

Robert Strothmann, 5040218
Jonas Schulz, 5153815
David Ueberle, 4903184

E-Mail 1, E-Mail 2, ueberleda@zedat.fu-berlin.de

Laborbericht / Versuchsprotokoll

Versuchsnummer - Versuchstitel

Datum der Versuchsdurchführung:
Datum der Protokolleinreichung:
Assistent/in:
Dateiname:

Mit der Einreichung wird versichert, dass das Protokoll von den oben eingetragenen Personen in gemeinschaftlicher Arbeit angefertigt worden ist und dass sämtliche Quellen, die zur Erstellung des Protokolls genutzt wurden, im 8. Teil des Protokolls (Literatur) kenntlich gemacht worden sind.

1 Einleitung

Viele Eigenschaften von Molekülen beruhen auf der Quantenmechanik. Die Beschreibung und Berechnung dieser Eigenschaften wurden erst durch die Entwicklung von leistungsstarken Computern möglich. Solche Untersuchungen sind Teil der Physikalischen und Theoretischen Chemie.

Im Folgenden wird der Gleichgewichtsabstand und die Dissoziationsenergie von Chlorwasserstoff und Kohlenmonoxid durch das Lösen der Schrödingergleichung untersucht.

2 Theoretische Grundlagen

Die im Folgenden beschriebenen Systeme werden über die zeitunabhängige Schrödingergleichung ausgedrückt (Gleichung 1).

$$\mathcal{H}(r, R) \psi(r, R) = E \psi(r, R) \quad (1)$$

Jedoch steigt die Komplexität der Gleichung stark an, umso größer die Systeme werden, da sämtliche Elektronen und Kerne betrachtet werden. Eine Möglichkeit der Simplifizierung ist hier die Born-Oppenheimer-Näherung (Gleichung 2).

$$\mathcal{H}(r, R) = \mathcal{H}_K(R) + \mathcal{H}_e(r, R) \quad (2)$$

Sie approximiert aufgrund der vielfach höheren Masse der Kerne im Vergleich zu den Elektronen, dass die Bewegungen der Kerne und der Elektronen separierbar sind. Außerdem wird angenommen, dass die kinetische Energie der Kerne gleich Null und somit die potentielle Energie konstant ist.

Hieraus ergibt sich die elektronische Schrödingergleichung (Gleichung 3) mit dem Hamilton-Operator wobei die Energie nur noch parametrisch von den Koordinaten der Kerne abhängig ist.

$$\mathcal{H}_e(r, R) \psi(r, R) = (E(R) - \mathcal{V}_{KK}(R)) \psi_e(r, R) \quad (3)$$

Somit lassen sich Wertepaare aus der Energie des Systems und dem Abstand der Kerne berechnen, welche die Potentialenergieflächen bilden.

Durch die Born-Oppenheimer-Näherung spielen Isotopeneffekte keine Rolle, da die Kerne als in Ruhe approximiert werden und somit keine kinetische Energie besitzen. Die einzigen Terme in denen die Masse der Kerne vorkommen fallen somit weg.

Die Potentialenergieflächen sind abhängig von dem Zustand des Moleküls, da die Schrödingergleichung über die Wellenfunktion mit den Quantenzahlen verbunden ist. Für die Schwingungsspektroskopie ist lediglich der Grundzustand relevant, da vorwiegend unangeregte Moleküle betrachtet werden.

3 Einführung

:

Zur Bestimmung der gesuchten Energiewerte bezogen auf die Bindungslänge der Zweiatomigen Moleküle CO und HCl wurde mithilfe des Programms -Gaussian- die zeitunabhängige Schrödingergleichung gelöst. Im Allgemeinen löst -Gaussian- die

Wellenfunktion im Rahmen der Born Oppenheimer Näherung genau für eine Kerngeometrie. Folglich wurde ein Intervall von Bindungslängen der betreffenden Moleküle gewählt, und jeweils für jede Geometrie ein Energiewert bestimmt, um representative Ergebnisse zu erhalten.

Berechnet wurden die Energien für beide Moleküle mit selbem Intervall an Bindungslängen in zwei unterschiedlichen Methoden (B3LYP & CCSD). Allgemein bestehen die Unterschiede der Methoden in den verwendeten Näherungen, um Elektron-Elektron WW zu beschreiben. Im wesentlichen beruhen die Näherung auf Dichtefunktionalen für Elektronen und der daraus resultierenden WW (DFT) oder auf Beschreibung wirkenden Kräfte auf den Elektronen durch ein externes Kraftfeld (HF). Relativistische Effekte der Elektronen können bei leichten Molekülen wie HCl und CO vernachlässigt werden. Der bei allen Berechnungen verwendete Basissatz () aus modifizierten Wasserstofforbitalen wurde, aufgrund geringer Anzahl an Basen \Leftrightarrow geringe Rechenzeit und auf die Komplexität der Basen bezogen gute Qualität, gewählt.

Durchführung :

Die Prozessierung erfolgt durch einen input file, welcher alle wichtigen Informationen der durchzuführenden Berechnung dem Computer übergibt. Dieser file beinhaltet im wesentlichen drei wichtige Blöcke. Der erste Befehlsblock am Anfang bezieht sich auf zugewiesene hardware Rechte, der folgende Block übergibt die Methode sowie weitere frei wählbare, vorimplementierte Optionen für die Berechnung (z.B die rekursive Berechnung für mehrere vordefinierte Bindungsabstände). Der letzte Block beinhaltet im wesentlichen die Eigenschaften des betrachteten quantenmechanischen Systems, wie die Gesamtladung, Spineigenschaften, sowie Atomtypen und Geometrien. Die Geometrien können sowohl in kartesischen Koordinaten

Zur Analyse wurden die zu berechnenden Daten aus dem output file manuell exportiert und weiter in -python- bearbeitet.

4 Zusammenfassung

Die erhaltenen Bindungslängen stimmen gut mit den Literaturwerten überein (siehe Tabelle 5.1.) Die mittels der CCSD-Methode gewonnenen Werte nähern sich besser an den Gleichgewichtsabstand der Literatur an als die mit der B3LYP Methode. Die ermittelten Dissoziationsenergien für das CO Molekül sind wie zu erwarten wesentlich größer gegenüber dem HCl Molekül. Die Werte decken sich jedoch deutlich schlechter mit der Literatur als es bei dem Gleichgewichtsabstand der Fall ist.

5 Auswertung

Die mittels Gaussian erhaltenen Gleichgewichtsabstände wurden in Tabelle 5.1 zusammengetragen. Dabei handelt es sich um den Atomabstand R, welcher bei den jeweiligen minimalsten Energiewerten einer Datenreihe zu finden ist. Die Dissoziationsenergie wurden erhalten, indem der größte Energiewert der Asymptote vom kleinsten Energiewert der Kurve subtrahiert worden ist.

Tabelle 5.1: Berechnete Gleichgewichtsabstände und Dissoziationsenergien von HCl und CO aus den mittels GAUSSIAN erhaltenen Werten mit der Methode B3LYP und dem Basissatz 6-31G bzw. der Methode CCSD und dem Basissatz 6-31G*.

Molekül	Methode	Gleichgewichtsabstand R	Dissoziationsenergie	
		in Ångstrom	in Hartree	in kJ/mol
CO	B3LYP	1.17	0.48	1260
CO	CCSD (SCF)	1.11	0.49	1290
CO	CCSD (MP2)	1.15	0.59	1550
CO	CCSD (MP3)	1.13	0.55	1440
CO	Literatur	1.128323		1077
HCl	B3LYP	1.33	0.19	498.0
HCl	CCSD (SCF)	1.27	0.34	892
HCl	CCSD (MP2)	1.28	0.19	498
HCl	CCSD (MP3)	1.28	0.16	420
HCl	Literatur	1.27455		429

<https://webbook.nist.gov>> und Holeyman wiberg 102. Auflage Seite 141

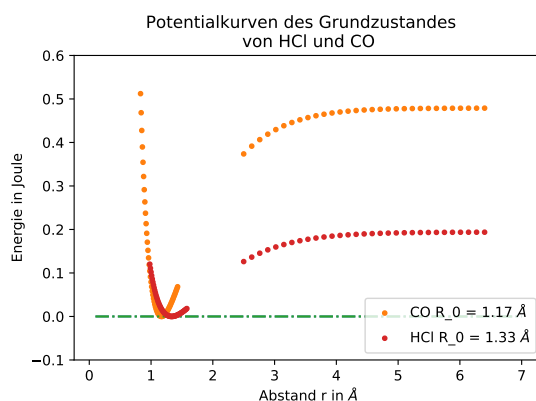


Abbildung 5.1: Grafische Auftragung der mit der Born-Oppenheimer-Näherung erhaltenen Energien bei verschiedenen Kernabständen von HCl und CO. Die Werte wurden mittels GAUSSIAN mit der Methode B3LYP und dem Basissatz 6-31G erhalten. Die Grafik wurde mit Python erstellt und über Spyder ausgegeben.

Wie in Abbildung 5.1 zu sehen beschreiben die mit B3LYP errechneten Werte den Verlauf eines Morsepotentials. Es sei hier erwähnt, dass das tatsächliche Minimum der Kurven nicht bei Null liegt, sondern das Minimum von allen Energiewerten subtrahiert worden ist, um dieses als Nullpunkt zu definieren. Dadurch ist es nun möglich anhand der Grafen eine qualitative Aussage über die Dissoziationsenergie, sowie den Gleichgewichtsabstand zu machen.

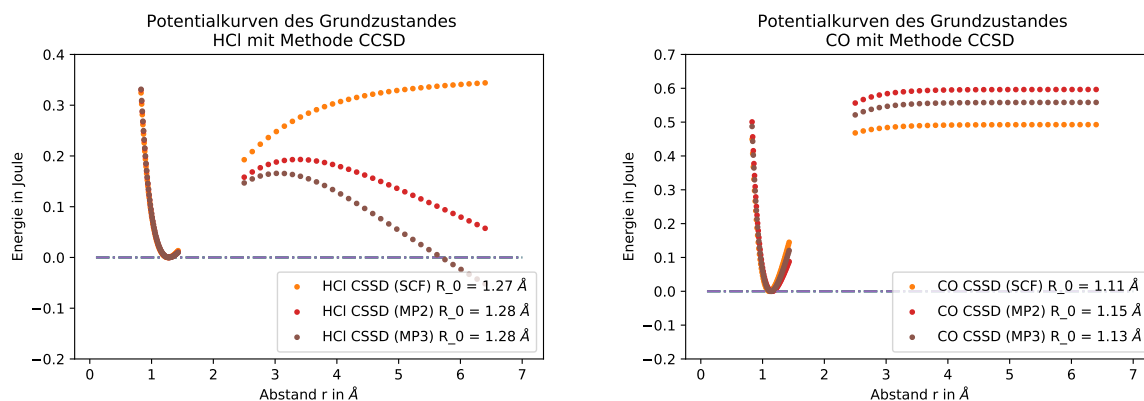


Abbildung 5.2: Grafische Auftragung der mit der Born-Oppenheimer-Näherung erhaltenen Energien bei verschiedenen Kernabständen von HCl und CO. Die Werte wurden mittels GAUSSIAN mit der Methode CCSD und dem Basissatz 6-31G* erhalten. Die Grafik wurde mit Python erstellt und über Spyder ausgegeben.

Der Verlauf der Werte, welche durch die CCSD Methode für CO, sowie HCl erhalten wurden, sind in Abbildung 5.2 aufgetragen worden. Bei der Betrachtung der Werte kann beobachtet werden, dass die Entwicklung durch Gaussian um das Minimum noch etwas genauer, als es mittels B3LYP der Fall war, gelungen ist. Jedoch beschreibt die Energie nach der Dissoziation des Moleküle besonders bei HCl einen Verlauf der gänzlich den Erwartungen widerspricht. Die Kurven sollten eigentlich gegen einen Energiewert konvergieren.

6 Rohdaten

Tabelle 6.1: Rohdaten der Energien nach Born Oppenheimer Näherung für verschiedene Bindungsabstände berechnet über GAUSSIAN für HCl und CO mit der Methode B3LYP und dem Basissatz 6-31G

B3LYP Werte für HCL		B3LYP Werte für CO	
Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hatree	Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hartree
0.83	-112.7369	0.98	-460.63329
0.84	-112.78074	0.99	-460.64262
0.85	-112.82153	1.0	-460.65139
0.86	-112.85945	1.01	-460.65961
0.87	-112.89468	1.02	-460.66733
0.88	-112.92737	1.03	-460.67456
0.89	-112.95769	1.04	-460.68134
0.9	-112.98577	1.05	-460.68768
0.91	-113.01175	1.06	-460.6936
0.92	-113.03576	1.07	-460.69913
0.93	-113.05792	1.08	-460.70429
0.94	-113.07834	1.09	-460.70909
0.95	-113.09713	1.1	-460.71356
0.96	-113.11438	1.11	-460.7177
0.97	-113.1302	1.12	-460.72154
0.98	-113.14466	1.13	-460.72509
0.99	-113.15786	1.14	-460.72836
1.0	-113.16986	1.15	-460.73137
1.01	-113.18075	1.16	-460.73414
1.02	-113.1906	1.17	-460.73667
1.03	-113.19946	1.18	-460.73898
1.04	-113.2074	1.19	-460.74109
1.05	-113.21448	1.2	-460.74299
1.06	-113.22075	1.21	-460.7447
1.07	-113.22626	1.22	-460.74623
1.08	-113.23107	1.23	-460.74759
1.09	-113.23521	1.24	-460.74878
1.1	-113.23873	1.25	-460.74983
1.11	-113.24167	1.26	-460.75072
1.12	-113.24406	1.27	-460.75148
1.13	-113.24595	1.28	-460.75211
1.14	-113.24737	1.29	-460.75262
1.15	-113.24835	1.3	-460.75301
1.16	-113.24891	1.31	-460.75329
1.17	-113.2491	1.32	-460.75347
1.18	-113.24892	1.33	-460.75355
1.19	-113.24841	1.34	-460.75353
1.2	-113.24759	1.35	-460.75343
1.21	-113.24649	1.36	-460.75324
1.22	-113.24512	1.37	-460.75298

B3LYP Werte für HCL		B3LYP Werte für CO	
Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hatree	Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hartree
1.23	-113.2435	1.38	-460.75263
1.24	-113.24165	1.39	-460.75222
1.25	-113.23959	1.4	-460.75174
1.26	-113.23734	1.41	-460.7512
1.27	-113.2349	1.42	-460.7506
1.28	-113.2323	1.43	-460.74995
1.29	-113.22955	1.44	-460.74924
1.3	-113.22666	1.45	-460.74849
1.31	-113.22363	1.46	-460.74769
1.32	-113.2205	1.47	-460.74685
1.33	-113.21725	1.48	-460.74596
1.34	-113.21391	1.49	-460.74504
1.35	-113.21048	1.5	-460.74409
1.36	-113.20696	1.51	-460.74309
1.37	-113.20338	1.52	-460.74207
1.38	-113.19974	1.53	-460.74101
1.39	-113.19603	1.54	-460.73993
1.4	-113.19228	1.55	-460.73883
1.41	-113.18848	1.56	-460.73769
1.42	-113.18465	1.57	-460.73654
1.43	-113.18078	1.58	-460.73537
2.5	-112.87545	2.5	-460.62736
2.63	-112.85758	2.63	-460.61709
2.76	-112.84261	2.76	-460.60812
2.89	-112.83006	2.89	-460.6004
3.02	-112.81951	3.02	-460.59381
3.15	-112.81066	3.15	-460.5882
3.28	-112.80324	3.28	-460.58345
3.41	-112.79705	3.41	-460.57944
3.54	-112.79191	3.54	-460.57606
3.67	-112.78767	3.67	-460.57323
3.8	-112.78418	3.8	-460.57086
3.93	-112.78133	3.93	-460.56888
4.06	-112.77902	4.06	-460.56724
4.19	-112.77715	4.19	-460.56587
4.32	-112.77565	4.32	-460.56474
4.45	-112.77446	4.45	-460.56381
4.58	-112.77352	4.58	-460.56304
4.71	-112.77279	4.71	-460.5624
4.84	-112.77221	4.84	-460.56189
4.97	-112.77177	4.97	-460.56146
5.1	-112.77143	5.1	-460.56112
5.23	-112.77116	5.23	-460.56083
5.36	-112.77095	5.36	-460.5606
5.49	-112.77079	5.49	-460.56042

B3LYP Werte für HCL		B3LYP Werte für CO	
Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hartree	Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hartree
5.62	-112.77066	5.62	-460.56028
5.75	-112.77055	5.75	-460.56016
5.88	-112.77046	5.88	-460.56006
6.01	-112.77039	6.01	-460.55998
6.14	-112.77032	6.14	-460.55991
6.27	-112.77026	6.27	-460.55986
6.4	-112.7702	6.4	-460.55982

Tabelle 6.2: Rohdaten der Energien nach Born Oppenheimer Näherung für verschiedene Bindungsabstände berechnet über GAUSSIAN für HCl mit der Methode CCSD und dem Basissatz 6-31G*

Atomabstand in Ängstrom	Energien nach der CCSD Methode für HCl		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
0.83	-112.28837	-112.52057	-112.53124
0.84	-112.33083	-112.56469	-112.57517
0.85	-112.37019	-112.60571	-112.61597
0.86	-112.40663	-112.6438	-112.65385
0.87	-112.44032	-112.67915	-112.68897
0.88	-112.47143	-112.71192	-112.72149
0.89	-112.50012	-112.74226	-112.75157
0.9	-112.52652	-112.77031	-112.77936
0.91	-112.55077	-112.79622	-112.80499
0.92	-112.57301	-112.82012	-112.82858
0.93	-112.59334	-112.84211	-112.85027
0.94	-112.6119	-112.86233	-112.87016
0.95	-112.62878	-112.88087	-112.88836
0.96	-112.64408	-112.89784	-112.90497
0.97	-112.6579	-112.91334	-112.92009
0.98	-112.67033	-112.92744	-112.9338
0.99	-112.68145	-112.94025	-112.9462
1.0	-112.69135	-112.95183	-112.95735
1.01	-112.7001	-112.96226	-112.96734
1.02	-112.70776	-112.97162	-112.97624
1.03	-112.71441	-112.97997	-112.98411
1.04	-112.7201	-112.98738	-112.99101
1.05	-112.7249	-112.9939	-112.99701
1.06	-112.72887	-112.99959	-113.00216
1.07	-112.73204	-113.0045	-113.00651
1.08	-112.73448	-113.00868	-113.01011
1.09	-112.73623	-113.01219	-113.01301
1.1	-112.73734	-113.01505	-113.01524
1.11	-112.73784	-113.01732	-113.01686
1.12	-112.73777	-113.01904	-113.0179

Atomabstand in Ängstrom	Energien nach der CCSD Methode für HCl		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
1.13	-112.73718	-113.02024	-113.0184
1.14	-112.73609	-113.02095	-113.01839
1.15	-112.73454	-113.02121	-113.01791
1.16	-112.73256	-113.02106	-113.01697
1.17	-112.73018	-113.02051	-113.01563
1.18	-112.72742	-113.0196	-113.01389
1.19	-112.72432	-113.01835	-113.01179
1.2	-112.7209	-113.01679	-113.00935
1.21	-112.71717	-113.01494	-113.00659
1.22	-112.71317	-113.01282	-113.00354
1.23	-112.70891	-113.01046	-113.00021
1.24	-112.70441	-113.00786	-112.99662
1.25	-112.69969	-113.00506	-112.99279
1.26	-112.69477	-113.00206	-112.98874
1.27	-112.68966	-112.99888	-112.98449
1.28	-112.68439	-112.99554	-112.98004
1.29	-112.67895	-112.99205	-112.97541
1.3	-112.67338	-112.98843	-112.97061
1.31	-112.66767	-112.98467	-112.96567
1.32	-112.66185	-112.98081	-112.96058
1.33	-112.65593	-112.97684	-112.95535
1.34	-112.6499	-112.97278	-112.95001
1.35	-112.6438	-112.96863	-112.94456
1.36	-112.63762	-112.96441	-112.939
1.37	-112.63137	-112.96011	-112.93335
1.38	-112.62507	-112.95576	-112.92761
1.39	-112.61872	-112.95134	-112.9218
1.4	-112.61233	-112.94688	-112.91591
1.41	-112.6059	-112.94237	-112.90996
1.42	-112.59945	-112.93781	-112.90395
1.43	-112.59298	-112.93322	-112.89788
2.5	-112.26977	-112.46478	-112.49705
2.63	-112.26398	-112.45445	-112.48758
2.76	-112.25963	-112.44681	-112.48062
2.89	-112.25634	-112.44115	-112.47546
3.02	-112.25383	-112.43695	-112.47163
3.15	-112.25192	-112.43385	-112.46877
3.28	-112.25044	-112.43155	-112.46664
3.41	-112.24931	-112.42985	-112.46505
3.54	-112.24842	-112.42859	-112.46386
3.67	-112.24774	-112.42766	-112.46296
3.8	-112.2472	-112.42696	-112.46229
3.93	-112.24679	-112.42645	-112.46179
4.06	-112.24647	-112.42606	-112.46142
4.19	-112.24622	-112.42577	-112.46114

Atomabstand in Ängstrom	Energien nach der CCSD Methode für HCl		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
4.32	-112.24603	-112.42556	-112.46093
4.45	-112.24589	-112.4254	-112.46078
4.58	-112.24577	-112.42528	-112.46066
4.71	-112.24568	-112.42518	-112.46056
4.84	-112.24561	-112.42511	-112.46049
4.97	-112.24555	-112.42505	-112.46043
5.1	-112.2455	-112.425	-112.46038
5.23	-112.24546	-112.42495	-112.46034
5.36	-112.24543	-112.42492	-112.4603
5.49	-112.2454	-112.42489	-112.46027
5.62	-112.24537	-112.42486	-112.46025
5.75	-112.24535	-112.42484	-112.46023
5.88	-112.24533	-112.42482	-112.46021
6.01	-112.24531	-112.4248	-112.46019
6.14	-112.2453	-112.42479	-112.46017
6.27	-112.24528	-112.42477	-112.46016
6.4	-112.24527	-112.42476	-112.46015

Tabelle 6.3: Rohdaten der Energien nach Born Oppenheimer Näherung für verschiedene Bindungsabstände berechnet über GAUSSIAN für HCl mit der Methode CCSD und dem Basissatz 6-31G*

Atomabstand in Ängstrom	Energien nach der CCSD Methode für CO		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
0.83	-459.73567	-459.86221	-459.87618
0.84	-459.75776	-459.88436	-459.89835
0.85	-459.77861	-459.90528	-459.91929
0.86	-459.79828	-459.92503	-459.93906
0.87	-459.81684	-459.94366	-459.95771
0.88	-459.83434	-459.96124	-459.9753
0.89	-459.85082	-459.97781	-459.9919
0.9	-459.86635	-459.99342	-460.00753
0.91	-459.88097	-460.00813	-460.02226
0.92	-459.89472	-460.02197	-460.03613
0.93	-459.90764	-460.035	-460.04918
0.94	-459.91979	-460.04724	-460.06145
0.95	-459.93119	-460.05875	-460.07298
0.96	-459.94188	-460.06955	-460.08381
0.97	-459.9519	-460.07969	-460.09396
0.98	-459.96128	-460.08919	-460.10349
0.99	-459.97006	-460.09808	-460.11241
1.0	-459.97826	-460.1064	-460.12076
1.01	-459.98591	-460.11418	-460.12856
1.02	-459.99304	-460.12144	-460.13585

Atomabstand in Ängstrom	Energien nach der CCSD Methode für CO		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
1.03	-459.99968	-460.12821	-460.14264
1.04	-460.00585	-460.13451	-460.14897
1.05	-460.01157	-460.14036	-460.15486
1.06	-460.01686	-460.1458	-460.16032
1.07	-460.02175	-460.15083	-460.16538
1.08	-460.02626	-460.15548	-460.17006
1.09	-460.03041	-460.15977	-460.17438
1.1	-460.0342	-460.16372	-460.17836
1.11	-460.03768	-460.16734	-460.18201
1.12	-460.04083	-460.17065	-460.18535
1.13	-460.0437	-460.17367	-460.1884
1.14	-460.04628	-460.17641	-460.19117
1.15	-460.0486	-460.17889	-460.19368
1.16	-460.05066	-460.18111	-460.19593
1.17	-460.05248	-460.1831	-460.19795
1.18	-460.05408	-460.18486	-460.19974
1.19	-460.05545	-460.1864	-460.20132
1.2	-460.05663	-460.18774	-460.20269
1.21	-460.05761	-460.18889	-460.20387
1.22	-460.05841	-460.18986	-460.20487
1.23	-460.05903	-460.19066	-460.2057
1.24	-460.05949	-460.19129	-460.20637
1.25	-460.05979	-460.19177	-460.20688
1.26	-460.05995	-460.1921	-460.20725
1.27	-460.05997	-460.19229	-460.20747
1.28	-460.05985	-460.19236	-460.20757
1.29	-460.05961	-460.1923	-460.20755
1.3	-460.05926	-460.19212	-460.20741
1.31	-460.05879	-460.19184	-460.20716
1.32	-460.05822	-460.19145	-460.20681
1.33	-460.05755	-460.19096	-460.20636
1.34	-460.05679	-460.19038	-460.20582
1.35	-460.05594	-460.18972	-460.20519
1.36	-460.05501	-460.18897	-460.20449
1.37	-460.054	-460.18815	-460.2037
1.38	-460.05292	-460.18726	-460.20285
1.39	-460.05177	-460.1863	-460.20193
1.4	-460.05056	-460.18528	-460.20095
1.41	-460.04929	-460.1842	-460.19992
1.42	-460.04796	-460.18307	-460.19882
1.43	-460.04658	-460.18188	-460.19768
2.5	-459.86738	-460.0342	-460.06076
2.63	-459.85138	-460.02393	-460.05283
2.76	-459.83685	-460.01559	-460.04709
2.89	-459.82373	-460.0091	-460.04347

Atomabstand in Ängstrom	Energien nach der CCSD Methode für CO		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
3.02	-459.81191	-460.00435	-460.04186
3.15	-459.80129	-460.00122	-460.04212
3.28	-459.79178	-459.99959	-460.04411
3.41	-459.78327	-459.99933	-460.04765
3.54	-459.77567	-460.00029	-460.05257
3.67	-459.7689	-460.00233	-460.05868
3.8	-459.76287	-460.00531	-460.0658
3.93	-459.7575	-460.00909	-460.07376
4.06	-459.75273	-460.01357	-460.0824
4.19	-459.74848	-460.01861	-460.09157
4.32	-459.7447	-460.02412	-460.10114
4.45	-459.74133	-460.03	-460.111
4.58	-459.73832	-460.0362	-460.12106
4.71	-459.73563	-460.04264	-460.13124
4.84	-459.7332	-460.04927	-460.14147
4.97	-459.73102	-460.05604	-460.15172
5.1	-459.72904	-460.06294	-460.16193
5.23	-459.72723	-460.06993	-460.17209
5.36	-459.72558	-460.07698	-460.18217
5.49	-459.72407	-460.0841	-460.19216
5.62	-459.72267	-460.09126	-460.20206
5.75	-459.72136	-460.09846	-460.21186
5.88	-459.72015	-460.10569	-460.22157
6.01	-459.71901	-460.11296	-460.23118
6.14	-459.71793	-460.12025	-460.24071
6.27	-459.71692	-460.12758	-460.25015
6.4	-459.71595	-460.13493	-460.25951