	D
1375.41	0.006	72705.6	1375.412	-0.002	188	74	1448		0.51	0.003	72705.48	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I6I	3.5	90271.44	162976.92	
1375.636	0.006	72693.6	1375.6424	-0.0064	131	55	812.2	963.7	-0.71	0.0022	72693.31	p6fd	5I4G	3.5	p6fp	5F6G	4.5	95872.73	168566.04	
1376.271	0.006	72660.1	1376.275	-0.004	28		21.79		0.02	0.004	72659.9	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3L2I	6.5	44390.14	117050.04	
1377.191	0.006	72611.5	1377.2003	-0.0093	211	124	2108	1946	0.79	0.0025	72611.08	p6fd	5I4H	3.5	p6fp	5I6I	3.5	98251.66	170862.74	
1377.551	0.006	72592.6	1377.555	-0.004	17	4	29.81		-0.03	0.005	72592.4	p6fd	3F2H2	5.5	p6fp	3L4K	5.5	124957.8	197550.2	
1377.772	0.006	72580.9	1377.774	-0.002	43	6	391.2		-0.27	0.004	72580.87	p6fd	3M2K	7.5	p6fp	3L4K	6.5	121281.29	193862.16	

TABLE B.1 – suite

1378.876	0.006	72522.8	1378.879	-0.003	52	13	765.7		0.81	0.004	72522.7	p6fd	3F4F3	4.5	p6fp	3L4K	5.5	125027.5	197550.2	
1379.405	0.006	72495	1379.407	-0.002	472	498	8235	8242	1	0.003	72494.94	p6fd	5I6G	6.5	p6fp	5I6H	7.5	74536.2	147031.14	
1380.2	0.006	72453.3	1380.203	-0.003	192	86	66.13		-0.1	0.003	72453.12	p6fd	5I6L	6.5	p6fp	5I4I	6.5	89157.82	161610.94	
1380.265	0.006	72449.9	1380.2695	-0.0045	144	67	1071		-0.62	0.0022	72449.62	p6fd	5I4G	3.5	p6fp	5I6I	4.5	95872.73	168322.35	
1380.312	0.006	72447.4	1380.3213	-0.0093	293	246	24.86	23.91	-0.02	0.002	72446.9	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4I	4.5	24735.79	97182.69	
1380.733	0.013	72425.3	1380.736	-0.003	282	217	2797	2828	-0.63	0.003	72425.12	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I4I	7.5	83376.61	155801.73	asym
1380.979	0.006	72412.4	1380.982	-0.003	41	24	164.1	159.9	0.08	0.003	72412.25	p6fd	5I4K	5.5	p6fp	5F6G	4.5	96153.79	168566.04	
1381.052	0.006	72408.6	1381.043	0.009	105	66	26.88	27.18	-0.07	0.0024	72409.04	p6f11	4I4I	6.5	p6fd	5I6I	6.5	6507.79	78916.83	
1381.302	0.013	72395.5	1381.295	0.007	120	69	358.5	359.8	-0.19	0.003	72395.81	p6fd	5I6L	8.5	p6fp	5I6I	8.5	82610.39	155006.2	bl
1381.742	0.006	72372.4	1381.7378	0.0042	170	134	1335		0.31	0.0019	72372.63	p6fd	3K4L2	6.5	p6fp	3K4K2	5.5	109125.55	181498.18	
1382.96	0.006	72308.7	1382.9552	0.0048	161	103	1695		-0.46	0.0021	72308.92	p6fd	5G6G	6.5	p6fp	5F4G	5.5	101427.05	173735.97	
1383.093	0.006	72301.7	1383.093	0	247	189	259.8		-0.41	0.004	72301.7	p6fd	3F2H2	4.5	p6fp	3L4K	5.5	125248.5	197550.2	
1383.328	0.006	72289.4	1383.327	0.001	123	45	393.5		-0.3	0.003	72289.5	p6fd	3L4K	5.5	p6fp	3L4K	6.5	121572.66	193862.16	
1383.659	0.006	72272.2	1383.6667	-0.0077	72	21	330.7	331.1	-0.39	0.0023	72271.74	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I6K	4.5	90711.46	162983.2	
1383.818	0.006	72263.8	1383.819	-0.001	87	42	19.64		-0.07	0.004	72263.78	p6fd	5G6H	5.5	p6fp	5G6H	6.5	109847.36	182111.14	
1384.588	0.006	72223.7	1384.592	-0.004	65	22	674.3		0.39	0.004	72223.46	p6fd	3L4L	7.5	p6fp	3L4K	6.5	121638.7	193862.16	
1384.649	0.006	72220.4	1384.6534	-0.0044	47	13	153.7	151.9	0.31	0.0023	72220.24	p6fd	5I4G	4.5	p6fp	5F6D	4.5	92187.41	164407.65	
1385.047	0.013	72199.7	1385.06	-0.013	187	129	39.58		0.07	0.003	72199.05	p6fd	5F4H	4.5	p6fp	5F6G	5.5	103907.65	176106.7	asym
1385.18	0.006	72192.8	1385.185	-0.005	126	54	1140		-0.78	0.003	72192.54	p6fd	3K4K2	5.5	p6fp	3K4K2	5.5	109305.64	181498.18	
1385.349	0.013	72184	1385.341	0.008	131	44	108.1		0.3	0.003	72184.37	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5I6K	4.5	90798.83	162983.2	asym
1385.429	0.006	72179.8	1385.4328	-0.0038	142	98	67.29	70.18	0.09	0.0019	72179.61	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5I4H	5.5	19331.49	91511.1	
1385.64	0.006	72168.8	1385.645	-0.005	91	44	12.59		-0.01	0.003	72168.56	p6fd	5I4K	5.5	p6fp	5I6I	4.5	96153.79	168322.35	
1385.898	0.006	72155.4	1385.904	-0.006	52	9	210.5	214.6	-0.46	0.003	72155.05	p6fd	5F6H	4.5	p6fp	5I4I	5.5	96308.78	168463.83	
1386.006	0.006	72149.7	1386.0085	-0.0025	243	160	2386	2401	-0.54	0.0024	72149.63	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5I6K	5.5	88456.69	160606.32	
1388.354	0.006	72027.7	1388.34	0.014	155	81	58.1		0.24	0.003	72028.47	p6fd	5F6H	7.5	p6fp	5I6K	7.5	93641.73	165670.2	
1388.41	0.006	72024.8	1388.408	0.002	105	44	497.5		-0.35	0.003	72024.92	p6fd	5G4G	5.5	p6fp	5F6G	4.5	106390.5	178415.42	
1388.613	0.013	72014.3	1388.6114	0.0016	331	171	2273	22.68**	-0.57	0.0019	72014.39	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I6K	6.5	85740.26	157754.65	p
1388.626	0.013	72013.6	1388.627	-0.001	181	57	648.5		-0.34	0.003	72013.57	p6fd	5F6H	4.5	p6fp	5I6I	4.5	96308.78	168322.35	p
1389.18	0.006	71984.9	1389.185	-0.005	72	30	30.24		-0.08	0.003	71984.67	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	3L4I	6.5	41609.23	113593.9	
1389.722	0.006	71956.9	1389.725	-0.003	89	46	46.24	47.29	0.1	0.002	71956.68	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5F4G	5.5	26707.61	98664.29	
1389.869	0.006	71949.2	1389.8732	-0.0042	47	7	147.7		0.08	0.0023	71949.01	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F6G	5.5	104157.69	176106.7	
1390.088	0.006	71937.9	1390.088	0	93	40	26.65		-0.04	0.004	71937.91	p6fd	5S4D	3.5	p6fp	5S6P	3.5	103413.95	175351.86	
1390.531	0.006	71915	1390.5324	-0.0014	207	130	1727	1743	0.4	0.0024	71914.9	p6fd	5I6K	5.5	p6fp	5I6I	4.5	88456.69	160371.59	
1391.796	0.013	71849.6	1391.805	-0.009	21	2	127.4	113.7	-0.12	0.005	71849.2	p6fd	3L4L	6.5	p6fp	3L4K	6.5	122013	193862.16	f
1392.48	0.013	71814.3	1392.483	-0.003	378	278	6497	6499	0.95	0.003	71814.17	p6fd	5I6L	5.5	p6fp	5I6K	4.5	91169.03	162983.2	asym
1394.054	0.006	71733.2	1394.054	0	108	78	387.4		-0.33	0.003	71733.22	p6f11	4F4F	3.5	p6fd	5I4G	4.5	20454.19	92187.41	
1394.385	0.006	71716.2	1394.3831	0.0019	64	11	30.45		-0.01	0.0022	71716.3	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5I6H	5.5	93829.42	165545.72	
1394.438	0.006	71713.5	1394.4399	-0.0019	114	74	647.4	651.3	0.31	0.0019	71713.38	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5I4H	5.5	90598.25	162311.63	

TABLE B.1 – suite

1394.787	0.006	71695.5	1394.809	-0.022	45	17	75.32		-0.05	0.003	71694.42	p6fd	5F6H	7.5	p6fp	5I6I	6.5	93641.73	165336.15	Q
1395.442	0.013	71661.9	1395.434	0.008	85	65	235.9	233.1	0.06	0.003	71662.31	p6fd	5I4K	7.5	p6fp	5I4I	6.5	89948.63	161610.94	p
1395.709	0.013	71648.2	1395.705	0.004	345	224	3654		0.8	0.003	71648.36	p6fd	5G6I	6.5	p6fp	5G6H	5.5	103182.95	174831.31	asym
1395.889	0.006	71638.9	1395.8973	-0.0083	21		27.47	28.13	-0.01	0.0022	71638.51	p6fd	5I4K	6.5	p6fp	5I6I	6.5	93697.64	165336.15	
1396.07	0.013	71629.6	1396.071	-0.001	111	26	490.3	500.7	0.35	0.003	71629.59	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6I	8.5	83376.61	155006.2	asym
1396.643	0.006	71600.3	1396.6447	-0.0017	136	94	934.9	921.6	-0.43	0.0019	71600.17	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I4H	5.5	90711.46	162311.63	
1396.777	0.006	71593.4	1396.7754	0.0016	60	52	325.1	326.7	0.27	0.0021	71593.47	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5I6H	4.5	94476.52	166069.99	
1396.86	0.013	71589.2	1396.8396	0.0204	158	125	367.2		0.14	0.0023	71590.18	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I4H	6.5	84992.52	156582.7	p Q
1396.897	0.006	71587.2	1396.8962	0.0008	140	91	782.7	793.9	0.41	0.002	71587.28	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I6I	5.5	85740.26	157327.54	
1397.026	0.006	71580.6	1397.031	-0.005	213	109	251.9		0.09	0.003	71580.38	p6fd	5G6G	4.5	p6fp	5G6H	4.5	105421.88	177002.26	
1397.861	0.006	71537.9	1397.867	-0.006	67	41	320.8	324.6	0.14	0.003	71537.55	p6fd	5I6I	3.5	p6fp	5I6I	4.5	88834.04	160371.59	
1398.434	0.006	71508.6	1398.435	-0.001	21		18.25		-0.01	0.003	71508.49	p6fd	5I6G	3.5	p6fp	5I6I	3.5	91468.43	162976.92	
1398.827	0.006	71488.5	1398.827	0	11		50.04		0.08	0.003	71488.45	p6fd	5I4L	6.5	p6fp	5I4K	6.5	97351.17	168839.62	
1399.088	0.006	71475.1	1399.089	-0.001	744	447	9087	9120	-0.83	0.004	71475.09	p6fd	5I6K	9.5	p6fp	5I4K	8.5	75982.9	147457.99	
1399.249	0.006	71466.9	1399.2462	0.0028	440	247	399.9	392.9	-0.34	0.0022	71467.05	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4G	5.5	15404.76	86871.81	
1399.601	0.006	71448.9	1399.61	-0.009	428	306	7041	7036	0.85	0.003	71448.5	p6fd	5I6L	6.5	p6fp	5I6K	5.5	89157.82	160606.32	
1400.011	0.006	71428	1400.014	-0.003	69	26	514		-0.14	0.005	71427.8	p6fd	5G4I	7.5	p6fp	5G6H	6.5	110683.3	182111.14	
1400.195	0.006	71418.6	1400.207	-0.012	83	35	22.67	23.28	-0.05	0.003	71418	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4K	5.5	24735.79	96153.79	
1400.883	0.006	71383.6	1400.8869	-0.0039	169	73	29.61	34.06	-0.02	0.0022	71383.35	p6fd	5I4I	4.5	p6fp	5F6G	4.5	97182.69	168566.04	
1400.955	0.006	71379.9	1400.9532	0.0018	196	72	61.77	59.76	-0.07	0.0019	71379.97	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5I4H	5.5	19331.49	90711.46	
1403.183	0.006	71266.5	1403.1787	0.0043	200	127	95.21	96.94	-0.24	0.0019	71266.76	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5I4I	6.5	19331.49	90598.25	
1403.267	0.006	71262.3	1403.266	0.001	43	9	154.1		-0.08	0.003	71262.35	p6fd	5G6H	6.5	p6fp	5G6H	6.5	110848.79	182111.14	
1404.065	0.013	71221.7	1404.077	-0.012	39	8	223.6		0.19	0.005	71221.16	p6fd	5G6G	4.5	p6fp	5F6G	4.5	107194.26	178415.42	p
1404.464	0.013	71201.6	1404.4721	-0.0081	73	46	256.9	259.6	-0.21	0.0023	71201.13	p6fd	5I4K	6.5	p6fp	5F4G	5.5	93697.64	164898.77	asym
1404.577	0.006	71195.8	1404.5845	-0.0075	169		266.3	285.4	0.12	0.0019	71195.43	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I6K	6.5	86559.22	157754.65	
1405.208	0.013	71163.9	1405.205	0.003	98	55	258.3	258	-0.06	0.003	71164	p6fd	5I4K	7.5	p6fp	5I6I	7.5	89948.63	161112.63	bl
1405.403	0.006	71154	1405.3933	0.0097	345	252	59.26	69.05	-0.21	0.0021	71154.46	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I6H	5.5	15404.76	86559.22	
1405.634	0.013	71142.3	1405.628	0.006	60		93.69		-0.37	0.003	71142.6	p6fd	5I6L	5.5	p6fp	5I4H	5.5	91169.03	162311.63	bl
1406.232	0.006	71112	1406.219	0.013	101	34	46.46		-0.02	0.003	71112.66	p6fd	5I4L	6.5	p6fp	5I4I	5.5	97351.17	168463.83	
1406.394	0.006	71103.8	1406.385	0.009	62	6	2419		0.74	0.005	71104.28	p6fd	3K4K2	7.5	p6fp	3K2L2	8.5	100034.94	171139.22	
1407.072	0.009	71069.6	1407.0763	-0.0043	228	101	319.3	323.4	0.13	0.0023	71069.35	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5F4G	5.5	93829.42	164898.77	D
1407.072	0.009	71069.6	1407.0793	-0.0073	228	101	699.7	696.8	-0.21	0.002	71069.2	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5I6H	5.5	94476.52	165545.72	D
1407.417	0.006	71052.2	1407.409	0.008	45		14.27		0.01	0.003	71052.53	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	3K4K2	5.5	36814.62	107867.15	
1407.723	0.006	71036.7	1407.721	0.002	224	110	84.64		0.03	0.003	71036.78	p6fd	5I6K	4.5	p6fp	5I6I	4.5	89334.81	160371.59	
1408.127	0.006	71016.3	1408.137	-0.01	158	42	917.9		-0.51	0.003	71015.82	p6fd	5F6G	5.5	p6fp	5F4F	4.5	102033.33	173049.15	
1408.195	0.006	71012.9	1408.199	-0.004	234	111	1368	1353	-0.33	0.002	71012.69	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5I4I	6.5	90598.25	161610.94	
1408.253	0.006	71010	1408.254	-0.001	249	96	952	958.8	-0.18	0.003	71009.91	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6K	6.5	86744.74	157754.65	
1408.498	0.006	70997.6	1408.501	-0.003	531	313	7256	7250	0.85	0.003	70997.48	p6fd	5I6L	7.5	p6fp	5I6K	6.5	86757.17	157754.65	
1409.004	0.006	70972.1	1409.014	-0.01	46	3	118.4		-0.1	0.003	70971.61	p6fd	3K4I2	6.5	p6fp	5G6H	6.5	111139.53	182111.14	

TABLE B.1 – suite

1409.085	0.013	70968.1	1409.091	-0.006	62	3	621.6		-0.37	0.003	70967.76	p6fd	3L4I	6.5	p6fp	5G6H	5.5	113593.9	184561.66	asym
1409.261	0.013	70959.2	1409.255	0.006	84	7	86.69		0.3	0.004	70959.49	p6fd	5G4F	4.5	p6fp	3K4K2	5.5	110538.69	181498.18	asym
1409.901	0.006	70927	1409.907	-0.006	120	20	235.4	239.5	0.08	0.003	70926.64	p6fd	5I6I	4.5	p6fp	5I6I	5.5	86400.9	157327.54	
1410.047	0.006	70919.6	1410.046	0.001	167	69	610.9		-0.23	0.003	70919.68	p6fd	5G6H	4.5	p6fp	5G6H	4.5	106082.58	177002.26	
1410.139	0.013	70915	1410.144	-0.005	493	428	7774	7790	0.87	0.004	70914.75	p6fd	5I6L	8.5	p6fp	5I6K	7.5	82610.39	153525.14	asym
1410.456	0.006	70899.1	1410.4476	0.0084	136	77	613.6	609.5	0.5	0.002	70899.48	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I4I	6.5	90711.46	161610.94	
1410.574	0.013	70893.1	1410.573	0.001	100	37	31.21	30.5	-0.03	0.003	70893.17	p6fd	5I4L	7.5	p6fp	5I6K	7.5	94777.03	165670.2	p
1410.779	0.013	70882.8	1410.7787	0.0003	154	66	517.7	488.1	0.31	0.0022	70882.84	p6fd	5I4G	5.5	p6fp	5I6K	6.5	86871.81	157754.65	asym
1411.236	0.006	70859.9	1411.2408	-0.0048	9		62.65	64.09	0.05	0.002	70859.63	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5I6I	6.5	94476.52	165336.15	
1411.301	0.006	70856.6	1411.296	0.005	132	79	45.11		-0.03	0.003	70856.85	p6f11	2H2H2	4.5	p6fd	5F4H	5.5	36814.62	107671.47	
1411.585	0.006	70842.3	1411.5832	0.0018	256	170	1477	1471	-0.3	0.002	70842.44	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I4H	6.5	85740.26	156582.7	
1412.07	0.006	70818	1412.0708	-0.0008	103	51	578.1	584.6	-0.73	0.0022	70817.98	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5I6H	4.5	95252.01	166069.99	
1412.246	0.006	70809.2	1412.2457	0.0003	293	200	1711	1675	-0.45	0.0023	70809.21	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I4I	7.5	84992.52	155801.73	
1412.415	0.006	70800.7	1412.4188	-0.0038	167	86	639	644.1	0.24	0.002	70800.53	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I4H	5.5	91511.1	162311.63	
1413.061	0.006	70768.4	1413.0617	-0.0007	93	45	258.1	264.9	-0.05	0.0019	70768.32	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I6I	5.5	86559.22	157327.54	
1413.706	0.006	70736.1	1413.706	0	412	258	5555	5561	0.74	0.004	70736.07	p6fd	3K4K2	7.5	p6fp	3K4I2	7.5	100034.94	170771.01	
1414.947	0.006	70674	1414.9551	-0.0081	79	16	731.3		0.4	0.0023	70673.62	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5G6H	5.5	104157.69	174831.31	
1414.982	0.013	70672.3	1414.9926	-0.0106	62	10	250.1	248.3	0.13	0.0019	70671.75	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5I6H	5.5	94873.97	165545.72	p
1415.201	0.013	70661.4	1415.207	-0.006	43	4	258.3		0.18	0.003	70661.02	p6fd	3H4F4	4.5	p6fp	5F6G	4.5	107754.4	178415.42	p
1415.447	0.006	70649	1415.44	0.007	84	28	16.99		-0.04	0.003	70649.39	p6fd	5G6H	6.5	p6fp	3K4K2	5.5	110848.79	181498.18	
1416.2	0.006	70611.5	1416.195	0.005	78	52	292.5		0.22	0.003	70611.76	p6fd	5G4G	5.5	p6fp	5G6H	4.5	106390.5	177002.26	
1416.356	0.006	70603.7	1416.3552	0.0008	76	53	110.5	111.6	-0.05	0.0023	70603.76	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6K	7.5	82921.38	153525.14	
1416.769	0.006	70583.1	1416.776	-0.007	179	128	808.9	812.8	0.18	0.003	70582.8	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6I	5.5	86744.74	157327.54	
1416.866	0.006	70578.3	1416.8675	-0.0015	99	70	184	187.5	0.1	0.0024	70578.23	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5F6D	4.5	93829.42	164407.65	
1417.265	0.006	70558.4	1417.251	0.014	30	8	62	61.37	0.02	0.003	70559.12	p6fd	5I4L	7.5	p6fp	5I6I	6.5	94777.03	165336.15	
1417.373	0.006	70553.1	1417.374	-0.001	106	76	754.6		-0.3	0.003	70553.02	p6fd	5G6I	6.5	p6fp	5F4G	5.5	103182.95	173735.97	
1417.46	0.006	70548.7	1417.469	-0.009	50	16	18.92		0.04	0.003	70548.27	p6fd	3K4K2	5.5	p6fp	5F6G	4.5	107867.15	178415.42	
1417.713	0.013	70536.1	1417.72	-0.007	109	60	320.2		-0.1	0.003	70535.81	p6fd	3K2I2	5.5	p6fp	3K4K2	5.5	110962.37	181498.18	asym
1418.153	0.006	70514.2	1418.1505	0.0025	74	39	193.3	196.8	0.16	0.0021	70514.38	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5I6I	7.5	90598.25	161112.63	
1419.268	0.006	70458.8	1419.259	0.009	82	38	63.47		0.05	0.003	70459.32	p6fd	5G4G	5.5	p6fp	5F6G	5.5	105647.38	176106.7	
1419.313	0.006	70456.6	1419.32	-0.007	102	9	52.74	51.85	-0.03	0.003	70456.26	p6fd	5I6K	8.5	p6fp	5I4I	7.5	85345.47	155801.73	
1419.597	0.006	70442.5	1419.609	-0.012	40		48.49		0.44	0.003	70441.91	p6fd	5I6L	5.5	p6fp	5I4I	6.5	91169.03	161610.94	
1419.788	0.013	70433	1419.765	0.023	184	140	1653	1633	-0.94	0.005	70434.17	p6fd	5F6H	6.5	p6fp	3K4I2	7.5	100336.84	170771.01	Q
1420.005	0.013	70422.3	1420.0058	-0.0008	12	3	123.5	136.6	0.14	0.0021	70422.25	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5F4G	5.5	94476.52	164898.77	bl
1420.266	0.006	70409.3	1420.272	-0.006	63	18	175.4	174.6	0.03	0.004	70409.05	p6fd	5I4L	8.5	p6fp	5I6I	7.5	90703.58	161112.63	
1421.291	0.006	70358.6	1421.289	0.002	41		52.5		0.04	0.003	70358.65	p6fd	3K4I2	6.5	p6fp	3K4K2	5.5	111139.53	181498.18	
1422.477	0.013	70299.9	1422.493	-0.016	76	9	455		0.25	0.003	70299.11	p6fd	5G4H	6.5	p6fp	5G6H	6.5	111812.03	182111.14	bl
1422.603	0.006	70293.7	1422.6024	0.0006	217	161	276.3	282.6	0.3	0.0022	70293.71	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5I6H	5.5	95252.01	165545.72	

TABLE B.1 – suite

1423.535	0.006	70247.7	1423.539	-0.004	15		75.07	77.43	0.2	0.003	70247.45	p6fd	5F6H	6.5	p6fp	5I4H	5.5	92064.18	162311.63	
1424.549	0.006	70197.7	1424.557	-0.008	211	129	2051	2055	0.84	0.0022	70197.26	p6fd	5I4G	3.5	p6fp	5I6H	4.5	95872.73	166069.99	
1424.65	0.006	70192.7	1424.654	-0.004	116	79	330.5	333.7	-0.06	0.0023	70192.48	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I6H	6.5	82921.38	153113.86	
1425.538	0.006	70148.9	1425.547	-0.009	263	182	1613	1607	-0.31	0.003	70148.53	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6K	7.5	83376.61	153525.14	
1426.032	0.006	70124.6	1426.0408	-0.0088	346	231	3965	3976	0.88	0.0024	70124.22	p6fd	5I4G	4.5	p6fp	5I4H	5.5	92187.41	162311.63	
1426.533	0.006	70100.1	1426.5368	-0.0038	107	43	229.2	233.1	-0.12	0.0021	70099.84	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I4I	6.5	91511.1	161610.94	
1427.315	0.006	70061.6	1427.318	-0.003	255	157	1452	1440	0.63	0.0021	70061.47	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I4I	7.5	85740.26	155801.73	
1428.085	0.006	70023.8	1428.0924	-0.0074	216	150	725.6	837.6	0.29	0.002	70023.48	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I4H	6.5	86559.22	156582.7	
1428.288	0.006	70013.9	1428.292	-0.004	136	28	331.4	330.9	0.37	0.003	70013.68	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6I	8.5	84992.52	155006.2	
1428.42	0.006	70007.4	1428.431	-0.011	75	25	345.6		0.2	0.003	70006.9	p6fd	5F4H	4.5	p6fp	5G6F	4.5	103907.65	173914.55	
1428.488	0.013	70004.1	1428.488	0	125	81	50.58	50.53	-0.01	0.003	70004.09	p6fd	5I6I	5.5	p6fp	5I6H	6.5	83109.77	153113.86	asym
1429.275	0.006	69965.5	1429.27	0.005	13	4	10.86		0.01	0.004	69965.81	p6fd	3I2L1	7.5	p6fp	3L4K	6.5	123896.35	193862.16	
1429.97	0.009	69931.5	1429.978	-0.008	158	96	1500		0.56	0.003	69931.17	p6fd	5G6I	6.5	p6fp	5G6H	5.5	104900.14	174831.31	D
1429.97	0.009	69931.5	1429.9783	-0.0083	158	96	97.12		0.24	0.0023	69931.13	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5F6D	4.5	94476.52	164407.65	D
1430.118	0.006	69924.3	1430.121	-0.003	55	11	48.45		-0.1	0.004	69924.15	p6fd	5S4D	3.5	p6fp	5F4D	3.5	103413.95	173338.1	
1430.58	0.006	69901.7	1430.5793	0.0007	170	129	1171	1087	0.38	0.0024	69901.75	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F6G	4.5	98664.29	168566.04	
1430.717	0.006	69895	1430.717	0	116	61	40.03		0.02	0.004	69895.03	p6fd	3H4I4	6.5	p6fp	5F6G	5.5	106211.67	176106.7	
1431.895	0.013	69837.5	1431.886	0.009	97	44	233.1	224	0.15	0.003	69837.96	p6fd	5I6K	6.5	p6fp	5I4H	6.5	86744.74	156582.7	asym
1432.131	0.006	69826	1432.141	-0.01	82	25	170.5	165.9	-0.16	0.003	69825.53	p6fd	5I6L	7.5	p6fp	5I4H	6.5	86757.17	156582.7	
1432.674	0.006	69799.6	1432.6742	-0.0002	94	48	90.68	91.32	0.21	0.0024	69799.54	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5I4I	5.5	98664.29	168463.83	
1433.549	0.006	69756.9	1433.5508	-0.0018	106	82	189.7		0.12	0.0025	69756.86	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5G6F	4.5	104157.69	173914.55	
1433.953	0.006	69737.3	1433.954	-0.001	219	137	984.5	985.3	-0.29	0.003	69737.25	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I6H	6.5	83376.61	153113.86	
1434.494	0.006	69711	1434.4961	-0.0021	407	309	4377	4274	0.64	0.0023	69710.89	p6fd	5I4G	5.5	p6fp	5I4H	6.5	86871.81	156582.7	
1435.535	0.006	69660.4	1435.529	0.006	88	38	138.7	139.1	0.06	0.003	69660.73	p6fd	5I6K	8.5	p6fp	5I6I	8.5	85345.47	155006.2	
1435.579	0.006	69658.3	1435.5841	-0.0051	62	38	270		-0.14	0.0024	69658.06	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5I6I	4.5	98664.29	168322.35	
1435.811	0.006	69647	1435.817	-0.006	9	2	39.98	34.19	0.04	0.0022	69646.76	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5F4G	5.5	95252.01	164898.77	
1437.222	0.006	69578.7	1437.2301	-0.0081	35		148.7		-0.08	0.0023	69578.28	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F4G	5.5	104157.69	173735.97	
1437.357	0.013	69572.1	1437.344	0.013	75	146	19.29		0.02	0.003	69572.76	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5I6I	4.5	90798.83	160371.59	f
1437.883	0.013	69546.7	1437.882	0.001	65	85	46.48	47.13	-0.14	0.003	69546.76	p6fd	5F6H	6.5	p6fp	5I4I	6.5	92064.18	161610.94	bl
1438.156	0.013	69533.5	1438.152	0.004	33	34	34.79		-0.02	0.0022	69533.68	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5F6D	4.5	94873.97	164407.65	bl
1438.803	0.013	69502.2	1438.8	0.003	7	180	136.5		-0.12	0.004	69502.37	p6fd	5F4F	3.5	p6fp	5G6H	4.5	107499.89	177002.26	bl
1440.585	0.006	69416.3	1440.5899	-0.0049	50	21	15.43	15.71	-0.02	0.002	69416.01	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5I4I	4.5	27766.68	97182.69	
1441.096	0.013	69391.6	1441.09	0.006	10		26.88	27.13	-0.02	0.003	69391.93	p6fd	5I4K	5.5	p6fp	5I6H	5.5	96153.79	165545.72	bl
1441.231	0.013	69385.1	1441.243	-0.012	24		81.27		-0.14	0.006	69384.5	p6fd	5G4I	7.5	p6fp	5G6H	7.5	110683.3	180067.84	bl
1442.078	0.006	69344.4	1442.087	-0.009	47	30	183.5		-0.61	0.003	69343.96	p6fd	5G6G	6.5	p6fp	3K4I2	7.5	101427.05	170771.01	
1444.695	0.006	69218.7	1444.689	0.006	10		10.58		-0.03	0.004	69219.05	p6fd	5G6H	6.5	p6fp	5G6H	7.5	110848.79	180067.84	
1444.758	0.006	69215.8	1444.767	-0.009	22	5	10.5		-0.15	0.003	69215.31	p6fd	5G4I	7.5	p6fp	3K4I2	7.5	101555.7	170771.01	
1446.309	0.006	69141.5	1446.309	0	11		26.23		0.02	0.003	69141.5	p6fd	5F4H	4.5	p6fp	5F4F	4.5	103907.65	173049.15	
1446.439	0.006	69135.3	1446.449	-0.01	63	27	660.2		0.43	0.003	69134.82	p6fd	3K4I2	4.5	p6fp	3K4K2	5.5	112363.36	181498.18	

TABLE B.1 – suite

1447.288	0.006	69094.8	1447.2781	0.0099	9	1	12.56		0.01	0.0022	69095.22	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I6K	5.5	91511.1	160606.32	
1447.351	0.006	69091.7	1447.352	-0.001	27	14	112.3	111.1	-0.03	0.005	69091.67	p6fd	5I6L	9.5	p6fp	5I6I	8.5	85914.53	155006.2	
1448.257	0.006	69048.5	1448.258	-0.001	39	3	30.54	31.82	0.14	0.003	69048.45	p6fd	5F6H	6.5	p6fp	5I6I	7.5	92064.18	161112.63	
1448.337	0.013	69044.7	1448.34	-0.003	17		49.25	48.27	-0.1	0.003	69044.56	p6fd	5I6L	7.5	p6fp	5I4I	7.5	86757.17	155801.73	p
1449.17	0.006	69005	1449.17	0	91	98	33.96		0.05	0.003	69005.04	p6f11	2I2I	5.5	p6fd	5G6G	5.5	41609.23	110614.27	
1450.458	0.013	68943.7	1450.471	-0.013	16		43.92		-0.1	0.003	68943.13	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	5I4I	4.5	28239.56	97182.69	bl
1451.637	0.006	68887.8	1451.6464	-0.0094	129	32	146.7	146.3	-0.12	0.0022	68887.3	p6fd	5I4I	4.5	p6fp	5I6H	4.5	97182.69	166069.99	
1452.367	0.006	68853.1	1452.3708	-0.0038	182	58	80.36		0.08	0.0021	68852.94	p6fd	3F4G4	5.5	p6fp	3K4K2	5.5	112645.24	181498.18	
1452.719	0.006	68836.4	1452.732	-0.013	57	22	86.71		-0.07	0.003	68835.83	p6fd	5G6I	6.5	p6fp	5F4G	5.5	104900.14	173735.97	
1454.061	0.013	68772.9	1454.056	0.005	99	29	77.09		0.05	0.004	68773.15	p6fd	5G6F	4.5	p6fp	5F6G	4.5	109642.27	178415.42	asym
1457.444	0.006	68613.3	1457.4287	0.0153	13	23	17.27		0.02	0.0024	68613.99	p6fd	5I4K	6.5	p6fp	5I4H	5.5	93697.64	162311.63	
1457.8	0.006	68596.5	1457.793	0.007	22	5	22.11		-0.01	0.003	68596.83	p6fd	5I6L	6.5	p6fp	5I6K	6.5	89157.82	157754.65	
1458.979	0.013	68541.1	1458.957	0.022	97	42	14.77		0.07	0.003	68542.1	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5F6H	4.5	27766.68	96308.78	asym Q
1460.004	0.006	68493	1460.01	-0.006	60	40	322.6		0.13	0.003	68492.67	p6fd	5G6G	4.5	p6fp	5G6F	4.5	105421.88	173914.55	
1460.844	0.006	68453.6	1460.834	0.01	101	66	14.14		0.02	0.005	68454.03	p6f11	2I2I	6.5	p6fd	3L4I	7.5	44390.14	112844.17	
1461.114	0.006	68440.9	1461.117	-0.003	46	12	385.6		-0.25	0.003	68440.81	p6fd	5G4G	5.5	p6fp	5G6H	5.5	106390.5	174831.31	
1463.015	0.006	68352	1463.009	0.006	245	173	29.2		0.06	0.003	68352.3	p6fd	3H4F4	4.5	p6fp	5F6G	5.5	107754.4	176106.7	
1463.38	0.006	68334.9	1463.387	-0.007	9	14	38.33		-0.02	0.004	68334.63	p6fd	5F4H	5.5	p6fp	5I6I	4.5	99987.72	168322.35	
1464.048	0.006	68303.8	1464.047	0.001	169	166	782.2	778.3	-0.13	0.003	68303.82	p6fd	5I4K	8.5	p6fp	5I4K	8.5	79154.17	147457.99	
1466.714	0.013	68179.6	1466.713	0.001	167	162	359.2	350.5	0.04	0.003	68179.67	p6fd	5I6K	8.5	p6fp	5I6K	7.5	85345.47	153525.14	asym
1468.132	0.006	68113.8	1468.12	0.012	248	156	59.45	59.83	-0.01	0.003	68114.31	p6fd	5I6I	6.5	p6fp	5I6H	7.5	78916.83	147031.14	
1468.291	0.006	68106.4	1468.2983	-0.0073	90	12	16.82	16.87	-0.05	0.0022	68106.05	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5I4G	3.5	27766.68	95872.73	
1468.679	0.006	68088.4	1468.675	0.004	22		27.03		-0.01	0.003	68088.59	p6fd	5G4G	5.5	p6fp	5F4G	5.5	105647.38	173735.97	
1471.982	0.006	67935.6	1471.982	0	293	193	1457	1438	0.14	0.004	67935.62	p6fd	5I4L	9.5	p6fp	5I4K	8.5	79522.37	147457.99	
1472.815	0.006	67897.2	1472.822	-0.007	77	62	13.91		-0.08	0.005	67896.86	p6fd	5D6G	5.5	p6fp	3L4K	5.5	129653.34	197550.2	
1473.255	0.006	67876.9	1473.254	0.001	148	103	522.8	526.8	-0.12	0.003	67876.97	p6fd	5I4K	8.5	p6fp	5I6H	7.5	79154.17	147031.14	
1473.794	0.006	67852.1	1473.797	-0.003	151	132	23.56		-0.06	0.004	67851.97	p6fd	5F4F	3.5	p6fp	5S6P	3.5	107499.89	175351.86	
1474.535	0.006	67818	1474.5276	0.0074	34	15	216.9	214.4	0.17	0.0025	67818.33	p6fd	5I4H	3.5	p6fp	5I6H	4.5	98251.66	166069.99	
1474.79	0.006	67806.3	1474.795	-0.005	67	50	13.2		0	0.003	67806.02	p6fd	5I4K	7.5	p6fp	5I6K	6.5	89948.63	157754.65	
1475.257	0.006	67784.8	1475.2552	0.0018	31	12	123.6	122.4	0.11	0.0023	67784.88	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I6K	7.5	85740.26	153525.14	
1475.332	0.006	67781.4	1475.328	0.004	67	46	49.26	48.97	0.16	0.003	67781.52	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5I4I	6.5	93829.42	161610.94	
1475.606	0.006	67768.8	1475.6029	0.0031	15		16.68	16.39	-0.04	0.0022	67768.91	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5I4I	5.5	26707.61	94476.52	
1476.997	0.006	67705	1476.996	0.001	67	41	13.88	14.24	0.15	0.003	67705.01	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I6I	5.5	15404.76	83109.77	
1477.779	0.013	67669.1	1477.778	0.001	29		17.04	15.79	0	0.004	67669.17	p6fd	5I6H	7.5	p6fp	5I6H	7.5	79361.97	147031.14	asym
1478.558	0.006	67633.5	1478.564	-0.006	115	72	60.96		-0.08	0.003	67633.17	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	5I4G	3.5	28239.56	95872.73	
1479.553	0.006	67588	1479.551	0.002	28	28	75		-0.13	0.004	67588.06	p6fd	5G6I	6.5	p6fp	3K4I2	7.5	103182.95	170771.01	
1480.598	0.006	67540.3	1480.5971	0.0009	159	133	93.35	91.75	-0.11	0.0023	67540.32	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5I4G	5.5	19331.49	86871.81	
1480.949	0.013	67524.3	1480.948	0.001	19		13.86		-0.01	0.004	67524.3	p6fd	3H4I4	6.5	p6fp	5F4G	5.5	106211.67	173735.97	f

TABLE B.1 – suite

1481.803	0.006	67485.3	1481.8035	-0.0005	48	42	21.76	22.04	-0.06	0.0023	67485.33	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5F6D	4.5	27766.68	95252.01	
1482.544	0.006	67451.6	1482.544	0	65	36	34.61	35.11	-0.07	0.003	67451.62	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4G	4.5	24735.79	92187.41	
1483.398	0.006	67412.8	1483.403	-0.005	8		15.61		-0.05	0.003	67412.57	p6fd	5G6G	6.5	p6fp	5I4K	6.5	101427.05	168839.62	
1484.263	0.006	67373.5	1484.2609	0.0021	38	29	147.7	147.6	0.06	0.0022	67373.6	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I6H	6.5	85740.26	153113.86	
1484.551	0.006	67360.5	1484.561	-0.01	16		165.4		0.1	0.004	67359.99	p6fd	5G6F	4.5	p6fp	5G6H	4.5	109642.27	177002.26	
1484.871	0.006	67345.9	1484.881	-0.01	2		19.03		0.01	0.003	67345.47	p6fd	5G4G	5.5	p6fp	5F4G	5.5	106390.5	173735.97	
1487.485	0.006	67227.6	1487.4814	0.0036	124	89	34.77	39.14	-0.12	0.0021	67227.73	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5I6H	5.5	19331.49	86559.22	
1489.063	0.006	67156.3	1489.0614	0.0016	72	31	288.7	282.3	-0.08	0.0021	67156.4	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5I6K	6.5	90598.25	157754.65	
1489.103	0.013	67154.5	1489.095	0.008	33		17.72		-0.01	0.005	67154.9	p6fd	5G6H	5.5	p6fp	5G6H	4.5	109847.36	177002.26	p
1489.547	0.006	67134.5	1489.5489	-0.0019	28		109.3		0.12	0.0023	67134.42	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5I4I	6.5	94476.52	161610.94	
1490.151	0.006	67107.3	1490.1511	-1.00E-04	128	65	56.32	55.89	-0.08	0.0021	67107.29	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5I4H	4.5	27766.68	94873.97	
1490.82	0.006	67077.2	1490.826	-0.006	7		20.42		-0.04	0.003	67076.91	p6fd	3H4F4	4.5	p6fp	5G6H	5.5	107754.4	174831.31	
1491.214	0.006	67059.5	1491.2104	0.0036	16		26.9	27.12	0.06	0.0024	67059.62	p6fd	5F6D	4.5	p6fp	5I4H	5.5	95252.01	162311.63	
1492.264	0.013	67012.3	1492.26	0.004	15		19.53		-0.09	0.003	67012.45	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	5F6D	4.5	28239.56	95252.01	f
1492.768	0.006	66989.7	1492.7594	0.0086	93	37	13.34	13.4	-0.07	0.0025	66990.03	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5I4K	6.5	26707.61	93697.64	
1494.571	0.006	66908.9	1494.574	-0.003	22		63.62	63.42	0.02	0.003	66908.68	p6fd	5I4K	6.5	p6fp	5I6K	5.5	93697.64	160606.32	
1496.234	0.006	66834.5	1496.246	-0.012	4		11.41		0.03	0.003	66833.91	p6fd	5I4L	7.5	p6fp	5I4I	6.5	94777.03	161610.94	
1496.363	0.013	66828.7	1496.347	0.016	29	8	65.71	65.32	0.03	0.003	66829.41	p6fd	5I4K	5.5	p6fp	5I6K	4.5	96153.79	162983.2	f
1497.558	0.013	66775.4	1497.5595	-0.0015	52	29	16.33	16.82	0.06	0.0025	66775.31	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4H	5.5	24735.79	91511.1	asym
1497.714	0.013	66768.4	1497.724	-0.01	50	16	52.7	52.1	-0.03	0.003	66767.97	p6fd	5I6L	7.5	p6fp	5I6K	7.5	86757.17	153525.14	asym
1498.59	0.006	66729.4	1498.5923	-0.0023	17		51.13	51.89	0.03	0.0022	66729.29	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5I6I	5.5	90598.25	157327.54	
1499.03	0.006	66709.8	1499.0292	0.0008	155	89	70.32	71.45	-0.19	0.0023	66709.84	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5I4I	5.5	27766.68	94476.52	
1499.872	0.006	66672.3	1499.8832	-0.0112	24		11.58		0.07	0.0024	66671.86	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5I6I	6.5	98664.29	165336.15	
1500.74	0.006	66633.8	1500.726	0.014	22		47.1		-0.1	0.003	66634.41	p6f11	4G4G	3.5	p6fd	5I4H	4.5	28239.56	94873.97	
1501.152	0.006	66615.5	1501.1391	0.0129	42		61.43	59.68	-0.04	0.0021	66616.08	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I6I	5.5	90711.46	157327.54	
1502.518	0.013	66554.9	1502.5248	-0.0068	43	14	26.93	33.42	-0.01	0.0024	66554.64	p6fd	5I6H	5.5	p6fp	5I6H	6.5	86559.22	153113.86	asym
1503.029	0.006	66532.3	1503.02	0.009	54		119.4		-0.05	0.003	66532.71	p6fd	5F6G	5.5	p6fp	5F6G	4.5	102033.33	168566.04	
1505.37	0.006	66428.9	1505.369	0.001	21		148.1		-0.05	0.003	66428.88	p6fd	3H4H4	6.5	p6fp	5G6H	5.5	108402.43	174831.31	
1505.825	0.006	66408.8	1505.8252	-0.0002	274	158	121.6	123.9	-0.2	0.0022	66408.77	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5I4H	6.5	19331.49	85740.26	
1508.564	0.006	66288.2	1508.545	0.019	37	3	59		0.03	0.003	66289.02	p6fd	5F6G	5.5	p6fp	5I6I	4.5	102033.33	168322.35	
1509.618	0.013	66241.9	1509.615	0.003	100	19	369.7	367.9	-0.18	0.003	66242.05	p6fd	5I4G	5.5	p6fp	5I6H	6.5	86871.81	153113.86	asym
1509.789	0.006	66234.4	1509.7877	0.0013	127	74	711.1	707.7	-0.3	0.0024	66234.48	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F4G	5.5	98664.29	164898.77	
1511.478	0.006	66160.4	1511.484	-0.006	46		199.3		-0.15	0.003	66160.15	p6fd	3H4F4	4.5	p6fp	5G6F	4.5	107754.4	173914.55	
1512.012	0.013	66137	1512.026	-0.014	10		34.8		-0.09	0.007	66136.4	p6fd	3K4H2	3.5	p6fp	5F6G	4.5	112279	178415.42	f
1512.181	0.006	66129.6	1512.1776	0.0034	54	11	154.3	148.8	-0.08	0.0024	66129.8	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5I6K	5.5	94476.52	160606.32	
1513.673	0.006	66064.5	1513.672	0.001	45		74.01		0.04	0.003	66064.5	p6fd	5F4H	5.5	p6fp	5F4G	5.5	107671.47	173735.97	
1513.966	0.006	66051.7	1513.957	0.009	19		13.32		-0.02	0.003	66052.06	p6fd	3K4I2	4.5	p6fp	5F6G	4.5	112363.36	178415.42	
1515.084	0.006	66002.9	1515.086	-0.002	16		43.67	42.46	-0.11	0.003	66002.85	p6fd	5F6H	4.5	p6fp	5I4H	5.5	96308.78	162311.63	
1515.508	0.006	65984.5	1515.5086	-0.0006	27		58.83	59.35	-0.03	0.0023	65984.45	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5I4H	6.5	90598.25	156582.7	



TABLE B.1 – suite

1515.578	0.006	65981.4	1515.575	0.003	6		76.72		0.08	0.003	65981.57	p6fd	3H4F4	4.5	p6fp	5F4G	5.5	107754.4	173735.97	
1515.713	0.006	65975.6	1515.7103	0.0027	53	6	14.24	14.01	-0.05	0.0023	65975.67	p6f11	4F4F	4.5	p6fd	5I4H	5.5	24735.79	90711.46	
1517.564	0.006	65895.1	1517.5642	-0.0002	4		45.1	45.74	0.04	0.0025	65895.07	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5I6I	4.5	94476.52	160371.59	
1518.129	0.013	65870.6	1518.122	0.007	21		83.21		-0.05	0.004	65870.87	p6fd	5G6I	6.5	p6fp	3K4I2	7.5	104900.14	170771.01	bl
1519.375	0.006	65816.5	1519.3772	-0.0022	116	55	173.7	176.3	0.08	0.0023	65816.44	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I6I	5.5	91511.1	157327.54	
1519.748	0.006	65800.4	1519.745	0.003	79	29	247.5	244.2	-0.15	0.003	65800.51	p6fd	5I4I	4.5	p6fp	5I6K	4.5	97182.69	162983.2	
1519.907	0.013	65793.5	1519.89	0.017	44		80.93		0.07	0.003	65794.23	p6fd	5I4I	4.5	p6fp	5I6I	3.5	97182.69	162976.92	f
1520.386	0.006	65772.8	1520.381	0.005	7		15.08		0.02	0.003	65772.98	p6fd	3L2I	5.5	p6fp	5G6H	5.5	118788.68	184561.66	
1521.073	0.006	65743.1	1521.066	0.007	101	42	324.1	326.7	-0.21	0.003	65743.36	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F6D	4.5	98664.29	164407.65	
1521.326	0.006	65732.1	1521.3209	0.0051	30		115.7	114	0.13	0.0023	65732.35	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5I6K	5.5	94873.97	160606.32	
1523.833	0.006	65624	1523.828	0.005	42		55.91		0.3	0.004	65624.19	p6fd	5F4D	3.5	p6fp	5I6H	4.5	100445.8	166069.99	
1525.137	0.006	65567.9	1525.134	0.003	9		57.78		0.26	0.004	65568.01	p6fd	5G4F	4.5	p6fp	5F6G	5.5	110538.69	176106.7	
1526.114	0.006	65525.9	1526.119	-0.005	193	103	87.68		0.08	0.004	65525.67	p6fd	3K4K2	5.5	p6fp	5G6H	5.5	109305.64	174831.31	
1526.775	0.006	65497.5	1526.773	0.002	64		182	180.9	-0.1	0.0024	65497.62	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5I6I	4.5	94873.97	160371.59	
1526.887	0.006	65492.7	1526.894	-0.007	29		33.14		0.19	0.003	65492.43	p6fd	5G6G	5.5	p6fp	5F6G	5.5	110614.27	176106.7	
1533.669	0.006	65203.1	1533.6605	0.0085	81		69.22	69.36	0.1	0.0024	65203.48	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5I4I	7.5	90598.25	155801.73	
1534.01	0.006	65188.6	1534	0.01	12		18.97		-0.03	0.004	65189.04	p6fd	5G6F	4.5	p6fp	5G6H	5.5	109642.27	174831.31	
1535.154	0.006	65140.1	1535.152	0.002	152	83	545.4	548.8	0.42	0.003	65140.13	p6fd	5I4G	4.5	p6fp	5I6I	5.5	92187.41	157327.54	
1538.839	0.006	64984	1538.831	0.008	28		10.51		-0.01	0.004	64984.41	p6fd	3M4K	6.5	p6fp	5G6H	5.5	119577.25	184561.66	
1542.076	0.006	64847.6	1542.077	-0.001	54	22	49.02	47.36	-0.02	0.004	64847.6	p6fd	5I6L	8.5	p6fp	5I4K	8.5	82610.39	147457.99	
1543.122	0.006	64803.7	1543.1268	-0.0048	40		10.51	10.82	0.02	0.0023	64803.49	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5I4H	5.5	26707.61	91511.1	
1544.841	0.006	64731.6	1544.842	-0.001	47	19	205.6	201.8	0.28	0.003	64731.54	p6fd	5I4H	3.5	p6fp	5I6K	4.5	98251.66	162983.2	
1544.988	0.006	64725.4	1544.992	-0.004	145	127	343.2		-0.2	0.003	64725.26	p6fd	5I4H	3.5	p6fp	5I6I	3.5	98251.66	162976.92	
1546.383	0.013	64667	1546.384	-0.001	63	28	24.74		0.08	0.005	64666.99	p6fd	5S4D	3.5	p6fp	5F6G	4.5	103899.05	168566.04	asym
1549.349	0.006	64543.22	1549.347	0.002	17		27.55		0.02	0.005	64543.32	p6fd	3H4K2	6.5	p6fp	3L4K	6.5	129318.84	193862.16	
1550.408	0.006	64499.17	1550.415	-0.007	84	27	515.1	515.7	0.35	0.003	64498.86	p6fd	5I4G	3.5	p6fp	5I6I	4.5	95872.73	160371.59	
1551.079	0.013	64471.2	1551.083	-0.004	11		62.83		-0.09	0.003	64471.08	p6fs	5I6I	5.5	p6fp	5G6H	4.5	112531.18	177002.26	p
1551.518	0.006	64452.99	1551.529	-0.011	160	135	53.72		-0.02	0.003	64452.53	p6fd	5I4K	5.5	p6fp	5I6K	5.5	96153.79	160606.32	
1552.057	0.006	64430.61	1552.061	-0.004	95	42	13.7		-0.03	0.005	64430.44	p6fd	3F4H3	5.5	p6fp	3L4K	5.5	133119.76	197550.2	
1552.289	0.006	64420.99	1552.295	-0.006	183	115	108.7	109.4	-0.01	0.003	64420.73	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5I4G	4.5	27766.68	92187.41	
1552.588	0.013	64408.6	1552.594	-0.006	44		74.04	66.37	0.04	0.003	64408.35	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F6G	4.5	104157.69	168566.04	f
1559.618	0.006	64118.25	1559.608	0.01	59	27	19.27		0.05	0.003	64118.67	p6fd	5G6G	6.5	p6fp	5I6H	5.5	101427.05	165545.72	
1559.747	0.006	64112.95	1559.748	-0.001	50	21	37.29	36.36	-0.03	0.003	64112.92	p6fd	5F6H	7.5	p6fp	5I6K	6.5	93641.73	157754.65	
1562.417	0.006	64003.42	1562.406	0.011	81	12	11.16	10.34	-0.02	0.0022	64003.85	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5I4H	5.5	26707.61	90711.46	
1565.177	0.006	63890.53	1565.1745	0.0025	157	115	28.5	28.51	-0.13	0.0023	63890.64	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5I4I	6.5	26707.61	90598.25	
1568.768	0.006	63744.27	1568.7648	0.0032	97		51.48	52.56	0.14	0.0024	63744.42	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5I4H	5.5	27766.68	91511.1	
1571.585	0.006	63630.01	1571.588	-0.003	132	40	41.24	41	0.02	0.003	63629.9	p6fd	5I4K	6.5	p6fp	5I6I	5.5	93697.64	157327.54	
1572.581	0.006	63589.73	1572.577	0.004	129	62	45.92	47.97	0.16	0.003	63589.89	p6f11	2H2H2	5.5	p6fd	5I6K	6.5	19331.49	82921.38	

TABLE B.1 – suite

1572.928	0.01	63575.7	1572.908	0.02	51		96.08	93.73	-0.03	0.003	63576.51	p6fd	5I4K	7.5	p6fp	5I6K	7.5	89948.63	153525.14	bl Q
1575.503	0.006	63471.79	1575.505	-0.002	234	136	277.7		-0.16	0.003	63471.72	p6fd	5G6G	6.5	p6fp	5F4G	5.5	101427.05	164898.77	
1576.695	0.006	63423.8	1576.699	-0.004	55	44	64.63	62.83	0.07	0.003	63423.63	p6fd	5I4I	4.5	p6fp	5I6K	5.5	97182.69	160606.32	
1578.221	0.006	63362.47	1578.212	0.009	58	24	29.73		0.06	0.004	63362.85	p6fd	5F4F	3.5	p6fp	5I6I	3.5	107499.89	170862.74	
1579.394	0.006	63315.41	1579.388	0.006	210	61	15.96		-0.06	0.004	63315.68	p6fd	5F4H	5.5	p6fp	5I4I	4.5	107671.47	170987.15	
1580.886	0.006	63255.67	1580.899	-0.013	64	52	39.53		0.02	0.004	63255.15	p6fd	5I4L	6.5	p6fp	5I6K	5.5	97351.17	160606.32	
1582.545	0.006	63189.35	1582.556	-0.011	91	24	98.17		-0.06	0.003	63188.9	p6fd	5I4I	4.5	p6fp	5I6I	4.5	97182.69	160371.59	
1583.135	0.006	63165.8	1583.149	-0.014	70	18	33.71		-0.01	0.003	63165.23	p6fd	5I4K	7.5	p6fp	5I6H	6.5	89948.63	153113.86	
1584.249	0.006	63121.41	1584.241	0.008	93	80	16.92		0.02	0.003	63121.7	p6fd	5G6G	5.5	p6fp	5F4G	5.5	110614.27	173735.97	
1586.827	0.013	63018.8	1586.816	0.011	95	64	166.4		0.06	0.003	63019.28	p6fd	5G4H	6.5	p6fp	5G6H	5.5	111812.03	174831.31	f
1588.694	0.006	62944.79	1588.6941	-1.00E-04	76		42.75	42.46	-0.1	0.0023	62944.78	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5I4H	5.5	27766.68	90711.46	
1590.141	0.006	62887.5	1590.149	-0.008	6	20	54.06		-0.04	0.003	62887.18	p6fd	5G6H	6.5	p6fp	5F4G	5.5	110848.79	173735.97	
1599.599	0.006	62515.68	1599.6	-0.001	54	14	137.6	134.9	0.07	0.003	62515.61	p6fd	5I4I	6.5	p6fp	5I6H	6.5	90598.25	153113.86	
1600.88	0.006	62465.65	1600.884	-0.004	21	6	38.4	39.28	0.04	0.003	62465.47	p6fd	5I4I	7.5	p6fp	5I4K	8.5	84992.52	147457.99	
1601.181	0.006	62453.9	1601.1895	-0.0085	32	5	47.13	46.43	0.05	0.0025	62453.57	p6fd	5I4H	4.5	p6fp	5I6I	5.5	94873.97	157327.54	
1602.5	0.013	62402.5	1602.502	-0.002	31	63	38.85	37.45	-0.07	0.003	62402.4	p6fd	5I4H	5.5	p6fp	5I6H	6.5	90711.46	153113.86	asym
1605.139	0.006	62299.91	1605.133	0.006	53	41	18.25		-0.02	0.003	62300.13	p6fs	5I6I	5.5	p6fp	5G6H	5.5	112531.18	174831.31	
1606.694	0.013	62239.6	1606.69	0.004	38		15.84		-0.02	0.005	62239.77	p6fd	5G6H	4.5	p6fp	5I6I	4.5	106082.58	168322.35	bl
1608.357	0.013	62175.2	1608.35	0.007	10	2	47.78		0.11	0.004	62175.54	p6fd	5G4G	5.5	p6fp	5F6G	4.5	106390.5	168566.04	bl
1608.757	0.006	62159.81	1608.752	0.005	11		31	25.6	-0.43	0.003	62160	p6fd	5F6H	7.5	p6fp	5I4I	7.5	93641.73	155801.73	
1609.797	0.006	62119.62	1609.789	0.008	51	7	70.34	69.13	0.06	0.003	62119.93	p6fd	5I4H	3.5	p6fp	5I6I	4.5	98251.66	160371.59	
1609.978	0.013	62112.6	1609.981	-0.003	107		24.67	24.03	0.01	0.004	62112.52	p6fd	5I6K	8.5	p6fp	5I4K	8.5	85345.47	147457.99	p
1610.214	0.013	62103.5	1610.2	0.014	101	92	11.07	11.03	0.05	0.003	62104.09	p6fd	5I4K	6.5	p6fp	5I4I	7.5	93697.64	155801.73	asym
1614.864	0.013	61924.7	1614.884	-0.02	59	26	29.03		-0.03	0.003	61923.94	p6fd	5G4H	6.5	p6fp	5F4G	5.5	111812.03	173735.97	bl
1620.335	0.006	61715.62	1620.33	0.005	62	10	20.09		-0.01	0.003	61715.82	p6fd	5G6I	6.5	p6fp	5F4G	5.5	103182.95	164898.77	
1627.054	0.013	61460.8	1627.049	0.005	78	34	14.8	14.4	-0.12	0.004	61460.96	p6fd	5F6H	6.5	p6fp	5I6K	7.5	92064.18	153525.14	asym
1631.559	0.006	61291.09	1631.564	-0.005	31	9	73.69	72.45	-0.07	0.003	61290.88	p6fd	5I4H	6.5	p6fp	5I6H	7.5	85740.26	147031.14	
1633.007	0.013	61236.7	1632.989	0.018	163	42	24.9		0.02	0.003	61237.41	p6fd	3L4I	6.5	p6fp	5G6H	5.5	113593.9	174831.31	p Q
1633.473	0.006	61219.26	1633.47	0.003	68	24	18.2		0.19	0.003	61219.35	p6fd	5D4F	4.5	p6fp	3K4K2	5.5	120278.83	181498.18	
1638.682	0.013	61024.7	1638.681	0.001	71	43	20.14		-0.21	0.004	61024.7	p6fd	5I4L	7.5	p6fp	5I4I	7.5	94777.03	155801.73	p
1646.347	0.006	60740.55	1646.332	0.015	104	26	20.79		-0.01	0.003	60741.08	p6fd	5F4G	5.5	p6fp	5F4G	5.5	104157.69	164898.77	
1650.265	0.013	60596.3	1650.255	0.01	81	31	20.51		-0.06	0.004	60596.68	p6fd	3K4K2	5.5	p6fp	5I4I	5.5	107867.15	168463.83	asym
1651.017	0.006	60568.71	1651.013	0.004	10		45.87		0.13	0.005	60568.88	p6fd	3L4K	5.5	p6fp	3K4K2	5.5	120929.3	181498.18	
1656.775	0.006	60358.23	1656.773	0.002	1		13.04		-0.06	0.004	60358.31	p6fd	3M4K	5.5	p6fp	3K4K2	5.5	121139.87	181498.18	
1662.109	0.006	60164.54	1662.118	-0.009	269	145	76.98	74.27	-0.1	0.003	60164.2	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5I4G	5.5	26707.61	86871.81	
1663.232	0.013	60123.9	1663.234	-0.002	7		10.03		0.06	0.004	60123.84	p6fd	5G6G	4.5	p6fp	5I6H	5.5	105421.88	165545.72	asym
1670.789	0.013	59852	1670.799	-0.01	277	129	14.67		-0.07	0.003	59851.61	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5I6H	5.5	26707.61	86559.22	bl Al III
1671.484	0.013	59827.1	1671.472	0.012	47		11.75	10.84	0.02	0.003	59827.5	p6fd	5I4K	6.5	p6fp	5I6K	7.5	93697.64	153525.14	bl
1677.154	0.013	59624.8	1677.162	-0.008	8		32.16	31.04	-0.01	0.004	59624.53	p6fs	5I6I	8.5	p6fp	5I6K	8.5	101709.89	161334.42	bl

TABLE B.1 – suite

1686.784	0.006	59284.41	1686.783	0.001	1	3	17.62		-0.05	0.003	59284.44	p6fd	5F6H	5.5	p6fp	5I6H	6.5	93829.42	153113.86	
1691.897	0.006	59105.26	1691.901	-0.004	186	149	47.76	49.01	0.14	0.003	59105.13	p6f11	4G4G	4.5	p6fd	5I4G	5.5	27766.68	86871.81	
1693.972	0.006	59032.84	1693.978	-0.006	292	229	86.1	85.24	-0.17	0.003	59032.65	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5I4H	6.5	26707.61	85740.26	
1700.434	0.006	58808.52	1700.434	0	6		22.75		0.12	0.006	58808.5	p6fd	3M4K	8.5	p6fp	3K2L2	8.5	112330.72	171139.22	
1701.836	0.006	58760.07	1701.83	0.006	4		37.92		0.04	0.004	58760.27	p6fd	5G4G	5.5	p6fp	5F6D	4.5	105647.38	164407.65	
1705.393	0.013	58637.5	1705.398	-0.005	33	3	13.3	13.46	-0.03	0.003	58637.34	p6fd	5I4I	5.5	p6fp	5I6H	6.5	94476.52	153113.86	asym
1705.793	0.006	58623.77	1705.792	0.001	21	4	54.42		0.12	0.004	58623.79	p6fd	3K4I2	4.5	p6fp	5I4I	4.5	112363.36	170987.15	
1733.752	0.006	57678.37	1733.746	0.006	4		43.37	39.36	-0.15	0.004	57678.57	p6fd	3K4K2	5.5	p6fp	5I6H	5.5	107867.15	165545.72	
1768.517	0.006	56544.54	1768.514	0.003	3	52	209.3		0.03	0.003	56544.65	p6fd	3K4L2	6.5	p6fp	5I6K	7.5	109125.55	165670.2	
1775.957	0.006	56307.67	1775.945	0.012	21		69.52		-0.08	0.003	56308.05	p6fs	5I6I	6.5	p6fp	5F4G	5.5	108590.72	164898.77	
1778.934	0.006	56213.44	1778.924	0.01	83		23.35	23.67	0.11	0.003	56213.77	p6f11	4G4G	5.5	p6fd	5I6K	6.5	26707.61	82921.38	
1779.033	0.006	56210.31	1779.024	0.009	6	7	86.14		0.01	0.003	56210.6	p6fd	3K4L2	6.5	p6fp	5I6I	6.5	109125.55	165336.15	
1781.272	0.006	56139.65	1781.271	0.001	29		117.4	115.4	-0.05	0.003	56139.68	p6fs	5I4I	6.5	p6fp	5I4K	6.5	112699.94	168839.62	
1791.197	0.013	55828.6	1791.22	-0.023	21		62.64		0.04	0.004	55827.87	p6fd	5D4F	4.5	p6fp	5F6G	5.5	120278.83	176106.7	asym Q
1792.968	0.013	55773.5	1792.975	-0.007	17		36.69		-0.06	0.003	55773.22	p6fd	3K4L2	6.5	p6fp	5F4G	5.5	109125.55	164898.77	asym
1797.665	0.006	55627.72	1797.674	-0.009	17		48.48		0.02	0.003	55627.44	p6fs	5F6F	5.5	p6fp	5G6H	5.5	119203.87	174831.31	
1822.484	0.013	54870.2	1822.492	-0.008	12	13	16.33		0.04	0.004	54869.93	p6fd	3L4I	6.5	p6fp	5I4I	5.5	113593.9	168463.83	asym
1827.803	0.006	54710.51	1827.797	0.006	6		110.6		0.08	0.004	54710.68	p6fs	5F6F	5.5	p6fp	5G6F	4.5	119203.87	173914.55	
1830.214	0.006	54638.42	1830.22	-0.006	99	89	505.9	502.5	0.16	0.003	54638.23	p6fs	5I4I	7.5	p6fp	5I6K	6.5	103116.42	157754.65	
1832.058	0.006	54583.43	1832.061	-0.003	19	21	118.2	84.86	0.23	0.005	54583.35	p6fd	3K2I2	5.5	p6fp	5I6H	5.5	110962.37	165545.72	
1832.5	0.013	54570.3	1832.501	-0.001	53	21	254.7		0.13	0.004	54570.23	p6fs	5F6F	5.5	p6fp	5G6F	4.5	119344.32	173914.55	p
1833.786	0.006	54531.98	1833.782	0.004	104	97	1398		0.58	0.003	54532.1	p6fs	5F6F	5.5	p6fp	5F4G	5.5	119203.87	173735.97	
1838.021	0.006	54406.35	1838.026	-0.005	86	103	43.25		-0.09	0.004	54406.19	p6fd	3K4I2	6.5	p6fp	5I6H	5.5	111139.53	165545.72	
1838.504	0.013	54392	1838.517	-0.013	225	181	2920		0.72	0.004	54391.65	p6fs	5F6F	5.5	p6fp	5F4G	5.5	119344.32	173735.97	p
1839.083	0.006	54374.92	1839.091	-0.008	11	4	27.5		0.35	0.004	54374.68	p6fd	5G6G	6.5	p6fp	5I4I	7.5	101427.05	155801.73	
1843.459	0.006	54245.84	1843.453	0.006	14		3841		0.71	0.004	54246.03	p6fd	5G4I	7.5	p6fp	5I4I	7.5	101555.7	155801.73	
1845.136	0.006	54196.54	1845.134	0.002	159	44	94.11		-0.17	0.004	54196.62	p6fd	3K4I2	6.5	p6fp	5I6I	6.5	111139.53	165336.15	
1848.707	0.006	54091.85	1848.708	-0.001	467	159	3841	3857	0.71	0.003	54091.84	p6fs	5I6I	8.5	p6fp	5I4I	7.5	101709.89	155801.73	
1856.71	0.006	53858.7	1856.729	-0.019	118	77	64.34		-0.41	0.004	53858.17	p6fd	5G4H	6.5	p6fp	5I6K	7.5	111812.03	165670.2	
1857.984	0.013	53821.8	1857.982	0.002	117	21	92.41		-0.13	0.009	53821.8	p6fd	5G4H	5.5	p6fp	5I4I	5.5	114642	168463.83	p
1860.273	0.013	53755.6	1860.274	-0.001	118	122	11.99		0.08	0.011	53755.5	p6fd	3M4K	7.5	p6fp	3K2L2	8.5	117383.7	171139.22	asym
1861.047	0.006	53733.2	1861.03	0.017	28	51	17.48		-0.05	0.004	53733.69	p6fd	5G4H	6.5	p6fp	5I6H	5.5	111812.03	165545.72	
1861.47	0.006	53720.99	1861.473	-0.003	376	333	5517	5724	0.81	0.003	53720.91	p6fs	5I6I	6.5	p6fp	5I4H	5.5	108590.72	162311.63	

TABLE B.1 – suite

1862.038	0.006	53704.59	1862.03	0.008	5	26	946.4		0.38	0.004	53704.83	p6fs	5F6F	5.5	p6fp	5F4F	4.5	119344.32	173049.15	
1867.554	0.006	53545.96	1867.55	0.004	402	253	3188	3299	0.5	0.003	53546.08	p6fs	5I6I	7.5	p6fp	5I4I	6.5	108064.86	161610.94	
1867.801	0.006	53538.9	1867.804	-0.003	307	221	7590		0.94	0.003	53538.81	p6fs	5I6I	5.5	p6fp	5I6H	4.5	112531.18	166069.99	
1868.322	0.006	53523.95	1868.317	0.005	13	26	21.39		-0.06	0.004	53524.12	p6fd	5G4H	6.5	p6fp	5I6I	6.5	111812.03	165336.15	
1870.329	0.006	53466.54	1870.338	-0.009	683	597	10430	10720	0.86	0.003	53466.28	p6fs	5I4I	7.5	p6fp	5I4H	6.5	103116.42	156582.7	
1871.789	0.006	53424.82	1871.792	-0.003	428	306	118.1	7450**	0.33	0.003	53424.75	p6fd	3F4G4	5.5	p6fp	5I6H	4.5	112645.24	166069.99	
1873.072	0.006	53388.23	1873.072	0	902	679	18770	18850	1	0.005	53388.22	p6fs	5I6I	8.5	p6fp	5I6K	9.5	101709.89	155098.11	
1875.757	0.013	53311.8	1875.728	0.029	112	84	1320		0.36	0.005	53312.62	p6fs	5F4F	4.5	p6fp	5G6F	4.5	120601.93	173914.55	asym Q
1876.294	0.006	53296.56	1876.303	-0.009	674	487	8732	8797	0.82	0.004	53296.31	p6fs	5I6I	8.5	p6fp	5I6I	8.5	101709.89	155006.2	
1877.243	0.013	53269.6	1877.245	-0.002	361	494	15230	15700	0.99	0.005	53269.56	p6fs	5I6I	7.5	p6fp	5I6K	8.5	108064.86	161334.42	p
1880.18	0.006	53186.38	1880.191	-0.011	179	286	3644		0.82	0.003	53186.08	p6fd	3K4L2	6.5	p6fp	5I4H	5.5	109125.55	162311.63	
1880.251	0.006	53184.38	1880.253	-0.002	8		16.34		-0.14	0.005	53184.33	p6fd	3I4G1	4.5	p6fp	5F6G	5.5	122922.37	176106.7	
1882.036	0.006	53133.95	1882.033	0.003	59	69	2389		0.52	0.004	53134.04	p6fs	5F4F	4.5	p6fp	5F4G	5.5	120601.93	173735.97	
1884.688	0.006	53059.17	1884.685	0.003	142	101	943.5		0.55	0.005	53059.27	p6fd	5D4F	4.5	p6fp	5F4D	3.5	120278.83	173338.1	
1885.085	0.006	53047.99	1885.093	-0.008	523	246	7217	7493	0.68	0.003	53047.77	p6fs	5I6I	7.5	p6fp	5I6I	7.5	108064.86	161112.63	
1886.066	0.006	53020.41	1886.073	-0.007	372	236	5293	5519	0.78	0.003	53020.22	p6fs	5I6I	6.5	p6fp	5I4I	6.5	108590.72	161610.94	
1886.272	0.006	53014.62	1886.275	-0.003	616	380	6511		0.82	0.003	53014.54	p6fs	5I6I	5.5	p6fp	5I6H	5.5	112531.18	165545.72	
1887.48	0.006	52980.69	1887.48	0	331	209	3083		0.81	0.005	52980.68	p6fs	5G6G	4.5	p6fp	5G6H	5.5	131580.98	184561.66	
1887.849	0.006	52970.35	1887.852	-0.003	628	451	13500	13840	-0.99	0.003	52970.26	p6fs	5I4I	6.5	p6fp	5I6K	7.5	112699.94	165670.2	
1888.075	0.006	52964	1888.079	-0.004	122	83	1347		-0.61	0.004	52963.88	p6fs	5I4I	4.5	p6fp	5I4I	4.5	118023.27	170987.15	
1890.337	0.006	52900.63	1890.342	-0.005	330	238	104.4	6441**	0.27	0.003	52900.48	p6fd	3F4G4	5.5	p6fp	5I6H	5.5	112645.24	165545.72	
1891.389	0.006	52871.2	1891.387	0.002	243		3981		0.68	0.006	52871.26	p6fs	3L4L	7.5	p6fp	3L4K	6.5	140990.9	193862.16	
1891.904	0.006	52856.8	1891.91	-0.006	508	360	11030	11450	0.97	0.004	52856.65	p6fs	5I4I	5.5	p6fp	5I4K	6.5	115982.97	168839.62	
1892.29	0.006	52846.04	1892.299	-0.009	223	142	3002	3099	-0.48	0.003	52845.78	p6fs	5I4I	6.5	p6fp	5I6H	5.5	112699.94	165545.72	
1893.758	0.006	52805.04	1893.761	-0.003	279	174	4989		0.74	0.003	52804.97	p6fs	5I6I	5.5	p6fp	5I6I	6.5	112531.18	165336.15	
1895.009	0.006	52770.19	1895.005	0.004	28	18	847.5		0.49	0.004	52770.32	p6fd	5D4F	4.5	p6fp	5F4F	4.5	120278.83	173049.15	
1896.224	0.006	52736.39	1896.232	-0.008	130	173	5406		0.89	0.005	52736.17	p6fs	5F4F	4.5	p6fp	5F4D	3.5	120601.93	173338.1	
1897.166	0.013	52710.2	1897.166	0	15	11	138.8	76.42	0.48	0.005	52710.2	p6fd	3H4H4	6.5	p6fp	5I6I	7.5	108402.43	161112.63	asym
1897.861	0.006	52690.9	1897.861	0	234	176	43.9	4931**	0.19	0.003	52690.91	p6fd	3F4G4	5.5	p6fp	5I6I	6.5	112645.24	165336.15	
1898.059	0.006	52685.42	1898.062	-0.003	541	277	9386	9654	0.88	0.003	52685.31	p6fs	5I4I	7.5	p6fp	5I4I	7.5	103116.42	155801.73	
1899.829	0.006	52636.32	1899.833	-0.004	349	337	6716	6949	-0.65	0.003	52636.21	p6fs	5I4I	6.5	p6fp	5I6I	6.5	112699.94	165336.15	
1901.755	0.006	52583.01	1901.753	0.002	42	54	1062		-0.38	0.004	52583.07	p6fs	5I4I	5.5	p6fp	5F6G	4.5	115982.97	168566.04	
1903.963	0.006	52522.03	1903.967	-0.004	204	237	3491	3663	0.68	0.004	52521.91	p6fs	5I6I	6.5	p6fp	5I6I	7.5	108590.72	161112.63	
1905.296	0.006	52485.28	1905.292	0.004	275	283	2943		0.66	0.003	52485.39	p6fd	3K4L2	6.5	p6fp	5I4I	6.5	109125.55	161610.94	
1905.457	0.006	52480.85	1905.457	0	230	298	5717	5977	0.65	0.004	52480.86	p6fs	5I4I	5.5	p6fp	5I4I	5.5	115982.97	168463.83	
1906.667	0.013	52447.5	1906.679	-0.012	129	158	3939		0.7	0.005	52447.22	p6fs	5F4F	4.5	p6fp	5F4F	4.5	120601.93	173049.15	asym
1909.572	0.006	52367.75	1909.578	-0.006	190	239	220.2		0.35	0.003	52367.59	p6fs	5I6I	5.5	p6fp	5F4G	5.5	112531.18	164898.77	
1910.597	0.006	52339.67	1910.607	-0.01	264	362	1840		-0.44	0.004	52339.38	p6fs	5I4I	5.5	p6fp	5I6I	4.5	115982.97	168322.35	
1911.032	0.006	52327.74	1911.029	0.003	120	191	2728		0.61	0.004	52327.83	p6fs	5I4I	4.5	p6fp	5I4I	4.5	118659.32	170987.15	

TABLE B.1 – suite

1915.575	0.006	52203.64	1915.583	-0.008	61	154	1278		-0.49	0.004	52203.42	p6fs	5I4I	4.5	p6fp	5I6I	3.5	118659.32	170862.74	
1915.728	0.013	52199.5	1915.752	-0.024	174	271	206.4	195	-0.36	0.003	52198.83	p6fs	5I4I	6.5	p6fp	5F4G	5.5	112699.94	164898.77	Q
1920.257	0.006	52076.36	1920.259	-0.002	37	97	547.5		0.66	0.004	52076.3	p6fd	3L4I	6.5	p6fp	5I6K	7.5	113593.9	165670.2	
1923.564	0.006	51986.82	1923.555	0.009	221	288	2407		0.72	0.003	51987.08	p6fd	3K4L2	6.5	p6fp	5I6I	7.5	109125.55	161112.63	
1927.165	0.006	51889.68	1927.162	0.003	449	509	6867	7047	0.92	0.004	51889.78	p6fs	5I4I	7.5	p6fp	5I6I	8.5	103116.42	155006.2	
1929.943	0.013	51815	1929.934	0.009	77	147	121.5	122.5	-0.08	0.004	51815.25	p6fs	5I6I	8.5	p6fp	5I6K	7.5	101709.89	153525.14	asym
1932.66	0.006	51742.15	1932.657	0.003	28	79	389.8		0.43	0.004	51742.25	p6fd	3L4I	6.5	p6fp	5I6I	6.5	113593.9	165336.15	
1962.773	0.013	50948.3	1962.779	-0.006	22	64	22.15		0.37	0.007	50948.18	p6fd	3F4H4	6.5	p6fp	5I6K	7.5	114722.02	165670.2	f
1963.299	0.006	50934.67	1963.298	0.001	45	84	19.96		0.01	0.005	50934.69	p6fs	5G6G	5.5	p6fp	5G6H	5.5	133626.97	184561.66	
1972.036	0.013	50709	1972.063	-0.027	98	106	94.49		0.23	0.005	50708.32	p6fd	5D4F	4.5	p6fp	5I4I	4.5	120278.83	170987.15	asym Q
1999.464	0.006	49997.19	1999.454	0.01	60	15	942.4		0.2	0.004	49997.44	p6fs	5I4I	7.5	p6fp	5I6H	6.5	103116.42	153113.86	(Air )
2015.021	0.006	49611.26	2015.003	0.018	23		815.4	848.1	0.18	0.003	49611.69	p6fs	5I4I	6.5	p6fp	5I4H	5.5	112699.94	162311.63	
2060.44	0.006	48517.81	2060.439	0.001	19		560.3		0.03	0.004	48517.84	p6fs	5I6I	7.5	p6fp	5I4H	6.5	108064.86	156582.7	
2143.174	0.006	46645.06	2143.176	-0.002	14		404.9		-0.5	0.006	46645.02	p6fs	3I2I1	6.5	p6fp	3L4K	6.5	147217.14	193862.16	
2168.038	0.006	46110.18	2168.042	-0.004	81		28.78		0.1	0.005	46110.09	p6fd	3L2I	5.5	p6fp	5F4G	5.5	118788.68	164898.77	
2185.202	0.006	45748.05	2185.199	0.003	463		4998	5027	0.04	0.005	45748.1	p6fs	5I6I	8.5	p6fp	5I4K	8.5	101709.89	147457.99	
2196.516	0.006	45512.42	2196.519	-0.003	7		17.4		-0.12	0.005	45512.36	p6fd	5G4H	5.5	p6fp	5F4G	5.5	119386.41	164898.77	
2198.296	0.013	45475.6	2198.303	-0.007	37		11.39		-0.5	0.007	45475.44	p6fd	5G4I	7.5	p6fp	5I6H	7.5	101555.7	147031.14	asym
2199.038	0.006	45460.23	2199.036	0.002	330		3434	3545	0.13	0.004	45460.28	p6fs	5I6I	7.5	p6fp	5I6K	7.5	108064.86	153525.14	
2205.784	0.006	45321.21	2205.782	0.002	531		6776	6818	0.28	0.005	45321.25	p6fs	5I6I	8.5	p6fp	5I6H	7.5	101709.89	147031.14	
2210.55	0.006	45223.51	2210.552	-0.002	88		3903		0.23	0.004	45223.47	p6fs	5I6I	5.5	p6fp	5I6K	6.5	112531.18	157754.65	
2211.516	0.006	45203.77	2211.515	0.001	18		1404		0.17	0.004	45203.78	p6fs	5F6F	5.5	p6fp	5F6D	4.5	119203.87	164407.65	
2216.148	0.006	45109.28	2216.142	0.006	72		58.23	3851**	-0.11	0.004	45109.41	p6fd	3F4G4	5.5	p6fp	5I6K	6.5	112645.24	157754.65	
2218.401	0.006	45063.49	2218.408	-0.007	22		2952		0.09	0.005	45063.33	p6fs	5F6F	5.5	p6fp	5F6D	4.5	119344.32	164407.65	
2218.835	0.006	45054.67	2218.833	0.002	131		2629	2716	-0.07	0.004	45054.71	p6fs	5I4I	6.5	p6fp	5I6K	6.5	112699.94	157754.65	
2219.121	0.013	45048.9	2219.114	0.007	268		4675	4789	-0.6	0.005	45049	p6fs	5I6I	7.5	p6fp	5I6H	6.5	108064.86	153113.86	asym
2220.485	0.006	45021.18	2220.483	0.002	38		30.84		-0.81	0.005	45021.24	p6fd	5G4H	5.5	p6fp	5F6D	4.5	119386.41	164407.65	
2223.821	0.006	44953.66	2223.822	-0.001	21		511.8		0.05	0.005	44953.65	p6fs	5I4I	4.5	p6fp	5I6I	3.5	118023.27	162976.92	
2224.769	0.013	44934.5	2224.773	-0.004	86		2631	2740	-0.27	0.005	44934.42	p6fs	5I6I	6.5	p6fp	5I6K	7.5	108590.72	153525.14	asym
2232.027	0.006	44788.4	2232.025	0.002	112		544.4		0.98	0.005	44788.45	p6fs	5G6G	5.5	p6fp	5F6G	4.5	133626.97	178415.42	
2237.331	0.006	44682.23	2237.328	0.003	28		22.95	1807**	-0.04	0.004	44682.3	p6fd	3F4G4	5.5	p6fp	5I6I	5.5	112645.24	157327.54	
2240.071	0.006	44627.59	2240.07	0.001	86		3668	3749	0.62	0.004	44627.6	p6fs	5I4I	6.5	p6fp	5I6I	5.5	112699.94	157327.54	
2240.292	0.006	44623.18	2240.284	0.008	13		2049	2126	0.19	0.004	44623.35	p6fs	5I4I	5.5	p6fp	5I6K	5.5	115982.97	160606.32	
2245.329	0.013	44523.1	2245.327	0.002	77		1161	1212	0.27	0.005	44523.14	p6fs	5I6I	6.5	p6fp	5I6H	6.5	108590.72	153113.86	asym
2247.003	0.006	44489.92	2247.003	0	353		2218		0.08	0.006	44489.93	p6fs	3K2K2	6.5	p6fp	3K4K2	5.5	137008.25	181498.18	
2251.57	0.006	44399.7	2251.575	-0.005	169		1693		0.63	0.004	44399.59	p6fd	3K4L2	6.5	p6fp	5I6K	7.5	109125.55	153525.14	
2252.135	0.006	44388.56	2252.132	0.003	137		2679	2768	0.82	0.004	44388.62	p6fs	5I4I	5.5	p6fp	5I6I	4.5	115982.97	160371.59	
2254.516	0.013	44341.7	2254.522	-0.006	404		4592	4737	0.07	0.006	44341.57	p6fs	5I4I	7.5	p6fp	5I4K	8.5	103116.42	147457.99	asym
2255.422	0.006	44323.87	2255.422	0	56		925.3		-0.11	0.005	44323.88	p6fs	5I4I	4.5	p6fp	5I6K	4.5	118659.32	162983.2	
2255.745	0.006	44317.53	2255.741	0.004	13		1209		-0.25	0.005	44317.6	p6fs	5I4I	4.5	p6fp	5I6I	3.5	118659.32	162976.92	
2269.375	0.006	44051.38	2269.368	0.007	7		174.4		-0.21	0.004	44051.52	p6fs	5I6I	5.5	p6fp	5I4H	6.5	112531.18	156582.7	
2272.638	0.013	43988.1	2272.629	0.009	30		688.4		0.1	0.005	43988.31	p6fd	3K4L2	6.5	p6fp	5I6H	6.5	109125.55	153113.86	asym
2276.431	0.013	43914.8	2276.438	-0.007	205		2036	2082	-0.2	0.006	43914.72	p6fs	5I4I	7.5	p6fp	5I6H	7.5	103116.42	147031.14	asylum



**Annexe C**

**Publication**





Contents lists available at ScienceDirect

## Journal of Quantitative Spectroscopy &amp; Radiative Transfer

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/jqsrt](http://www.elsevier.com/locate/jqsrt)Extended analysis of the free ion spectrum of Er<sup>3+</sup> (Er IV)A. Chikh<sup>a,b</sup>, D. Deghiche<sup>b</sup>, A. Meftah<sup>a,b</sup>, W.-Ü L. Tchang-Brillet<sup>a,\*</sup>, J.-F. Wyart<sup>a,c</sup>, C. Balança<sup>a</sup>, N. Champion<sup>a</sup>, C. Blaess<sup>a</sup><sup>a</sup> Observatoire de Paris-Meudon, PSL, Sorbonne Université, CNRS, LERMA, Meudon F-92195, France<sup>b</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri, BP 17 RP, Tizi-Ouzou 15000, Algeria<sup>c</sup> Laboratoire Aimé Cotton, CNRS FRE2038, Université Paris-Saclay, bâtiment 505, Orsay Cedex 91405, France

## ARTICLE INFO

## Article history:

Received 6 October 2020

Revised 3 June 2021

Accepted 5 June 2021

Available online 11 June 2021

## Keywords:

Trivalent lanthanide ions

Erbium

Wavelengths

Energy levels

Electronic configurations

Transition probabilities

## ABSTRACT

The analysis of the vacuum spark spectrum of erbium in the wavelength region 705 - 2460 Å has been extended. A total of 1022 spectral lines are newly identified as transitions between the low lying configurations  $4f^{11}$ ,  $4f^{10}5d$ ,  $4f^{10}6s$  and  $4f^{10}6p$  of the Er<sup>3+</sup> ion (Er IV), in addition to the confirmed previously identified 582 ones. The extended analysis has led to the determination of 168 new energy levels in Er<sup>3+</sup>, in addition to the 120 previously known ones. Energy values have been optimised by a least-squares procedure based on an increased number of measured wavelengths, resulting in a reduction of their uncertainties. Parametric calculations have been performed using the Cowan codes, in which radial integrals are parameters fitted by least-squares minimisation of the differences calculated - experimental energies. The increased number of experimentally known levels leads to better defined parameters and improved predictions of unknown energy levels and electric dipole transition probabilities. Fitted parameters are compared with *ab initio* Hartree-Fock integrals including relativistic corrections (HFR). The mean errors of the fits are respectively 51 cm<sup>-1</sup> for 65 known levels of the odd configurations  $4f^{11} + 4f^{10}6p$  with 9 free parameters, and 53 cm<sup>-1</sup> for 223 known levels of the even configurations  $4f^{10}5d + 4f^{10}6s$  with 17 free parameters.

© 2021 Elsevier Ltd. All rights reserved.

## 1. Introduction

Lanthanide ions of different ionisation stages have long since received attention because of their roles in different fields. Spectra and energy levels of these ions are valuable data for many applications such as plasma diagnostics and material sciences. In astrophysics, spectral lines of singly and doubly charged ions (spectra II and III) have been identified in observed spectra of chemically peculiar stars for many years (see, for example, refs [1] and [2]). More recently, search for an electromagnetic counterpart of gravitational waves emitted by binary neutron star mergers strengthened the interest in spectra of heavy element ions, such as lanthanides and actinides, presumably formed through the r-process in the matter ejected during the coalescence. To account for the opacities, spectroscopic data on the four first spectra of these elements are needed [3,4]. In material sciences, triply ionised lanthanide ions (spectra IV) are embedded in crystals for use in solid state laser materials [5]. Data on free ions are often references for analysing the influence of the environment on the energy levels or transi-

tion probabilities of the embedded ions. The emission spectrum of the triply charged ion Er<sup>3+</sup> received special attention since erbium oxide has been tested as candidate for fusion reactor blanket system [6] and more recently for possible quantum information applications when embedded in silicon [7]. Furthermore, reliable experimental level energies provide criteria for validation of *ab initio* theoretical calculations and allow semi-empirical approach. Therefore, interpretation of laboratory emission spectra aiming at determination of energy levels of lanthanide free ions is an indispensable means to obtain valuable data. Given the complexity of these spectra, this task can be achieved only by high resolution studies. Furthermore, the reliability of results is greatly supported by systematic comparisons of variation trends of energy parameters in isoelectronic or isoionic sequences, or in neighbouring ions.

In the case of erbium, the spectrum of the singly charged ion Er<sup>+</sup> (Er II) has been revisited by Wyart and Lawler [8], both theoretically and experimentally since the critical compilation *Atomic Energy Levels-The Rare Earth Elements*, Martin, Zalubas and Hagan [9]. The laboratory emission spectrum of the doubly charged ion Er<sup>2+</sup> (Er III) was first analysed by Spector [10] and also investigated by Wyart et al. [11]. Later, the observation of Er III lines in chemically peculiar stars [12] motivated a more complete analysis

\* Corresponding author.

E-mail address: [lydia.tchang-brillet@obspm.fr](mailto:lydia.tchang-brillet@obspm.fr) (W.-Ü L. Tchang-Brillet).



of laboratory data based on Becher's line list [13] and the interpretation of electronic configurations by parametric calculations [12].

The spectrum of the free ion  $\text{Er}^{3+}$  (Er IV) was the subject of a PhD dissertation by Carter [14] at Johns Hopkins University in 1966 but the conclusion of that work did not lead to a specific publication. Based on semi-empirical considerations on thermodynamical properties of lanthanides, Brewer [15] predicted an energy difference of  $75\,000 \pm 3000 \text{ cm}^{-1}$  between the lowest levels of the two configurations  $4f^{11}$  and  $4f^{10}5d$ , which was larger than the value of  $52481 \text{ cm}^{-1}$  given by Carter [14]. The critical compilation by Martin, Zalubas and Hagan [9] retained none of the Er IV levels of Ref[14], because of inconsistencies with the energy separation derived later from the systematic behaviour of similar configurations in rare earths. Instead, calculated theoretical values from parametric studies of  $\text{Er}^{3+}$  ions in crystals were listed for the lowest levels of  $4f^{11}$  in [9] (now transferred into the NIST Atomic Spectra Database [16]). In 2015, a theoretical study of  $\text{Er}^{3+}$  energy levels was published by Radžiūtė et al [17], reporting energies from relativistic calculations using Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) and Configuration Interaction methods. However, in absence of correct experimental level energies for the ground state configuration  $4f^{11}$ , the theoretical energies were compared with erroneous experimental energies ( $E_{\text{exp}}$ ) from [14] and with theoretical values ( $E_{\text{th}}$ ) from ions in crystals collected in [9].

Consequently, a completely revised analysis of  $\text{Er}^{3+}$  emission spectrum was desirable and was undertaken by our collaborating team. A first analysis unravelling the Er IV spectrum led to preliminary results reported at the APIP conference in 2016 [18] and to a regular publication describing the main characteristics of the spectrum [19]. The vacuum spark emission spectrum of erbium was recorded in the wavelength region 705 - 2460 Å, where transitions between the low lying configurations  $4f^{11}$ ,  $4f^{10}5d$ ,  $4f^{10}6s$  and  $4f^{10}6p$  take place. Based on theoretical predictions of energy levels and electric dipole transition probabilities by means of the Cowan codes [20], this revised analysis [19] led to the identification of 591 spectral lines in the wavelength range 850 - 2276 Å as transitions between low levels of these four configurations, and to the determination of 120 energy levels in both parities. Radial parameters were obtained in least-squares fits of both parities, minimising the differences between calculated and experimental energies. These radial parameters were compared with *ab initio* Hartree-Fock integrals including relativistic corrections (HFR), and the corresponding scaling factors were derived. The mean errors of the fits were respectively  $41 \text{ cm}^{-1}$  for 38 known levels of the odd parity configurations  $4f^{11} + 4f^{10}6p$  and  $49 \text{ cm}^{-1}$  for 82 known levels of the even configurations  $4f^{10}5d + 4f^{10}6s$ . This first revised Er IV analysis [19] was part of our systematical study of lanthanide ion spectra, carried on for several years, among which are the fourth spectra Yb IV [21], Nd IV [22,23], and Tm IV [24]. The advances in Nd IV [23] and Tm IV [24] showed the regularities in the  $4f^n(5d - 6p)$  and  $4f^n(6s - 6p)$  electron energy jumps along the lanthanide period and confirmed the corrections suggested for energy levels in Er IV [19]. However, these corrections did not question the wavelength measurements of the presumably classified Er IV lines reported in [14], which could be retained for a start.

Because of the complexity of the Er IV spectrum and the presence in the experimental exposures of numerous unknown lines, possibly from other ionisation stages, the previous revised analysis [19] was limited to the identification of the strongest spectral lines observed and to the determination of energy levels below  $176000 \text{ cm}^{-1}$ , but it opened the way to further extended analysis. To have an estimate, in the range 705 - 2460 Å, 6% of lines in the experimental spectrum was classified as Er IV lines. The present work is the extension expected as announced in the conclusions of [19]. It aims at further line identifications and determination of

additional energy levels extending the energy range, either with higher angular momentum  $J$ , including those having very few but strong transitions, or with smaller  $J$  and weaker predicted intensities.

## 2. Experiment and wavelength measurements

For the present work, the same set of emission spectra recorded in the wavelength region 705 - 2300 Å used for the previous analysis [19] were measured to include all lines of weaker intensities. The experimental set-up was similar to previous works on other rare earth ions and was described in detail in [25,26]. To recall the main features, two kinds of vacuum spark sources, sliding sparks and triggered sparks, were used to produce emission spectra of erbium. In both sources, the anode was made of erbium of 99% purity, and the cathode, of aluminum. A low-inductance capacitor of  $4.82 \mu\text{F}$  was charged to a voltage around 7 kV to produce electrical discharges. Spectra were recorded on the vacuum ultraviolet 10.7 m normal incidence high resolution spectrograph at the Meudon Observatory (3600 lines/mm holographic concave grating, linear dispersion of  $0.26 \text{ Å per mm}$  on the plates, resulting resolution of 150000 with a slit width of  $30 \mu\text{m}$ ). A supplementary inductance between  $11 \mu\text{H}$  and  $64 \mu\text{H}$  was introduced into the electrical circuit to vary the discharge conditions and thus helped to differentiate the lines from different ionisation stages by their intensity behaviour. Indeed, in the wavelength region studied, lines belonging to Er III and Er IV are both present. Photographic Ilford Q2 ( $38 \text{ cm} \times 5 \text{ cm}$ ) plates and photostimulable image plates ( $40 \text{ cm} \times 5 \text{ cm}$ ) were used for recording the spectra below 2300 Å, the first ones being preferred for wavelength measurements whereas the latter ones being preferred for intensity measurements due to their linear response over five orders of magnitude of exposure.

The spectra on image plates (IP) were digitised by a FUJII9000 specific scanner at a sample step of 10 microns. Photographic plates (PP) were digitised on a high-resolution A3 scanner iQSmart1, simultaneously with a precision optical ruler allowing the correction of a possible non-linearity in the scanner displacement by our programme of measurement of peak positions, as explained in [25]. The plate-holder of the spectrograph can accommodate two plates. Each exposure covers a wavelength range of about 200 Å, thus of 100 Å on one plate. A few exposures were taken on old Kodak SWR plates ( $45 \text{ cm} \times 5 \text{ cm}$ ) by ranges of 120 Å, providing complementary data. The final range of classified Er IV lines (715 - 2277 Å) involves 21 sections of 100 Å (or 120 Å on a SWR plate), with overlapping wavelength ranges. Each section was calibrated in wavelength using standard wavelengths to fit a dispersion polynomial. For all but one measured sections, a quadratic fit led to the smallest standard deviation of residuals, between  $0.002 \text{ Å}$  and  $0.005 \text{ Å}$ , with the fewest possible free parameters. Only one section (1365 - 1465 Å) was better fitted with a polynomial of the third degree, resulting in a standard deviation of  $0.0025 \text{ Å}$ . The previous analysis [19] reported that, for wavelength calibration, internal wavelength standards were chosen among lines of low-Z impurities, without giving explicitly the references [27] and [28], completed by lines measured by Carter in Er IV [14] and by Becher in Er III [13]. In the present work, we aimed at improving the internal standards by identifying more emission lines from impurities and by avoiding as much as possible previous Er IV wavelengths [14], since their identifications were not confirmed. We updated the wavelengths of low-Z impurity lines (C, N, O, Si, Al), taking the values from the NIST Atomic Spectra Database [16], adopting Ritz wavelengths when available, or otherwise, from Kaufman and Edlen's compilation [28]. A few Er III lines were identified in our spectra using Ritz wavelengths calculated from energy values [11] and could be included as internal standards (they will be reported separately later with an ongoing Er III study). Exposures

above 1400 Å were made with a copper wire around the anode and provided a few lines of Cu III [29] and Cu II [30], to be used as standards. Two strong lines at 2067.7787 Å and 2067.2356 Å were identified as B III resonance lines [31] and included as standards. In principle, for well isolated lines, the uncertainty on the peak-finding can be estimated to  $\pm 4 \mu\text{m}$  on the plate, which should result in  $\pm 0.001 \text{ \AA}$  on the wavelength. However, the spectrum is dense and many lines show asymmetric profiles or are perturbed by close neighbours, increasing this peak-finding uncertainty. The main part of wavelength uncertainty is due to the qualities of wavelength standards available in each section measured. The overall uncertainty on the measured wavelengths is estimated to be about  $\pm 0.005 - 0.007 \text{ \AA}$  for various measured plates, reaching  $0.01 \text{ \AA}$  for very perturbed lines.

The experimental intensity in arbitrary units was estimated for each line from the area under a triangle visually fitting approximately the line profile, either for the photographic plates (PP) or the image plates (IP). Relative intensities are not corrected for the wavelength dependence of the instrumental response, so they are consistent only over a limited range of wavelengths. Keeping in mind these imperfections and the non-linear response of photographic plates, these experimental intensities should be taken as estimates and not as quantitative measurements of intensities.

### 3. Analysis, results and discussion

As for our previous Er IV analysis [19], predictions of level energies and transition probabilities were obtained by applying the Racah-Slater method [20] to the theoretical study of atomic configurations, by means of the Cowan codes [20] in a Windows version developed by Kramida [32]. The RCN and RCN2 codes of the package were run to calculate the radial integrals needed for constructing the Hamiltonian operator in the Hartree-Fock formalism including relativistic corrections, separately for the two parities, i.e., the  $4f^{11}$  and  $4f^{10}6p$  configurations of the odd parity, and the  $4f^{10}5d + 5f^{10}6s$  configurations of the even parity. The RCG code diagonalises the Hamiltonian operator and calculates the transition probabilities of electric dipole transitions,  $gA$ , the Einstein coefficient of spontaneous emission weighted by the statistical weight of the upper level, to be compared with experimental line intensities.

The experimental level energies found in the course of the analysis were used as input data for the last Cowan's code RCE to iteratively improve the radial integral values. The latter were treated as adjustable energy parameters in a least squares fit (LSQ) minimising the mean error  $\Delta E = \sqrt{\sum_i (E_i^{\text{exp}} - E_i^{\text{calc}})^2 / (N_i - N_p)}$ , where  $N_i$  and  $N_p$  are respectively the number of experimental energies and the number of free parameters.

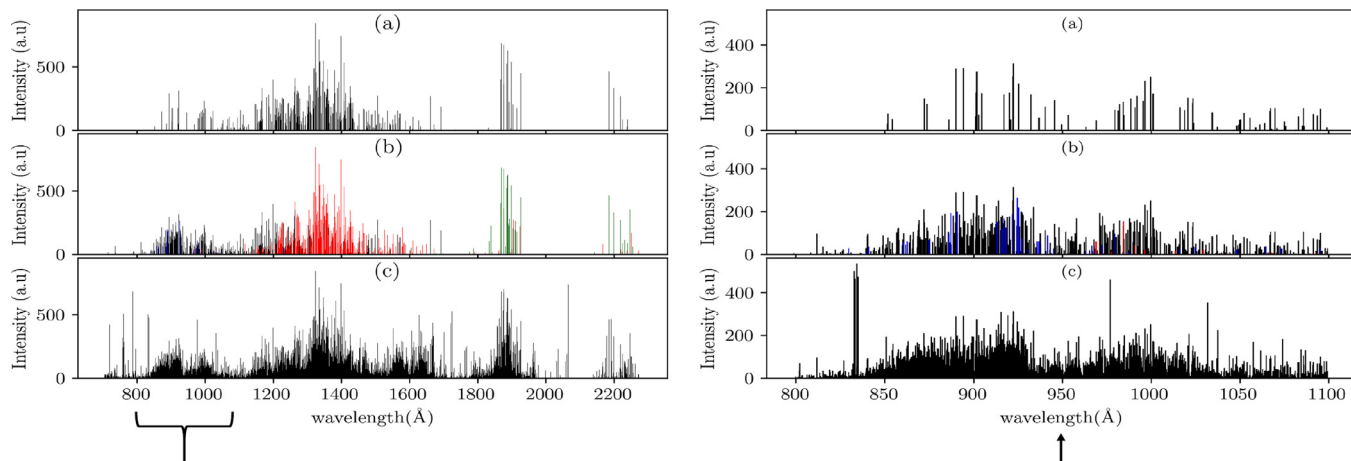
In the previous work [19], to provide initial theoretical predictions of level energies and transition probabilities, the HFR radial integrals, or parameters  $P_{\text{HFR}}$ , were multiplied by scaling factors  $SF(P)$ . These were estimated from appropriate previously studied lanthanide ion spectra mentioned above, in which  $SF(P) = P_{\text{fit}} / P_{\text{HFR}}$ , where  $P_{\text{fit}}$  is the parameter value derived from the LSQ fit of energies using the RCE code. Furthermore, corrections were applied to average energies  $E_{\text{HFR}}^{\text{av}}$  so to obtain the lowest levels of the four calculated configurations within the energy ranges predicted by Brewer [15]. Then the transition probabilities of the strongest electric dipole transitions were calculated with the RCG code and compared with the experimental spectrum. In the present work, this initial step was made easier by starting from the fitted values of parameters from the previous Er IV analysis [19]. As in previous studies, to take into account far configuration interactions at the second order of the perturbation theory, effective parameters were introduced with initial values chosen from neighbouring spectra.

The parameters  $\alpha$ ,  $\beta$  and  $\gamma$  are related to two-body excitations in  $f^{11}$  and  $f^{10}$ , while the parameters  $F^1(f, l)$  and  $G^k(f, l)$ , the so-called *illegal* Slater parameters [20], act on the  $(S, L)$  terms of the  $f^{10}l$  configurations. To reduce the number of free parameters in order to keep the energy predictions reliable, constraints on some parameters were imposed in the fits (fixed values for  $\beta$  and  $\gamma$  in  $f^{11}$  and  $f^{10}$ , equal values for the illegal-rank parameters  $G^2(4f, 5d)$  and  $G^4(4f, 5d)$ ).

The search for new levels was furthermore supported by using the IDEN code [33–35], which allows the visualisation of the great amount of experimental and calculated quantities involved. To assign a spectral line to a specific transition between two levels, not only the wavenumber must match the difference of the two energies but also the observed intensity must be consistent with the predicted transition probability. Based on the wavelengths of the new list of identified lines, an optimisation of the experimental energy values was performed using the LOPT code [36], which minimises the differences between the whole set of wave numbers from wavelength measurements and those calculated from the experimental energies by the Ritz principle. Asymmetric and perturbed spectral lines or lines with double identifications were introduced with a large uncertainty so they play a weak part by being given a low weight in the optimisation procedure. Some additional lines could be identified thanks to the optimised energy values, thus this optimisation procedure was iterated. The search was pursued until no new level could be validated unambiguously by a chain of transitions.

The present analysis endeavoured to identify unclassified weak lines and increased the number of classified spectral lines from 591 to 1603 in total in the range of (715 - 2276 Å), particularly towards the short wavelength end. Fig. 1 summarises the progress achieved in Er IV line identifications, especially in the range 800 - 1100 Å. The present line identifications not only confirm the previously found 120 energy levels [19] but furthermore allow the determination of 168 new energy levels. Thus a total of 288 levels of the  $\text{Er}^{3+}$  ion are known at present. They include 18 levels (9 new) in the ground  $4f^{11}$  configuration, 47 (18 new) levels in the  $4f^{10}6p$  configuration and 223 (141 new) levels belonging to the even  $4f^{10}(5d + 6s)$  configurations.

Table 1 and Table 2 display, as examples, the beginning sections of results on energy levels respectively for the odd and the even parities, in the increasing order of the calculated energies, up to the highest experimentally determined level. Most of the levels are determined by more than two transitions. Only two levels of  $4f^{10}5d$  in Table 2 ( $E = 79275.80 \text{ cm}^{-1}, J = 10.5$  and  $E = 108391.70 \text{ cm}^{-1}, J = 7.5$ ) are determined each by one single transition (922.580 Å for the first, 1318.873 Å for the second), the intensity of which provides an unambiguous identification. The experimental energies are the optimised values derived from the LOPT code [36]. Since the optimisation procedure involved more transitions in the present work, even for the previously known levels [19], one may expect reduced uncertainties on the optimised energies. Indeed, compared with [19], the uncertainties given in columns 3 of Table 1 and Table 2, derived as the maximum of the deviations  $D1$  and  $D2$  from the LOPT code [36], show a reduction by a factor of 2 on average for the 6p levels, and a reduction of about 10% for the 5d levels (note that in [19], the energy uncertainties were in fact the  $D1$  values). For the previously known levels, the changes of the optimised energies in the present work show a  $rms = 0.3 \text{ cm}^{-1}$ , mostly staying within the uncertainty limits, excluding six deviations larger than  $0.5 \text{ cm}^{-1}$ . These latter are due to the small numbers of classified lines with large uncertainties. In Table 1 and Table 2, the calculated energy values of levels, their percentage compositions in  $LS$  and  $JJ$  coupling schemes and their Landé factors are derived from the last LSQ fit in the RCE code and correspond to the energy parameter values given in Table 4 and



**Fig. 1.** Progress in the identification of Er IV lines (a) previously identified [19]; (b) identified transitions at present, black:  $4f^{11} - 4f^{10}5d$ , blue:  $4f^{11} - 4f^{10}6s$ , red:  $4f^{10}5d - 4f^{10}6p$ , green:  $4f^{10}6s - 4f^{10}6p$ ; (c) the complete experimental vacuum spark spectrum. Panels on the right are enlargements between 800 and 1100 Å. Intensities in arbitrary units (a.u.). Wavelengths in Å. The strong lines close to 832 Å are from O II and O III. The strong line at 977 Å is from C III. The two strong lines at 1031 Å and 1037 Å are from O VI. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

**Table 1**

Odd parity energy levels of the two configurations  $4f^{11}$  and  $4f^{10}6p$  of the  $Er^{3+}$  ion. Energies are given in  $cm^{-1}$ , in increasing order of  $E_{calc}$ . For each level are given, the configuration, the total angular momentum  $J$ , the experimental energy value when available, the uncertainty as  $MAX(D1, D2)$  derived from the LOPT code [36], the difference  $\delta E = E_{TW} - E_{[19]}$  between the energies from this work and the previously determined energies [19], the calculated energy value  $E_{calc}$  resulting from the Cowan codes corresponding to the parameters given in Table 4,  $\Delta E = E_{exp} - E_{calc}$ ,  $N_{cl}$ , the total number of transitions involving the experimental level determination, the calculated Landé factor and the leading components of the eigenfunction and their corresponding percentages in both  $LS$  and  $JJ$  coupling schemes. The number following a term designation is the Nielson-Koster index for repeating terms [37] as given by the Cowan codes.

Conf	J	$E_{exp}$	Unc.	$\delta E$	$E_{calc}$	$\Delta E$	$N_{cl}$	$g_{Landé}$	LS percentage composition			JJ percentage composition						
									%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2
$4f^{11}$	7.5	0	0	0	-19	19	50	1.197	97	4I	3	2K						
$4f^{11}$	6.5	6507.79	0.11	0.04	6543.6	-35.81	82	1.107	99	4I								
$4f^{11}$	5.5	10171.81	0.11	0.02	10191.6	-19.79	87	0.989	82	4I	15	2H2						
$4f^{11}$	4.5	12468.47	0.12	-0.19	12383.4	85.07	74	0.903	51	4I	17	2H2	14	4F				
$4f^{11}$	4.5	15404.76	0.12	-0.1	15309.0	95.76	67	1.133	58	4F	28	4I	8	2G1				
$4f^{11}$	1.5	-	-	-	18518.6	-	-	1.704	69	4S	18	2P	8	2D1				
$4f^{11}$	5.5	19331.49	0.11	-0.2	19411.3	-79.81	82	1.133	48	2H2	34	4G	15	4I				
$4f^{11}$	3.5	20454.19	0.15	-	20555.4	-101.21	36	1.213	92	4F	5	2G1						
$4f^{11}$	2.5	22416.28	0.16	-	22223.8	192.48	22	1.052	85	4F	13	2D1						
$4f^{11}$	1.5	-	-	-	22565.5	-	-	0.747	63	4F	21	2D1	16	4S				
$4f^{11}$	4.5	24735.79	0.12	-0.21	24672.4	63.39	67	1.073	24	4F	19	2G1	16	2H2				
$4f^{11}$	5.5	26707.61	0.11	-0.18	26807.8	-100.19	66	1.201	62	4G	25	2H2	10	2H1				
$4f^{11}$	4.5	27766.68	0.11	-0.14	27840.0	-73.32	59	1.11	79	4G	14	2H2	5	4I				
$4f^{11}$	7.5	28312.44	0.17	-	28232.3	80.14	26	1.064	92	2K	6	2L						
$4f^{11}$	3.5	28239.56	0.2	-	28234.5	5.06	26	0.954	40	4G	27	2G1	24	2G2				
$4f^{11}$	1.5	-	-	-	31902.8	-	-	1.049	36	2P	24	4F	21	2D1				
$4f^{11}$	6.5	33555.7	0.16	-	33573.4	-17.7	27	0.948	90	2K	10	2I						
$4f^{11}$	0.5	-	-	-	33696.4	-	-	0.613	92	2P	8	4D						
$4f^{11}$	2.5	-	-	-	33814.4	-	-	0.603	91	4G	3	2F2						
$4f^{11}$	3.5	-	-	-	34397.1	-	-	0.953	56	4G	26	2G1	14	2G2				
$4f^{11}$	2.5	-	-	-	35110.3	-	-	1.195	59	2D1	14	2D2	14	4F				
$4f^{11}$	4.5	36814.62	0.15	-	36861.3	-46.68	25	1.031	32	2H2	24	2G1	15	2G2				
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...			
$4f^{10}6p$	7.5	147031.14	0.13	-0.16	147069.7	-38.6	10	1.278	57	(5I)6H	18	(5I)4I	15	(5I)6I	92	(5I(8))(8,1/2)	6	(3K(8))(8,1/2)
$4f^{10}6p$	8.5	147457.99	0.13	-0.06	147477.6	-19.6	10	1.218	40	(5I)4K	35	(5I)6I	17	(5I)6K	92	(5I(8))(8,1/2)	5	(3K(8))(8,1/2)
$4f^{10}6p$	6.5	153113.86	0.11	-0.24	153155.4	-41.5	20	1.208	49	(5I)6H	29	(5I)6I	12	(5I)4I	92	(5I(7))(7,1/2)	4	(5I(8))(8,3/2)
$4f^{10}6p$	7.5	153525.14	0.11	-0.18	153546.1	-21	16	1.152	34	(5I)6K	30	(5I)4K	22	(5I)6I	94	(5I(7))(7,1/2)	2	(3K(7))(7,1/2)
$4f^{10}6p$	8.5	155006.2	0.13	-0.05	155023.8	-17.6	13	1.24	56	(5I)6I	34	(5I)4K			91	(5I(8))(8,3/2)	5	(3K(8))(8,3/2)
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

Read  ${}^2H_2$  for 2H2,  $({}^3I)6H$  for (5I)6H,  $({}^3I_8)1/2$  for (5I(8))(8,1/2). The complete Table 1 is available in tab-limited text format (Table 1A) in supplementary materials of the journal and also at molat.obspm.fr [40].

**Table 5.** Fig. 2 (a) and (b) display the calculated and experimental energy levels of Er IV for each  $J$ , respectively for the odd and even parities.

The complete tables are given in tab-limited text format (Table 1A and Table 2A) as supplementary materials of the journal and also at molat.obspm.fr [40].

Table 3 is the first page of the complete list of identified lines, which displays for each line : measured wavelength, uncertainty

on the measured wavelength specified in the LOPT code [36] for optimisation of energies, the corresponding wave numbers, Ritz wavelength and its uncertainty as derived from the LOPT code, experimental intensities from photographic plates (PP) and/or image plates (IP), calculated  $g_A$  from this work (the  $g_A$  from the previous study [19]), cancellation factor CF, labels and  $J$  values respectively for the lower and the upper levels of the transition, and their optimised energies. The uncertainties of 0.006 Å for wave-

**Table 2**  
Even parity energy levels of the two configurations  $4f^{10}5d$  and  $4f^{10}6s$  of the  $\text{Er}^{3+}$  ion.

Conf	J	$E_{\text{exp}}$	Unc.	$\delta E$	$E_{\text{calc}}$	$\Delta E$	$N_{\text{cl}}$	$g_{\text{Landé}}$	LS percentage composition						JJ percentage composition										
									%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3	%	Comp1	%	Comp2	%	Comp3					
$4f^{10}5d$	7.5	73426.4	0.16	0.23	73271.0	-44.6	9	1.275	50	(5I)6H	29	(5I)6I	7	(5I)4I	83	(5I(8))(8,3/2)	5	(3K(8))(8,3/2)							
$4f^{10}5d$	8.5	73707.86	0.23	-0.14	73724.0	-16.1	4	1.259	67	(5I)6I	17	(5I)6K	8	(5I)4K	72	(5I(8))(8,3/2)	21	(5I(8))(8,5/2)							
$4f^{10}5d$	6.5	74536.2	0.19	-0.07	74518.1	18.1	6	1.327	59	(5I)6G	22	(5I)6H	5	(3K2)4H	86	(5I(8))(8,3/2)	6	(3K(8))(8,3/2)							
$4f^{10}5d$	9.5	75982.9	0.23	0	76001.6	-18.7	3	1.217	55	(5I)6K	20	(5I)4L	19	(5I)6L	70	(5I(8))(8,3/2)	23	(5I(8))(8,5/2)							
$4f^{10}5d$	6.5	78916.83	0.18	0.04	78924.1	-7.3	13	1.23	37	(5I)6I	25	(5I)6G	19	(5I)6H	63	(5I(7))(7,3/2)	25	(5I(8))(8,5/2)							
$4f^{10}5d$	8.5	79154.17	0.15	-0.01	79128.2	26	9	1.198	36	(5I)4K	24	(5I)6I	22	(5I)6K	61	(5I(8))(8,5/2)	17	(5I(8))(8,3/2)	8	(5I(7))(7,5/2)					
$4f^{10}5d$	10.5	79275.8	0.8	0.2	79276.0	-0.2	1	1.231	92	(5I)6L	6	(3K2)4M			92	(5I(8))(8,5/2)	6	(3K(8))(8,5/2)							
$4f^{10}5d$	7.5	79361.97	0.16	-0.05	79349.6	12.4	11	1.227	32	(5I)6H	29	(5I)6I	23	(5I)6K	49	(5I(7))(7,3/2)	32	(5I(8))(8,5/2)	12	(5I(7))(7,5/2)					
$4f^{10}5d$	9.5	79522.37	0.22	0.08	79506.1	16.3	4	1.194	45	(5I)4L	37	(5I)6K	11	(5I)6L	68	(5I(8))(8,5/2)	20	(5I(8))(8,3/2)							
$4f^{10}5d$	5.5	79743.09	0.18	-0.04	79761.2	-18.1	12	1.232	42	(5I)6G	35	(5I)6H	11	(5I)6I	69	(5I(7))(7,3/2)	18	(5I(8))(8,5/2)							
$4f^{10}5d$	8.5	82610.39	0.19	0.07	82637.8	-27.4	8	1.133	38	(5I)6L	35	(5I)4K	15	(5I)4L	82	(5I(7))(7,3/2)	7	(5I(8))(8,5/2)							
$4f^{10}5d$	6.5	82921.38	0.13	-0.17	82915.4	6	18	1.171	21	(5I)6K	20	(5I)6I	18	(5I)4H	30	(5I(6))(6,3/2)	22	(5I(8))(8,5/2)	16	(5I(7))(7,5/2)					
$4f^{10}5d$	5.5	83109.77	0.15	-0.19	83100.5	9.3	12	1.131	45	(5I)6I	28	(5I)6G	7	(5I)6K	59	(5I(6))(6,3/2)	19	(5I(7))(7,5/2)	9	(5I(8))(8,5/2)					
$4f^{10}5d$	7.5	83376.61	0.17	-0.1	83334.9	41.7	11	1.157	33	(5I)4I	31	(5I)6K	9	(5I)6L	39	(5I(7))(7,3/2)	26	(5I(8))(8,5/2)	12	(5I(7))(7,5/2)					
$4f^{10}5d$	4.5	83708.51	0.17	-0.28	83749.2	-40.7	8	1.057	41	(5I)6H	23	(5I)6G	23	(5I)6I	60	(5I(6))(6,3/2)	18	(5I(7))(7,5/2)	10	(5I(5))(5,3/2)					
$4f^{10}5d$	7.5	84992.52	0.13	-0.02	84974.8	17.7	13	1.172	36	(5I)4I	29	(5I)6I	18	(5I)4K	55	(5I(7))(7,5/2)	27	(5I(8))(8,5/2)							
$4f^{10}5d$	8.5	85345.47	0.18	-0.06	85353.1	-7.6	8	1.157	47	(5I)6K	24	(5I)4L	12	(5I)6L	80	(5I(7))(7,5/2)	6	(5I(6))(6,5/2)	6	(5I(7))(7,3/2)					
$4f^{10}5d$	6.5	85740.26	0.12	-0.15	85795.6	-55.3	19	1.165	50	(5I)4H	18	(5I)6K	12	(5I)6H	34	(5I(8))(8,5/2)	22	(5I(6))(6,3/2)	19	(5I(7))(7,5/2)					
$4f^{10}5d$	9.5	85914.53	0.3	-0.27	85951.4	-36.9	2	1.174	66	(5I)6L	27	(5I)4L			93	(5I(7))(7,5/2)	2	(3K(7))(7,5/2)							
$4f^{10}5d$	4.5	86400.9	0.16	-0.23	86354.0	46.9	11	1.004	41	(5I)6I	35	(5I)6G	6	(5I)6K	50	(5I(5))(5,3/2)	16	(5I(6))(6,5/2)	12	(5I(7))(7,5/2)					
$4f^{10}5d$	5.5	86559.22	0.12	-0.18	86539.1	20.1	23	1.107	26	(5I)6H	22	(5I)6K	11	(5I)6G	26	(5I(5))(5,3/2)	25	(5I(6))(6,5/2)	13	(5I(7))(7,5/2)					
$4f^{10}5d$	3.5	86639.2	0.21		86668.9	-29.7	4	0.78	38	(5I)6H	29	(5I)6I	12	(5I)6G	46	(5I(5))(5,3/2)	16	(5I(6))(6,5/2)	14	(5I(4))(4,3/2)					
$4f^{10}5d$	6.5	86744.74	0.16	0.01	86670.5	74.2	13	1.101	26	(5I)6K	18	(5I)4I	17	(5I)6H	26	(5I(6))(6,3/2)	25	(5I(6))(6,5/2)	23	(5I(7))(7,5/2)					
$4f^{10}5d$	7.5	86757.17	0.17	-0.17	86754.0	3.2	11	1.034	53	(5I)6L	25	(5I)4K	11	(5I)4L	82	(5I(6))(6,3/2)	5	(5I(7))(7,5/2)							
$4f^{10}5d$	5.5	86871.81	0.13	-0.25	86906.1	-34.3	16	1.246	64	(5I)4G	11	(5I)6G	7	(5I)4H	49	(5I(8))(8,5/2)	19	(5I(7))(7,3/2)	16	(5I(7))(7,5/2)					
$4f^{10}5d$	5.5	88456.69	0.14	-0.17	88409.7	47	15	0.952	42	(5I)6K	12	(5I)6I	10	(5I)4I	47	(5I(5))(5,3/2)	18	(5I(5))(5,5/2)	5	(5I(4))(4,5/2)					
$4f^{10}5d$	3.5	88834.04	0.17	-0.23	88797.2	36.8	6	0.762	46	(5I)6I	21	(5I)6G	7	(5I)6H	43	(5I(4))(4,3/2)	13	(5I(4))(4,5/2)	11	(5I(6))(6,5/2)					
$4f^{10}5d$	6.5	89157.82	0.2	0.51	89138.5	19.3	10	0.907	60	(5I)6L	13	(5I)4K	5	(5I)4L	77	(5I(5))(5,3/2)	4	(3H(5))(5,3/2)							
$4f^{10}5d$	4.5	89334.81	0.15		89300.1	34.7	11	0.967	28	(5I)6K	24	(5I)6G	20	(5I)6H	28	(5I(5))(5,5/2)	27	(5I(4))(4,3/2)	17	(5I(6))(6,5/2)					
$4f^{10}5d$	3.5	89394.64	0.3		89504.3	-109.7	5	1.56	59	(5F)6P	14	(5F)6D	5	(3G2)4D	67	(5F(5))(5,3/2)	6	(5F(5))(5,5/2)	6	(3G(5))(5,3/2)					

Read  $(^5I)^6H$  for (5I)6H,  $(^3K2)^4H$  for (3K2)4H,  $(^5I_8)3/2$  for (5I(8))(8,3/2). The complete Table 2 is available in tab-limited text format (Table 2A) in supplementary materials of the journal and also at molat.obspm.fr [40].

**Table 3**

Identified lines in Er IV. Wavelengths below 2000 Å are in vacuum, and above 2000 Å, in standard air [41].  $\lambda_{\text{Ritz}}$  is derived from the optimised level energies.  $\Delta\lambda = \lambda_{\text{exp}} - \lambda_{\text{Ritz}}$ ; intensities  $I$  in arbitrary units (PP : photographic plates, IP : image plates); calculated transition probabilities  $gA$  from this work (TW) and from Meftah et al. 2016 [19],  $g$  being the statistical weight of the upper level,  $A$  being the Einstein coefficient of spontaneous emission. CF is the cancellation factor as defined by equation (14.107), p. 432 in [20]. Col. 2 displays the uncertainties of experimental wavelengths introduced into the LOPT code [36] for optimisation of energy values. Col. 11 displays the uncertainties on the Ritz wavelengths estimated by the LOPT code.

$\lambda_{\text{exp}}$ (Å)	$Unc_{\text{exp}}$ (Å)	$\sigma_{\text{exp}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\lambda_{\text{Ritz}}$ (Å)	$\Delta\lambda$ (Å)	$I_{\text{PP}}$	$I_{\text{IP}}$	$gA_{\text{TW}}$ ( $10^6\text{s}^{-1}$ )	$gA_{19}^*$ ( $10^6\text{s}^{-1}$ )	CF	$Unc_{\lambda_{\text{Ritz}}}$ (Å)	$\sigma_{\text{calc}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	Low.	level**	$J_{\text{low}}$	Upp.	Level**	$J_{\text{up}}$	$E_{\text{low}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$E_{\text{up}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	Comm.***
715.716	0.006	139720.1	715.7218	-0.0058	3	11	61.16		-0.01	0.0019	139719.1	4f11	<sup>4</sup> I	7.5	f10d	( <sup>3</sup> K1) <sup>4</sup> H	6.5	0.00	139719.1	
736.142	0.006	135843.4	736.1444	-0.0024	65	128	85.82		0.01	0.0025	135842.9	4f11	<sup>2</sup> H2	5.5	f10d	( <sup>3</sup> G3) <sup>4</sup> H	5.5	19331.49	155174.4	
737.107	0.006	135665.5	737.1043	0.0027	10	30	93.8		0.04	0.0021	135666.0	4f11	<sup>4</sup> I	6.5	f10d	( <sup>3</sup> H2) <sup>2</sup> H	5.5	6507.79	142173.8	
744.338	0.006	134347.6	744.3439	-0.0059	8	25	98.39		-0.06	0.0025	134346.5	4f11	<sup>4</sup> I	7.5	f10d	( <sup>1</sup> H1) <sup>2</sup> K	6.5	0.00	134346.5	
764.120	0.006	130869.6	764.1228	-0.0028	3	37	159.8		0.04	0.0021	130869.0	4f11	<sup>4</sup> I	6.5	f10d	( <sup>3</sup> K1) <sup>4</sup> H	6.5	6507.79	137376.8	
766.641	0.006	130439.1	766.644	-0.003	9	42	19.46		0.00	0.003	130438.6	4f11	<sup>4</sup> F	4.5	f10d	( <sup>3</sup> G3) <sup>4</sup> H	5.5	24735.79	155174.4	
785.442	0.006	127316.8	785.444	-0.002	5		72.51		-0.01	0.002	127316.5	4f11	<sup>4</sup> I	4.5	f10d	( <sup>3</sup> F4) <sup>4</sup> H	4.5	12468.47	139785.0	
786.667	0.006	127118.6	786.6634	0.0036	12	13	185.7		-0.12	0.0008	127119.18	4f11	<sup>4</sup> I	6.5	f10s	( <sup>3</sup> G) <sup>6</sup> G	5.5	6507.79	133626.97	
789.817	0.013	126115.7	789.8147	0.0023	23	9	282.6		0.12	0.0014	126111.97	4f11	<sup>4</sup> I	6.5	f10d	( <sup>3</sup> F3) <sup>4</sup> H	5.5	6507.79	133119.76	
798.838	0.006	125181.8	798.8400	-0.002	3	6	11.94		0.00	0.0022	125181.5	4f11	<sup>2</sup> H2	5.5	f10d	( <sup>3</sup> K1) <sup>4</sup> K	5.5	19331.49	144513.0	
806.152	0.013	124046.1	806.146	0.006	2		19.29		-0.01	0.003	124047.0	4f11	<sup>4</sup> F	4.5	f10d	( <sup>3</sup> G1) <sup>4</sup> H	3.5	15404.76	139451.8	
808.335	0.006	123711.1	808.331	0.004	7	16	105.9		0.03	0.0022	123711.7	4f11	<sup>4</sup> I	7.5	f10d	( <sup>3</sup> M) <sup>4</sup> L	6.5	0.00	123711.7	
809.943	0.006	123465.5	809.936	0.007	2	8	303.5		0.06	0.003	123466.5	4f11	<sup>4</sup> G	5.5	f10d	( <sup>3</sup> K1) <sup>2</sup> I	6.5	26707.61	150174.1	
811.879	0.006	123171.0	811.8776	0.0014	96	106	1736		0.23	0.0016	123171.28	4f11	<sup>4</sup> I	7.5	f10d	( <sup>3</sup> F3) <sup>4</sup> H	6.5	0.00	123171.28	
812.049	0.006	123145.3	812.0472	0.0018	3		84.41													



**Table 4**

Fitted parameters (in  $\text{cm}^{-1}$ ) for the odd parity configurations  $4f^{11}$  and  $4f^{10}6p$  of Er IV compared with HFR radial integrals. Columns 5 and 10 give the scaling factors  $SF(P) = P_{\text{fit}}/P_{\text{HFR}}$  except for average energies  $E_{av}$  where  $P_{\text{fit}} - P_{\text{HFR}}$  are given. Constraints on some parameters are indicated in the columns of Uncertainty "Unc.": f as "fixed" (See details in the text). For comparison, parameters fitted previously [19] with fewer experimental levels are given in columns 6 and 12 followed by their uncertainties in parentheses, followed by their scaling factors in columns 7 and 13.

Param. $P$	$4f^{11}$						$4f^{10}6p$					
	$P_{\text{fit}}$	Unc.	$P_{\text{HFR}}$	$SF$	$P_{\text{prev}}$	$SF_{\text{prev}}$	$P_{\text{fit}}$	Unc.	$P_{\text{HFR}}$	$SF$	$P_{\text{prev}}$	$SF_{\text{prev}}$
$E_{av}$	36095.2	19	0	36095.2	35997(44)	35997.0	207155.7	31	152887	54268.7	207022(76)	54135.0
$F^2(ff)$ (r)	100614.6	170	129798	0.775	99750(428)	0.769	105892.9	179	136606	0.775	104983(450)	0.796
$F^4(ff)$ (r)	71649.8	301	81425	0.880	72727(768)	0.893	75655.4	318	86049	0.879	76857(811)	0.769
$F^6(ff)$ (r)	51227.4	212	58575	0.875	50541(516)	0.863	54224.7	225	62003	0.875	53498(546)	0.863
$\alpha$	24.5	f			24.5(3)		17.3	f			17.3(f)	
$\beta$	-500	f			-500(f)		-500	f			-500(f)	
$\gamma$	1480	f			1480(f)		1480	f			1480(f)	
$\zeta_f$ (r)	2405.4	4	2438	0.987	2407(4)	0.987	2550.4	4	2586	0.986	2552(4)	0.987
$\zeta_p$							5310.6	13	4525	1.174	5310(12)	1.173
$F^1(fp)$							280.1	55			292(51)	
$F^2(fp)$							7700.8	282	9398	0.819	7543(451)	0.803
$G^2(fp)$							2264	f	2405	0.941	2264(f)	0.941
$G^4(fp)$							2053	f	2181	0.941	2053(f)	0.941
Configuration Interaction												
$f^{11} - f^{10}p$												
$R^2(ff, fp)$	-2591	f	-3701	0.700								
$R^4(ff, pf)$	-1406	f	-2008	0.700								

r : all the parameters of the same name are linked by a constant ratio f : fixed parameter

**Table 5**

Fitted parameters (in  $\text{cm}^{-1}$ ) for the even parity configurations  $4f^{10}5d$  and  $4f^{10}6s$  of Er IV compared with HFR radial integrals. Columns 5 and 9 give the scaling factors  $SF(P) = P_{\text{fit}}/P_{\text{HFR}}$  except for average energies  $E_{av}$  where  $P_{\text{fit}} - P_{\text{HFR}}$  are given. Constraints on some parameters are indicated in the columns of Uncertainty "Unc.": f as "fixed" or r as "ratio fixed";  $G^2(fd)$  and  $G^4(fd)$  are kept equal (See text). For comparison, parameters fitted previously [19] with fewer experimental levels are given in columns 6 and 12 followed by their uncertainties in parentheses, followed by their scaling factors in columns 7 and 13.

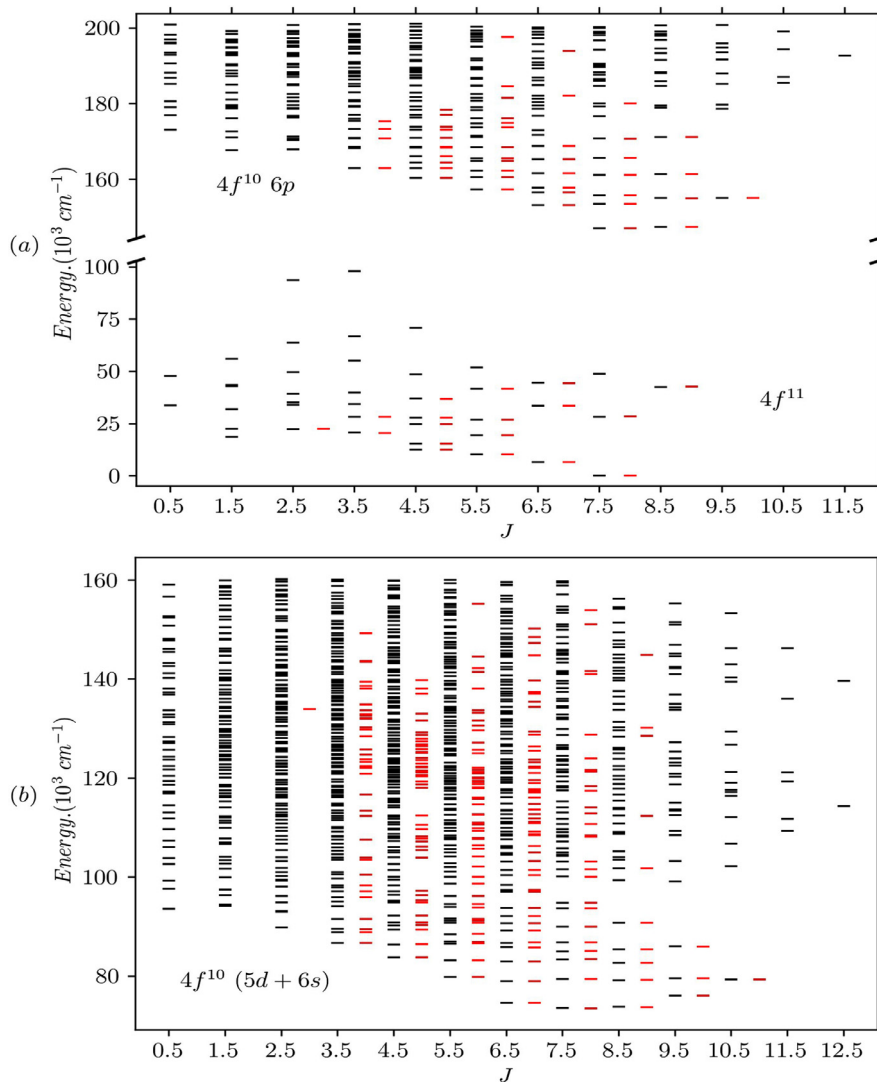
Param. $P$	$4f^{10}5d$						$4f^{10}6s$					
	$P_{\text{fit}}$	Unc.	$P_{\text{HFR}}$	$SF$	$P_{\text{prev}}$	$SF_{\text{prev}}$	$P_{\text{fit}}$	Unc.	$P_{\text{HFR}}$	$SF$	$P_{\text{prev}}$	$SF_{\text{prev}}$
$E_{av}$	133461.4	8	78792	54669.4	133502(67)	54710.0	156897.2	22	104113	52766.2	156929(68)	52816.0
$F^2(ff)$ (r)	105750.7	71	136066	0.777	106024(601)	0.779	106128.5	71	136550	0.777	106402 (r)	0.779
$F^4(ff)$ (r)	75867.8	142	85682	0.885	75440(1152)	0.880	76159.0	143	86011	0.885	75730(r)	0.880
$F^6(ff)$ (r)	53985.1	120	61731	0.874	54152(879)	0.877	54197.3	121	61975	0.874	54365(r)	0.877
$\alpha$	17.6	f			17.6(3)		17.6	f			17.6(f)	
$\beta$	-500	f			-500(f)		-500	f			-500(f)	
$\gamma$	1480	f			1480(f)		1400	f			1400(f)	
$\zeta_f$	2548.5	4	2579	0.988	2555(4)	0.991	2555.5	4	2585	0.988	2562(r)	0.991
$\zeta_d$ (r)	1629.9	8	1755	0.928	1635(11)	0.932						
$F^1(fd)$	1128.7	76			1066(109)							
$F^2(fd)$	24410.7	117	30311	0.805	24370(218)	0.804						
$F^4(fd)$	16260.5	78	14390	1.130	16574(423)	1.152						
$G^1(fd)$	8592.6	38	12410	0.692	8697(88)	0.693						
$G^2(fd)$ ( $r_1$ )	1784.8	119			1939(232)							
$G^3(fd)$	10108.2	167	10500	0.963	10139(291)	0.966						
$G^4(fd)$ ( $r_1$ )	1784.8	119			1939(232)							
$G^5(fd)$	6578.8	164	8108	0.811	6661(224)	0.822						
$G^3(fs)$							2707	105	3286	0.823	2734(112)	0.832
Configuration Interaction												
$f^{10}d - f^{10}s$												
$R^2(fd, fs)$ ( $r_2$ )	1237.7	106	1379	0.897	965(f)	0.700						
$R^3(fd, sf)$ ( $r_2$ )	2774.7	237	3091	0.897	2164(f)	0.700						

r : all the parameters of the same name are linked by a constant ratio f : fixed parameter

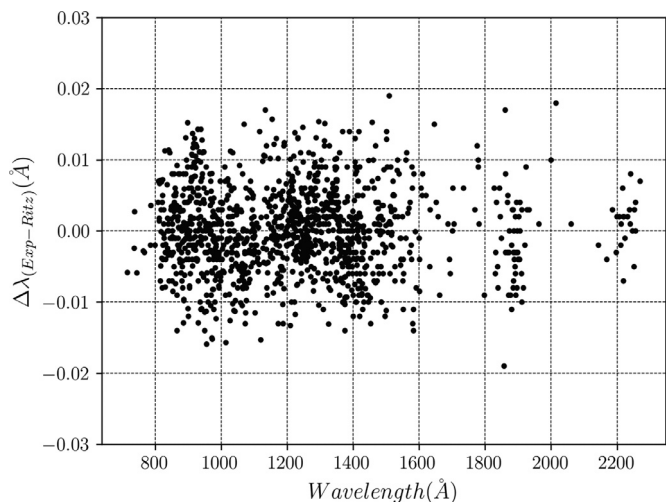
the uncertainty limits for wavelengths shorter than 2000 Å. For wavelengths longer than 2000 Å, the introduction of Cu II and B III standards in the present work results in an increase between 0.008 Å and 0.028 Å in wavelengths. From the previous line list [19], the lines at 1093.621 Å, 1169.007 Å, 1302.490 Å, 1368.886 Å, 1557.219 Å, 1568.954 Å, 1589.166 Å, 1779.547 Å and 2151.182 Å have not been retained. For three lines at 1248.436 Å, 1265.144 Å and 1518.129 Å, the classifications have been changed. For each of the previously doubly identified lines at 1163.024 Å, 1219.395 Å, 1349.702 Å and 1404.576 Å, only one identification has been retained.

In Table 3, the cancellation factor, as defined in equation (14.107), p. 423 in [20], is a measure of possible effects of interferences due to wavefunction mixings and provides a criterion for

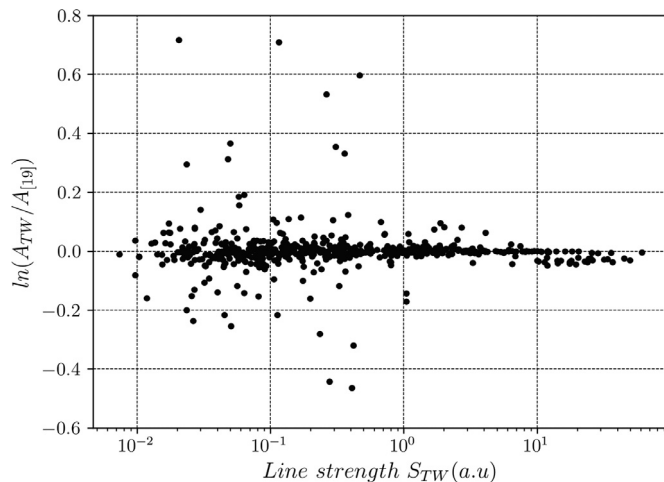
the reliability of the calculated  $gA$ . However, the limit of reliability is somewhat arbitrary, depending on cases. As examples, in the discussion on the calculated transition probabilities in Te II and Te III spectra [38], the authors considered  $|CF| > 0.05$  as the limit for fully reliable  $A$  values. In a study on rare-earth elements and ions, Biémont [39] considered the transition probabilities as affected by severe cancellation effects when  $|CF| < 0.01$ . Among the present 1647 identified transitions, 66% have a  $|CF| > 0.05$  and 1% have a  $|CF| < 0.01$ , i. e., most of the  $gA$  values are not affected by cancellation effects in spite of strong mixings of wavefunctions in both  $LS$  and  $JJ$  coupling schemes. In column 9 of Table 3, eleven of the previous  $gA$  values are marked with an asterisk (\*). They show a transcription error in [19]. Fig. 4 displays a comparison of  $gA$  from this work and from the previous study [19] for lines in common in



**Fig. 2.** Level energies versus  $J$  for (a) the odd parity  $4f^{11}$  and  $4f^{10}6p$  configurations and (b) the even parity  $4f^{10}5d$  and  $4f^{10}6s$  configurations. In black: calculated; in red and shifted to the right: experimental. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)



**Fig. 3.** Deviations between the measured wavelengths and the calculated Ritz wavelengths for all lines included in the energy optimisation procedure.



**Fig. 4.** Comparison of the transition probabilities  $gA$  from this work (TW) and from the previous work [19] for lines common to the two works versus line strengths. Eleven outlying points have been excluded from the plot (see text).

the two works, by plotting  $\ln(A_{TW}/A_{[19]})$  as a function of the line strengths  $S_{TW}$  (in a.u.) calculated in this work. The eleven outlying points have been omitted from this figure. One can see that the  $gA$  values are in good agreement with deviations of 8% in average.

The complete Table 3 is given in tab-limited text format (Table 3A) in supplementary materials of the journal and also at [molat.obspm.fr](http://molat.obspm.fr) [40].

Table 4 reports the results from the final run of RCE for the odd configurations, i.e., the HFR and fitted energy parameters and their uncertainties in the LSQ fit performed with 65 experimental levels of  $4f^{11}$  and  $4f^{10}6p$ . The mean error of the fit with 9 free parameters is  $51\text{ cm}^{-1}$ . The fitted parameter values and their uncertainties from the previous analysis [19] are displayed for comparison. Table 5 reports the similar results for the even configurations. The fit performed with 223 experimental levels and 17 free parameters led to a mean error of  $53\text{ cm}^{-1}$ . It can be seen that compared with the previous analysis [19], all the fitted parameters are determined with much smaller uncertainties.

#### 4. Conclusions

Based on laboratory high resolution emission spectra of erbium and semi-empirical HFR-parametric calculations, we extended the previous revised analysis of the Er IV spectrum [19], leading to the identifications of 1603 Er IV lines in the UV range of 715 - 2277 Å, of which 1022 are new, and to the determination of 168 new energy levels belonging to the  $4f^{11}$ ,  $4f^{10}5d$ ,  $4f^{10}6s$  and  $4f^{10}6p$  configurations of the  $\text{Er}^{3+}$  ion, reaching a total of 288 energy levels in this ion. This work greatly increases the number of known energy levels and leads to better defined energy parameters of the electronic configurations involved. Consequently, the final diagonalisation of the Hamiltonian built with these parameters provides improved predictions for remaining unknown level energies and improved wavefunctions, therefore, more reliable semi-empirical radiative transition probabilities and Landé factors. These results also provide experimental data necessary for testing different theoretical methods, whether they are *ab initio* or semi-empirical. The experimental vacuum spark spectra of erbium contain many unidentified lines that could belong to the Er III spectrum. The present progress in Er IV opens the way to further study of the Er III spectrum below 2000 Å.

#### Author Statement

Anis CHIKH : main contributor to the spectral analysis (PhD student), D. Deghiche, A. Meftah, W.-Ü L. Tchang-Brillet, J-F Wyart and C. Balança : contribute equally to the work : conceptualization, funding acquisition, methodology, investigation and writing. N. Champion and C. Blaess : technical support for experiments and measurements.

#### Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

#### Acknowledgements

We are deeply indebted to the referee for his very thorough and instructive review, which helped us to greatly improve our data and their presentation. AC is thankful to the Algerian-French PRO-FAS B+ programme for a seven-month grant. Supports from Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algeria and from the project A25N01UN150120150001, CNEPRU, Algeria are acknowledged. Financial supports from the French CNRS - PNPS national program

and from the Paris Observatory Federal Action "Stars" (AFE) are acknowledged.

#### Appendix A

The following tables are given in tab-limited text format as supplementary materials of the journal:

Table1A: Odd parity energy levels of the two configurations  $4f^{11}$  and  $4f^{10}6p$  of the  $\text{Er}^{3+}$  ion.

Table2A: Even parity energy levels of the two configurations  $4f^{10}5d$  and  $4f^{10}6s$  of the  $\text{Er}^{3+}$  ion.

Table3A: The classified lines of Er IV (Table 3A) are ordered by increasing wavelengths in the file.

#### Supplementary material

Supplementary material associated with this article can be found, in the online version, at doi:[10.1016/j.jqsrt.2021.107796](https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107796).

#### References

- [1] Ryabchikova T, Ryabtsev A, Kochukhov O, Bagnulo S. Rare-earth elements in the atmosphere of the magnetic chemically peculiar star HD 144897. New classification of the Nd III spectrum. *Astron Astrophys* 2006;456:329–38. doi:[10.1051/0004-6361:20065367](https://doi.org/10.1051/0004-6361:20065367).
- [2] Wyart J-F, Tchang-Brillet W-Ü L, Churilov SS, Ryabtsev AN. Extended analysis of the Eu III spectrum. *Astronomy & Astrophysics* 2008;483(1):339–59. doi:[10.1051/0004-6361:20079333](https://doi.org/10.1051/0004-6361:20079333).
- [3] Kasen D, Badnell NR, Barnes J. Opacities and spectra of the r-process ejecta from neutron star mergers. *Astrophys J* 2013;774. doi:[10.1088/0004-637X/774/1/25](https://doi.org/10.1088/0004-637X/774/1/25).
- [4] Fontes C, Fryer C, Hungerford A, Hakeel P, Colgan J, Kilcrease D, et al. Relativistic opacities for astrophysical applications. *High Energy Density Phys* 2015;16:53–59. doi:[10.1016/j.hedp.2015.06.002](https://doi.org/10.1016/j.hedp.2015.06.002).
- [5] Godard A. Infrared (2–12  $\mu\text{m}$ ) solid-state laser sources: a review. *CR Phys* 2007;8(10):1100–28. doi:[10.1016/j.cry.2007.09.010](https://doi.org/10.1016/j.cry.2007.09.010).
- [6] Levchuk D, Levchuk S, Maier H, Bolt H, Suzuki A. Erbium oxide as a new promising tritium permeation barrier. *J Nucl Mater* 2007;367:1033–7. doi:[10.1016/j.jnucmat.2007.03.183](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2007.03.183).
- [7] Yin C, Rancic M, de Boo GG, Stavrias N, McCallum JC, Sellars MJ, et al. Optical addressing of an individual erbium ion in silicon. *Nature* 2013;497(7447):91–4. doi:[10.1038/nature12081](https://doi.org/10.1038/nature12081).
- [8] Wyart J-F, Lawler JE. Theoretical interpretation and new energy levels in Er II. *Phys Scr* 2009;79(4). doi:[10.1088/0031-8949/79/04/045301](https://doi.org/10.1088/0031-8949/79/04/045301).
- [9] Martin WC, Zalubas R, Hagan L. Atomic energy levels - The rare-Earth elements; 1978.
- [10] Spector N. Level structure of doubly ionized erbium (Er III). *Journal of the Optical Society of America* (1917–1983) 1973;63:358–61.
- [11] Wyart J-F, Blaise J, Camus P. Progrès récents dans l'interprétation des configurations  $4f^N(5d + 6s)$  des lanthanides II. Etude paramétrique des configurations. *Phys Scr* 1974;9(6):325–30. doi:[10.1088/0031-8949/9/6/004](https://doi.org/10.1088/0031-8949/9/6/004).
- [12] Wyart J-F, Blaise J, Bidelman WP, Cowley CR. Energy levels and transition probabilities in doubly-ionized erbium (Er III). *Phys Scr* 1997;56(5):446–58. doi:[10.1088/0031-8949/56/5/008](https://doi.org/10.1088/0031-8949/56/5/008).
- [13] Becher J. The Spectrum of Erbium III. The Johns Hopkins University, Baltimore, MD, USA; 1966.
- [14] Carter WJ. The Spectrum of Erbium IV. The Johns Hopkins University, Baltimore, MD, USA; 1966.
- [15] Brewer L. Energies of the electronic configurations of the singly, doubly, and triply ionized lanthanides and actinides. *Journal of the Optical Society of America* (1917–1983) 1971;61:1666–82.
- [16] Kramida A, Ralchenko Y, Reader J, NIST ASD Team. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.7.1). [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2019, October 18]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.; 2019.
- [17] Radžiūtė L, Gaigalas G, Kato D, Jönsson P, Rynkun P, Kučas S, et al. Energy level structure of  $\text{Er}^{3+}$ . *J Quant Spectrosc Radiat Transfer* 2015;152:94–106. doi:[10.1016/j.jqsrt.2014.11.007](https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2014.11.007).
- [18] Meftah A, Ait Mammari S, Wyart J-F, Tchang-Brillet W-Ü L, Blaess C, Champion N, et al. Analysis of the VUV emission spectrum of the  $\text{Er}^{3+}$  ion (Er IV). *AIP Conf Proc* 2017;1811(1):040003. doi:[10.1063/1.4975719](https://doi.org/10.1063/1.4975719).
- [19] Meftah A, Ait Mammari S, Wyart J-F, Tchang-Brillet W-Ü L, Champion N, Blaess C, et al. Analysis of the free ion spectrum of  $\text{er}^{3+}$  (er IV). *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics* 2016;49(16). doi:[10.1088/0953-4075/49/16/165002](https://doi.org/10.1088/0953-4075/49/16/165002).
- [20] Cowan R. The theory of atomic structure and spectra. University of California Press; 1981. ISBN 9780520906150.
- [21] Wyart J-F, Tchang-Brillet W-Ü L, Spector N, Palmeri P, Quinet P, Biémont E. Extended analysis of the spectrum of triply-ionized ytterbium (Yb IV) and transition probabilities. *Phys Scr* 2001;63(2):113–21. doi:[10.1238/Physica.Regular.063a00113](https://doi.org/10.1238/Physica.Regular.063a00113).

- [22] Wyart J-F, Meftah A, Bachelier A, Sinzelle J, Tchang-Brillet W-Ü L, Champion N, et al. LETTER TO THE EDITOR: Energy levels of  $4f^3$  in the  $Nd^{3+}$  free ion from emission spectra. *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics* 2006;39:L77–82. doi:10.1088/0953-4075/39/5/L01.
- [23] Wyart J-F, Meftah A, Tchang-Brillet W-Ü L, Champion N, Lamrous O, Spec- tor N, et al. Analysis of the free ion  $Nd^{3+}$  spectrum (Nd IV). *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics* 2007;40:3957–72. doi:10.1088/0953-4075/40/19/ 013.
- [24] Meftah A, Wyart J-F, Champion N, Tchang-Brillet W-Ü L. Observation and interpretation of the  $Tm^{3+}$  free ion spectrum. *European Physical Journal D* 2007;44:35–45. doi:10.1140/epjd/e2007-00173-x.
- [25] Meftah A, Wyart J-F, Tchang-Brillet W-Ü L, Blaess C, Champion N. Spectrum and energy levels of the  $Yb^{4+}$  free ion (Yb v). *Phys Scr* 2013;88(4). doi:10.1088/ 0031-8949/88/04/045305.
- [26] Meftah A, Wyart J-F, Sinzelle J, Tchang-Brillet W-Ü L, Champion N, Spec- tor N, et al. Spectrum and energy levels of the  $Nd^{4+}$  free ion (Nd v). *Phys Scr* 2008;77(5). doi:10.1088/0031-8949/77/05/055302.
- [27] Kelly RL. Atomic and ionic spectrum lines below 2000 Angstroms. hydrogen through krypton. *J Phys Chem Ref Data* 1987;16:1.
- [28] Kaufman V, Edlén B. Reference wavelengths from atomic spectra in the range 15 Å to 25000 Å. *J Phys Chem Ref Data* 1974;3(4):825–95. doi:10.1063/1. 3253149.
- [29] Shenstone AG. The third spectrum of copper (Cu III). *J Res Natl Bur Stand (US)* 1975;A 79:497–521. doi:10.6028/jres.079A.014.
- [30] Kramida A, Nave G, Reader J. The Cu II spectrum. *Atoms* 2017;5(1):9. doi:10. 3390/atoms5010009.
- [31] Litzén U, Kling R. LETTER TO THE EDITOR: Precision measurement of wave- lengths and isotope shifts of the B III resonance lines at 2065 and 2067 Å. *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics* 1998;31(22):L933–6. doi:10.1088/ 0953-4075/31/22/001.
- [32] Kramida A. A suite of atomic structure codes originally developed by R. D. Cowan adapted for Windows-based personal computers. National Institute of Standards and Technology. (Accessed: 2018-10-15); 2018. doi:10.18434/T4/ 1502500
- [33] Azarov VI. Formal approach to the solution of the complex-spectra identifica- tion problem. i. theory. *Phys Scr* 1991;44:528–38. doi:10.1088/0031-8949/44/ 6/004.
- [34] Azarov VI. Formal approach to the solution of the complex-spectra identi- fication problem. 2. implementation. *Phys Scr* 1993;48:656–67. doi:10.1088/ 0031-8949/48/6/004.
- [35] Azarov VI, Kramida A, Vokhmentsev MY. IDEN2—A program for visual iden- tification of spectral lines and energy levels in optical spectra of atoms and simple molecules. *Comput Phys Commun* 2018;225:149–53. doi:10.1016/j.cpc. 2017.12.012.
- [36] Kramida AE. The program LOPT for least-squares optimization of energy levels. *Comput Phys Commun* 2011;182:419–34. doi:10.1016/j.cpc.2010.09.019.
- [37] Nielson C, Koster G. *Spectroscopic coefficients for the  $p^n$ ,  $d^n$ , and  $f^n$  configurations*. Cambridge, MA : MIT Press; 1963.
- [38] Zhang W, Palmeri P, Quinet P, Biémont E. Transition probabilities in te II and te III spectra. *Astronomy & Astrophysics* 2013;551. doi:10.1051/0004-6361/ 201220918.
- [39] Biémont E. Recent advances and difficulties in oscillator strength determina- tion for rare-Earth elements and ions. *Physica Scripta Volume T* 2005;119:55– 60. doi:10.1088/0031-8949/2005/T119/010.
- [40] Paris Observatory. Online atomic and molecular data, <https://molat.obspm.fr>. 2020.
- [41] Peck ER, Reeder K. Dispersion of air. *Journal of the Optical Society of America (1917–1983)* 1972;62(8):958.



# Bibliographie

- [1] J. G. BEDNORZ et K. A. MÜLLER, « Possible highTc superconductivity in the Ba La Cu O system », en, [Zeitschrift für Physik B Condensed Matter](#) **64**, 189-193 (1986).
  - [2] D SCHMITT, « Angular distribution of 4f electrons in the presence of a crystal field », [Journal de Physique](#) **47**, 677-681 (1986).
  - [3] S. COTTON et J. HARROWFIELD, « Lanthanides : Biological Activity and Medical Applications », in (déc. 2012).
  - [4] D. GLEZ, S. HOURDIN et O. SOREL, « Laser Er :YAG en parodontologie et implication dans le plan de traitement orthodontique », [L'Orthodontie Française](#) **81**, 19-26 (2010).
  - [5] Y. KOROVIN et N RUSAKOVA, « Near-infrared luminescence of  $Yb^{3+}$ ,  $Nd^{3+}$  and  $Er^{3+}$  in complexes with organic dyes », [Journal of Alloys and Compounds](#) **374**, 311-314 (2004).
  - [6] P. KIK et A. POLMAN, « Erbium-doped optical-waveguide amplifiers on silicon », [MRS bulletin](#) **23**, 48-54 (1998).
  - [7] T. RYABCHIKOVA, A. RYABTSEV, O. KOCHUKHOV et S. BAGNULO, « Rare-earth elements in the atmosphere of the magnetic chemically peculiar star HD 144897 - New classification of the Nd III spectrum », [Astronomy & Astrophysics](#) **456**, 329-338 (2006).
  - [8] T. FAN, « Heat generation in Nd :YAG and Yb :YAG », [IEEE Journal of Quantum Electronics](#) **29**, 1457-1459 (1993).
  - [9] D LEVCHUK, S LEVCHUK, H MAIER, H BOLT et A SUZUKI, « Erbium oxide as a new promising tritium permeation barrier », [Journal of Nuclear Materials](#) **367**, 1033-1037 (2007).
-

- 
- [10] C. YIN, M. RANCIC, G. G. de BOO, N. STAVRIAS, J. C. McCALLUM, M. J. SELLARS et S. ROGGE, « Optical addressing of an individual erbium ion in silicon », *Nature* **497**, 91-94 (2013).
- [11] N. SPECTOR et J. SUGAR, « Analysis of the fourth spectrum of terbium (TbIV) », EN, *J. Opt. Soc. Am., JOSA* **66**, 436-438 (1976).
- [12] J.-F WYART, J BLAISE et P CAMUS, « Progrès Récents dans l'Interprétation des Configurations  $4f^N$  (5d+ 6s) des Lanthanides II. Etude Paramétrique des Configurations », *Physica Scripta* **9**, 325 (1974).
- [13] J.-F WYART, J BLAISE, W. P BIDELEMAN et C. R COWLEY, « Energy levels and transition probabilities in doubly-ionized erbium (Er III) », *Physica Scripta* **56**, 446 (1997).
- [14] J.-F. WYART et J. E. LAWLER, « Theoretical interpretation and new energy levels in Er II », en, *Phys. Scr.* **79**, 045301 (2009).
- [15] J BECHER, « The Spectrum of Erbium III. », thèse de doct. (THE JOHNS HOPKINS UNIVERSITY., 1966).
- [16] W. J. CARTER, « The Spectrum of Erbium IV. », thèse de doct. (The John Hopkins university., jan. 1966).
- [17] L. BREWER, « Energies of the electronic configurations of the singly, doubly, and triply ionized lanthanides and actinides. », *Journal of the Optical Society of America* (1917-1983) **61**, 1666-1682 (1971).
- [18] L BREWER, « Energies of the Electronic Configurations of the Lanthanide and Actinide Neutral Atoms », EN, *J. Opt. Soc. Am., JOSA* **61**, 1101-1111 (1971).
- [19] W. C. MARTIN, R. ZALUBAS et L. HAGAN, *Atomic energy levels - The rare-Earth elements*, NSRDS-NBS (US), 60 (1978).
- [20] L RADŽIŪTĖ, D. KATO, G. GAIGALAS, P. JÖNSSON, P. RYNKUN, V. JONAUSKAS et S KUČAS, « Energy level structure of the ground configuration in the  $\text{Er}^{3+}$  free ion », *Physica Scripta* **90**, 054001 (2015).
- [21] A. MEFTAĤ, S. A. MAMMAR, J.-F. WYART, W.-L. TCHANG-BRILLET, C. BLAESS et al., « Analysis of the VUV emission spectrum of the  $\text{Er}^{3+}$  ion (Er IV) », *AIP Conference Proceedings* **1811**, 040003 (2017).
- [22] A. MEFTAĤ, S. A. MAMMAR, J.-F. WYART, W.-L. TCHANG-BRILLET, N. CHAMPION et al., « Analysis of the free ion spectrum of  $\text{Er}^{3+}$  (Er IV) », en, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49**, 165002 (2016).
-

- 
- [23] R. D. COWAN, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, en (University of California Press, sept. 1981).
- [24] J. F. SEELY, J. O. EKBERG, C. M. BROWN, U. FELDMAN, W. E. BEHRING, J. READER et M. C. RICHARDSON, « Laser-Produced Spectra and QED Effects for Fe-, Co-, Cu-, and Zn-like Ions of Au, Pb, Bi, Th, and U », *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2924-2926 (1986).
- [25] S. CAROLI, *Improved hollow cathode lamps for atomic spectroscopy* (Ellis Horwood, 1985).
- [26] S JOHANSSON et U LITZÉN, « Analysis of 4d-4f Transitions in Fe II », *Physica Scripta* **10**, 121 (1974).
- [27] S JOHANSSON et U LITZÉN, « Observations of charge-transfer reactions through enhancement of spectral lines », *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics* **11**, L703 (1978).
- [28] C HEISE, J HOLLANDT, R KLING, M KOCK et M KÜHNE, « Radiometric characterization of a Penning discharge in the vacuum ultraviolet », *Applied optics* **33**, 5111-5117 (1994).
- [29] P. FELLGETT, « On the ultimate sensitivity and practical performance of radiation detectors », *JOSA* **39**, 970-976 (1949).
- [30] P. R. GRIFFITHS, « Fourier transform infrared spectrometry », *Science* **222**, 297-302 (1983).
- [31] V. I. AZAROV, « Formal approach to the solution of the complex-spectra identification problem. I. theory », en, *Phys. Scr.* **44**, 528 (1991).
- [32] V. I. AZAROV, « Formal approach to the solution of the complex-spectra identification problem. 2. implementation », en, *Phys. Scr.* **48**, 656 (1993).
- [33] F. S. TOMKINS et M. FRED, « A Photoelectric Setting Device for a Spectrum Plate Comparator », EN, *JOSA* **41**, Publisher: Optical Society of America, 641-643 (1951).
- [34] D. W. STEINHAUS, « Photoelectric Comparator for Wavelength and Intensity Measurements of Spectra\* », EN, *JOSA* **49**, Publisher: Optical Society of America, 468-470 (1959).
-

- 
- [35] L. FRANÇOISE, « Photoelectric spectroscopic plate measuring machine built at the Meudon Observatory », in *Image processing techniques in astronomy : Proceedings of a Conference Held in Utrecht on March 25-27 1975*, t. 54, Springer Science & Business Media (2012), p. 265-268.
- [36] V. KAUFMAN et B. EDLÉN, « Reference wavelengths from atomic spectra in the range 15 Å to 25000 Å », *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **3**, 825-895 (1974).
- [37] R. L. KELLY, « Atomic and ionic spectrum lines below 2000 angstroms : hydrogen through krypton », **16** (1987).
- [38] C. CLAUDE COHEN-TANNOUJJI, B. DIU et F. LALOË, *Mécanique quantique Tome 1*, Français, EDP-Sciences, t. vol. 1, nouvelle édition (2018).
- [39] C. CLAUDE COHEN-TANNOUJJI, B. DIU et F. LALOË, *Mécanique quantique Tome 2*, Français, EDP-Sciences, t. vol. 2, nouvelle édition révisé (2018).
- [40] A. THORNE, U. LITZÉN et S. JOHANSSON, *Spectrophysics : principles and applications* (Springer Science & Business Media, 1999).
- [41] W. PAULI, « Exclusion principle and quantum mechanics », in *Writings on Physics and Philosophy* (Springer, 1994), p. 165-181.
- [42] BIÉMONT, *Spectroscopie atomique : Instrumentation et structures atomiques* (Poche, fév. 2015).
- [43] E. U. CONDON et G. H. SHORTLEY, *The theory of atomic spectra* (Cambridge University Press, 1951).
- [44] E. U. CONDON et G. H. SHORTLEY, « The Theory of Complex Spectra II », *Phys. Rev.* **37**, 1025-1043 (1931).
- [45] C. BONNELLE et N. SPECTOR, « Rare-Earth Spectroscopy », en, in *Rare-Earths and Actinides in High Energy Spectroscopy*, sous la dir. de C. BONNELLE et N. SPECTOR, Progress in Theoretical Chemistry and Physics (Springer Netherlands, Dordrecht, 2015), p. 245-325.
- [46] G. RACAH, « Theory of Complex Spectra. II », *Phys. Rev.* **62**, 438-462 (1942).
- [47] G. RACAH, « Theory of Complex Spectra. III », *Phys. Rev.* **63**, 367-382 (1943).
- [48] G. RACAH, « Theory of Complex Spectra. IV », *Phys. Rev.* **76**, 1352-1365 (1949).
- [49] J. C. SLATER, *Introduction to chemical physics* (Read Books Ltd, 2011).
-

- 
- [50] O. KOCHUKHOV, T. RYABCHIKOVA et N. PISKUNOV, « No magnetic field variation with pulsation phase in the roAp star  $\gamma$  Equulei », en, *Astronomy & Astrophysics* **415**, Number: 2 Publisher: EDP Sciences, L13-L16 (2004).
- [51] S. D. CHOJNOWSKI, S. HUBRIG, S. HASSELQUIST, F. CASTELLI, D. G. WHELAN et al., « Discovery of Resolved Magnetically Split Lines in SDSS/APOGEE Spectra of 157 Ap/Bp Stars », *The Astrophysical Journal* **873**, L5 (2019).
- [52] C. CLAUDE COHEN-TANNOUJJI, B. DIU et F. LALOË, *Mécanique quantique Tome 3*, Français, EDP-Sciences, t. vol. 3 (2017).
- [53] J.-F. WYART, « On the interpretation of complex atomic spectra by means of the parametric Racah–Slater method and Cowan codes », *Canadian Journal of Physics* **89**, 451-456 (2011).
- [54] R. D. COWAN, « Theoretical Calculation of Atomic Spectra Using Digital Computers\* », EN, *J. Opt. Soc. Am., JOSA* **58**, 808-818 (1968).
- [55] W. CARNALL, P. FIELDS et K. RAJNAK, « Electronic energy levels in the trivalent lanthanide aquo ions. I.  $Pr^{3+}$ ,  $Nd^{3+}$ ,  $Pm^{3+}$ ,  $Sm^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$ ,  $Ho^{3+}$ ,  $Er^{3+}$ , and  $Tm^{3+}$  », *The Journal of Chemical Physics* **49**, 4424-4442 (1968).
- [56] W. CARNALL, P. FIELDS et K. RAJNAK, « Spectral intensities of the trivalent lanthanides and actinides in solution. II.  $Pm^{3+}$ ,  $Sm^{3+}$ ,  $Eu^{3+}$ ,  $Gd^{3+}$ ,  $Tb^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$ , and  $Ho^{3+}$  », *The Journal of Chemical Physics* **49**, 4412-4423 (1968).
- [57] A. MEFTAH, « Mesure et interprétation de spectres de lanthanides faiblement ionisés dans l’ultraviolet : cas du néodyme et du thulium », Université Paris 11 (France), Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (Algérie), 2007, thèse de doct. ()).
- [58] H VIGNERON, « Répartition des raies spectrales dans des spectres d’émission : théorie de Ritz », *Journal de Physique Théorique et Appliquée* **1**, 294-301 (1911).
- [59] A. E. KRAMIDA, « The program LOPT for least-squares optimization of energy levels », *Computer Physics Communications* **182**, 419-434 (2011).
- [60] L. J. RADZIEMSKI JR, K. J. FISHER, D. W. STEINHAUS et A. S. GOLDMAN, « Wave number calculation from least-squares level values », *Computer Physics Communications* **3**, 19-21 (1972).
- [61] K. ÖBERG, « Isotope shifts and accurate wavelengths in Ne II and Ne III », *The European Physical Journal D* **41**, 25-47 (2007).
-

- 
- [62] L. J. RADZIEMSKI JR, K. J. FISHER, D. W. STEINHAUS et A. S. GOLDMAN, « Calculation of atomic energy level values », *Computer Physics Communications* **3**, 9-18 (1972).
- [63] J.-F. WYART, A. MEFTAH, A. BACHELIER, J. SINZELLE, W.- L. TCHANG-BRILLET et al., « Energy levels of  $4f^3$  in the  $Nd^{3+}$  free ion from emission spectra », en, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39**, L77 (2006).
- [64] J.-F. WYART, A. MEFTAH, W.- L. TCHANG-BRILLET, N. CHAMPION, O. LAMROUS, NISSAN SPECTOR et J. SUGAR, « Analysis of the free ion  $Nd^{3+}$  spectrum (Nd IV) », en, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40**, 3957 (2007).
- [65] A MEFTAH, J.-F. WYART, N CHAMPION et L TCHANG-BRILLET, « Observation and interpretation of the  $Tm^{3+}$  free ion spectrum », *The European Physical Journal D* **44**, 35-45 (2007).
- [66] A. KRAMIDA et G. NAVE, « New FTS measurements, optimized energy levels and refined VUV standards in the Ne III spectrum », *The European Physical Journal D-Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics* **37**, 1-21 (2006).
- [67] A. KRAMIDA, Y. RALCHENKO, J. READER et NIST ASD TEAM, NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.5.6), [Online]. Available : <https://physics.nist.gov/asd> [2017, April 9]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. 2018.
- [68] L. RADŽIŪTĖ, G. GAIGALAS, D. KATO, P. JÖNSSON, P. RYNKUN et al., « Energy level structure of  $Er^{3+}$  », *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **152**, 94-106 (2015).
- [69] A. MEFTAH, J.-F. WYART, W.- L. TCHANG-BRILLET, C. BLAESS et N. CHAMPION, « Spectrum and energy levels of the  $Yb^{3+}$  free ion (Yb V) », en, *Phys. Scr.* **88**, 045305 (2013).
- [70] A. MEFTAH, J.-F. WYART, N. CHAMPION et W.-Ü. L. TCHANG-BRILLET, « Observation and interpretation of the  $Tm^{3+}$  free ion spectrum », *European Physical Journal D* **44**, 35-45 (2007).
- [71] A. CHIKH, D. DEGICHE, A. MEFTAH, W.- L. TCHANG-BRILLET, J. F. WYART et al., « Extended analysis of the free ion spectrum of  $Er^{3+}$  (Er IV) », en, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 107796 (2021).
- [72] A. KRAMIDA, « Critically evaluated energy levels and spectral lines of singly ionized indium (In II) », *Journal of research of the National Institute of Standards and Technology* **118**, 52 (2013).
-

- 
- [73] A. KRAMIDA, « A critical compilation of energy levels, spectral lines, and transition probabilities of singly ionized silver, Ag II », Journal of research of the National Institute of Standards and Technology **118**, 168 (2013).
- [74] E. R. PECK et K. REEDER, « Dispersion of Air », Journal of the Optical Society of America (1917-1983) **62**, 958 (1972).
- [75] C. NIELSON et G. KOSTER, *Spectroscopic Coefficients for the  $p^n$ ,  $d^n$ , and  $f^n$  Configurations* (Cambridge, MA : MIT Press, 1963).
-

## Résumé

Cette thèse porte sur l'étude des propriétés spectroscopiques d'ions trivalents de terres rares, cas de  $Er^{+3}$ ,  $Dy^{+3}$  et  $Ho^{+3}$ . Pour l'ion ErIV, nous avons étendu et analysé le spectre ultraviolet sous vide (VUV) dans la région allant de 705 à 2460 Å moyennant la méthode paramétrique de Racah-Slater implémentée dans la série des codes Cowan. Les spectres expérimentaux ont été produits et enregistrés avec le spectrographe de 10.7m de l'observatoire de Paris-Meudon. Ce qui nous a permis d'identifier 1022 nouvelles raies comme transitions entre les configurations  $4f^{11}$ ,  $4f^{10}5d$ ,  $4f^{10}6s$ ,  $4f^{10}6p$  additionnées aux 591 raies identifiées précédemment. Ces identifications ont eu pour effet de déterminer 168 nouveaux niveaux d'énergie de l'ErIV pour une déviation moyenne de  $51 \text{ cm}^{-1}$  pour les configurations impaires ( $4f^{11}$  et  $4f^{10}6p$ ) et de  $53 \text{ cm}^{-1}$  pour les configurations paires ( $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$ ). Le nombre important de niveaux expérimentaux identifiés donne une meilleure définition des paramètres de Racah, ce qui améliore la prédiction des niveaux inconnus et les probabilités de transitions. Pour le  $Dy^{+3}$  et le  $Ho^{+3}$ , nous nous sommes intéressés à l'étude théorique des propriétés radiatives en utilisant les facteurs d'échelle d'éléments de la même séquence isoionique.

**Mots clés :** Ions trivalents de lanthanides, Spectroscopie à réseau, Approximation du champ central, Algèbre de Racah-slater, Erbium, Dysprosium, Holmium, Niveaux d'énergie, Longueurs d'onde, Probabilités de transition, configurations électroniques.

## Abstract

This thesis focuses on the study of the spectroscopic properties of trivalent rare earth ions, such as  $Er^{+3}$ ,  $Dy^{+3}$ , and  $Ho^{+3}$ . For the ErIV ion, we analyzed and heard the VUV spectrum in the region ranging from 705 to 2460 Å, and this, using an *ab-initio* method implemented in the RD Cowan code which uses the approximation of the central field and the Racah-slater algebra. Using the experimental spectra recorded with the 10.7m spectrograph from the Paris-Meudon observatory, this made it possible to identify 1022 new lines of transitions between the  $4f^{11}$ ,  $4f^{10}5d$ ,  $4f^{10}6s$ ,  $4f^{10}6p$  configurations of the ion  $Er^{+3}$  added to 591 lines identified previously. These identifications have the effect of determining 168 new energy levels of ErIV for an average deviation of  $51 \text{ cm}^{-1}$  for the configurations of odd parity ( $4f^{11}$  and  $4f^{10}6p$ ) and  $53 \text{ cm}^{-1}$  for the even configurations ( $4f^{10}5d$  and  $4f^{10}6s$ ). The large number of experimental levels identified gives a better definition of the Racah parameters, which improves the prediction of the unknown levels and the transitions probabilities. For the  $Dy^{+3}$  and the  $Ho^{+3}$ , the lack of experimental data compels us to restrict ourselves to purely theoretical calculations adjusted using scale factors of elements of the same isoionic sequence.

**keywords :** Trivalent lanthanide ions, Grating spectroscopy, Approximation of the central field, Racah-slater algebra, Erbium, Dysprosium, Holmium, Energy levels, Wavelengths, Transitions probabilities, Electronics configurations.