

ROBERT HUBER und WALTER HOPPE

Zur Chemie des Ecdysons, VII<sup>1)</sup>

## Die Kristall- und Molekülstrukturanalyse des Insektenverpuppungshormons Ecdyson mit der automatisierten Faltmolekülmethode

Aus der Abteilung für Röntgenstrukturforschung am Max-Planck-Institut für Eiweiß- und Lederforschung, München, und der Abteilung für Strukturforschung am Physikalisch-Chemischen Institut der Technischen Hochschule München

(Eingegangen am 28. Dezember 1964)

Die vollständige Struktur und Konfiguration des Insektenverpuppungshormons Ecdyson wird durch Röntgenstrukturanalyse der natürlichen, schweratomfreien Verbindung als 2 $\beta$ .3 $\beta$ .14 $\alpha$ .22 $\beta$ .r.25-Pentahydroxy- $\Delta^7$ -5 $\beta$ -cholestenon-(6) ermittelt.

Die vorliegende Arbeit beschreibt eine röntgenographische Konstitutionsanalyse des Insektenverpuppungshormons Ecdyson mit einer in unserem Laboratorium vor längerer Zeit ausgearbeiteten Methode (Faltmolekülmethode<sup>2)</sup>). Die Analyse wurde an Kristallen der reinen schweratomfreien Substanz durchgeführt, da Versuche zur Darstellung und Kristallisation von zur Untersuchung geeigneten Schweratomderivaten fehlgeschlagen waren. Die Faltmolekülmethode setzt eine Teilkenntnis der räumlichen Struktur des Moleküls voraus. In vorangegangenen Untersuchungen<sup>3,4)</sup> war sichergestellt worden, daß Ecdyson ein Sterin-Skelett (oder zumindest eine vom Perhydrophenanthren abgeleitete Konstitution) besitzen sollte. Wir beschlossen daher, zur Faltmolekülauswertung ein 10.13.17-Trimethyl-steran-Gerüst zu verwenden. Freilich war die sterische Konfiguration des Sterin-Skeletts weitgehend unsicher. Verfütterungsversuche von radioaktiv markiertem Cholesterin an Insekten<sup>5)</sup> hatten eine im Tierkörper ablaufende Umwandlung von Cholesterin in Ecdyson erwiesen. Es war daher naheliegend, die Faltung eines Cholesterin-Skeletts zu vermuten und mit dieser Annahme in die Faltmolekülanalyse einzugehen. Gänzlich unbekannt war zu Beginn unserer Untersuchung die Lage der ungesättigten  $\alpha$ . $\beta$ -Ketogruppierung. Die Verzerrung des Sterin-Skeletts durch die Doppelbindung wurde daher vernachlässigt (Annahme eines völlig hydrierten Ringsystems).

Diese ungenaue Kenntnis der Molekülteilstruktur mußte die Analyse zunächst beträchtlich erschweren; es konnte keineswegs als sicher gelten, daß sie erfolgreich verlaufen würde. Daher wurden die parallelen Versuche zur Gewinnung der Schwer-

1) VI. Mittel.: P. KARLSON, H. HOFFMEISTER, H. HUMMEL, P. HOCKS und G. SPITELLER, Chem. Ber. **98**, 2394 [1965], vorstehend.

2) W. HOPPE, Acta crystallogr. [Copenhagen] **10**, 750 [1957].

3) W. HOPPE und R. HUBER, Chem. Ber. **98**, 2353 [1965].

4) P. KARLSON, H. HOFFMEISTER, W. HOPPE und R. HUBER, Liebigs Ann. Chem. **662**, 1 [1963].

5) Freundliche Privatmitteil. von P. KARLSON.

atomderivate fortgesetzt. Rückblickend läßt sich tatsächlich sagen, daß das in die Analyse eingegebene Sterin-Skelett bezüglich seiner sterischen Faltung falsch war; trotzdem war es möglich, die räumliche Konfiguration des Moleküls mit allen Seitenketten auf wenige Hundertstel Å zu bestimmen, so daß schließlich die Schweratomversuche abgebrochen werden konnten. Das Fehlen eines Schweratoms brachte allerdings nicht nur Nachteile: Die bei reinen Leichtatomstrukturen charakteristische größere Genauigkeit (bei gleicher Genauigkeit der Intensitätsmessungen) in der Endanalyse ermöglichte es, die Sauerstoff-Funktionen im Molekül ohne chemische Annahmen aus der Form und Höhe der Fouriermaxima ohne weiteres zu erkennen; sie gestattete sogar das Auffinden einer großen Anzahl von Wasserstoffatomen aus einer Differenz-Fouriersynthese.

Im Gange der Analyse erfolgte zunächst eine Art Selbstkorrektur des unvollkommen eingegebenen Sterin-Skeletts und später — in weiteren sukzessiven Fouriersynthesen — ein Auffinden der Seitenkettenlagen (zuerst noch ohne Unterscheidung von C und O). In keinem Stadium der Analyse haben wir auf weitere chemische Informationen zurückgegriffen; die Form der Näherungselektronensynthese im betreffenden Stadium wurde als einziges Indiz für einzugebende Atomlagen angesehen. In der Röntgenanalyse einer Verbindung, deren Konstitutionsformel (oder Teilkonstitutionsformel) nicht über jeden Zweifel als gesichert gelten kann, ist ein solches Vorgehen unbedingt zu empfehlen: Die allgemeine Erfahrung in der Röntgenstrukturanalyse lehrt, daß sich „fehlende“ Atome im Laufe einer Analyse sehr viel leichter korrigieren als „falsche“ Atome. Die von chemischer Information unabhängige Durchführung einer Röntgenanalyse ist nicht zuletzt verantwortlich für ihren Wert als endgültiger Konstitutionsbeweis.

Es ist bemerkenswert, daß sich die in unserem Laboratorium an mehreren Beispielen bisher nur zweidimensional erprobte Faltmolekülmethode bei ihrem erstmaligen, über Rechenmaschinenprogramme geführten Einsatz in einem dreidimensionalen Strukturproblem (automatisierte Faltmolekülmethode<sup>6)</sup> trotz einer sehr unvollkommenen Molekülteilstruktur als röntgenographische Konstitutionsbestimmungsmethode bewährt hat.

#### EXPERIMENTELLES

Ecdyson kristallisiert in zwei Modifikationen je nach Lösungsmittel<sup>4)</sup>. Die Daten der für diese Arbeit verwendeten Ecdysonkristalle sind:

Raumgruppe  $P2_12_12_1$ ;  $a = 35.56 \text{ \AA}$ ,  $b = 9.92 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.73 \text{ \AA}$ ;  $V = 2725.32 \text{ \AA}^3$ ; 4 Moleküle/Zelle; exp. Dichte:  $1.127 \text{ g/cm}^3$ ; ber. Dichte mit 4 Formeleinheiten/Zelle:  $1.131 \text{ g/cm}^3$ .  $\mu = 6.34 \text{ cm}^{-1}$ .

#### Symmetrioperationen:

$x$	$y$	$z$	(Symmetrioperation 1)
$0.5 - x$	$1.0 - y$	$0.5 + z$	(Symmetrioperation 2)
$0.5 + x$	$0.5 - y$	$1.0 - z$	(Symmetrioperation 3)
$1.0 - x$	$-0.5 + y$	$0.5 - z$	(Symmetrioperation 4)

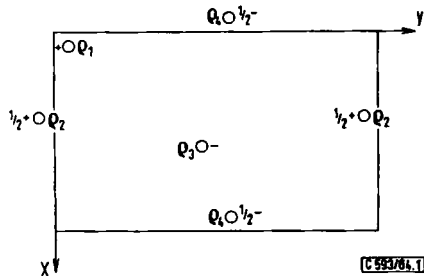
<sup>6)</sup> R. HUBER, Acta crystallogr. [Copenhagen] [1965], im Druck.

Die für Intensitätsmessungen benutzten Kristalle hatten die Dimension  $0.45 \times 0.35 \times 0.15$  mm.

Die Intensitäten wurden photographisch mit  $\text{Cu-K}_\alpha$ -Strahlung nach dem Mehrfachfilm-Weissenberg-Verfahren registriert. Um die Reflexe in der kurzen  $a^*$ -Richtung gut zu trennen, benutzten wir eine vergrößerte Filmvorschubgeschwindigkeit ( $1^\circ/\text{mm}$ ) in der Weissenberg-Kamera. Wir konnten auf allen Aufnahmen die symmetrisch äquivalenten Reflexe zwei- bis dreimal registrieren. Aufgenommen wurden die Ebenen  $hk0$  bis  $hk6$  und  $h0l$  bis  $h7l$ , so daß die meisten Reflexe auf zwei unabhängigen Aufnahmen auftraten. Die Filme wurden auf einem an unserem Institut entwickelten integrierenden Photometer photometriert. Die Intensitäten wurden mit den üblichen Faktoren korrigiert, aufeinander skaliert und gemittelt, so daß zuletzt ein Satz von etwa 3400 unabhängigen Struktur Faktoren vorlag. Alle innerhalb der mit  $\text{Cu-K}_\alpha$ -Strahlung erreichbaren Grenze liegenden nicht sichtbaren Reflexe wurden mit der Hälfte des kleinsten beobachteten Wertes eingegeben und genau so behandelt wie die gemessenen Intensitäten. Sie wurden für alle Rechnungen mitverwendet. Die für die spätere Kleinste-Quadrate-Verfeinerung wichtigen Reflexgewichte wurden durchweg gleich Eins gesetzt, mit Ausnahme der vier größten Struktur Faktoren, die offensichtlich extinktionsgeschwächt waren. Diese erhielten das Gewicht  $1/4$ .

#### STRUKTURANALYSE

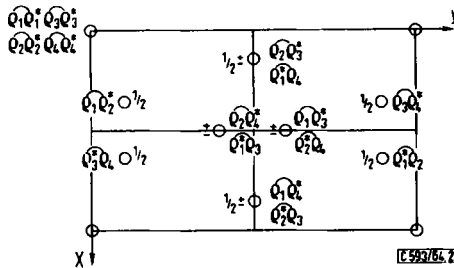
Bevor die eigentliche Strukturbestimmung beschrieben wird, sei kurz auf die Grundlage der verwendeten „automatisierten Faltmolekülmethode“<sup>6)</sup> eingegangen. Die Faltmolekülmethode<sup>2)</sup> (Faltprodukte von Molekülen = „Faltmoleküle“) benutzt die Abbildung von gewissen moleküleigenen Funktionen in der Patterson-Synthese zur Orientierungs- und Translationsbestimmung der Moleküle. Das Prinzip erläutern Abbild. 1 und 2. Abbild. 1 zeigt die schematische Abbildung einer aus vier symmetrisch äquivalenten Molekülen aufgebauten Elementarzelle eines Kristalles in der Raum-



Abbild. 1. Punktlagen der Raumgruppe  $P2_12_12_1$

gruppe  $P2_12_12_1$ . Das erste Molekül (mit  $\rho_1$  bezeichnet) wird durch eine Schraubenachse in Richtung  $a$  in das Molekül  $\rho_3$ , durch eine Schraubenachse in Richtung  $b$  in das Molekül  $\rho_4$  und schließlich durch eine Schraubenachse in Richtung  $c$  in das Molekül  $\rho_2$  „verwandelt“. Bei Kenntnis der Lage und Orientierung von  $\rho_1$  kann man also die gesamte Kristallstruktur konstruieren. Abbild. 2 enthält die sog. „Faltmolekülpunktlage“. Diese Figur zeigt, wie die Patterson-Funktion aus den (wieder in

bestimmter Weise symmetrisch zusammenhängenden) Faltprodukten der Moleküle („Faltmoleküle“) geordnet zusammengesetzt ist. Nach der Theorie der Faltmolekülmethode werden die „gleich-indizierten“ Faltmoleküle im Ursprung der Patterson-Struktur zur Orientierungsbestimmung, die außerhalb des Ursprungs angeordneten



Abbild. 2. Faltmolekülpunktlagen der Raumgruppe  $P2_12_12_1$

„gemischt-indizierten“ Faltmoleküle zur Translationsbestimmung herangezogen. Die Auswertung geschieht dann also ähnlich wie bei einem Zusammensetzspiel, bei dem ebenfalls Bildelemente (die Faltmoleküle) zu einem kompletten Bild (die Patterson-Struktur) zusammengesetzt sind.

Bei Anwendung in röntgenographischen Konstitutionsanalysen ist es nun wichtig, daß eine Faltmolekülanalyse auch mit einem Molekülfragment durchgeführt werden kann. Man erhält nach einer solchen Auswertung Ort und Lage des Teilmoleküls. Man kann dann eine nur auf der Struktur des Teilmoleküls basierende Phasenberechnung durchführen und sich schließlich — ähnlich wie in der Schweratomtechnik — zur Gesamtstruktur in sukzessiven Fouriersynthesen vorarbeiten. Für die dreidimensionale Faltmolekülauswertung wurde eine für die Anwendung in Rechenmaschinen bestimmte automatisierte Form entworfen<sup>6)</sup>, welche die möglichen Orientierungen und Translationen des Moleküls (oder Teilmoleküls) nach Eingabe des Modells in Form der Schichtlinienkarte von sog. Zuverlässigkeitsfunktionen liefert. Der Wert der Zuverlässigkeitsfunktion für einen bestimmten Orientierungs- oder Translationsparameter ist im wesentlichen ein Maß der Differenz des „Faltmoleküls“ von der Patterson-Funktion. Bei richtiger Lage des Faltmoleküls muß diese Differenz (wenn das volle Molekül eingegeben wird und alle Faltmoleküle berücksichtigt werden) Null sein. Wird das Faltmolekül eines Teilmoleküls zur Analyse verwendet, so kann ein positiver Rest entstehen; die Differenz darf aber an keiner Stelle negativ sein, wenn die Lage richtig sein soll. Negative Werte deuten an, daß in der Patterson-Synthese Maxima fehlen, welche die angenommene Lage des Teilmoleküls verlangen würde. Registriert man diese Zuverlässigkeitsfunktionen in Abhängigkeit von den Orientierungs- oder Translationsparametern der Faltmoleküle (z. B. als Schichtlinienkarten), so werden Minima dieser Funktionen zugelassene Orientierungen bzw. Translationen der Faltmoleküle (und damit auch des Teilmoleküls) kennzeichnen. Die Rechenmaschinenprogramme sind so angelegt, daß diese Schichtlinienkarten unmittelbar berechnet und ausgegeben werden. Vor der Auswertung müssen natürlich die Struktur des Teilmoleküls und die mathematische Definition des

zur Diskussion verwendeten Faltmoleküls in geeigneter Form in die Maschine eingespeichert werden. Mit der Zuverlässigkeitsfunktion können auch Modellentscheidungen getroffen werden, da das richtige Modell zu einem niedrigeren Zuverlässigkeitsminimum führen muß als ein teilweise falsches Modell. Die Zuverlässigkeitsfunktion zur Bestimmung der Orientierung ist eine Funktion der drei Eulerschen Winkel der gleichindizierten Faltmoleküle. Zur Translationsparameterbestimmung können verschiedene gemischt-indizierte Faltmoleküle der Abbild. 2 herangezogen werden. In unserer Auswertung wurden die Faltmoleküle  $\widehat{\rho}_1\rho_2^*$ ,  $\widehat{\rho}_1\rho_4^*$ ,  $\widehat{\rho}_1\rho_3^*$  (mit ihren symmetrischen Abbildungen) herangezogen, die von den Koordinaten  $x,y$ ;  $x,z$  und  $y,z$  abhängen. Man erhält so je zwei unabhängige Bestimmungen eines jeden Translationsparameters. Zur Vorbereitung der Faltmolekülanalyse berechneten wir Absolutwerte der Strukturaktoren aus den gemessenen relativen Werten über eine Wilson-Statistik zur Bestimmung von Temperatur- und Skalierungsfaktor. Mit diesen Daten wurde eine dreidimensionale, zugespitzte (vgl. l. c.<sup>7)</sup>), absolute Patterson-Synthese gerechnet. Da die Orientierung des starren Steringerüsts aus der diffusen Streuung<sup>3)</sup> schon bekannt war, beschränkte sich die Orientierungsbestimmung mit der Faltmolekülmethode auf eine Kontrolle und Verfeinerung der bereits bekannten Werte. Da das automatisierte Orientierungsbestimmungsprogramm noch nicht fertiggestellt war, wurde die Einpassung über besonders charakteristische Faltmolekülmaxima von Hand durchgeführt. Mit der so bestimmten Orientierung wurden alle folgenden Auswertungen durchgeführt. Zur Testung des später fertiggestellten Orientierungsrechenprogrammes haben wir übrigens diese Orientierungsbestimmung später mit der automatisierten Methode wiederholt, wobei sich die Orientierung genauer ergab, wie ein Vergleich mit den verfeinerten Atomparametern zeigt. Die Berechnungen der Translationsparameter ergaben folgende Resultate: Die Funktion  $R(x,y)$  zeigt ein einziges Minimum mit der relativen Höhe von 250 (Höhe von  $R(x,y)$  max. = 2500). Die  $R(x,z)$ -Funktion hatte mehrere Minima; das niedrigste hatte den gleichen  $x$ -Parameter wie das einzige Minimum in  $R(x,y)$ . Die Funktion  $R(y,z)$  hatte viele Minima, darunter eines an der nach den beiden anderen Funktionen zu erwartenden Stelle. Dieses unterschiedliche Verhalten der drei Funktionen ist leicht aus der verschiedenen Struktur der Faltmoleküle zu verstehen. Während nämlich das Faltmolekül  $\widehat{\rho}_1\rho_2^*$  für die  $R(x,y)$ -Funktion einige sehr hohe Maxima aufweist, besteht das Faltmolekül  $\widehat{\rho}_1\rho_3^*$  ( $R(y,z)$ -Funktion) nur aus flachen und niedrigen Maxima, hat also eine wenig charakteristische Gestalt. Es ist verständlich, daß das Einpassen eines Faltmoleküls um so besser gelingen muß, je ausgeprägtere Strukturmerkmale (hohe Maxima) es zeigen wird. Man kann daher aus der Form der Faltmoleküle auf die Güte der Parameter schließen.

Der nächste Schritt in der Analyse war die Berechnung einer Fouriersynthese, wobei das Trimethylsteran-Modell mit den schon festgelegten Orientierungs- und Translationsparametern die Phasen bestimmte. Die Fouriersynthese wies neben den eingegebenen Atomen etwa 160 Maxima auf. Sie war nicht interpretierbar. Es fiel jedoch auf, daß die drei höchsten Maxima der Synthese ungefähr an Stellen lagen, die in

<sup>7)</sup> H. LIPSON und W. COCHRAN, The Determination of Crystal Structures, S. 172, Tab. 172a, Reihe 4, G. Bell and Sons Ltd., London 1957.

einem Sterin-Skelett mit Koprostanfaltung (in Abänderung von der Cholesterinfaltung) mit Atomen besetzt sein müßten. Damit lag die Vermutung nahe, daß das Ringskelett von Ecdyson in der Koprostanfaltung vorliegt.

Um diese Vermutung zu prüfen, berechneten wir mit einem Koprostanmodell (die Doppelbindung im Ring blieb weiter unberücksichtigt) die Translationsfunktion  $R(x,y)$ , die ein Minimum in der Höhe von 0 (anstelle von 250) an gleicher Stelle wie in der  $R$ -Funktion des Cholesterinmodells aufwies. Diese Erniedrigung des Minimums kann nur bedeuten, daß das abgeänderte Teilmolekül besser in die Patterson-Synthese „paßt“ als das zuerst benutzte Cholesterinmodell. Wir berechneten nun eine Fouriersynthese mit dem Koprostanmodell, welche immer noch ca. 130 (allerdings z. T. sehr niedrige) Maxima zeigte. Die sechs höchsten Maxima dieser Synthese waren als Liganden (es handelte sich, wie sich später herausstellte, um die 6 Sauerstoffatome) interpretierbar.

In einer dritten Fouriersynthese, berechnet mit diesen 26 Atomen, traten die restlichen 7 Atome klar hervor. Gleichzeitig verzerrte sich das Sterin-Skelett in einer Form, welche die Doppelbindung erkennen ließ.

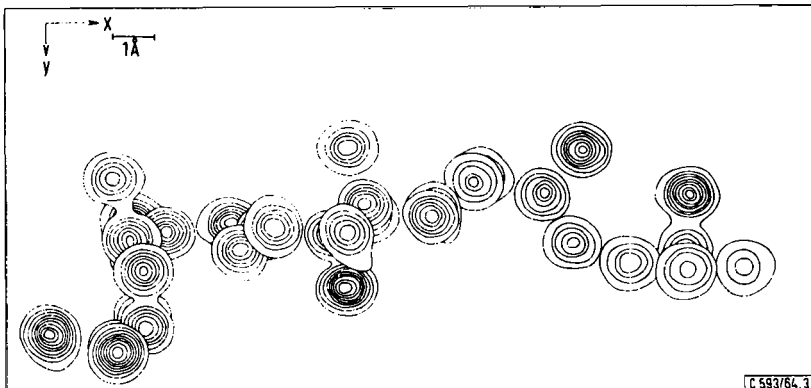
Die statistische Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Struktur-faktoren, definiert als sog.  $R_1$ -Wert:

$$R_1 = \frac{\sum ||F_o| - |F_c||}{\sum |F_o|}$$

( $F_o$  = beobachtete Struktur-faktoren,  $F_c$  = berechnete Struktur-faktoren, Summierung über alle unabhängigen 3400 Struktur-faktoren) betrug in diesem Stadium  $R_1 = 40\%$ .

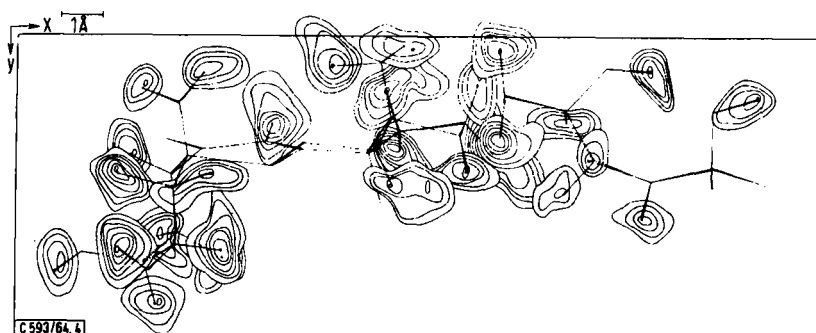
Eine anschließende Kleinste-Quadrate-Verfeinerung mit isotropen individuellen Temperatur-faktoren erbrachte  $R_1 = 21\%$ .

In einer anschließenden Differenz-Fouriersynthese zeigten alle Atome elliptische Gestalt, die auf anisotrope Temperaturbewegung hindeutet. Wir verfeinerten die Struktur daher anisotrop weiter ( $R_1 = 16\%$ ). In der darauf berechneten Differenz-



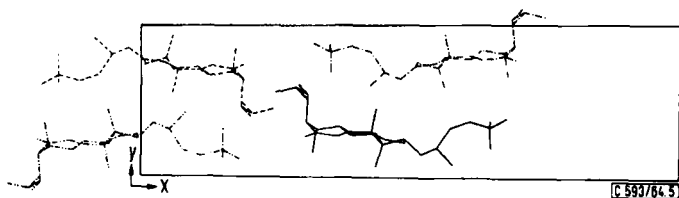
Abbild. 3. Dreidimensionale Fouriersynthese von Ecdyson (erste Linie  $0.8 \text{ e}/\text{Å}^3$ , dann alle  $1.65 \text{ e}/\text{Å}^3$ )

Fouriersynthese traten 28 von den 44 Wasserstoffatomen auf. Die Maxima hatten Höhen von 0.4 bis 0.8  $e/\text{\AA}^3$ . Zwei weitere Zyklen der Verfeinerung mit kleinsten Quadraten (Variation der Kohlenstoff- und Sauerstoff-Lageparameter und Temperatur-

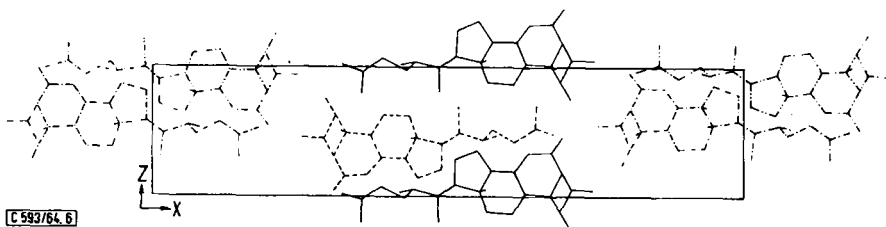


Abbild. 4. Dreidimensionale Differenz-Fouriersynthese von Ecdyson (Subtraktion von C und O) (erste Linie 0.1  $e/\text{\AA}^3$ , dann alle 0.1  $e/\text{\AA}^3$ )

koeffizienten) ergaben ein endgültiges  $R_1 = 15\%$ . Abbild. 3 zeigt eine dreidimensionale Fouriersynthese von Ecdyson, Abbild. 4 eine dreidimensionale Differenz-Fouriersynthese (Subtraktion von C und O), in der sich die Wasserstoffatome zeigen,

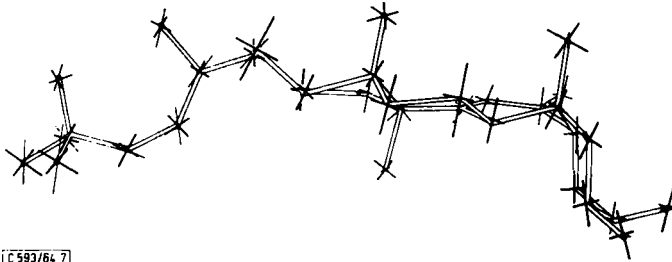


Abbild. 5. Projektion der Ecdysonstruktur entlang *c*



Abbild. 6. Projektion der Ecdysonstruktur entlang *b*

Abbild. 5 und 6 das Gerüst der Verbindung in den zwei Projektionen entlang *c* und *b* und Abbild. 7 schließlich eine Zeichnung des Molekülmodells, in welchem die anisotropen Schwingungen angedeutet sind.

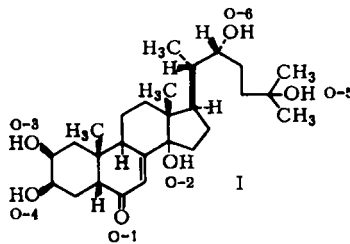


[C 593/64.7]

Abbild. 7. Molekülmodell des Ecdyson mit den Schwingungshauptachsen (die Längen der Schwingungshauptachsen sind fünffach vergrößert gegenüber den Bindungsabständen)

#### DISKUSSION

Ecdyson ist ein  $2\beta,3\beta,14\alpha,22\beta,25$ -Pentahydroxy- $\Delta^7$ - $5\beta$ -cholestenon-(6) (I) (C-20 hat die normale sterische Konfiguration, nämlich  $20\beta$ -Methyl), (6-Keto-O = O-1;  $14\alpha$ -O = O-2,  $2\beta$ -O = O-3,  $3\beta$ -O = O-4,  $25$ -O = O-5,  $22$ -O = O-6).



Die Tabellen 1 und 2 zeigen, daß die Bindungslängen und -winkel bei Berücksichtigung der Fehlergrenze normal sind. Die gemittelte C—C-Bindung beträgt 1.54 Å, die gemittelte C—O-Bindung 1.43 Å. Die C-6—C-7-Einfachbindung ist durch einen Mesomerie-Effekt der CO- und CC-Doppelbindung stark verkürzt, was von ähnlichen Bindungen her bekannt ist.

Die Winkel des Kohlenstoff-Fünfringes sind durchweg kleiner als die übrigen Tetraederwinkel. Die Summen der Winkel an den trigonalen Kohlenstoffatomen C-6 und C-8 sind  $360^\circ$ . Durch die Atome C-5, C-6, O-1, C-7, C-8, C-9, C-14 läßt sich eine beste Ebene legen:

$$\text{Ebenengleichung: } 0.10955 \cdot x + 0.94912 \cdot y - 0.29519 \cdot z - 3.649 = 0.$$

Die Atomabstände von dieser Ebene betragen:

C-5 + 0.21 Å	C-7 - 0.07 Å
C-6 - 0.00 Å	C-8 - 0.09 Å
O-1 - 0.05 Å	C-9 - 0.14 Å
	C-14 + 0.15 Å

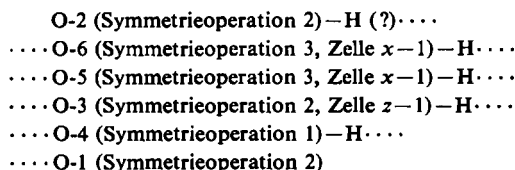


Tab. 1. Bindungslängen des Ecdysonmoleküls

Bindung	Bindungslängen (Å)	Mittlere Fehler (Å)	Bindung	Bindungslängen (Å)	Mittlere Fehler (Å)
C-1 — C-10	1.55	0.016	O-1 — C-6	1.25	0.013
C-1 — C-2	1.49		O-2 — C-14	1.42	
C-2 — C-3	1.53		O-3 — C-2	1.43	
C-3 — C-4	1.53		O-4 — C-3	1.42	
C-4 — C-5	1.51		O-5 — C-25	1.43	
C-5 — C-6	1.52		O-6 — C-22	1.45	
C-5 — C-10	1.53		C-21 — C-20	1.57	0.020
C-6 — C-7	1.43		C-22 — C-20	1.54	
C-7 — C-8	1.35		C-23 — C-22	1.51	
C-8 — C-9	1.52		C-24 — C-23	1.55	
C-8 — C-14	1.50		C-25 — C-24	1.54	0.025
C-9 — C-10	1.56		C-26 — C-25	1.56	
C-9 — C-11	1.52		C-27 — C-25	1.56	
C-10 — C-19	1.55				
C-11 — C-12	1.57				
C-12 — C-13	1.52				
C-13 — C-18	1.54				
C-13 — C-14	1.56				
C-13 — C-17	1.56				
C-14 — C-15	1.52				
C-15 — C-16	1.56				
C-16 — C-17	1.54				
C-17 — C-20	1.56				

Die Verbindung bildet im Kristall ein Netz von Wasserstoffbrücken aus, die wahrscheinlich für den niedrigen Temperaturfaktor des starren Gerüsts verantwortlich sind. Alle Sauerstoffatome nehmen an Wasserstoffbrückenbindungen teil (Tab. 3). Mit Ausnahme des Ketosauerstoffes und des Sauerstoffes an C-14 die *ein* Sauerstoffatom im Abstand von etwa 2.7 Å haben, sind alle Sauerstoffatome im Kristallverband zu zwei anderen Sauerstoffatomen benachbart.

Der Verlauf des Wasserstoffbrückensystems im Kristall läßt sich aus der Lage der nachgewiesenen Wasserstoffatome bestimmen:



(Symmetrieoperation 1 kennzeichnet das Molekül, dessen C-1- bis C-20-Gerüst in Tab. 4 angegeben ist).

O-2—H ist nicht nachgewiesen, da aber O-2 nur einen nächsten Sauerstoffnachbarn hat, ist die angegebene Wasserstofflage unbedingt zu fordern. Die Wasserstoffbrücke zwischen O-6 und O-5 ist intramolekular; sie kann auch in Lösung erhalten bleiben. Der Abstand zwischen O-3 (Symmetrieoperation 1) und O-4 (Symmetrieoperation 1) beträgt zwar 2.83 Å, ist aber keine intramolekulare Wasserstoffbindung. (Die Winkel C-2—O-3—O-4 und C-3—O-4—O-3 betragen 58 bzw. 59°.)

Tab. 2. Bindungswinkel im Ecdysonmolekül (das mittlere Atom ist das Scheitelatom). Der mittlere Fehler der Bindungswinkel beträgt etwa 1.5°

C-10-C-1 -C-2	114°	C-14-C-15-C-16	103°
C-1 -C-2 -C-3	111°	C-15-C-16-C-17	108°
C-2 -C-3 -C-4	110°	C-16-C-17-C-13	103°
C-3 -C-4 -C-5	112°	C-16-C-17-C-20	111°
C-4 -C-5 -C-10	113°	C-13-C-17-C-20	116°
C-4 -C-5 -C-6	110°	C-17-C-20-C-22	109°
C-19-C-10-C-1	109°	C-17-C-20-C-21	112°
C-19-C-10-C-5	108°	C-21-C-20-C-22	111°
C-19-C-10-C-9	111°	C-20-C-22-C-23	116°
C-5 -C-10-C-9	110°	C-22-C-23-C-24	114°
C-10-C-5 -C-6	111°	C-23-C-24-C-25	114°
C-5 -C-6 -C-7	118°	C-26-C-25-C-27	114°
C-6 -C-7 -C-8	122°	C-26-C-25-C-24	113°
C-7 -C-8 -C-14	122°	C-27-C-25-C-24	109°
C-8 -C-14-C-13	113°	O-1 -C-6 -C-7	123°
C-7 -C-8 -C-9	124°	O-1 -C-6 -C-5	119°
C-9 -C-8 -C-14	114°	O-2 -C-14-C-13	107°
C-8 -C-9 -C-11	114°	O-2 -C-14-C-15	108°
C-10-C-9 -C-8	111°	O-2 -C-14-C-8	105°
C-9 -C-11-C-12	113°	O-3 -C-2 -C-1	111°
C-10-C-9 -C-11	112°	O-3 -C-2 -C-3	110°
C-11-C-12-C-13	109°	O-4 -C-3 -C-2	110°
C-12-C-13-C-14	108°	O-4 -C-3 -C-4	109°
C-12-C-13-C-18	111°	O-5 -C-25-C-27	107°
C-18-C-13-C-17	113°	O-5 -C-25-C-26	107°
C-18-C-13-C-14	110°	O-5 -C-25-C-24	107°
C-14-C-13-C-17	99°	O-6 -C-22-C-23	112°
C-13-C-14-C-15	104°	O-6 -C-22-C-20	106°

Tab. 3. Bindungslängen und Bindungswinkel der an Wasserstoffbrücken beteiligten Sauerstoffatome

Bindungslängen			
O-2 (S.-O. 2)	O-6 (S.-O. 3, Z. x-1)	2.78 Å	
O-6 (S.-O. 3, Z. x-1)	O-5 (S.-O. 3, Z. x-1)	2.63	
O-5 (S.-O. 3, Z. x-1)	O-3 (S.-O. 2, Z. z-1)	2.75	
O-3 (S.-O. 2, Z. z-1)	O-4 (S.-O. 1)	2.83	
O-4 (S.-O. 1)	O-1 (S.-O. 2)	2.79	
Bindungswinkel (das mittlere Atom ist das Scheitelatom)			
C-14 (S.-O. 2)	O-2 (S.-O. 2)	O-6 (S.-O. 3, Z. x-1)	111°
C-22 (S.-O. 3, Z. x-1)	O-6 (S.-O. 3, Z. x-1)	O-5 (S.-O. 3, Z. x-1)	104°
C-25 (S.-O. 3, Z. x-1)	O-5 (S.-O. 3, Z. x-1)	O-3 (S.-O. 2, Z. z-1)	110°
C-2 (S.-O. 2, Z. z-1)	O-3 (S.-O. 2, Z. z-1)	O-4 (S.-O. 1)	113°
C-3 (S.-O. 1)	O-4 (S.-O. 1)	O-1 (S.-O. 2)	126°
C-6 (S.-O. 2)	O-1 (S.-O. 2)	O-4 (S.-O. 1)	118°
O-2 (S.-O. 2)	O-6 (S.-O. 3, Z. x-1)	O-5 (S.-O. 3, Z. x-1)	124°
O-6 (S.-O. 3, Z. x-1)	O-5 (S.-O. 3, Z. x-1)	O-3 (S.-O. 2, Z. z-1)	131°
O-5 (S.-O. 3, Z. x-1)	O-3 (S.-O. 2, Z. z-1)	O-4 (S.-O. 1)	109°
O-3 (S.-O. 2, Z. z-1)	O-4 (S.-O. 1)	O-1 (S.-O. 2)	94°

(S.-O. = Symmetrieoperation. Z. = Zelle.)

Die Symmetrieoperation 1 entspricht dem Molekül, dessen C-1- bis C-20-Gerüst in Tab. 4 angegeben ist.)

Tab. 4. Lageparameter und mittlere Fehler

Atom	$x$	$\sigma(x)$	$y$	$\sigma(y)$	$z$	$\sigma(z)$
C-1	0.30771	0.00025	0.39278	0.00101	0.63978	0.00097
C-2	.31002	.00022	.54160	.00104	.62014	.00108
C-3	.29186	.00022	.58797	.00096	.45122	.00107
C-4	.30972	.00024	.51274	.00096	.29932	.00108
C-5	.30790	.00022	.36132	.00092	.32191	.00102
C-6	.32531	.00022	.29280	.00103	.16608	.00105
C-7	.36491	.00022	.26997	.00089	.16781	.00108
C-8	.38586	.00022	.29285	.00086	.30984	.00103
C-9	.36963	.00022	.33659	.00098	.48240	.00099
C-10	.32623	.00023	.31264	.00100	.48983	.00103
C-19	.31714	.00032	.16122	.00109	.51311	.00144
C-11	.38983	.00028	.27642	.00173	.63765	.00109
C-12	.43367	.00027	.28941	.00147	.62372	.00113
C-13	.44695	.00022	.22401	.00091	.45650	.00110
C-18	.43658	.00028	.07315	.00104	.45108	.00149
C-14	.42789	.00021	.29966	.00086	.30295	.00101
C-15	.44879	.00022	.24814	.00108	.14549	.00104
C-16	.48981	.00024	.23239	.00118	.21282	.00115
C-17	.48915	.00022	.25071	.00107	.41064	.00112
C-20	.51859	.00025	.15640	.00108	.49858	.00135
O-1	.30507	.00016	.26578	.00076	.03893	.00076
O-2	.43664	.00016	.43877	.00061	.32263	.00087
O-3	.20732	.00015	.39101	.00077	.26352	.00077
O-4	.25280	.00015	.55631	.00074	.45347	.00084
O-5	.14842	.00017	.30950	.00062	.46835	.00104
O-6	.41794	.00018	.58158	.00069	.02491	.00123
C-21	.01564	.00033	.34143	.00178	.29872	.00152
C-22	.44189	.00023	.69646	.00101	.06257	.00152
C-23	.07412	.00026	.17465	.00101	.48857	.00200
C-24	.38889	.00029	.87135	.00114	.07751	.00198
C-25	.14683	.00029	.16544	.00110	.47558	.00222
C-26	.14593	.00054	.11387	.00241	.28413	.00358
C-27	.18203	.00038	.11795	.00164	.57980	.00339
1 $\beta$ -H	.2233		.6250		.1667	
1 $\alpha$ -H	.1692		.6416		.2167	
2 $\alpha$ -H	.1625		.4416		.1250	
3 $\alpha$ -H	.2966		.6916		.4541	
4 $\alpha$ -H	.3391		.5666		.2667	
4 $\beta$ -H	.2966		.5249		.1999	
5 $\beta$ -H	.2808		.3167		.3167	
7-H	.3725		.2333		.0458	
1. 19-H	.1733		.8416		.1167	
2. 19-H	.2917		.1417		.4666	
3. 19-H	.3292		.0999		.4333	
12 $\alpha$ -H	.0583		.6166		.1417	
1. 18-H	.4092		.0750		.4250	
2. 18-H	.4525		.0250		.3667	
15 $\alpha$ -H	.4500		.2917		.0333	
15 $\beta$ -H	.4416		.1500		.0500	
16 $\alpha$ -H	.5083		.2917		.1458	

Tab. 4. (Fortsetzung)

Atom	x	$\sigma(x)$	y	$\sigma(y)$	z	$\sigma(z)$
16 $\beta$ -H	0.4983		0.1250		0.1916	
17 $\alpha$ -H	.4958		.3500		.4500	
20-H	.4833		.5416		.0250	
H an O-3	.2225		.4416		.3250	
H an O-4	.2375		.6166		.4916	
H an O-5	.1733		.3458		.3750	
H an O-6	.1083		.4000		.4833	
21-H	.0150		.2500		.2250	
22-H	.4416		.7250		.1833	
1. 23-H	.0558		.0917		.5000	
2. 23-H	.0708		.1750		.3417	

Beim Vergleich der individuellen isotropen Temperaturkoeffizienten sind definierte Unterschiede der einzelnen Atome zu beobachten. Die Atome des starren Gerüsts haben durchschnittlich einen Temperaturfaktor von 1.5 Å<sup>2</sup>, die beiden angularen Methylgruppen von 2.8 Å<sup>2</sup>. Die Ketten weisen einen mittleren Temperaturfaktor von 3.0 Å<sup>2</sup>, die Methylgruppen C-26 und C-27 von 6.0 Å<sup>3</sup> auf. Diese Werte zeigen, daß (wie man auch erwarten wird) äußere Gruppen an langen Ketten besonders stark schwingen.

Tab. 5. Temperaturkoeffizienten definiert nach  
 $\exp -(\beta_{11} \cdot h^2 + \beta_{22} \cdot k^2 + \beta_{33} \cdot l^2 + 2\beta_{12} \cdot hk + 2\beta_{13} \cdot hl + 2\beta_{23} \cdot kl)$

Atom	$\beta_{11}$	$\beta_{22}$	$\beta_{33}$	$\beta_{12}$	$\beta_{13}$	$\beta_{23}$
C-1	0.0004528	0.0094926	0.0007954	0.0005346	0.0007184	0.0018829
C-2	.0001479	.0098234	.0050684	.0001773	.0004326	-.0025631
C-3	.0003262	.0069277	.0051960	.0005156	-.0000509	-.0009210
C-4	.0003519	.0064447	.0041929	-.0000008	.0001985	.0004913
C-5	.0002430	.0065368	.0028413	.0002466	-.0000481	.0009767
C-6	.0002817	.0082424	.0038341	.0001295	-.0000104	-.0000728
C-7	.0003267	.0055157	.0052293	.0006065	-.0000813	-.0002686
C-8	.0003076	.0045058	.0038429	.0006347	-.0000096	.0002282
C-9	.0003013	.0087768	.0012556	.0008076	.0002469	.0013642
C-10	.0004432	.0077002	.0018855	.0007975	.0006256	.0024564
C-19	.0008878	.0081975	.0099815	.0000791	.0006326	.0060452
C-11	.0004491	.0264249	.0020306	.0017015	-.0002350	.0009661
C-12	.0005135	.0171450	.0039124	.0013453	-.0008951	-.0037127
C-13	.0003567	.0050206	.0049517	.0002647	-.0005280	.0008315
C-18	.0006027	.0068243	.0148738	-.0000888	-.0009028	.0028821
C-14	.0002795	.0047406	.0040145	.0001211	.0001089	.0007947
C-15	.0002574	.0102746	.0049864	.0006638	.0002089	-.0011432
C-16	.0003090	.0108301	.0070560	.0005910	-.0001494	-.0011502
C-17	.0002354	.0079291	.0076559	.0005910	-.0003340	-.0006417
C-20	.0004052	.0082150	.0126429	.0007666	-.0011689	-.0009317
O-1	.0004120	.0112591	.0046232	.0008013	-.0012021	-.0024355
O-2	.0004017	.0041177	.0098970	-.0000377	-.0001920	-.0010561
O-3	.0002106	.0113328	.0057685	-.0002332	-.0004496	.0045308
O-4	.0002282	.0116782	.0076276	.0008391	-.0003348	-.0051493
O-5	.0004523	.0042599	.0164093	-.0005828	.0016441	-.0034102
O-6	.0003920	.0056057	.0270011	-.0007820	-.0016138	.0047110
C-21	.0007916	.0212464	.0101411	-.0018277	.0013371	.0051025
C-22	.0003612	.0066322	.0184110	-.0008141	-.0016233	.0037933
C-23	.0004222	.0057705	.0286442	-.0003755	.0011691	-.0050380
C-24	.0004502	.0073958	.0306892	-.0000506	-.0017505	-.0042731
C-25	.0004690	.0059688	.0329375	-.0005795	.0017967	-.0022227
C-26	.0015500	.0339347	.0827680	-.0047633	.0091598	-.0481152
C-27	.0006448	.0147949	.0717770	.0012194	.0025807	.0177744

Tab. 6. Länge ( $R_i$ ) in Å und Winkel der Hauptachsen der Schwingungsellipsoide

Atom	$i$	$R_i$	$x$ -Achse	Winkel mit $y$ -Achse	$z$ -Achse
C-1	1	0.028	121°	90°	31°
	2	.167	43	120	63
	3	.213	115	149	105
C-2	1	.065	141	79	53
	2	.134	51	79	40
	3	.227	92	164	75
C-3	1	.121	113	70	31
	2	.130	36	108	59
	3	.199	116	152	81
C-4	1	.109	104	95	15
	2	.153	14	92	75
	3	.180	91	174	95
C-5	1	.088	100	79	165
	2	.122	16	101	102
	3	.185	102	164	97
C-6	1	.108	91	90	178
	2	.133	5	95	91
	3	.203	95	174	89
C-7	1	.113	143	54	95
	2	.125	92	83	7
	3	.189	126	143	85
C-8	1	.097	135	50	107
	2	.109	75	100	162
	3	.180	131	138	91
C-9	1	.054	82	85	170
	2	.113	26	115	84
	3	.226	114	153	97
C-10	1	.045	103	99	16
	2	.136	37	127	85
	3	.228	124	141	105
C-19	1	.103	82	52	141
	2	.228	41	125	108
	3	.255	130	123	121
C-11	1	.071	104	84	164
	2	.147	21	104	104
	3	.374	105	164	91
C-12	1	.077	112	93	157
	2	.161	32	114	108
	3	.314	111	154	78
C-13	1	.094	121	71	142
	2	.157	64	134	124
	3	.171	137	129	76
C-18	1	.155	118	51	128
	2	.186	43	47	81
	3	.242	120	67	39
C-14	1	.106	81	77	164
	2	.131	20	110	86
	3	.159	108	155	104
C-15	1	.098	137	73	51
	2	.134	52	96	38
	3	.235	106	162	85
C-16	1	.129	161	75	100
	2	.144	98	79	13
	3	.240	105	162	82

Tab. 6. (Fortsetzung)

Atom	<i>i</i>	<i>R<sub>i</sub></i>	<i>x</i> -Achse	Winkel mit <i>y</i> -Achse	<i>z</i> -Achse
C-17	1	0.101	155°	72°	105°
	2	.153	100	74	19
	3	.210	111	155	79
C-20	1	.107	145	71	117
	2	.190	94	42	48
	3	.240	123	126	54
O-1	1	.048	125	89	145
	2	.166	45	121	120
	3	.258	115	149	73
O-2	1	.136	103	154	112
	2	.159	23	109	76
	3	.180	109	107	26
O-3	1	.085	52	103	139
	2	.127	142	101	123
	3	.253	97	23	111
O-4	1	.098	152	68	75
	2	.122	68	74	28
	3	.267	105	151	67
O-5	1	.115	142	59	108
	2	.128	71	38	58
	3	.265	121	109	38
O-6	1	.110	36	126	84
	2	.162	119	139	116
	3	.311	70	72	153
C-21	1	.085	125	70	138
	2	.240	43	103	131
	3	.349	112	156	97
C-22	1	.096	28	110	71
	2	.162	82	33	58
	3	.276	63	65	142
C-23	1	.145	134	44	88
	2	.156	47	51	68
	3	.311	104	107	22
C-24	1	.135	31	111	111
	2	.189	115	155	95
	3	.323	73	103	22
C-25	1	.131	144	57	101
	2	.181	60	34	73
	3	.331	108	98	20
C-26	1	.108	115	125	133
	2	.206	35	126	91
	3	.682	112	125	43
C-27	1	.174	154	115	91
	2	.221	67	145	65
	3	.503	101	68	25

(Zur Berechnung von C-1 wurden die Temperaturparameter eines früheren Kleinste-Quadrate-Zyklus verwendet, da die Parameter des letzten Zyklus nicht positiv definit waren. Bei einigen Atomen wurden auf die Achsenwinkel Symmetrioperationen angewendet, um die Schwingungsellipsoide eines einzigen Moleküls darzustellen.)

Das Molekül schwingt ausgesprochen anisotrop (Tab. 5 und 6). Die Temperaturbewegung des starren Gerüsts ist am größten in Richtung der kurzen Achse des Moleküls, während die Bewegung in Richtung der langen Molekülachse sehr gering ist (Abbild. 7).







H K F <sub>O</sub> F <sub>C</sub>				H K F <sub>O</sub> F <sub>C</sub>				H K F <sub>O</sub> F <sub>C</sub>				H K F <sub>O</sub> F <sub>C</sub>							
1 = 2				1 = 2				1 = 2				1 = 2							
9	3	30.92	29.78	31	3	7.71	7.30	12	0	29.95	26.31	12	7	15.53	16.73	1	10	3.71	2.94
11	3	12.78	11.85	33	3	2.96	2.24	14	0	10.38	9.98	14	7	6.95	6.24	3	10	1.31	1.10
13	3	12.78	11.78	35	3	6.90	6.26	16	0	8.64	7.02	16	7	13.97	14.10	5	10	5.96	6.51
15	3	14.04	10.42	37	3	4.33	4.74	18	0	21.74	19.25	18	7	9.51	9.16	7	10	8.79	8.32
17	3	15.71	12.87	39	3	1.88	2.32	20	0	9.16	5.16	20	7	10.12	9.11	9	10	4.74	2.71
19	3	9.68	7.13	41	3	1.39	1.11	22	0	1.95	2.20	22	7	12.01	12.94	11	10	4.74	2.71
21	3	4.76	3.67	43	4	6.63	5.68	24	0	13.30	11.19	23	7	6.47	4.09	13	10	4.52	3.54
23	3	16.17	15.13	28	4	6.69	5.55	1	0	18.03	13.24	25	7	4.20	4.32	15	10	1.17	1.93
25	3	13.36	11.24	30	4	5.71	5.35	2	1	29.68	29.05	27	0	6.34	5.05	17	10	3.52	3.99
1	4	15.83	16.43	32	4	4.05	3.92	4	1	41.77	41.71	29	0	6.25	6.07	19	10	5.14	4.24
3	4	15.74	10.43	34	4	3.85	2.88	6	1	27.03	27.38	31	0	1.45	0.62	21	10	6.97	1.37
5	4	12.20	9.49	36	4	3.34	2.83	8	1	18.80	17.43	33	0	6.75	3.22	23	10	5.77	6.24
7	4	18.80	15.59	38	4	4.05	2.99	10	1	6.43	4.90	35	0	5.64	5.32	25	10	2.77	3.93
9	4	5.92	2.85	40	4	3.45	2.23	12	1	23.71	21.74	38	0	4.22	2.66	27	10	0.50	2.30
11	4	9.02	7.91	42	4	1.59	1.89	14	1	26.03	26.17	40	0	12.22	13.95	29	10	4.40	4.40
13	4	25.19	23.75	27	5	7.25	6.02	16	1	17.98	14.60	42	0	8.61	9.61	11	4	4.79	3.96
15	4	11.62	9.38	29	5	9.30	8.83	18	1	6.16	3.38	44	0	6.73	6.85	3	11	5.02	4.84
17	4	4.89	3.13	31	5	5.37	4.03	20	1	12.09	8.27	27	1	5.83	5.05	5	11	5.65	4.59
19	4	14.14	13.28	33	5	4.91	4.98	22	1	15.17	13.05	29	1	12.20	11.30	7	11	1.09	1.25
21	4	6.72	6.41	35	5	7.82	7.99	24	1	17.63	15.73	31	1	7.98	7.06	8	11	1.07	1.15
23	4	7.09	7.40	37	5	7.62	7.45	26	2	23.36	22.45	33	1	8.01	7.25	10	11	1.09	1.48
25	4	8.23	6.67	39	5	4.99	5.05	2	2	22.87	19.93	35	1	8.11	7.76	12	11	3.74	4.01
1	5	8.44	5.72	41	5	3.63	4.10	4	2	25.62	24.69	37	1	2.48	2.94	14	11	2.67	3.45
3	5	24.14	21.16	43	7	3.67	4.40	6	2	38.85	35.37	39	1	5.92	5.67	16	11	3.71	5.23
5	5	11.57	9.07	45	7	4.91	5.03	8	2	43.58	42.25	41	1	9.06	9.07	18	11	7.55	10.60
7	5	20.85	17.49	30	7	1.15	1.59	10	2	17.28	15.53	43	1	0.80	0.49	2	12	1.16	1.73
9	5	13.57	12.46	32	7	3.35	3.82	12	2	26.19	25.43	26	2	5.35	4.17	4	12	3.00	5.55
11	5	8.44	5.40	34	7	3.35	4.65	14	2	9.60	7.37	28	2	14.33	13.28	6	12	1.09	3.14
13	5	16.14	15.37	3	8	20.67	19.69	16	2	7.97	7.53	30	2	10.26	10.02	8	12	1.46	2.35
15	5	6.41	4.85	2	8	11.45	11.05	18	2	6.06	4.01	32	2	8.42	7.43	10	12	1.61	3.61
17	5	8.64	8.10	4	8	12.81	12.62	20	2	15.88	14.96	34	2	3.47	4.61	12	12	1.38	2.55
19	5	2.76	1.11	6	8	10.05	9.83	22	2	9.58	7.97	36	2	1.30	0.97	1	13		
21	5	13.23	12.37	9	8	5.17	5.62	24	2	22.03	20.44	38	2	3.58	2.82	2	14	38.19	42.23
23	5	12.08	9.99	11	8	10.02	10.97	0	3	5.65	4.71	40	2	4.09	3.45	4	14	24.05	24.43
25	5	9.41	7.95	13	8	13.14	13.14	2	3	8.16	5.52	42	2	3.37	2.78	6	14	20.24	17.02
1	6	21.11	17.99	15	8	4.82	5.50	0	3	8.36	7.68	44	2	5.29	9.05	11	15	11.09	14.48
3	6	4.63	3.74	16	8	1.38	1.29	6	3	29.70	28.61	26	3	14.22	13.98	13	15	28.53	25.16
5	6	23.95	21.59	18	8	10.54	10.32	8	3	22.21	18.41	28	3	3.70	2.67	15	15	20.57	17.57
7	6	9.77	8.13	22	8	6.57	7.25	10	3	28.71	25.93	30	3	9.45	9.97	17	15	17.01	14.98
9	6	6.27	3.37	24	8	4.91	3.25	12	3	21.54	17.75	32	3	5.98	5.67	19	15	2.06	8.78
11	6	17.02	17.32	24	8	3.05	2.49	14	3	5.30	5.05	34	3	7.56	6.58	21	15	31.17	29.54
13	6	9.14	7.17	26	8	3.33	2.80	16	3	8.38	5.69	36	3	8.36	6.97	23	15	2.18	0.76
15	6	6.74	5.04	28	8	6.14	6.72	18	3	10.95	6.07	38	3	6.51	6.62	25	15	19.30	17.25
17	6	10.60	9.35	32	8	3.08	4.59	20	3	15.70	13.79	40	3	1.74	3.08	6	14	14.02	11.13
19	6	16.62	15.16	32	8	4.45	3.75	22	3	5.40	4.49	42	3	8.04	6.09	8	14	6.07	33.65
21	6	16.00	13.39	0	9	9.08	8.01	24	3	2.61	2.48	27	4	8.72	7.57	10	14	33.60	30.60
23	6	7.63	6.89	2	9	11.34	11.98	0	4	19.69	18.04	29	4	11.47	10.09	12	14	14.44	8.74
25	6	7.07	6.52	4	9	1.39	2.14	2	4	21.24	19.24	31	4	6.30	5.95	14	14	9.28	7.98
27	6	8.66	7.54	6	9	8.41	8.25	4	4	21.03	18.61	33	4	3.49	2.31	16	14	26.54	27.48
29	6	6.85	6.81	8	9	4.77	5.55	6	4	8.47	7.65	35	4	5.24	4.76	18	14	8.16	8.47
31	6	7.37	6.94	10	9	7.25	8.25	8	4	18.40	15.99	37	4	2.51	1.19	20	14	2.05	1.77
33	6	6.51	7.82	12	9	5.43	5.40	10	4	9.63	7.74	39	4	3.40	4.62	21	14	2.50	3.36
35	6	10.03	10.83	14	9	1.34	2.86	12	4	13.69	12.28	41	4	0.80	0.92	23	14	16.42	12.50
37	6	0.91	0.24	16	9	8.44	8.03	14	4	7.61	5.24	26	5	14.00	15.15	25	14	1.54	0.97
39	6	4.49	4.05	18	9	1.27	1.03	16	4	6.96	5.94	38	5	10.00	9.43	1	15	32.77	30.79
1	7	17.07	13.82	20	9	1.22	0.74	18	4	3.95	2.74	30	5	11.19	9.97	3	15	8.88	7.11
3	7	18.95	17.22	22	9	1.15	1.02	20	4	19.39	19.99	32	5	1.54	2.12	5	15	46.61	44.03
5	7	6.79	6.23	23	9	3.53	3.30	22	4	7.56	6.23	34	5	8.09	8.30	7	15	2.10	8.66
7	7	14.64	13.08	25	9	8.44	8.25	24	4	6.44	5.13	36	5	1.30	1.08	8	15	34.94	31.78
9	7	13.77	11.61	27	9	2.92	3.61	0	5	12.56	10.74	38	5	1.79	3.34	10	15	32.77	30.79
11	7	8.84	6.43	29	9	0.78	0.41	2	5	1.98	2.79	40	5	6.88	7.09	3	15	24.64	22.97
13	7	14.70	14.24	0	10	4.91	3.52	4	5	7.95	5.14	27	7	9.20	9.15	5	15	11.67	7.63
15	7	12.61	12.50	2	10	8.29	7.20	6	5	11.03	8.93	29	7	8.29	9.77	7	15	18.56	12.26
17	7	6.19	6.64	4	10	1.30	2.77	8	5	10.58	9.07	31	7	6.22	6.99	9	15	11.94	11.36
19	7	17.85	17.65	6	10	1.29	0.17	10	5	6.26	5.85	33	7	3.09	3.54	11	15	15.56	13.84
21	7	3.91	3.49	8	10	4.78	4.51	12	5	10.84	8.19	35	7	2.01	1.29	13	15	12.75	8.97
23	7	14.06	13.56	10	10	6.65	6.23	14	5	4.06	2.88	1	8	16.81	15.87	15	15	3.10	3.21
24	0	11.73	7.17	12	10	1.23	0.86	16	5	11.25	8.71	3	8	11.41	11.36	16	15	12.59	11.36
28	0	11.42	0.67	14	10	6.76	5.57	18	5	14.69	14.69	5	8	18.45	18.23	18	15	7.91	6.37
30	0	16.28	15.40	16	10	3.61	3.45	20	5	1.28	1.15	7	8	7.53	6.81	20	15	20.39	17.73
32	0	1.45	1.21	18	10	5.52	4.69	22	5	15.17	16.28	8	8	3.90	3.25	22	15	11.84	8.44
33	0	6.11	5.83	20	10	3.20	3.79	24	5	10.78	10.47	10	8	9.47	8.60	0	16	12.28	10.04
35	0	11.82	11.49	22	10	3.46	5.03	0	6	9.09	7.85	12	8	6.53	4.53	4	17	11.49	6.69
37	0	1.32	1.69	24	10	2.56	2.86	2	6	8.05	7.06	14	8	13.70	12.81	6	17		

H K F <sub>0</sub> F <sub>c</sub>				H K F <sub>0</sub> F <sub>c</sub>				H K F <sub>0</sub> F <sub>c</sub>				H K F <sub>0</sub> F <sub>c</sub>				H K F <sub>0</sub> F <sub>c</sub>			
1 - 3				1 - 3				1 - 3				1 - 3				1 - 4			
16	6	12.09	12.32	5	8	10.88	8.06	13	4	6.97	5.91	28	3	5.28	4.53	10	1	13.88	11.88
18	6	17.93	18.39	7	8	8.07	4.52	15	4	8.66	7.03	30	3	6.04	6.85	12	1	14.91	13.71
20	6	4.30	4.30	9	6	4.30	8.87	17	4	7.42	6.43	32	3	2.80	2.39	14	1	14.91	13.71
22	6	17.24	16.39	11	8	12.97	13.88	19	4	4.43	3.95	34	3	6.53	5.58	16	1	20.95	19.92
24	6	3.04	4.61	13	8	7.31	5.89	21	4	12.75	11.32	36	3	2.07	1.65	18	1	14.98	12.32
26	6	5.97	5.46	15	8	7.86	8.14	23	4	3.91	1.74	38	3	1.14	1.33	20	1	7.91	5.71
28	6	6.39	6.77	17	8	6.18	3.77	25	4	22.13	21.80	41	3	5.78	6.29	21	4	5.78	6.29
30	6	3.15	4.93	19	8	9.03	8.42	1	5	11.48	9.25	26	4	10.70	8.57	23	1	25.80	25.70
32	6	4.07	4.14	21	8	9.78	9.55	3	5	7.51	5.07	28	4	5.63	4.92	25	1	23.77	24.25
34	6	1.98	2.08	23	8	2.98	2.91	5	5	3.88	2.02	30	4	2.62	2.25	1	2	20.89	19.40
36	6	3.15	5.49	25	8	8.88	2.16	24	3	8.82	7.37	32	4	1.18	1.92	3	2	20.02	17.44
0	7	17.41	14.73	27	8	6.91	7.24	2	4	20.42	18.41	34	4	9.95	9.88	4	2	1.19	4.93
2	7	19.29	16.84	29	8	3.69	5.09	6	4	8.01	4.84	36	4	5.34	4.71	6	2	30.30	26.99
4	7	17.50	13.19	31	8	5.04	5.59	12	4	11.40	11.18	38	4	1.00	1.88	8	2	15.89	12.61
6	7	23.96	21.83	0	9	1.06	0.15	18	4	12.89	10.59	40	4	0.79	2.49	10	2	6.79	5.19
8	7	11.92	9.96	1	9	5.81	4.47	22	4	5.03	4.25	26	5	7.25	6.66	12	2	12.76	9.67
10	7	9.58	8.29	3	9	4.24	3.37	0	5	13.98	12.85	28	5	10.21	9.00	14	2	13.37	11.27
12	7	10.63	9.65	5	9	9.09	8.01	4	5	6.58	5.48	30	5	8.39	7.36	16	2	1.39	2.50
14	7	1.51	1.79	7	9	4.45	3.78	7	5	25.33	21.77	32	5	6.28	6.76	18	2	11.46	10.61
15	7	11.16	11.45	9	9	7.20	6.97	9	5	21.19	18.32	34	5	5.53	6.45	20	2	12.38	10.55
17	7	4.30	3.69	11	9	4.82	2.98	11	5	16.77	15.36	36	5	6.05	7.06	22	2	16.09	13.85
19	7	12.22	7.77	13	9	1.01	1.34	1	5	12.01	11.41	38	5	1.21	6.92	24	2	10.36	9.22
20	7	8.24	6.22	15	9	0.98	1.71	15	5	9.58	7.35	25	7	8.88	8.47	0	3	6.95	3.22
22	7	3.30	2.32	17	9	4.04	3.44	17	5	1.12	1.22	28	7	1.28	1.99	2	3	16.00	12.72
24	7	5.90	5.48	19	9	1.29	0.91	19	5	18.09	16.96	30	7	0.83	1.61	4	3	20.73	20.05
26	0	24.14	24.33	21	9	4.22	4.24	21	5	5.75	5.85	32	7	0.73	0.72	6	3	27.34	23.83
28	0	2.89	2.89	23	9	2.68	2.42	1	5	24.48	22.89	34	7	10.60	1.07	8	3	17.38	14.92
30	0	15.76	15.65	25	9	7.96	8.34	25	5	7.18	5.12	0	8	17.90	14.41	10	3	6.86	4.14
32	0	12.66	9.86	27	9	3.61	4.57	1	6	17.39	14.68	2	8	8.28	8.28	12	3	9.10	6.32
34	0	2.81	3.52	29	9	4.02	5.67	3	6	20.92	19.48	4	8	23.60	23.23	14	3	6.04	3.76
36	0	2.89	3.34	17	10	3.65	3.45	5	6	29.55	28.92	6	8	6.25	7.06	16	3	16.49	15.92
38	0	1.31	3.37	3	10	4.43	3.37	0	6	24.48	22.89	8	8	10.88	10.39	18	3	7.31	3.46
39	0	9.80	9.46	4	10	6.27	4.18	9	6	7.59	5.23	10	8	5.04	2.70	20	3	7.85	5.71
41	0	9.06	10.63	6	10	6.06	5.63	11	6	7.39	5.75	12	8	20.48	20.76	22	3	15.17	12.40
43	0	7.69	5.65	7	10	5.03	4.30	13	6	8.71	6.87	14	8	4.26	3.60	24	3	1.37	3.04
0	2	19.26	27.35	9	10	1.88	1.33	15	6	10.43	8.16	16	8	7.13	6.72	0	4	9.78	8.00
2	2	27.32	26.43	9	10	1.32	2.18	17	6	8.45	6.84	18	8	2.92	1.76	2	5	7.00	6.03
4	2	18.72	18.59	11	10	4.07	3.11	19	6	14.30	13.81	20	8	7.78	7.38	4	5	11.99	9.44
6	2	40.22	38.51	13	10	3.52	4.16	21	6	16.20	15.33	22	8	5.46	4.81	5	5	13.62	11.27
8	2	16.44	13.99	15	10	0.84	0.95	23	6	11.60	10.30	24	8	0.92	1.41	7	5	12.95	11.46
10	2	6.57	6.57	17	10	2.52	1.33	25	6	2.52	1.33	26	8	3.92	3.33	9	5	9.68	8.36
11	2	26.34	24.26	19	10	1.48	2.30	27	6	5.21	4.15	28	8	4.08	3.96	11	5	5.59	3.98
13	2	8.27	8.24	21	10	0.94	1.63	29	6	2.22	2.49	30	8	2.68	3.41	13	5	7.74	6.32
15	2	21.70	19.24	23	10	3.30	3.41	31	6	5.98	6.43	32	8	3.61	3.71	15	5	8.41	7.91
17	2	10.61	7.75	0	11	4.99	5.44	33	6	2.21	2.93	2	9	6.36	5.10	17	5	5.58	3.65
19	2	16.22	15.25	2	11	7.44	7.45	1	6	17.46	16.41	4	9	8.46	6.26	19	5	11.56	9.46
21	2	15.14	14.13	4	11	4.07	4.00	3	6	1.74	3.24	6	9	6.66	5.22	21	5	12.52	12.34
23	2	28.77	28.27	6	11	4.13	4.44	5	7	22.74	21.46	8	9	6.28	4.86	23	5	11.00	9.65
25	2	7.22	4.64	8	11	4.16	4.17	7	7	14.84	11.69	10	9	3.59	2.59	25	5	8.73	7.74
27	2	19.26	18.35	9	11	0.73	1.35	5	7	29.97	28.81	12	9	9.03	9.05	27	5	8.79	5.58
29	2	20.15	19.45	11	11	4.05	4.98	7	7	10.04	9.08	14	9	5.82	5.82	29	5	10.94	8.40
31	2	13.81	11.97	14	11	4.15	0.83	7	7	10.36	9.14	16	9	5.82	6.53	5	6	22.46	20.78
33	2	1.19	2.06	16	11	0.57	1.67	11	7	11.25	11.05	18	9	5.28	4.95	7	6	15.01	14.10
35	2	6.18	4.77	18	11	3.00	3.34	13	7	16.13	15.92	20	9	3.97	3.27	9	6	5.84	3.90
37	2	8.68	7.38	20	11	1.52	1.30	16	7	1.52	1.30	22	9	3.72	2.87	11	6	9.78	5.58
39	2	12.25	13.05	1	12	29.43	25.29	18	7	12.00	11.25	24	9	2.64	1.45	13	6	16.13	15.57
41	2	3.91	4.23	3	12	13.71	10.95	21	7	9.96	8.58	26	9	0.95	2.30	15	6	11.03	9.38
43	2	7.92	9.52	5	12	26.23	21.46	23	7	11.96	11.43	28	9	3.02	3.07	17	6	7.00	5.17
27	2	12.00	10.77	7	12	22.59	23.66	25	7	7.14	8.07	0	10	5.69	5.06	19	6	7.59	8.05
29	2	18.02	17.15	9	12	19.53	14.91	27	0	30.13	30.21	2	10	4.13	4.82	21	6	9.78	8.29
31	2	10.22	9.54	11	12	17.15	13.09	29	0	4.99	4.63	5	10	1.36	2.29	23	6	8.36	6.35
33	2	11.91	11.21	13	12	0.65	6.44	31	0	16.09	16.32	10	10	3.91	3.86	25	6	7.50	7.13
35	2	1.14	1.13	15	12	10.80	7.21	33	0	8.75	7.27	12	10	3.35	3.16	27	6	1.77	2.21
37	2	9.82	8.46	17	12	1.61	3.76	35	0	6.54	4.83	14	10	2.44	2.38	29	6	5.52	4.58
39	2	0.93	0.89	19	12	19.92	18.93	38	0	12.03	11.50	16	10	2.58	3.15	31	6	1.04	1.84
41	2	8.08	7.24	22	12	27.74	27.57	40	0	14.99	16.23	18	10	0.77	1.24	33	6	3.92	4.79
43	2	4.61	4.54	24	12	46.92	49.88	42	0	0.75	2.00	20	10	1.41	2.73	34	6	4.66	5.92
27	3	10.98	8.12	0	2	32.54	31.72	1	1	37.06	38.01	22	10	1.24	2.23	0	7	8.60	6.95
29	3	13.78	13.81	2	2	7.61	6.43	3	1	8.96	8.14	24	10	2.89	2.40	2	7	11.17	23.49
31	3	3.03	3.38	4	2	36.90	27.49	5	1	18.51	16.13	1	11	6.28	3.95	4	7	13.95	12.88
33	3	10.64	9.89	6	2	38.46	37.98	7	1	34.01	34.06	3	11	4.82	5.08	6	7	18.76	19.28
35	3	1.89	1.35	9	2	36.52	33.43	9	1	30.86	27.48	5	11	5.81	5.84	8	7	9.70	10.41
37	3	3.21	3.47	12	2	12.15	8.96	12	1	20.14	18.02	7	11	4.63	5.00	10	7	5.15	3.97
39	3	5.98	4.73	14	2	13.75	21.51	14	1	28.45	18.01	9	11	1.49	1.97	12	7		

H	K	F <sub>O</sub>	F <sub>C</sub>	H	K	F <sub>O</sub>	F <sub>C</sub>	H	K	F <sub>O</sub>	F <sub>C</sub>	H	K	F <sub>O</sub>	F <sub>C</sub>	H	K	F <sub>O</sub>	F <sub>C</sub>
31	2	9.00	9.01	20	0	1.54	2.94	38	1	5.92	5.36	18	0	8.48	6.94	26	4	1.52	1.66
33	2	4.47	6.08	22	9	8.33	8.25	40	1	7.18	7.75	20	0	8.08	6.16	28	6	7.24	7.24
35	2	2.22	3.03	24	0	16.91	14.91	26	2	8.96	10.59	22	0	16.23	14.71	30	4	11.37	4.48
37	2	1.18	1.42	1	1	24.24	22.61	28	2	9.38	7.90	24	0	6.03	5.07	32	4	10.9	10.76
39	2	5.95	5.31	3	1	28.53	26.19	30	2	4.44	3.77	0	1	26.03	22.03	34	6	5.43	4.92
41	2	5.83	7.58	5	1	10.28	8.01	32	2	7.16	5.44	1	1	10.11	8.36	36	6	8.37	8.35
27	3	17.85	16.64	7	1	4.54	32.81	34	2	4.76	5.65	3	1	6.76	5.87	28	5	5.7	5.38
29	3	9.23	7.78	9	1	14.36	11.64	36	2	2.28	2.84	5	1	16.43	14.68	30	5	4.45	5.44
31	3	6.43	5.00	11	1	6.98	6.24	38	2	4.36	3.91	6	1	3.84	1.76	32	5	4.80	5.77
32	3	1.25	1.47	13	1	7.87	5.37	40	2	5.56	5.45	8	1	13.52	11.16	34	5	7.80	9.38
34	3	5.26	4.46	15	1	16.22	16.07	26	3	9.31	7.61	10	1	7.96	6.52	1	6	8.41	7.05
36	3	5.23	6.49	17	1	17.40	17.70	28	3	7.21	6.94	12	1	10.93	8.97	3	6	14.67	11.59
38	3	3.87	2.75	20	1	16.91	14.90	30	3	5.92	4.85	15	1	11.19	11.28	5	6	9.74	8.48
40	3	0.81	1.30	22	1	11.43	9.87	33	3	5.59	3.47	17	1	11.85	10.78	7	6	3.80	4.35
1	4	0.99	1.52	24	1	18.92	16.72	35	3	3.28	4.81	19	1	4.83	3.17	9	6	2.90	1.63
3	4	14.46	14.17	2	2	5.89	6.78	37	3	6.89	5.59	21	1	14.20	13.92	11	6	16.77	11.18
5	4	6.35	8.7C	4	2	18.00	15.80	39	3	0.99	0.47	22	1	10.78	8.66	13	6	4.03	2.43
7	4	14.53	12.85	5	2	26.24	24.53	0	4	22.43	22.28	24	1	1.59	1.63	15	6	3.90	5.52
9	4	16.80	13.37	7	2	31.29	26.91	2	4	9.83	9.31	0	2	10.08	9.09	17	6	5.86	4.87
11	4	3.96	1.60	9	2	18.77	14.81	4	4	8.77	6.50	2	2	7.07	7.03	19	6	4.11	3.21
13	4	12.37	12.28	11	2	12.91	10.83	6	4	6.25	6.26	4	2	7.65	7.20	21	6	3.99	3.78
15	4	10.31	7.65	13	2	8.35	7.12	8	4	12.53	9.61	6	2	16.13	15.05	23	6	9.08	9.32
17	4	7.33	5.17	15	2	15.76	12.82	10	4	3.04	3.75	8	2	16.18	13.41	25	6	7.71	7.96
19	4	8.41	9.01	17	2	9.65	6.14	12	4	16.99	13.38	10	2	16.23	15.23	27	6	5.10	6.57
21	4	8.66	5.12	19	2	11.31	10.09	14	4	12.43	12.96	12	2	11.71	9.42	29	6	6.93	5.02
23	4	16.78	14.04	21	2	4.01	3.07	16	4	8.10	6.93	14	2	8.57	5.87	31	6	6.05	4.46
25	4	16.01	16.12	23	2	27.02	26.87	18	4	11.97	11.96	16	2	15.23	13.95	33	6	3.05	2.05
27	4	4.89	2.90	25	2	13.28	11.03	20	4	8.24	8.10	18	2	5.95	5.29	1	7	7.98	6.52
29	4	12.18	12.78	1	3	9.98	6.36	22	4	3.69	2.66	20	2	7.13	5.87	3	7	14.41	14.48
31	4	1.73	2.38	3	3	21.78	19.54	24	4	12.45	12.79	22	2	16.21	15.80	5	7	9.59	8.33
33	4	3.36	3.63	5	3	15.45	8.77	26	4	7.96	8.11	24	2	9.73	9.55	7	7	8.57	7.46
35	4	2.29	2.36	7	3	10.19	7.85	28	4	21.47	22.36	0	3	22.81	22.43	9	7	14.23	10.24
37	4	0.82	0.18	9	3	13.08	10.28	30	4	1.78	2.02	2	3	8.31	7.41	10	7	6.17	4.63
39	4	3.63	4.73	11	3	19.72	19.39	32	4	9.81	10.14	4	3	15.29	13.75	12	7	11.00	10.24
41	4	6.00	5.21	13	3	7.16	6.38	34	4	7.96	8.11	6	3	9.15	7.86	14	7	2.47	2.57
3	5	7.20	6.67	15	3	9.45	8.77	36	4	7.26	7.89	8	3	8.50	5.69	16	7	5.69	5.59
31	5	4.26	5.40	17	3	14.90	14.49	38	4	4.90	5.17	9	3	3.09	2.64	18	7	5.95	3.91
33	5	6.45	6.82	19	3	8.80	8.67	26	5	9.45	7.89	11	3	2.51	2.91	20	7	6.24	7.31
35	5	4.39	4.92	21	3	6.73	3.36	28	5	7.22	5.42	13	3	14.44	12.28	22	7	1.08	0.53
37	5	1.52	1.12	23	3	11.24	9.82	30	5	8.73	7.81	15	3	1.95	2.38	24	7	7.28	8.34
27	7	7.34	9.06	3	5	15.46	14.05	32	5	1.03	1.46	17	3	10.03	9.59	26	7	2.59	2.59
29	7	3.93	5.25	1	5	10.18	7.24	34	5	4.31	4.01	19	3	3.79	3.31	28	7	1.59	2.43
31	7	6.84	6.14	3	5	5.13	4.89	36	5	2.39	2.78	21	3	14.90	14.11	1	8	1.24	1.11
33	7	2.52	2.20	5	5	13.89	11.78	26	7	4.53	4.86	23	3	9.66	9.16	3	8	2.47	2.05
1	8	11.13	12.03	7	5	9.65	8.77	28	7	3.36	4.09	25	3	11.70	10.78	5	8	1.23	2.01
3	8	15.01	14.63	10	5	7.79	4.83	30	7	1.64	1.77	27	3	11.70	10.78	7	8	1.23	2.01
5	8	12.87	11.73	12	5	11.60	9.11	32	7	2.70	2.63	2	4	8.60	6.97	9	8	5.12	4.14
6	8	5.15	3.71	14	5	4.81	4.54	0	8	11.02	10.72	4	4	8.01	7.11	11	8	7.51	7.30
8	8	1.21	1.77	16	5	14.39	13.67	2	8	7.50	5.71	6	4	12.80	11.50	13	8	4.39	2.84
10	8	6.37	6.16	18	5	8.65	8.77	4	8	5.15	4.15	8	4	5.15	4.15	15	8	1.13	1.46
12	8	6.08	4.94	20	5	8.25	5.78	7	8	2.43	2.18	10	4	5.10	3.25	18	8	1.10	1.22
14	8	4.70	3.58	22	5	17.62	17.14	9	8	1.21	1.99	12	4	11.72	10.35	16	8	6.91	6.40
16	8	1.15	1.09	24	5	10.48	9.58	11	8	5.08	4.98	14	4	5.73	4.27	20	8	2.5	2.97
18	8	2.23	4.44	0	6	16.38	17.64	13	8	7.33	6.50	16	4	8.46	6.27	22	8	3.66	4.56
20	8	7.83	6.13	2	6	5.33	5.4	15	8	11.85	8.84	14	4	11.85	10.88	24	8	6.11	5.68
22	8	5.36	5.48	4	6	21.61	19.01	17	8	2.78	3.43	20	4	4.23	4.78	26	8	6.74	9.01
24	8	4.00	3.05	6	6	16.08	13.42	19	8	10.57	12.45	21	4	6.33	1.95	0	9	7.75	10.89
26	8	0.85	1.85	8	6	7.29	4.84	21	8	2.09	1.76	23	4	10.09	9.51	2	9	2.76	3.36
28	8	5.30	3.94	10	6	10.78	8.92	23	8	4.16	3.70	25	4	5.92	4.40	4	9	3.88	4.42
30	8	3.98	8.86	12	6	12.01	11.74	25	8	4.76	4.86	3	5	12.67	11.89	6	9	1.11	3.20
1	9	5.94	6.13	14	6	1.33	0.95	27	8	0.80	2.10	3	5	4.74	3.96	8	9	4.61	4.11
3	9	5.69	4.72	16	6	8.32	7.46	29	8	4.28	3.40	5	5	3.47	2.73	10	9	5.19	5.84
5	9	1.16	3.18	18	6	1.36	1.40	0	9	1.17	1.14	7	5	11.41	11.06	12	9	4.81	4.86
7	9	5.12	4.96	20	6	12.15	11.09	2	9	4.68	4.63	9	5	14.06	13.60	14	9	1.39	3.06
9	9	10.22	11.50	22	6	6.53	6.10	4	9	5.44	4.72	12	5	6.61	6.23	2	10	0.93	0.51
11	9	4.14	3.43	24	6	10.31	9.43	6	9	1.63	1.69	14	5	9.97	7.80	2	10	0.93	0.49
9	9	4.82	4.18	26	6	2.11	3.29	8	9	6.02	4.36	16	5	6.26	4.90	4	10	4.51	5.87
14	9	3.20	4.90	28	6	1.40	2.88	10	9	5.48	4.09	18	5	8.27	7.09	6	10	6.10	8.59
16	9	1.44	2.33	8	8	4.82	3.77	12	9	1.09	6.88	20	5	8.45	7.94	8	10	6.08	5.02
18	9	0.97	2.16	32	8	0.47	2.54	15	9	1.04	2.42	22	5	5.71	4.03	10	10	0.83	3.87
20	9	4.05	4.89	35	6	3.59	5.17	17	9	0.99	1.51	24	5	6.91	4.85	0	11	0.77	3.63
22	9	0.82	1.23	1	7	15.34	15.02	19	9	4.20	4.67	26	5	11.54	10.96	2	11	2.56	4.63
24	9	5.33	6.62	3	7	8.79	5.62	21	9	0.87	2.44	28	0	10.31	9.02	3	11	2.03	4.40
26	9	2.78	3.31	5	7	9.16	9.12	23	9	3.30	3.93	30	0	8.66	8.26	1	11	16.94	14.36
1	10	1.03	1.80	7	7	6.60	5.54	25	9	5.31	6.77	32	0	1.22	1.05	3	12		

H K F <sub>0</sub> F <sub>c</sub>				H K F <sub>0</sub> F <sub>c</sub>				H K F <sub>0</sub> F <sub>c</sub>				H K F <sub>0</sub> F <sub>c</sub>							
1 - 5				1 - 5				1 - 6				1 - 6							
1	2	15.01	13.95	24	6	6.72	6.88	19	2	14.03	14.03	19	8	4.80	4.08	1	5	14.87	13.57
3	2	17.35	16.25	25	6	6.69	10.03	21	2	4.55	5.05	20	8	5.30	6.13	3	5	12.87	11.24
4	2	2.91	2.36	28	6	4.87	3.68	23	2	5.29	3.68	22	8	4.19	5.53	5	5	17.84	18.11
7	2	14.26	10.68	30	6	4.54	4.90	25	2	3.56	3.80	1	9	5.71	6.43	7	5	1.47	1.69
9	2	7.49	5.52	32	6	7.33	8.44	27	2	6.38	6.60	3	9	1.79	2.37	9	5	9.34	10.40
11	2	14.54	12.90	0	7	18.26	17.28	29	2	9.79	9.65	5	9	6.36	7.29	11	5	10.52	9.77
13	2	10.11	7.21	2	7	7.21	6.23	31	2	5.82	5.70	7	7	0.86	2.91	13	5	9.68	9.77
15	2	9.13	6.87	4	7	7.37	6.59	33	2	12.43	14.40	9	9	0.83	1.94	15	5	8.03	5.23
17	2	13.10	11.19	6	7	10.96	10.25	34	2	2.14	3.62	11	9	2.10	7.43	17	5	6.77	6.78
19	2	13.45	13.01	8	7	12.92	12.41	1	3	13.34	10.82	13	9	2.05	4.04	19	5	9.62	8.74
21	2	7.90	7.09	11	7	6.15	5.11	3	3	7.47	4.49	15	9	2.22	5.58	21	5	8.45	7.02
23	2	11.91	9.22	13	7	5.28	3.95	5	3	15.18	14.80	17	9	4.68	5.56	23	5	6.09	9.04
25	2	3.94	4.36	15	7	9.95	9.09	7	3	9.88	8.64	1	0	41.20	39.74	25	5	8.24	7.40
3	3	13.00	12.52	17	7	10.04	10.06	9	3	9.79	8.07	3	0	12.70	11.25	27	5	8.34	8.83
3	3	6.07	6.76	19	7	5.20	4.44	11	3	13.02	14.98	5	0	11.65	9.44	30	5	1.25	3.78
5	3	17.30	16.54	21	7	10.54	11.49	13	3	11.81	11.16	7	0	8.29	3.81	0	6	10.73	9.99
8	3	3.32	3.79	23	7	2.96	6.15	15	3	7.87	5.54	9	0	8.54	6.76	2	7	5.18	5.12
10	3	11.93	9.66	25	7	4.73	5.18	17	3	9.61	7.76	11	0	14.73	5.85	4	6	14.93	14.88
12	3	7.92	6.02	27	7	1.72	2.45	19	3	10.29	10.88	13	0	10.71	16.86	6	6	11.18	10.53
14	3	15.22	12.71	0	8	4.63	2.99	21	3	9.55	8.11	15	0	17.90	16.38	8	6	5.40	5.14
16	3	11.72	10.31	2	8	7.82	7.54	23	3	2.50	1.90	17	0	13.91	13.72	10	6	8.79	8.37
18	3	8.46	7.07	4	8	4.82	5.11	25	3	11.32	10.05	19	0	1.32	3.22	12	7	5.86	7.79
20	3	2.28	2.17	6	8	4.90	3.71	27	3	1.16	2.49	21	0	16.52	17.07	14	6	7.57	6.31
22	3	1.68	2.36	8	8	3.43	3.18	29	3	5.75	5.54	23	0	1.61	2.44	16	6	2.05	2.41
24	3	5.93	4.74	10	8	5.62	5.47	31	3	12.04	13.05	25	0	10.36	10.51	18	6	6.34	7.14
1	4	1.34	0.81	12	8	2.35	3.30	3	3	3.21	5.05	27	0	9.13	9.26	20	6	13.26	15.21
3	4	3.17	3.33	14	8	4.81	3.33	5	3	4.83	4.89	29	0	5.97	6.20	22	7	5.18	5.22
5	4	15.99	14.67	17	8	1.53	2.89	7	4	15.76	15.60	31	0	4.76	4.97	24	6	1.67	2.00
7	4	7.99	6.36	19	8	1.03	1.82	9	4	8.73	8.46	34	0	7.88	8.78	26	6	4.29	3.96
9	4	18.07	17.65	21	8	0.96	1.50	11	4	9.35	10.13	36	0	3.87	4.01	28	6	4.65	4.97
11	4	13.85	11.35	23	8	6.33	6.45	13	4	10.32	9.03	1	1	18.62	15.50	1	7	6.01	4.68
13	4	12.13	10.41	25	8	2.80	2.80	15	4	11.23	10.07	3	1	15.55	13.37	3	7	5.18	7.22
15	4	9.58	9.31	27	8	4.85	7.58	17	4	10.05	8.79	5	1	28.13	29.17	5	7	3.57	2.27
17	4	1.86	2.76	1	9	1.13	1.20	19	4	7.76	8.43	7	1	17.59	18.08	7	7	2.24	1.80
19	4	7.41	6.55	3	9	3.18	3.55	21	4	3.95	3.73	10	1	14.53	13.92	10	7	4.94	3.83
22	4	8.16	7.35	6	9	4.64	6.65	24	4	11.51	11.31	12	1	5.24	6.63	12	7	5.31	3.09
24	4	7.47	7.36	9	9	1.09	2.74	27	4	7.91	7.07	14	2	23.50	25.14	14	7	5.86	4.78
0	5	18.34	18.43	9	9	4.81	4.93	22	4	2.85	2.64	16	1	18.25	19.83	16	7	7.07	5.86
2	5	4.33	1.89	11	9	5.32	6.18	24	4	9.41	8.57	18	1	15.02	14.39	18	7	7.79	7.77
4	5	8.27	7.43	13	9	3.48	3.56	26	4	7.55	6.73	20	1	12.66	11.14	20	7	5.78	4.91
6	5	19.66	19.66	15	9	4.86	4.65	28	4	8.86	10.87	22	1	8.97	8.66	22	7	8.13	10.23
8	5	11.06	11.36	1	10	3.74	4.28	30	4	7.23	6.93	24	1	6.30	7.79	24	7	3.26	3.28
10	5	10.17	8.84	3	10	0.92	1.36	32	4	5.70	5.07	26	1	6.35	6.20	2	8	3.34	2.32
11	5	13.94	13.02	5	10	0.91	0.68	0	5	12.64	9.64	29	1	4.59	2.81	4	8	4.45	4.68
13	5	7.66	6.82	7	10	4.24	3.52	2	5	9.49	7.87	31	1	3.17	2.65	6	8	5.49	4.38
15	5	5.47	3.73	9	10	3.57	3.11	4	5	17.84	17.91	3	1	13.85	13.37	8	8	11.02	10.86
17	5	6.66	5.36	11	10	3.21	3.62	6	5	1.23	0.41	35	1	6.79	7.39	10	8	4.67	4.09
19	5	8.87	8.40	1	11	0.53	2.40	8	5	7.02	5.96	1	2	16.38	13.68	12	8	7.83	7.40
21	5	7.95	7.67	4	11	0.48	2.26	10	5	1.48	2.69	3	2	33.75	34.93	14	8	5.22	6.52
23	5	1.26	1.57	0	11	4.71	38.34	12	5	14.23	14.10	5	2	7.34	5.97	16	8	1.74	3.39
25	5	11.98	12.81	0	0	1.47	0.07	14	5	1.47	3.08	7	2	17.69	17.10	18	8	7.27	7.22
27	0	6.16	4.62	2	0	1.67	0.84	16	5	3.89	3.14	9	2	12.31	10.73	20	8	3.65	4.68
29	0	10.34	9.32	4	0	24.19	21.63	18	5	1.20	1.49	11	2	11.60	11.29	2	9	1.81	1.52
31	0	9.20	7.58	6	0	12.58	10.44	20	5	11.12	11.28	14	2	10.91	9.91	4	9	0.90	1.41
33	0	1.17	1.15	8	0	15.80	14.78	22	5	1.13	1.06	16	2	16.88	3.56	6	9	0.89	1.39
35	0	11.63	11.44	10	0	7.10	11.11	24	5	7.10	11.14	18	2	3.87	9.60	8	9	0.89	1.39
37	0	10.68	11.00	12	0	7.53	5.89	25	5	6.13	9.30	20	2	7.92	8.37	10	9	0.84	1.11
39	0	4.89	4.78	14	0	11.55	10.87	27	5	6.78	6.55	22	2	5.23	4.76	12	9	5.72	7.78
27	1	7.71	6.65	16	0	15.67	16.61	29	5	3.65	4.35	24	2	4.19	4.05	10	9	2.14	3.91
29	1	4.99	3.96	18	0	7.04	6.26	31	5	8.44	9.83	26	2	7.00	6.30	14	9	1.95	3.91
31	1	9.68	10.06	20	0	15.80	17.75	1	6	11.48	11.07	28	2	5.74	5.75	16	9	0.58	2.50
33	1	5.38	4.36	22	0	6.32	7.44	3	6	1.56	0.99	30	2	4.50	4.82	18	9	0.27	6.55
35	1	4.17	4.11	24	0	11.76	10.89	5	6	13.47	12.69	32	2	8.61	7.85	1	7		
37	1	2.36	2.86	26	0	4.89	4.99	7	6	5.29	4.05	0	3	10.90	9.78	1	0	28.28	27.78
39	1	3.93	4.40	28	0	1.47	0.07	9	6	5.50	4.88	2	3	10.77	8.66	3	0	22.53	23.58
27	2	6.15	5.81	30	0	3.43	2.95	11	6	5.55	6.68	4	3	11.61	11.37	5	0	10.11	8.51
29	2	1.27	1.78	32	0	1.00	0.39	13	6	7.87	8.24	6	3	13.54	12.51	7	0	25.01	30.12
31	2	8.00	7.94	33	0	0.93	2.09	15	6	7.46	8.15	8	3	12.40	10.43	9	0	9.38	7.59
33	2	4.52	4.06	35	0	4.94	3.14	17	6	14.98	17.09	10	3	8.22	6.08	11	0	1.52	2.00
35	2	1.92	2.66	0	1	15.01	14.68	19	6	4.49	5.61	12	3	9.66	8.97	13	0	17.66	18.85
37	2	0.81	2.59	2	1	32.08	34.66	21	6	7.66	7.28	14	3	10.40	7.91	15	0	22.48	23.55
28	3	6.88	6.13	4	1	18.56	18.26	23	6	5.11	5.16	16	3						

H	K	F <sub>O</sub>	F <sub>C</sub>	H	K	F <sub>O</sub>	F <sub>C</sub>	H	K	F <sub>O</sub>	F <sub>C</sub>	H	K	F <sub>O</sub>	F <sub>C</sub>	H	K	F <sub>O</sub>	F <sub>C</sub>	H	K	F <sub>O</sub>	F <sub>C</sub>	
4	2	12.12	11.14	25	1	7	6.50	6.00	20	1	4.83	1.40	9	3	2.66	4.03	1	1	1.45	1.08	1	1	1.45	1.08
6	2	8.34	8.53	25	1	7	9.60	10.91	22	1	4.03	1.37	11	3	1.29	0.41	3	1	6.10	5.39	3	1	6.10	5.39
8	2	4.95	4.63	27	1	7	3.65	3.05	24	1	0.79	5.44	13	3	1.25	0.66	5	1	5.11	4.73	5	1	5.11	4.73
10	2	1.42	1.14	29	1	7	4.02	4.78	26	1	4.49	5.90	15	3	5.36	6.41	8	1	3.85	4.40	8	1	3.85	4.40
12	2	5.98	5.07	1	2	11.59	9.94	1	2	7.05	6.91	17	3	2.27	3.38	10	1	6.26	6.43	10	1	6.26	6.43	
14	2	1.39	1.19	3	2	7.81	8.61	3	2	1.33	1.61	19	3	1.99	2.25	12	1	4.05	4.13	12	1	4.05	4.13	
16	2	0.42	0.76	5	2	7.84	5.94	4	2	1.52	1.68	21	3	0.95	1.71	14	1	6.62	8.17	14	1	6.62	8.17	
18	2	5.94	4.17	7	2	2.02	1.14	6	2	3.21	4.28	0	4	8.65	8.15	16	1	1.47	2.52	16	1	1.47	2.52	
20	2	8.07	8.90	9	2	3.49	3.71	8	2	1.29	1.80	2	4	5.46	4.08	18	1	2.46	2.71	18	1	2.46	2.71	
22	2	9.05	4.56	11	2	5.66	4.11	10	2	4.39	5.45	4	4	1.71	3.35	0	2	5.72	6.31	0	2	5.72	6.31	
24	2	9.00	11.20	13	2	7.41	8.61	12	2	3.93	4.25	6	4	5.86	5.15	2	2	7.87	10.39	2	2	7.87	10.39	
26	2	4.91	4.35	15	2	5.16	5.03	14	2	1.20	2.17	8	4	1.17	1.10	4	2	1.03	3.30	4	2	1.03	3.30	
28	2	4.73	5.23	17	2	8.09	7.79	16	2	1.14	1.49	10	4	4.57	3.65	6	2	6.37	5.79	6	2	6.37	5.79	
30	2	4.22	5.65	19	2	1.31	1.91	18	2	3.06	4.67	12	4	4.41	4.61	8	2	3.09	4.38	8	2	3.09	4.38	
0	0	11.44	7.98	21	2	1.25	1.18	20	2	1.00	0.49	14	4	1.05	3.07	10	2	4.18	5.51	10	2	4.18	5.51	
2	3	14.06	12.49	23	2	5.79	4.95	22	2	2.87	6.92	16	4	2.43	3.14	12	2	4.99	6.98	12	2	4.99	6.98	
4	3	6.11	6.14	25	2	1.09	0.78	0	3	1.39	3.55	18	4	4.48	4.74	14	2	3.62	4.35	14	2	3.62	4.35	
6	3	1.52	1.52	27	2	3.96	3.36	4	3	7.29	8.96	20	4	1.15	4.14	16	2	2.85	4.13	16	2	2.85	4.13	
8	3	7.43	6.88	29	2	4.53	4.76	2	3	2.77	3.87	22	4	0.94	1.46	0	3	4.46	5.07	0	3	4.46	5.07	
10	3	7.37	7.03	0	5	20.39	21.58	6	3	6.10	5.84	0	5	4.93	4.20	2	3	1.48	1.28	2	3	1.48	1.28	
12	3	4.21	4.31	3	3	5.29	5.18	8	3	1.34	1.35	2	5	5.60	7.47	4	3	8.13	7.59	4	3	8.13	7.59	
14	3	9.26	8.20	5	3	3.05	2.55	10	3	6.16	6.94	4	5	1.09	1.65	6	3	4.50	4.39	6	3	4.50	4.39	
16	3	6.71	6.47	7	3	1.52	2.07	12	3	3.12	5.59	6	5	1.07	1.02	8	3	7.84	11.16	8	3	7.84	11.16	
18	3	8.31	8.42	9	3	6.41	5.50	14	3	1.73	2.96	8	5	3.62	4.48	10	3	0.92	1.04	10	3	0.92	1.04	
20	3	1.33	1.24	11	3	6.31	6.49	15	3	6.31	6.49	10	3	3.90	3.48	12	3	4.75	6.84	12	3	4.75	6.84	
22	3	0.87	0.99	13	3	4.18	4.29	18	3	2.19	2.85	12	5	0.96	0.77	15	3	3.80	6.47	15	3	3.80	6.47	
24	3	1.16	1.03	15	3	6.48	7.01	20	3	2.84	4.25	14	5	1.82	3.59	17	3	2.33	5.89	17	3	2.33	5.89	
26	3	1.05	2.37	17	3	5.64	3.34	22	3	3.07	5.51	16	5	2.05	2.66	1	4	3.47	5.15	1	4	3.47	5.15	
28	3	5.47	6.81	19	3	8.15	9.04	1	4	7.94	7.35	18	5	3.30	6.26	4	4	6.24	7.60	4	4	6.24	7.60	
30	3	4.95	7.19	21	3	4.29	3.17	3	4	4.21	3.67	1	5	3.47	6.05	6	4	6.57	9.53	6	4	6.57	9.53	
1	4	10.12	6.37	23	3	5.68	6.24	5	4	3.90	5.28	3	6	2.67	3.08	8	4	1.56	3.30	8	4	1.56	3.30	
3	4	1.39	2.66	25	3	2.72	4.11	7	4	1.18	2.04	5	6	6.05	7.27	10	4	2.48	3.40	10	4	2.48	3.40	
5	4	8.07	7.31	27	3	5.41	6.05	9	4	6.35	7.70	8	6	1.44	3.26	12	4	1.52	3.20	12	4	1.52	3.20	
7	4	1.94	2.73	29	3	5.06	6.76	11	4	5.03	5.20	10	6	1.94	3.80	14	4	0.62	5.82	14	4	0.62	5.82	
9	4	9.97	7.92	0	4	2.04	26.34	13	4	6.10	6.23	12	6	0.90	0.55	1	5	4.25	8.68	1	5	4.25	8.68	
11	4	3.29	3.35	2	4	14.67	16.94	15	4	3.24	4.11	14	6	1.63	2.82	3	5	4.90	9.20	3	5	4.90	9.20	
13	4	4.94	4.10	4	4	9.40	8.37	17	4	4.68	5.91	1	7	9.11	9.35	5	5	5.17	7.69	5	5	5.17	7.69	
15	4	1.29	1.58	6	4	8.28	6.77	19	4	0.87	1.26	1	8	7.80	8.34	7	5	4.75	6.04	7	5	4.75	6.04	
17	4	10.81	12.47	8	4	4.53	3.76	21	4	0.75	2.34	3	9	7.92	10.80	9	6	6.35	7.04	9	6	6.35	7.04	
19	4	5.89	6.69	10	4	1.17	6.53	23	4	1.34	2.26	4	10	6.97	7.50	11	6	5.77	12.35	11	6	5.77	12.35	
21	4	4.49	4.21	12	4	1.89	3.19	1	5	5.39	5.20	6	11	8.03	6.13	13	6	3.06	2.61	13	6	3.06	2.61	
23	4	1.04	2.78	14	4	9.50	10.21	3	5	5.99	5.06	8	12	5.35	7.29	15	6	2.49	2.99	15	6	2.49	2.99	
25	4	3.74	4.70	16	4	8.78	8.43	5	5	1.08	3.94	10	13	6.67	7.50	17	6	0.62	1.00	17	6	0.62	1.00	
27	4	1.55	1.55	18	4	6.31	11.08	7	5	1.96	2.32	12	14	3.90	3.48	19	6	1.40	1.25	19	6	1.40	1.25	
29	4	3.59	6.51	20	4	7.50	7.48	9	5	3.56	5.67	13	15	3.06	2.61	21	6	1.84	4.94	21	6	1.84	4.94	
0	5	9.19	7.96	22	4	1.08	4.24	11	5	3.43	4.56	15	16	5.35	7.29	23	6	1.56	3.30	23	6	1.56	3.30	
2	5	9.72	8.63	24	4	3.96	4.80	13	5	3.52	5.79	17	17	0.49	2.99	25	6	1.40	1.25	25	6	1.40	1.25	
4	5	2.60	2.85	26	4	1.23	2.48	15	5	2.47	4.56	19	18	0.62	1.00	27	6	1.40	1.25	27	6	1.40	1.25	
6	5	6.91	7.45	28	4	1.96	6.01	17	5	1.96	2.46	21	19	1.10	1.40	29	6	1.40	1.25	29	6	1.40	1.25	
8	5	7.23	6.68	1	5	1.31	2.84	0	6	6.22	7.15	2	20	1.84	4.94	31	6	1.40	1.25	31	6	1.40	1.25	
10	5	6.89	7.74	3	5	10.96	9.69	2	6	5.99	6.55	4	1	5.88	5.61	33	6	1.40	1.25	33	6	1.40	1.25	
12	5	7.18	7.23	5	5	8.44	7.36	4	6	1.08	1.16	6	1	8.98	9.70	35	6	1.40	1.25	35	6	1.40	1.25	
14	5	3.78	3.65	7	5	1.28	2.88	6	6	1.49	1.82	7	1	7.36	7.31	37	6	1.40	1.25	37	6	1.40	1.25	
16	5	6.91	7.45	9	5	1.27	3.62	7	6	1.47	3.46	8	1	8.57	9.30	39	6	1.40	1.25	39	6	1.40	1.25	
18	5	12.38	16.26	11	5	7.26	7.34	9	6	1.49	3.85	11	1	6.13	6.74	41	6	1.40	1.25	41	6	1.40	1.25	
20	5	1.03	4.49	13	5	9.84	11.09	11	6	1.33	2.65	13	1	7.38	10.04	43	6	1.40	1.25	43	6	1.40	1.25	
22	5	6.39	7.65	15	5	5.26	5.20	13	6	1.73	4.36	15	1	3.12	3.08	45	6	1.40	1.25	45	6	1.40	1.25	
24	5	0.83	1.93	17	5	8.12	8.13	1	7	5.40	5.32	17	1	6.27	7.11	47	6	1.40	1.25	47	6	1.40	1.25	
26	5	9.77	9.77	19	5	6.39	6.28	3	7	1.44	0.28	19	1	5.93	9.57	49	6	1.40	1.25	49	6	1.40	1.25	
0	6	8.99	7.99	21	5	0.99	2.53	5	8	3.50	4.19	20	1	0.28	6.18	51	6	1.40	1.25	51	6	1.40	1.25	
2	6	4.38	2.80	23	5	0.89	2.75	7	9	8.95	8.35	1	2	6.09	6.85	53	6	1.40	1.25	53	6	1.40	1.25	
4	6	9.54	10.18	25	5	3.42	4.80	9	10	11.24	11.73	3	2	4.63	4.93	55	6	1.40	1.25	55	6	1.40	1.25	
6	6	1.36	1.94	27	5	4.49	6.78	11	10	10.30	11.72	5	2	8.99	10.93	57	6	1.40	1.25	57	6	1.40	1.25	
8	6	5.59	5.92	1	6	5.88	6.42																	

## AUFSTELLUNG DER VERWENDETEN RECHENPROGRAMME

1. Lorentz-Polarisationsfaktor und Wilson-Statistik: K. ANZENHOFER und R. HUBER, Abteilung für Röntgenstrukturforschung am Max-Planck-Institut für Eiweiß- und Lederforschung, München.

2. Fouriersynthesen: Von uns modifiziertes Programm von S. BLOCK und J. R. HOLDEN, U. S. Nat. Bureau of Standards.

3. Kleinste Quadrate: Von uns erweitertes Programm von W. R. BUSING und H. A. LEVY, Oak Ridge.

4. Abstands-, Winkel- und Schwingungsberechnung: W. R. BUSING und H. A. LEVY, Oak Ridge.

5. Automatisierte Faltmolekülmethode: R. HUBER, Abteilung für Röntgenstrukturforschung am Max-Planck-Institut für Eiweiß- und Lederforschung, München.

Alle Rechnungen wurden an der in Garching bei München am Institut für Plasmaphysik installierten IBM-7090-Rechenmaschine durchgeführt.

Für die Unterstützung unserer Arbeiten auf dem Gebiete der Röntgenstrukturanalyse organischer Verbindungen sind wir der DEUTSCHEN FORSCHUNGSGEMEINSCHAFT, dem FONDS DER CHEMIE und der BADISCHEN ANILIN- & SODA-FABRIK zu Dank verpflichtet.

[593/64]

---