

Localisation des Atomes d'Hydrogène dans l'Acide Sébacique $\text{COOH}[\text{CH}_2]_8\text{COOH}$

PAR JACQUES HOUSTY ET MICHEL HOSPITAL

Laboratoire de Cristallographie, Faculté des Sciences de Bordeaux, Talence (Gde), France

(Reçu le 17 mai 1965)

The crystal structure of sebacic acid has been recomputed by three-dimensional X-ray crystallographic methods, to determine the positions of the hydrogen atoms. The effect of the hydrogen atoms on the parameters of carbon atoms and on the bond C-C is discussed. Their presence is also evident on Fourier difference synthesis.

Introduction

La structure cristalline de l'acide sébacique a été étudiée par Morrison & Robertson (1949). Ces auteurs montrent l'importance de la contribution des atomes d'hydrogène dans le calcul des facteurs de structure pour les réflexions caractérisées par un angle de diffraction petit.

Ils introduisent les atomes d'hydrogène dans le calcul, mais en leur attribuant une position fixe telle que la distance C-H soit égale à 1,09 Å et que la valence tétraédrique du carbone soit respectée.

Nous avons repris ce travail de façon à préciser la position des atomes d'hydrogène par affinement tridimensionnel comme nous l'avons déjà fait pour l'acide adipique et subérique (Housty & Hospital, 1965*a, b*).

Données expérimentales

Cristallisation

Nous avons obtenu de bons cristaux en appliquant la méthode de Bridgman à l'acide sébacique fondu. Cette technique consiste à faire descendre lentement un tube contenant le produit fondu dans l'axe d'un four vertical présentant un fort gradient de température.

Dans notre cas, l'acide sébacique fondu étant enfermé dans un tube de verre très mince de 0,3 à 0,4 mm de diamètre intérieur, nous avons réalisé un four adapté aux faibles dimensions de l'échantillon.

On peut aussi faire cristalliser l'acide sébacique par évaporation lente d'une solution dans de l'alcool éthylique ou du dioxane.

Paramètres de la maille et groupe spatial

Les clichés de diffraction ont été réalisés avec la radiation Cu $K\alpha$. Nous avons déterminé les paramètres de la maille monoclinique à partir de deux cristaux tournant autour des rangées [100] et [010] dans une chambre de Bragg.

$$\begin{aligned} a &= 15,04 \pm 0,03 \text{ \AA} \\ b &= 5,00 \pm 0,01 & \beta &= 133^\circ 10' \\ c &= 10,07 \pm 0,02 \end{aligned}$$

Groupe spatial $P2_1/c$ avec deux molécules centrosymétriques par maille.

Densité observée, 1,207 (Parisot, 1949).

Densité calculée, 1,207.

Mesure des intensités

Les clichés servant aux mesures photométriques ont été réalisés avec un rétigraphe de De Jong, le cristal tournant autour de sa direction d'allongement [001]. Les intensités des taches de diffraction ont été déterminées par comparaison visuelle avec une échelle d'intensités. Après correction par le facteur de Lorentz-polarisation, on a obtenu les valeurs de 450 facteurs de structure observés pour l'espace réciproque.

Affinement de la structure

Nous avons adopté, pour commencer ce travail, les positions des atomes de carbone et d'oxygène publiées par Morrison & Robertson :

	x/a	y/b	z/c
C(1)	0,0366	0,0540	0,0221
C(2)	0,1382	-0,1260	0,0387
C(3)	0,2153	-0,0188	0,0036
C(4)	0,3150	-0,2000	0,0650
C(5)	0,3958	-0,1140	0,0353
O(1)	0,3723	0,0960	-0,0501
O(2)	0,4866	-0,2640	0,1040

Affinement tridimensionnel des positions des atomes de carbone et d'oxygène

Les positions données par Morrison & Robertson nous ont permis de calculer une hypothèse de départ correspondant à un facteur de reliabilité $R=0,25$.

La première phase de l'affinement a porté sur les positions atomiques puis nous avons déterminé un coefficient d'agitation thermique indépendant pour chaque atome : isotrope pour les carbones et anisotrope pour les oxygènes. A ce stade de l'affinement, les positions atomiques et les coefficients d'agitation thermique sont pratiquement fixés ($R=0,15$).

Les coordonnées atomiques sont les suivantes :

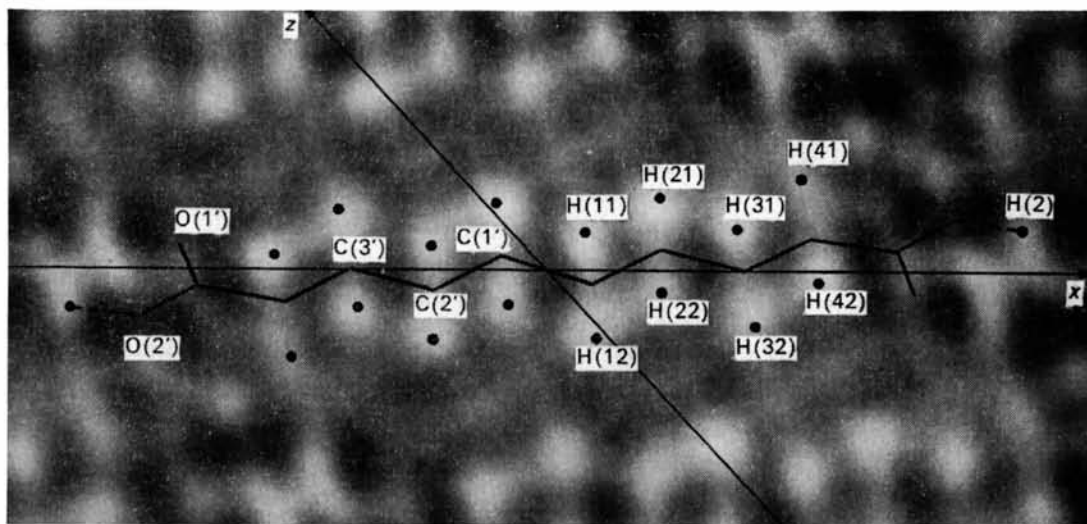


Fig. 1. Fonction différence: T.F. $\{F_o - F_c \text{ (carbone + oxygène)}\}$ faisant apparaître les atomes d'hydrogène.

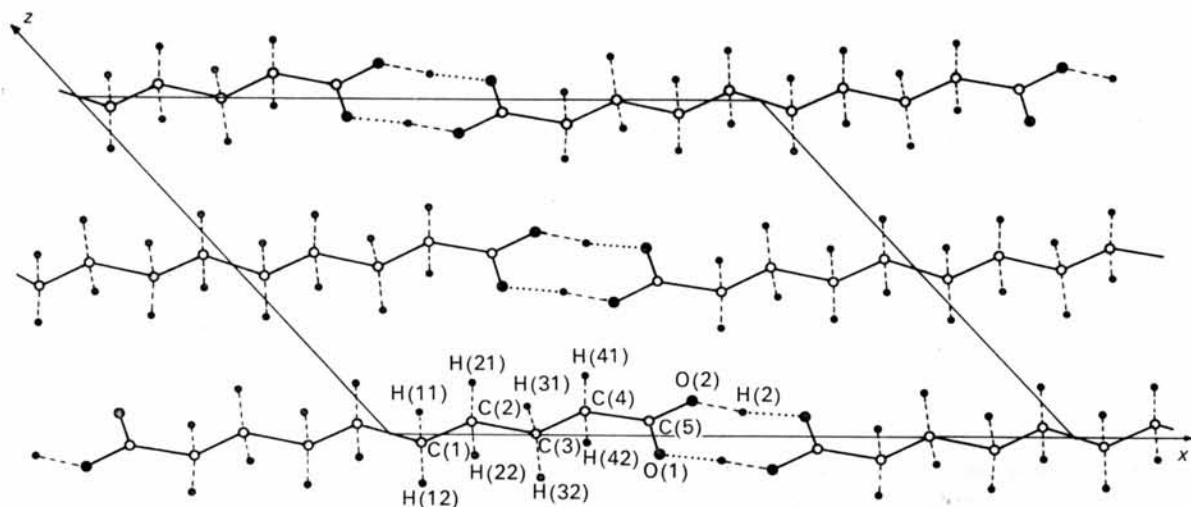


Fig. 2. Projection de la structure parallèlement à l'axe Oy .

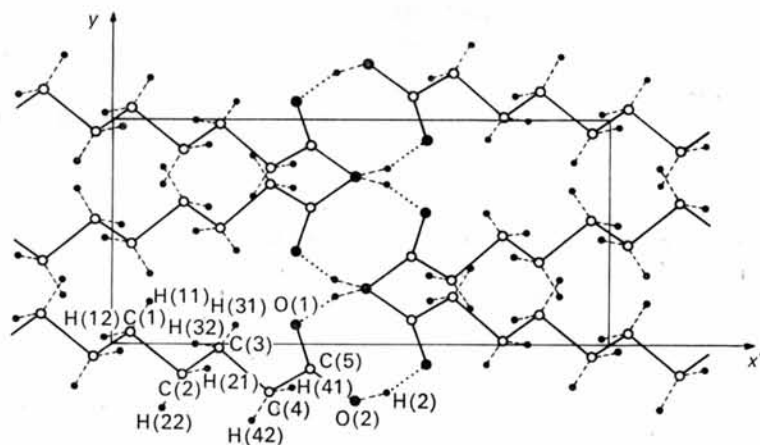


Fig. 3. Projection de la structure parallèlement à l'axe Oz .

	x/a	y/b	z/c
C(1)	0,0355	0,0540	-0,0244
C(2)	0,1397	-0,1343	0,0414
C(3)	0,2132	-0,0171	0,0001
C(4)	0,3161	-0,2120	0,0680
C(5)	0,3959	-0,1083	0,0374
O(1)	0,3706	0,0924	0,0544
O(2)	0,4886	-0,2581	0,1037

légèrement, comme s'ils avaient occupés jusque là une position leur permettant de compenser partiellement la contribution non calculée de l'hydrogène (Tableau 1).

Enfin nous avons terminé l'affinement de cette structure en appliquant à chaque carbone une agitation thermique anisotrope (Tableau 2).

Le coefficient de reliabilité final est: $R=0,085$.

Discussion

Les Figs. 2 et 3 schématisent la disposition des molécules sur les deux projections principales $hk0$ et $h0l$.

Nous avons calculé les liaisons C-C avant et après l'introduction des atomes d'hydrogène:

	Distances C-C avant introduction des hydrogènes	Distances C-C avec les hydrogènes
C(1')-C(1)	1,550 Å	1,535 Å
C(1)-C(2)	1,546	1,528
C(2)-C(3)	1,541	1,523
C(3)-C(4)	1,536	1,531
C(4)-C(5)	1,512	1,501

Ceci confirme bien que les atomes de carbone se placent sur une position légèrement erronée tant que nous ne considérons pas les atomes d'hydrogène dans le calcul de la structure. Ce phénomène est général dans cette série de produits; nous l'avons remarqué avec la même amplitude sur les acides adipique, subérique et dodécanedioïque (Housty & Hospital, 1965*a, b*, 1966).

Introduction des atomes d'hydrogène

Nous avons fait une fonction ($F_o - F_c$) correspondant au dernier cycle d'affinement de la structure sans les atomes d'hydrogène (Fig. 1). Nous remarquons que les atomes de carbone et d'oxygène sont pratiquement effacés, mais de part et d'autre de chaque atome de carbone nous voyons apparaître une masse de densité électronique importante. Il semble normal, à ce stade de l'affinement, d'attribuer cette densité électronique à la présence des atomes d'hydrogène; on remarquera que les hydrogènes représentent 16% de la contribution électronique totale puisque la formule brute de l'acide sébacique est $C_{10}O_4H_{18}$.

Dans les calculs suivants nous avons introduit les contributions des atomes d'hydrogène. Plusieurs cycles d'affinement portant uniquement sur les positions des hydrogènes, les autres atomes étant bloqués sur les positions déjà déterminées, ont permis de localiser les atomes d'hydrogène.

Nous avons ensuite libéré les autres atomes. On remarque que les atomes de carbone se déplacent

Tableau 1. Paramètres et écart type des atomes

	x/a	$\sigma(x)$	y/b	$\sigma(y)$	z/c	$\sigma(z)$
C(1)	0,0354 ± 0,0004		0,0556 ± 0,0014		0,0233 ± 0,0005	
C(2)	0,1396 ± 0,0003		-0,1287 ± 0,0012		0,0406 ± 0,0005	
C(3)	0,2125 ± 0,0004		-0,0182 ± 0,0013		-0,0010 ± 0,0004	
C(4)	0,3164 ± 0,0004		-0,2073 ± 0,0013		0,0661 ± 0,0005	
C(5)	0,3961 ± 0,0004		-0,1081 ± 0,0012		0,0371 ± 0,0005	
O(1)	0,3704 ± 0,0002		0,0920 ± 0,0009		-0,0540 ± 0,0003	
O(2)	0,4875 ± 0,0003		-0,2572 ± 0,0009		0,1037 ± 0,0004	
H(11)	0,0740		0,1850		0,0650	
H(12)	-0,0180		0,0270		-0,1470	
H(21)	0,1900		-0,1050		0,1600	
H(22)	0,0980		-0,2800		-0,0480	
H(31)	0,2450		0,0850		0,0880	
H(32)	0,1640		-0,0020		-0,1250	
H(41)	0,3600		-0,1880		0,1770	
H(42)	0,2790		-0,3400		-0,0220	
H(2)	0,5490		-0,2100		0,0750	

Tableau 2. Paramètres d'agitation thermique anisotrope

	β_{11}	β_{22}	β_{23}	β_{12}	β_{23}	β_{31}
C(1)	0,0101	0,0645	0,0325	0,0050	0,0150	0,0285
C(2)	0,0103	0,0620	0,0335	0,0100	0,0350	0,0300
C(3)	0,0091	0,0545	0,0265	0,0080	0,0300	0,0232
C(4)	0,0094	0,0580	0,0264	-0,0125	0,0100	0,0237
C(5)	0,0088	0,0550	0,0240	-0,0150	-0,0350	0,0215
O(1)	0,0117	0,0610	0,0360	0,0200	0,0300	0,0320
O(2)	0,0116	0,0542	0,0390	-0,0009	-0,0250	0,0335

Les valeurs des longueurs de liaisons et des angles (Tableau 3 et Fig. 4) sont normales et comparables à celles trouvées pour les autres diacides. Il faut noter la valeur assez élevée des angles H-C-H. Ceci a déjà été observé dans l'acide subérique.

Le plan moyen, déterminé par la méthode des moindres carrés de la chaîne des carbones a pour équation:

$$x + 21,5y + 34,8z' = 0$$

L'écart de chaque atome à ce plan est respectivement:

C(1)	0,09 Å	C(5)	0,02 Å
C(2)	-0,02	O(1)	0,05
C(3)	0,02	O(2)	0,14
C(4)	-0,04	H(2)	0,11

Nous avons aussi calculé l'équation du plan moyen de deux groupements carboxyles de deux molécules voisines:

$$x - 11,3y - 17,4z' - 7,5 = 0.$$

Tableau 3. Liaisons et angles

C(1')-C(1)	1,535 ± 0,016 Å	C(1)-H(11)	0,90 Å
C(1)-C(2)	1,528 ± 0,012	C(1)-H(12)	0,95
C(2)-C(3)	1,523 ± 0,013	C(2)-H(21)	0,90
C(3)-C(4)	1,531 ± 0,012	C(2)-H(22)	1,00
C(4)-C(5)	1,501 ± 0,012	C(3)-H(31)	0,85
C(5)-O(1)	1,230 ± 0,011	C(3)-H(32)	0,95
C(5)-O(2)	1,277 ± 0,012	C(4)-H(41)	0,85
O(1)-O(2'')	2,642 ± 0,020 Å	C(4)-H(42)	0,95
O(2)-H(2)	1,17		
C(1')-C(1)-C(2)	112°	C(1)-C(2)-H(21)	100°
C(1)-C(2)-C(3)	113	H(21)-C(2)-C(3)	103
C(2)-C(3)-C(4)	111	C(3)-C(2)-H(22)	99
C(3)-C(4)-C(5)	115	H(22)-C(2)-C(1)	104
C(4)-C(5)-O(1)	122	H(22)-C(2)-H(21)	138
C(4)-C(5)-O(2)	115		
O(1)-C(5)-O(2)	123	C(2)-C(3)-H(31)	86
C(1')-C(1)-H(11)	94	H(31)-C(3)-C(4)	103
H(11)-C(1)-C(2)	103	C(4)-C(3)-H(32)	106
C(2)-C(1)-H(12)	100	H(32)-C(3)-C(2)	111
H(12)-C(1)-C(1')	103	H(32)-C(3)-H(31)	137
H(12)-C(1)-H(11)	144		
O(2)-H(2)-O(1'')	167	C(3)-C(4)-H(41)	99
		H(41)-C(4)-C(5)	103
		C(5)-C(4)-H(42)	95
		H(42)-C(4)-C(3)	104
		H(42)-C(4)-C(41)	141

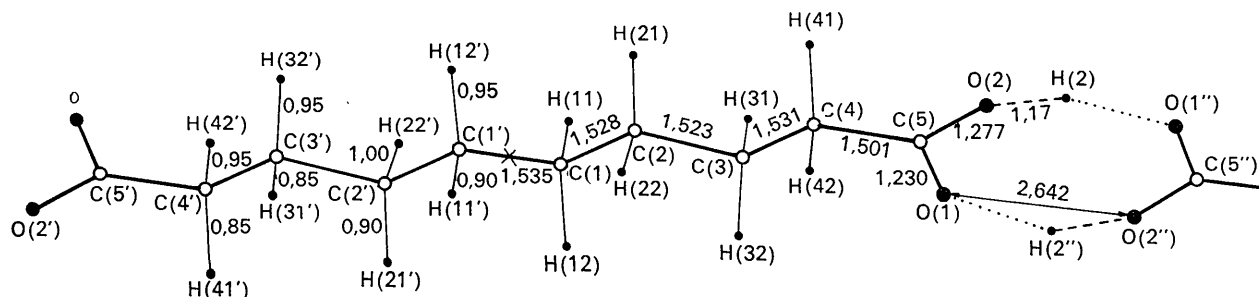


Fig. 4. Schéma de la molécule.

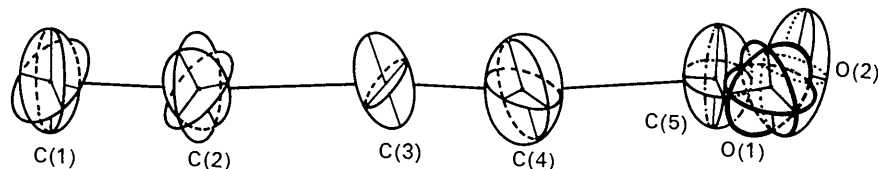


Fig. 5. Projection des ellipsoïdes d'agitation thermique sur un plan perpendiculaire au plan moyen de la chaîne des carbones.

Les deux groupes carboxyles en regard sont sensiblement coplanaires, aucun atome de carbone ou d'oxygène n'étant à une distance supérieure à 0,02 Å du plan moyen, par contre l'atome d'hydrogène H(2) de la liaison est situé à 0,12 Å de ce plan. Les deux plans moyens, celui de la chaîne carbonée et celui des groupements carboxyles, font entre eux un angle de 3°.

La distance O(2)-O(1'')=2,64 Å, permet de classer la liaison hydrogène unissant deux molécules parmi les liaisons fortes. L'atome H(2) est situé au dehors de cette liaison O(2)-H(2)-O(1'')=167°, la distance O-H=1,15 Å est du même ordre de grandeur que dans les autres diacides.

Le Tableau 4 donne les amplitudes et les directions des axes principaux d'agitation thermique de chaque atome par rapport au référentiel x'yz du cristal. La Fig. 5 montre que l'axe de plus grande anisotropie de tous les atomes est approximativement perpendiculaire au plan moyen de la chaîne des carbones.

Tableau 4. Orientation et amplitude des ellipsoïdes d'agitation thermique

	B	q _{ix'}	q _{iy}	q _{iz}	
C(1)	1	8,5	0,477	0,589	0,651
	2	3,5	0,773	0,070	-0,629
	3	5,6	0,418	-0,803	0,422
C(2)	1	9,5	0,438	0,630	0,640
	2	2,9	0,524	0,399	-0,751
	3	4,4	0,730	-0,664	0,155
C(3)	1	8,0	0,353	0,678	0,644
	2	3,0	0,188	0,624	-0,758
	3	3,9	0,912	-0,397	-0,094
C(4)	1	7,8	0,143	-0,791	-0,594
	2	2,0	0,547	0,564	-0,618
	3	5,6	0,824	-0,256	0,513
C(5)	1	8,0	0,435	-0,720	0,539
	2	2,8	0,478	0,691	0,540
	3	3,6	0,784	-0,022	-0,619
O(1)	1	9,4	0,604	0,565	0,561
	2	3,4	0,786	-0,533	-0,310
	3	5,3	0,124	0,631	-0,765
O(2)	1	9,7	0,435	-0,454	0,776
	2	3,0	0,501	-0,594	-0,628
	3	5,4	0,742	0,668	-0,031

On peut expliquer cette direction privilégiée d'agitation en considérant que, puisque les molécules sont toutes parallèles et solidement 'accrochées' bout à bout par une liaison hydrogène forte elles ne peuvent jouir d'un certain degré de liberté que perpendiculairement à l'axe d'alignement des chaînes de molécules.

Références

HOUSTY, J. & HOSPITAL, M. (1965a). *Acta Cryst.* **18**, 693.
 HOUSTY, J. & HOSPITAL, M. (1965b). *Acta Cryst.* **18**, 753.
 HOUSTY, J. & HOSPITAL, M. (1966). *Acta Cryst.* Sous presse.
 MORRISON, J. D. & ROBERTSON, J. M. (1949). *J. Chem. Soc.* p. 993.
 PARISOT, A. (1949). *Constantes et données numériques des corps purs*, p. 281. Paris: Dunod.

Tableau 5. Facteurs de structure observés et calculés

01 01 00	00 00 00	29,17	-10,54	01 02 02	15,91	14,76	-12 01 05	16,03	-1,07
02 00 00	00 00 00	3,68	-4,59	02 02 02	7,63	-7,02	-10 01 05	0,03	1,74
03 00 00	00 00 00	12,32	12,39	03 02 02	3,13	3,60	-07 01 05	2,36	-2,78
04 00 00	00 00 00	7,42	7,41	04 02 02	1,66	2,27	-07 01 05	2,36	4,52
05 00 00	00 00 00	16,05	17,39	05 02 02	7,66	7,66	-07 01 05	13,02	-10,47
06 00 00	00 00 00	13,71	-12,55	06 02 02	2,04	-3,43	-05 01 05	1,30	2,47
07 00 00	00 00 00	10,70	10,37	-11 03 02	2,1F	3,46	-05 01 05	5,37	7,47
08 00 00	00 00 00	6,93	4,02	-10 03 02	3,22	-4,30	-02 01 05	4,35	4,15
09 00 00	00 00 00	3,94	-7,11	-05 03 02	4,06	2,63	-02 01 05	4,35	4,15
10 00 00	00 00 00	1,84	-1,84	-02 03 02	14,13	13,05	00 01 05	6,05	7,04
11 00 00	00 00 00	1,94	-1,93	04 03 02	5,65	-5,64	-11 02 05	4,54	-5,00
12 00 00	00 00 00	1,94	-1,93	05 03 02	12,34	12,73	-07 02 05	7,29	-7,67
01 01 00	00 00 00	32,06	10,64	-02 03 02	12,23	-11,10	-07 02 05	6,34	7,61
02 01 00	00 00 00	2,83	-2,55	-02 03 02	4,06	4,96	-07 02 05	6,34	7,61
03 01 00	00 00 00	1,67	0,79	01 03 02	4,06	4,96	-07 02 05	6,34	7,61
04 01 00	00 00 00	4,63	-4,54	03 03 02	3,21	4,69	-04 02 05	10,42	-9,74
05 01 00	00 00 00	16,91	-16,64	05 03 02	12,10	-13,56	-04 02 05	10,42	-9,74
06 01 00	00 00 00	5,33	5,61	06 03 02	4,08	5,80	-02 02 05	4,74	-6,17
07 01 00	00 00 00	1,77	2,22	07 03 02	2,47	-4,01	-03 02 05	10,27	12,15
08 01 00	00 00 00	4,92	-5,01	-03 04 02	3,99	4,64	-09 03 05	4,14	-3,73
09 01 00	00 00 00	1,67	1,94	-04 04 02	3,91	-7,55	-07 03 05	3,71	-4,35
10 01 00	00 00 00	1,43	-0,64	-04 04 02	9,83	10,31	-07 03 05	3,71	-4,35
01 02 00	00 00 00	26,46	27,53	-03 04 02	2,36	-2,53	-04 03 05	1,27	1,42
02 02 00	00 00 00	15,32	-13,71	01 04 02	3,40	-5,22	-04 03 05	1,27	1,42
03 02 00	00 00 00	11,14	11,10	02 04 02	1,91	1,69	-02 03 05	3,10	-3,47
04 02 00	00 00 00	7,75	-7,33	03 04 02	1,93	-1,66	-13 00 06	2,50	-2,30
05 02 00	00 00 00	27,44	27,84	04 04 02	2,04	1,22	-11 00 06	7,71	-10,17
06 02 00	00 00 00	11,65	-11,78	-04 05 02	2,43	3,12	-09 00 06	2,50	-2,30
07 02 00	00 00 00	1,76	1,10	-02 05 02	2,15	2,90	-10 00 06	1,59	-1,57
08 02 00	00 00 00	3,35	-3,47	-04 05 02	2,43	3,12	-09 00 06	2,50	-2,30
01 03 00	00 00 00	2,21	-4,60	-02 05 02	2,15	2,90	-07 00 06	7,47	-10,29
02 03 00	00 00 00	10,55	10,67	-13 01 03	12,84	-13,51	-07 00 06	7,47	-10,29
03 03 00	00 00 00	7,32	-9,46	-11 01 03	6,17	-8,79	-09 00 06	7,57	7,06
04 03 00	00 00 00	3,65	3,40	-11 01 03	4,40	-6,97	-09 00 06	7,57	7,06
05 03 00	00 00 00	2,68	-3,14	-07 01 03	9,36	-9,99	-09 00 06	7,57	7,06
06 03 00	00 00 00	2,68	-3,14	-07 01 03	10,09	-10,72	-09 00 06	7,57	7,06
07 03 00	00 00 00	1,72	-2,33	-01 01 03	12,02	-12,51	-11 01 06	12,47	-13,07
08 03 00	00 00 00	4,57	-2,33	-01 01 03	12,02	-12,51	-11 01 06	12,47	-13,07
09 03 00	00 00 00	11,47	11,70	-05 01 03	26,91	-23,50	-10 01 06	11,70	-12,37
10 03 00	00 00 00	3,69	-4,71	04 01 03	13,56	-12,75	-06 01 06	11,45	-11,87
01 04 00	00 00 00	2,77	-1,20	-01 01 03	1,90	1,12	-04 01 06	10,77	-10,61
02 04 00	00 00 00	1,14	-0,68	01 01 03	2,5F	4,82	-04 01 06	10,77	-10,61
03 04 00	00 00 00	2,09	-2,74	02 01 03	29,04	-30,96	-02 01 06	2,13	-4,21
04 04 00	00 00 00	2,09	-2,74	03 01 03	5,28	-4,83	00 01 06	4,35	4,71
05 04 00	00 00 00	1,93	-1,96	04 01 03	3,72	3,36	-12 02 06	3,75	-3,74
06 04 00	00 00 00	1,51	1,10	05 01 03	6,70	6,12	-11 02 06	2,17	2,17
00 06 00	00 00 00	0,72	-1,62	-12 02 03	2,02	2,02	-09 02 06	2,06	-2,06
-12 01 01	01 01 01	6,80	-6,76	-11 02 05	1,04	-1,39	-09 02 06	2,17	2,17
-11 01 01	01 01 01	3,74	-4,66	-02 02 05	2,61	-4,15	-07 02 06	3,06	-3,06
-10 01 01	01 01 01	2,66	-4,72	-02 02 05	4,55	4,67	-07 02 06	3,06	-3,06
-09 01 01	01 01 01	7,99	-6,72	-07 02 05	14,06	6,04	-04 02 06	3,22	2,16
-08 01 01	01 01 01	31,11	-26,85	-05 02 05	13,44	12,92	-04 02 06	3,22	2,16
-07 01 01	01 01 01	11,86	-11,86	-11 02 05	10,16	-10,32	-02 01 06	3,99	-6,09
-06 01 01	01 01 01	19,95	-18,91	-03 02 05	13,29	11,14	-10 03 06	3,11	2,79
-05 01 01	01 01 01	15,66	-14,62	-01 02 05	18,81	-18,81	-07 03 06	15,06	14,34
-04 01 01	01 01 01	7,49	-6,74	-01 02 05	18,81	-18,81	-07 03 06	15,06	14,34
-03 01 01	01 01 01	93,14	-7,02	04 02 05	19,80	20,52	-05 03 06	2,36	4,70
02 01 01	01 01 01	11,75	-7,02	04 02 05	10,48	-10,66	-04 03 06	2,27	-2,51
01 01 01	01 01 01	10,73	-10,46	-10 03 05	2,94	-2,30	-02 03 06	2,31	2,49
04 01 01	01 01 01	1,93	-2,37	-03 03 05	4,74	4,35	-14 01 07	2,31	-2,49
07 01 01	01 01 01	3,66	-4,29	-04 03 05	6,44	-6,07	-12 01 07	0,74	-0,77
-11 02 01	01 01 01	3,19	-4,15	-05 03 05	6,85	7,67	-12 01 07	0,74	-0,77
-10 02 01	01 01 01	1,57	-1,91	-04 03 05	5,96	-4,77	-10 01 07	5,58	-6,10
-09 02 01	01 01 01	11,57	-11,53	-01 03 05	1,39	-1,37	-09 01 07	2,17	-2,09
-08 02 01	01 01 01	11,36	11,03	01 03 05	6,98	6,75	-08 01 07	6,43	-6,32
-07 02 01	01 01 01	10,25	-10,41	-08 04 05	5,53	5,72	-06 01 07	6,43	-6,32
-06 02 01	01 01 01	12,53	-10,77	-05 04 05	3,75	3,94	-04 01 07	2,08	1,39
-05 02 01	01 01 01	10,25	-10,41	-02 04 05	2,89	2,97	-01 01 07	3,09	-3,82
-04 02 01	01 01 01	1,64	2,31	-04 05 05	3,12	-3,44	-13 02 07	4,81	5,43
-03 02 01	01 01 01	10,25	-13,67	-02 05 05	3,58	-3,43	-12 02 07	7,02	-7,32
-02 02 01	01 01 01	1,75	-1,26	-03 06 03	2,12	2,43	-10 02 07	4,88	4,51
-01 02 01	01 01 01	4,36	-3,54	-03 06 03	2,12	2,43	-10 02 07	4,88	4,51
02 02 01	01 01 01	3,21	-3,54	-17 00 06	2,40	-1,62	-10 02 07	11,82	10,46
-07 03 01	01 01 01	4,53	-6,02	-16 00 06	2,40	-1,62	-06 02 07	4,30	-4,27
-06 03 01	01 01 01	7,79	-7,75	-13 00 06	2,43	2,21	-05 02 07	4,30	-4,27
-05 03 01	01 01 01	10,47	-11,23	-10 00 06	2,04	-1,27	-04 02 07	4,30	-4,27
-04 03 01	01 01 01	4,97	-4,72	-13 00 06	10,37	8,87	-02 02 07	1,51	-1,57
-03 03 01	01 01 01	3,08	-3,08	-11 00 06	30,41	-29,60	-09 03 07	6,50	-6,76
-02 03 01	01 01 01	2,10	-2,10	-10 00 06	4,81	-4,77	-09 03 07	6,50	-6,76
-01 03 01	01 01 01	3,60	-3,60	-07 00 06	5,57	5,91	-09 03 07	6,50	-6,76
02 03 01	01 01 0								