Tetrahedron. Vol. 30, pp. 1087 to 1096. Pergamon Press 1974. Printed in Great Britain

1,2-OXAZINE CHEMISTRY—II

THE CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF N-(p-CARBOXYBENZYL)-TETRAHYDRO-1,2-OXAZINE

F. G. RIDDELL,* P. MURRAY-RUST and J. MURRAY-RUST
Department of Chemistry, The University, Stirling

(*Received in the UK* 14 *September* 1973; *Accepted for publication* 3 *December* 1973)

Abstract—The crystal structure of the title compound has been determined from X-ray diffractometer data by direct methods, and refined by full matrix least squares techniques to R = 0·057 for 1231 reflections. The crystals are monoclinic, space group C2/C, cell dimensions a = 1665, b = 987, c = 1443 pm, β = 107·37° and Z = 8. The conformation of the tetrahydro-1,2-oxazine ring is a chair with the N-substituent equatorial. There is evidence of significantly greater torsional angles around the N and O atoms than around the ring C atoms, showing the ring to be more puckered than cyclohexane. The hydrogen bond is between the acid group on one molecule and the ring nitrogen on its neighbour.

INTRODUCTION

In connection with our current investigation of the tetrahydro-1, 2-oxazine ring[1] it became important to have precise data relating to molecular geometry, interatomic distances and torsion angles for this system. A crystallographic study became doubly important since so little is known about the geometry of hydroxylamine, and even less about that of its derivatives. Giguere and Liu[2] deduced from IR spectral measurements on hydroxylamine that the N—O bond length is 146 pm, and that possibly more than one conformation is present. A crystallographic study of N-methylhydroxylamine hydrochloride[3] showed an N—O bond length of 145 pm and a *trans* arrangement of N—CH_3 and OH about the central N—O bond. However no quantitative data exist about the molecular geometry of any hydroxylamine derivative as the free base.

In the absence of accurate and reliable experimental data on the geometry and conformation energetics of hydroxylamine and its derivatives molecular orbital calculations offer the next best alternative. It is clear from those studies available in the literature[4-7] that the conformational situation in hydroxylamine is vastly different from that in ethane. Allen's group found that the barrier to internal rotation in hydroxylamine is of the form shown in Fig 1.[4] From this result and from the similar calculations by Pedersen and Morokuma[5] it is apparent that the staggered form (c) which corresponds roughly to the expected arrangement around the N—O bond in tetrahydro-1,2-oxazines with an equatorial group on nitrogen, is about 2 kcal.mole^{-1} more strained than form (a). In our cyclic derivatives we would therefore expect the torsion angle about the N—O bond to be greater than 60°. The arrangement (b) corresponding to an axial N-substituent is 8 kcal/mole higher still, therefore we expected to find the N-substituent equatorial.

The INDO calculations of Gordon and Pople[6,7] lead to a qualitatively different picture of the hydroxylamine molecule, and to an N—O bond length (128 pm) that is too short.† Since these calculations involve a greater degree of approximation than the other examples discussed, and since the bond length is closer to that of a double than a single bond we shall not consider them further.

One point of particular conformational interest in the structure of tetrahydro-1,2-oxazines is that axial groups on each of the four ring C atoms suffer different types of non-bonded interactions and are subject to different 1,3-*trans*-annular distances. The information that we had available on the conformational equilibria of Me groups on each of

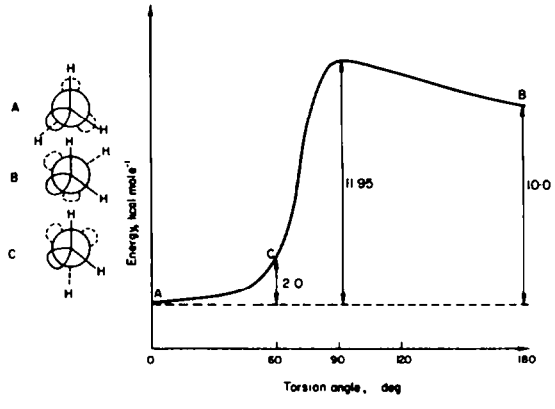

Fig 1.

†In both papers[6,7] these authors misquote Giguere and Liu's estimate[2] of the N—O bond length of 146 pm as 141 pm. A bond length of 146 pm was however assumed in Refs 4 and 5.

these four C atoms clearly demanded a quantitative investigation of these distances.

We therefore undertook an X-ray study with two objectives in mind: to increase our knowledge of the molecular geometry of hydroxylamine derivatives and to back up the conformational results on the methyl tetrahydro-1,2-oxazines.

EXPERIMENTAL

N-(p-carboxybenzyl)-tetrahydro-1,2-oxazine was prepared by the reaction of tetrahydro-1,2-oxazine (1 mole) with *p*-bromomethylbenzoic acid (1 mole) in the presence of Na_2CO_3 (2 moles) in refluxing EtOH. The compound was purified by crystallisation from water m.p. 155–158°.

Crystal data $C_{12}H_{13}NO_3$, M = 221. Monoclinic a = 1665 (2), b = 987(1), c = 1443(2) pm, β = 107·37°, U = 2264·9 × 10^6 pm^3, D_m = 1·29 gm cm^{-3} (by flotation in aqueous silver nitrate), Z = 8, D_c = 1·307 gm cm^{-3}, Space group C2/c (C2hNo15). Mo − Kα radiation λ = 71·07 pm.

Crystallographic measurements. Unit cell dimensions and space group were determined from oscillation and Weissenberg photographs taken with Mo − Kα radiation. Data was then collected on a Hilger and Watts linear diffractometer using Mo − Kα radiation. Levels 0–4 kl and h 0–8 l was collected. Intensities were corrected for the appropriate Lorentz and polarisation factors and reflections with an intensity < 3·00 σ were rejected. 1231 reflections were obtained.

Structure determination. After attempts to solve the structure from the 3-dimensional Patterson function had failed the problem was tackled by direct methods using the LSAM series of programs devised by Peter Main of York University.

Seven sets of phases were generated for 253 reflections with |E| > 1·3 of which that with the best figure of merit provided the solution to the structure. The E map based on this set showed the positions of all the non-H atoms, but did not allow unambiguous identification of the ring O atom. Treating this atom as a C atom, structure factors (R = 0·44) and a Fourier map were calculated which allowed identification of this atom. Thereafter the structure was refined by the full matrix least squares technique and after five cycles of refinement with isotropic temp factors R was 0·149. Four further cycles with anisotropic temp factors included reduced R to 0·100 at which point a difference map enabled location of all the H atoms. Two cycles refining H positions using assumed anisotropic factors related to those of the directly bound carbon, reduced R to 0·074. A weighting scheme was introduced where W = 1 if Fo > 15 and W = 1/(1 + ((F − 15)/65)²) if Fo > 15. Four cycles of refinement of all parameters except the temp factors of H atoms produced a final R of 0·057.

All computations were performed on the Stirling University Elliott 4130 system with programs described in Refs 8 and 9. Scattering factors were taken from Ref 10.

DISCUSSION

The final atomic coordinates, anisotropic temperature factors, bond lengths, bond angles and torsion angles are presented in Tables 1–4. The structure consists of molecules in the O-acid form linked by H-bonds. The conformation of the 1,2-oxazine ring is clearly seen to be a chair, with the N-substituent equatorial (Fig 2).

Table 1. Fractional coordinates with estimated standard deviations in parentheses

	x/a	y/b	z/c
O(1)	0·4297(2)	0·4879(2)	0·3586(2)
N(2)	0·3610(2)	0·3986(3)	0·3620(2)
C(3)	0·3294(2)	0·3309(4)	0·2667(3)
C(4)	0·2923(3)	0·4366(5)	0·1895(3)
C(5)	0·3592(3)	0·5417(5)	0·1895(3)
C(6)	0·3965(3)	0·5970(4)	0·2910(3)
C(11)	0·3988(2)	0·3042(4)	0·4433(3)
C(12)	0·4702(2)	0·2170(3)	0·4314(2)
C(13)	0·5517(2)	0·2659(4)	0·4629(2)
C(14)	0·6172(2)	0·1903(3)	0·4500(2)
C(15)	0·6022(2)	0·0639(3)	0·4051(2)
C(16)	0·5210(2)	0·0134(4)	0·3755(2)
C(17)	0·4554(2)	0·0896(4)	0·3887(3)
C(21)	0·6712(2)	0·0178(4)	0·3871(3)
O(11)	0·7451(2)	0·0425(3)	0·4131(2)
O(12)	0·6596(2)	−0·1280(3)	0·3487(2)
H(6)	0·4429(38)	0·6621(58)	0·2972(39)
H(16)	0·3556(37)	0·6439(57)	0·3150(39)
H(5)	0·3324(35)	0·6234(57)	0·1420(39)
H(15)	0·4031(38)	0·5065(56)	0·1765(40)
H(4)	0·2674(34)	0·3894(56)	0·1128(42)
H(14)	0·2451(37)	0·4853(57)	0·2065(38)
H(3)	0·2836(32)	0·2639(54)	0·2745(36)
H(13)	0·3748(33)	0·2874(54)	0·2548(35)
H(21)	0·3550(33)	0·2459(53)	0·4434(36)
H(22)	0·4199(33)	0·3579(54)	0·5026(40)
H(23)	0·5661(30)	0·3600(50)	0·4969(33)
H(24)	0·6748(34)	0·2216(51)	0·4706(36)
H(26)	0·5095(31)	0·7888(54)	0·3421(37)
H(27)	0·4006(34)	0·0561(51)	0·3665(36)
H(31)	0·7851(36)	−0·0153(56)	0·3957(40)

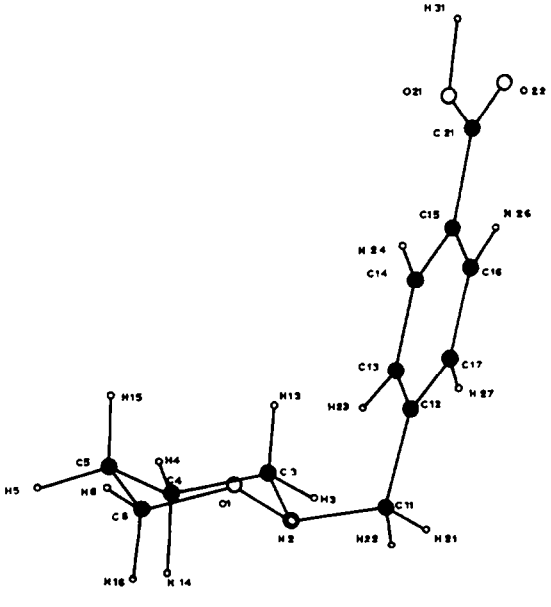

Fig. 2.

Table 2. Anisotropic temperature factors × 10^4 with standard deviations in parentheses

	B_{11}	B_{22}	B_{33}	B_{12}	B_{13}	B_{23}
O(1)	33(1)	96(3)	58(1)	6(1)	16(1)	0(2)
N(2)	25(1)	102(3)	49(2)	13(2)	14(1)	0(2)
C(3)	35(1)	118(5)	52(2)	5(2)	6(1)	−12(3)
C(4)	49(1)	161(6)	52(2)	30(3)	1(1)	−4(3)
C(5)	72(2)	140(6)	58(2)	35(3)	22(2)	15(3)
C(6)	59(2)	99(5)	68(3)	17(3)	22(2)	10(3)
C(11)	35(1)	115(5)	53(2)	18(2)	19(1)	4(2)
C(12)	30(1)	98(4)	36(2)	12(2)	12(1)	7(2)
C(13)	31(1)	91(4)	44(2)	10(2)	9(1)	−4(2)
C(14)	29(1)	88(4)	45(2)	4(2)	10(1)	0(2)
C(15)	32(1)	79(4)	43(2)	9(2)	16(1)	10(2)
C(16)	38(2)	78(4)	53(2)	2(2)	18(2)	1(2)
C(17)	29(1)	98(4)	56(2)	2(2)	14(1)	2(2)
C(21)	40(2)	89(4)	64(2)	13(2)	22(2)	4(3)
O(11)	31(1)	140(4)	81(2)	15(2)	20(1)	−24(2)
O(12)	62(2)	110(4)	183(4)	−1(2)	61(2)	−53(3)
H(3)	6	16	8	0	0	2
H(13)	6	16	8	0	0	2
H(4)	7	18	9	0	0	2
H(14)	7	18	9	0	0	2
H(5)	7	18	9	0	0	2
H(15)	7	18	9	0	0	2
H(6)	7	18	9	0	0	2
H(16)	7	18	9	0	0	2
H(21)	6	16	8	0	0	2
H(22)	6	16	8	0	0	2
H(23)	5	13	7	0	0	1
H(24)	6	16	8	0	0	2
H(26)	6	16	8	0	0	2
H(27)	6	16	8	0	0	2
H(31)	7	18	9	0	0	2

The tetrahydro-1,2-oxazine ring can be considered in two parts (CNOC) and (CCCC). The first has shorter bond lengths and greater internal torsion angles, whilst the second is more nearly cyclohexane like in character with normal C—C bond lengths and torsion angles of *ca* 55°.

The torsion angle about the N—O bond (67°) is the largest in the ring and is markedly larger than in cyclohexane. Since in a perfect cyclohexane chair the ideal torsion angle is 60° yet molecular forces conspire to reduce this to 55°[11] it is likely that there is still some torsional strain present in N—O bond of tetrahydro-1,2-oxazine. This will mean, in terms of Fig 1, that the equilibrium position is away from C in the direction of A, as MO calculations predict. Alternatively one can say that the tendency of N—O bond in the ring to have a large internal torsion angle is constrained by the four carbon bridge so that the angle only reaches 67°.*

The intramolecular H bond is from the acid group in one molecule to the N atom in its neighbour. The H atom in the H-bond is nearer to the O atom (97 pm) than to the N atom (170 pm) showing that the hydroxylamine part of the ring is essentially like that of the free base and not like a quaternary salt. It is probable that the H-bond has little effect on the geometry at nitrogen since MO calculations on H-bonding by Pople[12] show that even moderately strong H-bonds do not have a significant effect on the molecular geometry of ammonia.

The N-substituent is in an equatorial position. Whilst it is always possible that this is due to crystal packing forces or to the presence of the H-bond, it is more likely that this represents the stable conformation at nitrogen in the free molecule. Katritzky's group[13] have shown that the parent compound has an exclusively equatorial N–H group, and the MO calculations[4,5] on hydroxylamine show a very high energy for the torsional arrangement involved with an axial N-substituent.

The bond angles around nitrogen show the N-substituent to lean towards the oxygen. The O–N-benzylic C angle is 104·8°, whereas the C(3)–N-benzylic C angle is 113·7°. This may be caused by the non-bonded repulsions between the N substituent and oxygen being lower than those with the

*Ring internal torsion angles and the torsion angles in figure one differ. A corresponds to a ring torsion angle of + 120° C to + 60° and B to − 60°.

Table 3. Interatomic distances and angles

(a) Bonded distances (pm) estimated standard deviations are 0·6 pm for all distances except C-H estimated as 5 pm

C(6)-C(5)	151·2	C(11)-H(22)	100
C(6)-O(1)	144·6	C(12)-C(13)	138·2
C(6)-H(6)	97	C(12)-C(17)	138·9
C(6)-H(16)	106	C(13)-H(14)	137·8
C(5)-C(4)	152·2	C(13)-C(23)	106
C(5)-H(5)	104	C(14)-C(15)	139·4
C(5)-H(15)	105	C(14)-H(24)	100
C(4)-C(3)	151·7	C(15)-C(16)	138·2
C(4)-H(4)	102	C(15)-C(21)	148·9
C(4)-H(14)	111	C(16)-C(17)	138·6
C(3)-N(2)	147·8	C(16)-H(26)	102
C(3)-H(3)	100	C(17)-H(17)	97
C(3)-H(13)	104	C(21)-O(11)	131·7
C(11)-C(12)	151·9	C(21)-O(12)	121·0
C(11)-N(2)	148·3	N(2)-O(1)	145·6
C(11)-H(21)	96	O(11)-H(31)	97

(b) Interbond angles (°) with estimated standard deviations in parentheses

C(6)-C(5)-C(4)	109·6	(0·3)	C(12)-C(17)-H(27)	118·3	(2·0)
C(6)-C(5)-H(5)	109·0	(2·0)	C(13)-C(12)-C(17)	119·2	(0·3)
C(6)-C(5)-H(15)	103·9	(2·0)	C(13)-C(14)-C(15)	120·5	(0·3)
C(6)-O(1)-N(2)	109·1	(0·3)	C(13)-C(14)-H(24)	123·9	(2·0)
C(5)-C(6)-O(1)	110·4	(0·3)	C(14)-C(13)-H(23)	117·4	(2·0)
C(5)-C(6)-H(6)	113·7	(2·0)	C(14)-C(15)-C(16)	119·2	(0·3)
C(5)-C(6)-H(16)	113·9	(2·0)	C(14)-C(15)-C(21)	121·7	(0·3)
C(5)-C(4)-C(3)	109·4	(0·3)	C(15)-C(14)-H(24)	115·6	(2·0)
C(5)-C(4)-H(4)	114·7	(2·0)	C(15)-C(16)-C(17)	120·0	(0·3)
C(5)-C(4)-H(14)	108·5	(2·0)	C(15)-C(16)-H(26)	119·2	(2·0)
C(4)-C(5)-H(5)	111·3	(2·0)	C(15)-C(21)-O(11)	114·2	(0·3)
C(4)-C(5)-H(15)	114·5	(2·0)	C(15)-C(21)-O(12)	122·7	(0·3)
C(4)-C(5)-N(2)	109·0	(0·3)	C(16)-C(15)-C(21)	119·1	(0·3)
C(4)-C(3)-H(3)	111·1	(2·0)	C(16)-C(17)-H(27)	121·0	(2·0)
C(4)-C(3)-H(13)	110·2	(2·0)	C(17)-C(16)-H(26)	120·7	(2·0)
C(3)-C(4)-H(4)	108·9	(2·0)	C(21)-O(11)-H(31)	108·6	(2·0)
C(3)-C(4)-H(14)	108·3	(2·0)	N(2)-C(3)-H(3)	105·0	(2·0)
C(3)-N(2)-C(11)	113·7	(0·3)	N(2)-C(3)-H(13)	109·3	(2·0)
C(3)-N(2)-O(1)	108·0	(0·3)	N(2)-C(11)-H(21)	104·1	(2·0)
C(11)-C(12)-C(13)	119·3	(0·3)	N(2)-C(11)-H(22)	107·9	(2·0)
C(11)-C(12)-C(17)	121·5	(0·3)	O(1)-C(6)-H(6)	105·8	(2·0)
C(11)-N(2)-O(1)	104·8	(0·3)	O(1)-C(6)-H(16)	106·5	(2·0)
C(12)-C(11)-N(2)	115·4	(0·3)	O(11)-C(21)-O(12)	123·0	(0·3)
C(12)-C(11)-H(21)	108·2	(2·0)	H(6)-C(6)-H(16)	106·0	(3·0)
C(12)-C(11)-H(22)	110·7	(2·0)	H(5)-C(5)-H(15)	108·2	(3·0)
C(12)-C(13)-C(14)	120·3	(0·3)	H(4)-C(4)-H(14)	106·9	(3·0)
C(12)-C(13)-C(23)	122·3	(2·0)	H(3)-C(3)-H(13)	112·0	(3·0)
C(12)-C(17)-C(16)	120·6	(0·3)	H(12)-C(11)-H(22)	110·3	(3·0)

Table 4. Torsion angles in tetrahydro-oxazine ring(°). The torsion angle A-B-C-D is positive if, when viewed in projection along the bond B→C the sense of rotation from BA to CD is clockwise. Estimated standard deviation 0·4°

O(1)-N(2)-C(3)-C(4)	−64·3
N(2)-C(3)-C(4)-C(5)	+57·9
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	−53·1
C(4)-C(5)-C(6)-O(1)	+56·2
C(5)-C(6)-O(1)-N(2)	−63·2
C(6)-O(1)-N(2)-C(3)	+67·1

C(3) H-atoms. Another bond angle feature is the opening out of the N–C–C angle at the benzylic carbon (115·4°). This may be a means by which the benzene ring minimises its non-bonded interactions with the ring atoms.

The N—O bond length is 145·6 pm, in agreement with the estimate made by Giguere and Liu.[2]

In order to correlate the results in this paper with the conformational equilibria discussed in the following paper, which relate to tetrahydro-1,2-oxazines carrying C-Me groups, we used the geometry found in this work to calculate positions

Table 5. Observed positions of ring atoms and calculated positions of methyl groups attached to ring carbon atoms in orthogonal coordinates (distances in pm)

	x	y	z
O1	561·0	481·7	494·0
N2	445·3	393·5	498·4
C3	433·4	326·1	367·1
C4	404·6	431·2	261·0
C5	516·5	535·1	260·9
C6	535·0	589·6	401·0
Me3A	565·4	253·4	335·5
Me3E	318·5	223·8	373·1
Me4A	270·4	500·0	292·1
Me4E	396·9	363·6	122·8
Me5A	647·8	469·6	214·0
Me5E	479·8	650·5	165·8
Me6A	407·6	663·2	446·5
Me6E	654·5	686·6	404·8
C11	472·8	300·1	610·7

Table 6. Calculated transannular distances for C-Me groups (pm)

Me3A-O(1)	278
Me3A-C(5)	295
Me4A-N(2)	291
Me4A-C(6)	300
Me5A-O(1)	293
Me5A-C(3)	300
Me6A-N(2)	277
Me6A-C(4)	297

for imaginary Me groups located in axial and equatorial positions on an oxazine ring. Each Me group was placed on a ring carbon such that C–C distances were 154 pm, Me–C–Me angles at 109·5° and the Me–C–Me plane was perpendicular to the plane of the three closest ring atoms. The calculated positions of these imaginary groups in the unit cell are given in Table 5, and the calculated transannular distances are given in Table 6. As expected the axial Me groups are closer to the hetero atoms than to the relevant ring C atoms. Moreover the axial groups on C(4) and C(5) are seen to be substantially less hindered than those on C(3) and C(6). These results will be combined with those in the following paper to argue that oxygen is "softer" than nitrogen.

REFERENCES

[1]F. G. Riddell and D. A. R. Williams, *Tetrahedron* **30**, 1083 (1974)
[2]P. A. Giguere and I. D. Liu, *Canad. J. Chem.* **30** (1952)
[3]L. Toft and B. Jerslev, *Acta. Chem. Scand.* **21**, 1383, 1948 (1967)
[4]W. H. Fink, D. C. Pan and L. C. Allen, *J. Chem. Phys.* **47**, 895 (1967)
[5]L. Pedersen and K. Morukama, *Ibid.* **46**, 3941 (1967)
[6]M. S. Gordon and J. A. Pople, *Ibid.* **49**, 4643 (1968)
[7]M. S. Gordon, *J. Am. Chem. Soc.* **91**, 1322 (1969)
[8]A. Griffiths and M. T. G. Powell, *Crystal "69" computer program for the Elliott* 4130
[9]P. Main, M. M. Woolfson and G. Germain "LSAM", University of York (1971)
[10]*International Tables for X-ray Crystallography* Vol. III, Kynoch Press (1962)
[11]ᵃM. Davis and O. Hassel, *Acta Chem. Scand.* **17**, 1181 (1963) ᵇH. R. Buys and H. J. Geise, *Tetrahedron Letters* 2991 (1970)
[12]J. A. Pople, Centenary lecture to the Chemical Society (1972)
[13]R. A. Y. Jones, A. R. Katritzky, A. C. Richards, S. Saba, A. J. Sparrow and D. L. Trepanier, *Chem. Comm.* 673 (1972)

STRUCTURE FACTORS FOR 2-PARACARBOXYBENZYL-TETRAHYDRO-1,2-OXAZINE

H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC
0	0	4	84,3	-87,4	10	0	-6	11,7	-12,0	1	1	12	5,9	6,9
0	0	6	19,6	-18,7	10	0	-4	28,7	30,2	3	1	-15	4,8	5,2
0	0	10	3,8	-4,2	10	0	-2	5,6	-5,6	3	1	-14	4,7	-4,9
0	0	12	13,7	-13,8	10	0	0	21,9	-23,0	3	1	-12	3,4	-2,3
0	0	16	4,6	4,4	10	0	8	6,5	-6,6	3	1	-10	6,9	6,8
2	0	-16	6,4	6,7	10	0	10	6,2	5,6	3	1	-9	4,3	3,4
2	0	-14	4,3	3,5	12	0	-16	3,8	-4,3	3	1	-8	15,5	16,5
2	0	-12	33,5	-32,5	12	0	-12	6,6	6,4	3	1	-7	3,8	-3,4
2	0	-8	4,7	5,3	12	0	-10	10,0	-10,8	3	1	-6	10,5	-10,1
2	0	-6	4,2	-5,2	12	0	-8	7,7	7,6	3	1	-5	5,3	-6,4
2	0	-4	25,9	-25,3	12	0	-6	26,7	26,6	3	1	-4	35,1	-36,4
2	0	6	12,2	12,4	12	0	-4	5,9	-5,7	3	1	-3	41,1	-42,0
2	0	8	9,1	8,3	12	0	-2	17,3	-18,1	3	1	3	4,2	4,5
2	0	10	20,4	-20,7	12	0	0	5,1	2,9	3	1	4	26,1	25,3
2	0	12	10,4	10,6	12	0	4	5,9	-6,7	3	1	5	28,5	-28,0
2	0	16	4,7	-3,6	12	0	6	20,1	-21,4	3	1	6	3,6	-3,7
4	0	-16	4,1	4,7	12	0	8	8,1	8,4	3	1	7	7,3	6,2
4	0	-14	8,7	-9,0	12	0	10	5,6	5,1	3	1	8	9,5	-8,8
4	0	-12	7,8	8,6	14	0	-12	6,7	-7,0	3	1	9	7,7	-7,4
4	0	-10	3,2	3,3	14	0	-10	11,8	-12,0	3	1	10	7,9	-8,4
4	0	-8	2,4	2,8	14	0	-8	11,6	12,6	3	1	11	4,9	5,6
4	0	-6	42,0	-41,7	14	0	-6	54,7	56,6	3	1	12	8,7	8,7
4	0	-4	30,5	-31,0	14	0	-4	4,1	3,4	3	1	13	4,4	4,2
4	0	2	39,9	-41,1	14	0	-2	24,7	-24,6	3	1	15	4,8	5,1
4	0	4	12,2	13,0	14	0	0	15,5	-15,3	3	1	16	6,0	-6,0
4	0	8	2,7	2,7	14	0	2	3,3	-4,0	5	1	-14	4,8	-5,3

H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC
4	0	10	16,1	15,8	14	0	4	5,7	-5,2	5	1	-12	9,8	10,5
4	0	14	5,4	5,2	16	0	-8	10,6	10,2	5	1	-10	3,8	-4,1
6	0	-12	3,2	-2,5	16	0	-6	5,7	-5,6	5	1	-9	5,6	5,3
6	0	-10	15,9	-15,4	16	0	-4	10,5	9,9	5	1	-8	16,6	-17,0
6	0	-8	6,6	7,9	16	0	-2	9,6	10,2	5	1	-7	7,4	-6,4
6	0	-6	13,7	13,3	16	0	0	3,7	-2,3	5	1	-6	6,3	-5,1
6	0	-4	7,4	7,9	16	0	2	3,7	-4,1	5	1	-5	10,7	-10,3
6	0	-2	31,3	-31,5	16	0	4	5,5	-5,8	5	1	-4	29,2	29,9
6	0	0	8,5	-7,2	16	0	6	5,0	4,9	5	1	-3	57,0	59,6
6	0	2	33,3	-33,5	18	0	-12	4,1	-3,6	5	1	-1	24,9	-25,1
6	0	4	14,3	-14,7	18	0	4	11,2	9,9	5	1	0	36,1	-37,0
6	0	6	12,1	11,8	20	0	-8	7,8	-7,4	5	1	1	8,9	-8,7
6	0	8	17,5	18,3	20	0	2	8,2	7,0	5	1	2	7,9	7,6
6	0	10	4,8	5,3	1	1	-15	5,1	5,1	5	1	3	13,0	-12,7
6	0	14	4,4	-2,9	1	1	-14	11,6	11,4	5	1	4	17,3	17,7
6	0	16	4,8	4,8	1	1	-13	11,0	10,6	5	1	5	12,8	-12,4
8	0	-14	12,5	12,5	1	1	-12	9,6	-10,0	5	1	6	9,9	-9,1
8	0	-10	7,5	-5,9	1	1	-9	6,6	-5,5	5	1	7	11,6	-11,6
8	0	-8	37,5	-37,5	1	1	-8	19,3	-18,9	5	1	8	9,7	-10,1
8	0	-6	15,2	-15,0	1	1	-7	6,1	5,6	5	1	9	6,7	-8,0
8	0	-4	14,2	14,6	1	1	-5	52,6	-51,9	5	1	10	11,7	10,8
8	0	-2	3,6	3,7	1	1	-4	69,5	72,1	5	1	11	6,3	6,8
8	0	0	8,9	8,4	1	1	4	3,3	-3,1	5	1	12	5,8	5,5
8	0	2	9,6	11,0	1	1	5	38,4	38,0	5	1	14	5,0	-4,5
8	0	4	16,1	-15,0	1	1	6	57,2	56,1	5	1	15	4,9	4,8
8	0	6	9,7	-9,9	1	1	7	13,2	13,7	7	1	-14	3,9	-4,9
8	0	10	5,8	6,2	1	1	9	9,3	9,4	7	1	-13	10,2	9,9
10	0	-16	4,6	4,3	1	1	10	17,0	-17,9	7	1	-11	6,2	6,2
10	0	-8	15,7	-16,1	1	1	11	10,6	-11,6	7	1	-10	19,9	19,5
7	1	-9	4,8	5,2	11	1	6	8,0	-7,8	2	2	-12	12,1	-12,3
7	1	-8	12,8	12,4	11	1	9	4,9	-5,0	2	2	-11	3,9	-4,1
7	1	-7	4,7	-4,2	13	1	-12	7,9	7,7	2	2	-10	7,4	7,5
7	1	-6	32,1	-29,5	13	1	-11	9,4	-9,2	2	2	-9	3,8	-4,8
7	1	-5	21,6	-18,1	13	1	-9	9,1	-8,9	2	2	-8	53,7	54,1
7	1	-4	17,2	-14,7	13	1	-8	10,1	-10,8	2	2	-7	8,3	-8,4
7	1	-3	18,9	-17,0	13	1	-6	3,4	1,4	2	2	-6	7,8	8,8
7	1	-2	16,2	-15,3	13	1	-5	12,0	13,1	2	2	-5	23,6	-24,4
7	1	-1	25,5	24,4	13	1	-3	21,3	22,2	2	2	-4	14,8	-14,9
7	1	0	22,2	-20,9	13	1	-2	20,1	20,0	2	2	-3	18,2	17,2
7	1	1	10,7	10,7	13	1	-1	12,1	11,7	2	2	2	17,3	-17,7
7	1	2	15,7	16,4	13	1	0	8,9	8,9	2	2	3	19,0	18,4
7	1	3	16,0	-15,7	13	1	2	11,3	-12,0	2	2	4	16,2	-16,2
7	1	4	27,2	25,7	13	1	3	4,5	-3,9	2	2	5	4,9	-4,8
7	1	5	6,5	-6,6	13	1	4	10,1	-9,8	2	2	6	22,9	22,4
7	1	7	15,1	-14,6	13	1	7	8,8	-8,3	2	2	7	5,0	3,9
7	1	8	9,1	-8,7	13	1	8	11,7	10,8	2	2	8	5,2	5,5
7	1	9	6,1	6,8	15	1	-14	3,7	-2,8	2	2	9	3,4	-3,8
7	1	10	4,2	-4,4	15	1	-11	9,5	-9,1	2	2	10	13,0	-12,6
7	1	11	4,0	-2,8	15	1	-10	9,4	9,8	2	2	11	10,7	-10,5
7	1	12	4,5	4,2	15	1	-9	12,7	-12,8	2	2	13	4,0	3,6
9	1	-18	5,0	4,6	15	1	-8	14,9	15,3	4	2	-13	4,0	-4,5
9	1	-16	5,1	4,5	15	1	-6	8,9	-9,4	4	2	-10	7,2	7,1
9	1	-15	6,6	7,1	15	1	-5	12,9	12,3	4	2	-9	3,8	3,5
9	1	-13	5,4	5,6	15	1	-4	26,6	-26,1	4	2	-8	7,0	7,9
9	1	-12	7,7	-7,2	15	1	-3	8,6	8,2	4	2	-7	8,3	-8,5
9	1	-11	9,4	9,1	15	1	-2	3,8	3,6	4	2	-6	15,8	-16,5
9	1	-10	7,0	7,2	15	1	-1	10,6	11,0	4	2	-5	18,0	-18,5
9	1	-9	4,6	4,7	15	1	0	19,7	19,1	4	2	-4	21,2	-22,5
9	1	-6	3,2	-1,5	15	1	1	6,6	6,2	4	2	-3	23,2	24,2
9	1	-5	3,1	3,7	15	1	4	9,7	-10,8	4	2	-2	50,4	54,9
9	1	-3	30,0	-30,5	15	1	5	6,2	-6,8	4	2	-1	13,1	14,3
9	1	-1	4,7	4,7	15	1	6	6,7	6,3	4	2	0	16,3	14,9
9	1	1	7,5	6,7	17	1	-9	4,1	-2,8	4	2	1	7,0	-7,9
9	1	2	11,6	-11,3	17	1	-8	6,3	5,2	4	2	2	14,0	-13,8
9	1	5	4,6	-4,7	17	1	-6	8,9	-8,3	4	2	3	25,2	-26,2
9	1	6	5,4	5,6	17	1	-5	3,5	-1,5	4	2	4	18,5	17,8
9	1	7	3,7	3,7	17	1	-4	3,5	3,6	4	2	5	10,3	10,2
9	1	8	3,4	-3,7	17	1	-2	5,5	5,9	4	2	6	11,6	-11,2
9	1	9	4,7	-4,1	17	1	0	5,4	-3,9	4	2	7	15,9	17,1
9	1	10	5,0	4,7	17	1	2	6,8	-6,5	4	2	8	5,7	-6,2
11	1	-15	3,6	2,8	19	1	-1	4,1	-3,2	4	2	9	17,3	-18,0
11	1	-12	4,6	4,8	19	1	1	3,9	-3,6	4	2	10	12,7	-12,7
11	1	-11	8,0	7,9	19	1	2	3,9	-2,5	4	2	11	9,3	9,3
11	1	-8	8,2	-7,3	21	1	-1	3,7	-3,1	4	2	12	4,5	-5,2
11	1	-7	5,8	-5,3	0	2	3	24,5	-24,7	6	2	-15	6,1	-5,1
11	1	-5	9,7	-9,9	0	2	4	92,8	-95,0	6	2	-14	3,9	-4,0
11	1	-4	15,2	15,1	0	2	5	27,0	-27,3	6	2	-12	4,2	-4,8
11	1	-3	24,8	24,6	0	2	6	15,9	14,8	6	2	-10	3,2	3,1
11	1	-2	16,2	-15,9	0	2	7	8,3	9,1	6	2	-8	6,8	5,9
11	1	-1	5,7	5,3	0	2	8	24,4	24,3	6	2	-7	17,8	16,5

H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC
11	1	0	3,1	-3,6	0	2	9	24,3	23,9	6	2	-6	12,3	12,4
11	1	1	4,1	-4,1	0	2	10	24,8	24,1	6	2	-5	23,8	23,1
11	1	2	14,8	14,5	0	2	11	8,1	-8,1	6	2	-4	8,6	8,7
11	1	5	3,5	-2,5	0	2	13	4,2	-3,7	6	2	-2	3,6	2,4
6	2	-1	72,7	-76,7	12	2	-6	4,1	2,2	1	3	-7	59,5	58,8
6	2	0	16,4	-15,9	12	2	-5	5,1	-5,7	1	3	-6	15,4	-14,8
6	2	2	8,0	8,0	12	2	-4	15,4	-16,6	1	3	-5	38,1	37,1
6	2	3	8,5	9,5	12	2	-3	5,4	4,5	1	3	-4	18,3	18,1
6	2	4	3,0	4,1	12	2	-2	5,9	-5,6	1	3	-3	19,6	-20,3
6	2	5	6,5	6,1	12	2	-1	3,4	-2,7	1	3	-2	2,2	-1,4
6	2	6	8,3	9,2	12	2	0	14,7	14,6	1	3	-1	9,0	9,0
6	2	7	7,3	-8,1	12	2	1	8,9	9,3	1	3	0	5,0	-4,7
6	2	8	5,2	-5,7	12	2	2	25,1	28,1	1	3	1	6,5	-6,9
6	2	12	10,3	-9,7	12	2	3	7,5	7,7	1	3	2	2,1	-3,0
6	2	13	5,6	4,8	12	2	6	8,1	-8,7	1	3	3	2,4	1,9
6	2	14	7,3	-6,5	12	2	7	4,9	-5,7	1	3	4	35,0	-34,5
8	2	-18	6,5	-7,4	14	2	-16	7,3	6,9	1	3	5	33,4	-32,6
8	2	-16	5,4	-5,0	14	2	-15	4,8	-5,3	1	3	6	43,1	40,0
8	2	-13	3,6	2,5	14	2	-14	8,2	8,5	1	3	7	3,0	-2,1
8	2	-12	7,4	8,7	14	2	-10	17,8	-19,0	1	3	10	5,8	-5,5
8	2	-10	3,7	4,5	14	2	-9	6,9	7,3	1	3	11	4,7	-5,5
8	2	-8	3,6	-2,7	14	2	-8	6,6	-6,5	3	3	-14	5,6	5,5
8	2	-7	2,9	2,3	14	2	-6	10,1	9,1	3	3	-13	7,5	-7,2
8	2	-5	38,3	39,2	14	2	-4	7,5	-8,1	3	3	-12	5,0	4,4
8	2	-4	18,2	19,3	14	2	-3	8,4	-9,2	3	3	-11	8,5	-8,7
8	2	-3	6,8	-7,4	14	2	-2	16,6	-17,7	3	3	-10	7,9	7,6
8	2	-2	7,5	-7,9	14	2	-1	9,7	-10,1	3	3	-8	14,2	14,5
8	2	-1	8,4	-8,0	14	2	0	6,3	6,6	3	3	-7	17,4	17,0
8	2	0	5,0	4,5	14	2	1	9,8	9,8	3	3	-6	45,6	-46,4
8	2	1	29,5	-29,1	14	2	2	11,2	11,7	3	3	-5	4,3	4,5
8	2	2	10,4	9,4	14	2	3	9,8	10,0	3	3	-4	12,8	-13,9
8	2	3	7,5	-7,5	14	2	4	11,4	12,0	3	3	-3	7,9	-6,9
8	2	5	4,8	5,1	14	2	5	4,5	-4,6	3	3	-2	6,3	-5,3
8	2	6	9,1	-9,5	16	2	-14	9,4	10,2	3	3	-1	11,9	12,7
8	2	9	7,2	7,3	16	2	-13	3,8	-2,8	3	3	0	3,7	3,5
8	2	10	5,1	5,1	16	2	-11	5,9	-5,9	3	3	1	36,6	35,8
10	2	-16	9,7	-10,1	16	2	-10	4,9	-4,3	3	3	2	2,8	-2,6
10	2	-15	5,2	6,0	16	2	-9	4,7	4,4	3	3	3	22,3	-21,2
10	2	-13	5,6	-5,9	16	2	-8	6,9	-6,5	3	3	4	19,9	20,0
10	2	-12	3,5	3,2	16	2	-7	12,4	12,9	3	3	5	4,5	-6,0
10	2	-10	5,3	6,6	16	2	-6	10,1	-10,5	3	3	7	8,2	7,1
10	2	-9	6,3	6,0	16	2	-4	3,6	-2,8	3	3	8	3,7	3,3
10	2	-8	3,2	-2,3	16	2	-3	5,5	-5,9	3	3	9	3,0	-2,6
10	2	-7	8,7	10,3	16	2	-1	3,8	3,5	3	3	10	7,6	-7,5
10	2	-6	10,7	10,8	16	2	3	4,3	-4,7	3	3	13	4,2	-5,0
10	2	-5	14,5	-14,9	18	2	-9	4,1	4,1	3	3	15	3,6	-3,0
10	2	-4	9,6	10,9	18	2	-8	4,2	4,3	5	3	-12	4,2	-4,3
10	2	-3	7,1	-8,0	18	2	0	5,0	-5,4	5	3	-11	9,2	-9,1
10	2	-2	17,0	-17,4	18	2	5	4,3	3,3	5	3	-10	6,7	6,0
10	2	-1	14,5	15,3	20	2	-7	9,9	-10,3	5	3	-9	11,5	11,2
10	2	0	5,7	-6,1	20	2	-4	4,0	4,0	5	3	-8	7,9	-8,9
10	2	2	9,9	9,8	20	2	-3	4,0	3,7	5	3	-7	14,7	-14,9
10	2	4	6,3	6,9	1	3	-14	5,9	6,3	5	3	-6	3,7	-3,2
10	2	9	7,6	-7,2	1	3	-13	6,8	-7,3	5	3	-5	5,6	-5,1
12	2	-17	4,3	4,0	1	3	-12	7,2	8,3	5	3	-4	13,0	11,8
12	2	-12	5,7	5,2	1	3	-11	15,1	-15,4	5	3	-3	49,8	49,8
12	2	-10	9,1	-9,9	1	3	-10	6,5	-6,6	5	3	-2	62,9	64,2
12	2	-9	7,9	-8,3	1	3	-9	8,9	-8,3	5	3	-1	25,0	-26,8
12	2	-8	6,9	-7,3	1	3	-8	19,9	-19,4	5	3	0	13,1	-13,5
5	3	1	10,5	-10,2	11	3	0	9,7	-10,6	2	4	-10	22,7	-22,8
5	3	2	40,3	-40,9	11	3	1	16,2	-16,5	2	4	-9	5,7	5,8
5	3	3	5,6	5,7	11	3	2	6,4	6,8	2	4	-8	13,8	14,2
5	3	4	7,8	8,0	11	3	3	6,9	6,5	2	4	-7	19,2	20,1
5	3	5	10,9	11,1	11	3	4	4,8	4,3	2	4	-6	2,8	4,0
5	3	7	12,6	13,3	11	3	5	5,8	6,2	2	4	-5	23,6	-24,0
5	3	8	14,5	-14,5	11	3	6	7,2	7,6	2	4	-4	9,5	-9,5
5	3	10	3,7	2,4	11	3	7	7,3	7,1	2	4	-3	17,2	-17,0
5	3	12	9,0	9,1	11	3	8	4,5	4,9	2	4	-2	4,6	-5,5
5	3	13	5,2	-6,0	13	3	-13	6,8	6,3	2	4	-1	2,5	-2,1
5	3	15	8,0	-8,1	13	3	-12	6,7	6,7	2	4	0	22,5	22,6
7	3	-15	10,4	-9,6	13	3	-11	7,0	6,8	2	4	1	6,2	-6,3
7	3	-14	15,1	-15,1	13	3	-10	4,1	-3,5	2	4	2	8,6	8,8
7	3	-11	5,3	5,2	13	3	-1	16,5	-17,8	2	4	3	11,0	-10,1
7	3	-10	7,7	7,7	13	3	1	15,1	-16,0	2	4	4	11,3	-9,5
7	3	-8	10,4	-11,2	13	3	2	11,0	-10,7	2	4	6	14,5	14,8
7	3	-5	18,7	-17,7	13	3	4	5,3	-5,8	2	4	7	8,5	8,4
7	3	-4	36,9	35,2	13	3	5	11,7	11,7	2	4	8	3,1	-3,2
7	3	-3	9,8	-10,0	13	3	6	10,6	9,5	2	4	10	4,0	-4,1
7	3	-2	27,1	23,2	13	3	7	6,3	6,2	2	4	15	4,8	4,2
7	3	-1	44,3	42,4	13	3	8	6,3	5,2	4	4	-16	3,4	3,0

H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC
7	3	0	6,1	-5,8	15	3	-14	4,1	-4,1	4	4	-14	5,5	6,2
7	3	1	11,5	10,7	15	3	-13	14,2	14,2	4	4	-12	8,1	-8,6
7	3	3	5,8	-6,0	15	3	-12	6,4	-5,8	4	4	-10	6,5	-7,3
7	3	5	6,8	-6,8	15	3	-11	7,0	7,0	4	4	-9	14,4	14,2
7	3	6	4,5	-5,0	15	3	-10	3,9	4,1	4	4	-7	11,0	-11,1
7	3	7	5,4	-5,4	15	3	-7	4,8	-4,5	4	4	-6	10,6	-11,4
7	3	8	17,7	-17,9	15	3	-3	4,5	-4,8	4	4	-5	3,0	-3,4
7	3	9	16,0	17,1	15	3	-1	7,7	-7,4	4	4	-4	12,4	-12,6
9	3	-14	6,7	-6,4	15	3	0	11,2	11,9	4	4	-3	16,0	15,3
9	3	-13	13,9	-13,4	17	3	-12	10,3	-9,9	4	4	-2	2,0	2,2
9	3	-11	4,0	-3,4	17	3	-9	4,2	3,9	4	4	-1	3,5	-3,4
9	3	-8	11,1	-10,9	17	3	-2	7,0	7,9	4	4	0	34,4	35,4
9	3	-7	4,8	4,8	21	3	-1	4,9	-4,8	4	4	1	17,3	16,4
9	3	-5	16,5	15,9	0	4	0	26,1	24,7	4	4	2	6,2	-7,0
9	3	-4	36,0	35,2	0	4	1	23,6	-23,4	4	4	3	24,0	-25,0
9	3	-3	27,0	-24,4	0	4	2	32,3	32,0	4	4	4	8,1	-7,2
9	3	0	5,7	-5,7	0	4	3	6,7	-6,5	4	4	5	10,8	10,0
9	3	1	7,7	7,7	0	4	4	9,4	-10,2	4	4	6	5,9	6,0
9	3	3	6,2	-6,5	0	4	5	17,5	-17,1	4	4	9	7,8	-8,5
9	3	5	5,8	5,9	0	4	6	12,4	-10,3	4	4	12	4,1	3,7
9	3	6	9,2	-8,6	0	4	7	20,5	19,2	4	4	14	3,8	2,9
9	3	7	5,5	6,0	0	4	8	6,0	-5,0	6	4	-15	8,1	8,2
9	3	8	7,0	6,0	0	4	9	8,1	8,1	6	4	-12	11,4	-11,5
11	3	-14	4,5	4,3	0	4	10	4,4	-4,2	6	4	-11	10,7	-11,6
11	3	-13	4,2	-4,1	0	4	11	4,7	-6,4	6	4	-10	9,8	10,4
11	3	-11	4,6	4,6	0	4	12	3,6	-3,1	6	4	-7	5,0	-5,7
11	3	-9	5,4	6,3	0	4	13	5,5	-6,4	6	4	-6	8,6	-9,0
11	3	-7	9,0	-9,0	2	4	-17	5,4	-6,3	6	4	-5	8,2	-8,9
11	3	-6	4,1	2,9	2	4	-16	3,7	3,6	6	4	-4	2,4	-3,0
11	3	-5	17,1	-15,9	2	4	-15	3,8	-3,7	6	4	-3	4,9	-4,4
11	3	-4	13,0	-12,5	2	4	-14	5,9	5,3	6	4	-2	6,9	5,3
11	3	-3	14,3	13,6	2	4	-13	3,1	2,5	6	4	0	15,8	-16,2
11	3	-2	6,3	-5,8	2	4	-12	10,8	-10,7	6	4	1	14,5	12,9
11	3	-1	3,6	-3,9	2	4	-11	18,0	18,8	6	4	2	3,3	2,4
6	4	3	44,2	45,7	14	4	-6	5,8	7,2	3	5	1	14,5	14,5
6	4	4	18,5	18,0	14	4	-5	4,3	-4,0	3	5	3	12,3	-11,3
6	4	5	3,6	3,5	14	4	-3	5,3	-5,9	3	5	4	16,8	-15,9
6	4	6	4,0	-4,2	14	4	-2	5,0	-4,9	3	5	5	10,9	9,9
6	4	7	8,6	-9,3	14	4	-1	7,0	-7,0	3	5	6	12,9	12,2
6	4	9	15,6	-15,8	14	4	1	11,8	12,9	3	5	7	5,9	-5,4
6	4	10	11,3	11,8	14	4	2	4,8	-5,4	3	5	10	3,2	-2,9
6	4	11	7,0	-7,2	14	4	5	4,9	-4,7	3	5	11	4,1	3,2
8	4	-17	4,7	3,9	14	4	7	5,3	-5,3	5	5	-13	11,1	11,0
8	4	-16	4,7	4,8	16	4	-11	8,5	-8,9	5	5	-11	5,9	-5,5
8	4	-15	11,4	11,2	16	4	-6	6,3	6,0	5	5	-10	5,9	5,3
8	4	-10	6,7	-6,7	16	4	-3	3,9	-4,5	5	5	-9	4,1	4,3
8	4	-9	29,4	-30,1	16	4	0	4,2	4,3	5	5	-8	4,4	4,5
8	4	-8	6,4	-8,0	16	4	1	4,8	4,9	5	5	-7	3,1	-2,2
8	4	-7	10,9	-10,2	16	4	2	3,7	-3,1	5	5	-6	19,5	-18,6
8	4	-5	7,8	8,0	18	4	-12	4,4	-3,4	5	5	-5	2,7	0,9
8	4	-4	6,6	5,5	18	4	-1	4,0	3,8	5	5	-3	7,5	-7,4
8	4	-3	5,1	5,2	20	4	-4	5,7	5,5	5	5	-2	14,4	14,2
8	4	-2	10,4	-9,5	20	4	-3	11,1	9,8	5	5	-1	12,5	-12,7
8	4	-1	16,3	15,5	20	4	-2	5,3	4,9	5	5	0	13,5	-11,8
8	4	0	3,2	-8,9	20	4	1	5,9	-4,9	5	5	1	7,5	-7,7
8	4	2	12,5	11,5	1	5	-16	5,6	-6,7	5	5	2	34,3	-33,3
8	4	4	5,3	5,4	1	5	-14	5,7	-6,0	5	5	3	8,0	-7,9
8	4	5	12,8	13,8	1	5	-11	3,8	-3,7	5	5	4	30,0	29,9
8	4	6	16,0	-16,4	1	5	-9	6,1	-5,8	5	5	6	22,4	22,2
8	4	10	10,8	10,2	1	5	-7	7,4	7,9	5	5	7	14,9	14,4
8	4	12	4,6	4,3	1	5	-6	6,9	6,8	5	5	8	5,2	-4,4
10	4	-12	3,5	4,4	1	5	-5	9,5	9,2	7	5	-13	5,0	4,4
10	4	-10	8,9	-9,5	1	5	-4	13,3	13,5	7	5	-12	17,6	16,7
10	4	-9	6,3	6,5	1	5	-3	20,0	-18,3	7	5	-11	17,1	15,8
10	4	-7	5,1	-4,2	1	5	-2	4,5	5,2	7	5	-10	26,2	25,0
10	4	-6	20,7	20,1	1	5	-1	31,4	-29,7	7	5	-8	27,8	-27,1
10	4	-3	4,3	-4,4	1	5	2	8,1	-7,5	7	5	-7	7,2	-6,7
10	4	-2	19,0	-18,6	1	5	3	29,7	28,9	7	5	-6	20,6	-20,7
10	4	1	3,7	4,4	1	5	4	20,3	-19,1	7	5	-5	17,9	-17,6
10	4	2	4,9	5,7	1	5	5	2,9	1,9	7	5	-2	3,4	-3,3
10	4	3	5,2	-5,3	1	5	6	3,0	1,9	7	5	-1	19,7	18,8
10	4	4	13,0	-13,4	1	5	7	4,5	4,7	7	5	0	21,7	-20,8
10	4	5	3,3	-3,1	1	5	8	5,0	5,1	7	5	1	5,9	-5,4
10	4	6	6,8	-8,0	1	5	10	4,5	-3,2	7	5	2	12,5	-12,6
10	4	8	9,8	9,9	1	5	12	4,5	3,9	7	5	4	29,1	28,0
10	4	13	5,0	4,1	1	5	15	3,5	3,4	7	5	5	14,4	-14,5
12	4	-8	5,0	6,7	3	5	-16	5,5	-5,1	7	5	6	14,9	14,0
12	4	-7	3,4	3,0	3	5	-15	7,2	7,0	7	5	7	8,4	-8,2
12	4	-6	5,3	5,1	3	5	-14	5,6	-6,2	7	5	9	4,0	4,1
12	4	-3	6,7	6,0	3	5	-13	3,6	3,5	7	5	14	5,3	-3,7

H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC
12	4	1	13.9	-12.0	3	5	-12	11.0	-10.3	9	5	-13	5.7	-6.5
12	4	4	16.3	-16.5	3	5	-10	5.2	5.6	9	5	-12	14.4	13.6
12	4	5	12.0	-12.2	3	5	-9	5.1	-5.7	9	5	-10	5.8	5.9
12	4	6	5.3	-4.3	3	5	-8	17.7	16.8	9	5	-9	5.4	5.5
12	4	7	4.0	-1.5	3	5	-6	6.2	-7.2	9	5	-8	8.4	-9.1
12	4	9	6.0	4.7	3	5	-5	13.4	-13.1	9	5	-7	5.6	4.7
12	4	10	4.3	4.4	3	5	-3	13.7	-13.3	9	5	-6	5.9	-5.7
14	4	-8	8.1	9.0	3	5	-2	10.8	11.1	9	5	-5	7.8	6.5
14	4	-7	6.2	6.6	3	5	0	7.0	6.4	9	5	-4	5.1	4.6
9	5	-3	3.8	3.6	2	6	-5	5.4	5.1	8	6	-7	8.8	9.0
9	5	-1	6.1	-6.3	2	6	-4	6.5	-7.8	8	6	-6	16.7	16.8
9	5	0	19.4	-19.8	2	6	-3	14.4	-14.7	8	6	-5	9.9	10.7
9	5	2	15.0	14.9	2	6	-2	11.8	-11.4	8	6	-3	5.5	5.8
9	5	5	5.5	5.2	2	6	-1	11.0	10.5	8	6	-2	6.9	-8.0
9	5	6	3.6	-4.5	2	6	0	3.2	-3.3	8	6	-1	3.1	2.4
9	5	7	12.1	-11.9	2	6	1	19.8	19.5	8	6	0	8.6	-9.4
9	5	9	5.1	-5.6	2	6	3	2.4	-3.2	8	6	1	22.9	-24.6
11	5	-12	5.2	4.6	2	6	4	6.3	-6.8	8	6	2	23.3	25.2
11	5	-11	4.1	-3.3	2	6	5	2.8	2.7	8	6	3	15.6	-16.4
11	5	-10	9.6	-8.5	2	6	6	3.7	3.6	8	6	4	8.4	8.7
11	5	-7	4.2	-4.0	2	6	7	5.5	-5.2	8	6	5	7.8	8.2
11	5	-5	4.9	4.2	4	6	-14	4.1	4.1	8	6	6	10.7	-11.1
11	5	-3	7.7	7.7	4	6	-13	5.3	-4.7	8	6	7	4.9	4.5
11	5	-1	6.8	6.5	4	6	-12	3.2	-1.3	8	6	8	4.6	-5.5
11	5	0	6.3	5.7	4	6	-10	5.3	5.3	10	6	-12	5.2	4.2
11	5	5	6.3	-6.6	4	6	-8	14.9	15.2	10	6	-11	6.2	6.3
11	5	6	4.2	-3.6	4	6	-7	5.1	-5.3	10	6	-10	10.6	-10.7
11	5	8	6.5	-6.6	4	6	-6	5.4	-5.2	10	6	-9	7.3	7.5
11	5	9	4.9	-5.0	4	6	-5	4.9	5.4	10	6	-7	7.9	-8.2
11	5	10	4.4	-4.6	4	6	-3	2.2	1.7	10	6	-1	8.2	-8.7
13	5	-9	7.4	-7.1	4	6	1	5.6	6.1	10	6	0	3.4	2.9
13	5	-7	3.6	1.9	4	6	2	13.2	-14.2	10	6	1	9.2	10.4
13	5	-5	8.3	10.2	4	6	3	14.1	-14.4	10	6	2	17.6	17.9
13	5	-4	6.2	6.0	4	6	4	12.5	-12.9	10	6	8	4.5	3.6
13	5	-3	5.3	6.5	4	6	5	12.0	-12.9	10	6	12	8.2	-7.3
13	5	0	4.8	4.3	4	6	6	6.3	7.2	12	6	-12	4.0	-3.0
13	5	1	4.8	-4.7	4	6	7	9.1	9.2	12	6	-11	5.6	-5.5
13	5	2	4.5	-3.9	4	6	8	3.9	-3.8	12	6	-5	4.4	-4.2
13	5	8	5.1	-4.5	4	6	9	6.7	7.7	12	6	-3	4.9	3.6
15	5	-13	3.9	3.1	6	6	-14	5.4	-6.2	12	6	-2	7.1	-6.3
15	5	-11	3.9	2.0	6	6	-13	4.6	-4.4	12	6	-1	4.0	4.3
15	5	-10	4.4	3.8	6	6	-12	5.8	-6.0	12	6	0	14.4	15.5
15	5	-7	7.0	-6.8	6	6	-11	5.1	-5.1	12	6	3	4.5	2.9
15	5	-4	4.7	-4.2	6	6	-10	13.3	13.0	12	6	4	4.3	-4.1
15	5	-3	8.6	8.7	6	6	-9	18.4	19.1	12	6	8	4.7	4.7
15	5	-2	3.8	-3.6	6	6	-8	17.5	18.3	14	6	-7	4.7	4.5
15	5	2	4.0	3.5	6	6	-7	25.9	26.7	14	6	-3	9.7	-9.9
17	5	-8	4.4	4.0	6	6	-5	14.5	-16.1	16	6	-5	4.2	-3.3
17	5	-4	4.9	-4.5	6	6	-4	7.4	-7.3	16	6	-3	4.7	5.3
17	5	-1	4.6	3.6	6	6	-3	8.6	-8.2	16	6	-1	3.8	-4.7
19	5	0	3.7	6.4	6	6	-2	3.8	-4.4	18	6	-3	5.5	-5.4
0	6	1	14.0	-13.9	6	6	-1	2.5	-3.1	18	6	1	4.6	3.7
0	6	3	21.6	-19.2	6	6	0	7.7	8.2	20	6	-8	4.4	-4.4
0	6	4	3.4	-3.7	6	6	1	18.3	-20.0	20	6	0	6.6	-5.6
0	6	7	4.3	3.8	6	6	2	7.7	-7.8	1	7	-12	6.0	6.1
0	6	8	8.3	8.4	6	6	4	7.8	8.3	1	7	-9	4.9	4.6
0	6	9	5.2	5.1	6	6	6	15.6	-16.1	1	7	-7	3.7	-3.8
0	6	10	9.2	-9.9	6	6	7	3.7	4.2	1	7	-6	8.9	-10.1
0	6	11	4.4	5.1	6	6	8	3.6	-4.0	1	7	-5	7.5	6.3
2	6	-14	7.3	7.8	6	6	10	4.4	4.1	1	7	-4	12.7	-13.5
2	6	-10	5.5	-5.7	6	6	13	5.2	5.4	1	7	-3	2.7	3.0
2	6	-9	6.0	-6.3	8	6	-12	4.1	-4.5	1	7	-2	11.9	11.8
2	6	-7	7.4	-7.4	8	6	-11	5.8	5.3	1	7	-1	13.5	-13.6
2	6	-6	17.3	17.4	8	6	-8	6.0	-6.3	1	7	0	4.2	3.8
1	7	2	4.0	-3.9	7	7	0	7.1	-7.2	2	8	7	6.7	-5.9
1	7	4	3.8	4.0	7	7	2	19.8	-19.8	2	8	9	3.5	-4.3
1	7	5	10.4	11.0	9	7	-14	4.2	-4.5	4	8	-13	4.6	-2.2
1	7	7	3.1	-2.6	9	7	-3	6.3	-6.3	4	8	-12	5.4	-4.9
1	7	8	3.1	-3.6	9	7	-2	9.8	9.9	4	8	-8	5.4	-5.2
1	7	11	3.7	-3.9	9	7	-1	14.7	-15.1	4	8	-6	13.8	-13.7
1	7	12	3.9	4.4	9	7	0	4.1	-3.0	4	8	-5	6.3	-5.9
1	7	13	3.8	-3.3	9	7	1	7.3	-6.9	4	8	-3	5.7	-6.1
1	7	14	3.6	3.2	9	7	2	5.3	4.3	4	8	-2	13.5	13.4
3	7	-17	4.8	-4.6	9	7	3	14.4	14.6	4	8	-1	15.8	15.8
3	7	-10	5.1	5.3	9	7	4	5.7	-5.3	4	8	0	5.3	5.6
3	7	-9	4.0	-3.8	9	7	5	10.4	10.0	4	8	1	10.3	10.4
3	7	-8	3.3	2.3	9	7	6	3.8	-2.6	4	8	3	3.5	-3.3
3	7	-6	6.3	-6.4	9	7	11	7.2	6.6	4	8	4	6.9	6.8
3	7	-5	18.6	18.8	11	7	-13	6.4	6.3	4	8	5	9.0	-9.3
3	7	-4	10.6	-10.7	11	7	-12	5.6	5.0	4	8	7	5.6	6.1

H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC
3	7	-3	4,2	-4,6	11	7	-10	3,9	-3,9	4	8	10	4,0	-2,7
3	7	-2	3,2	3,5	11	7	-9	5,0	-5,4	4	8	11	5,1	-4,8
3	7	-1	7,3	7,7	11	7	-8	5,5	-5,4	4	8	14	4,9	-3,0
3	7	0	13,5	13,2	11	7	-7	3,6	-4,1	6	8	-11	3,7	-2,7
3	7	1	2,6	3,1	11	7	-6	4,2	4,0	6	8	-7	6,8	6,6
3	7	2	7,6	-7,6	11	7	-4	4,0	2,3	6	8	-6	6,1	-5,4
3	7	4	6,9	-6,6	11	7	-2	7,1	-7,3	6	8	-5	20,5	-20,6
3	7	5	6,6	-7,2	11	7	-1	13,7	-13,3	6	8	-4	19,0	-18,8
3	7	6	7,1	7,7	11	7	1	6,1	5,8	6	8	-3	6,0	-6,6
3	7	7	9,1	-9,2	11	7	4	3,6	3,4	6	8	-1	14,2	14,4
3	7	8	5,8	-7,0	13	7	-12	5,2	-5,4	6	8	0	11,8	11,1
5	7	-17	4,6	-4,8	13	7	-11	4,2	-4,1	6	8	1	13,0	12,9
5	7	-13	3,9	-2,2	13	7	-5	4,1	3,7	6	8	2	11,5	11,5
5	7	-11	6,8	-6,8	13	7	-3	4,7	-4,2	6	8	3	3,7	3,8
5	7	-9	11,7	-11,5	13	7	-2	5,5	-5,2	6	8	10	4,2	3,5
5	7	-7	13,2	13,4	13	7	6	5,6	5,7	8	8	-8	3,9	3,3
5	7	-5	13,0	13,5	15	7	-12	5,3	-5,6	8	8	-7	12,3	-11,9
5	7	-4	19,4	19,4	15	7	-10	5,2	-4,6	8	8	-6	5,6	5,0
5	7	-3	8,5	9,0	15	7	-2	3,9	3,5	8	8	-5	8,0	-7,1
5	7	-2	7,8	8,8	15	7	-1	5,6	5,0	8	8	-4	6,0	5,9
5	7	-1	2,8	2,8	17	7	-1	5,3	-5,0	8	8	-3	10,6	10,7
5	7	0	9,4	-9,6	0	8	1	4,9	4,8	8	8	-2	17,7	-17,7
5	7	2	8,9	-8,9	0	8	4	10,8	-10,5	8	8	-1	11,0	11,7
5	7	3	4,2	-4,5	0	8	6	11,6	12,6	8	8	0	11,4	-11,0
5	7	4	4,9	4,8	0	8	7	7,3	-7,8	8	8	1	5,7	-5,9
5	7	7	5,0	4,7	0	8	8	11,3	11,4	8	8	2	4,4	4,5
5	7	8	7,5	-7,3	0	8	10	4,5	-4,7	8	8	5	4,6	4,1
5	7	9	5,6	-5,8	0	8	12	3,6	-3,1	10	8	-11	4,3	4,0
5	7	10	6,2	-3,9	2	8	-11	4,2	3,6	10	8	-10	3,9	3,3
5	7	11	5,2	-5,2	2	8	-9	7,6	7,7	10	8	-9	4,8	4,5
5	7	14	4,8	4,0	2	8	-7	5,2	-5,5	10	8	-7	9,7	-9,6
7	7	-8	15,7	-15,8	2	8	-5	7,1	7,5	10	8	-5	6,0	-5,8
7	7	-7	4,6	-5,1	2	8	-3	8,7	-8,9	10	8	0	10,6	-10,1
7	7	-6	6,8	-7,7	2	8	-1	3,2	-2,8	10	8	1	4,7	5,0
7	7	-5	11,5	-12,1	2	8	0	6,2	6,9	10	8	2	4,7	-4,0
7	7	-4	25,7	26,4	2	8	1	4,9	5,4	10	8	6	5,9	-5,1
7	7	-3	10,6	11,0	2	8	2	3,9	-4,5	12	8	-11	4,2	-4,2
7	7	-2	28,9	28,7	2	8	3	2,8	2,9	12	8	-10	5,7	-4,7
7	7	-1	11,7	11,8	2	8	5	7,1	7,5	12	8	-9	5,5	-4,3
12	8	-6	8,7	8,7	3	9	-13	4,0	4,2	2	10	2	10,1	-9,9
12	8	-2	6,1	-5,0	3	9	-9	4,9	-4,6	2	10	3	4,4	-4,0
12	8	0	4,0	4,5	3	9	-7	3,7	-3,7	2	10	7	4,5	4,7
12	8	3	4,3	-4,1	3	9	-5	4,7	4,8	4	10	-7	4,9	4,5
12	8	4	5,6	-4,9	3	9	-3	10,2	-9,3	4	10	-2	3,3	3,3
12	8	9	5,2	4,1	3	9	-2	3,7	-3,4	4	10	-1	6,5	5,8
14	8	-14	5,7	4,3	3	9	-1	8,8	-8,4	4	10	0	3,5	-4,6
14	8	-7	4,5	-3,5	3	9	1	8,7	8,6	4	10	1	5,8	-5,7
14	8	-3	4,5	-2,5	3	9	2	7,7	-8,1	4	10	2	6,4	-6,9
14	8	-1	6,2	5,6	3	9	3	4,4	4,6	4	10	3	13,0	-13,2
14	8	0	7,7	6,7	3	9	4	13,2	13,1	4	10	4	4,0	-4,6
14	8	1	4,5	-3,3	3	9	6	6,2	6,3	4	10	5	3,6	-2,5
14	8	2	5,1	4,5	0	10	0	8,7	9,3	4	10	7	5,0	5,6
14	8	4	4,2	-2,9	0	10	1	3,6	3,2	4	10	9	5,1	5,5
16	8	-2	4,6	3,6	0	10	3	7,3	6,6	3	11	0	4,4	-3,8
1	9	-8	5,9	5,6	0	10	4	5,3	-5,6	3	11	1	8,7	9,0
1	9	-6	3,0	0,6	0	10	5	3,3	-3,7	3	11	2	3,7	-3,7
1	9	-5	4,1	4,1	0	10	10	4,2	-4,1	3	11	5	4,6	-5,0
1	9	-4	9,7	-9,9	0	10	12	4,3	-4,0	3	11	6	4,3	-4,5
1	9	-2	5,5	6,1	2	10	-6	4,3	-3,7	3	11	8	6,1	-6,4
1	9	-1	5,5	5,7	2	10	-4	8,2	-7,4	0	12	3	3,8	2,5
1	9	2	3,0	-2,2	2	10	-2	8,4	8,6	2	12	-4	7,5	-7,1
1	9	3	11,6	-12,5	2	10	-1	6,7	-6,7	2	12	-1	4,0	4,0
1	9	4	7,8	8,5	2	10	0	7,5	8,0	4	12	-5	4,9	-4,3
1	9	6	4,1	4,3	2	10	1	5,7	-5,0	4	12	-3	4,8	4,5
										4	12	-1	5,2	5,3