

Table A1: Transitions of ν_{3a} of ND₂H

J'	K'_a	K'_c	J	K_a	K_c	$\tilde{\nu}_0^{\text{exp}}/\text{cm}^{-1}$	Δ	
<i>s</i>	0	0	<i>a</i>	1	1	0	2417.8325	-24
<i>s</i>	1	0	<i>s</i>	2	1	2	2412.0556	-45
<i>s</i>	1	0	<i>a</i>	2	1	1	2407.0778	-37
<i>s</i>	1	0	<i>s</i>	1	1	0	2427.0403	-34
<i>s</i>	1	0	<i>a</i>	1	1	1	2428.4756	-42
<i>s</i>	1	1	<i>a</i>	2	2	0	2404.1604	-37
<i>s</i>	1	1	<i>s</i>	1	0	1	2434.7244	-49
<i>s</i>	1	1	<i>a</i>	0	0	0	2443.6516	-40
<i>s</i>	1	1	<i>s</i>	2	2	1	2404.9529	-45
<i>s</i>	1	1	<i>s</i>	2	2	0	2402.6980	9
<i>s</i>	1	1	<i>s</i>	0	0	0	2442.2004	15
<i>s</i>	1	1	<i>a</i>	2	2	1	2403.1706	11
<i>s</i>	1	1	<i>a</i>	1	0	1	2432.9305	-6
<i>s</i>	2	0	<i>s</i>	1	1	1	2446.0930	-44
<i>s</i>	2	0	<i>a</i>	2	1	2	2429.3358	-45
<i>s</i>	2	0	<i>s</i>	3	1	3	2404.9685	-38
<i>s</i>	2	0	<i>a</i>	3	1	2	2395.3549	-44
<i>s</i>	2	1	<i>a</i>	2	2	1	2424.7810	29
<i>s</i>	2	1	<i>a</i>	3	2	1	2394.8038	58
<i>s</i>	2	1	<i>s</i>	3	2	2	2397.6609	60
<i>s</i>	2	1	<i>s</i>	2	2	0	2424.3103	47
<i>s</i>	2	1	<i>a</i>	1	0	1	2454.5456	59
<i>s</i>	2	1	<i>s</i>	3	0	3	2406.7366	-3
<i>s</i>	2	1	<i>a</i>	3	2	2	2392.2941	3
<i>s</i>	2	1	<i>s</i>	1	0	1	2449.5104	7
<i>s</i>	2	1	<i>a</i>	2	0	2	2431.7800	2
<i>s</i>	2	2	<i>s</i>	3	3	1	2390.2851	6
<i>s</i>	2	2	<i>s</i>	1	1	1	2460.0338	16
<i>s</i>	2	2	<i>s</i>	2	1	1	2438.6336	12
<i>s</i>	2	2	<i>a</i>	3	3	0	2389.9599	7
<i>s</i>	2	2	<i>a</i>	1	1	0	2458.2602	5
<i>s</i>	2	2	<i>a</i>	2	1	1	2437.9188	64
<i>s</i>	2	2	<i>a</i>	1	1	1	2459.3165	57
<i>s</i>	2	2	<i>s</i>	3	3	0	2389.6066	57
<i>s</i>	3	0	<i>a</i>	4	1	3	2382.6176	-31
<i>s</i>	3	0	<i>s</i>	3	1	2	2420.5401	-32
<i>s</i>	3	0	<i>a</i>	3	1	3	2429.8173	-36
<i>s</i>	3	0	<i>s</i>	4	1	4	2397.7319	-45
<i>s</i>	3	0	<i>s</i>	2	1	2	2454.5262	-12
<i>s</i>	3	1	<i>a</i>	2	0	2	2466.0076	-19
<i>s</i>	3	1	<i>s</i>	3	2	1	2423.9851	-23
<i>s</i>	3	1	<i>a</i>	4	2	2	2384.2075	-22
<i>s</i>	3	1	<i>a</i>	3	2	2	2426.5213	-21
<i>s</i>	3	1	<i>s</i>	4	2	3	2390.8267	-24
<i>s</i>	3	1	<i>s</i>	2	0	2	2456.2029	-4
<i>s</i>	3	1	<i>s</i>	4	0	4	2398.4346	-12
<i>s</i>	3	1	<i>a</i>	3	0	3	2430.8194	-2
<i>s</i>	3	1	<i>s</i>	3	2	2	2416.7070	-4
<i>s</i>	3	1	<i>a</i>	4	2	3	2380.6918	-4
<i>s</i>	3	2	<i>s</i>	2	1	2	2472.2931	-115
<i>s</i>	3	2	<i>a</i>	4	3	1	2380.6409	-121
<i>s</i>	3	2	<i>a</i>	2	1	2	2469.9040	58
<i>s</i>	3	2	<i>s</i>	3	3	1	2416.9151	76
<i>s</i>	3	2	<i>s</i>	2	1	1	2465.2635	80
<i>s</i>	3	2	<i>s</i>	4	3	1	2378.5698	54
<i>s</i>	3	2	<i>a</i>	4	3	2	2379.4885	59
<i>s</i>	3	2	<i>a</i>	3	1	2	2435.9227	55
<i>s</i>	3	2	<i>s</i>	3	1	3	2445.5342	39
<i>s</i>	3	3	<i>a</i>	4	4	0	2376.1647	37
<i>s</i>	3	3	<i>s</i>	4	4	1	2376.3514	26
								*
								*
<i>s</i>	3	3	<i>a</i>	2	2	0	2474.3421	32
<i>s</i>	3	3	<i>s</i>	2	2	0	2474.3864	45
<i>s</i>	3	3	<i>s</i>	4	4	0	2376.2031	44
<i>s</i>	3	3	<i>a</i>	4	4	1	2376.0806	45
<i>s</i>	3	3	<i>a</i>	2	2	1	2474.8584	41
<i>s</i>	3	3	<i>a</i>	3	2	1	2444.8791	49
<i>s</i>	4	0	<i>a</i>	4	1	4	2429.7851	-23
<i>s</i>	4	0	<i>s</i>	4	1	3	2415.0052	-13
<i>s</i>	4	0	<i>a</i>	5	1	4	2369.4185	-23
<i>s</i>	4	0	<i>s</i>	5	1	5	2390.1284	-22
<i>s</i>	4	0	<i>s</i>	3	1	3	2462.2101	-22
<i>s</i>	4	1	<i>a</i>	3	0	3	2478.4942	-27
<i>s</i>	4	1	<i>s</i>	4	0	4	2446.1091	-40
<i>s</i>	4	1	<i>a</i>	5	2	3	2372.6393	-26
<i>s</i>	4	1	<i>a</i>	4	2	3	2428.3667	-28
<i>s</i>	4	1	<i>s</i>	3	2	2	2464.3813	-34
<i>s</i>	4	1	<i>s</i>	4	2	2	2422.0669	-25
<i>s</i>	4	1	<i>s</i>	3	0	3	2462.8516	7
<i>s</i>	4	1	<i>s</i>	4	2	3	2412.7114	-18
<i>s</i>	4	1	<i>s</i>	5	0	5	2390.3644	-13
<i>s</i>	4	1	<i>a</i>	4	0	4	2430.1303	47
<i>s</i>	4	1	<i>a</i>	5	2	4	2368.4952	-10
<i>s</i>	4	2	<i>a</i>	4	3	2	2421.8751	15
<i>s</i>	4	2	<i>s</i>	4	3	1	2420.9565	11
<i>s</i>	4	2	<i>a</i>	5	3	2	2372.0130	15
<i>s</i>	4	2	<i>s</i>	5	3	3	2375.6089	14
<i>s</i>	4	2	<i>a</i>	3	1	2	2478.3106	24
<i>s</i>	4	2	<i>a</i>	4	1	3	2433.8325	50
<i>s</i>	4	2	<i>a</i>	5	3	3	2368.7407	50
<i>s</i>	4	2	<i>s</i>	4	3	2	2415.3022	39
<i>s</i>	4	3	<i>a</i>	4	4	1	2413.9454	10
<i>s</i>	4	3	<i>a</i>	3	2	1	2482.7431	5
<i>s</i>	4	3	<i>a</i>	5	4	1	2366.8164	6
<i>s</i>	4	3	<i>a</i>	5	4	2	2366.3966	22
<i>s</i>	4	3	<i>a</i>	3	2	2	2484.6949	19
<i>s</i>	4	3	<i>s</i>	3	2	1	2482.1591	20
<i>s</i>	4	3	<i>s</i>	5	2	3	2393.2726	47
<i>s</i>	4	3	<i>a</i>	4	2	2	2442.3787	-4
<i>s</i>	4	4	<i>s</i>	3	3	1	2491.1193	-45
<i>s</i>	4	4	<i>a</i>	3	3	0	2490.7942	-44
<i>s</i>	4	4	<i>a</i>	5	5	0	2362.8286	-42
<i>s</i>	4	4	<i>s</i>	5	5	1	2362.9802	-43
<i>s</i>	4	4	<i>s</i>	3	3	0	2490.9687	-65
<i>s</i>	4	4	<i>s</i>	5	5	0	2362.9556	-48
<i>s</i>	4	4	<i>a</i>	3	3	1	2490.9061	-51
<i>s</i>	4	4	<i>a</i>	5	5	1	2362.8157	-51
<i>s</i>	5	0	<i>s</i>	5	1	4	2409.0262	-17
<i>s</i>	5	0	<i>s</i>	6	1	6	2382.2431	-15
<i>s</i>	5	0	<i>a</i>	5	1	5	2429.4019	-15
<i>s</i>	5	1	<i>a</i>	6	2	4	2360.0010	-2
<i>s</i>	5	1	<i>s</i>	6	2	5	2377.8834	-28
<i>s</i>	5	1	<i>s</i>	4	2	3	2473.8738	-11
<i>s</i>	5	1	<i>a</i>	4	0	4	2491.2869	-3
<i>s</i>	5	1	<i>s</i>	5	2	3	2418.1466	24
<i>s</i>	5	1	<i>a</i>	5	2	4	2429.6575	-4
<i>s</i>	5	1	<i>a</i>	6	2	5	2355.8772	-9
<i>s</i>	5	1	<i>s</i>	6	0	6	2382.3158	-6
<i>s</i>	5	1	<i>s</i>	4	0	4	2469.6089	-7
<i>s</i>	5	1	<i>s</i>	5	2	4	2407.9689	-1
<i>s</i>	5	1	<i>a</i>	5	0	5	2429.5057	-8

 $\Delta = \text{observed} - \text{calculated in } 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$

Table A1(continued): Transitions of ν_{3a} of ND₂H

J'	K'_a	K'_c	J	K_a	K_c	$\tilde{\nu}_0^{\text{exp}}/\text{cm}^{-1}$	Δ			
<i>s</i>	5	2	3	<i>a</i>	6	3	3	2361.6854	-28	
<i>s</i>	5	2	3	<i>a</i>	5	3	3	2424.5291	-27	
<i>s</i>	5	2	3	<i>a</i>	4	1	3	2489.6208	-28	
<i>s</i>	5	2	4	<i>s</i>	5	3	3	2412.6747	46	
<i>s</i>	5	2	4	<i>s</i>	4	1	3	2477.7818	37	
<i>s</i>	5	2	4	<i>s</i>	6	1	5	2379.7299	48	
<i>s</i>	5	2	4	<i>a</i>	5	1	4	2432.1967	43	
<i>s</i>	5	2	4	<i>a</i>	4	1	4	2492.5670	81	
<i>s</i>	5	3	2	<i>s</i>	4	2	3	2497.2411	52	
<i>s</i>	5	3	2	<i>s</i>	5	2	3	2441.5107	56	
<i>s</i>	5	3	2	<i>a</i>	5	4	2	2414.6374	57	
<i>s</i>	5	3	2	<i>a</i>	6	4	2	2356.9470	59	
<i>s</i>	5	3	3	<i>s</i>	4	2	2	2488.7844	-19	
<i>s</i>	5	3	3	<i>s</i>	5	2	4	2451.1893	-2	
<i>s</i>	5	3	3	<i>a</i>	6	4	3	2356.3134	-30	
<i>s</i>	5	3	3	<i>s</i>	5	4	2	2412.7686	-32	
<i>s</i>	5	3	3	<i>a</i>	4	2	3	2495.0833	-31	
<i>s</i>	5	3	3	<i>a</i>	5	2	3	2439.3559	-30	
<i>s</i>	5	3	3	<i>s</i>	6	4	2	2355.0822	-34	
<i>s</i>	5	4	1	<i>a</i>	6	5	1	2353.2470	12	
<i>s</i>	5	4	1	<i>s</i>	4	3	2	2500.5039	7	
<i>s</i>	5	4	1	<i>a</i>	4	3	1	2499.2893	18	
<i>s</i>	5	4	2	<i>a</i>	5	3	2	2450.3320	-58	
<i>s</i>	5	4	2	<i>a</i>	4	3	2	2500.1940	-59	
<i>s</i>	5	4	2	<i>a</i>	6	5	2	2353.1442	-57	
<i>s</i>	5	4	2	<i>s</i>	4	3	1	2499.2757	-59	
<i>s</i>	5	4	2	<i>s</i>	6	5	1	2353.2386	-53	
<i>s</i>	5	4	2	<i>s</i>	5	3	3	2453.9275	-62	
<i>s</i>	5	5	0	<i>a</i>	4	4	0	2507.2185	-200	*
<i>s</i>	5	5	0	<i>s</i>	4	4	1	2507.4051	-213	*
<i>s</i>	5	5	0	<i>a</i>	6	6	0	2349.7311	-250	*
<i>s</i>	5	5	0	<i>s</i>	6	6	1	2349.8656	-275	*
<i>s</i>	5	5	1	<i>a</i>	6	6	1	2349.7311	-241	*
<i>s</i>	5	5	1	<i>s</i>	6	6	0	2349.8656	-245	*
<i>s</i>	5	5	1	<i>a</i>	5	4	1	2460.1139	-267	*
<i>s</i>	5	5	1	<i>a</i>	4	4	1	2507.2438	-254	*
<i>s</i>	5	5	1	<i>s</i>	4	4	0	2507.3664	-254	*
<i>s</i>	6	0	6	<i>a</i>	6	1	6	2428.7976	-5	
<i>s</i>	6	0	6	<i>s</i>	5	1	5	2476.3021	-12	
<i>s</i>	6	0	6	<i>s</i>	7	1	7	2374.1678	-9	
<i>s</i>	6	0	6	<i>a</i>	7	1	6	2343.1076	-6	
<i>s</i>	6	0	6	<i>s</i>	6	1	5	2403.1265	3	
<i>s</i>	6	1	5	<i>a</i>	6	2	5	2430.1618	22	
<i>s</i>	6	1	5	<i>s</i>	6	2	4	2412.5880	2	
<i>s</i>	6	1	5	<i>a</i>	7	2	5	2346.7669	22	
<i>s</i>	6	1	5	<i>s</i>	7	2	6	2370.7428	26	
<i>s</i>	6	1	5	<i>a</i>	5	0	5	2503.7899	20	
<i>s</i>	6	1	6	<i>a</i>	7	2	6	2342.9874	24	
<i>s</i>	6	1	6	<i>a</i>	6	0	6	2428.8268	-8	
<i>s</i>	6	1	6	<i>s</i>	7	0	7	2374.1883	-10	
<i>s</i>	6	1	6	<i>s</i>	5	0	5	2476.3640	-1	
<i>s</i>	6	2	4	<i>s</i>	5	3	3	2482.5820	-151	*
<i>s</i>	6	2	4	<i>a</i>	7	3	4	2350.2828	-153	*
<i>s</i>	6	2	4	<i>s</i>	6	3	3	2419.7376	-154	*
<i>s</i>	6	2	4	<i>a</i>	5	1	4	2502.1037	-158	*
<i>s</i>	6	2	4	<i>s</i>	7	3	5	2363.7985	-151	*
<i>s</i>	6	2	4	<i>a</i>	6	3	4	2427.2310	-154	*
<i>s</i>	6	2	5	<i>s</i>	6	3	4	2409.0453	0	
<i>s</i>	6	2	5	<i>a</i>	6	1	5	2431.1476	41	
<i>s</i>	6	2	5	<i>a</i>	5	1	5	2504.3127	38	

J'	K'_a	K'_c	J	K_a	K_c	$\tilde{\nu}_0^{\text{exp}}/\text{cm}^{-1}$	Δ			
<i>s</i>	6	2	5	<i>s</i>	7	1	6	2371.4497	41	
<i>s</i>	6	2	5	<i>a</i>	7	3	5	2345.3240	42	
<i>s</i>	6	3	3	<i>a</i>	7	4	3	2349.3561	-70	
<i>s</i>	6	3	3	<i>a</i>	5	2	3	2501.9531	-70	
<i>s</i>	6	3	3	<i>s</i>	7	4	4	2353.4285	-69	
<i>s</i>	6	3	3	<i>a</i>	6	4	3	2418.9063	-112	*
<i>s</i>	6	3	3	<i>s</i>	6	4	2	2417.6802	-67	
<i>s</i>	6	3	4	<i>a</i>	5	2	4	2505.9905	83	
<i>s</i>	6	3	4	<i>a</i>	7	4	4	2345.6692	146	*
<i>s</i>	6	3	4	<i>a</i>	6	2	4	2436.3399	145	*
<i>s</i>	6	4	2	<i>a</i>	6	5	2	2409.9036	276	*
<i>s</i>	6	4	2	<i>s</i>	5	3	3	2510.6869	272	*
<i>s</i>	6	4	2	<i>a</i>	7	5	2	2343.7004	278	*
<i>s</i>	6	4	2	<i>s</i>	6	5	1	2409.9975	275	*
<i>s</i>	6	4	2	<i>a</i>	5	3	2	2507.0910	272	*
<i>s</i>	6	4	3	<i>a</i>	7	5	3	2343.4041	-220	*
<i>s</i>	6	4	3	<i>a</i>	5	3	3	2509.8157	-205	*
<i>s</i>	6	4	3	<i>a</i>	6	3	3	2446.9711	-214	*
<i>s</i>	6	5	1	<i>a</i>	5	4	1	2515.8494	-13	
<i>s</i>	6	5	1	<i>s</i>	5	4	2	2516.3035	-10	
<i>s</i>	6	5	1	<i>s</i>	7	6	2	2340.1345	-18	
<i>s</i>	6	5	1	<i>a</i>	7	6	1	2339.9882	-6	
<i>s</i>	6	5	1	<i>a</i>	6	6	1	2405.4637	-15	
<i>s</i>	6	5	2	<i>a</i>	7	6	2	2339.9334	-473	*
<i>s</i>	6	5	2	<i>a</i>	5	4	2	2516.1088	-459	*
<i>s</i>	6	5	2	<i>a</i>	6	4	2	2458.4157	-485	*
<i>s</i>	6	6	0	<i>a</i>	7	7	0	2336.7124	14	
<i>s</i>	6	6	0	<i>a</i>	5	5	0	2523.5054	17	
<i>s</i>	6	6	0	<i>s</i>	7	7	1	2336.8378	13	
<i>s</i>	6	6	0	<i>s</i>	5	5	1	2523.6549	-5	
<i>s</i>	6	6	1	<i>a</i>	5	5	1	2523.5054	-42	
<i>s</i>	6	6	1	<i>a</i>	7	7	1	2336.7124	13	
<i>s</i>	6	6	1	<i>s</i>	7	7	0	2336.8378	15	
<i>s</i>	6	6	1	<i>s</i>	5	5	0	2523.6549	55	
<i>s</i>	7	0	7	<i>a</i>	7	1	7	2428.0323	77	
<i>s</i>	7	0	7	<i>s</i>	8	1	8	2365.9436	22	
<i>s</i>	7	0	7	<i>a</i>	8	1	7	2329.9407	-23	
<i>s</i>	7	1	6	<i>a</i>	6	0	6	2515.9215	20	
<i>s</i>	7	1	6	<i>s</i>	8	2	7	2363.1395	41	
<i>s</i>	7	1	6	<i>a</i>	8	2	6	2333.5160	36	
<i>s</i>	7	1	6	<i>a</i>	7	2	6	2430.0806	39	
<i>s</i>	7	1	6	<i>s</i>	6	2	5	2489.8228	81	
<i>s</i>	7	1	7	<i>a</i>	8	2	7	2329.9033	-7	
<i>s</i>	7	1	7	<i>s</i>	8	0	8	2365.9436	-35	
<i>s</i>	7	1	7	<i>a</i>	7	0	7	2428.0323	-3	
<i>s</i>	7	2	6	<i>s</i>	7	3	5	2404.5979	14	
<i>s</i>	7	2	6	<i>s</i>	8	1	7	2363.3828	38	
<i>s</i>	7	2	6	<i>s</i>	6	1	5	2490.4353	4	
<i>s</i>	7	2	6	<i>a</i>	6	1	6	2516.1088	18	
<i>s</i>	7	2	6	<i>a</i>	8	3	6	2332.8828	26	
<i>s</i>	7	2	6	<i>a</i>	7	1	6	2430.4196	27	
<i>s</i>	7	3	4	<i>a</i>	8	4	4	2339.2465	-5	
<i>s</i>	7	3	4	<i>a</i>	6	2	4	2512.9124	5	
<i>s</i>	7	3	4	<i>a</i>	7	4	4	2422.2410	0	
<i>s</i>	7	3	5	<i>s</i>	6	2	4	2499.7357	23	
<i>s</i>	7	3	5	<i>a</i>	6	2	5	2517.3086	35	
<i>s</i>	7	3	5	<i>a</i>	8	4	5	2334.3583	35	
<i>s</i>	7	3	5	<i>a</i>	7	2	5	2433.9138	36	
<i>s</i>	7	3	5	<i>s</i>	8	2	6	2361.3121	36	
<i>s</i>	7	4	3	<i>s</i>	6	3	4	2521.5856	621	*

 $\Delta = \text{observed} - \text{calculated in } 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$

Table A1(continued): Transitions of ν_{3a} of ND₂H

J'	K'_a	K'_c	J	K_a	K_c	$\tilde{\nu}_0^{\text{exp}}/\text{cm}^{-1}$	Δ		J'	K'_a	K'_c	J	K_a	K_c	$\tilde{\nu}_0^{\text{exp}}/\text{cm}^{-1}$	Δ					
<i>s</i>	7	4	3	<i>a</i>	7	5	3	2410.2305	614	*	<i>a</i>	0	0	0	<i>a</i>	1	1	1	2423.2570	-51	
<i>s</i>	7	4	3	<i>s</i>	7	3	4	2444.6353	623	*	<i>a</i>	0	0	0	<i>s</i>	1	1	0	2421.8215	-45	
<i>s</i>	7	4	3	<i>a</i>	8	5	3	2333.2760	620	*	<i>a</i>	1	0	1	<i>a</i>	1	1	0	2430.6852	-31	
<i>s</i>	7	4	4	<i>s</i>	6	3	3	2512.4921	341	*	<i>a</i>	1	0	1	<i>s</i>	1	1	1	2432.4566	-42	
<i>s</i>	7	4	4	<i>s</i>	7	5	3	2408.8902	329	*	<i>a</i>	1	0	1	<i>s</i>	2	1	1	2411.0575	-35	
<i>s</i>	7	4	4	<i>a</i>	8	5	4	2333.3740	342	*	<i>a</i>	1	0	1	<i>a</i>	2	1	2	2415.6995	-41	
<i>s</i>	7	4	4	<i>a</i>	7	3	4	2443.0364	333	*	<i>a</i>	1	1	0	<i>s</i>	2	2	0	2408.0983	-16	
<i>s</i>	7	4	4	<i>a</i>	6	3	4	2519.9853	339	*	<i>a</i>	1	1	0	<i>a</i>	1	0	1	2438.3321	-19	
<i>s</i>	7	6	2	<i>a</i>	8	7	2	2326.7684	16		<i>a</i>	1	1	0	<i>s</i>	0	0	0	2447.6003	-15	
<i>s</i>	7	6	2	<i>a</i>	6	5	2	2532.1002	13		<i>a</i>	1	1	0	<i>a</i>	2	2	1	2408.5699	-25	
<i>s</i>	7	7	0	<i>a</i>	6	6	0	2539.4916	1290	*	<i>a</i>	1	1	1	<i>a</i>	0	0	0	2445.8322	13	
<i>s</i>	7	7	0	<i>a</i>	8	8	0	2323.5834	1300	*	<i>a</i>	1	1	1	<i>s</i>	1	0	1	2436.9064	18	
<i>s</i>	7	7	1	<i>a</i>	8	8	1	2323.5834	1300	*	<i>a</i>	1	1	1	<i>s</i>	2	2	1	2407.1340	13	
<i>s</i>	7	7	1	<i>a</i>	6	6	1	2539.4916	1280	*	<i>a</i>	2	0	2	<i>s</i>	3	1	2	2399.3049	-24	
<i>s</i>	8	0	8	<i>s</i>	9	1	9	2357.5747	0		<i>a</i>	2	0	2	<i>s</i>	2	1	2	2433.2964	49	
<i>s</i>	8	0	8	<i>s</i>	7	1	7	2489.5378	1		<i>a</i>	2	0	2	<i>a</i>	3	1	3	2408.5821	-27	
<i>s</i>	8	0	8	<i>s</i>	8	1	7	2391.4424	31		<i>a</i>	2	0	2	<i>a</i>	2	1	1	2428.3085	-42	
<i>s</i>	8	0	8	<i>a</i>	8	1	8	2427.0982	-2		<i>a</i>	2	1	1	<i>s</i>	3	2	1	2398.4494	-15	
<i>s</i>	8	1	7	<i>s</i>	8	2	6	2400.3271	-75		<i>a</i>	2	1	1	<i>a</i>	2	0	2	2440.4728	-2	
<i>s</i>	8	1	7	<i>a</i>	9	2	7	2320.3785	-83		<i>a</i>	2	1	1	<i>a</i>	3	2	2	2400.9884	14	
<i>s</i>	8	1	7	<i>a</i>	8	2	7	2429.6438	-81		<i>a</i>	2	1	1	<i>s</i>	1	0	1	2458.2020	-9	
<i>s</i>	8	1	7	<i>s</i>	9	2	8	2355.2413	-75		<i>a</i>	2	1	1	<i>a</i>	2	2	0	2427.6374	-3	
<i>s</i>	8	1	7	<i>s</i>	7	2	6	2496.9040	-79		<i>a</i>	2	1	1	<i>s</i>	2	2	1	2428.4332	21	
<i>s</i>	8	1	7	<i>a</i>	7	0	7	2527.7770	-34		<i>a</i>	2	1	2	<i>a</i>	3	0	3	2410.1294	-109	*
<i>s</i>	8	1	8	<i>s</i>	9	0	9	2357.5747	-15		<i>a</i>	2	1	2	<i>s</i>	3	2	2	2396.0167	-114	*
<i>s</i>	8	1	8	<i>a</i>	8	0	8	2427.0982	-24		<i>a</i>	2	1	2	<i>a</i>	2	2	1	2423.1404	-108	*
<i>s</i>	8	1	8	<i>s</i>	8	2	7	2391.3935	-30		<i>a</i>	2	1	2	<i>a</i>	3	2	1	2393.1601	-110	*
<i>s</i>	8	1	8	<i>s</i>	7	0	7	2489.5378	-44		<i>a</i>	2	1	2	<i>s</i>	2	0	2	2435.5114	-127	*
<i>s</i>	8	2	6	<i>a</i>	8	3	6	2430.3837	35		<i>a</i>	2	2	0	<i>s</i>	1	1	0	2462.0339	35	
<i>s</i>	8	2	6	<i>a</i>	7	1	6	2527.9200	31		<i>a</i>	2	2	0	<i>a</i>	1	1	1	2463.4709	44	
<i>s</i>	8	2	6	<i>a</i>	9	3	6	2324.4929	38		<i>a</i>	2	2	0	<i>a</i>	3	3	1	2393.6966	40	
<i>s</i>	8	2	7	<i>a</i>	8	1	7	2429.7563	-49		<i>a</i>	2	2	0	<i>s</i>	3	3	0	2393.7595	29	
<i>s</i>	8	2	7	<i>a</i>	7	1	7	2527.8377	-50		<i>a</i>	2	2	1	<i>s</i>	1	1	1	2463.0791	69	
<i>s</i>	8	3	5	<i>a</i>	9	4	5	2328.0975	890	*	<i>a</i>	2	2	1	<i>s</i>	3	3	1	2393.3310	66	
<i>s</i>	8	3	5	<i>a</i>	8	4	5	2425.7596	884	*	<i>a</i>	2	2	1	<i>a</i>	2	1	2	2446.3218	68	
<i>s</i>	8	3	5	<i>a</i>	7	2	5	2525.3157	890	*	<i>a</i>	2	2	1	<i>s</i>	2	1	1	2441.6792	68	
<i>s</i>	8	3	6	<i>a</i>	8	2	6	2432.3462	-5		<i>a</i>	2	2	1	<i>a</i>	3	3	0	2393.0055	63	
<i>s</i>	8	3	6	<i>a</i>	9	4	6	2322.4780	-6		<i>a</i>	2	2	1	<i>a</i>	1	1	0	2461.3066	69	
<i>s</i>	8	3	6	<i>a</i>	7	2	6	2528.9109	-2		<i>a</i>	3	0	3	<i>a</i>	4	1	4	2401.3056	-17	
<i>s</i>	8	4	4	<i>s</i>	8	5	3	2414.1531	2		<i>a</i>	3	0	3	<i>s</i>	3	1	3	2433.7310	-12	
<i>s</i>	8	4	4	<i>s</i>	9	5	5	2330.9020	4		<i>a</i>	3	0	3	<i>a</i>	3	1	2	2424.1172	-19	
<i>s</i>	8	4	4	<i>a</i>	7	3	4	2525.2510	3		<i>a</i>	3	0	3	<i>s</i>	4	1	3	2386.5251	-12	
<i>s</i>	8	4	4	<i>a</i>	9	5	4	2326.5698	4		<i>a</i>	3	1	2	<i>s</i>	2	0	2	2469.6833	0	
<i>s</i>	8	4	5	<i>s</i>	8	5	4	2407.6196	135	*	<i>a</i>	3	1	2	<i>a</i>	3	2	1	2427.3316	12	
<i>s</i>	8	4	5	<i>a</i>	9	5	5	2322.7069	151	*	<i>a</i>	3	1	2	<i>s</i>	4	2	2	2387.8724	3	
<i>s</i>	8	4	5	<i>a</i>	7	3	5	2530.5393	148	*	<i>a</i>	3	1	2	<i>a</i>	3	0	3	2444.2997	1	
<i>s</i>	9	0	9	<i>a</i>	9	1	9	2426.0228	5		<i>a</i>	3	1	2	<i>a</i>	4	2	3	2394.1726	4	
<i>s</i>	9	0	9	<i>s</i>	10	1	10	2349.0722	12		<i>a</i>	3	1	2	<i>s</i>	3	2	2	2430.1876	3	
<i>s</i>	9	0	9	<i>s</i>	8	1	8	2495.9092	7		<i>a</i>	3	1	3	<i>a</i>	4	0	4	2401.9284	-66	
<i>s</i>	9	1	8	<i>s</i>	8	2	7	2503.6965	-417	*	<i>a</i>	3	1	3	<i>a</i>	4	2	2	2377.8983	-49	
<i>s</i>	9	1	8	<i>s</i>	10	2	9	2347.1404	-397	*	<i>a</i>	3	1	3	<i>s</i>	4	2	3	2384.5175	-51	
<i>s</i>	9	1	8	<i>a</i>	9	2	8	2428.9762	-396	*	<i>a</i>	3	1	3	<i>s</i>	3	0	3	2434.6544	-59	
<i>s</i>	9	1	8	<i>a</i>	8	0	8	2539.4024	-399	*	<i>a</i>	3	2	1	<i>s</i>	4	3	1	2384.6422	12	
<i>s</i>	9	1	9	<i>a</i>	9	0	9	2426.0228	0		<i>a</i>	3	2	1	<i>s</i>	2	1	1	2471.3332	10	
<i>s</i>	9	1	9	<i>s</i>	8	0	8	2495.9092	-4		<i>a</i>	3	2	1	<i>s</i>	3	3	1	2422.9844	2	
<i>s</i>	9	1	9	<i>s</i>	10	0	10	2349.0722	8		<i>a</i>	3	2	1	<i>a</i>	3	1	2	2441.9949	11	
<i>s</i>	9	3	7	<i>a</i>	8	2	7	2540.6139	-135	*	<i>a</i>	3	2	1	<i>a</i>	3	3	0	2422.6605	15	
<i>s</i>	9	3	7	<i>a</i>	9	2	7	2431.3492	-131	*	<i>a</i>	3	2	1	<i>a</i>	4	3	2	2385.5603	10	
<i>s</i>	10	0	10	<i>s</i>	9	1	9	2502.1175	26		<i>a</i>	3	2	2	<i>s</i>	3	1	2	2439.9116	120	*
<i>s</i>	10	0	10	<i>a</i>	10	1	10	2424.7968	32		<i>a</i>	3	2	2	<i>a</i>	2	1	1	2468.9174	125	*

 $\Delta = \text{observed} - \text{calculated in } 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$

Table A1(continued): Transitions of ν_{3a} of ND₂H

J'	K'_a	K'_c	J	K_a	K_c	$\tilde{\nu}_0^{\text{exp}}/\text{cm}^{-1}$	Δ		J'	K'_a	K'_c	J	K_a	K_c	$\tilde{\nu}_0^{\text{exp}}/\text{cm}^{-1}$	Δ					
<i>a</i>	3	2	2	<i>s</i>	4	3	2	2383.4601	124	*	<i>a</i>	5	1	4	<i>a</i>	4	2	3	2476.9499	22	
<i>a</i>	3	2	2	<i>s</i>	2	1	2	2473.8960	124	*	<i>a</i>	5	1	5	<i>a</i>	4	0	4	2473.1494	1	
<i>a</i>	3	3	0	<i>a</i>	4	4	1	2379.5369	63		<i>a</i>	5	1	5	<i>s</i>	5	0	5	2433.3885	-8	
<i>a</i>	3	3	0	<i>a</i>	3	2	1	2448.3346	58		<i>a</i>	5	1	5	<i>s</i>	6	2	5	2359.7504	22	
<i>a</i>	3	3	0	<i>s</i>	2	2	0	2477.8414	50		<i>a</i>	5	1	5	<i>a</i>	6	0	6	2385.8521	-7	
<i>a</i>	3	3	0	<i>s</i>	4	4	0	2379.6599	67		<i>a</i>	5	2	3	<i>s</i>	6	3	3	2364.8532	11	
<i>a</i>	3	3	1	<i>s</i>	4	4	1	2379.5669	61		<i>a</i>	5	2	3	<i>a</i>	6	3	4	2372.3446	-8	
<i>a</i>	3	3	1	<i>a</i>	4	4	0	2379.3804	74		<i>a</i>	5	2	3	<i>s</i>	5	3	3	2427.6973	11	
<i>a</i>	3	3	1	<i>s</i>	2	2	1	2478.3531	89		<i>a</i>	5	2	3	<i>s</i>	4	1	3	2492.8066	25	
<i>a</i>	4	0	4	<i>s</i>	4	1	4	2433.6764	-1		<i>a</i>	5	2	3	<i>a</i>	5	3	2	2424.1014	12	
<i>a</i>	4	0	4	<i>s</i>	5	1	4	2373.3003	-11		<i>a</i>	5	2	3	<i>a</i>	5	1	4	2447.2191	6	
<i>a</i>	4	0	4	<i>a</i>	5	1	5	2393.6760	-9		<i>a</i>	5	2	4	<i>s</i>	5	1	4	2435.4085	-18	
<i>a</i>	4	1	3	<i>a</i>	5	2	4	2387.7047	20		<i>a</i>	5	2	4	<i>a</i>	4	1	3	2480.6705	6	
<i>a</i>	4	1	3	<i>s</i>	4	2	3	2431.9188	-7		<i>a</i>	5	2	4	<i>a</i>	6	1	5	2382.6176	-28	
<i>a</i>	4	1	3	<i>s</i>	5	2	3	2376.1910	22		<i>a</i>	5	2	4	<i>s</i>	4	1	4	2495.7836	-19	
<i>a</i>	4	1	3	<i>s</i>	3	0	3	2482.0598	25		<i>a</i>	5	2	4	<i>s</i>	6	3	4	2360.5199	-24	
<i>a</i>	4	1	4	<i>s</i>	4	0	4	2433.9834	-34		<i>a</i>	5	3	2	<i>a</i>	5	2	3	2445.5058	-12	
<i>a</i>	4	1	4	<i>a</i>	5	0	5	2393.8822	-15		<i>a</i>	5	3	2	<i>s</i>	6	4	2	2361.2345	6	
<i>a</i>	4	1	4	<i>s</i>	5	2	4	2372.3450	-12		<i>a</i>	5	3	2	<i>a</i>	5	4	1	2418.4658	-3	
<i>a</i>	4	1	4	<i>a</i>	4	2	3	2416.2411	-21		<i>a</i>	5	3	2	<i>a</i>	6	4	3	2362.4634	-11	
<i>a</i>	4	1	4	<i>a</i>	3	0	3	2466.3683	-23		<i>a</i>	5	3	2	<i>s</i>	4	2	2	2494.9334	-11	
<i>a</i>	4	2	2	<i>s</i>	4	3	2	2425.0782	5		<i>a</i>	5	3	2	<i>s</i>	5	4	2	2418.9183	-16	
<i>a</i>	4	2	2	<i>s</i>	3	1	2	2481.5297	1		<i>a</i>	5	3	3	<i>s</i>	6	4	3	2360.4942	-138	*
<i>a</i>	4	2	2	<i>a</i>	4	3	1	2423.8619	0		<i>a</i>	5	3	3	<i>a</i>	4	2	2	2492.6717	-143	*
<i>a</i>	4	2	2	<i>s</i>	5	3	2	2375.2140	-18		<i>a</i>	5	3	3	<i>a</i>	5	2	4	2455.0735	-149	*
<i>a</i>	4	2	2	<i>a</i>	5	3	3	2378.5142	-7		<i>a</i>	5	3	3	<i>s</i>	4	2	3	2499.2893	-161	*
<i>a</i>	4	2	3	<i>s</i>	3	1	3	2484.2358	-57		<i>a</i>	5	4	1	<i>a</i>	5	3	2	2453.4378	-235	*
<i>a</i>	4	2	3	<i>a</i>	5	3	2	2368.3260	-58		<i>a</i>	5	4	1	<i>s</i>	4	3	1	2502.3808	-244	*
<i>a</i>	4	2	3	<i>a</i>	4	3	2	2418.1882	-57		<i>a</i>	5	4	1	<i>a</i>	5	5	0	2412.4344	-229	*
<i>a</i>	4	2	3	<i>s</i>	4	1	3	2437.0299	-58		<i>a</i>	5	4	1	<i>s</i>	6	5	1	2356.3439	-236	*
<i>a</i>	4	2	3	<i>s</i>	5	3	3	2371.9229	-49		<i>a</i>	5	4	1	<i>s</i>	5	5	1	2412.5875	-214	*
<i>a</i>	4	3	1	<i>a</i>	3	2	2	2488.7844	-44		<i>a</i>	5	4	2	<i>s</i>	4	3	2	2503.3007	31	
<i>a</i>	4	3	1	<i>s</i>	3	2	1	2486.2517	-11		<i>a</i>	5	4	2	<i>s</i>	6	5	2	2356.2503	-16	
<i>a</i>	4	3	1	<i>s</i>	5	4	1	2370.2935	-19		<i>a</i>	5	5	0	<i>s</i>	6	6	0	2352.4833	-151	*
<i>a</i>	4	3	1	<i>a</i>	4	2	2	2446.4719	-30		<i>a</i>	5	5	0	<i>s</i>	4	4	0	2509.9840	-161	*
<i>a</i>	4	3	2	<i>s</i>	4	2	2	2445.8455	-16		<i>a</i>	5	5	0	<i>a</i>	4	4	1	2509.8617	-158	*
<i>a</i>	4	3	2	<i>a</i>	4	2	3	2452.1454	-18		<i>a</i>	5	5	0	<i>a</i>	6	6	1	2352.3485	-149	*
<i>a</i>	4	3	2	<i>s</i>	3	2	2	2488.1603	-20		<i>a</i>	5	5	1	<i>s</i>	5	4	1	2462.8544	-217	*
<i>a</i>	4	3	2	<i>a</i>	5	2	3	2396.4169	-27		<i>a</i>	5	5	1	<i>s</i>	6	6	1	2352.4734	-235	*
<i>a</i>	4	3	2	<i>a</i>	5	4	1	2369.3781	-5		<i>a</i>	5	5	1	<i>s</i>	4	4	1	2510.0064	-238	*
<i>a</i>	4	3	2	<i>s</i>	5	4	2	2369.8309	-16		<i>a</i>	6	0	6	<i>a</i>	7	1	7	2377.7375	5	
<i>a</i>	4	4	0	<i>a</i>	5	5	1	2365.8330	-52		<i>a</i>	6	0	6	<i>s</i>	6	1	6	2432.7170	0	
<i>a</i>	4	4	0	<i>s</i>	5	5	0	2365.9731	-48		<i>a</i>	6	0	6	<i>a</i>	5	1	5	2479.8756	-3	
<i>a</i>	4	4	0	<i>s</i>	3	3	0	2493.9878	-49		<i>a</i>	6	0	6	<i>s</i>	7	1	6	2347.0137	10	
<i>a</i>	4	4	1	<i>a</i>	4	3	2	2456.6731	-47		<i>a</i>	6	1	5	<i>s</i>	7	2	5	2349.9995	25	
<i>a</i>	4	4	1	<i>a</i>	3	3	0	2493.7728	-47		<i>a</i>	6	1	5	<i>s</i>	5	0	5	2507.0451	25	
<i>a</i>	4	4	1	<i>s</i>	3	3	1	2494.0976	-51		<i>a</i>	6	1	5	<i>s</i>	6	2	5	2433.4036	22	
<i>a</i>	4	4	1	<i>s</i>	5	5	1	2365.9574	-60		<i>a</i>	6	1	6	<i>a</i>	7	0	7	2377.7547	4	
<i>a</i>	4	4	1	<i>a</i>	5	5	0	2365.8060	-57		<i>a</i>	6	1	6	<i>s</i>	7	2	6	2346.8867	11	
<i>a</i>	4	4	1	<i>s</i>	4	3	1	2455.7545	-50		<i>a</i>	6	1	6	<i>s</i>	6	0	6	2432.7432	0	
<i>a</i>	5	0	5	<i>a</i>	6	1	6	2385.7912	0		<i>a</i>	6	2	4	<i>a</i>	6	3	3	2422.4608	19	
<i>a</i>	5	0	5	<i>a</i>	5	1	4	2412.5878	11		<i>a</i>	6	2	4	<i>a</i>	5	3	3	2485.3029	4	
<i>a</i>	5	0	5	<i>s</i>	6	1	5	2360.1194	1		<i>a</i>	6	2	4	<i>s</i>	7	3	4	2353.2987	24	
<i>a</i>	5	0	5	<i>a</i>	4	1	4	2472.9549	17		<i>a</i>	6	2	4	<i>s</i>	5	1	4	2505.1369	20	
<i>a</i>	5	1	4	<i>a</i>	5	2	3	2421.2236	35		<i>a</i>	6	2	4	<i>s</i>	6	3	4	2430.2493	25	
<i>a</i>	5	1	4	<i>a</i>	5	0	5	2454.5919	37		<i>a</i>	6	2	5	<i>s</i>	6	1	5	2434.3033	-3	
<i>a</i>	5	1	4	<i>s</i>	6	2	4	2363.3900	19		<i>a</i>	6	2	5	<i>a</i>	5	1	4	2486.7697	-14	
<i>a</i>	5	1	4	<i>s</i>	5	2	4	2433.0530	22		<i>a</i>	6	2	5	<i>a</i>	6	3	4	2411.8977	-4	
<i>a</i>	5	1	4	<i>s</i>	4	0	4	2494.6940	27		<i>a</i>	6	2	5	<i>s</i>	7	3	5	2348.4656	3	
<i>a</i>	5	1	4	<i>a</i>	6	2	5	2380.9626	27		<i>a</i>	6	2	5	<i>s</i>	5	1	5	2507.4803	-4	

 $\Delta = \text{observed} - \text{calculated in } 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$

Table A1(continued): Transitions of ν_{3a} of ND₂H

J'	K'_a	K'_c	J	K_a	K_c	$\tilde{\nu}_0^{\text{exp}}/\text{cm}^{-1}$	Δ		
<i>a</i>	6	2	5	<i>a</i>	7	1	6	2374.2856	0
<i>a</i>	6	3	3	<i>s</i>	7	4	3	2351.9780	-50
<i>a</i>	6	3	3	<i>a</i>	6	4	2	2420.0316	-74
<i>a</i>	6	3	3	<i>s</i>	6	4	3	2421.5313	-50
<i>a</i>	6	3	3	<i>s</i>	5	2	3	2504.5978	-51
<i>a</i>	6	3	3	<i>a</i>	6	2	4	2446.4551	-50
<i>a</i>	6	3	4	<i>a</i>	6	4	3	2413.6133	46
<i>a</i>	6	3	4	<i>s</i>	5	2	4	2508.4863	45
<i>a</i>	6	3	4	<i>s</i>	7	4	4	2348.1314	49
<i>a</i>	6	3	4	<i>s</i>	6	2	4	2438.8237	46
<i>a</i>	6	3	4	<i>a</i>	7	2	5	2372.9958	-1
<i>a</i>	6	4	2	<i>a</i>	5	3	3	2513.5969	34
<i>a</i>	6	4	2	<i>s</i>	7	5	2	2346.8714	33
<i>a</i>	6	4	2	<i>a</i>	7	5	3	2347.1838	3
<i>a</i>	6	4	2	<i>s</i>	5	3	2	2510.2972	28
<i>a</i>	6	4	3	<i>s</i>	6	3	3	2450.0863	-587 *
<i>a</i>	6	4	3	<i>a</i>	6	3	4	2457.5806	-578 *
<i>a</i>	6	4	3	<i>a</i>	5	3	2	2509.3352	-579 *
<i>a</i>	6	4	3	<i>s</i>	5	3	3	2512.9314	-577 *
<i>a</i>	6	4	3	<i>s</i>	7	5	3	2346.4867	-576 *
<i>a</i>	6	5	1	<i>s</i>	5	4	1	2518.5383	-364 *
<i>a</i>	6	5	1	<i>s</i>	7	6	1	2342.6826	-357 *
<i>a</i>	6	5	2	<i>s</i>	5	4	2	2518.8119	-605 *
<i>a</i>	6	5	2	<i>s</i>	6	4	2	2461.1261	-602 *
<i>a</i>	6	5	2	<i>a</i>	7	6	1	2342.4972	-594 *
<i>a</i>	6	5	2	<i>s</i>	7	6	2	2342.6445	-597 *
<i>a</i>	6	6	0	<i>a</i>	7	7	1	2338.8944	9
<i>a</i>	6	6	0	<i>s</i>	5	5	0	2525.8365	46
<i>a</i>	6	6	0	<i>s</i>	7	7	0	2339.0201	13
<i>a</i>	6	6	0	<i>a</i>	5	5	1	2525.6870	-51
<i>a</i>	6	6	1	<i>s</i>	7	7	1	2339.0201	13
<i>a</i>	6	6	1	<i>s</i>	6	5	1	2469.5960	-1
<i>a</i>	6	6	1	<i>a</i>	7	7	0	2338.8944	12
<i>a</i>	6	6	1	<i>s</i>	5	5	1	2525.8365	-11
<i>a</i>	6	6	1	<i>a</i>	5	5	0	2525.6870	10
<i>a</i>	7	0	7	<i>s</i>	8	1	7	2333.8913	12
<i>a</i>	7	0	7	<i>s</i>	7	1	7	2431.9904	18
<i>a</i>	7	0	7	<i>a</i>	8	1	8	2369.5520	27
<i>a</i>	7	0	7	<i>a</i>	6	1	6	2486.6192	11
<i>a</i>	7	1	6	<i>a</i>	6	2	5	2492.6193	5
<i>a</i>	7	1	6	<i>s</i>	6	0	6	2519.0578	8
<i>a</i>	7	1	6	<i>a</i>	8	2	7	2365.9436	41
<i>a</i>	7	1	6	<i>s</i>	8	2	6	2336.6240	19
<i>a</i>	7	1	6	<i>s</i>	7	2	6	2433.2008	14
<i>a</i>	7	1	6	<i>a</i>	7	2	5	2409.2250	11
<i>a</i>	7	1	7	<i>s</i>	7	0	7	2431.9904	-52
<i>a</i>	7	1	7	<i>a</i>	8	0	8	2369.5520	-19
<i>a</i>	7	1	7	<i>a</i>	6	0	6	2486.6357	17
<i>a</i>	7	2	5	<i>s</i>	7	3	5	2432.0824	35
<i>a</i>	7	2	5	<i>a</i>	7	3	4	2418.5649	15
J'	K'_a	K'_c	J	K_a	K_c	$\tilde{\nu}_0^{\text{exp}}/\text{cm}^{-1}$	Δ		
<i>a</i>	7	2	5	<i>s</i>	6	1	5	2517.9207	33
<i>a</i>	7	2	5	<i>s</i>	8	3	5	2340.5276	36
<i>a</i>	7	2	6	<i>s</i>	7	1	6	2433.5063	0
<i>a</i>	7	2	6	<i>s</i>	6	1	6	2519.2107	0
<i>a</i>	7	2	6	<i>s</i>	8	3	6	2335.9535	-5
<i>a</i>	7	2	6	<i>a</i>	7	1	7	2464.2295	-10
<i>a</i>	7	3	4	<i>s</i>	8	4	4	2341.8343	-22
<i>a</i>	7	3	4	<i>a</i>	7	4	3	2420.7511	-60
<i>a</i>	7	3	4	<i>s</i>	7	4	4	2424.8273	-22
<i>a</i>	7	3	4	<i>s</i>	6	2	4	2515.5196	-25
<i>a</i>	7	3	5	<i>s</i>	7	2	5	2436.3719	23
<i>a</i>	7	3	5	<i>s</i>	8	4	5	2336.7972	25
<i>a</i>	7	3	5	<i>s</i>	6	2	5	2519.7764	24
<i>a</i>	7	4	3	<i>s</i>	7	5	3	2414.6763	-171 *
<i>a</i>	7	4	3	<i>s</i>	8	5	3	2337.7246	-167 *
<i>a</i>	7	4	3	<i>s</i>	6	3	3	2518.2772	-168 *
<i>a</i>	7	4	3	<i>a</i>	7	5	2	2414.1339	-172 *
<i>a</i>	7	4	3	<i>a</i>	7	3	4	2448.8225	-167 *
<i>a</i>	8	0	8	<i>s</i>	9	1	8	2320.6944	13
<i>a</i>	8	0	8	<i>a</i>	7	1	7	2493.2112	27
<i>a</i>	8	0	8	<i>s</i>	8	1	8	2431.1282	29
<i>a</i>	8	1	7	<i>a</i>	7	2	6	2499.6184	-60
<i>a</i>	8	1	7	<i>s</i>	7	0	7	2530.8254	-34
<i>a</i>	8	1	7	<i>s</i>	8	2	7	2432.6795	-36
<i>a</i>	8	1	7	<i>s</i>	9	2	7	2323.3988	-32
<i>a</i>	8	1	8	<i>s</i>	9	2	8	2320.6825	15
<i>a</i>	8	1	8	<i>s</i>	8	0	8	2431.1282	10
<i>a</i>	8	1	8	<i>a</i>	7	0	7	2493.2112	-15
<i>a</i>	8	2	6	<i>s</i>	7	1	6	2530.4569	46
<i>a</i>	8	2	6	<i>s</i>	9	3	6	2327.0039	39
<i>a</i>	8	2	6	<i>s</i>	8	3	6	2432.9046	45
<i>a</i>	8	2	7	<i>s</i>	9	3	7	2323.1425	-51
<i>a</i>	8	2	7	<i>a</i>	9	1	8	2358.0214	-53
<i>a</i>	8	2	7	<i>s</i>	8	1	7	2432.7758	-43
<i>a</i>	8	2	7	<i>s</i>	7	1	7	2530.8744	-41
<i>a</i>	9	0	9	<i>s</i>	9	1	9	2430.1303	11
<i>a</i>	9	0	9	<i>a</i>	10	1	10	2352.8092	12
<i>a</i>	9	0	9	<i>a</i>	8	1	8	2499.6511	-18
<i>a</i>	9	1	8	<i>s</i>	9	2	8	2431.9191	-549 *
<i>a</i>	9	1	8	<i>a</i>	8	2	7	2506.3191	-580 *
<i>a</i>	9	1	8	<i>s</i>	8	0	8	2542.3636	-566 *
<i>a</i>	9	1	8	<i>a</i>	10	2	9	2349.7604	-574 *
<i>a</i>	9	1	9	<i>s</i>	9	0	9	2430.1303	6
<i>a</i>	9	1	9	<i>a</i>	8	0	8	2499.6511	-29
<i>a</i>	9	1	9	<i>a</i>	10	0	10	2352.8092	9
<i>a</i>	10	0	10	<i>a</i>	9	1	9	2505.9491	0
<i>a</i>	10	0	10	<i>s</i>	10	1	10	2428.9985	6
<i>a</i>	10	1	10	<i>s</i>	10	0	10	2428.9985	5
<i>a</i>	10	1	10	<i>a</i>	9	0	9	2505.9491	-2
<i>a</i>	5	5	1	<i>s</i>	4	4	1	2510.0064	-238 *

 $\Delta = \text{observed} - \text{calculated in } 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$