

Beiträge zur Chemie der Übergangsmetalloxide

Darstellung und Charakterisierung neuer ternärer
Verbindungen in den Systemen
Silber/Palladium/Sauerstoff, Silber/Nickel/Sauerstoff
und Strontium/Palladium/Sauerstoff

Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades (Dr. rer. nat.)

der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der

Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

vorgelegt von

Dipl.-Chem. Martin Schreyer

aus

Marburg

Bonn, Oktober 2001

Angefertigt mit Genehmigung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

1. Referent: Prof. Dr. Martin Jansen
2. Referent: Prof. Dr. Johannes Beck

Tag der Promotion:

Meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr. Martin Jansen, danke ich für die interessante Themenstellung und sein großes Interesse an dieser Arbeit. Seine stete Unterstützung und Diskussionsbereitschaft haben sehr zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Weiterhin danke ich:

Herrn Prof. Dr. Johannes Beck für die Übernahme des Koreferats.

Herrn Diplomchemiker Norbert Priesmann für wertvolle präparative Vorarbeiten, sowie die Einweisung in die Hochdruckautoklavenchemie.

Herrn Dr. Winfried Kockelmann und Herrn Dr. Ralf Hagenmeyer für die Durchführung der Neutronenbeugungsmessungen.

Herrn Dr. Hartwig Modrow für die Durchführung der XANES-Messungen und der FEFF8-Rechnungen sowie seine stete Diskussionsbereitschaft.

Herrn Dr. Ulrich Wedig für die Durchführung der quantenchemischen Rechnungen.

Herrn Dr. Peter Adler für die Durchführung der photoelektronenspektroskopischen Messungen.

Herrn Dr. Helmut Haas für die freundliche Unterstützung in letzter Minute.

Herrn Diplomchemiker Sascha Vensky für die zuverlässige und stete Begleitung aller in Stuttgart durchgeführten Messungen.

Herrn Dr. Rudolf Hundt und Herrn Dr. Holger Putz für die strukturchemischen und gruppentheoretischen Diskussionen.

Herrn Amir Mirkhani danke ich für seine tatkräftige Unterstützung bei der Durchführung der präparativen Arbeiten.

Herrn Diplomingenieur Norbert Wagner, Herrn Dr. Reinhard K. Kremer, Frau Eva Brücher und Frau Gisela Siegle danke ich für die Durchführung der magnetometrischen und konduktometrischen Messungen.

Herrn Klaus Armbruster, Herrn Diplomchemiker Arnd Velden, Herrn Diplomchemiker Friedrich Karau und Herrn Albrecht Roloff danke ich für ihre stete Freundschaft und die herzliche Laborgemeinschaft.

Sowie allen bisher ungenannten Mitarbeitern des Arbeitskreises, die zum Gelingen dieser Arbeit und zur guten Atmosphäre im Arbeitskreis beigetragen haben.

Zu besonderem Dank bin ich meinen Eltern und meinem Bruder für ihre Unterstützung und Geduld verpflichtet.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Allgemeiner Teil	3
2.1	Apparaturen und Arbeitstechniken	3
2.1.1	Schutzgastechnik	3
2.1.1.1	Schutzgasanlage	3
2.1.1.2	Arbeiten unter Schutzgas, Schlenkrohrtechnik	4
2.1.1.3	Der Handschuhkasten	6
2.1.2	Festkörperreaktionen unter Druck	6
2.1.2.1	Hochdruckautoklaven	7
2.1.2.2	Druckaufbau und Kontrolle	9
2.1.3	Öfen und Temperaturkontrolle	10
2.2	Analysemethoden	11
2.2.1	Röntgenpulverdiffraktometrie	11
2.2.2	Strukturlösung und Verfeinerung aus Pulverdaten	13
2.2.3	Neutronenbeugung	15
2.2.4	Elektronenmikroskopische Untersuchungen	17
2.2.4.1	Rasterelektronenmikroskopie	18
2.2.4.2	Transmissionselektronenmikroskopie	19
2.2.5	Thermische Analysen	21
2.2.6	Leitfähigkeitsmessungen	22
2.2.7	Messung der magnetischen Suszeptibilität	23

2.2.8 Röntgenabsorptionsspektroskopie	25
2.2.8.1 Allgemeines	25
2.2.8.2 XANES-Spektroskopie	25
2.2.8.3 Probenpräparation und Kalibrierung	27
2.2.9 Photoelektronenspektroskopie	28
2.2.9.1 Allgemeines	28
2.2.9.2 Röntgeninduzierte Photoemission (XPS)	29
2.2.9.3 UV induzierte Photoemission (UPS)	29
2.2.9.4 Experimentelle Aspekte	30
2.3 Quantenchemische Methoden	31
2.3.1 Dichtefunktionaltheorie	32
2.3.2 Das Eigenwertproblem	34
2.3.3 Basissätze	34
2.3.4 Die FEFF8-Methode	35
2.3.5 TB-LMTO-Methode	37
2.3.6 Auswertung	38
3 Spezieller Teil	42
3.1 Motivation und Zielsetzung	42
3.1.1 Supraleitung in Oxiden	42
3.1.2 Besonderheiten der d^{10} -Kationen	46
3.2 Darstellung und Charakterisierung von Ag_2PdO_2	50
3.2.1 Einleitung	50
3.2.2 Ausgangsverbindungen und Darstellung	51

3.2.3	Rasterelektronenmikroskopische Untersuchungen und Elementaranalyse	51
3.2.4	Strukturanalyse mit Röntgen- und Neutronenpulverdaten	52
3.2.5	Thermische und chemische Eigenschaften	57
3.2.6	Elektrische und magnetische Eigenschaften	57
3.2.7	Zusammenfassung und Ausblick	59
3.3	Synthese und Charakterisierung von Ag_2NiO_2	61
3.3.1	Einleitung	61
3.3.2	Experimentelle Details	63
3.3.3	Rasterelektronenmikroskopische Untersuchungen und Elementaranalyse	64
3.3.4	Strukturanalyse mit Röntgen- und Neutronenpulverdaten	65
3.3.5	Physikalische Eigenschaften	69
3.3.6	Untersuchungen zur Bandstruktur und den Bindungsverhältnissen	76
3.3.7	Chemische Hinweise auf den Bildungsmechanismus	92
3.3.8	Zusammenfassung und Ausblick	92
3.4	Untersuchungen zur Kristallstruktur von $\text{Sr}_{4+x}\text{Pd}_{3-x}\text{O}_9$	94
3.4.1	Experimentelle Details	94
3.4.2	Pulverdiffraktometrische Untersuchungen	96
3.4.3	Transmissionselektronenmikroskopische Untersuchungen	105
3.4.4	Zusammenfassung und Ausblick	111
4	Bilanz und Ausblick	112
5	Literaturverzeichnis	116

6 Anhang

120

1 Einleitung

Die Übergangsmetalloxide bilden eine Gruppe von Verbindungen mit einer einzigartigen Bandbreite chemischer, physikalischer und elektronischer Eigenschaften. Einige davon, wie zum Beispiel der Magnetismus des Magnetits oder die Farbigkeit der Edelsteine sind bereits seit der Antike bekannt. Andere wie katalytische Eigenschaften oder insbesondere die Hochtemperatursupraleitfähigkeit ternärer und quarternärer Kupferoxide sind erst vor kurzem entdeckt worden.

Der Charakter der Übergangsmetall-Sauerstoff-Bindung kann von nahezu ionischer bis hin zu metallischer Natur variieren. Dies hat eine große Vielfalt an Strukturtypen wie den Perowskiten, den Pyrochloren, den Spinellen, den Delafossiten zur Folge. Die phänomenale Vielfalt der elektrischen und magnetischen Eigenschaften der Übergangsmetalloxide ist nicht minder bemerkenswert. Am einen Ende der Skala findet man nichtleitende Materialien wie BaTiO_3 oder SrTiO_3 und Titandioxid, dem meistbenutzten Weißpigment, am anderen Ende metallische Leiter wie LaNiO_3 , SrRuO_3 oder LaSrCuO_4 . Einige Verbindungen gehen bei geringfügiger Dotierung vom nichtleitenden Zustand in den metallischen über. Das derzeit bekannteste Beispiel für einen derartigen Metall-Nichtmetall-Übergang stellt die Mischkristallserie $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ ¹ dar, der Prototyp der Hochtemperatursupraleiter. Mit der Variation der elektrischen Eigenschaften geht eine ebenso breite Vielfalt der magnetischen Eigenschaften einher. Einige Verbindungen, wie CrO_2 oder $\text{La}_{0,5}\text{Sr}_{0,5}\text{MnO}_3$ sind Ferromagneten, andere Ferrimagneten wie der bereits seit der Antike bekannte Magnetit (Fe_3O_4) und wieder andere Antiferromagneten, so zum Beispiel NiO ; La_2NiO_4 oder auch das undotierte La_2CuO_4 .

Die ungewöhnlichen Eigenschaften der Übergangsmetalloxide, die sie von intermetallischen Verbindungen, kovalenten Halbleitern und ionischen Isolatoren unterscheiden, haben mehrere Ursachen: Infolge der geringen Überlappung der Sauerstoff-2p-Zustände mit den d-Orbitalen der Metalle findet man nur geringe Bandbreiten von typischerweise 1 bis 2 eV, während man in normalen Metallen Bandbreiten von 5 bis 15 eV findet. Diese geringen Bandbreiten führen dazu, dass Elektronenkorrelationseffekte eine bedeutende Rolle spielen. Die örtliche Elektronenstruktur kann in Form atomartiger Zustände, z. B. Cu^{1+} (d^{10}), Cu^{3+} (d^8) und Cu^{2+} (d^9) für Kupfer in CuO), beschrieben werden. Bei den meisten Übergangsmetalloxiden sind die d-Schalen der Metalle nur partiell besetzt. Zwischen verschiedenen Oxidationsstufen und Elektronenkonfigurationen eines Übergangsmetallatoms bestehen nur geringe Energiedifferenzen. Daher kommen die meisten dieser Elemente in verschiedenen Oxidationsstufen vor. Bei Mangan beobachtet man beispielsweise in oxidischen Verbindungen alle Oxidationsstufen von +2 (Elektronenkonfiguration d^5) in MnO bis +7 (Elektronenkonfiguration d^0) in KMnO_4 . Durch diese Vielfalt an Oxidationsstufen sind die Übergangsmetalloxide geradezu als Redoxkatalysatoren² prädestiniert. Als Beispiele sei an dieser Stelle auf die Verwendung von Vanadiumpentoxid (V_2O_5) als Redoxkatalysator im Kontaktverfahren bei der Schwefelsäuresynthese verwiesen. Darüberhinaus sind viele komplexe Übergangsmetalloxide nicht wirklich dreidimensional, sondern haben niedrigdimensionale Bauelemente in ihrer Kristallstruktur. So sind zum Beispiel La_2CuO_4 und La_2NiO_4 mit der K_2NiF_4 -Struktur niedrigdimensional im Vergleich zu LaCuO_3 und LaNiO_3 mit der Perowskitstruktur. In der K_2NiF_4 -Struktur sind oktaedrische MO_6 -Einheiten ($M =$ Übergangsmetall) zu MO_4 -Flächen eckenverknüpft, während sie in der Perowskitstruktur über alle 6 Ecken zu einem dreidimensionalen MO_3 -Netzwerk verbunden sind. Es ist eine auffällige Tatsache, dass Hochtemperatursupraleitfähigkeit bislang nur in Systemen mit derartigen niedrigdimensionalen Bauelementen beobachtet wird. Auch der intermetallische Supraleiter MgB_2 ³, der mit 39 K die höchste Sprungtemperatur für intermetallische Verbindungen aufweist, hat eine Struktur die durch stark zweidimensionale Elemente

charakterisiert ist: Es handelt sich um eine Zintlphase, bei der die Boratome die Plätze des Kohlenstoffs im hexagonalen Graphit einnehmen.

Die Besonderheiten der Übergangsmetalloxide hören nicht mit der gefüllten d-Elektronenschale auf. Stellt man einen systematischen Strukturvergleich von Silber(I)-verbindungen an, so beobachtet man vielfach, dass die Abstände der Silberkationen im Bereich derjenigen von metallischem Silber liegen. Üblicherweise neigen Kationen dazu, größtmögliche Abstände voneinander einzunehmen. Bei monovalentem Silber beobachtet man stattdessen eine deutliche Tendenz zur Clusterbildung, die eine anziehende Wechselwirkung zwischen den Silberatomen nahe legt, obwohl die 4d-Unterschale abgeschlossen ist. Diese Wechselwirkung ist unter der Bezeichnung d^{10} - d^{10} -Wechselwirkung in die Literatur eingegangen⁴. Ebenso wie die Supraleitung, die Born-Oppenheimer-Näherung, nach der Elektronen und Kernbewegung in erster Näherung separat betrachtet werden können, in Frage stellen, stellt die d^{10} - d^{10} -Wechselwirkung die in der Quantenchemie übliche Näherung in Frage, dass abgeschlossene Schalen bei der Betrachtung der chemischen Bindung als Rumpfelektronen vernachlässigt werden können. Vielmehr ist die d^{10} - d^{10} -Wechselwirkung nur unter Einbeziehung der Rumpfelektronen verständlich.

Vorliegende Arbeit wurde insbesondere von zwei Phänomenen motiviert: Der Hochtemperatursupraleitfähigkeit einerseits und der d^{10} - d^{10} -Wechselwirkung andererseits. Derzeit kann nicht ausgeschlossen werden, dass es neben den Kupferoxiden noch andere Systeme mit Hochtemperatursupraleitfähigkeit gibt. Da vieles darauf hindeutet, dass dieses Phänomen eng mit den Besonderheiten der Übergangsmetalloxide verbunden ist, erscheint es sinnvoll, neue Übergangsmetalloxide mit zwei- oder gar eindimensionalen Bauelementen darzustellen und ihre physikalischen Eigenschaften zu untersuchen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde dabei ein besonderes Augenmerk auf die ternären Nickel- und Palladiumoxide gelegt. Die bisherigen Arbeiten von M. Jansen et al.⁴ im Rahmen der Untersuchung der d^{10} - d^{10} -Wechselwirkung legen die Existenz einer Vielzahl von subvalenten Silberverbindungen nahe, von denen bisher nur einige dargestellt werden konnten. Entsprechend wurde in dieser Arbeit versucht, weitere, ternäre, silberreiche Verbindungen zu erhalten, deren Untersuchungen das Verständnis dieser Verbindungsklasse erweitern sollte.

2 Allgemeiner Teil

2.1 Apparaturen und Arbeitstechniken

2.1.1 Schutzgastechnik

2.1.1.1 Schutzgasanlage

Substanzen, die gegenüber atmosphärischen Einflüssen wie Feuchtigkeit empfindlich sind, müssen unter Schutzgas gehandhabt werden. Je nach Empfindlichkeit oder erforderlichem Arbeitsgang wird entweder eine Vakuumpumpe oder auch ein Handschuhkasten verwendet.

Die aus Duranglas gefertigte Schutzgasapparatur (Abb. 2.1) besteht aus einem Vakuumpumpe- und einem Schutzgasstrang, womit die an der Anlage angeschlossenen Apparaturen wahlweise evakuiert oder nach Bedarf mit Argon oder Sauerstoff geflutet werden können. Von den drei Abgriffen (NS 14,5) führen Glasspiralen oder flexible, vakuumdichte Metallbalgenschläuche zu weiteren Apparaturen. Ein Verteiler, der an den Gasstrang angeschlossen ist, ermöglicht den Betrieb dreier Röhrenöfen mit unterschiedlichen Gasatmosphären.

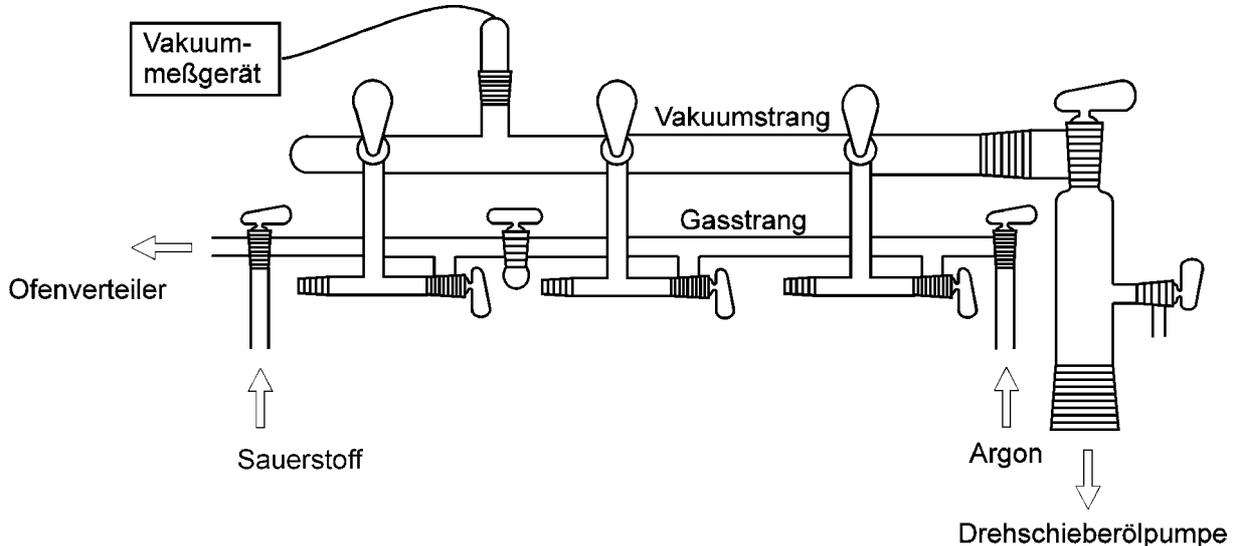


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Schutzgasapparatur

Das Vakuum wird von einer zweistufigen Drehschieberpumpe der Firma Vacuubrand, Wertheim (Modell Vacuubrand RD4, Pumpleistung: 4,3 m³/h, Endtotaldruck: 0,2 Pa) erzeugt. Sie ist über einen Metallbalgenschlauch mit der Vakuumpumpe verbunden. Zwischen Vakuumpumpe und Vakuumpumpe befindet sich eine mit flüssigem Stickstoff gekühlte Kühlfalle. Hiermit soll einerseits verhindert werden, dass Pumpenöl in die Vakuumpumpe diffundiert, andererseits, dass gasförmige Zersetzungsprodukte das Pumpenöl verunreinigen oder ggf. die Pumpe korrosiv beschädigen.

Die Druckmessung erfolgt über ein Vakuummeter der Firma Leybold, Köln (Modell: Thermovac TM 20, Messbereich: 0,1 bis 10^5 Pascal). Zur Überprüfung der Atmosphäre im Inneren der Vakuumapparatur, sowie der angeschlossenen Geräte dient ein Hochfrequenz-Vakuumpriifer der Firma Leybold Heräeus, Köln (Modell VP 202, 55kV, 440 kHz). Die von außen angelegte, hochfrequente Wechselspannung erzeugt im Inneren eine stromlose Entladung, deren Färbung und Intensität ein qualitatives Maß für Vakuum- bzw. Schutzgasqualität ist. Als Schutzgas wird Argon in der Reinheitsstufe 4,6 (entspricht: 99.996 %) verwendet, als Synthesegas Sauerstoff der Reinheitsstufe 4,5 (entspricht: 99.995 %). Zur Entfernung auch kleinster Verunreinigungen werden beide Gase vor der Verwendung in einer Gasreinigungsanlage nachbehandelt (Abb. 2.2).

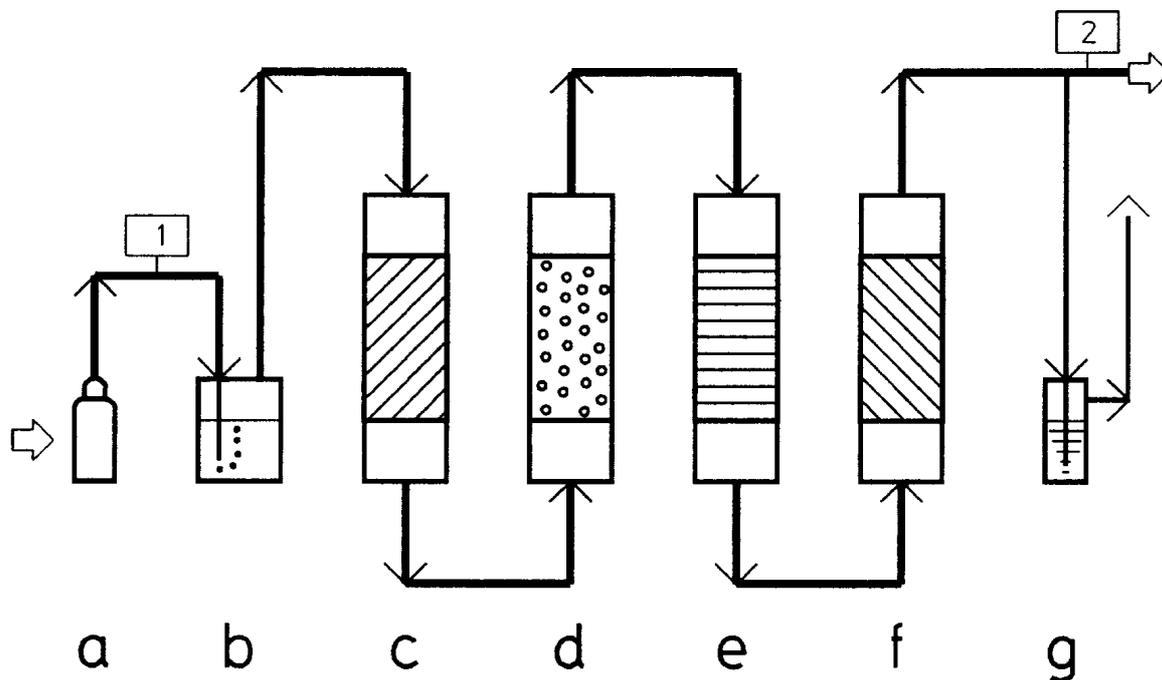


Abbildung 2.2: Gasreinigungsanlage a) Gasflasche b) Blasenähler c) Blaugel d) Kaliumhydroxid e) Molsieb 300 f) Sicapent g) Quecksilbermanometer

Zunächst werden die Gase zur Dosierung durch einen mit Paraffinöl gefüllten Blasenähler geleitet, anschließend durch vier hintereinander geschaltete Trockentürme, die mit Blaugel, Kaliumhydroxid, Molsieb der Porenweite 300 pm sowie Phosphorpentoxid (Sicapent, Fa. Merck) gefüllt sind. Hier werden geringste Verunreinigungen an Wasser, Kohlendioxid und weiteren Spurenbestandteilen entfernt. Argon wird zusätzlich mit einem auf 700 °C geheizten Titanschwamm gereinigt. Dadurch werden auch letzte Spuren von Sauerstoff, Stickstoff oder Kohlendioxid entfernt. Zur Überdrucksicherung der Anlage dient ein Quecksilbermanometer mit Quecksilberüberdruckventil.

2.1.1.2 Arbeiten unter Schutzgas, Schlenkrohrtechnik

Bei der Arbeitstechnik an der Schutzgasanlage handelt es sich um eine Weiterentwicklung der Schlenkrohrtechnik. Die Apparaturen werden über Glasschliffverbindungen, die mit Siliconschliff fett der Firma Wacker gefettet werden, an die Schutzgasapparatur

angeschlossen. Zur Entfernung letzter an den Glaswänden anhaftender Feuchtigkeitsspuren, werden die Apparaturen mit der nichtleuchtenden Flamme eines Bunsenbrenners ausgeheizt und evakuiert.

Die Portionierung, Homogenisierung, Trocknung und Abfüllung der Substanzen wird in sogenannten Umfüllapparaturen (Abb. 2.3) vorgenommen. Durch die Verwendung spezieller Kapillarröhrchenansätze ist es darüberhinaus möglich, auch Substanzen für röntgenographische Untersuchungen abzufüllen. Pulverpräparate werden im Argon-Gegenstrom bei geöffneter Schliffkappe aus einer Ampulle in die Umfüllapparatur überführt.

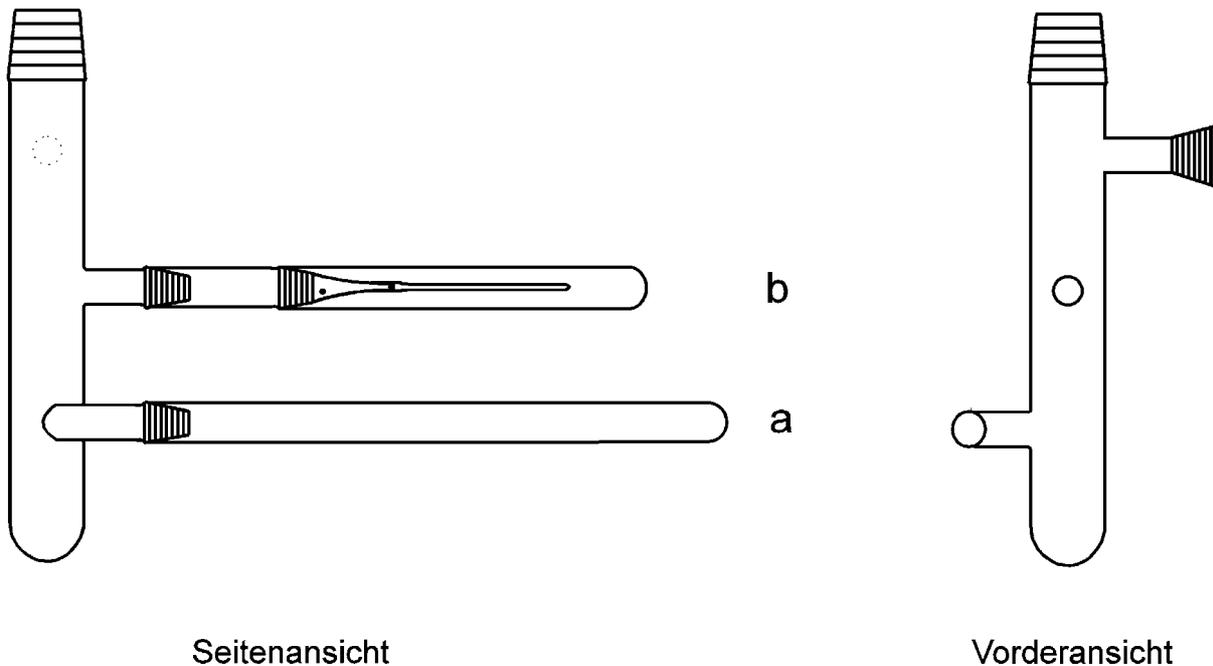


Abbildung 2.3: Umfüllapparatur mit a) Ampullenansatz b) Markröhrchenansatz

Bei Bedarf können die Substanzen mit speziell geformten Glas- und Messingstäben bearbeitet werden, die zuvor sorgfältig ausgeheizt werden. Durch Drehen und Kippen der Apparatur werden die Substanzen in die seitlichen Ansätze überführt. Anschließend werden die Ampullen bzw. Kapillaren mit einem Erdgas-Handbrenner luftdicht abgeschmolzen.

Eine Weiterentwicklung der Umfüllapparatur sind die Oxidationsrohre. Der Körper ist länger als derjenige einer Umfüllapparatur und es ist nur ein NS 14,5 Kern als Abgriff vorhanden, an den wahlweise ein Ampullen- oder ein Kapillarröhrchenansatz angeschlossen werden kann. Zwischen Schutzgasanlage und Oxidationsrohr befindet sich ein Zweiwegesackhahn. Diese Konstruktion ermöglicht das Trocknen, Tempern und Zersetzen luftempfindlicher Substanzen unter inerten Bedingungen (Schutzgas oder Vakuum). Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Oxidationsrohr um einen porösen Glasfilter der Porengröße G3 noch vor dem Zweiwegehahn erweitert (siehe Abb. 2.4), um so die Kontamination der Schutzgasanlage durch besonders feinstaubige Substanzen, wie zum Beispiel gefriergetrocknete Precursoren, zu vermeiden.

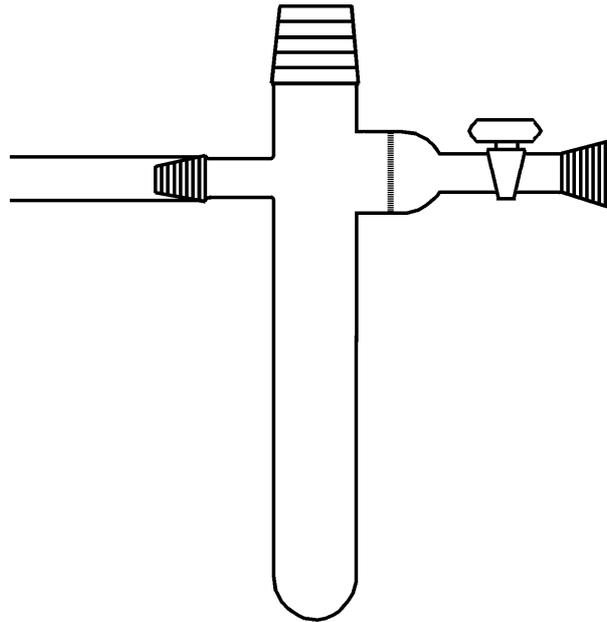


Abbildung 2.4: Oxidationsrohr mit Staubschutz

2.1.1.3 Der Handschuhkasten

Trotz vieler Vorzüge der Schlenkrohrtechnik, gibt es doch einige Arbeitsschritte, die die Verwendung eines Handschuhkastens (engl.: glove-box) erfordern. Zur Entfernung von Feuchtigkeit wird beim Handschuhkasten der Fa. Braun, Garching (Modell MB 200) ein Molekularsieb, zur Entfernung von Sauerstoff ein Kupferkontakt verwendet. Die Schutzgasatmosphäre wird kontinuierlich über die Gasreinigung umgewälzt, so dass der Wassergehalt auf 0,1 ppm, der Sauerstoffgehalt auf 0,4 ppm gehalten wird. Die Zusammensetzung der Schutzgasatmosphäre wird durch Gasanalysatoren überwacht. Proben werden über eine Schleuse, die dreimal 20 Minuten lang evakuiert und anschließend mit Schutzgas geflutet wird, in die Präparationskammer des Handschuhkastens eingebracht.

2.1.2 Festkörperreaktionen unter Druck

Um die Jahrhundertwende begann die Entwicklung der modernen Hochdrucktechnik durch G. Tamman und P. W. Bridgeman, die die Druckabhängigkeit bestimmter physikalischer Eigenschaften untersuchten. Durch die erfolgreiche Synthese von Quarzeinkristallen⁵ 1934 und künstlicher Diamanten⁶ kam es, trotz des hohen apparativen Aufwandes zu einer verstärkten Nutzung hoher Drücke in der präparativen Festkörperchemie.

Generell unterscheidet man zwei verschiedene Methoden zum Aufbau hoher Drücke: die Autoklaventechnik und die Hochdruckpressen. Die Vorteile der Autoklaventechnik liegen im erheblich größeren Reaktionsvolumen und damit größeren Probenmengen, der Variabilität der Atmosphären sowie in der Verwendung von Wasser und anderen Mineralisatoren, wodurch die Synthesetemperaturen insbesondere für Einkristalle deutlich herabgesetzt werden. Als Nachteile fallen die im Vergleich zur Hochdruckpressentechnik geringen Drücke und Temperaturen sowie die wechselseitige Abhängigkeit von Druck und Temperatur ins Gewicht. Bei der Autoklaventechnik erfolgt der Druckaufbau durch Erhitzen eines

einkondensierten Gases. Wie noch beschrieben wird, lässt sich der Gasdruck bei gegebener Temperatur und Autoklavenvolumen über die van der Waals Gleichung bestimmen.

2.1.2.1 Hochdruckautoklaven

Im Rahmen dieser Arbeit wurden je nach erwünschten Bedingungen zwei verschiedene Typen von Autoklaven verwendet.

Der erste Autoklaventyp (Abb. 2.5) ermöglicht Synthesen bei Sauerstoffdrücken bis maximal 400 Mpa und Temperaturen bis zu 823 K. Vorteile sind das relativ große Autoklavenvolumen und die hohe Beständigkeit des Wandmaterials gegenüber stark korrosiven Mineralisatoren, wie etwa konzentrierter Kaliumhydroxidlösung.

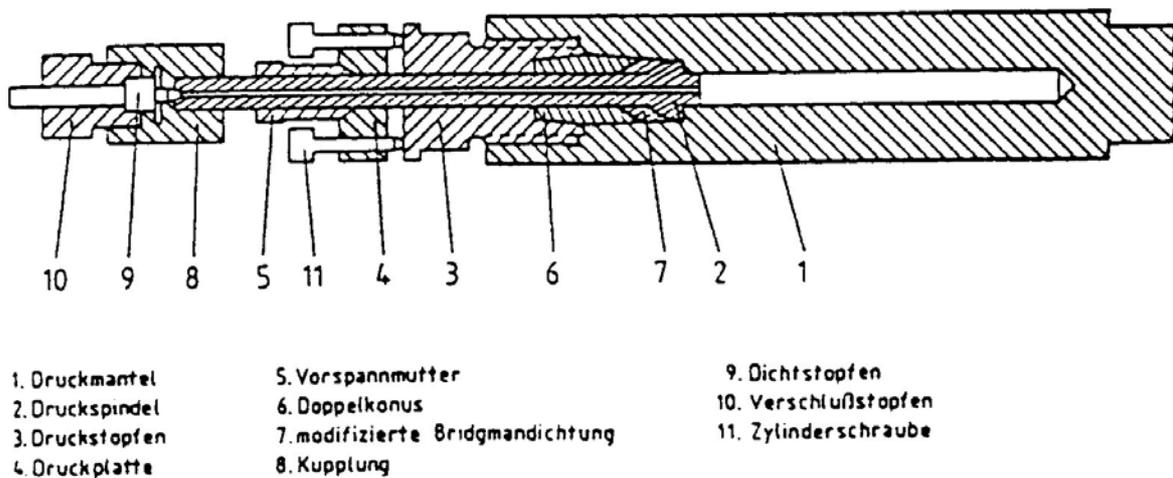


Abbildung 2.5 Hochdruckautoklav, Typ 1 mit modifizierter Bridgemandichtung

Tabelle 2.1: Betriebsparameter eines Hochdruckautoklaven des Typs 1

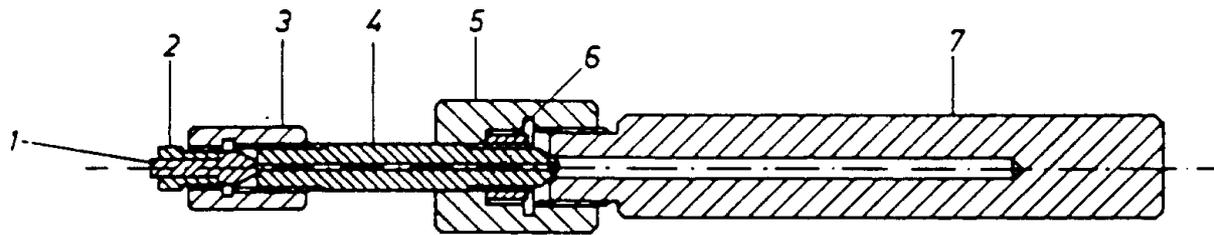
Betriebsdaten	
Werkstoff	hochwarmfester Edelstahl NiCr20Co18Ti
Werkstoffnummer	2.4969.0
Bezeichnung	ATS 340 (Fa. Thyssen, Bochum)
Maße	Stäbe $\varnothing = 60 \text{ mm}$, $l = 240 \text{ mm}$
Innenvolumen	20 cm^3
Max. Betriebsdruck	400 Mpa
Max. Betriebstemperatur	823 K
Dichtung	modifizierte Bridgemandichtung (selbstdichtend)

Proben werden in nicht gasdichten, kalt verschlossenen Goldtieglern, in denen sich ggf. auch die Mineralisatorlösung befindet, eingebracht. Sauerstoff wird als Druck- bzw. Reaktionsgas einkondensiert.

Die aus Kupfer gefertigte Bridgemandichtung dieses Autoklaventyps bedingt den eingeschränkten Betriebstemperatur- und Druckbereich.

Demgegenüber erschließt der Hochdruckautoklav des Typs 2 (siehe Abb. 2.6) dank einer konischen Ringdichtung Betriebstemperaturen bis zu 1273 K und Drücke bis zu 1 GPa. Die geringere Korrosionsbeständigkeit des Autoklavenmaterials sowie die höheren Temperaturen

schränken allerdings den Einsatz von Mineralisatoren erheblich ein. Darüberhinaus ist das Autoklaveninnenvolumen erheblich geringer als beim zuvor beschriebenen Typen.



1	Dichtstopfen
2	Verschlußstopfen
3	Überwurfmutter
4	Druckspindel
5	Überwurfmutter (groß)
6	Vorspannmutter
7	Autoklavenkörper

Abbildung 2.6 Hochdruckautoklav Typ 2

Tabelle 2.2: Betriebsparameter eines Hochdruckautoklaven des Typs 2

Betriebsdaten

Werkstoff	hochwarmfeste austenitisch ausgehärtete Ni/Cr Gusslegierung
Werkstoffnummer	2.4670.0
Bezeichnung	Vakumelt ATS 290-G (Fa. Thyssen, Bochum)
Maße	Stäbe $\varnothing = 40 \text{ mm}$, $l = 250 \text{ mm}$
Innenvolumen	12 cm^3
Max. Betriebsdruck	1000 Mpa
Max. Betriebstemperatur	1273 K
Dichtung	konische, metallische Ringabdichtung

Die Probenmaterialien werden in zgedrückten Goldtieglern oder Korundtieglern mit lose aufgelegtem Deckel eingebracht. Als Druckübertragungsmedium und Reaktionsgas wird Sauerstoff einkondensiert. Oberhalb von 973 K sind Goldtiegel ungeeignet, da der Verschluss zusammensintert und so kein Sauerstoff mehr an die Probe gelangen kann.

Nach dem Einbringen der Tiegel wird der Autoklavenkörper mit den beweglichen Teilen verschlossen. Bei jedem Versuch muss eine neue Bridgemandichtung verwendet werden, die zuvor in der Bunsenbrennerflamme ausgeglüht und anschließend in Ethanol abgeschreckt wurde. Die Großgewinde werden jeweils mit einem Hochtemperaturspezialfett (COPASLIP, Fa. SLIP Oelprodukte Rodgau) eingefettet um ein Zusammensintern bzw. Korrosion zu vermeiden.

2.1.2.2 Druckaufbau und Kontrolle

Zum Druckaufbau werden die Autoklaven mit flüssigem Sauerstoff beschickt. Hierfür wird der Verschlussstopfen entfernt und durch den Einfüllstutzen der Füllapparatur Abb. 2.7 ersetzt. Die jeweils benötigte Menge flüssigen Sauerstoffs (Stahlflasche, Gasqualität 4,5) wird zunächst in einen graduierten Glasfinger einkondensiert, während der Autoklavenkörper auf die Temperatur des flüssigem Stickstoffs abgekühlt wird.

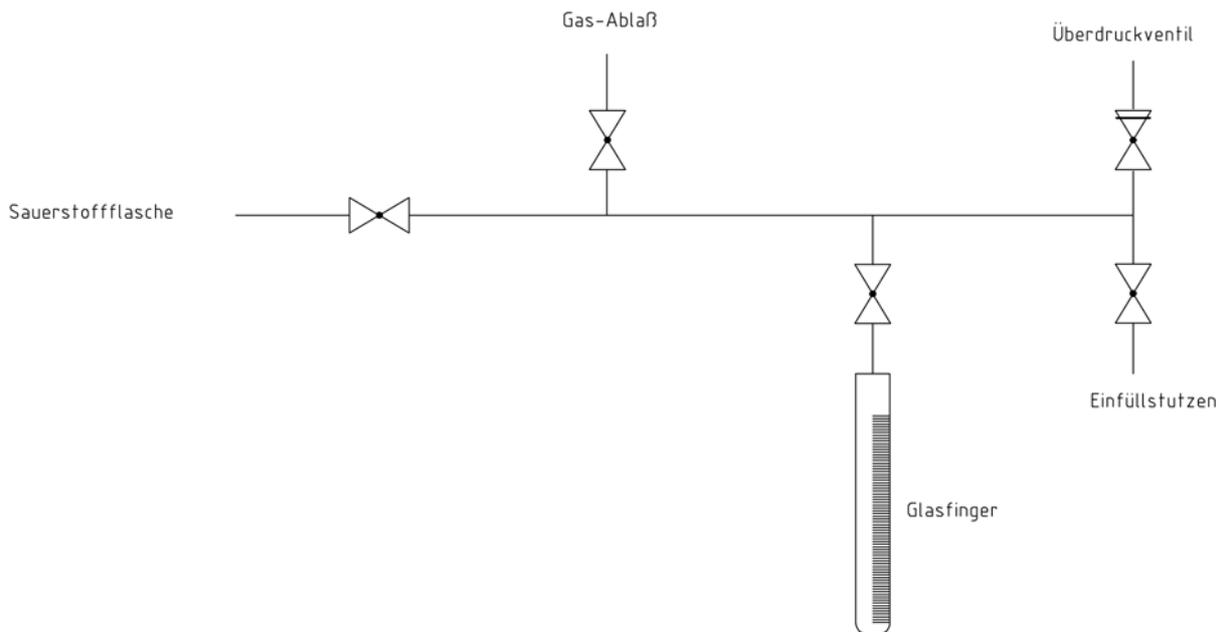


Abbildung 2.7 Apparatur zur Beschickung mit Sauerstoff

Das Ventil zum Autoklaven muss bei diesem Schritt verschlossen bleiben. Anschließend werden die Ventile zur Gasflasche verschlossen, dasjenige zum Autoklaven geöffnet, die Kühlung des Glasfingers entfernt und der Sauerstoff in den Autoklaven überkondensiert. Nach Beendigung dieses Vorganges wird der Einfüllstutzen entfernt, der Verschlussstopfen zügig aufgebracht und der Autoklav fest verschlossen. Schließlich wird der Autoklav in einen auf 300 °C vorgeheizten Ofen eingebracht, der im Anschluss auf die jeweilige Endtemperatur gebracht wird.

Der Sauerstoffdruck im Autoklaven hängt vom effektiven Autoklavenvolumen, dem um Tiegel-, Deckel- und Probenvolumen verringerten Innenvolumen des Autoklaven, der einkondensierten Sauerstoffmenge, sowie der Reaktionstemperatur ab.

Die verwendete Sauerstoffmenge wird nach (1) bestimmt. Daraus wird über die van der Waals Gleichung (2) der Sauerstoffpartialdruck bei Reaktionstemperatur bestimmt.

$$n = \frac{V_o \rho_o}{M_o} \quad (1)$$

mit: V_o : einkondensiertes Sauerstoffvolumen
 ρ_o : Dichte des flüssigen Sauerstoffs (1,218 g/cm³)
 M_o : Molmasse von Sauerstoff (g/mol)

$$p = \frac{nRT}{V_{eff}^2 - nb} - a \frac{n^2}{V_{eff}^2} \quad (2)$$

mit

- p : Druck in Pa
- n : Stoffmenge in mol
- R : universelle Gaskonstante 8,314 J/(K·mol)
- T : Temperatur in K
- V_{eff} : effektives Autoklavenvolumen
- b : Eigenvolumen in m³/mol
- a : Binnendruckkonstante Nm⁴/mol²

Im Gegensatz zur idealen Gasgleichung wird hier berücksichtigt, dass die Gasmoleküle ein Eigenvolumen b besitzen und auf kurze Entfernungen zwischen ihnen eine anziehende Wechselwirkung besteht, die als Binnendruck a des Gases berücksichtigt wird. Bei Versuchen mit größeren Mengen Mineralisator werden die Partialdrücke für Sauerstoff und Wasser separat berechnet und zum Gesamtdruck p addiert. Die Konstanten a und b sind stoffspezifisch:

Tabelle 2.3: Van der Waals Parameter von Sauerstoff und Wasser

Gas	Binnendruck a [Nm ⁴ /mol ²]	Eigenvolumen b [m ³ /mol]
Sauerstoff	0,138	$31,8 \cdot 10^{-6}$
Wasser	0,555	$30,5 \cdot 10^{-6}$

2.1.3 Öfen und Temperaturkontrolle

Je nach Temperaturbereich werden verschiedene Öfen verwendet. Für Erzeugung von Temperaturen bis etwa 1173 K werden elektrische Widerstandsöfen mit Kanthaldrahtwicklung auf Pythagorasrohr verwendet. Temperaturen bis zu 1323 K sind durch Röhrenöfen der Fa. HTM Reetz GmbH, Berlin (Typ LOBA 40/160/1200) zugänglich. Bei Versuchen unter Schutz- bzw. Reaktionsgas sind die Öfen waagrecht in ein Gestell eingebaut, bei Autoklavenversuchen senkrecht.

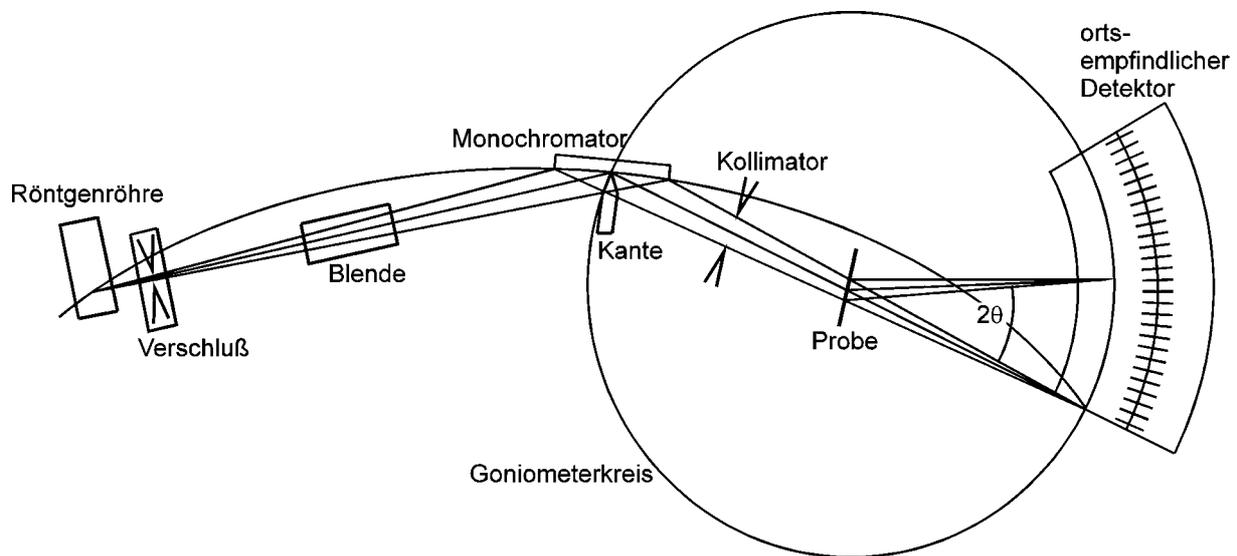
Die Temperaturregelung erfolgt über Soll-Ist-Wert PID-Regler, wobei mit Hilfe eines Steuercomputers (Elektronikwerkstatt, Chemische Institute Bonn) Temperaturprogramme durchlaufen werden können. Zur Temperaturmessung werden Platin/Rhodium/Platin-Thermoelemente verwendet, die außerhalb des Quarzrohres bzw. Autoklaven auf Höhe des Heizgutes positioniert sind

2.2 Analysemethoden

2.2.1 Röntgenpulverdiffraktometrie

Die Strukturaufklärung kristalliner, anorganischer Festkörper erfolgt mit Hilfe von Röntgenbeugung⁷⁻⁹, gegebenenfalls ergänzt durch Neutronen- oder Elektronenbeugung. Man unterscheidet zwischen Röntgenbeugung an Einkristallen und an polykristallinen Pulvern. Die Pulverdiffraktometrie dient zunächst zur Identifikation von Substanzen und der Bestimmung der Metrik, kann jedoch mit Hilfe der Rietveldmethode auch zur vollständigen Strukturaufklärung dienen.

Das Transmissionsdiffraktometer (Abb. 2.8) der Fa. Stoe & Cie GmbH, Darmstadt (Modell StadiP) verwendet eine ähnliche Geometrie wie eine Debye-Scherrer-Kamera.



2.8 Schematischer Aufbau des Stoe StadiP - Diffraktometers

Mit Hilfe eines Johannson-Monochromators, bestehend aus einem gebogenen Germaniumeinkristall wird der aus einer Kupfer-Röntgenröhre austretende Strahl monochromatisiert und auf den Goniometerkreis fokussiert. In dessen Mittelpunkt trifft die $\text{Cu-K}_{\alpha 1}$ Strahlung ($\lambda = 154,06 \text{ pm}$) auf die Probe (je nach Beständigkeit der Substanz als Flächenpräparat oder im eingeschmolzenen Kapillarröhrchen). Durch die Verwendung von Kollimatoren wird der Röntgenstrahl an die jeweilige Probenart und Kapillarenstärke angepasst und so eine möglichst untergrundarme Messung sichergestellt. Die Reflexe werden in Abhängigkeit vom Beugungswinkel mit einem ortsempfindlichen Proportionaldetektor (PSD, Position Sensitive Detector) (Abb. 2.9) registriert.

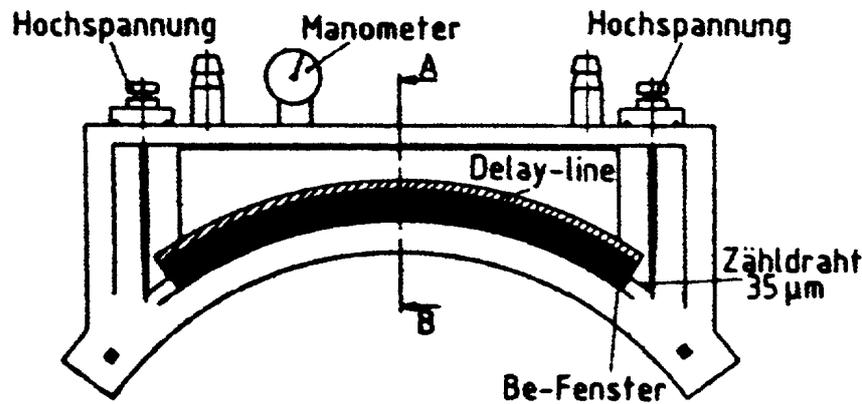


Abbildung 2.9 Aufbau des gebogenen ortsempfindlichen Proportionalzählers (PSD)

Die durch das Berylliumfenster eintretende Röntgenstrahlung ionisiert das Füllgas (90% Argon, 10% Methan). Die so erzeugten Elektronen werden unter weiterer Stoßionisation zum Zählrohrdraht beschleunigt und dort auf eine Induktionsspule (delay line) übertragen, wo sie nach beiden Seiten hin abfließen. Die Zeitdifferenzen für das Abfließen der Ladung sind direkt mit dem Winkel 2θ der reflektierten Röntgenstrahlung korreliert. Der Vorteil dieses Detektors gegenüber herkömmlichen Szintillationszählern besteht in der simultanen Erfassung eines großen Winkelbereichs und der daraus resultierenden kürzeren Messzeit. Es stehen zwei verschiedene, ortsempfindliche Proportionalzähler zur Verfügung: Ein gebogener PSD erfasst einen Winkelbereich von $37,5^\circ$ bei einer Auflösung von $\Delta 2\theta = 0,15^\circ$. Demgegenüber erfasst der lineare PSD einen Winkelbereich von 6° bei einer Auflösung von $\Delta 2\theta = 0,08^\circ$. Der gebogene PSD wird für Routinemessungen im Winkelbereich von $2\theta = 5-80^\circ$ bei einer Messzeit von 20 Minuten verwendet. Der lineare PSD steht für Präzisionsmessungen im Bereich von $2\theta = 3-125^\circ$ bei Messzeiten bis zu 72 h zur Verfügung. Silizium ($a = 543,09 \text{ pm}$) wird als externer Standard verwendet.

Mit Hilfe des Siliziumstandards werden die erfassten Rohdaten kalibriert. Die Identifikation bekannter sowie die Indizierung und Gitterkonstantenbestimmung neuer Phasen erfolgt mit dem Softwarepaket WinXPOW der Fa. Stoe & Cie GmbH¹⁰.

Durch Vergleich des gemessenen Pulverdiffraktogramms mit Pulverdaten aus der JCPDS Datenbank (Joint Committee of Powder Diffraction Standards) sowie Einkristalldaten der ICSD-Datenbank (Inorganic Crystal Structure Database)¹¹ werden bekannte Phasen identifiziert. Mit den in WinXPOW integrierten Programmen Werner¹² und Visser¹³ werden unbekannte Phasen indiziert. Anschließend werden die Gitterkonstanten nach dem Prinzip der kleinsten Fehlerquadrate verfeinert. Das Modul THEO ermöglicht ausgehend von einem adäquaten Strukturmodell die Berechnung von Pulverdiffraktogrammen. Die Intensität der Reflexe ist durch Gleichung (3) gegeben:

$$I_{hkl} = H \cdot PLG \cdot |F_{c(hkl)}|^2 \cdot A \cdot T \quad (3)$$

mit

I_{hkl}	:	Intensität
H	:	Flächenhäufigkeitsfaktor
PLG	:	Polarisations-, Lorentz- und Geometriefaktor

$F_{c(hkl)}$: berechneter Strukturfaktor
 A : Absorptionsfaktor
 T : Temperaturfaktor

2.2.2 Strukturlösung und Verfeinerung aus Pulverdaten

Pulverdiffraktogramme sind eindimensionale Projektionen des dreidimensionalen reziproken Gitters. Entsprechend komplex gestaltet sich die Strukturbestimmung aus Pulverdaten, da sich einerseits viele Reflexe überlagern können, andererseits Probleme bei der exakten Bestimmung ihrer Intensitäten bestehen, die zudem noch durch Textureffekte erschwert werden können. Einen eleganten Lösungsansatz bietet das Programm Endeavour der Firma Crystal Impact, Bonn¹⁴. Bei bekannter Elementarzelle und kristallographischer Summenformel wird zunächst von einer zufälligen Startkonfiguration der Atome ausgegangen. Im Rahmen von „Simulated Annealing“ führt die Kombination zweier verschiedener Kostenfunktionen zum globalen Minimum. Die erste bezieht sich auf die potentielle Energie, E_{pot} , der jeweiligen Atomkonfiguration, die zweite auf die Übereinstimmung mit dem beobachteten Pulverdiffraktogramm unter Verwendung des Bragg-R-Wertes, R_B , nach Harris und Tremayne¹⁵. Die kombinierte Kostenfunktion C berechnet sich wie folgt:

$$C = \alpha E_{pot} + (1 - \alpha) R_B \quad (4)$$

Über den Faktor α lässt sich die Gewichtung der beiden Unterfunktionen regulieren. Für jeden Schritt wird einerseits die potentielle Energie der Atomkonfiguration, andererseits ihr Beugungsmuster berechnet. Anschließend wird der Wert der kombinierten Kostenfunktion ermittelt. Der Prozess wird so häufig wiederholt, bis C einen minimalen Wert erreicht hat. Bei guten Potentialfunktionen und Pulverdiffraktogrammen lässt sich nach dieser Methode mit hoher Wahrscheinlichkeit eine chemisch und physikalisch sinnvolle Strukturlösung erzielen, die dann nach der Rietveldmethode verfeinert werden kann. Derzeit liegen für ionische und intermetallische Verbindungen geeignete Potentialfunktionen vor.

Zur Analyse komplizierter Pulverdiffraktogramme entwickelte Rietveld in den Jahren 1967-1969 eine Kurvenanpassungsmethode^{16,17}. Dabei wird die Differenz zwischen dem gesamten gemessenen und dem gesamten berechneten Profil nach dem Verfahren der kleinsten Fehlerquadrate minimiert. Zur Vermeidung von Intensitätsverfälschungen in Folge der Überlappung mehrerer Reflexe wird aus den Einzelintensitäten der Messpunkte ein Reflexprofil erstellt¹⁶.

$$Y_{ic} = Y_{ib} + \sum_{k=k_1}^{k_2} G_{ik} I_k \quad (5)$$

mit

- Y_{ic} : berechnete Intensität am Punkt i
- Y_{ib} : Untergrundintensität
- G_{ik} : normalisierte Peakprofilfunktion
- I_{ik} : Braggintensität des k -ten Reflexes
- $k_1..k_2$: Reflexe, die Intensität am Punkt i beisteuern

Es werden die Gitterkonstanten, die Atompositionen, die Untergrundkoeffizienten, Profilparameter, der Skalierungsfaktor sowie die Temperatur- und Besetzungsfaktoren nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate so lange variiert, bis beobachtetes und berechnetes

Pulverdiffraktogramm möglichst genau übereinstimmen. Dabei wird folgende Kostenfunktion minimiert:

$$R = \sum_i w_i (Y_{io} - Y_{ic})^2 \quad \text{mit} \quad w_i = \frac{1}{\sqrt{Y_{io}}} \quad (6)$$

mit w_i : Wichtungsfaktor des i-ten Messpunktes
 Y_{ic} : berechnete Intensität des i-ten Punktes
 Y_{io} : beobachtete Intensität des i-ten Messpunktes

Voraussetzungen für die Anwendung der Rietveldmethode sind ein gutes Strukturmodell, das die Startparameter für die Verfeinerung liefert, sowie die Auswahl einer geeigneten Profilkurve, die die Form und Breite und systematischen Fehler der Bragg-Reflexe in Abhängigkeit des Beugungswinkels 2θ beschreibt (Bei hohen Winkeln beobachtet man infolge der längeren Wegstrecke durch die Probe und der damit verbundenen starken Absorption eine signifikante Verringerung der Reflexintensität. Man spricht vom 2θ -fall off.). Die Wahl der Profilkurve hängt von gerätespezifischen Parametern wie der Art der Strahlung, der Form des Primärstrahls, der Aufnahmegeometrie sowie dem verwendeten Detektor ab. Auch Intensitätsverfälschungen, die auf Textur- oder Absorptionseffekte beruhen, können ggf. durch entsprechende Parameter berücksichtigt werden. Die Güte der Strukturverfeinerung wird schließlich durch sogenannte Residualwerte (R-Werte) ausgedrückt:

Der Profil R-Wert:
$$R_p = \frac{\sum |Y_{io} - Y_{ic}|}{\sum Y_{io}} \quad (7)$$

Der gewichtete Profil R-Wert:
$$R_{wp} = \sqrt{\frac{\sum w_i (Y_{io} - Y_{ic})^2}{\sum w_i Y_{io}^2}} \quad (8)$$

mit Wichtungsfaktor w_i des i-ten Schrittes:
$$w_i = \frac{1}{Y_i} \quad (9)$$

Der Bragg R-Wert:
$$R_B = \frac{\sum |I_{ko} - I_{kc}|}{\sum I_{ko}} \quad (10)$$

mit I_{ko} : beobachtete integrierte Intensität des k-ten Reflexes
 I_{kc} : berechnete integrierte Intensität des k-ten Reflexes

Der erwartete R-Wert:
$$R_{exp} = \sqrt{\frac{N - P}{\sum w_i \cdot Y_{io}^2}} \quad (11)$$

mit N : Anzahl der Messpunkte
 P : Anzahl der freien Parameter

sowie Goodness-of-Fit:
$$Goof = \frac{\sum w_i (Y_{io} - Y_{ic})^2}{N - P} = \left(\frac{R_{wp}}{R_{exp}} \right)^2 \quad (12)$$

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zur Rietveldverfeinerung die frei erhältlichen Programme FULLPROF¹⁸, GSAS¹⁹ sowie das kommerzielle Programm DIFFRAKT97²⁰ verwendet.

2.2.3 Neutronenbeugung

Neben Röntgenstrahlen können auch Elementarteilchen wie Elektronen und Neutronen^{21, 22} am Festkörper gebeugt werden. Bei nichtrelativistischen Geschwindigkeiten kann man Neutronen je nach ihrer Geschwindigkeit v_n eine Wellenlänge λ_n gemäß der de Broglie-Beziehung zuordnen:

$$\lambda_n = \frac{h}{m_n v_n} = \frac{0,123}{\sqrt{E}} \quad [\text{m}] \quad (13)$$

mit h : Plancksches Wirkungsquantum [J·s]
 m_n : Ruhemasse des Neutrons [kg]
 E : kinetische Energie in [J]

Die der Beugung zugrundeliegende Wechselwirkung ist die starke Kernwechselwirkung, d.h., Neutronen werden an den Atomkernen gestreut, im Gegensatz zu den Röntgenstrahlen, die an der Elektronenhülle gestreut werden. Der Beugungsvorgang wird somit durch den Wirkungsquerschnitt des beugenden Atomkerns, den Kernspin und die Kernenergieniveaus bestimmt, nicht aber durch die Elektronendichte. Hierdurch erklärt sich auch das deutlich unterschiedliche Streuvermögen benachbarter Isotope und Elemente. Leichtatome wie Sauerstoff und Stickstoff lassen sich durch Neutronenbeugung erheblich besser bestimmen als durch Röntgenbeugung. Im Gegensatz zu Röntgenquanten haben Neutronen als Fermionen ein Spinmoment von $\frac{1}{2}$ und damit ein magnetisches Moment ($\mu_n = 6,03077 \cdot 10^{-8}$ eV/T), so dass auch magnetische Überstrukturen in Neutronendiffraktogrammen nachgewiesen werden können. Ein weiterer Vorteil der Neutronenbeugung liegt im großen Durchdringungsvermögen der Neutronen. Damit lassen sich durch die Verwendung großer Probenmengen Textureffekte weitgehend ausschließen. Bei Neutronen sind die Streulängen winkelunabhängig; ein der Röntgenbeugung analoger 2 θ -fall off findet somit nicht statt.

Neutronen werden nach ihrer kinetischen Energie eingeteilt:

thermische Neutronen	< 0,1 eV
langsame Neutronen	0,1 bis 100 eV
mittelschnelle Neutronen	100 eV bis 100 keV
schnelle Neutronen	100 keV bis 10 MeV
ultraschnelle Neutronen	> 10 MeV

Für Beugungsversuche muss die Wellenlänge der Neutronen im Bereich der Gitterabstände liegen. Nach der de-Broglie-Beziehung entspricht dies thermischen Neutronen mit Energien um 25 meV.

Als Neutronenquellen für Beugungsexperimente werden Spallationsquellen oder Kernreaktoren verwendet. In Kernreaktoren entstehen schnelle Neutronen im Verlauf von

nuklearen Kettenreaktionen, die durch Zusammenstöße mit den Atomkernen eines meist aus Leichtelementen bestehenden Moderators abgebremst werden, bis Moderator und Neutronen im thermischen Gleichgewicht stehen. Die Impulsverteilung der so erzeugten thermischen Neutronen ist entsprechend durch die Maxwell-Boltzmann-Verteilung gegeben. Da bei Kernreaktoren eine große Menge thermischer Neutronen in einem verhältnismäßig engem Energiebereich zur Verfügung steht, bietet es sich an, mit monoenergetischen, d.h., monochromatischen, Neutronen zu arbeiten und analog zur Röntgenbeugung winkeldispersiv zu Arbeiten.

Im Falle von Spallationsquellen wird ein Target aus schweren Elementen wie Tantal oder abgereicherten Uran mit hochenergetischen Protonen ($E_{\text{kin}} > 0,6 \text{ GeV}$) beschossen. Die Protonen durchdringen die Coulomb-Barriere der Targetatomkerne und setzen beim Zusammenstoß eine große Zahl von Neutronen frei, die auch hier auf thermische Energien moderiert werden müssen. Verwendet man einen gepulsten Protonenstrahl, so ist die Neutronenquelle ihrerseits gepulst. Die so erzeugte Neutronenstrahlung weist ein hohes Energiespektrum auf („weiße Neutronenstrahlung“), so dass Beugungsdaten bei Spallationsquellen häufig energiedispersiv erfasst werden.

Alle im Rahmen der vorliegenden Arbeit vorgenommenen Neutronenbeugungsexperimente wurden am Neutronenflugzeitdiffraktometer ROTAX/DIFF²³⁻²⁷ an der gepulsten Spallationsneutronenquelle ISIS im Rutherford Appleton Laboratory in Chilton, Großbritannien durchgeführt. Wie in Abb. 2.10 skizziert, ist das Gerät mit zwei orts- und zeitauflösenden Szintillationsdetektoren des Typs JULIOS ausgestattet.

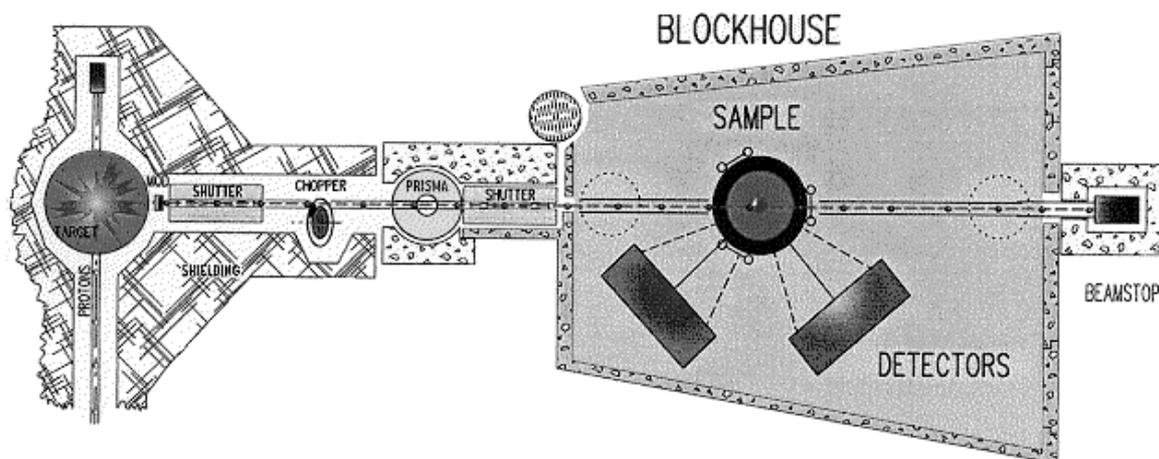


Abbildung 2.10 Schematische Darstellung des Neutronenflugzeitdiffraktometers ROTAX/DIFF nach²⁴

Die Probe befindet sich in einem zylindrischen Vanadiumcontainer im „weißen“ Neutronenstrahl. Das Beugungsmuster wird sowohl energie- als auch winkeldispersiv gemessen, wodurch sowohl eine gute Ausnutzung der Neutronenflussdichte als auch eine simultane Erfassung eines großen kristallographischen Netzebenenabstandsbereiches von 0,3 bis 50 Å gewährleistet wird. Ein wesentlicher Vorteil der Neutronenflugzeitdiffraktometrie besteht darin, dass in Rückstreuung für kleine d -Werte eine hohe Auflösung von $\Delta d/d = 4 \cdot 10^{-3}$ erreicht wird. Tabelle 2.4 fasst die Instrumentparameter zusammen:

Tabelle 2.4: Instrumentparameter des ROTAX/DIFF

Parameter	Wert
Messbereich (d-Werte)	0,3 - 50 Å
Auflösung $\Delta d/d$	$4 \cdot 10^{-3}$
Mittlerer Neutronenfluss an der Probe	10^6 n/cm ² /sec
Abstand bis zur Probe	14 - 16 m (variabel)
Abstand Probe-Detektor	0,5 - 1,6 m (variabel)
Streuwinkelbereich	3-175°
Energiebereich	3-450 meV
Wellenlängenbereich	0,4-5,2 Å
Zeitfenster	1 - 20ms
Ortsauflösung des Detektors Δr	2,5 mm
Zeitauflösung des Detektors Δt	1,0 μ s

2.2.4 Elektronenmikroskopische Untersuchungen

Elektronenmikroskope nutzen die Tatsache, dass Elektronenstrahlen je nach Beschleunigungsspannung eine um ein Vielfaches geringere Wellenlänge haben können als sichtbares Licht und somit eine um einen Faktor 1000 höhere Auflösung ermöglichen. Wie beim ersten 1932 von M. Knoll und E. Ruska gebauten Elektronenmikroskop²⁸ (Nobelpreis für Physik 1986) werden elektrische und magnetische Felder zum Fokussieren der Elektronen verwendet.

Es gibt verschiedene Sorten Elektronenmikroskope, die je nach Aufbau und Art des Detektors eine Vielzahl unterschiedlicher Informationen liefern. Abbildung 2.11 skizziert die Ereignisse, die beim Aufprall eines Elektronenstrahls auf einen Festkörper auftreten:

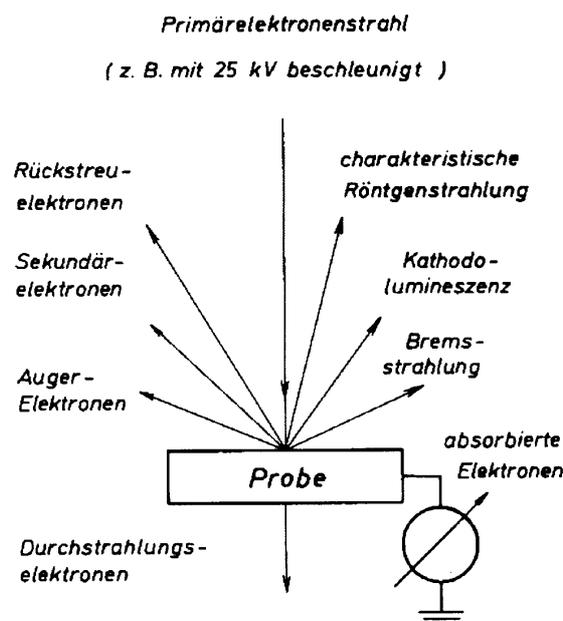


Abbildung 2.11 Phänomene bei der Wechselwirkung zwischen Primärelektronen und Probe in einem Rasterelektronenmikroskop

Neben der elastischen Rückstreuung der Primärelektronen treten inelastische Streuprozesse auf. Diese erlauben mit Hilfe spektroskopischer Methoden Rückschlüsse auf die chemische Zusammensetzung und Morphologie der Probensubstanz.

2.2.4.1 Rasterelektronenmikroskopie

Oberflächenstrukturen können mit einem Rasterelektronenmikroskop (Abb. 2.12) untersucht werden. Zur qualitativen und quantitativen Elementanalyse ist das Elektronenmikroskop zusätzlich mit einer energiedispersiven (EDX) Röntgenfluoreszenzanalyse ausgestattet.

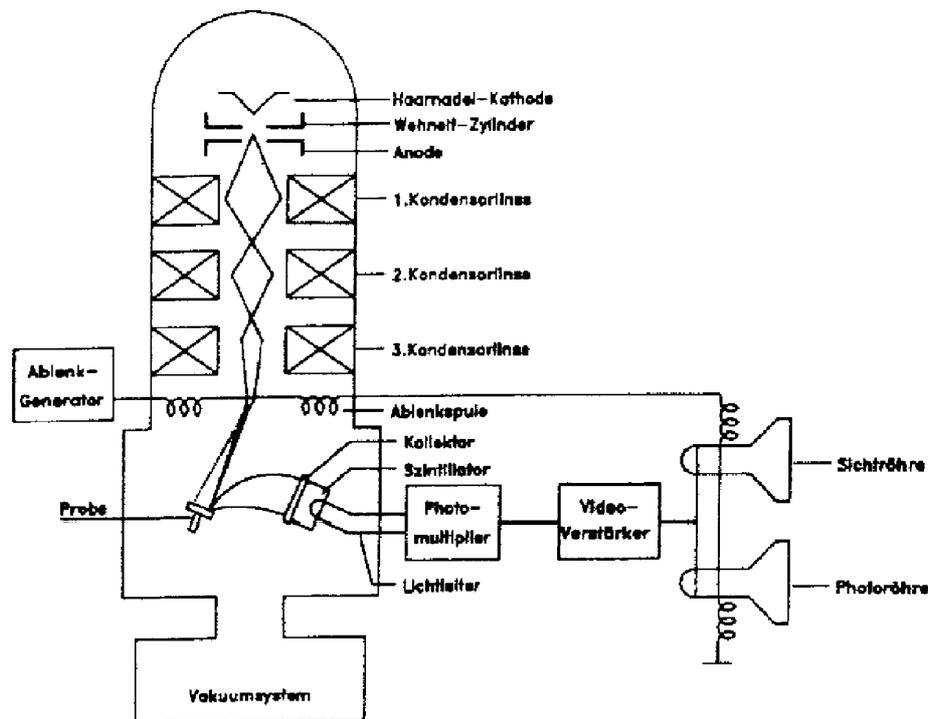


Abbildung 2.12 Schematischer Aufbau eines Rasterelektronenmikroskops²⁹

Der Elektronenstrahl wird erzeugt, indem von einer Wolfram-Glühkathode emittierte Elektronen zu einer ringförmigen Anode hin beschleunigt werden. Zur Vorbeschleunigung und -fokussierung des Strahls dient der Wehneltzylinder mit Lochblende, an dem ein schwach positives Feld gegenüber der Kathode anliegt. Eine weitere Fokussierung erfolgt über die hinter der Anode liegenden Kondensorlinsen. Die Ablenkspulen sorgen für eine zeilenweise, zum Strahl der Bildröhre synchrone Abtastung der Probe. Die von der Probe emittierten Sekundärelektronen, werden mit Hilfe der Saugspannung des Kollektors auf einen schräg über der Probe befindlichen Elektronenzähler geleitet und dort detektiert und anschließend über einen Photomultiplier in elektrische Impulse umgewandelt, die ihrerseits die Bildröhrenhelligkeit steuern.

Durch die hochenergetischen Elektronen des Primärelektronenstrahls werden Elektronen aus der K-, M-Schale der Probenatome in einen angeregten Zustand überführt. Die so angeregten Elektronen können unter Emission charakteristischer Röntgenstrahlung in einen energetisch tieferen Zustand relaxieren. Durch die energiedispersive Aufnahme dieses Röntgenspektrums

lässt sich die Zusammensetzung der Probe für Elemente, deren Ordnungszahlen größer als 8 ist, sowohl qualitativ als auch quantitativ erfassen.

Hierzu dient die Energiedispersive Mikroanalyse (EDX, Energy Dispersive X-Ray Spectroscopy) der Fa. EDAX, Taunusstein (Modell Pv 9800). Die Betriebsparameter sind in Tabelle 2.5 zusammengefasst.

Tabelle 2.5: Betriebsparameter des EDX-Spektrometers Pv 9800

Betriebsparameter	Wert
Beschleunigungsspannung	15-30 kV
Arbeitsabstand	25 mm
Auflösung	146 eV

Die Registrierung der Röntgenquanten erfolgt über einen mit flüssigem Stickstoff gekühlten, Lithium-gedrifteten Siliziumdetektor³⁰, der über eine hohe Quantenausbeute sowie Energieauflösung verfügt. Einfallende Röntgenquanten ionisieren die Siliziumatome des Detektors, deren Ionisierungsenergie 3,8 eV beträgt. Die so erzeugten Elektron-Loch-Paare werden durch eine am Detektor anliegende Spannung getrennt und der resultierende Stromstoß anschließend verstärkt. Die Amplitude des Spannungsstoßes ist streng proportional zur Anzahl der Elektron-Loch-Paare und damit zur Energie des einfallenden Röntgenquants. Über einen Vielkanalanalysator werden die digitalisierten Impulse auf verschiedene Kanäle verteilt und als Gesamtspektrum auf dem Bildschirm dargestellt.

Ein Programm (SUPER-QUANT) berechnet mit Hilfe vorgegebener Standard- und Korrekturparameter die quantitative elementare Zusammensetzung der Probe. Bei der sogenannten ZAF-Korrektur³¹ werden die mittlere Ordnungszahl der Probe, sowie daraus die Eindringtiefe der Elektronen, die Absorption der charakteristischen Röntgenstrahlung in Abhängigkeit von ihrer Energie und der Elementzusammensetzung berücksichtigt. Da diese Größen teilweise nur näherungsweise bestimmt werden können, stimmen die berechneten und die tatsächlichen Zusammensetzungen nur innerhalb gewisser Grenzen miteinander überein.

Bei der Präparation wird etwas Substanz auf einen mit selbstklebender Kohlenstoffolie versehenen Aluminiumprobenteller (Durchmesser 1,25 cm) aufgetragen. Zur Vermeidung einer elektrostatischen Aufladung werden nichtleitende Proben mit Gold oder Kohlenstoff bedampft.

Die Vorteile der Mikroanalyse liegen in der hohen Empfindlichkeit, dem geringen Zeitaufwand sowie der Möglichkeit, gezielt die Zusammensetzung einzelner Kristallite zu untersuchen. Damit lässt sich die Homogenität einer Probe sehr genau überprüfen.

Für die vorliegende Arbeit wurde ein Rasterelektronenmikroskop der Fa. Zeiss, Oberkochen (Modell DSM 940, max. Beschleunigungsspannung: 30 keV, max. Auflösung: 5 nm) benutzt.

2.2.4.2 Transmissionselektronenmikroskopie

Im Gegensatz zum Rasterelektronenmikroskop erfolgt beim Transmissionselektronenmikroskop die Bildentstehung durch die elastische Streuung der Primärelektronen an den Atomen der Probe. Voraussetzung ist, dass die Probe dünn genug ist, um vom Elektronenstrahl vollständig durchstrahlt zu werden (max. 1 μm). Hieraus ergibt sich zusätzlich die Möglichkeit, Elektronenbeugung an Kristalliten vorzunehmen und ggf. lässt sich auf diesem Wege die Kristallstruktur der Probe aufklären. Durch das Anlegen hoher Beschleunigungsspannungen von 100 bis 400 kV wird eine Auflösung von bis zu 1 Å erreicht.

Der Aufbau eines Transmissionselektronenmikroskops ist in Abbildung 2.13 wiedergegeben. Als Elektronenquelle dient eine Haarnadelkathode aus Wolfram oder LaB_6 . Die Elektronen

werden durch die Ringkathode beschleunigt, von einem Wehneltzylinder gebündelt und durch ein zweistufiges Kondensorsystem fokussiert.

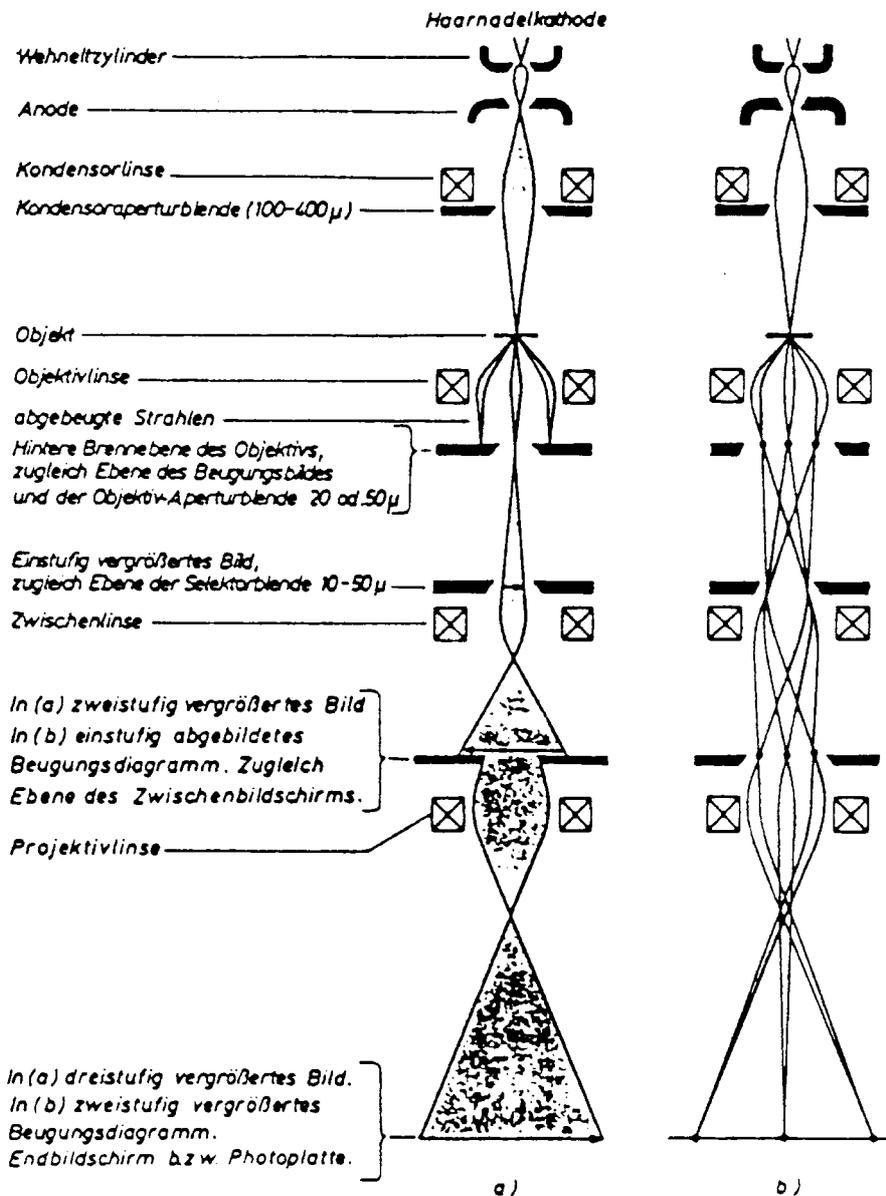


Abbildung 2.13 Aufbau und Arbeitsweise eines Transmissionselektronenmikroskops.

a) Abbildungsmodus

b) Beugungsmodus

Bei der Durchstrahlung einer dünnen Probe werden die Elektronen an den Atomkernen der Probe elastisch gestreut. Nach der Wechselwirkung der Elektronen mit der Probe bildet die Objektivlinse in der Bildebene die transmittierten Elektronenwellen ab. In ihrer hinteren Brennebene entsteht das Beugungsbild. Dabei treten bei kristallinen Substanzen Beugungspunkte, bei polykristallinen Beugungsringe auf. Wie in Abb. 2.13 skizziert, kann ein Transmissionselektronenmikroskop in zwei verschiedenen Modi betrieben werden. Im Abbildungsmodus wird auf die Bildebene fokussiert (schwach gebeugte Elektronen), dadurch erhält man hochaufgelöste Abbildungen des Objektes. Im Beugungsmodus funktioniert das Transmissionselektronenmikroskop ähnlich wie ein Diffraktometer: Es wird die bildseitige

Brennebene der Objektivlinse auf dem Schirm abgebildet, d.h., stark gebeugte Elektronen erfasst. Wie bei einem Einkristalldiffraktometer lassen sich so schichtenweise Abbildungen des reziproken Raumes erhalten. Durch Variation der Brennweite der ersten Linse des Projektorsystems (Zwischenlinse) lässt sich zwischen den beiden Modi umschalten.

Pulverförmige Proben werden zunächst unter Aceton zerkleinert. Anschließend werden einige Tropfen der Suspension auf eine Lochfolie aus Kohlenstoff, die sich auf einem Kupferträgernetz befindet, gebracht. Die so präparierte Probe wird auf dem Probenhalter befestigt und über eine Schleuse in den Strahlengang eingeführt.

In dieser Arbeit wurde ein Transmissionselektronenmikroskop, Jeol 2000FX, das mit einer energiedispersiven Mikroanalyse, Link AN10000, ausgestattet ist, verwendet.

2.2.5 Thermische Analysen

Prozesse, die mit einer Wärmetönung einhergehen, lassen sich mit einer Differenzial-Thermoanalyse erfassen. Hierzu gehören physikalische Phasenübergänge wie Änderungen des Aggregatzustandes, Phasenumwandlungen im festen Zustand, magnetische Übergänge (Ferro-, Ferri- oder Antiferromagnetismus) oder auch die Adsorption und Desorption von Gasen, sowie chemische Übergänge wie thermische Zersetzungen oder Festkörperreaktionen. Bei der DTA wird mittels zweier Thermoelemente aus Pt-Rh/Pt die thermische Änderung der Probe im Vergleich zu einer Referenzsubstanz (Korund) während des Aufheizens und Abkühlens bestimmt. Erwärmt sich die Probe schneller als die Referenz, liegt ein exothermer Prozess vor, im umgekehrten Falle spricht man von einem endothermen Prozess.

Bei der Thermogravimetrie werden Gewichtsveränderungen der Probe als Funktion der Temperatur untersucht. Hierdurch können quantitative Aussagen zu Reaktionen, meist Zersetzungen, gemacht werden.

Die Kombination beider Analysemethoden (DTA/TG) ermöglicht die Detektion intermediärer Spezies.

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Simultan-Analysator der Fa. Netzsch, Selb (Modell STA 429) verwendet. Tabelle 2.6 gibt die Instrumentparameter wieder:

Tabelle 2.6: Instrumentparameter der STA 429

Parameter	Wert
Temperaturbereich	25°C bis 1400°C (unter Schutzgas)
Heizrate	5°C/min
Spülgas	Argon, Sauerstoff
Referenz	Korund

2.2.6 Leitfähigkeitsmessungen

Festkörper werden je nach Größe und Temperaturabhängigkeit ihrer spezifischen Leitfähigkeit σ in Metalle ($\sigma > 10^2 \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$), Halbleiter ($\sigma = 10^2$ bis $10^{-9} \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$) und Nichtleiter ($\sigma < 10^{-9} \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$) eingeteilt. Bei Metallen nimmt die Leitfähigkeit mit zunehmender Temperatur ab, bei Halbleitern jedoch stark zu.

Zur Bestimmung der Leitfähigkeit werden Pulverproben zerkleinert und homogenisiert und mit einem Presswerkzeug bei einem Druck von 770 Mpa zu einem tablettenförmigen Pressling (Durchmesser: 9 mm, Stärke: ca. 1mm) geformt, der anschließend im Röhrenofen bei 400°C im Sauerstoffstrom gesintert wird. Anschließend wird die Leitfähigkeit nach der Vier-Punkt-Methode bestimmt (Abb. 2.14).

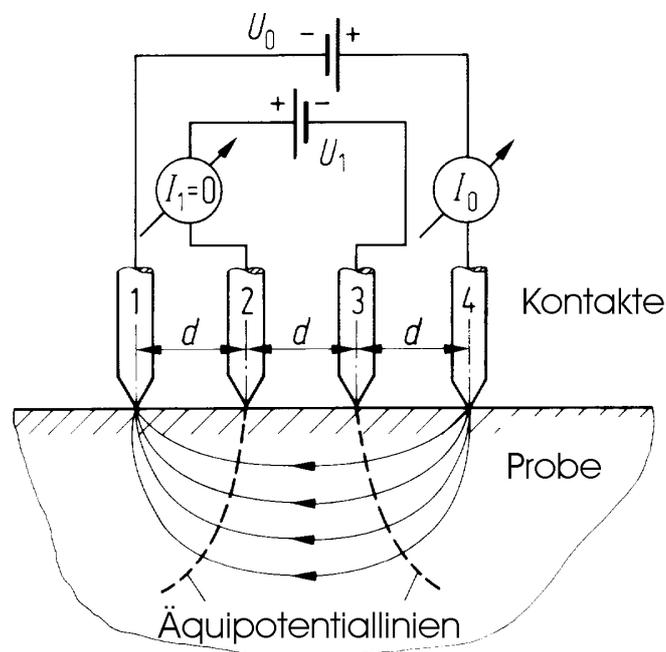


Abbildung 2.14 Leitfähigkeitsmessung nach der Vierpunktmethode³²

Für eine einseitig begrenzte, ansonsten unendlich ausgedehnte Probe gilt:

$$\rho = 2\pi d \frac{U_1}{I_0} \quad (14)$$

mit

- ρ : spezifischer Widerstand
- d : Abstand zwischen den 4 Kontakten
- U_1 : Spannung zwischen den beiden inneren Kontakten
- I_0 : Stromfluss zwischen den beiden äußeren Kontakten

Alle konduktometrischen Messungen im Rahmen dieser Arbeit wurden im Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart durchgeführt.

2.2.7 Messung der magnetischen Suszeptibilität:

Die magnetischen Eigenschaften von Substanzen werden mit einem SQUID-Magnetometer der Fa. Quantum Design, San Diego (Typ MPMS: Magnetfeldbereich: 0 - 5 Tesla, Temperaturbereich: 1,8 bis 400 K) bestimmt.

Die SQUID-Magnetometrie³³ basiert auf der Empfindlichkeit eines SQUID - Sensors (Superconducting Quantum Interference Device) gegenüber Änderungen des magnetischen Flusses. Ein SQUID Sensor besteht aus einer supraleitenden Spule mit einer „schwachen Stelle“ (Josephson Kontakt)³⁴ aus normalleitendem Material. Der Aufbau eines SQUID - Magnetometers ist in Abb. 2.15 skizziert:

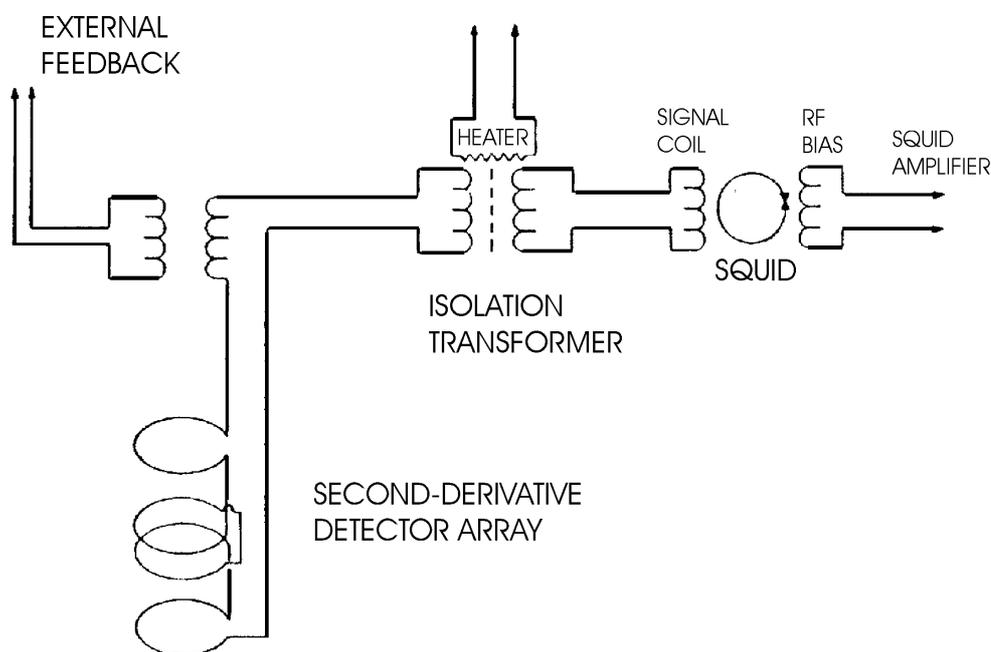


Abbildung 2.15: Aufbau eines SQUID – Magnetometers

Mess- und Analysatorraum sind getrennt. Der Messraum wird von einem homogenen Magnetfeld durchdrungen. Gemessen wird die Änderung des magnetischen Flusses beim Ein- und Ausbringen der Probe in die supraleitende Messspule (second-derivative detector array) bei konstantem äußeren Magnetfeld. Der SQUID-Sensor befindet sich im supraleitend gegen äußere Magnetfelder abgeschirmten Analysatorraum. Der in der Messspule induzierte Strom wird zunächst über den beheizbaren Isolationstransformator auf die ebenfalls supraleitende Signalspule übertragen, die ihrerseits induktiv mit dem SQUID Sensor gekoppelt ist. Beim Anfahren eines neuen Magnetfeldes dient eine Heizung dazu, die beiden supraleitenden Stromkreise zu unterbrechen, indem kurzzeitig über die Sprungtemperatur erwärmt wird. Ein RF-Schwingkreis, dessen Eigenfrequenz im MHz-Bereich liegt, dient als Gegenkopplung dazu, den Quantenzustand im SQUID konstant zu halten. Die Resonanzfrequenz wird durch den durch den Josephson Kontakt durchtretenden Dauerstrom moduliert. Die eigentliche Messgröße ist also der am RF-Schwingkreis anfallende Kompensationsstrom. Zur Eichung des SQUID-Magnetometer wird HgCo(SCN)_4 verwendet.

Pulverproben werden in einer Gelatinekapsel präpariert, deren magnetische Suszeptibilität vor der eigentlichen Messung bestimmt und zur Korrektur herangezogen wird. Die Probe wird in einem Probenhalter befestigt⁵⁰ und über eine Luftschieuse nach mehrfachem Evakuieren und Fluten mit Helium in den Probenraum eingeführt. Anschließend wird im Nullfeld auf 2 K abgekühlt (zero field cooling), das remanente Feld bestimmt und kompensiert. Bei einem konstanten Magnetfeld von $1,5 \cdot 10^{-3}$ T wird ein Temperaturprogramm (Aufheizen und Abkühlen) durchlaufen. In Anwesenheit eines Supraleiters 2. Art ergibt sich infolge des Meissner-Effekts ein charakteristischer Unterschied zwischen Aufheiz- und Abkühlkurve. Zur Untersuchung para-, dia-, antiferro- und ferromagnetischer Substanzen werden Magnetfelder bis zu 5 Tesla verwendet.

2.2.8 Röntgenabsorptionsspektroskopie

2.2.8.1 Allgemeines

Die elastische Röntgenbeugung gibt Aufschluss über den strukturellen Aufbau eines Festkörpers. Daneben kann es auch zu inelastischer Streuung von Röntgenstrahlung kommen: Durch Absorption eines Photons genügender Energie wird ein kernnahes Elektron aus einem Atom herausgeschlagen, das als sphärische Welle betrachtet werden kann, die an den Hüllen der Nachbaratome gestreut wird. Hierbei kommt es in Abhängigkeit von der chemischen Umgebung des Absorberatoms und der Wellenlänge der Anregungsstrahlung zu Interferenzen zwischen auslaufender und an den Nachbaratomen zurückgestreuten Wellen. Der Absorptionskoeffizient wird also in Abhängigkeit von der Photonenergie moduliert. Es werden zwei Bereiche unterschieden:

1. Der kantennahe XANES - Bereich (X-Ray Absorption Near Edge Structure) erstreckt sich von der Absorptionskante bis etwa 40 eV oberhalb des Ionisationspotentials^{35, 36}.
2. Der kantenferne EXAFS – Bereich (Extended X-Ray Absorption Fine Structure) reicht bis zu 1000 eV oberhalb des Ionisationspotentials.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ausschließlich XANES-Spektroskopie betrieben, so dass auf diese Methode im folgenden genauer eingegangen wird.

2.2.8.2 XANES-Spektroskopie

Alle im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Röntgenabsorptionsmessungen wurden am 2,5 GeV-Synchrotron (Abb. 2.16) der Universität Bonn durchgeführt.

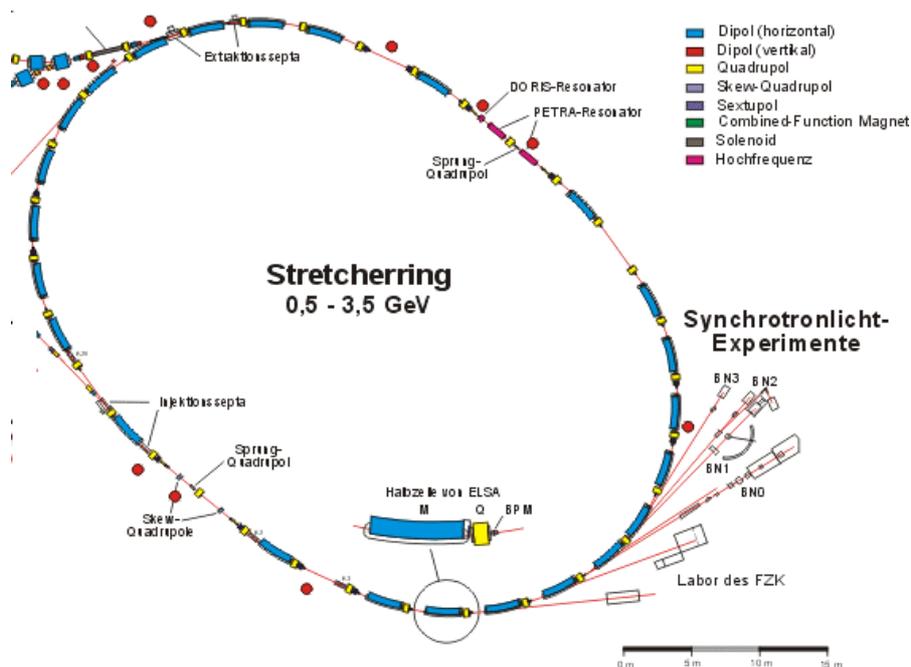


Abbildung 2.16: Schematischer Ausschnitt der Elektronenbeschleunigeranlage ELSA³⁷.

Die XANES Experimente wurden im Labor für Synchrotronlichtexperimente durchgeführt. Die im Elektronen-Synchrotron Speicherring ELSA auf hochrelativistische Geschwindigkeiten beschleunigten Elektronen strahlen ein kontinuierliches Spektrum elektromagnetischer Wellen ab. Der Vorteil dieser Röntgenquelle liegt einerseits in ihrer hohen Intensität und andererseits in der guten Durchstimmbarkeit Wellenlänge der erzeugten Strahlung über einen weiten Bereich. Die polychromatische Röntgenstrahlung wird tangential vom Elektronenstrom im Speicherring abgestrahlt und an einem Doppelkristallmonochromator (Reflexion an den (111)- Flächen zweier InSb Einkristalle; $2d = 7,4806 \text{ \AA}$) vom Lemmonier-Typ monochromatisiert.

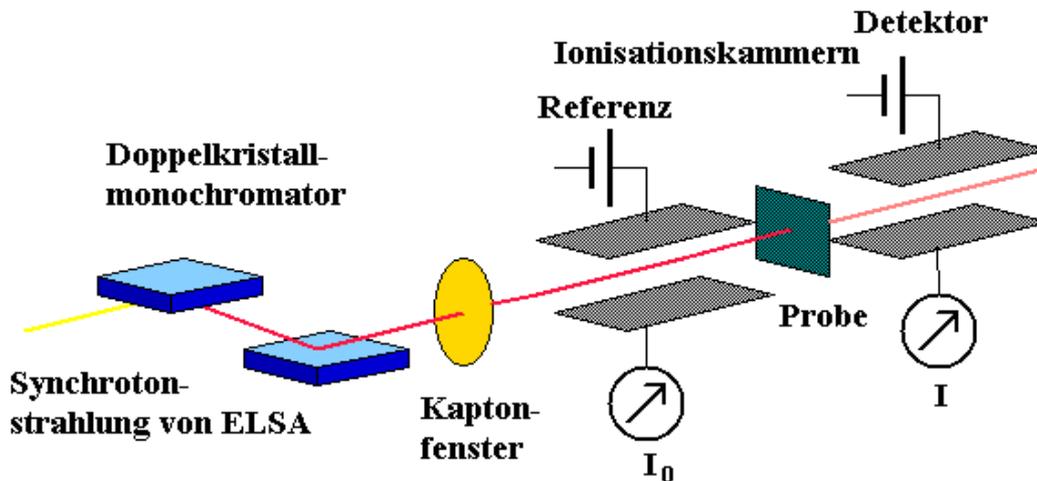


Abbildung 2.17: Schematischer Aufbau eines XANES-Experiments³⁸

Der Einfallswinkel des Röntgenstrahls wird durch Drehung der Kristalle variiert, so dass die Braggsche Gleichung jeweils nur für eine bestimmte Wellenlänge erfüllt ist. Anschließend wird die relative Intensität des Strahls vor (I_0) und hinter (I) der Messzelle mit der Probensubstanz mittels zweier Ionisationskammern bestimmt (Abb. 2.17). Das Röntgenabsorptionsspektrum ergibt sich aus der Auftragung von $\log(I/I_0)$ gegen die Energie E der Erregerstrahlung. Für die Schwächung der Intensität I bei der Durchstrahlung einer Probe der Schichtdicke d gilt das Lambert-Beerschen Gesetz:

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu(E)d} \quad (15)$$

$\mu(E)$ ist hierbei der substanz- und wellenlängenspezifische lineare Absorptionskoeffizient. Dieser nimmt mit steigender Energie E der Erregerstrahlung stetig ab, bis die Energie ausreicht, um ein Elektron aus einer inneren Schale anzuregen. Bei dieser Energie steigt $\mu(E)$ abrupt an, um bei höheren Energien wieder exponentiell abzufallen. So ergibt sich das in Abbildung 2.18 links skizzierte Kantenspektrum eines isolierten Atoms.

In ihrer einfachsten Formulierung führen die quantenmechanischen Auswahlregeln der Elektronenanregung dazu, dass die Erregerstrahlung nur dann in Wechselwirkung mit einem Rumpfelektron tritt, wenn ein definierter Endzustand erreicht werden kann. Durch eine derartige Anregung eines Rumpfelektrons mit einer Energie oberhalb der Absorptionskante wird ein Photoelektron erzeugt, das als Kugelwelle aufgefasst werden kann. Diese Kugelwelle wird an den benachbarten Atomen im Festkörper zurückgestreut, woraus sich eine mit sich selbst interferierende Welle ergibt. Die sich je nach Abstand und Geometrie der Nachbaratome ergebenden konstruktiven und destruktiven Interferenzen führen zur

Feinstruktur oberhalb der Absorptionskante. Im Festkörper ergibt sich somit der Abb. 2.18 rechts dargestellte Verlauf des Röntgenabsorptionsspektrums.

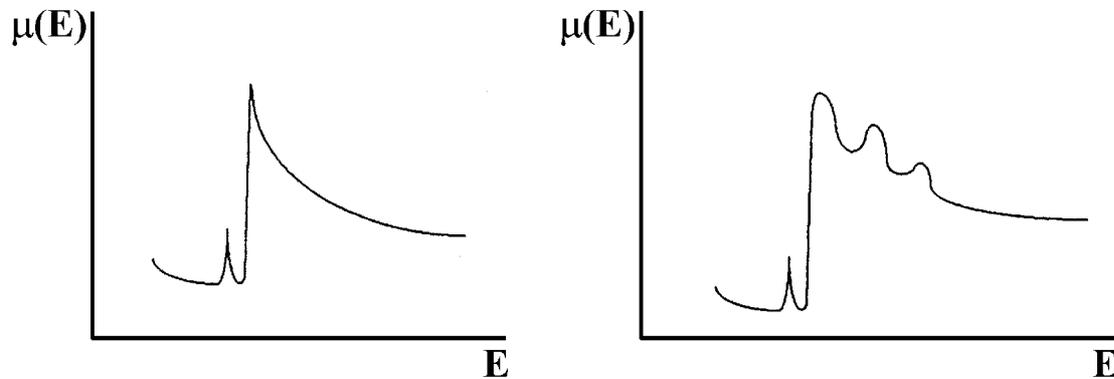
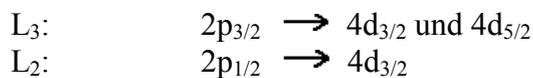


Abbildung 2.18: Schematische Darstellung des Röntgenabsorptionsspektrums eines isolierten Atoms (links) und eines Festkörpers (rechts)

Bei XANES-Spektren an Silber ist eine Besonderheit zu beachten: Unterhalb der Absorptionskante tritt die Promotion von Rumpfelektronen in unbesetzte höhere Energieniveaus des Absorberatoms ein. Nach den quantenmechanischen Auswahlregeln für elektrische Dipolübergänge entsprechen die für Silber an der AgL-Kante beobachteten Vorkantenpeaks folgenden Übergängen:



Die Fläche des dabei im Röntgenspektrum austretenden Vorkantenpeaks ist proportional der Übergangswahrscheinlichkeit des Elektrons in einen solchen Endzustand. Diese Übergangswahrscheinlichkeit hängt neben den quantenmechanischen Auswahlregeln auch vom Besetzungsgrad der Endniveaus ab. Aus der Fläche unter den Vorkantenpeaks kann somit auf den Besetzungsgrad des erreichten Endzustands und damit in vielen Fällen auf die Oxidationsstufe des Silbers geschlossen werden^{39, 40}.

2.2.8.3 Probenpräparation und Kalibrierung

Zur Aufnahme der XANES-Messungen wurden die Probensubstanzen im Mörser verkleinert und auf Träger aus selbstklebender Kaptonfolie aufgetragen und in die evakuierte Probenkammer eingebracht. Alle Messungen wurden bei Raumtemperatur durchgeführt. Die Kalibrierung der Messungen erfolgte relativ zum Wendepunkt des Röntgenabsorptionsspektrums des korrespondierenden Metalls, der auf tabellierte Elektronenbindungsenergie-Werte normiert wurde (X-ray Data-booklet). Die Umgebung der AgL_{III}-Kante wurde mit einer Schrittweite 0,21 eV und diejenige der Ni K-Kante mit einer von 0,72 eV vermessen.

2.2.9 Photoelektronenspektroskopie

2.2.9.1 Allgemeines

Durch Wechselwirkung ist elektromagnetische Strahlung in der Lage, aus Atomen, Molekülen und Festkörpern sogenannte Photoelektronen herauszulösen. Die Anregungsenergie der eingestrahelten elektromagnetischen Quanten muss hierfür größer als die Bindungsenergie E_b der herausgelösten Elektronen sein. Beim Festkörper muss zusätzlich noch die Austrittsarbeit Φ geleistet werden. Die kinetische Energie der austretenden Photoelektronen setzt sich somit wie folgt zusammen:

$$E_{kin} = h \cdot \nu - E_b - \Phi \quad (16)$$

Die Austrittsarbeit Φ bezieht sich auf die Austrittsarbeit des Analysators, mit dem die Probe leitend verbunden wird. Dadurch gleicht sich das Fermi-niveau der Probe, deren Austrittsarbeit in der Regel unbekannt ist, dem des Analysators an. Infolgedessen kann die bekannte Austrittsarbeit des Analysators verwendet werden.

Aus den energetischen Lagen der erhaltenen Emissionsbanden lassen sich sowohl Rückschlüsse auf die in der Probe vorhandenen Elemente als auch deren Bindungszustände treffen. So kann eine erhöhte Oxidationsstufe eine Verschiebung der kernnahen Niveaus zu höheren Bindungsenergien bewirken, da die Kernladung mit steigender Oxidationsstufe weniger gut abgeschirmt wird. Diese sogenannten chemischen Verschiebungen sind für viele Verbindungen tabelliert^{41, 42}.

Abbildung 2.91 zeigt den schematischen Messaufbau eines photoelektronenspektroskopischen Experiments:

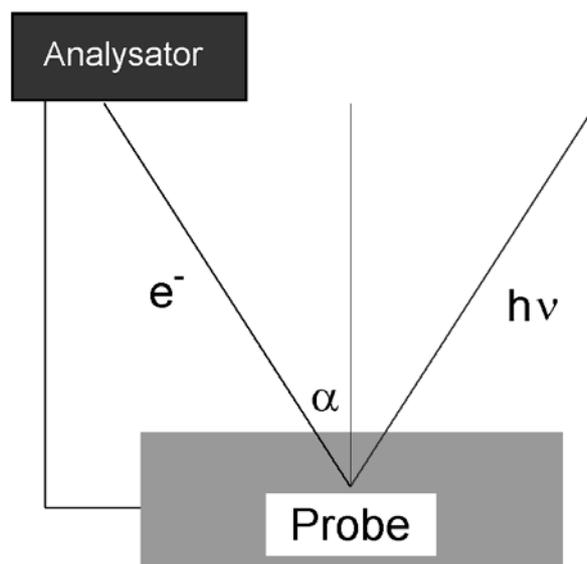


Abbildung 2.19 Schematische Darstellung eines Photoemissionsexperiments

Die tablettenförmige Probe wird mit Photonen einer definierten Energie bestrahlt. Die austretenden Photoelektronen werden unter einem Winkel α zwischen der Probennormalen und Analysator detektiert. Die Anregungsenergien der Strahlungsquellen sollten im Bereich der Energien der zu beobachtenden Zustände liegen. Gängige Strahlungsquellen emittieren im Bereich von Ultraviolett (10 eV) bis Röntgenstrahlung (etwa 2000 eV). Im Röntgenbereich stehen kommerzielle Röntgenröhren, im UV-Bereich Gasentladungslampen zur Verfügung. In der vorliegenden Arbeit wurden zwei Meßmethoden verwendet, die im Folgenden skizziert werden.

2.2.9.2 Röntgeninduzierte Photoemission (XPS)

Für die XPS-Messungen wurde eine kommerzielle Röntgenröhre mit Aluminiumanode verwendet. Die dafür charakteristische Anregungsenergie und die Halbwertsbreite (Full Width at Half Maximum) der Emissionslinie betragen:

$$\text{Al}_{K\alpha}: h\nu = 1486,6 \text{ eV}, \quad \text{FWHM} = 830 \text{ meV}$$

Im Gegensatz zur XANES-Spektroskopie ist die Photoelektronenspektroskopie eine oberflächensensitive Methode. Ausschlaggebend hierfür ist die mittlere freie Weglänge der austretenden Photoelektronen, die üblicherweise ca. 20 Å beträgt. Infolgedessen haben Verunreinigungen auf der Probenoberfläche einen überproportional großen Einfluss auf das Messergebnis. Diesem Effekt muss bei der Probenpräparation (s.u.) Rechnung getragen werden.

2.2.9.3 UV induzierte Photoemission (UPS)

Die die chemische Bindung bestimmenden Elektronenzustände erstrecken sich über nur wenige eV. Zur Bestimmung der genauen Elektronenstruktur benötigt man daher in diesem Bereich eine höhere Auflösung als in der XPS. Die relativ große Linienbreite der anregenden Strahlung ist hier ein Nachteil der röntgeninduzierten Photoemission. Darüberhinaus ist der Wirkungsquerschnitt für Photoionisation im Valenzband für Röntgenstrahlung gering. Zur Betrachtung des Valenzbandes verwendet man daher Gasentladungslampen, die ultraviolette Strahlung abgeben, als Anregungsquellen. In der vorliegenden Arbeit wurden der HeI und der HeII Übergang für die Aufnahme von UPS-Messungen verwendet:

$$\begin{array}{ll} \text{HeI: } h\nu = 21,22 \text{ eV}, & \text{FWHM} = 3 \text{ meV} \\ \text{HeII: } h\nu = 40,82 \text{ eV}, & \text{FWHM} = 17 \text{ meV} \end{array}$$

Die Auflösung setzt sich aus intrinsischer FWHM und instrumentellen Parametern, vor allem der sogenannten Durchlass- (Pass)- Energie des Analysators zusammen. Sie beträgt ungefähr 0,1 eV für HeI, sowie 0,3 eV für HeII Anregungen. Die mittlere freie Weglänge der so erzeugten Photoelektronen liegt bei ca. 10 Å, so dass etwa 30% der Elektronen aus der obersten Atomlage stammen.

2.2.9.4 Experimentelle Aspekte

Infolge der hohen Oberflächensensitivität hat die Vermeidung von Oberflächenkontamination besondere Bedeutung bei der Probenpräparation. Von der Probensubstanz werden zunächst Presslinge von 9 mm Durchmesser und 2-3 mm Stärke bei einem Druck von 770 MPa hergestellt. Diese werden anschließend bei geeigneten Bedingungen nachgesintert, so dass innere Oberflächen an den Korngrenzen ausheilen können. Unter dem Einfluss der Atmosphäre insbesondere durch Kohlendioxid und Feuchtigkeit findet eine gewisse Oberflächendegradation statt. Der Anteil der resultierenden Kontaminationsphasen wird durch Abschleifen der Probenoberfläche im Ultrahochvakuum ($< 5 \cdot 10^{-10}$ mbar) der Probenpräparationskammer verringert. Dies wird an der Sauerstoff 1s Bande überprüft. Die Messung selbst findet in einer Ultrahochvakuumkammer ($< 5 \cdot 10^{-10}$ mbar) des Photoelektronenspektrometers statt. In der vorliegenden Arbeit wurde ein Elektronenspektrometer, das mit einem Elektronenanalysator LS-EA-200 (Hersteller: Fa. Specs) ausgestattet war, verwendet. Zur Kalibrierung wird die Au $4F_{7/2}$ -Bande (Bindungsenergie = 84,0 eV) verwendet.

Für eine weiterführende Diskussion der Photoelektronenspektroskopie sei auf die Literatur verwiesen^{43, 44}.

2.3 Quantenchemische Methoden

Zum näheren Verständnis eines der in dieser Arbeit betrachteten Systeme sowie zur Auswertung der XANES-Spektren wurden quantenchemische Rechnungen durchgeführt. Die Quantenmechanik fasst die Dynamik der Atomkerne und der sie umgebenden Elektronen in einer Wellengleichung zusammen. Eine stationäre Form dieser Wellengleichung unter Vernachlässigung relativistischer Effekte ist die Schrödingergleichung:

$$E\Psi = H\Psi \quad (17)$$

Ψ ist die sogenannte Wellenfunktion des Systems, E ein Eigenwert der Gesamtenergie und H der sogenannte Hamiltonoperator: Er beinhaltet die potentielle und kinetische Energie eines jeden Atomkerns und eines jeden Elektrons des Systems. Ausgeschrieben sieht er wie folgt aus:

$$H = -\sum_i \frac{\nabla_{R_i}^2}{M_i} - \sum_i \nabla_{r_i}^2 - \sum_{i,j} \frac{2Z_i}{|r_i - R_j|} + \sum_{i \neq j} \frac{1}{|r_i - r_j|} + \sum_{i \neq j} \frac{Z_i Z_j}{|R_i - R_j|} \quad (18)$$

(Die Formel ist in Rydberg angegeben, so dass $\hbar^2 = 2m = e^2/2c$ ist). R bzw. r sind die Ortskoordinaten der Atomkerne bzw. der Elektronen, Z gibt die Ordnungszahl des jeweiligen Atomkerns an. Die ersten beiden Terme sind die Operatoren für die kinetischen Energien der Atomkerne bzw. der Elektronen. Die letzten drei Terme betrachten die elektrostatischen Wechselwirkungen, der Elektronen mit den Atomkernen, der Elektronen untereinander sowie der Atomkerne untereinander. Bereits für das Wasserstoffatom gestaltet sich die Lösung der Schrödingergleichung schwierig. Für einen Festkörper, der aus typischerweise 10^{24} Atomen und entsprechend mehr Elektronen besteht, ist eine exakte Lösung auch angesichts moderner Computertechnik auf den ersten Blick undenkbar. Es müssen Näherungen auf der Basis physikalisch sinnvoller Annahmen herangezogen werden.

Eine erste Vereinfachung ist die Born-Oppenheimer-Näherung (1927). Infolge ihrer größeren Masse sind die Atomkerne um ein vielfaches träger als die Elektronen. Es erscheint somit sinnvoll, die Atomkern- und die Elektronenbewegung derart zu separieren, dass man die Atomkerne auf ihren Positionen festhält und allein die Elektronenbewegung betrachtet. Damit fällt der erste Term des Hamiltonoperators weg und der letzte wird zu einer konstanten Summe, dem elektrostatischen Potentialfeld der Atomkerne. Dieses steht in enger Beziehung zur Madelungenergie des betrachteten Kristalls und hängt allein von der Kristallstruktur ab. Das Ergebnis ist der sogenannte elektronische Hamiltonoperator.

In der Hartree-Fock-Näherung vernachlässigt man die dynamische Elektronenkorrelation und reduziert die Wechselwirkungen der Elektronen untereinander auf das Pauliprinzip sowie die Coulombabstoßung der Elektronen untereinander auf ein mittleres Feld weitgehend konstanter Elektronendichte zu einem mittleren Feld integriert. Auf diese Weise lässt sich die Vielteilchenwellenfunktion Ψ in einen Satz entkoppelter Einteilchenwellenfunktionen ψ zerlegen, aus dem unlösbares Vielteilchenproblem wird eine Vielzahl von Einteilchenproblemen. Die Gesamtwellenfunktion wird nun als Slaterdeterminante der Einteilchenwellenfunktionen geschrieben:

$$\Psi(r_1s_1 \cdots r_Ns_N) = \begin{vmatrix} \psi_1(r_1s_1) & \psi_1(r_2s_2) & \cdot & \cdot & \cdot & \psi_1(r_Ns_N) \\ \cdot & \cdot & & & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & & & \cdot \\ \psi_N(r_1s_1) & \psi_N(r_2s_2) & \cdot & \cdot & \cdot & \psi_N(r_Ns_N) \end{vmatrix} \quad (19)$$

wobei $\psi_1(r_1s_1)$ die erste Eielektronenwellenfunktion an der Ortskoordinate r_1 mit dem Spin s_1 ist. Man erhält einen Satz von Eigenwertgleichungen, die man die Hartree-Fock-Gleichungen nennt:

$$\begin{aligned} \varepsilon_i \psi_i(r, s) = & -\nabla^2 \psi_i(r, s) - \sum_{j=1}^{N_{at}} \frac{Z}{|r - R_j|} \psi_i(r, s) - \int n(r') \frac{1}{|r - r'|} dr' \psi_i(r, s) \\ & - \sum_{j=1}^{N_{el}} \int \frac{1}{|r - r'|} \psi_j^*(r', s) \psi_i(r', s) \psi_j(r', s) \delta_{s_i s_j} dr' \end{aligned} \quad (20)$$

$n(r')$ bezeichnet die Elektronendichte am Ort r' und $\delta_{s_i s_j}$ ist das Kroneckerdelta. Die beiden letzten Terme auf der rechten Seite geben die Elektron-Elektron-Wechselwirkung wieder, die in zwei Beiträge, den Direkten und den Austauschbeitrag, aufgespalten ist. Der direkte Term beinhaltet die Coulombabstoßung aller anderen Elektronen, die zu einem mittleren Feld integriert wird, in dem sich das Elektron bewegt. Das Pauliprinzip wird durch den Austauschterm berücksichtigt, der dazu führt, dass der Austausch zweier Elektronen i und j zu einem Vorzeichenwechsel der Wellenfunktion führt.

Der Coulomb- und der Austauschterm in der Hartree-Fock-Gleichung hängen von der Wellenfunktion selbst ab. Die Lösung muss also bekannt sein, bevor das Problem gelöst werden kann. In derartigen Fällen geht man nach einer iterativen, selbstkonsistenten Methode vor: Man vermutet eine geeignete Wellenfunktion, rechnet mit ihr die Potentialterme aus, mit deren Hilfe man wiederum eine neue Wellenfunktion errechnet. Dieser Vorgang wird wiederholt, bis alte und neue Wellenfunktion identisch sind, das heißt, die Selbstkonsistenz erreicht ist. Damit hat man nach der Hartree-Fock-Methode eine näherungsweise Lösung der Schrödingergleichung gefunden.

2.3.1 Dichtefunktionaltheorie

Nach der Hartree-Fock-Methode wird die Wellenfunktion aus der Schrödingergleichung bestimmt. Bei der Dichtefunktionaltheorie⁴⁵ spielt die Elektronendichte $n(r)$ die entscheidende Rolle. Sie basiert auf drei grundlegenden Theoremen, die von Hohenberg und Kohn 1964 formuliert wurden⁴⁶:

1. **Eindeutigkeit:** *Der Grundzustandserwartungswert einer Observablen ist eine eindeutige Funktion der genauen Grundzustandselektronendichte $n(r)$.* Das heißt, kennt man die Elektronendichte des Grundzustandes und die Funktionale, so lassen sich alle Observablen, insbesondere die Energie des Grundzustandes des Systems, berechnen.
2. **Variationsprinzip:** *$n(r)$ minimiert die Gesamtenergiefunktion $E(n)$.* Es ist möglich, aus $E(n)$ den Energieterm zu isolieren, der die äußere Potentialenergie enthält, so dass die Gesamtenergie wie folgt beschrieben werden kann:

$$E(n) = F(n) + e \int V_{\text{ext}}(r) n(r) d^3 r \quad (21)$$

$F(n)$ beinhaltet die kinetische Energie und die Elektron-Elektron-Wechselwirkung. V_{ext} beschreibt das äußere Potential inklusive des elektrostatischen Potentials der Atomkerne. Das Variationsprinzip dient hier ebenso wie im Hartree-Fock-Verfahren dazu, sich durch Variation der Elektronendichtefunktion (im Hartree-Fock-Verfahren der Wellenfunktion) der Grundzustandsenergie des betrachteten Systems iterativ anzunähern.

3. **Universalität:** Die Funktion $F(n)$ ist in dem Sinne universell, als sie nicht von V_{ext} abhängt.

Im nächsten Schritt wird, wie 1965 von Kohn und Sham demonstriert, $F(n)$ in drei Komponenten aufgespalten⁴⁷:

$$F(n) = T(n) + \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} d^3 r' d^3 r + E_{\text{xc}}(n) \quad (22)$$

$T(n)$ ist hier die kinetische Energie eines nicht wechselwirkenden, freien Elektronengases mit der gleichen Elektronendichte wie im betrachteten Fall, der zweite Term ist der Coulombterm der interelektronischen Abstoßung, der dritte ist der Austausch- und Korrelationsterm. Analog zum Hartree-Fock-Schema lässt sich das Vielteilchenproblem als Summe vieler Einteilchenproblemen folgender Formulierung auffassen (Kohn-Sham-Gleichung):

$$H_{\text{eff}} \psi_i(r) = [-\nabla^2 + V_{\text{eff}}(r)] \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r) \quad (23)$$

Nach obigen Überlegung gliedert sich V_{eff} , das effektive Potential, in dem sich die nicht wechselwirkenden Elektronen bewegen, folgendermaßen auf:

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{ext}} + \int \frac{2n(r)}{|r-r'|} d^3 r + V_{\text{xc}} \quad (24)$$

V_{xc} ist das Austausch- bzw. Korrelationspotential. Die Eielektronenwellenfunktionen können als Satz von Gleichungen betrachtet werden, die über ihre Elektronendichte miteinander gekoppelt sind:

$$n(r) = \sum_{i=1}^{N_{\text{el}}} |\psi_i(r)|^2 \quad (25)$$

Diese Kopplung ist automatisch in den späteren Rechnungen im Zuge der iterativen Selbstkonsistenz eingebaut. Am problematischsten ist der Austausch- bzw. Korrelationsterm. Häufig wird hier die lokale Dichtenäherung (LDA = local density approximation) verwendet⁶².

$$E_{\text{xc}}^{\text{LDA}}(n) = \int n(r) \varepsilon_{\text{xc}}(n(r)) d^3 r \quad (26)$$

ε_{xc} ist die Austausch und Korrelationsenergie pro Teilchen in einem homogenen Elektronengas der Dichte $n(r)$. Hierfür gibt es verschiedene Ausdrücke, denen unterschiedliche Näherungsmethoden zugrunde liegen.

2.3.2 Das Eigenwertproblem

Verwendet man die Dichtefunktionaltheorie mit der lokalen Dichtenäherung (LDA) als Annäherung der Austausch- und Korrelationsenergie, so bleibt immer noch ein Einteilcheneigenwertproblem zurück.

Um die Rechnungen zu vereinfachen, betrachtet man zur Auswahl geeigneter Probewellenfunktionen zunächst einmal die Symmetrieaspekte: Sie müssen im Falle eines Moleküls oder Clusters mit der Punktgruppe der betrachteten Einheit kompatibel sein. Dies ist insofern von Vorteil, als dadurch die Zahl der möglichen Probefunktionen deutlich eingeschränkt wird. Im Falle kristalliner Festkörper kommt als zusätzliche Randbedingung die Periodizität des Kristallgitter, das man sich als unendliche, periodische Wiederholung eines kleinsten Motivs, der Elementarzelle, vorstellen kann, hinzu. Dies führt für die Wellenfunktionen zur sogenannten periodischen Randbedingung oder Blochbedingung, dass Sie invariant gegenüber der Translation um ein ganzzahliges Vielfaches des Gittervektors R , der einen Punkt innerhalb der Elementarzelle auf sein Äquivalent in der benachbarten Elementarzelle abbildet, sein muss:

$$\psi(k, r + R) = e^{ikR} \psi(k, r) \quad (27)$$

mit: $k = \frac{2\pi}{\lambda}$; $\lambda = \text{Wellenlänge}$

Durch Einführung dieser Randbedingung wird der Wellenvektor k auf bestimmte erlaubte Werte beschränkt. Die Schrödingergleichung lässt sich nun wie folgt schreiben:

$$H(r)\psi_{\mu}(k, r) = \varepsilon_{\mu}(k)\psi_{\mu}(k, r) \quad (28)$$

Die Eielektronen-Schrödingergleichung wird also für einen spezifischen Wellenvektor k gelöst. Die Lösung ergibt einen Satz von Energieeigenwerten, die mit μ indiziert werden. So wie eine Position im Realraum durch den Vektor r definiert ist, definiert der Wellenvektor k eine Position im reziproken Raum, der im Wesentlichen das Inverse des Realraums ist. Der Elementarzelle im Realraum entspricht im reziproken Raum die Brillouinzone. Um eine möglichst gute Kenntnis der Bandstruktur zu erhalten muss die Schrödingergleichung für möglichst viele Punkte in der Brillouinzone gelöst werden.

2.3.3 Basissätze

Jede quantenchemische Rechnung benötigt einen Basissatz von Testfunktionen, die zur näherungsweise Lösung der Schrödingergleichung eingesetzt werden. Eine Möglichkeit besteht darin, die Ausgangsfunktionen von einem Potential zu berechnen, das dem Kristallpotential ähnelt, und diese dann zu linearisieren. Ein solches Potential lässt sich generieren, indem man den Kristall in zwei Bereiche einteilt, den atomaren und den Zwischenbereich⁴⁸. Im Zwischenbereich wird das elektrostatische Potential als konstant angenommen während es im atomaren Bereich sphärisch um das jeweilige Zentralatom ist:

$$V_{MT}(r) = \begin{cases} V(r) & r < S_{MT} \\ V_{MTZ} & r \geq S_{MT} \end{cases} \quad (29)$$

S_{MT} ist der Radius der sogenannten Muffin-Tin-Sphäre, V_{MTZ} das sogenannte Muffin-Tin-Nullpotential und $V(r)$ das Coulombpotential innerhalb der Muffin-Tin-Sphäre. Um einen Basissatz zu erhalten löst man die Kohn-Sham-Gleichung, wobei $V_{eff}(r)$ durch $V_{MT}(r)$ ersetzt wird, für eine einzelne Muffin-Tin-Sphäre. Zur Vereinfachung der Rechnung wird angestrebt, dass die Probefunktionen φ nicht energieabhängig sondern lediglich ortsabhängig sind:

$$\psi(\varepsilon, r) \rightarrow \varphi(r) \quad (30)$$

Die Lösungen $\varphi_l(\varepsilon, r)$ innerhalb der Muffin-Tin-Sphäre sind immer noch energieabhängig. Um dies zu beheben, werden sie als Taylorreihe entwickelt und lediglich jeweils die ersten beiden Terme berücksichtigt:

$$\varphi_l(\varepsilon, r) \approx \varphi_l(\varepsilon_v, r) + (\varepsilon - \varepsilon_v) \phi_l(\varepsilon_v, r) \quad (31)$$

wobei ε_v eine charakteristische Bandenergie ist. Terme höherer Ordnung können vernachlässigt werden. Die Lösungen außerhalb des Muffin-Tin-Radiuses sind Lösungen der sogenannten Helmholtzgleichung:

$$\begin{aligned} 0 &= (\nabla^2 - \kappa^2) \psi(\varepsilon, r) \\ \kappa^2 &= \varepsilon - V_{MTZ} \end{aligned} \quad (32)$$

An der Grenze müssen beide Lösungen so miteinander verbunden werden, dass die Gesamtfunktion stetig und differenzierbar ist. Auf diese Weise erhält man energieunabhängige Muffin-Tin-Orbitale, mit Hilfe derer die zur Kohn-Sham-Gleichung umformulierte Schrödingergleichung iterativ gelöst werden kann.

2.3.4 Die FEFF8-Methode

Die FEFF8-Methode ⁴⁹ unterscheidet sich bereits in der Zielsetzung von dem zuvor skizzierten, allgemeinen Schema. Sie zielt weniger darauf ab, rechnerische Informationen über die Bandstruktur eines gegebenen Stoffes zu erhalten, als darauf, Röntgenabsorptionsexperimente wie XANES oder EXAFS mit Hilfe einer ab-initio Methode rechnerisch zu simulieren und so quantitativ zu verstehen. Darüberhinaus ermöglicht diese Methode auch Einblicke in die Bandstruktur, wenn auch mit geringerer Genauigkeit als andere Methoden.

Betrachtet wird zunächst ein lokales Ereignis, die Streuung eines durch Röntgenabsorption erzeugten Photoelektrons an den zum Absorberatom benachbarten Atomen, die zur charakteristischen Feinstruktur der Röntgenabsorption (vgl. Kapitel 2.2.8) führt. Hierfür genügt es, in erster Näherung die erste und zweite Koordinationssphäre um das Absorberatom zu betrachten. Anstatt also den gesamten Kristall zu betrachten und dementsprechend im reziproken Raum zu rechnen, beschränkt man sich auf einen genügend großen Ausschnitt oder Cluster und rechnet wie in der molekularen Quantenchemie im Realraum. Die FEFF8-Methode ist somit unabhängig von der Translationssymmetrie und eignet sich damit ebenso zur Untersuchung amorpher wie zur Untersuchung kristalliner Systeme.

Ein weiterer Unterschied besteht darin, dass der FEFF8-Methode nicht die Schrödingergleichung sondern die Dirac-Gleichung zugrunde liegt, die zusätzlich noch relativistische Effekte berücksichtigt. Die entsprechend umformulierte Kohn-Sham-Gleichung sieht folgendermaßen aus:

$$H_{\text{eff}}\psi_i(r) = [-c^2\nabla^2 + 4mc^4 + V_{\text{eff}}(r)]\psi_i(r) = \varepsilon_i\psi_i(r) \quad (33)$$

Diese wird unter Verwendung eines geeigneten Basissatzes von Muffin-Tin-Orbitalen für das betrachtete System iterativ gelöst.

Ziel der Berechnung ist primär der Röntgenabsorptionskoeffizient $\mu(E)$. Man macht sich weiterhin die Tatsache zunutze, dass ein enger Zusammenhang zwischen dem Röntgenabsorptionsspektrum und der elektronischen Bandstruktur besteht. Dies ist intuitiv nachvollziehbar, wenn man bedenkt, dass das durch Absorption eines Röntgenquants entstandene Photoelektron an der Elektronenhülle der benachbarten Atome gestreut wird. Dieser Zusammenhang findet seinen Niederschlag in der Ähnlichkeit zwischen dem Röntgenabsorptionskoeffizienten $\mu_{li}(E)$ eines gegebenen Adsorberatoms i und des Bahnmomentes l mit der l -projizierten elektronischen Zustandsdichte $\rho_{li}(E)$ dieses Adsorberatoms:

$$\begin{aligned} \mu_{li}(E) &= \mu_{li}^0(E)[1 + \chi_{li}'(E)] \\ \rho_{li}(E) &= \rho_{li}^0(E)[1 + \chi_{li}(E)] \end{aligned} \quad (34)$$

$\mu_{li}^0(E)$ und $\rho_{li}^0(E)$ sind hierbei die jeweiligen atomaren Hintergrundbeiträge, während $\chi_{li}(E)$ bzw. $\chi_{li}'(E)$ die Feinstruktur des Röntgenabsorptionsspektrums ist. Diese Ähnlichkeit kann zu der irreführenden Vermutung führen, dass die Röntgenabsorptionsspektroskopie direkt die l -projizierte Zustandsdichte misst. Hierbei wird allerdings die Einwirkung des zurückbleibenden „Lochs“ am Adsorberatom vernachlässigt, der in der obigen Formel durch das Apostroph angedeutet wird. Eine quantitative Beschreibung der Röntgenabsorptionsspektroskopie wie die FEF8-Methode benötigt also sowohl Rechnungen mit als auch ohne Berücksichtigung des Loch in der Innenschale des Adsorberatoms.

Die Orts- und Energieabhängigkeit der elektronische Zustandsdichte lässt sich durch den Imaginärteil des Einelektronen Greenfunktionsoperators G ausdrücken:

$$G = \frac{1}{E - H} \quad (35)$$

wobei H der Einelektronenhamiltonoperator und E die komplexe Photoelektronenenergie ist. Die totale elektronische Zustandsdichte $\rho(E)$ ist für reelle Energiewerte durch das Integral des Imaginärteils der Greenfunktion im Ortsraum gegeben:

$$\rho(E) = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \int G(r,r,E) d^3r \quad (36)$$

Die Gesamtelektronendichte im Realraum wiederum erhält man durch Integration des Imaginärteils der Greenfunktion über die Energie von unendlich negativer Energie bis zur Fermienergie E_F .

$$\rho(E) = -\frac{2}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{E_F} G(r,r,E) dE \quad (37)$$

Aus derselben Greenfunktion lässt sich gleichzeitig ein theoretischer Wert für den Röntgenabsorptionskoeffizienten $\mu(E)$ gewinnen wobei die spektrale Auflösung und die Lebensdauer des zurückgebliebenen Loches mit einer Größe Γ berücksichtigt werden. Da

lediglich Übergänge in unbesetzte, virtuelle Zustände oberhalb der Fermienergie erlaubt sind wird von der Fermienergie bis zu unendlich hoher Energie integriert:

$$\mu(E) = \int_{E_F}^{\infty} dE' \tilde{\mu}(E') \frac{\Gamma}{\pi[(E - E')^2 + \Gamma^2]} \quad (38)$$

mit:

$$\tilde{\mu}(E) \propto \sum_f \left| \int f \vec{\epsilon} \cdot \text{rid}E \right|^2 \delta(E - E_f)$$

mit: $\vec{\epsilon}$ = Röntgenpolarisationsvektor

i ist der Ausgangszustand des Innenschalenelektrons und f der Endzustand, in den es durch die Aufnahme des Röntgenquants befördert wird.

Auf diese Weise gelangt die FEFF8 Methode gleichzeitig zu einer Simulation des Röntgenabsorptionsspektrum und einer näherungsweisen Darstellung der l-projizierten Zustandsdichte. Allerdings ist die Zustandsdichte bei diesem Clusteransatz im Vergleich zu anderen Methoden verbreitert und entsprechend weniger genau.

2.3.5 TB-LMTO-Methode

Die 1984 von Anderson et al. erstmals vorgestellte TB-LMTO-Methode (tight binding linearized muffin tin orbital method) ⁵⁰ baut auf dem bereits in den vergangenen Abschnitten Beschriebenen auf. Die Methode hat folgende Besonderheiten:

1. Für die Atomorbitale innerhalb der Muffin-Tin-Sphären werden minimale Basissätze verwendet, das heißt, pro Atom jeweils nur ein s, drei p und fünf d Orbitale.
2. Die Muffin-Tin-Potentiale werden in der Tight-Binding-Näherung so gewählt, dass benachbarte Potentialtöpfe einander berühren, nicht aber überlappen. (Üblicherweise erlaubt die LMTO-Methode einen Überlapp von maximal 16%.)
3. Die Methode ist darauf angewiesen, dass die Muffin-Tin-Sphären dicht gepackt sind. Falls der betrachtete Festkörper keine dichte Atompäckung aufweist, werden die Hohlräume durch sogenannte Lehrhüllen (empty spheres) aufgefüllt, die Atomen ohne Kernladung und Elektronen entsprechen.
4. Die Rechnung wird im Rahmen der Tight-Binding-Näherung dadurch vereinfacht, dass Wechselwirkungen innerhalb eines vernünftig großen Clusters von Atomen berücksichtigt werden. Innerhalb dieses Clusters wird die Schrödingergleichung im Realraum gelöst und die so erhaltenen Orbitalfunktionen als Probefunktionen für die eigentliche Muffin-Tin-Rechnung verwendet. Dieser Prozess wird iterativ bis zur Selbstkonsistenz wiederholt.
5. Im Falle schwerer Atome kann ggf. Auch die relativistische Dirac-Gleichung anstelle der Schrödingergleichung der Rechnung zugrundegelegt werden.
6. Zur Betrachtung amorpher Festkörper kann die Rechnung auch vollständig im Realraum durchgeführt werden.

Problematisch ist wie bei allen MTO-Methoden der Übergang vom atomaren Muffin-Tin-Bereich zum interstitiellen Bereich zwischen den Atomen. Dies wird an Abbildung 2.20 deutlich:

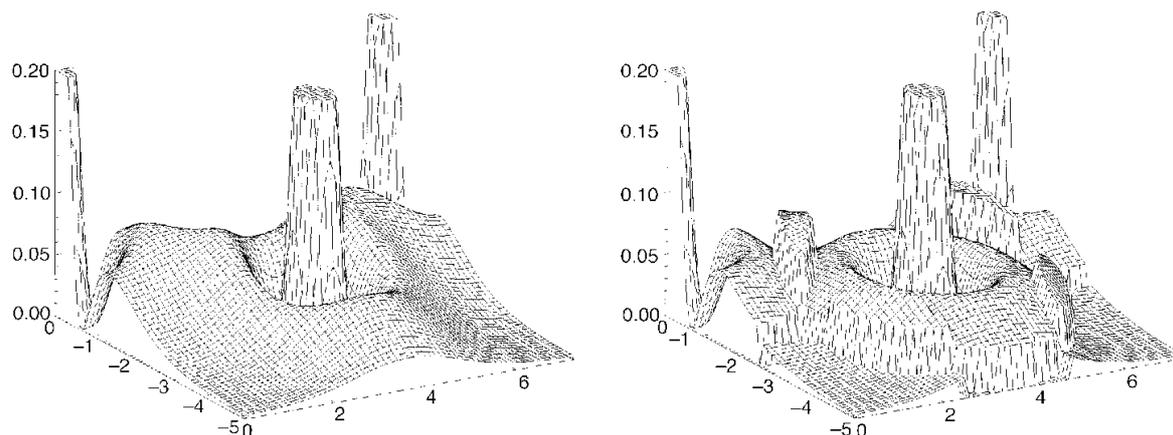


Abbildung 2.20: links tatsächliche Ladungsdichte entlang der Si (110) Ebene
Rechts in der LMTO-Näherung

Der Übergang zwischen beiden Bereichen muss so gestaltet werden, dass keine Unstetigkeiten in der Elektronendichte und der Wellenfunktion vorliegen. Auf diese Weise wird der theoretische Verlauf der Realität angenähert.

2.3.6 Auswertung

Das Ergebnis einer quantenmechanischen Rechnung ist ein näherungsweise Modell der elektronischen Struktur einer Substanz. Diese wird vielfach in Form einer sogenannten Bandstruktur dargestellt. Ein Band ist der Verlauf des Energieeigenwertes $\varepsilon(\mathbf{k})$ einer Lösung der Schrödingergleichung in der reziproken Elementarzelle, der ersten Brillouinzone. Die Energie wird hierbei auf der y-Achse aufgetragen. Da es umständlich ist, jeden Punkt der Elementarzelle auf der x-Achse aufzutragen, betrachtet man den Verlauf zwischen ausgewählten Punkten hoher Symmetrie. Diese Punkte werden durch lateinische oder griechische Großbuchstaben auf der x-Achse gekennzeichnet. Abbildung 2.21 gibt die Bandstruktur eines quadratischen zweidimensionalen Gitters von Atomen mit je einem s- und drei p-Orbitalen wieder⁵¹. Ausgangspunkt der Betrachtung ist der Ursprung der Brillouinzone (0 0), der Γ -Punkt. Nun wandert man entlang der x-Achse nach (0 1), dem X-Punkt. Von hier aus weiter zum M-Punkt (1 1), von dem es über die Flächendiagonale zurück zum Γ -Punkt geht. In Falle von dreidimensionalen Körpern muss noch die jeweilige Raumgruppensymmetrie herangezogen werden. Infolge der zusätzlichen Symmetrien ergeben sich zusätzliche spezielle Lagen, die Ihrerseits mit griechischen oder lateinische Großbuchstaben gekennzeichnet werden. Die offizielle Nomenklatur wurde 1988 von Ramirez und Böhme vorgeschlagen⁵². In einfachen Fällen, wie dem gezeigten Beispiel, lässt sich der energetische Verlauf der Bänder mit dem Verlauf der aus den Atomorbitalen konstruierten Wellenfunktion korrelieren: Am Γ -Punkt sind alle benachbarten Atomorbitale in einer Phase. Für die energetisch am tiefsten liegenden s-Orbitale, wie auch für die p_z -Orbitale ergibt dies eine vollständig bindende Linearkombination. Befindet man sich am X-Punkt, so erhält man für die in y-Richtung benachbarten s- und p_z -Orbitale einen bindenden für die in x-Richtung befindlichen Nachbarn jedoch antibindende Wechselwirkungen. Entsprechend höher ist die Energie des Bandes an diesem Punkt. Vollständig antibindende Wechselwirkungen der direkt benachbarten Atomorbitale finden sich am M-Punkt (1 1), der somit sowohl für das s- als auch das p_z -Band das energetische Maximum darstellt. Darüberhinaus ist zu betrachten, dass die s-Orbitale über die σ -Wechselwirkung erheblich stärker miteinander überlappen als die p_z -Orbitale deren Wechselwirkung vertikal zur x,y-

Ebenen stattfindet. Dementsprechend ist der energetische Verlauf bei des s-Bandes erheblich stärker ausgeprägt als der des p_z -Bandes. Über ähnliche Überlegungen kann man sich auch den Verlauf des p_x - und des p_y -Bandes herleiten.

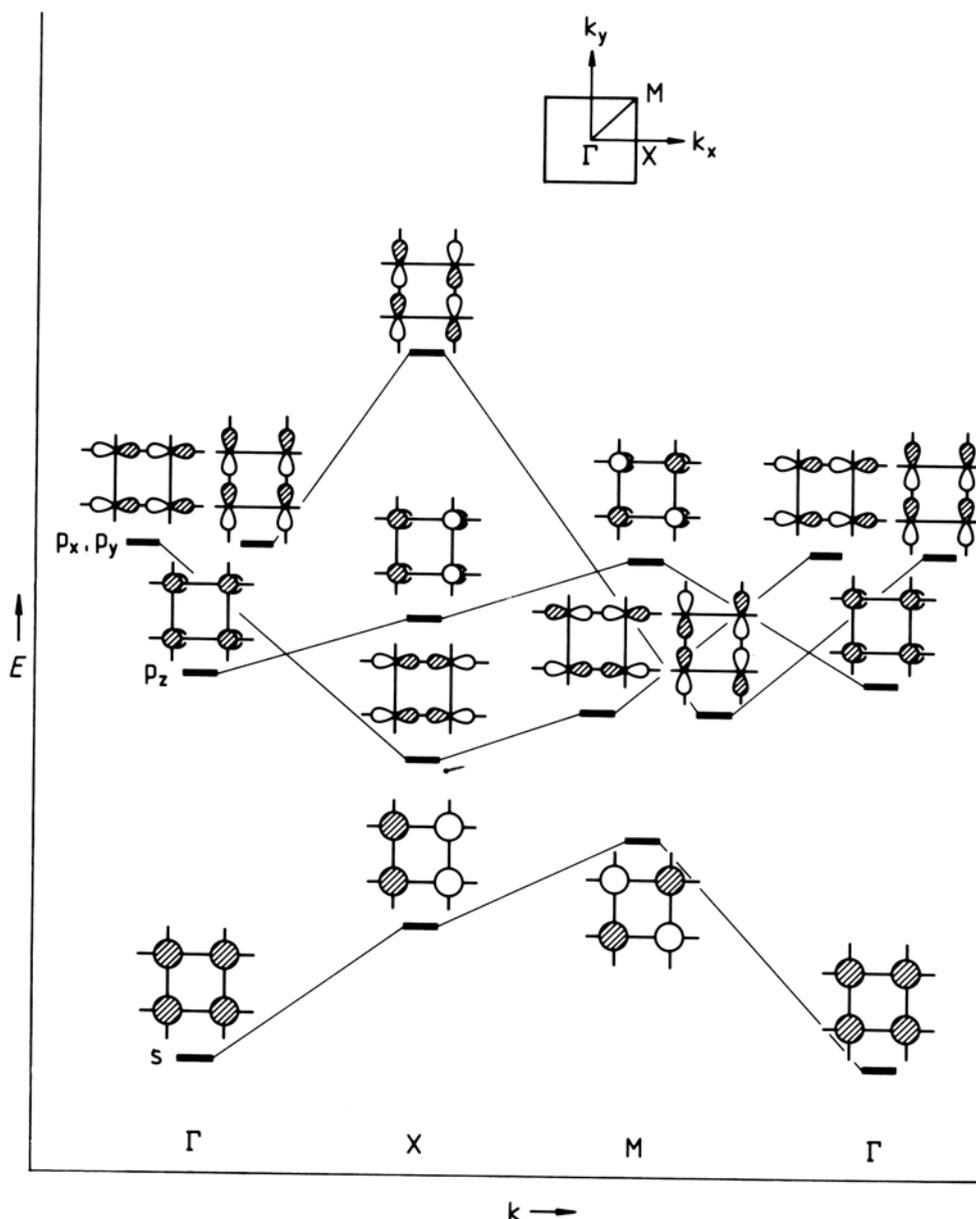


Abbildung 2.21: Schematische Bandstruktur eines quadratisch planaren Atomgitters

Eine weitere Darstellungsmöglichkeit ist diejenige der sogenannten Zustandsdichte oder auch DOS (Density of States). Aufgetragen wird hierbei die sogenannte Zustandsdichte (Anzahl der elektronischen Zustände pro Energieintervall) gegen die Energie. Je nach Autor ist entweder die Energie oder auch die Zustandsdichte selbst die x -Achse. Zur besseren Korrelation von Bandstrukturauftragung und DOS ist es in beiden Fällen sinnvoll, die Energie als y -Achse zu verwenden. Mit Hilfe der Bandstruktur lassen sich dann die Energiebänder mit bestimmten Kristallorbitalen in Verbindung bringen. Im Beispiel zeigt die Zustandsdichte das in Abbildung 2.22 skizzierte Muster. Ganz unten ist das dank guter Überlappung relativ breite s -Band. Darüber befindet sich das p -Band, wobei das p_x - und das p_y -Band ebenfalls relativ breit sind während das p_z -Band infolge der schlechten Überlappung derer π -Bindungen energetisch erheblich schmäler ist, als die anderen Bänder.

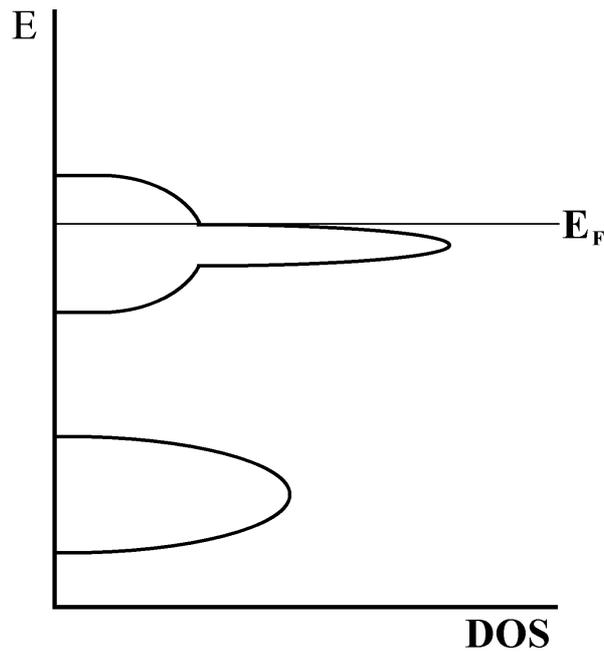


Abbildung 2.22: schematische Zustandsdichte für ein quadratisch planares Atomgitter

Für das Fermi-niveau wurde eine Besetzung von $s^2 p^4$ pro Atom angenommen. Zur weiteren Aufschlüsselung der Zustandsdichte (DOS) kann ein Kristallorbital-überlappungspopulationsdiagramm dienen. Nach der Abkürzung des englischen Begriffs *crystal orbital overlap population* wird es auch als COOP bezeichnet. Dabei wird die Zustandsdichte in ihre bindenden, nichtbindenden und antibindenden Anteile zerlegt. Zu diesem muss zunächst einem eine Bindung definiert werden. Als einfachstes Beispiel kann man eine lineare Kette von Wasserstoffatomen betrachten. Der unterste Zustand des 1s Bandes, in dem alle 1s Orbitale in einer Phase schwingen ist offensichtlich bindend. Mit zunehmender Einführung von Knotenpunkten verliert das Band seinen bindenden Charakter und wird schließlich antibindend. Die bindenden Zustände werden nun nach rechts aufgetragen und die antibindenden nach links, während die y-Achse die Energieskala darstellt (Abbildung 2.23):

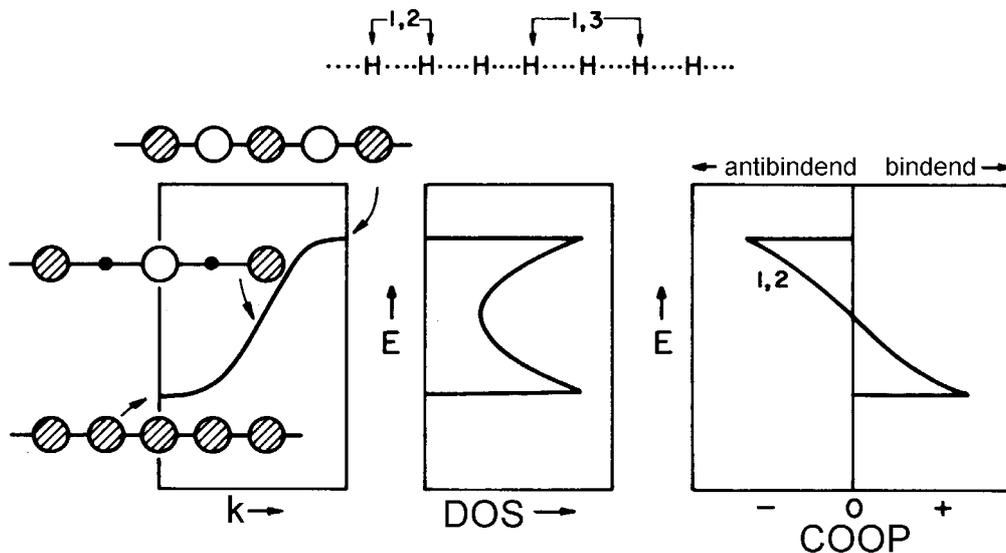


Abbildung 2.23: Bandstruktur, DOS und COOP für eine einatomige Kette von Wasserstoffatomen

Als Maß für den Bindungsgrad dient die sogenannte Mulliken Überlappungspopulation, $2c_1c_2S_{ij}$. Für ein zweiatomiges Molekül kommt sie aus der LCAO-Näherung zustande, indem man die Wellenfunktion Ψ als Linearkombination der atomaren Wellenfunktionen ϕ_1 und ϕ_2 auffasst. Für eine nichtnormalisierte Wellenfunktion gilt:

$$E = \frac{\int \Psi^* H \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \quad \text{mit: } \Psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 \quad (39)$$

Wobei die Faktoren c_1 und c_2 wichten, welchen Beitrag die jeweiligen atomaren Wellenfunktionen zur Gesamtwellenfunktion leisten. Im Falle einer rein ionischen Bindung ist einer der Faktoren gleich eins während der andere null ist, während im Falle einer rein kovalenten Bindung beide Faktoren den Wert $\frac{1}{2}$ annehmen. Man erhält dann:

$$E = \frac{\int (c_1\phi_1^* + c_2\phi_2^*) H (c_1\phi_1 + c_2\phi_2) d\tau}{\int (c_1\phi_1^* + c_2\phi_2^*) (c_1\phi_1 + c_2\phi_2) d\tau} = \frac{c_1^2 \int \phi_1^* H \phi_1 d\tau + c_2^2 \int \phi_2^* H \phi_2 d\tau + 2c_1c_2 \int \phi_1^* H \phi_2 d\tau}{c_1^2 \int \phi_1^* \phi_1 d\tau + c_2^2 \int \phi_2^* \phi_2 d\tau + 2c_1c_2 \int \phi_1^* \phi_2 d\tau} \quad (40)$$

Geht man von normierten Atomorbitalen aus, deren Integrale gleich 1 sind so erhält man für den Nenner der Schrödingergleichung:

$$\int \Psi^* \Psi d\tau = c_1^2 + c_2^2 + 2c_1c_2 \int \phi_1^* \phi_2 d\tau = c_1^2 + c_2^2 + 2c_1c_2 S \quad (41)$$

Wobei der letzte Term das gesuchte Austauschintegral ist. Die Amplitude des COOP-Diagramms hängt neben der Anzahl der Zustände unter der Kurve auch von der Größe des Austauschintegrals ab, dessen Vorzeichen entscheidet, ob ein bindender oder ein antibindender Zustand vorliegt. Während die Fläche unter der Zustandsdichte DOS bis zum Fermi-niveau die Gesamtzahl der Elektronen im betrachteten System angibt, so ist die Fläche unter dem COOP-Diagramm bis zum Fermi-niveau ein Maß für den Bindungsgrad.

3 Spezieller Teil

3.1 Motivation und Zielsetzung

Wie eingangs erwähnt, besitzen Übergangsmetalloxide infolge der sukzessiven Besetzung der d-Schale eine einzigartige Bandbreite an chemischen und physikalischen Eigenschaften, die vom Isolator bis zum metallischen Leiter oder gar Supraleiter, vom Antiferromagneten bis zum Ferromagneten reicht. Übergangsmetalloxide können Isolatoren und Weißpigmente wie das Titandioxid sein, oder sie können Farbpigmente wie der als Thenards Blau bekannte Kobalt-Aluminium-Spinell CoAl_2O_4 . Man findet sie als Katalysatoren wie zum Beispiel Vanadiumpentoxid oder auf magnetischen Datenträgern wie den Ferrit Fe_3O_4 und das Chromdioxid CrO_2 . Allein dies genügt, um das nicht nachlassende Interesse an dieser Verbindungsklasse zu begründen.

Insbesondere zwei Phänomene haben den Anstoß zur vorliegenden Arbeit gegeben. Das erste ist die Entdeckung der Hochtemperatursupraleitung in den ternären Kupferoxiden von Bednorz und Müller, das andere sind die mit der d^{10} - d^{10} -Wechselwirkung verbundenen Besonderheiten der Kristallchemie und der physikalischen Eigenschaften der Silberoxide. Auf beide Phänomene wird im Folgenden detaillierter eingegangen. Sinnvoll erschien einerseits die Suche nach neuen Übergangsmetalloxiden mit niedrigdimensionalen Bauelementen, wie Schichten, Spinleitern oder auch Säulen, andererseits die Suche nach weiteren ternären, silberreichen Verbindungen.

Der methodische Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit liegt in der Sauerstoffhochdruckchemie unter Verwendung von Hochdruckautoklaven, da ein Großteil der unter Normaldruck zugänglichen Übergangsmetalloxide bereits bekannt ist. Insbesondere zur Darstellung ternärer Silberoxide ist diese Technik von besonderer Bedeutung: Die geringe Zersetzungstemperatur von Ag_2O schränkt die Zugänglichkeit ternärer Silberverbindung unter Normaldruck deutlich ein.

3.1.1 Supraleitung in Oxiden

Unter der 1911 von dem niederländischen Tieftemperaturphysiker Heike Kamerlingh-Onnes (Nobelpreis 1913) entdeckten Supraleitung⁵³ versteht man den Totalverlust des elektrischen Widerstandes einer Substanz unterhalb einer materialspezifischen Sprungtemperatur T_c . Dieser Zustand ist durch zwei weitere kritische Größen, der kritischen Feldstärke B_C und der kritischen Stromdichte j_C begrenzt. Diese sind miteinander gekoppelt und spannen zusammen die Abbildung 3.1 skizzierte kritische Oberfläche des Supraleiters, die die supraleitende Phase eingrenzt, auf. Oberhalb des jeweiligen kritischen Wertes verliert das Material seine supraleitende Eigenschaft.

Neben dem Verlust des elektrischen Widerstandes ist der ideale Diamagnetismus ein weiteres Charakteristikum der Supraleitung. Kühlt man einen Supraleiter im Magnetfeld auf nahezu 0 K ab, so wird beim Übergang in den supraleitenden Zustand das Magnetfeld vollständig aus dem Inneren des Supraleiters verdrängt, das heißt das Innere des Supraleiters ist feldfrei. In einer auf wenige Nanometer beschränkten Abschirmschicht, der sogenannten Londonschen Eindringtiefe λ_L , fließt ein Abschirmstrom, dessen resultierendes Magnetfeld das äußere Feld vollständig kompensiert. Dieses Phänomen wird als der Meissner-Ochsenfeld-Effekt⁵⁴ bezeichnet.

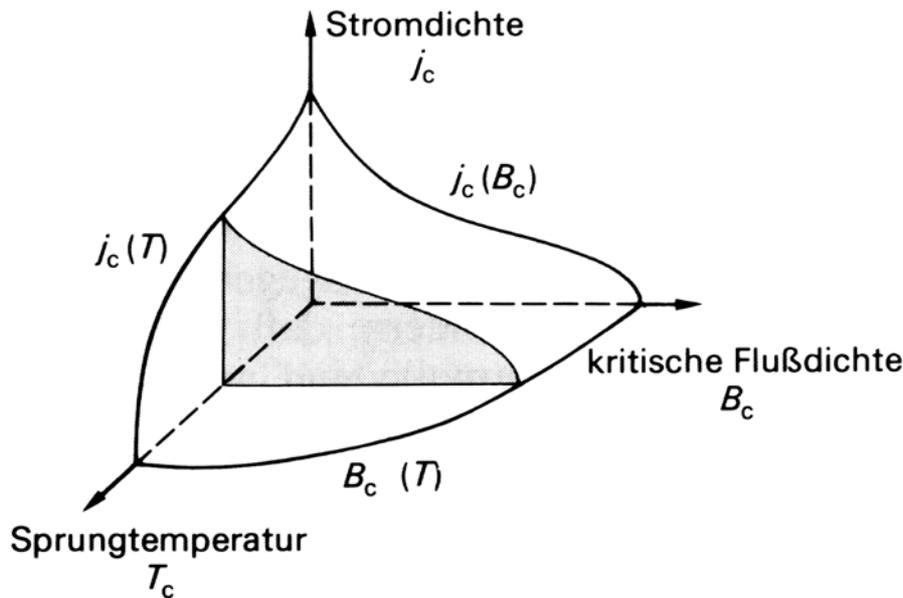


Abbildung 3.1 kritische Oberfläche eines Supraleiters ⁵⁵

Geht man von einzelnen Elektronen als Ladungsträgern aus, so ist Supraleitung aus quantenmechanischer Sicht eine Unmöglichkeit: Nach dem quantenmechanischen Welle-Teilchen-Dualismus lassen sich Elektronen im Festkörper als Wellen mit bestimmter Wellenlänge auffassen. Die Valenzelektronen werden an den Atomrümpfen des Kristallgitters elastisch gestreut, dies führt zum Bändermodell des Festkörpers. Zusätzlich werden Elektronen an Gitterschwingungen gestreut, wobei sie Energie aufnehmen oder verlieren. Im Rahmen dieser inelastischen Streuprozesse verlieren sie ihre ursprüngliche Bewegungsenergie, woraus sich die Widerstandscharakteristik der Metalle ergibt. Da selbst am absoluten Nullpunkt eine sogenannte Nullpunktschwingung vorhanden ist, muss selbst bei 0 K ein Restwiderstand bleiben. Im Jahre 1957 wurde von den amerikanischen Physikern Bardeen, Cooper und Schrieffer (Nobelpreis 1972) eine mikroskopische Theorie ⁵⁶ veröffentlicht, die erstmals eine umfassende Erklärung der Supraleitung anbot. Je zwei Elektronen entgegengesetzten Spins und Impulses werden miteinander durch den Austausch virtueller Gitterschwingungen (Phononen) zu einem neuen Quasiteilchen, dem Cooperpaar gekoppelt. Ein Cooperpaar hat somit einen Gesamtimpuls von 0 und damit eine unendliche Wellenlänge, und kann sich daher völlig widerstandsfrei im Festkörper bewegen. Darüberhinaus haben Cooperpaare einen ganzzahligen Spin von 0, sind also keine Fermionen, sondern Bosonen. Infolgedessen gilt für sie das Pauli-Prinzip nicht: Alle Cooperpaare können in ein und demselben Grundzustand vorliegen und bilden einen makroskopischen Quantenzustand, der durch eine einzige Wellenfunktion beschrieben werden kann. Man spricht von einer Bose-Einstein-Kondensation. Die unendliche Wellenlänge, die mit der Paarbildung verbundene Bindungsenergie Δ , sowie die mit der Bose-Einstein-Kondensation verbundene Phasenkohärenz der Cooper-Paare erklären zwanglos die Eigenschaften eines Supraleiters. So ist zum Beispiel die Paarbildungsenergie Δ nach (42) mit der Sprungtemperatur T_C verbunden:

$$2\Delta = 3,52 \cdot k_b \cdot T_C \quad (42)$$

Die Entdeckung der Hochtemperatursupraleitung im Jahre 1986 mit geradezu sensationell hohen Sprungtemperaturen von bis zu 164 K, kann suggerieren, dass Supraleitung in oxidischen Materialien ein Novum sei. Tatsächlich sind supraleitende Oxide seit mittlerweile vier Jahrzehnten bekannt. Unter den binären Übergangsmetalloxiden weisen lediglich TiO (T_C

= 2,3 K) und NbO ($T_C = 1,4$ K) ^{57, 58} supraleitendes Verhalten auf. Der am längsten bekannte oxidische Supraleiter basiert auf SrTiO₃, einer in der Perowskitstruktur kristallisierende Verbindung. Bei exakter stöchiometrischer Zusammensetzung ist sie ein Isolator. Erst durch das gezielte Einbringen von Ladungsträgern bei der partiellen Reduktion im Wasserstoffstrom lässt sich metallische Leitfähigkeit und bei sehr tiefen Temperaturen ($T_C = 0,7$ K) erzielen ⁵⁹. Die Strukturen einer Vielzahl weiterer bekannter oxidischer Supraleiter wie die der Wolframbronzen A_xWO₃ ⁶⁰ mit A = Li, Na, K, Rb, Cs, Ca, Sr, Ba, In, Tl, NH₄, der Molybdänbronzen A_{0,9}Mo₆O₁₇ ^{61, 62} (A = Li, Na, K, Tl) und der hexagonalen Rheniumbronze K_{0,3}ReO₃ ⁶³ ($T_C = 3,6$ K) leiten sich ebenfalls von der Perowskitstruktur ab.

Die höchste Sprungtemperatur unter den Übergangsmetalloxiden wies mit 13,7 K bis 1986 das in der Spinellstruktur kristallisierende LiTi₂O₄ ⁶⁴ auf. Mit der Entdeckung der Supraleitung in La_{2-x}Ba_xCuO₄ ($T_C = 26$ K) ¹, dem Prototypen der Hochtemperatursupraleiter setzte eine rasante Entwicklung ein, in deren Rahmen immer höhere Sprungtemperaturen erreicht wurden. Derzeitiger Rekordhalter ist das 1993 von E. V. Antipov et al. dargestellte HgBa₂Ca₂Cu₃O_{10-x} ^{65, 66} mit einer Sprungtemperatur von 135 K unter Normaldruck und von 164 K unter einem Druck von 31 GPa. Derzeit sind einige hundert Hochtemperatursupraleiter auf Kupferoxidbasis bekannt. Für eine detaillierte Betrachtung sei auf die Monographie von Cava ⁶⁷ verwiesen. Kristallchemisch haben alle Kupferoxidsupraleiter, den in Abbildung 3.2 wiedergegebenen Aufbau gemein:

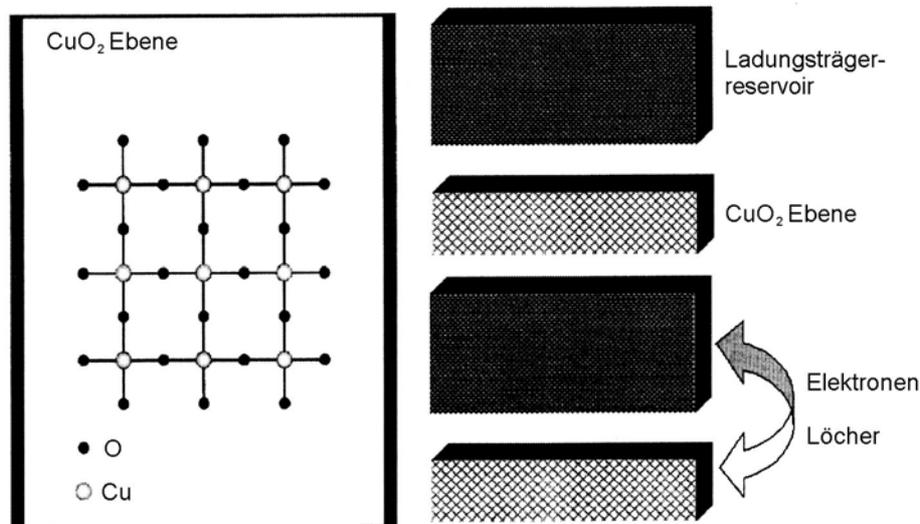


Abbildung 3.2: Schematischer Aufbau eines Cupratsupraleiter nach ⁶⁷

Sie sind generell aus Lagen von Ebenen, bestehend aus einem schachbrettartigen Muster eckenverknüpfter [CuO₄]-Quadrate, aufgebaut. Diese [CuO₂]-Ebenen werden durch Ladungsträgerreservoirs voneinander getrennt. Über diese Ladungsträgerreservoirs werden über chemische Techniken wie dem Einbau von Fremdionen die elektronischen Zustände in den [CuO₂]-Ebenen kontrolliert. Die stöchiometrischen Verbindungen sind in der Regel Kupfer(II)oxide. Diese sind Isolatoren, und die Spinnmomente der Kupferatome sind innerhalb der [CuO₂]-Schichten antiferromagnetisch geordnet. Durch chemische Modifikation der Ladungsträgerreservoirschichten lässt sich Kupfer oxidieren oder reduzieren. Die Oxidation der [CuO₂]-Schichten ist gleichbedeutend mit der Einführung von Löchern. In Abbildung 3.12 sind die Phasenübergänge, die sich beim Dotieren in Abhängigkeit von Lochkonzentration und Temperatur ergeben, dargestellt. Nach derzeitigen Vorstellungen wird nicht Kupfer oxidiert. Vielmehr befinden sich die Löcher in einem sauerstoffdominierten Band. Dies führt zu ungepaarten Elektronen im Sauerstoffband, die ihrerseits mit dem am Kupfer lokalisierten ungepaarten Elektron in Wechselwirkung treten. Infolgedessen kommt es zu einer graduellen

Unterbindung der langreichweitigen antiferromagnetischen Kopplung bis zu ihrem vollständigem Verlust und damit zur Ausbildung eines Spin-Glas-Zustandes. Bei einer Lochkonzentration von etwa 0,15 beginnt sich bei tiefen Temperaturen ein supraleitender Zustand auszubilden. Bei $x = 0,2$ erreicht die Sprungtemperatur ein Maximum, um dann bei noch höheren Dotierungsgraden wieder abzunehmen, bis der supraleitende Zustand vollständig unterbunden wird und das Material ein normales Metall wird. Mit diesem einfachen Schema lässt sich das Verhalten der meisten Hochtemperatursupraleiter qualitativ beschreiben^{67, 34}.

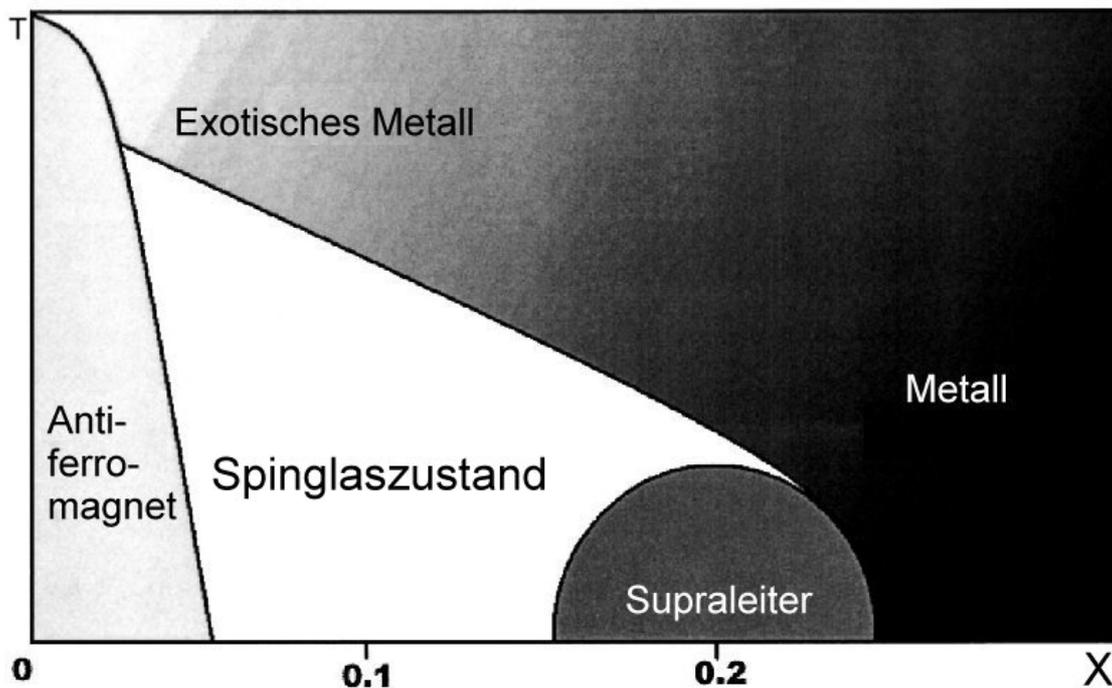


Abbildung 3.3: elektronisches Phasendiagramm eines Cupratsupraleiters in Abhängigkeit von der Lochkonzentration x nach⁶⁷

Insbesondere die unerwartet hohen Sprungtemperaturen boten Anlass zu Diskussionen über den Mechanismus der Supraleitung in diesen Materialien, wobei bislang noch keine der konkurrierenden Theorien allgemeine Anerkennung erlangt hat. Die meisten dieser Theorien haben folgende Aspekte gemeinsam:

- Die Kopplung zweier Elektronen mit gleichem aber entgegengesetztem Impuls und Spin durch den Austausch eines virtuellen Quasiteilchens. Im Falle der BCS-Theorie ist das Austauscheteilchen ein Phonon.
- Die gekoppelten Elektronen bilden ein neues Quasiteilchen mit einer Spinquantenzahl von 0 und einem Impuls von 0. Die supraleitenden Ladungsträger sind somit Bosonen, die der Bose-Einstein-Statistik gehorchen.
- Alle supraleitenden Ladungsträger kondensieren in den Grundzustand. Es liegt ein Bose-Einstein-Kondensat vor, dessen strenge Phasenkohärenz die mit der Supraleitung verbundenen makroskopischen Quanteneffekte erklärt.

Sie können damit als Verallgemeinerungen der BCS-Theorie aufgefasst werden, indem sie an Stelle der Phononen andere Quasiteilchen als Vermittler der Supraleitung einführen. Für die vorliegende Arbeit ist vor allem die von Anderson 1973 vorgeschlagene RVB-Theorie⁶⁸ (resonating valence bond) von Bedeutung: Bei dem RVB-Zustand handelt es sich um einen alternativen Grundzustand für ein antiferromagnetisch gekoppeltes System. Im Gegensatz

zum antiferromagnetischen Néel-Zustand weist er keine langreichweitige Ordnung auf, sondern eine kurzreichweitige, fluktuierende, antiferromagnetische Ordnung. Eine solche, elektrisch isolierende, magnetische Phase wird durch niedrigen Spin, niedrige Dimensionalität (z.B. Schichten) und magnetische Frustration begünstigt. Alle drei Punkte sind in leicht dotierten Cupraten gegeben. Wird der Isolator durch zusätzliche Dotierung in den metallischen Zustand überführt, so ist nach Andersons Theorie eine magnetische Kopplung der eingeführten Ladungsträger zu Cooperpaaren zu erwarten⁶⁹⁻⁷¹. Derartige Überlegungen lassen insbesondere trigonal-planare Spingitter, wie sie beispielsweise in den Delafossiten des Typs AgMO_2 ($M =$ Übergangsmetall) vorliegen als besonders interessant erscheinen. Jedes M-Kation ist von sechs weiteren in einer Schicht umgeben. Die energetisch günstigste Kopplung zwischen benachbarten Spinnmomenten ist die antiferromagnetische, die jedoch aus geometrischen Gründen nicht für alle Nachbarn verwirklicht werden kann. Es handelt sich also um ein magnetisch frustriertes System. Für derartige trigonal-frustrierte Antiferromagneten stellt sich die Frage, ob der Grundzustand eine langreichweitige Spinordnung, ein statischer Spin-Glas-Zustand oder aber ein RVB-Zustand ist.

3.1.3 Besonderheiten der d^{10} -Kationen

Eine ausgeprägte Eigenschaft vieler Übergangsmetallkationen in Lösung wie im Festkörper ist ihre ausgeprägte Komplexchemie, der Ligand-Metall-Bindungen unter Einbeziehung der partiell gefüllten d-Orbitale zugrunde liegen. Daraus erklären sich z. B. bevorzugte Umgebungen für Kationen mit bestimmten Elektronenkonfigurationen, oktaedrische Koordination für d^6 -Kationen im low spin Zustand, quadratisch-planare für d^8 -Kationen im low-spin Zustand oder auch die Jahn-Teller-Verzerrung der oktaedrischen Koordination z. B. für d^9 Kationen wie Cu^{2+} . Bei aufgefüllter d-Schale sollte die bevorzugte Koordination ausschließlich durch elektrostatische und geometrische Faktoren wie den jeweiligen Ladungen und Größen von Zentralteilchen und Ligand gegeben sein. Stattdessen findet man für ein d^{10} -Kation wie Ag^+ sowohl in Lösung als auch im Festkörper vorwiegend lineare Koordination, im Komplex $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ ebenso wie im Festkörper Ag_2O . Eine ähnliche Tendenz zu linearer Koordination findet man ebenso bei den isoelektronischen Spezies Cu^+ , Au^+ , Cd^{2+} und Hg^{2+} . Dies lässt sich nur dann zwanglos erklären, wenn man annimmt, dass die im dz^2 -Orbital befindlichen 4d Elektronen mit den energetisch nur geringfügig höher gelegenen, unbesetzten 5s- und $5p_z$ -Niveaus hybridisieren und so zwei Hybridfunktionen bildet, die zur Bildung eines Paares linearer, kovalenter Bindungen geeignet sind⁷². Bereits dies ist ein erster Hinweis darauf, dass die Elektronen der abgeschlossenen d-Schale keineswegs inert sind, also auch nicht pauschal als Rumpfelektronen betrachtet werden können.

In Kristallstrukturen mit edelgaskonfigurierten Kationen beobachtet man neben der Realisierung der jeweils charakteristischen Kation-Anion-Kontakte ein Streben nach größtmöglichen Kation-Kation Abständen im Sinne einer Maximierung der Gitterenergie. Betrachtet man Silber aufgrund seiner abgeschlossenen 4d-Schale als edelgaskonfiguriert, so würde man ein entsprechendes Verhalten auch von ionischen Silberverbindungen erwarten. Eine idealen Ansatzpunkt für einen Vergleich bietet eine ionische Verbindung, die Silber-Alkalimetallkationen nebeneinander enthält. Dies ist in KAgCO_3 ⁷³ gegeben. In der in Abbildung 3.4 wiedergegebenen Struktur fällt direkt die vollständige Trennung von Silber-Kaliumteilstruktur, die durch Lagen von Carbonationen separiert werden, auf. Bei den Kaliumionen beobachtet man erwartungsgemäß das Bestreben, einen größtmöglichen Abstand voneinander einzunehmen. Der kürzeste $\text{K}^+ - \text{K}^+$ -Abstand liegt bei 4,04 Å. Mit 2,97 Å ist der kürzeste $\text{Ag}^+ - \text{Ag}^+$ -Abstand erheblich kürzer und ist nur geringfügig größer als derjenige in

elementarem Silber mit 2,89 Å. Insgesamt bilden die Silberatome Lagen von geringfügig verzerrten hexagonalen Schichten, einem Motiv aus der Kristallstruktur des Elements.

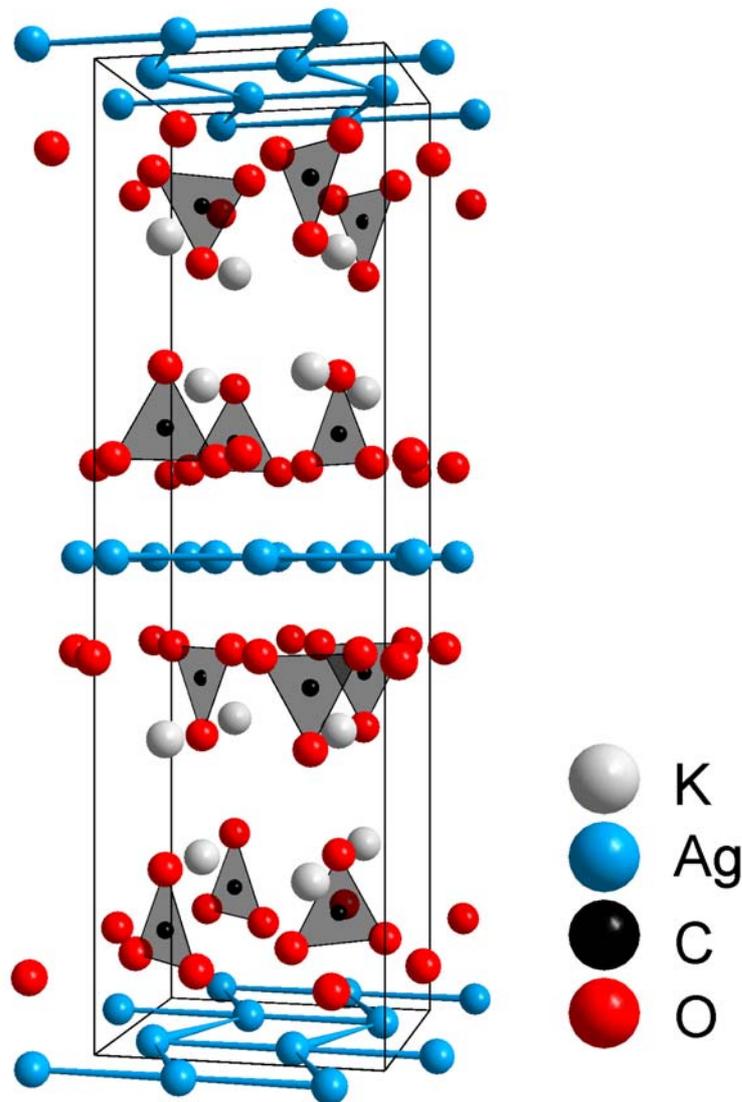


Abbildung 3.4: Kristallstruktur von $KAgCO_3$

Noch deutlicher fällt diese Tendenz bei einem systematischen Vergleich mehrerer Silber(I)-verbindungen wie $Ag_6Si_2O_7$ ⁷⁴, Ag_2CO_3 ⁷⁵ und $LiAg_3O_2$ ⁷⁶ auf. In allen drei Verbindungen findet man ähnlich wie in $KAgCO_3$ eine deutliche Tendenz zur Anhäufung von Silberkationen. Dabei werden gleichseitige Dreiecke von Silberkationen zu Schichten, Bändern und Gerüsten verknüpft. Die kürzesten Ag-Ag-Abstände liegen mit 2,80 Å noch unterhalb demjenigen im metallischen Silber, die längsten mit 3,30 Å bleibt unterhalb des van-der-Waals-Abstands von 3,40 Å⁷⁷. Die beschriebene Neigung zur Bildung von Silberteilstrukturen kann sogar die Sekundärstruktur kondensierter Oxoanion bestimmen. So wurde zum Beispiel in $Ag_{10}Si_4O_{13}$ ⁷⁸ erstmals das Tetrasilicat-Ion in einem Festkörper nachgewiesen. In den Delafossiten der allgemeinen Formel ABO_2 ($A = Cu^+$, Ag^+ ; $B =$ dreiwertiges Kation) bilden die d^{10} -konfigurierten Kationen zweidimensionale, unendliche Schichten aus gleichseitigen Dreiecken, wobei der Ag-Ag-Abstand bei etwa 2,90 Å liegt. Diese Struktur lässt sich allerdings auch mit der bevorzugten Koordination der beteiligten

Kationen (linear für das A-Kation, oktaedrisch für das B-Kation) erklären, erscheint aber in diesem Zusammenhang in einem neuen Licht. Die Anpassungsfähigkeit der Struktur gegenüber Variationen der Größe der B-Kationen eröffnet die Möglichkeit von systematischen Vergleichen: Die A^+-A^+ -Abstände entsprechen der a-Gitterkonstante, die wiederum durch den Ionenradius des dreiwertigen B-Kations bestimmt wird. Bei den derzeit bekannten Cu-Delafossiten schwanken die a-Gitterparameter zwischen 2,80 und 3,80 Å, die Cu-Cu-Abstände sind also über einen weiten Bereich durchstimmbare. Bei Vorliegen einer Cu^+-Cu^+ -Wechselwirkung, sollte sich diese systematisch mit dem Abstand ändern. So sollten von der Bandstruktur abhängige physikalische Eigenschaften einen einheitlichen Gang mit der Gitterkonstanten a aufweisen. Bei einem Vergleich der aus Einkristall-Röntgenstrukturanalysen ermittelten Abstände in Delafossiten ⁷⁹ stößt man auf einen überraschenden Trend: Mit zunehmendem Radius der B-Kationen nehmen die Cu-O-Abstände signifikant ab. Einen Erklärungsansatz bietet die Annahme, dass eine Verkürzung der Cu-O-Abstände zu Lasten der B-O-Abstände ginge. Eine Analyse nach dem Bindungslänge/Bindungsstärke-Konzept ⁸⁰ zeigt jedoch, dass die Beiträge der dreiwertigen Kationen zur Valenzsumme (s) von Sauerstoff in den untersuchten Verbindungen konstant bleiben. Unter Annahme einer konstanten Valenzsumme von 2 für Sauerstoff, müsste auch der von Kupfer beigesteuerte Beitrag mit 0,5 konstant bleiben. Dies steht im Widerspruch zu dem experimentellen Befund, dass die Cu-O-Abstände mit zunehmendem B^{3+} -Ionenradius abnehmen. Nach den gefundenen Bindungslängen hat die Valenz s der Cu-O-Bindung in $CuYO_2$ einen höheren Wert als die entsprechende in $CuAlO_2$. Es stellt sich somit die Frage, wie die zusätzlichen Valenzen des Kupfers im letzten Fall abgesättigt wird. Da alle anderen Abstände außerhalb der ersten Koordinationssphäre liegen, kommen hierfür nur homoatomare Cu-Cu-Wechselwirkungen in Frage. Eine Abschätzung nach den von Brown ⁸⁰ angegebenen Ansätzen ergibt für den Anteil der Cu-Cu-Wechselwirkungen an der Valenzsumme von Kupfer in $CuYO_2$ einen Wert von 3%, in $CuAlO_2$ dagegen einen Wert von über 20%. Neben strukturellen Gegebenheiten weisen auch physikalische Eigenschaften auf die Existenz einer homoatomaren $d^{10}-d^{10}$ -Wechselwirkung hin: So verschiebt sich die Absorptionskante von 33100 cm^{-1} für Ag_2SO_4 (farblos) mit isolierten Ag^+ -Kationen zu 13500 cm^{-1} für $Ag_{10}Ge_4O_{13}$ (schwarz) ⁸¹, das eine ausgeprägte Silberteilstruktur besitzt. Eine ähnliche Tendenz findet man auch in der elektrischen Leitfähigkeit ⁸². Während das Ag_2SO_4 ein elektrischer Isolator ist, sind alle bisher untersuchten Verbindungen mit clusterähnlichen d^{10} -Kationenteilstrukturen Halbleiter. Besonders aufschlussreich ist in diesem Zusammenhang eine systematische Untersuchung der elektrischen Leitfähigkeit an Kupfer-Delafossiten, bei deren Synthese zur Vermeidung von Cu^{2+} -Dotierung ein Sauerstoffüberschuss ⁸¹ vermieden wurde. Die aus dem intrinsischen Kurventeilen berechneten Aktivierungsenergien der elektrischen Leitfähigkeit zeigen einen praktisch linearen Zusammenhang mit der Aufweitung der Gitterkonstanten a, die mit dem Cu-Cu-Abstand identisch ist. Angesichts dieser Vielfalt von Belegen stellt sich die Frage nach der Natur der $d^{10}-d^{10}$ -Wechselwirkung. Ebenso wie die lineare Koordination der d^{10} -Kationen ist sie nur unter der Annahme, dass die abgeschlossene d-Schale am Bindungsgeschehen beteiligt ist, zu verstehen. Analog zu der von Orgel zur Erklärung der linearen Koordination postulierten Hybridisierung des nd_z^2 -Orbitals mit dem $(n+1)s$ -Orbital, kann auch hier die Hybridisierung der obersten Niveaus der abgeschlossenen d-Schale mit den energetisch tiefsten Niveaus der unbesetzten nächsthöheren Schale angenommen werden. Tatsächlich zeigt zum Beispiel eine Deformationselektronendichtebestimmung an dem Delafossiten $CuAlO_2$ ⁸³ zusätzliche Elektronendichte in der xy-Ebene, deren Maxima in den Schwerpunkten der gleichseitigen, aus Kupferatomen bestehenden Dreiecke liegen. Auch die Arbeiten von R. Hoffmann et al. ⁸⁴⁻⁸⁶ und J. K. Burdett ⁸⁷ zeigen, dass selbst bei Vernachlässigung der Störungen der d^{10} -Systeme durch die Liganden auch zwischen vollbesetzten d-Zuständen bindende Wechselwirkungen auftreten können, wenn zugelassen dass die Einelektronen-d-Funktionen teilweise s- und p-Charakter

aufweisen können. Man gelangt also zu der Schlussfolgerung, dass der abgeschlossenen d-Schale infolge ihrer energetischen Nähe zu den ersten angeregten Zuständen ihr Rumpfcharakter genommen und ihre Kugelsymmetrie gestört wird. Damit lässt sich sowohl die bevorzugte lineare Koordination der d^{10} -Kationen, als auch ihre Tendenz zur Ausbildung homoatomarer Wechselwirkungen verstehen. Im Falle der Kupfer-Delafossite erklärt sich damit auch zwanglos, dass die beiden Effekte in Konkurrenz miteinander stehen.

Auch die Existenz der bisher bekannten beiden binären Silbersubverbindungen des Silbersubfluorids Ag_2F ⁸⁸ und des Silbersuboxids Ag_3O ⁸⁹ erscheint in diesem Zusammenhang in einem neuen Licht. Das Silbersubfluorid kristallisiert in der anti- CdI_2 -Struktur, während das Silbersuboxid im anti- BiI_3 -Typ kristallisiert. In beiden Strukturen sind oktaedrische Ag_6 -Cluster zu unendlichen, hexagonalen Silberdoppelschichten verknüpft. Angesichts der generell beobachteten Tendenz der d^{10} -Kationen zur Ausbildung homoatomarer Wechselwirkungen liegt die Vermutung auf der Hand, dass die Bindungen in diesen beiden Verbindungen nicht ausschließlich auf die partielle Besetzung des 5s-Bandes zurückzuführen ist. Vielmehr ist auch hier ein Beitrag von der „abgeschlossenen“ d-Schale zu vermuten, zumal die Tatsache, dass Ag_2F das einzige bekannte Subfluorid ist, auf eine besondere Stabilisierung dieser Verbindung hindeutet. Angesichts dieser Überlegung ist die Existenz einer Vielzahl weiterer Silbersubverbindungen zu vermuten, die weitere Erkenntnisse über diesen interessanten Bindungstyp erwarten lassen.

3.2 Darstellung und Charakterisierung von Ag₂PdO₂

3.2.1 Einleitung

Ternäre Edelmetalloxide sind schon lange wegen ihrer generell hohen katalytischen Aktivität von wissenschaftlichem und technischem Interesse. Spätestens mit der Entdeckung von Supraleitfähigkeit in Sr₂RuO₄⁹⁰ rückten sie auch in den Mittelpunkt des Interesses als mögliche Kandidaten für Supraleitung. Besondere Aufmerksamkeit erfahren in diesem Zusammenhang Oxide mit niedrigdimensionalen Bauelementen analog zu den planaren CuO₂-Schichten oder auch zu den quasi-eindimensionalen, sogenannten Spinleitern, von denen sich Theoretiker noch höhere Sprungtemperaturen erhofft hatten.

Derartige Struktur motive sind charakteristisch für eine Vielzahl ternärer Übergangsmetall-oxide, wie zum Beispiel für Nickel-, Kupfer-, Gold-, Palladium und auch Platinoxide. Vertreter mit quasi-eindimensionalen Strukturen sind die im Li₂CuO₂ - Typ⁹¹, kristallisierenden ternären Oxide mit Übergangsmetallkationen in den Elektronenkonfigurationen d⁸ und d⁹, zu denen neben dem Namensgeber Li₂CuO₂ Li₂PdO₂^{92, 93} und Li₂NiO₂⁹⁴ gehören. Das jeweilige Übergangsmetallkation ist nahezu quadratisch-planar koordiniert, was im Falle von Kupfer (d⁹) durch den Jahn-Teller-Effekt und im Falle von Ni²⁺ und Pd²⁺ in der low-spin d⁸-Konfiguration stark bevorzugt ist. Die PdO₄ Quadrate sind über gegenüberliegende Kanten zu unendlichen [PdO₂] - Ketten in der kristallographischen [010] Richtung verknüpft. Diese Ketten sind in der (010) Ebene hexagonal gepackt. Abbildung 3.22 zeigt die Li₂CuO₂-Struktur am Beispiel von Li₂PdO₂

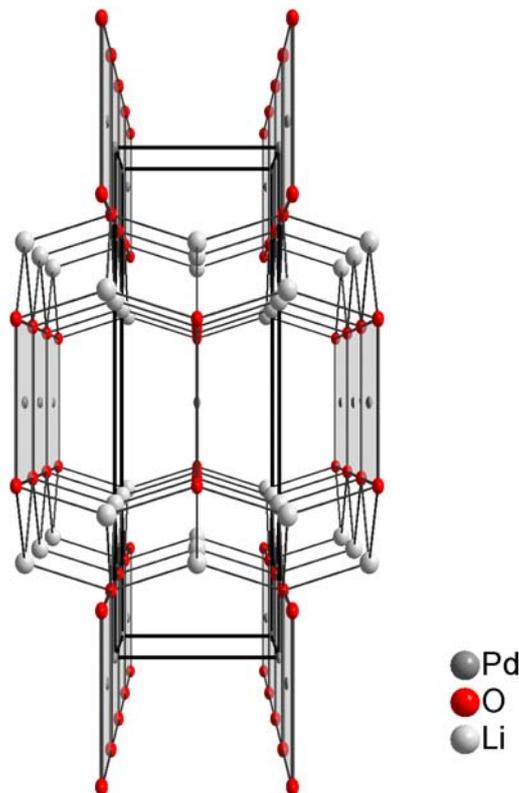


Abbildung 3.22: Kristallstruktur von Li₂PdO₂ entlang der [010] Achse

Lithium ist hingegen verzerrt tetraedrisch von Sauerstoff umgeben. Die LiO₄ - Tetraeder sind über die Flächen zu unendlichen LiO - Schichten verknüpft, die ihrerseits ein Motiv der Calciumfluoridstruktur wiedergeben.

Mit Ag₂PdO₂ wurde eine neue Verbindung gefunden, deren Struktur zwar mit der beschriebenen verwandt ist, die aber sowohl chemisch als auch strukturell gesehen, einen neuen, eigenen Typus darstellt.

3.2.2 Ausgangsverbindungen und Darstellung

Die Synthese von Ag₂PdO₂ erfolgte aus Silbernitrat (Fluka, p.A.) und Palladiumnitrat. Das Palladiumnitrat wurde aus elementarem Palladium (Degussa AG, 99.9%) durch Auflösen in konzentrierter Salpetersäure⁹⁵ dargestellt.

Zur Darstellung von Ag₂PdO₂ wurden in einem typischen Ansatz 3,3974 g (200 mmol) Silbernitrat und 2,3041 g (100 mmol) Palladiumnitrat in 40 ml entionisiertem Wasser unter Zugabe von einem ml konzentrierter Salpetersäure gelöst. Durch Zugabe zu 40 ml einer 5 molaren Kaliumhydroxidlösung wurde ein schwarzer Feststoff gefällt, der über einen Glasfildertiegel G4 filtriert wurde. Der Rückstand wurde mit entionisiertem Wasser bis zur Neutralität gewaschen. Anschließend wurde 12 Stunden lang bei 383 K an Luft getrocknet. Das so erhaltene, schwarze Rohprodukt ist röntgenamorph, während sowohl analog gefälltes Silberoxid als auch nach derselben Methode dargestelltes Palladiumoxid kristallin ist.

Feinkristalline Proben von Ag₂PdO₂ wurden durch Erhitzen dieses Precursors im Temperaturbereich von 432 bis 823 K hergestellt. Einphasige Proben wurden bei 823 K und einem Sauerstoffdruck von 73 Mpa unter Verwendung von 2,5 ml einer 5 molaren Kaliumhydroxidlösung als Mineralisator erhalten.

3.2.3 Rasterelektronenmikroskopische Untersuchungen und Elementaranalyse

Morphologie sowie die Zusammensetzung einzelner Kristallite wurden an einem Rasterelektronenmikroskop (Zeiss DSM 940), das mit EDX (EDAX PV 9800) ausgestattet ist, untersucht. Da die Verbindung halbleitend ist, konnte auf eine Bedampfung mit Gold verzichtet werden. An 5 verschiedenen Kristalliten wurde das Silber / Palladiumverhältnis durch Integration der jeweiligen L-Emissionslinien bestimmt, wobei im Rahmen der Messgenauigkeit ein Verhältnis von Ag:Pd von 2:1 erhalten wurde: Ag 40,8(3) at% (ber. 40,0) sowie Pd 19,2(3) at% (ber. 20,0). Ein typischer Kristallit ist in Abbildung 3.23 wiedergegeben.

Des weiteren wurde das Silber / Palladium Verhältnis einer makroskopischen Probe durch ICP (IRIS Advantage Emissionsspektrometer) bestimmt. Hierfür wurde die Probensubstanz zunächst in konzentrierter Salpetersäure gelöst und anschließend die Silber 328,0 nm Linie und die Palladium 3242, 3421, 3609 und 3624 nm Emissionslinien aufgenommen und integriert. Es wurden jeweils drei Messungen an zwei unterschiedlichen Proben vorgenommen. Der Silbergehalt betrug in guter Übereinstimmung mit den EDX-Analysen 60,8 Masse% (ber. 60,92), der Palladiumgehalt 29,8 Masse% (ber. 30,05).

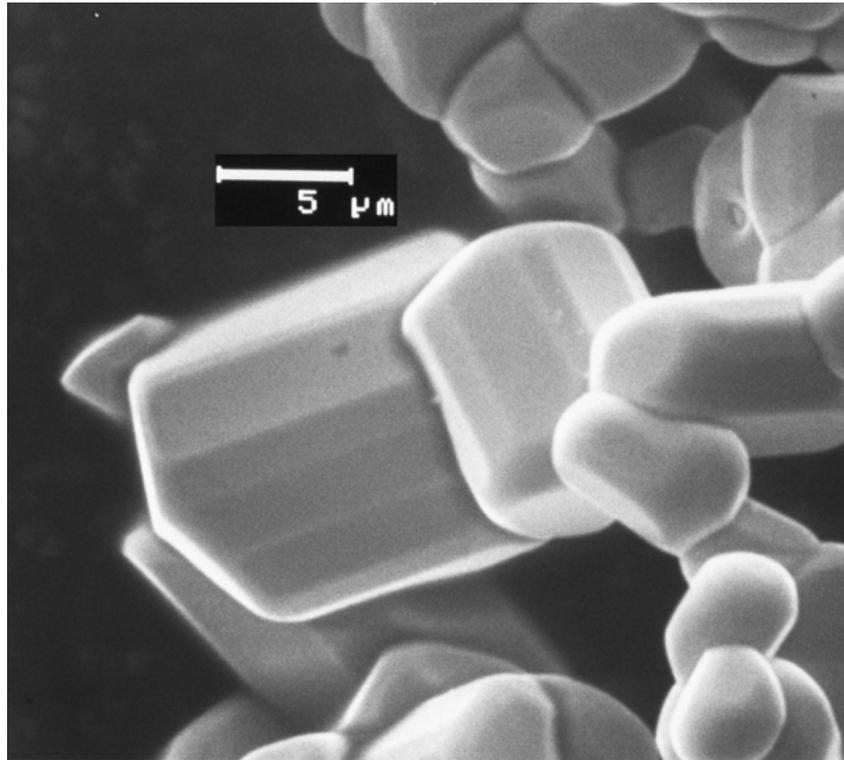


Abbildung 3.23 Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme von Ag₂PdO₂

3.2.4 Strukturanalyse mit Röntgen- und Neutronenpulverdaten

Die Zellparameter wurden durch Indizierung und Verfeinerung von Röntgenpulverdaten nach dem Verfahren der kleinsten Fehlerquadrate unter Verwendung des WERNER Algorithmus¹² der WinXPOW Software¹¹ bestimmt. Hieraus konnte mit Hilfe von Endeavour¹⁴ eine ab-initio Strukturlösung erzielt werden. Die Strukturverfeinerung erfolgte aus Röntgen- und Neutronenpulverdaten nach dem Rietveldverfahren mit dem Programm GSAS¹⁹. Abbildung 3.24a bis d zeigt die Profilanpassungen für die Röntgen- sowie die Neutronendaten der drei Messbänke des ROTAX,ISIS. Die Ergebnisse sind einander in Tabelle 3.1 gegenübergestellt. Die Kristallstruktur von Ag₂PdO₂ ist in Abbildung 3.25 dargestellt. Die neue Verbindung kristallisiert in der Raumgruppe *Immm* (71) in einem neuen, mit dem Li₂CuO₂ Typ verwandten Strukturtyp. Ausgewählte Bindungslängen und Winkel sind in Tabelle 3.2 wiedergegeben. Bei der Bestimmung der Abstände und Winkel wurden die Atompositionen der Neutronendaten verwendet, während die Gitterkonstanten den Röntgenbeugungsdaten entnommen wurden.

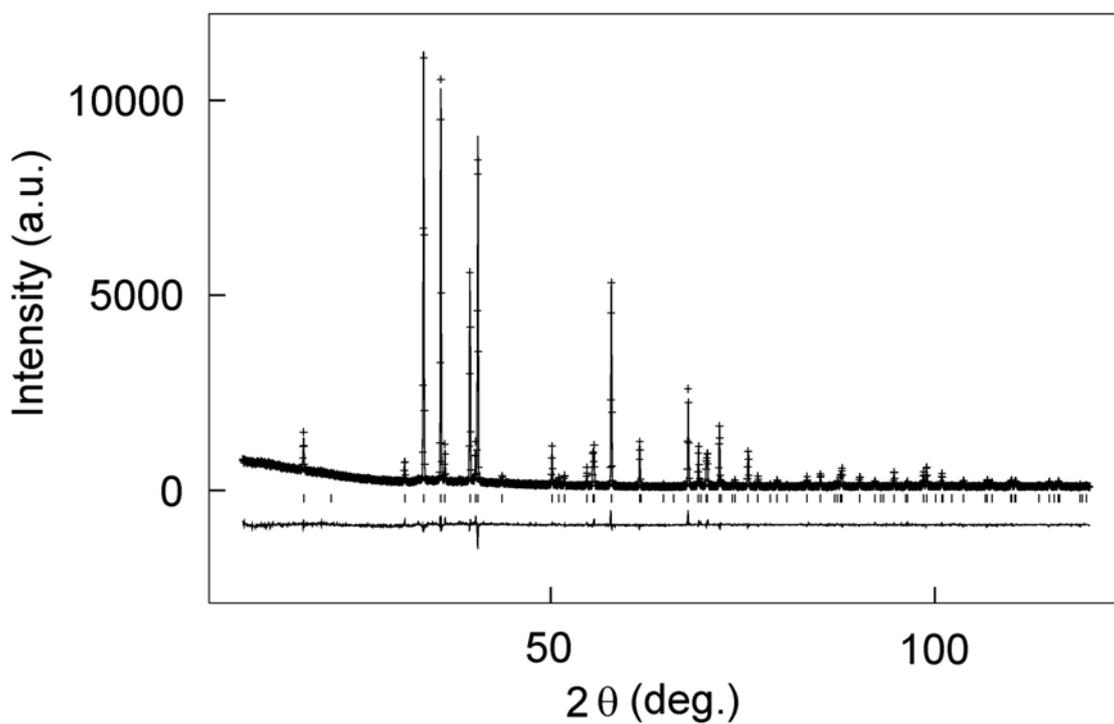
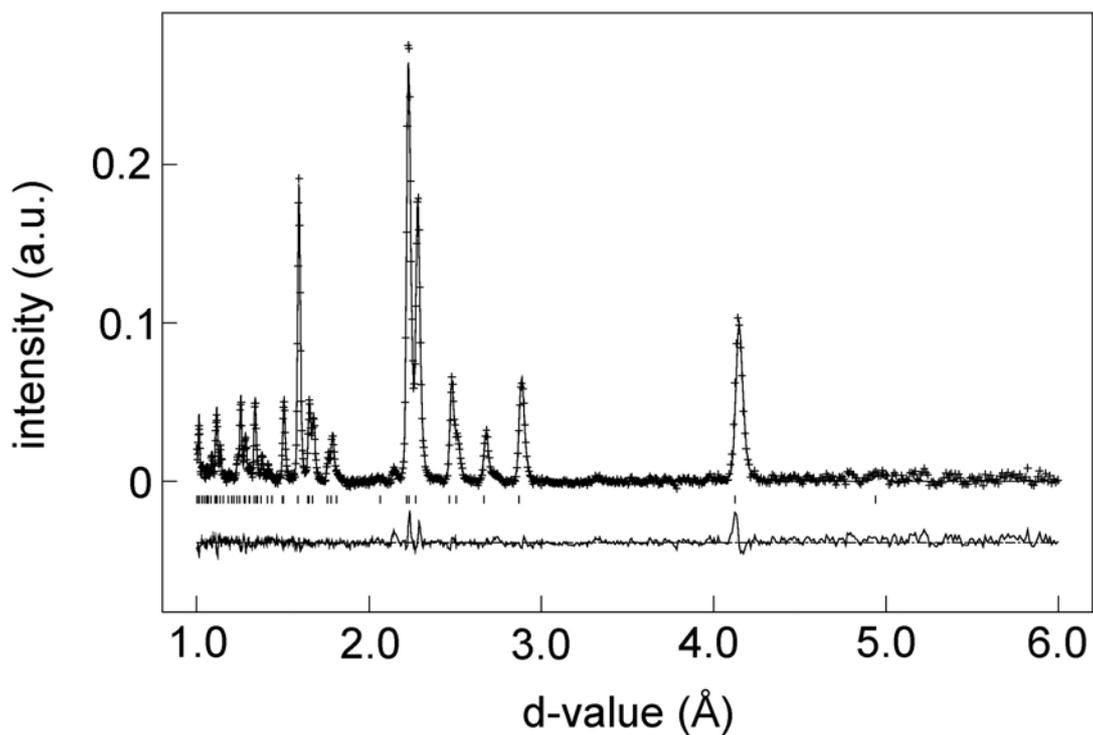
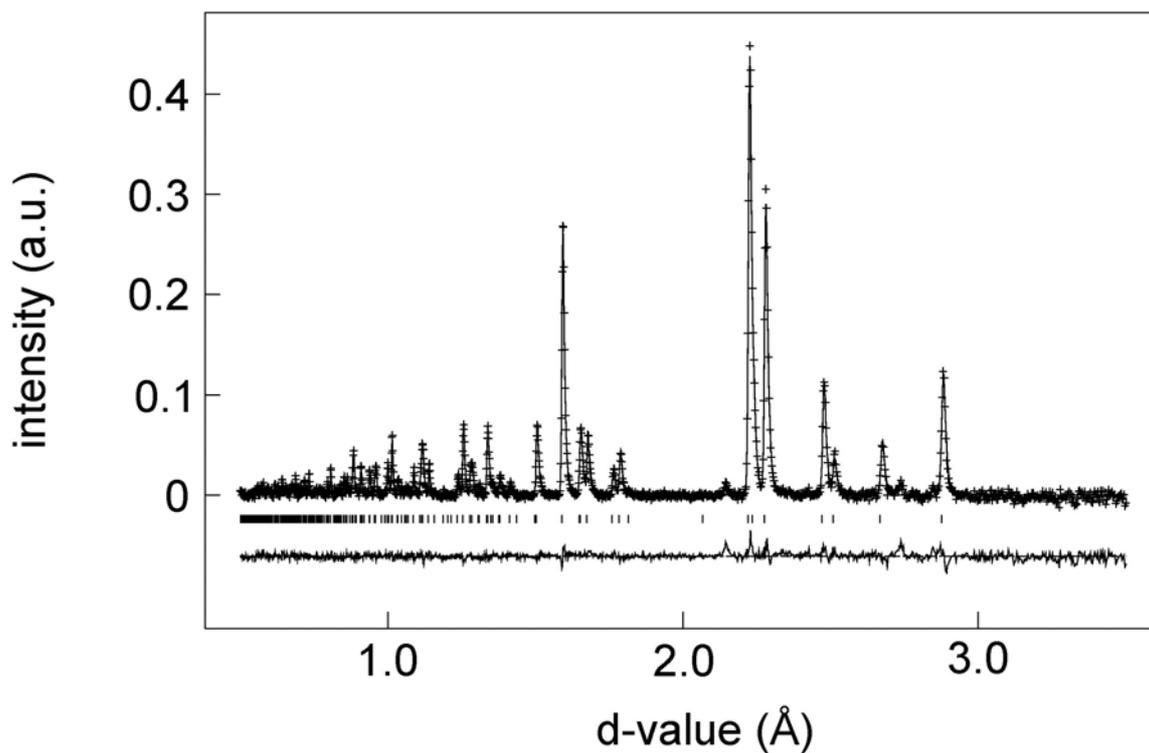


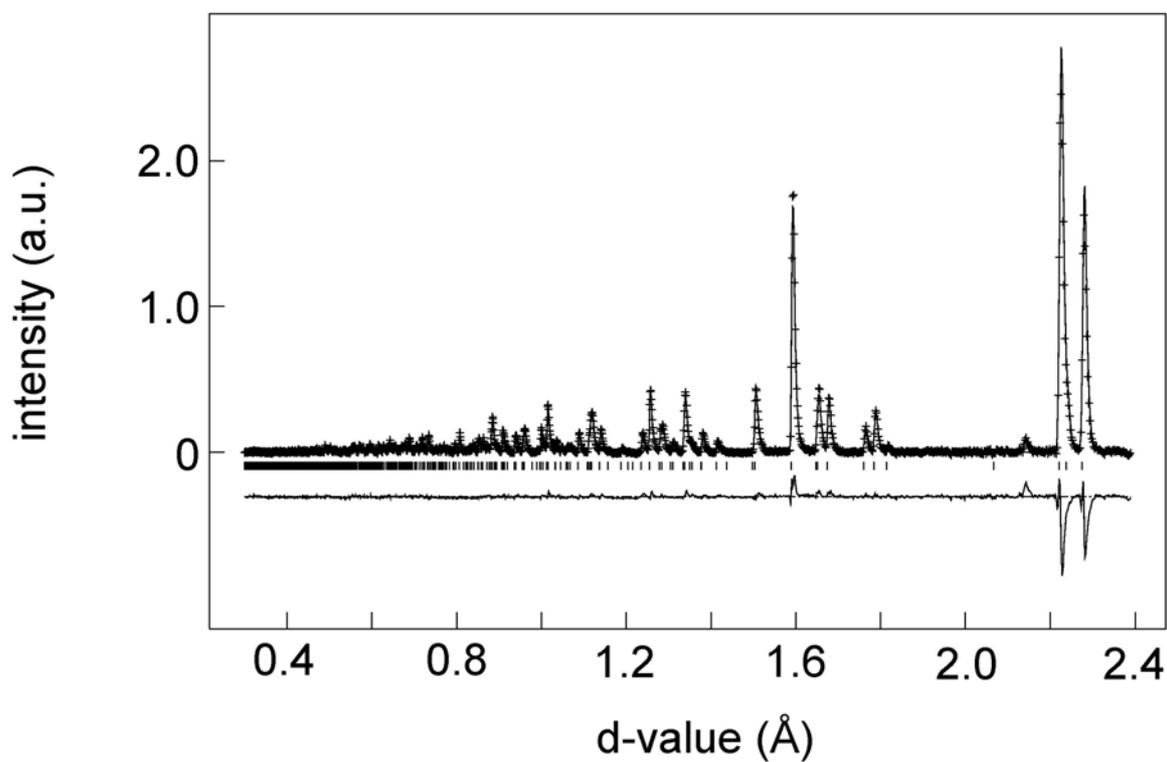
Abbildung 3.24: Profilanpassung und Differenzplot a) Röntgendaten



b) Neutronendaten, Detektorbank 1, ROTAX



c) Neutronendaten, Detektorbank 2, ROTAX



b) Neutronendaten, Detektorbank 3, ROTAX

Abbildung 3.24: Profilanpassungen und Differenzplots der Röntgen- und Neutronenpulverdiffraktogramme von Ag_2PdO_2

Tabelle 3.1: Kristallographische Daten von Ag₂PdO₂

	Röntgenbeugung	Neutronenbeugung
Raumgruppe	Immm (71)	Immm (71)
Gitterparameter (Å)	a = 4,55523(5) b = 3,00803 (3) c = 9,8977(1)	a = 4,55653(7) b = 3,00909(2) c = 9,9009(2)
Volumen (Å ³)	135,62	135,75
Formeleinheiten pro Zelle	2	2
R _p	0,0645	0,0432
R _{wp}	0,0868	0,0376
Chi ²	1,965	1,912
Atomparameter		
Pd (0,0,0)		
U _{iso}	0,0343(4)	0,0093(3)
Ag(0,0,z)	z = 0,35758(9)	z = 0,3562(1)
U _{iso}	0,0402(4)	0,0157(3)
O (1/2,0,z)	z = 0,3627(6)	z = 0,3622(1)
U _{iso}	0,035(2)	0,0128(3)

Palladium ist in nahezu idealer quadratisch-planarer Geometrie von vier Sauerstoffatomen im Abstand von 2,030(1) Å umgeben, wie es auch bei den ternären Oxopalladaten(II) Sr₂PdO₃⁹⁶, Li₂PdO₂ oder auch K₂PdO₂⁹⁷ beobachtet wird. Die PdO₄ Quadrate sind über gegenüberliegende Kanten zu linearen, unendlichen, leiterartigen Polyanionen verknüpft, was eine Abweichung von der idealen D_{4h} Punktsymmetrie bedingt: Die verbrückenden Kanten sind im Vergleich zu den nicht verbrückenden kontrahiert, wodurch der Abstand zwischen den Palladiumatomen vergrößert und somit ihre wechselseitige Abstoßung verringert wird. Die [PdO₂] - Ketten verlaufen parallel zu [010] wie in Abbildung 3.25 dargestellt.

Tabelle 3.2: Winkel und Abstände in Ag₂PdO₂:

Pd1—O1 ⁱⁱ	2,030(1)(4×)	O1 ^v —Pd1—O1 ⁱⁱ	84,41(2) (2×)
O1—Ag1 ⁱⁱⁱ	2,278(1)(2×)	O1 ^{iv} —Pd1—O1 ^v	95,59(2) (2×)
O1—Ag1 ⁱ	2,633(1)(2×)	O1 ^{vi} —Ag1—O1	177,01(4)
		O1 ^v —Ag1—O1 ^{iv}	69,66(2)

Symmetriecodes:

(i) 0.5+x, 0.5-y, 0.5-z; (ii) -0.5+x, -0.5+y, -0.5+z; (iii) 1+x, y, z; (iv) -0.5+x, 0.5-y, 0.5-z;
(v) -0.5+x, -0.5-y, 0.5-z; (vi) -1+x, y, z.

Silber ist nahezu linear von zwei Sauerstoffatomen im Abstand von 2,278(1) Å koordiniert, wobei der O-Ag-O Winkel 177,01(4)° beträgt. Zwei weitere Sauerstoffatome liegen in einer Entfernung von 2,633 Å. Jedes Silberatom verbindet über die kurzen Silber-Sauerstoffbindungen zwei benachbarte[PdO₂] Ketten, die so parallel gehalten werden. Die so gebildeten Ag₂PdO₂ Schichten sind entlang der c-Achse gestapelt, wobei benachbarte Schichten um $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ versetzt sind und über die langen Silber-Sauerstoffbindungen miteinander verknüpft sind.

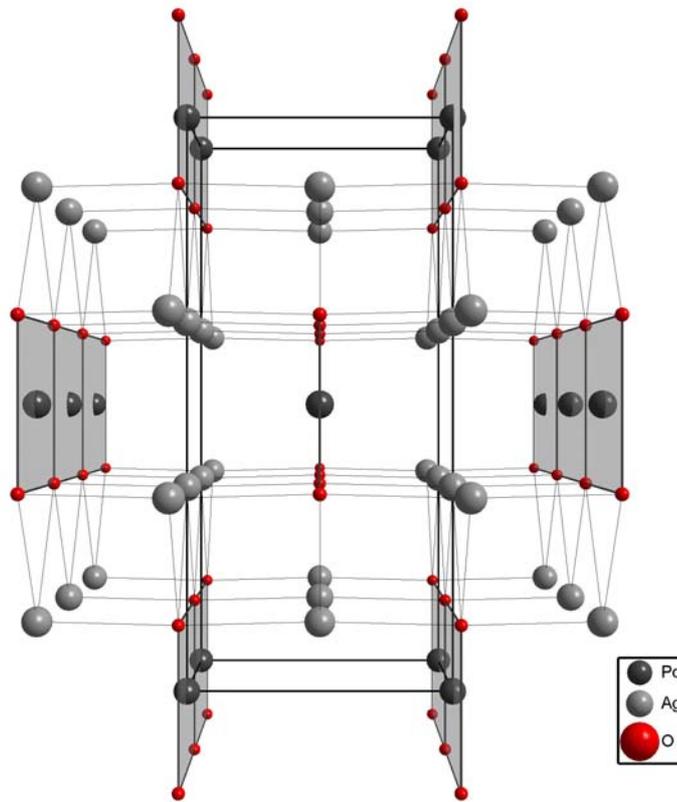


Abb. 3.25: Kristallstruktur von Ag_2PdO_2 entlang $[010]$

Wie in Abbildung 3.26 illustriert liegt der entscheidende Unterschied zur Struktur von Li_2CuO_2 in der Koordination des monovalenten Kation, die im Gegensatz zur nahezu tetraedrischen im Li_2CuO_2 -Typ fast ideal linear ist. Nimmt man die beiden weiter entfernten Sauerstoffnachbarn hinzu, so stellen die AgO Schichten ein Motiv der NaCl Struktur dar.

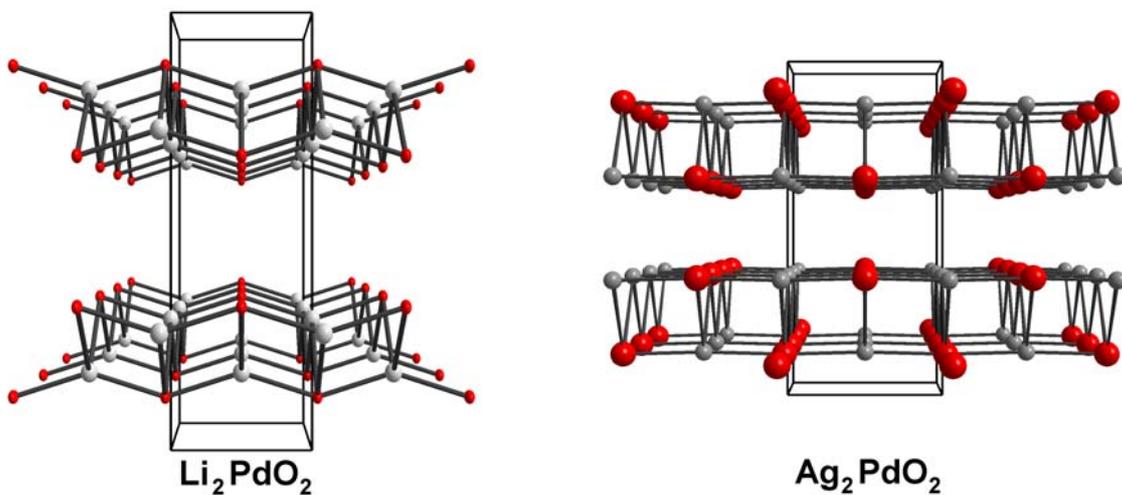


Abbildung 3.26: Koordinationsgeometrie der Monovalenten Kationen in Li_2PdO_2 und Ag_2PdO_2 im Vergleich

Zu einer alternativen Strukturbeschreibung gelangt man, indem man zunächst die Kationenunterstruktur für sich betrachtet. Silber und Palladium bilden zusammen eine nur leicht verzerrte kubisch dichte Kugelpackung. $2/3$ der Oktaederlücken sind von Sauerstoffatomen besetzt. Jedes Sauerstoffatom wird von zwei Palladiumatomen entlang einer Kante umgeben. Gegenüber von den Palladiumatomen liegen die entfernteren Silberatome, während die näheren Silberatome, die axialen Positionen des stark verzerrten Koordinationsoktaeders besetzen. Aus dieser Perspektive kann man die Struktur von Ag_2PdO_2 als NaCl-Defektstruktur auffassen, wobei ein Drittel der Oktaederlücken leer ist. Für die Li_2CuO_2 -Struktur hingegen ist eine derartige Beschreibung nicht möglich, obwohl von einem Li_2PdO_3 , das unter Hochdruck aus Li_2PdO_2 hergestellt wurde und in einer NaCl-Variante kristallisieren soll, berichtet wurde. Entsprechende Versuche zur Darstellung von Ag_2PdO_3 blieben bislang erfolglos.

3.2.5 Thermische und chemische Eigenschaften

Ag_2PdO_2 entsteht als feinkristallines Pulver mit metallischem Glanz. An Luft und Wasser ist es bei Raumtemperatur stabil, löst sich aber leicht in verdünnten, mineralischen Säuren. Abbildung 3.27 zeigt die Thermische Analyse von Ag_2PdO_2 in einer Argonatmosphäre. Der Zersetzungspunkt liegt bei 763 K unter Normaldruck. Die festen Zersetzungsprodukte sind Palladiumoxid und elementares Silber.

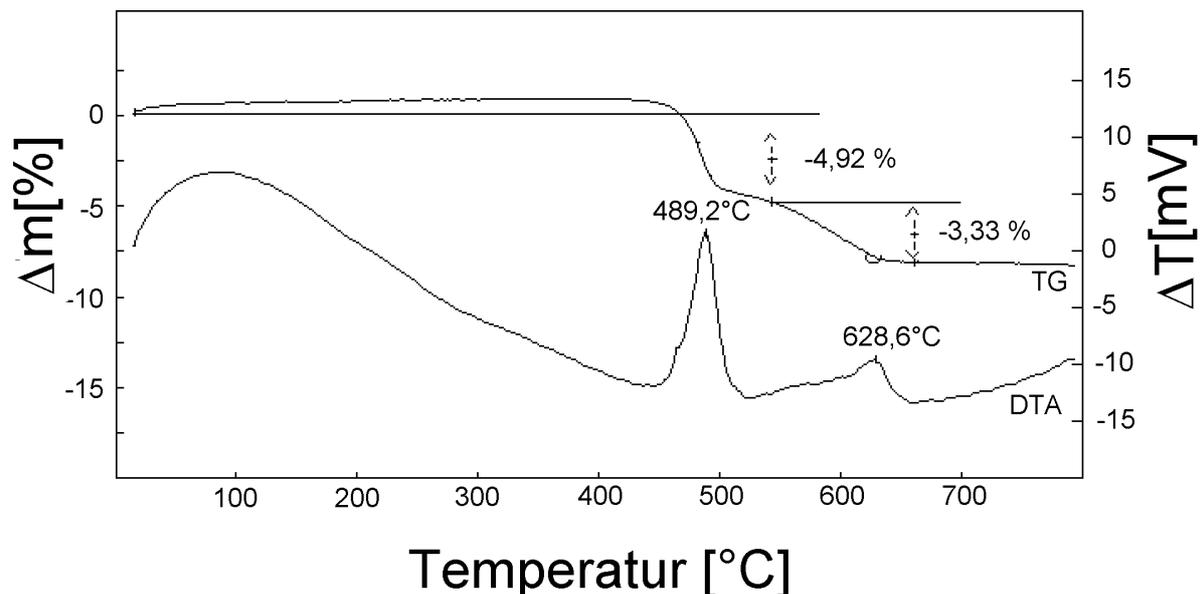


Abbildung 3.27: DTA und TG von Ag_2PdO_2

3.2.6 Elektrische und magnetische Eigenschaften

Die magnetische Suszeptibilität von Ag_2PdO_2 wurde im Temperaturbereich von 3 bis 350 K bei Magnetfeldern von 1 bis 10 Tesla bestimmt (Abb. 3.28). Die Verbindung ist oberhalb von 10 K diamagnetisch. Dies bestätigt das Vorliegen des Palladiums in der Elektronenkonfiguration d^8 in quadratisch-planarer Koordination.

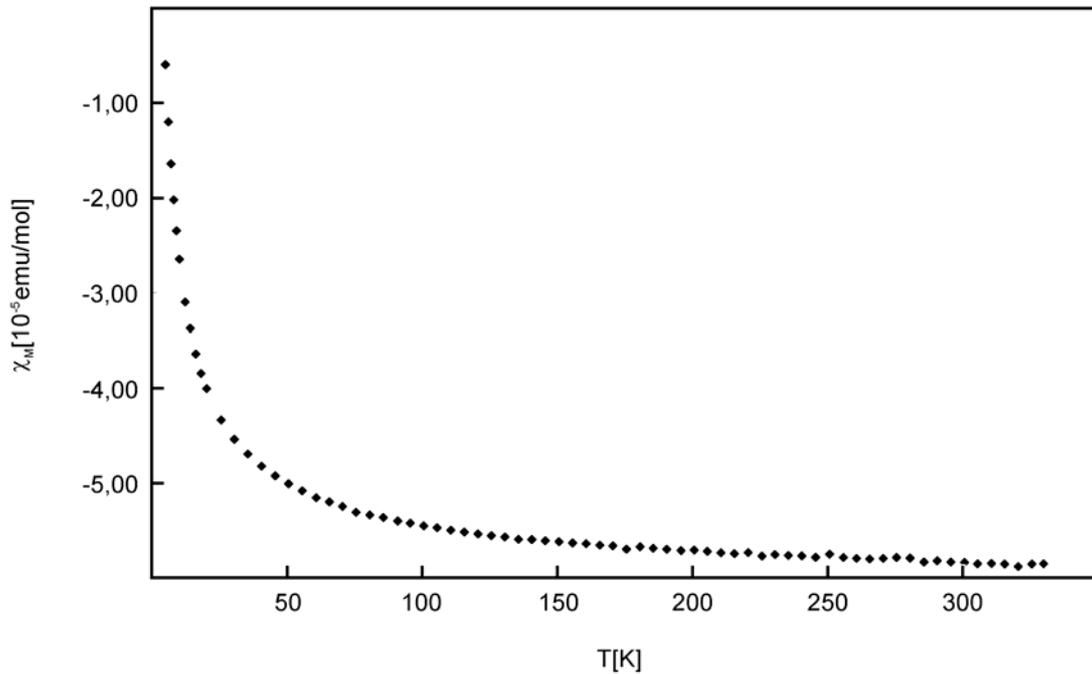


Abbildung 3.28: Temperaturabhängigkeit der Molsuszeptibilität von Ag₂PdO₂

Der Anstieg der Suszeptibilität unterhalb von 50 K ist auf geringe Mengen paramagnetischer Verunreinigungen zurückzuführen. Zur Bestimmung der Leitfähigkeit wurden Tabletten mit einem Durchmesser von 9 mm und einer Stärke von 0,5 mm bei einem Druck von 770 MPa gepresst. Die Presslinge wurden anschließend 10 h lang bei 573 K im Sauerstoffstrom getempert. Die Leitfähigkeit wurde nach der Standard Vier-Punkt-Methode bestimmt. In Abbildung 3.29 ist die Temperaturcharakteristik des spezifischen Widerstands der Verbindung dargestellt. Mit zunehmender Temperatur steigt die Leitfähigkeit, bei Raumtemperatur liegt die spezifische Leitfähigkeit bei 85,5 Ωcm. Somit zeigt Ag₂PdO₂ die Charakteristiken eines Halbleiters

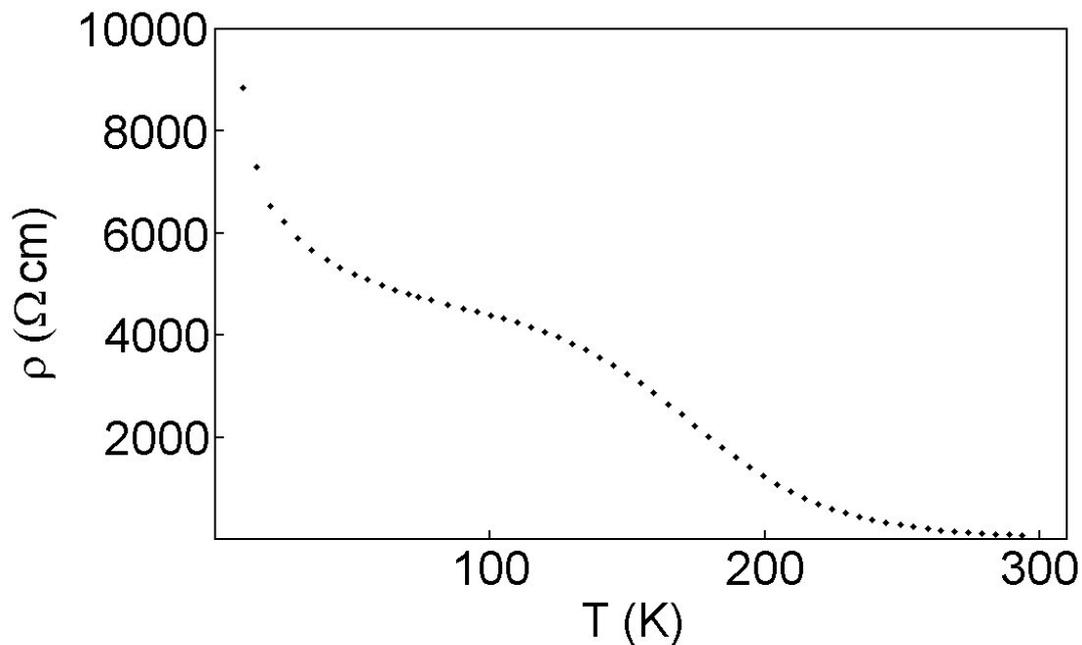


Abbildung 3.29: Temperaturcharakteristik der spezifischen Leitfähigkeit von Ag₂PdO₂

Trägt man im Arrheniusplot $\log(\sigma)$ gegen die reziproke Temperatur ($1/T$) auf, so beobachtet man zwei lineare Bereiche, einen bei hohen, einen bei tiefen Temperaturen (Abbildung 3.30). Diese Charakteristik entspricht einem Störstellenhalbleiter.

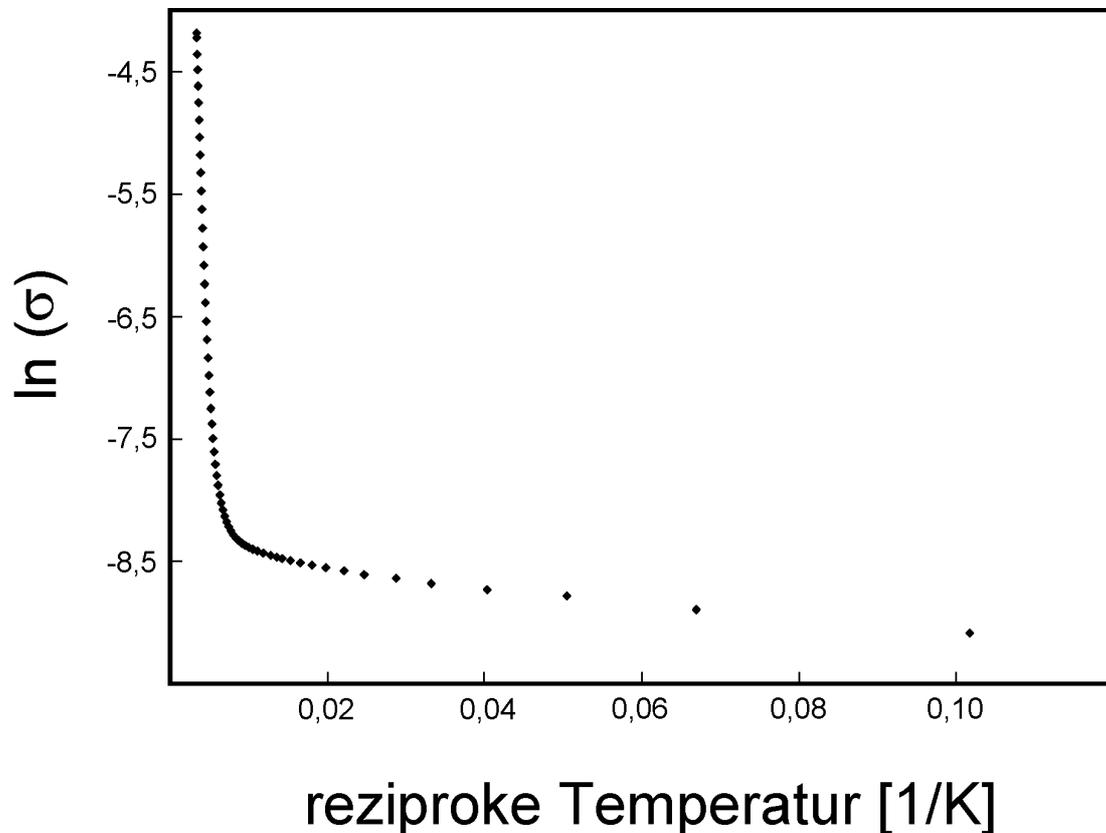


Abbildung 3.29 Arrheniusplot der Leitfähigkeit von *Ag₂PdO₂*

Der lineare Bereich unterhalb von 100 K (bzw. oberhalb von $0,01 \text{ K}^{-1}$) ist auf Störstellenleitung zurückzuführen, während der zweite lineare Bereich oberhalb von 200 K (bzw. unterhalb von $0,005 \text{ K}^{-1}$) die intrinsische Leitfähigkeit der Verbindung wiedergibt. Die Bandlücke wurde aus dem intrinsischen Bereich bei hohen Temperaturen mit $0,18(2) \text{ eV}$ bestimmt.

3.2.7 Zusammenfassung und Ausblick

Ag₂PdO₂ wurde erstmals dargestellt und charakterisiert. Im Unterschied zu *Li₂PdO₂* und *Li₂PdO₃* ist *Ag₂PdO₂* unter Normalbedingungen an Luft und Wasser stabil. Die neue Verbindung ist ein Halbleiter mit einer nur geringen Bandlücke, liegt also relativ nahe an einem Metall-Nichtmetallübergang.

Die Struktur zeigt Struktur motive, die für Oxopalladate(II) charakteristisch sind, und kann mit dem *Li₂CuO₂*-Typ verglichen werden. Alternativ hierzu lässt sich die Verbindung als eine sauerstoffdefizitäre Kochsalzdefektstruktur beschreiben, wobei Silber und Palladium gemeinsam eine kubisch-flächenzentrierte dichte Kugelpackung bilden und Sauerstoff $2/3$ der Oktaederlücken besetzt.

Neben zweiwertigem Palladium kommt Palladium analog zu seinem höheren Homologen Platin auch in der Oxidationsstufe +4 vor, wobei es in der Regel eine oktaedrische

Koordination einnimmt. Insbesondere die strukturchemischen Gegebenheiten legen die Vermutung nahe, dass noch höhere Sauerstoffdrücke zu einer Verbindung Ag₂PdO₃ mit Kochsalzstruktur führen könnten. Die Synthese dieser Verbindung sowie die Untersuchung ihrer physikalischen Eigenschaften sind daher für künftige Arbeiten auf diesem Gebiet von besonderem Interesse.

Derzeit sind keine Silberplatinoxide bekannt. Es ist sicherlich für künftige Forschungen besonders reizvoll, ob sich derartige Verbindungen realisieren lassen und welche Eigenschaften sie gegebenenfalls mit den bereits bekannten ternären Silberoxiden der niedrigeren Homologen Nickel und Palladium verbinden.

Ein weiterer Schwerpunkt wird in der genaueren Untersuchung der hier beschriebenen Verbindung selbst sowie des amorphen Copräzipitats selbst liegen.

- 1) Die Reduzierbarkeit sowie die relative Stabilität machen diese Verbindung sowie ihren amorphen Precursor als potentielle Katalysatoren, z. B. für Oxidationen mit molekularem Sauerstoff, interessant.
- 2) Die Fällung von Silbernitrat und Palladiumnitrat mit NaOH führt zu den jeweiligen binären Oxiden in kristalliner Form. Demgegenüber erhält man durch die Copräzipitation beider Nitrats über einen weiten Mischungsbereich röntgenamorphe Pulver, die sich im Gegensatz zu frisch gefälltem Palladiumoxid leicht in verdünnter Salpetersäure lösen lassen. Man kann daher davon ausgehen, dass diese Präzipitate ihrerseits neue Verbindungen sind deren genauere Charakterisierung ein lohnendes Betätigungsfeld sein kann, zumal alle Präzipitate als potentielle Katalysatoren in Betracht zu ziehen sind und im Gegensatz zur kristallinen Form sehr leicht zugänglich sind.
- 3) Ag₂PdO₂ ist ein Halbleiter mit einer nur sehr geringen Bandlücke. Supraleitung tritt gerade im Bereich eines Metall-Nichtmetall-Übergangs auf, wie dies zum Beispiel bei den Hochtemperatursupraleitern der Fall ist. Aus dieser Perspektive erscheint es vielversprechend, Ag₂PdO₂ chemisch so zu modifizieren, dass ein derartiger Übergang auftritt. Zum Beispiel könnte das Palladium partiell reduziert werden, indem man das einwertige Silber partiell durch zweiwertiges Quecksilber ersetzt. Diese Substitution bietet sich insbesondere deshalb an, weil sowohl einwertiges Silber als auch zweiwertiges Quecksilber eine vergleichbare Koordinationschemie haben, indem beide eine lineare Ligandenumgebung bevorzugen. Eine derartig modifizierte, gemischtvalente Verbindung kann metallische Leitfähigkeit zeigen. Alternativ kann man versuchen, Silber elektrochemisch zu deintercalieren, wobei das Palladium partiell, je nach Menge des entfernten Silbers, oxidiert wird. Auch die so induzierte Gemischtvalenz kann metallische Leitfähigkeit, gegebenenfalls sogar Supraleitung zur Folge haben.

Die Synthese und Charakterisierung von Ag₂PdO₂ stellt somit einen Ausgangspunkt für weitere, durchaus vielversprechende Untersuchungen dar.

3.3 Synthese und Charakterisierung von Ag₂NiO₂

3.3.1 Einleitung

Schon seit längerem sind Übergangsmetalloxide des Delafossittyps AMO₂ (A= Cu, Ag, Pd, Pt; M = Übergangsmetall) bekannt. Das A-Kation ist in dieser Verbindungsklasse monovalent, während das M-Kation dreiwertig ist. Besonders intensiv wurden sie von der Gruppe um Shannon und Prewitt untersucht⁹⁸⁻¹⁰⁰. In Abbildung 3.31 ist die Kristallstruktur am Beispiel von AgNiO₂ dargestellt. Für die Delafossitstruktur ist die Verknüpfung CdI₂- bzw. CdCl₂-artiger MO₂-Schichten über zweifach linear koordinierte A Kationen, die jeweils zwei Sauerstoffatome benachbarter Schichten miteinander verbinden, charakteristisch.

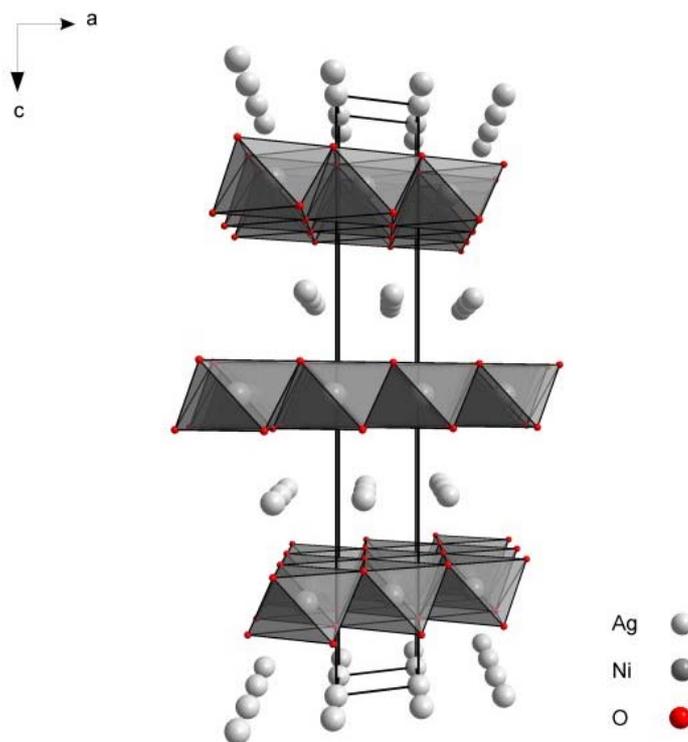
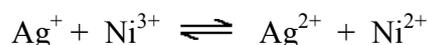


Abbildung 3.31: Delafossitstruktur am Beispiel von AgNiO₂

Die Abstände größerer A-Kationen wie Silber sind vielfach geringer als im Metall, so dass eine Bindung der A-Kationen im Rahmen der d¹⁰-d¹⁰-Wechselwirkung vorgeschlagen und diskutiert wurde⁴. AgNiO₂, ein typischer Vertreter dieser Verbindungsklasse, ist ein Halbmetall, dessen elektrische und magnetischen Eigenschaften kürzlich auf eine schwache Überlappung des σ*(Ni-O) Bandes mit den Ag 4d-Zuständen zurückgeführt wurden¹⁰¹. Dieser Zusammenhang lässt sich durch das Redoxgleichgewicht



beschreiben. Es wird angenommen, dass das Gleichgewicht auf der linken Seite liegt. Dieses Bild legt Löcher im Nickel-Sauerstoff-Band sowie Elektronen in den Silberzuständen nahe, wodurch sich die hohe elektrische Leitfähigkeit der Verbindung erklären ließe.

Charakteristisch für die Chemie des Silbers ist die Ausbildung von intermetallischen Wechselwirkungen bei niedrigen Oxidationsstufen, wobei die Silber-Silber Abstände schon bei einwertigem Silber geringer sein können als im Metall, was mit der oben genannten d^{10} - d^{10} Wechselwirkung erklärt wird. Besonders deutlich tritt dies zu Tage, wenn man die Oxidationsstufe noch weiter verringert. So gibt es ein Silbersuboxid Ag_3O ⁸⁹, dessen Struktur sich vom anti- BiI_3 -Typ herleitet, und ein Silbersubfluorid Ag_2F ⁸⁸, das im anti- CdI_2 -Typ kristallisiert. Hervorzuheben ist, dass Ag_2F das bislang einzige bekannte Subfluorid überhaupt ist. Für gewöhnlich stabilisiert Fluor ausschließlich hohe Oxidationsstufen, während es niedrige destabilisiert. Entsprechend gibt es auch ein Silberdifluorid AgF_2 und sogar ein Silbertrifluorid AgF_3 . Abbildung 3.32 illustriert die strukturelle Verwandtschaft dieser beiden binären Silbersubverbindungen, die beide durch hexagonale Silberdoppellagen mit stark metallischem Bindungscharakter charakterisiert sind.

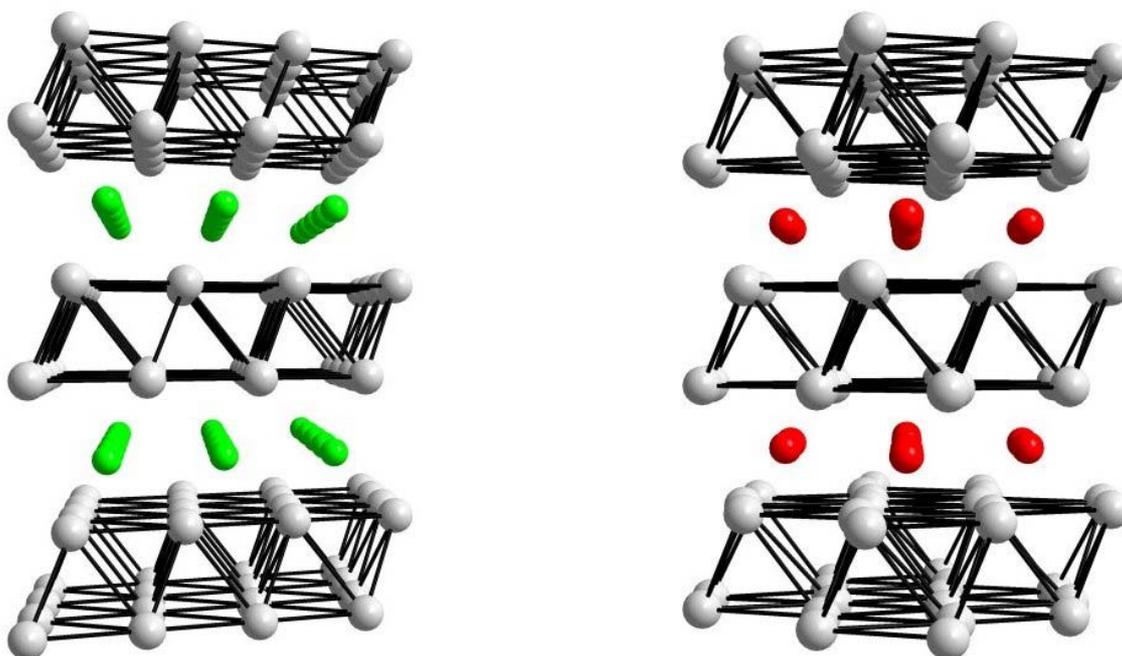


Abbildung 3.32: Die Strukturen der Silbersubverbindungen Ag_2F und Ag_3O

Von der Synthese weiterer, ternärer silberreicher Übergangsmetalloxide erhofften wir uns Aufschlüsse über Silber-Silber-Wechselwirkungen einerseits, sowie über die Wechselwirkung zwischen Silber und dem Übergangsmetallkation andererseits. In diesem Zusammenhang ist die Synthese von Ag_2NiO_2 zu sehen.

3.3.2 Experimentelle Details

Als Ausgangssubstanzen dienten Silbernitrat (Fa. Degussa, p.A.) und Nickelnitrathexahydrat (Fa. Merck, p.A.). Silberoxid wurde durch Fällung einer 1 molaren Silbernitratlösung mit 3 molarer Natriumhydroxidlauge dargestellt. Der Niederschlag wurde mit entionisiertem Wasser bis zur Neutralität gewaschen und anschließend 12 Stunden lang bei 110°C an Luft getrocknet. Analog wurde Nickelhydroxid durch Fällung einer 1 molaren Nickelnitratlösung mit frisch hergestellter 3 molarer Natriumhydroxidlösung hergestellt. Die Trocknung des Niederschlags erfolgte zur Vermeidung von Carbonatbildung bei 100°C in einem Ölpumpenvakuum von 10⁻³ mbar. Zwei verschiedene Syntheserouten führen zu Ag₂NiO₂:

- 1 Ag₂O und Ni(OH)₂ wurden im Verhältnis 1,05 zu 1 innig miteinander vermengt und homogenisiert. Etwa 1 g der Mischung wurden in Goldtiegel gegeben und 1,5 Milliliter einer 5 molaren Kaliumhydroxidlösung wurde als Mineralisator hinzugefügt. Anschließend wurde bei 823 K und 65 MPa Sauerstoffdruck 24 Stunden lang getempert.
- 2 Zu 10 ml einer 0,5 molaren Silbernitratlösung wurden 5 ml einer 0,5 molaren wässrigen Nickelnitratlösung gegeben. Die so erhaltene Lösung wurde tropfenweise unter heftigem Rühren zu 20 ml einer 10 molaren Kaliumhydroxidlösung gegeben. Die resultierende, braune Suspension wurde in einen Teflonautoklaven (Typ DAB 5, Fa. Berghof, D-72800 Eningen) gegeben und 3 Tage lang bei 503 K getempert.

Die Reaktionsprodukte wurden mittels Pulverdiffraktometrie, sowie Rasterelektronenmikroskopie identifiziert. Darüberhinaus wurden die magnetischen, thermischen und elektrischen Eigenschaften der Verbindung charakterisiert.

3.3.3 Rasterelektronenmikroskopische Untersuchungen und Elementaranalyse

Analog zu Ag₂PdO₂ wurde die Morphologie einzelner Kristallite zunächst an einem Rasterelektronenmikroskop untersucht. Bei der Probenpräparation konnte aufgrund der metallischen Leitfähigkeit der Substanz auf eine Bedampfung mit Gold verzichtet werden. Das Silber- zu Nickelverhältnis wurde mit Hilfe der energiedispersiven Mikroanalyse an fünf verschiedenen Kristalliten durch Integration der jeweiligen L-Emissionslinien bestimmt, wobei im Rahmen der Messgenauigkeit ein Verhältnis von Ag:Ni von 2:1 erhalten wurde: Ag 40,8(3) at% (ber. 40,0) sowie Ni 19,2(3) at% (ber. 20,0). Wie in Abbildung 3.33 dargestellt, haben die Kristallite eine hexagonale, plättchenförmige Morphologie.

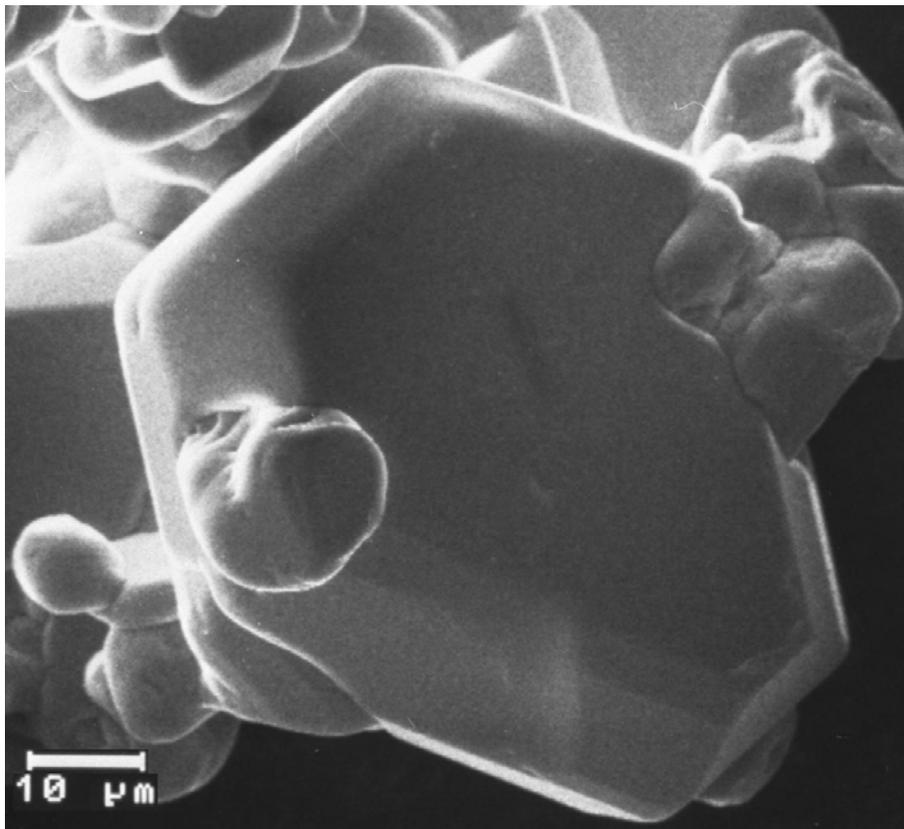
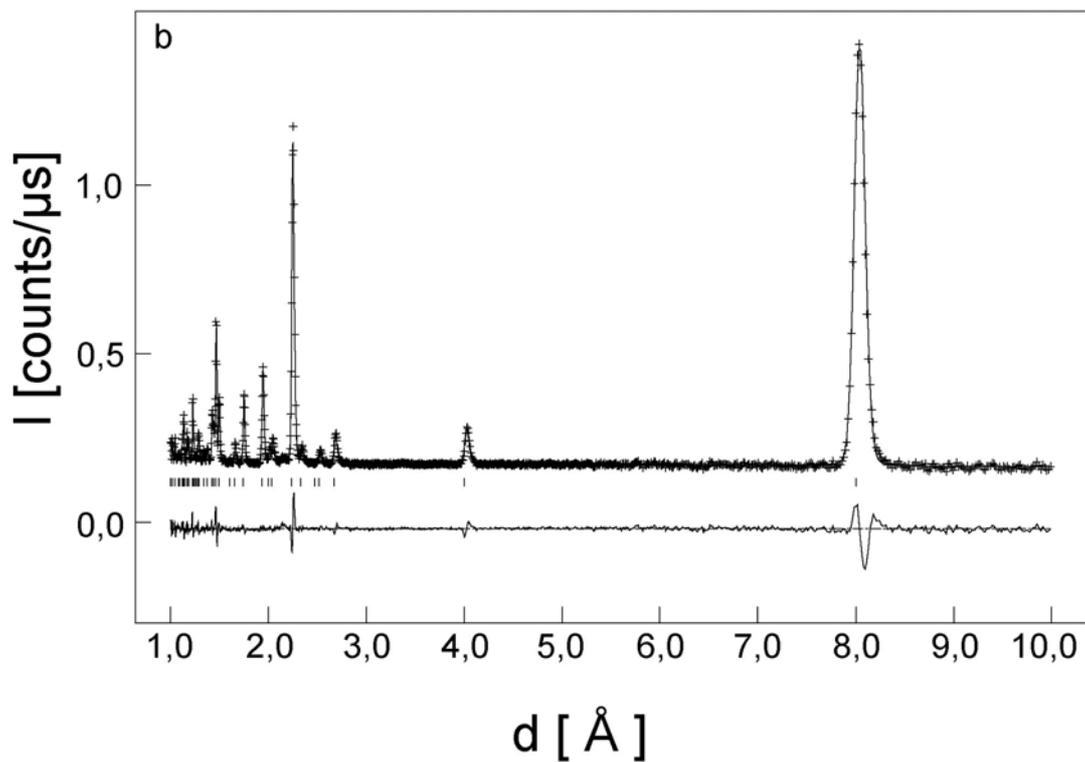
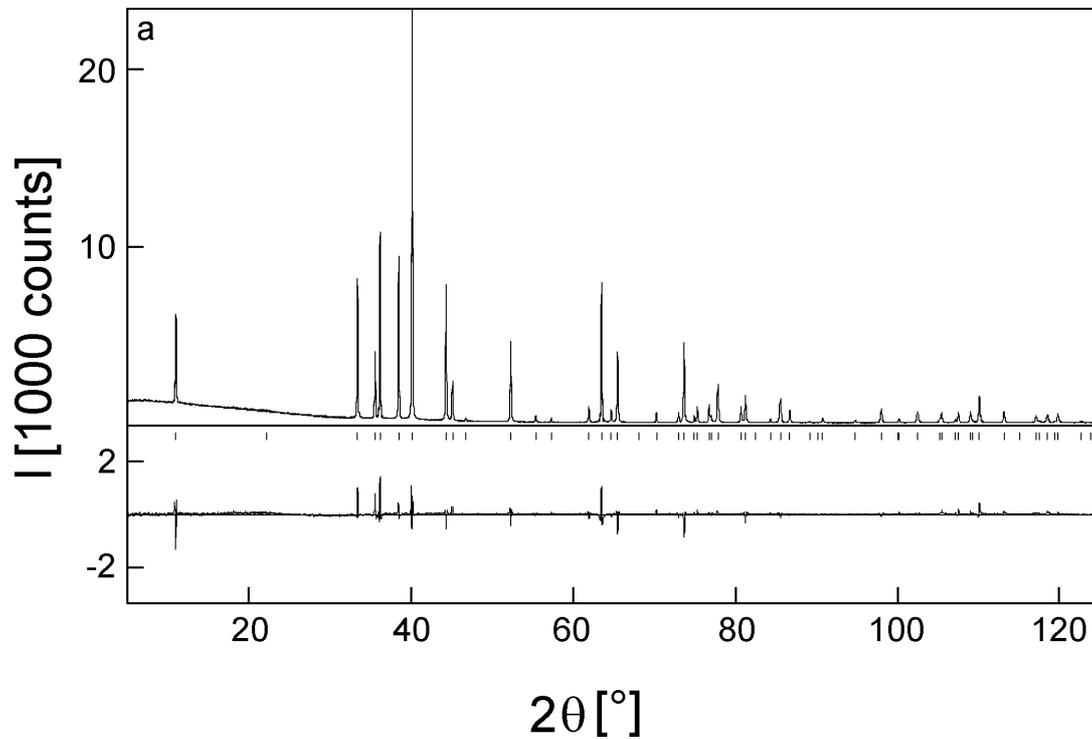


Abbildung 3.33: Kristallit von Ag₂NiO₂

Bereits in dieser Hinsicht unterscheidet sich diese Verbindung von ihrem höheren Homologen Ag₂PdO₂ und zeigt stattdessen große Ähnlichkeiten mit dem Delafossiten AgNiO₂. Auf makroskopischer Ebene wurde das Silber / Nickel Verhältnis durch ICP (IRIS Advantage Emissionsspektrometer) bestimmt. Hierfür wurde die Probensubstanz zunächst in konzentrierter Salpetersäure gelöst und anschließend die Silber 328,0 nm Linie und die Nickel 2216 und 2316 nm Emissionslinien aufgenommen und integriert. Es wurden drei Messungen an einer Probe vorgenommen. Der Silbergehalt betrug 72,5 Masse% (ber. 70,40), der Palladiumgehalt 19,4 Masse% (ber. 19,15). Dies entspricht einer Zusammensetzung von Ag_{2,02}NiO₂. Allerdings ist es wahrscheinlicher, dass neben Ag₂NiO₂ noch zwei Molprozent Ag₂O vorliegen, da bei der Synthese Silber in fünfprozentigem Überschuss verwendet werden.

3.3.4 Strukturanalyse mit Röntgen- und Neutronenpulverdaten

Die Strukturlösung erfolgte aus Röntgenpulverdaten über eine ab-initio Rechnung mit dem Programm Endeavour. Anschließend wurden Rietveldverfeinerungen der Röntgenpulverdaten mit Diffrakt 97 und der Neutronenpulverdaten mit GSAS vorgenommen. Die Profilanpassungen sind in Abbildung 3.34 a bis d dargestellt.



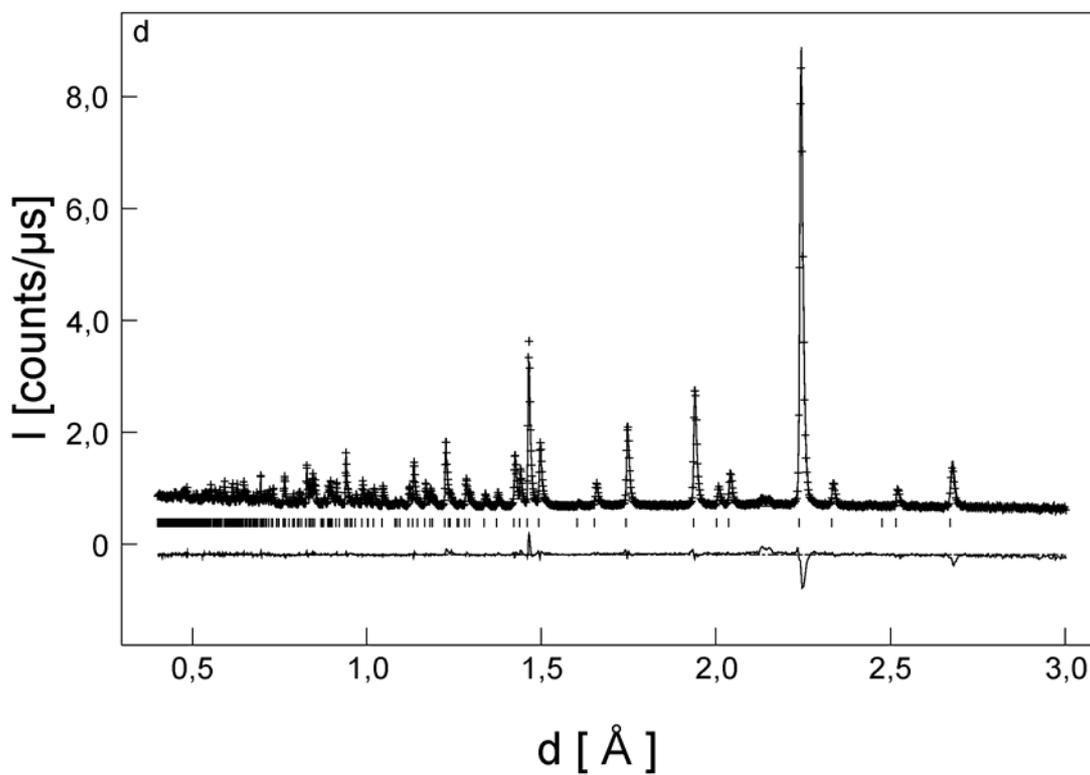
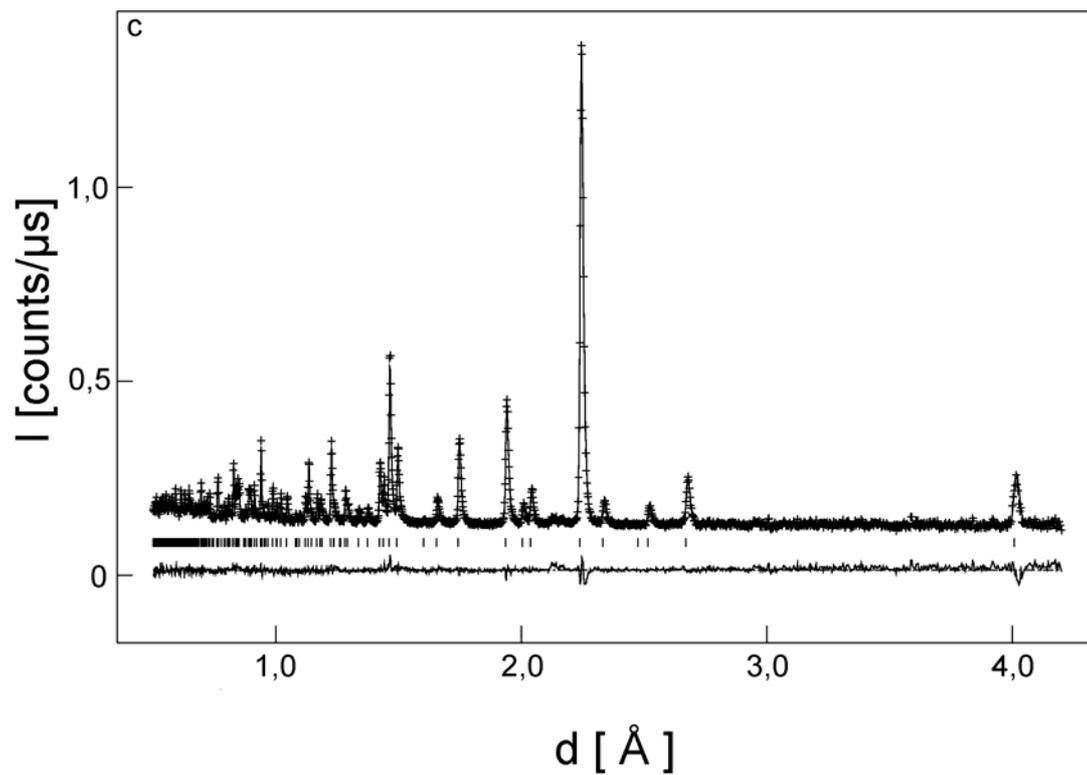


Abbildung 3.34: Rietveldverfeinerung und Differenzplot a) Röntgendaten b) Neutronendaten (ISIS, ROTAX, Chilton), Detektorbank 1 c) Neutronendaten, Detektorbank 2 d) Neutronendaten, Detektorbank 3

Ag₂NiO₂ kristallisiert in der Raumgruppe $R-3m$. Den Neutronenbeugungsdaten konnten bis zu 4 K keine magnetischen Überstrukturen entnommen werden. Das Strukturmodell konnte später an einem Einkristall verifiziert werden. Eine Gegenüberstellung der resultierenden Gitterkonstanten, Atomparameter und R-Werte findet sich in Tabelle 3.

Tabelle 3.3: Kristallographische Daten von Ag₂NiO₂

Messung	Röntgenpulverdaten	Neutronenpulverdaten	Röntgeneinkristalldaten
Raumgruppe	$R-3m$ (166)	$R-3m$ (166)	$R-3m$ (166)
Gitterkonstanten (Å)	a = 2,92647(2) c = 24,0888(2)	a = 2,92471(2) c = 24,0746(4)	a = 2,9193(4) c = 24,031(4)
Volumen (Å ³)	178,66(3)	178,342(3)	177,36(5)
Formeleinheiten pro Elementarzelle	3	3	3
R _{bragg}	0,04351		R ₁ = 0,0132
R _p	0,06057	0,0297	0,0301
R _{wp}	0,08487	0,0283	0,01263
GOF	3,585		
Chi ²		3,619	
Atomparameter			
Ni (0,0,0)			
U _{iso}	0,0246(2)	0,0040(1)	0,0040(1)
Ag(0,0,z)	z = 0,21408(3)	z = 0,21399(4)	z = 0,21395(1)
U _{iso}	0,00268(1)	0,0076(2)	U _{aniso} : Anhang Tab. A 10
O (0,0,z)	z = 0,3749 (2)	z = 0,37610(4)	z = 0,37589(13)
U _{iso}	0,0410(7)	0,0084(2)	U _{aniso} : Anhang Tab. A 10

Abbildung 3.35 gibt die Struktur von Ag₂NiO₂ wieder. Das Nickel-Sauerstoffteilgitter ist nahezu identisch mit demjenigen von AgNiO₂: Flächenverknüpfte NiO₆-Oktaeder bilden in der a,b-Ebenen hexagonale NiO₂-Schichten. Die Nickel-Sauerstoffabstände und Winkel sind praktisch identisch mit denjenigen von AgNiO₂. In Tabelle 3.4 werden ausgewählte strukturelle Details von Ag₂NiO₂, AgNiO₂ sowie von Ag₂F einander gegenübergestellt. Letztere sind für die Betrachtung der Silberteilstuktur wichtig. Die Gitterkonstanten wurden den Röntgenpulverdaten entnommen, während die Atomlagen, die den Berechnungen der Winkel und Abstände zugrunde liegen, den Neutronenpulverdaten entstammen.

Tabelle 3.4: Winkel (°) und Abstände (Å) in Ag₂NiO₂, AgNiO₂ und Ag₂F:

	Ag ₂ NiO ₂	AgNiO ₂	Ag ₂ F
d (Ni-O)	1,979(1) (×6)	1,94(×6)	
d (Ag-O)	2,501(1) (×3)	2,12 (×2)	
d (Ag-F)			2,451 (×3)
d (Ag-Ag in Ebene)	2,926(1) (×6)	2,939(×6)	2,996 (×6)
d (Ag-Ag vert.)	2,838(1) (×3)		2,814 (×3)
O-Ni-O (1)	95,36(2)	98,50	
O-Ni-O (2)	84,64(2)	81,50	

Völlig unterschiedlich ist die Strukturchemie des Silbers in den beiden Verbindungen. In AgNiO₂ findet sich Silber in linearer Koordination von zwei Sauerstoffatomen, wie man es für einwertiges Silber erwarten würde. Auf diese Weise werden in AgNiO₂ benachbarte NiO₂-

Schichten miteinander verknüpft. Wie man in Abbildung 3.34 sieht, liegt im Falle von Ag_2NiO_2 ein ganz anderes Arrangement vor: Die NiO_2 -Schichten werden von Silberdoppellagen getrennt, die große Ähnlichkeiten mit denjenigen im Silbersubfluorid Ag_2F aufweisen.

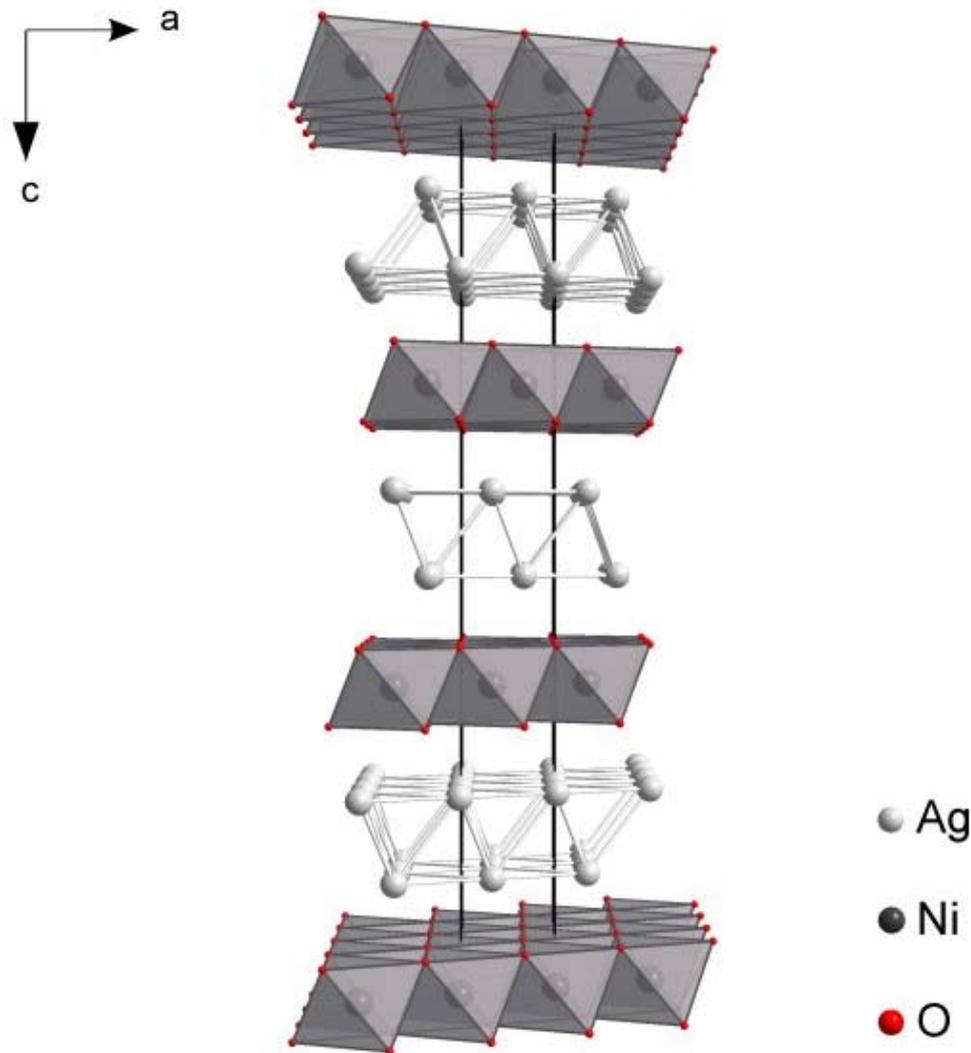


Abbildung 3.35: Struktur von Ag_2NiO_2

Dies gilt nicht nur für die Silber-Silber Abstände, die mit 2,838 Å zwischen benachbarten Silberlagen, sogar noch geringer sind als im metallischen Silber (2,889 Å), sondern auch für die Silber-Anionen-Abstände: In Ag_2NiO_2 hat jedes Silberatom drei Sauerstoffnachbarn im Abstand von 2,501 Å in der benachbarter NiO_2 -Schicht. Ganz ähnlich sind die Verhältnisse in Ag_2F . Dies führt zu der Vermutung, dass die Bindungen innerhalb der Ag_2 -Schichten metallischen Charakter haben. Unter der Annahme, dass Nickel dreiwertig ist, müsste Silber formal einhalbwertig sein; es läge also ein Silbersuboxid vor. In diesem Modell ist das zusätzliche Silberelektron in der Ag_2 -Schicht in einem metallischen Band delokalisiert und

sollte dementsprechend einen temperaturunabhängigen, Pauli-paramagnetischen Beitrag zur magnetischen Suszeptibilität liefern.

Folgt man diesem Modell, so vereinigt Ag_2NiO_2 ionische und kovalente Bindungselemente in den NiO_2 -Schichten mit den metallischen Bindungselementen eines Silbersuboxids in den Ag_2 -Schichten. Man kann sich die Verbindung aus zwei schichtförmigen Polyionen aufgebaut vorstellen: Einem $[Ag_2^+]_\infty$ -Polykation, das durch metallische Bindungen zwischen den Silberatomen zusammengehalten wird, sowie einem $[NiO_2^-]_\infty$ -Polyanion, dessen konstituierenden Ionen durch ionisch-kovalente Bindungen miteinander verknüpft werden. Diese beiden Polyionen werden durch Bindungen miteinander verknüpft, die ihrerseits vorwiegend ionischen Charakter haben.

3.3.5 Physikalische Eigenschaften

Die ungewöhnlichen strukturellen Eigenschaften der Verbindung finden ihren Ausdruck in einem komplexen magnetischen Verhalten (Abbildung 3.36). Bei 56 K wird ein antiferromagnetischer Übergang beobachtet, der ähnlich wie in $AgNiO_2$ auf eine antiferromagnetische Ordnung der Spins in den NiO_2 -Schichten zurückgeführt wird. Zwischen 56 K und 245 K findet man Curie-Weiss-Verhalten. Das magnetische Moment ist mit $1,95 \mu_B$ nur geringfügig höher, als man es für ein einzelnes ungepaartes Elektron ($1,73 \mu_B$) erwarten würde. Oberhalb von 280 K beobachtet man einen Übergang in einen zweiten Curie-Weiss-paramagnetischen Bereich, hier liegt das magnetische Moment bei $1,77 \mu_B$, wie man es für dreiwertiges Nickel im low-spin Zustand erwarten würde. Pro Formeleinheit sind in Ag_2NiO_2 zwei ungepaarte Elektronen vorhanden. Eines davon ist am Nickel lokalisiert und trägt dementsprechend zum temperaturabhängigen Curie-Weiss-Paramagnetismus bei. Das zweite ungepaarte Elektron befindet sich in den metallischen Ag_2 -Schichten. Analog zu Ag_2F würde man hier einen temperaturunabhängigen paramagnetischen Beitrag zur Suszeptibilität erwarten.

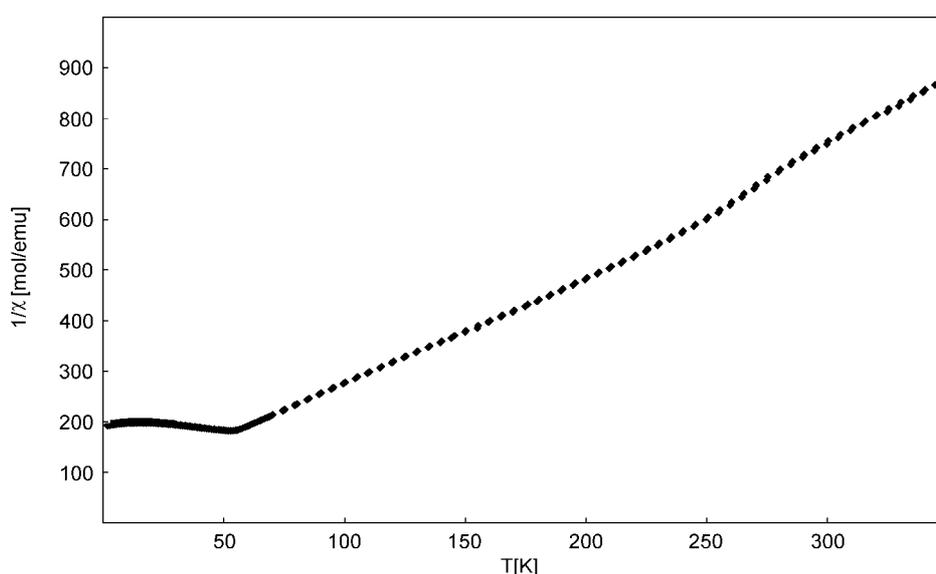


Abbildung 3.36: Temperaturabhängigkeit der inversen Suszeptibilität von Ag_2NiO_2

Der komplexe Verlauf der reziproken Suszeptibilität lässt sich möglicherweise auf einen Metall-Nichtmetall-Übergang innerhalb der NiO_2 -Schichten zurückführen. Unter der Annahme, dass die Zustände am Fermi-niveau analog zu Ag_2F Silberzustände sind, findet die metallische Leitfähigkeit bei tiefen Temperaturen hauptsächlich in Silberniveaus statt. Nimmt

man weiterhin an, dass sich Nickel und Sauerstoffzustände kurz unterhalb und oberhalb des Fermi-niveaus befinden, die durch eine nur geringfügige Bandlücke getrennt werden, so kann diese Bandlücke durch thermische Anregung überwunden werden. Infolgedessen kommt es oberhalb von 250 K zu einem Nichtmetall-Metall-Übergang; ein Teil der Ni-3d-Elektronen liefert nunmehr einen temperaturunabhängigen paramagnetischen Beitrag zum magnetischen Moment. Dadurch ließe sich auch das erniedrigte effektive magnetische Moment im Bereich oberhalb von 280 K erklären, da nunmehr ein etwas geringerer Anteil der Ni 3d-Elektronen an den Nickelatomen lokalisiert ist. Zwischen 60 und 245 K liegt das effektive magnetische Moment mit $1,95 \mu_B$ nicht höher als bei $AgNiO_2$, wo man je nach Darstellungsmethode $1,93$ oder $2,28 \mu_B$ findet ¹⁰². Derart leicht erhöhte Werte für das magnetische Moment können durch Bahnmomentbeiträge erklärt werden: Im Oktaederfeld der sechs benachbarten Sauerstoffatome befindet sich das Nickel im low-spin Zustand. Die Orbitalbesetzung ist $t_{2g}^6 e_g^1$: Unter Annahme der Russel-Saunders-Kopplung liegt als Grundzustand ein E_g Zustand vor, der selbst keinen Bahnmomentbeitrag liefert. Der erste angeregte Zustand, ein T_{1g} Zustand, liefert einen Bahnmomentbeitrag, der zur Erklärung des erhöhten magnetischen Momentes herangezogen werden kann. Allerdings ist das Bahnmoment nicht dazu geeignet, zu erklären, warum bei tiefen Temperaturen ein höheres magnetisches Moment vorliegt als bei hohen, da der Grundzustand selbst keinen Bahnmomentbeitrag liefert.

Von Interesse ist auch die magnetische Überstruktur unterhalb der Neéltemperatur. Die Nickelatome sind in Form von hexagonalen Schichten angeordnet. Jedes Nickelatom hat sechs weitere Nickelatome als direkte Nachbarn. Dadurch ist es geometrisch unmöglich, dass die Spins aller beteiligten benachbarten Nickelatome zueinander antiparallel geordnet sind. Man spricht von einem magnetisch frustrierten System. Eine plausible, energetisch günstige Spinordnung erhält man, indem man zunächst ein Dreieck benachbarter Nickelatome in einer Schicht betrachtet ¹⁰³. Zwei der Atome ordnet man antiferromagnetisch zueinander an, das eine mit positivem Spin senkrecht zur Ebene, das zweite mit negativem Spin senkrecht zur Ebene. Zur Vermeidung einer direkten, und energetisch ungünstigen ferromagnetischen Wechselwirkung ist der Spin des dritten Atoms in der Ebene polarisiert. Auf diese Weise gelangt man auf die in Abbildung 3.37 dargestellte Anordnung.

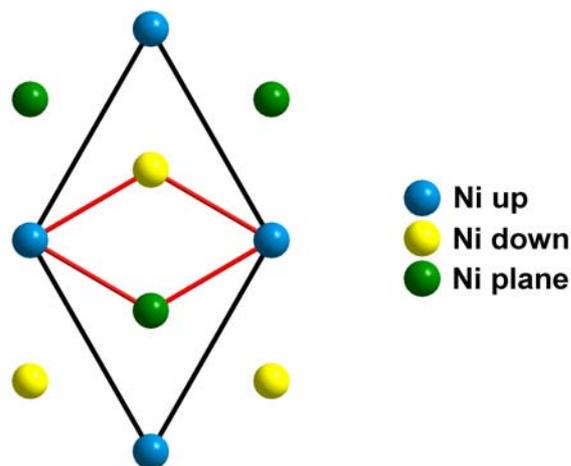


Abbildung 3.37: Spinordnung in einer $[NiO_2]$ -Schicht von Ag_2NiO_2 unter Voraussetzung des Isingmodells für einen trigonalen, frustrierten Antiferromagneten

Im Falle einer derartigen Spinordnung ist jeweils ein Drittel aller Spinmomente $+1/2$ bzw. $-1/2$, der Nettoeffekt ist antiferromagnetisch. Die in der Ebene polarisierten Spinmomente können zunächst als ungeordnet betrachtet werden.

Durch die magnetische Überstruktur gehen mehrere Symmetrieelemente der Originalzelle verloren, darunter auch die dreizählige Drehachse. Auf diese Weise gelangt man zu einer erheblich kleineren monoklinen Zelle in der Raumgruppe *C 1 2 1* (Nr. 5) mit der in Tab. 3.5 dargestellten Aufstellung..

Tabelle 3.5: Kristallographische Daten der nach dem Isingmodell vermuteten magnetischen Überstruktur von Ag₂NiO₂

Raumgruppe	<i>C 1 2 1</i> (no. 5)				
Gitterparameter (Å)	<i>a</i> = 5,0688				
	<i>b</i> = 8,7794				
	<i>c</i> = 8,2054				
	β = 101,88				
Volumen (Å ³)	357,33				
Formeleinheiten pro Elementarzelle	6				
Atom:	Ox.:	Wyck.:	x:	y:	z:
Ni up	+3	2 <i>a</i>	0	0	0
Ni down	+3	2 <i>a</i>	1/2	1/6	0
Ni plane	+3	2 <i>a</i>	1/2	5/6	0
Ag1	+½	4 <i>c</i>	0,78601	0	0,35803
Ag2	-½	4 <i>c</i>	0,28601	1/6	0,35803
Ag3	-½	4 <i>c</i>	0,28601	5/6	0,35803
O1	-2	4 <i>c</i>	0,12390	0	0,87170
O2	-2	4 <i>c</i>	0,12390	1/6	0,87170
O3	-2	4 <i>c</i>	0,12390	5/6	0,87170

Abbildung 3.38 zeigt eine Elementarzelle von Ag₂NiO₂ in dieser Aufstellung:

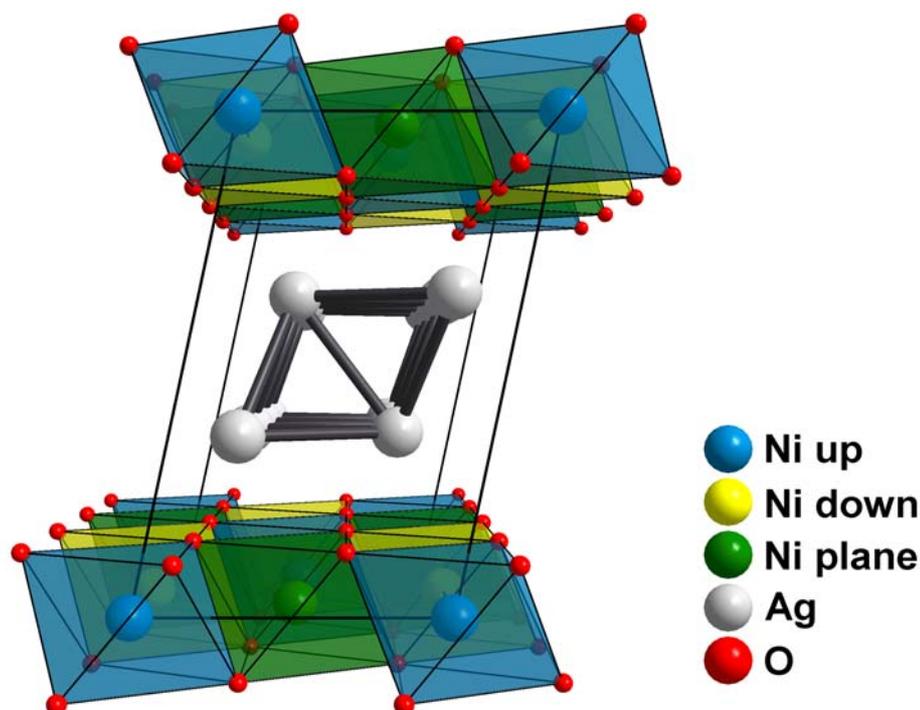


Abbildung 3.38: Elementarzelle von Ag₂NiO₂ unter Berücksichtigung der magnetischen Überstruktur

Abbildung 3.39 gibt das entsprechende theoretische Neutronenpulverdiffraktogramm für ein magnetisches Moment von einem Bohrschen Magneton pro Atom wieder. Auffällig ist die überraschend geringe Intensität der zu erwartenden, magnetischen Überstrukture reflexe.

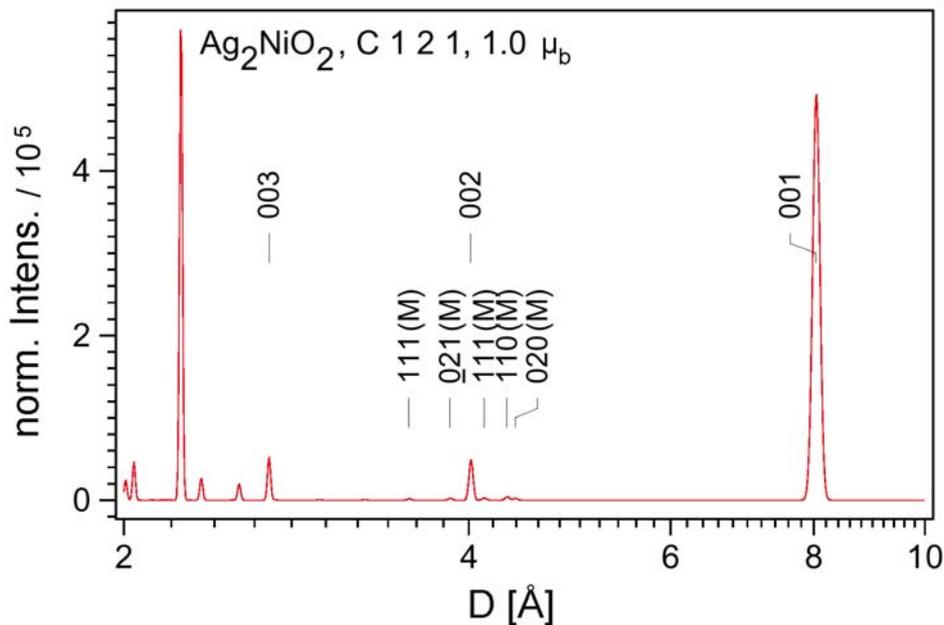


Abbildung 3.39: Berechnetes Neutronenbeugungsdiagramm mit magnetischer Überstruktur

Der stärkste magnetische Reflex ist bei $D = 4,35 \text{ \AA}$ zu erwarten und ist etwa um den Faktor 25 geringer als der $(0\ 0\ 2)$ Reflex. Vergleicht man in Abbildung 3.40 die Neutronenpulverdiffraktogramme oberhalb und unterhalb der Néeltemperatur, so findet sich tatsächlich in der Tieftemperaturneutronenbeugungsmessung ein zusätzlicher Reflex, der mit diesem Reflex übereinstimmt:

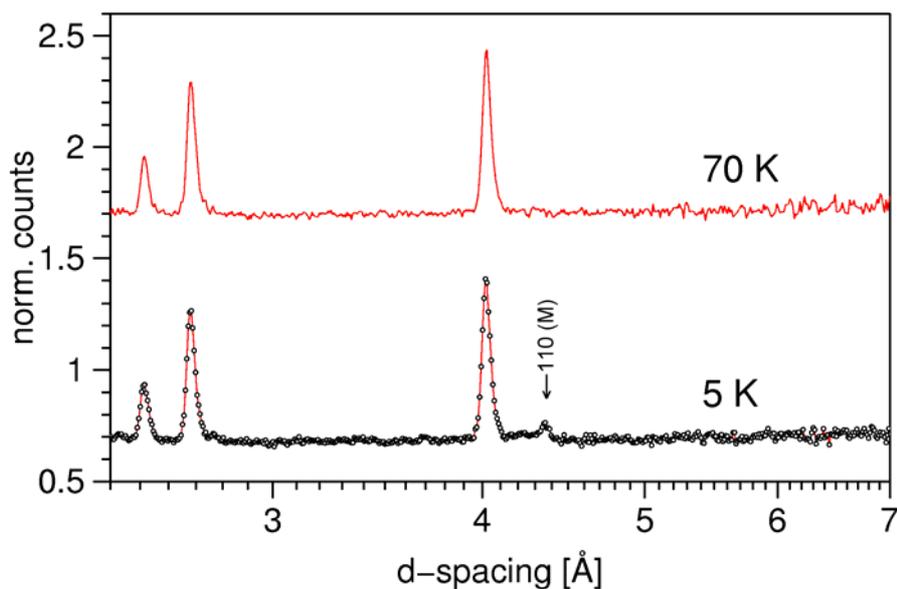


Abbildung 3.40: Neutronenpulverdiffraktogramme (ROTAX, ISIS) von Ag_2NiO_2 bei 70 K und 5 K mit magnetischem Überstrukture reflex

Abbildung 3.41 zeigt den Abfall des zusätzlichen Reflexes mit steigender Temperatur. Er verschwindet zwischen 40 und 60 K, so dass ein Zusammenhang mit der Néeltemperatur von 56 K als nachgewiesen gelten kann.

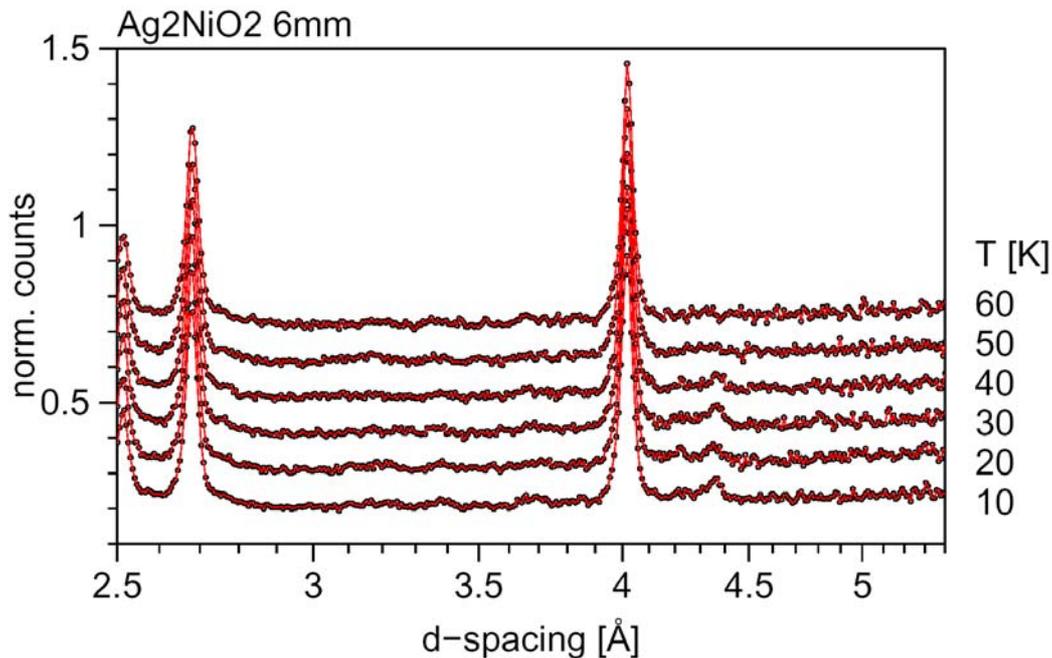


Abb. 3.41: Temperaturabhängigkeit des magnetischen Überstrukturreflexes von Ag_2NiO_2 , Messungen am ROTAX, ISIS

Dieses Ergebnis ist insofern von besonderer Bedeutung als der Grundzustand triangularer, frustrierter Antiferromagneten Gegenstand von wissenschaftlichen Diskussionen ist. Als mögliche Grundzustände kommen das Isingmodell eines triangularen, frustrierten Antiferromagneten, ein Spin-Glas-Zustand mit kurzreichweitiger statischer Spinordnung oder aber der von Andersen vorgeschlagene RVB-Zustand mit kurzreichweitiger, fluktuierender Spinordnung in Frage. Das Isingmodell eines triangularen, frustrierten Antiferromagneten konnte hier erstmals als der Grundzustand eines realen Antiferromagneten nachgewiesen werden.

Die elektrischen Transporteigenschaften von Ag_2NiO_2 wurden an Tabletten von 9 mm Durchmesser und 1 mm Stärke, die unter einem Druck von 770 MPa gepresst und 10 Stunden lang bei 573 K im Sauerstoffstrom gesintert wurden, nach der Vier-Punkte-Methode bestimmt. Sowohl $AgNiO_2$ als auch das Silbersubfluorid Ag_2F sind metallische Leiter. Unterhalb von 0,66 K wird Ag_2F supraleitend. Auch die neue Verbindung Ag_2NiO_2 , die Eigenschaften beider Verbindungen miteinander vereint, ist erwartungsgemäß über den gesamten betrachteten Temperaturbereich ein metallischer Leiter, wie in Abbildung 3.42 gezeigt wird.

Bei Raumtemperatur liegt der Widerstand bei 1,2 m Ω und nimmt mit fallender Temperatur monoton ab. Der magnetische Übergang zum Antiferromagneten bei 56 K macht sich durch einen stärkeren Abfall des Widerstandes bei dieser Temperatur bemerkbar. Bis zu 5 K konnte keine Supraleitung nachgewiesen werden. Als mögliche Erklärung für den zweiten magnetischen Übergang bei 260 K wurde ein Metall-Nichtmetallübergang innerhalb der NiO_2 -Schichten postuliert. Dies sollte oberhalb von 260 K entweder zu einer Verringerung des Widerstandes, oder aber einen deutlich geringeren Anstieg des Widerstandes mit der Temperatur zur Folge haben. Ein derartiges Abflachen der Widerstandscharakteristik ist in Abbildung 3.42 nur andeutungsweise zu erkennen.

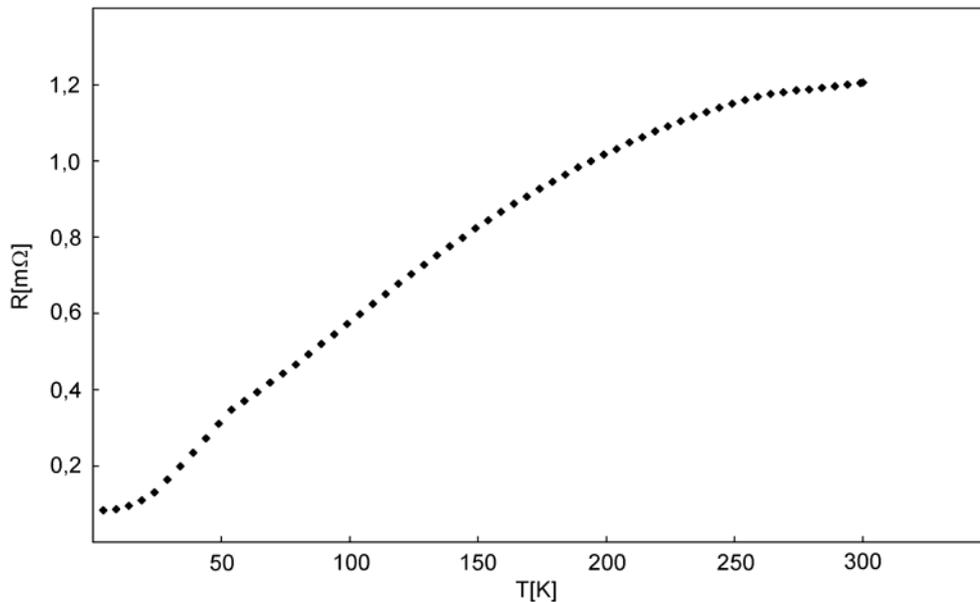


Abbildung 3.42: Widerstandscharakteristik von Ag_2NiO_2

Aussagekräftiger ist hier die erste Ableitung des Widerstandes nach der Temperatur, wie sie in Abbildung 3.43 dargestellt ist:

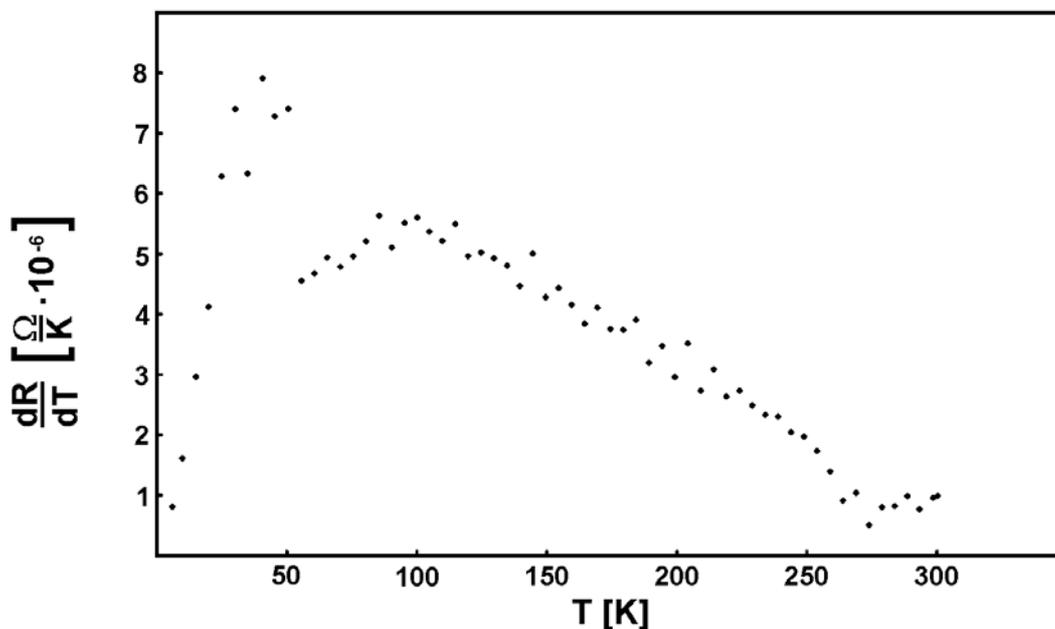


Abbildung 3.43: Ableitung des Widerstands von Ag_2NiO_2 nach der Temperatur

Sowohl der bei 56 K beobachtete Übergang vom Antiferromagnetismus zum Curie-Weiss-Paramagnetismus als auch der zweite magnetische Übergang bei 260 K gehen mit einem Minimum des Anstieges des elektrischen Widerstandes der Verbindung mit der Temperatur einher. Beide magnetische Übergänge finden sich also in der Leitfähigkeitscharakteristik wieder.

Zur Bestimmung der thermischen Eigenschaften wurde die DTA/TG von Ag_2NiO_2 zwischen 293 und 1073 K im Argonstrom bei einer Aufheizrate von 5K pro Minute aufgenommen. Der Verlauf sowohl der Thermogravimetrie als auch der Differentialthermoanalyse ist in Abbildung 3.44 dargestellt. Ag_2NiO_2 ist in Argon bis 832 K stabil, und zersetzt sich oberhalb

dieser Temperatur unter endothermer Wärmetönung zu Silber, Nickeloxid und Sauerstoff wie die in Abbildung 3.44 gezeigte Thermoanalyse zeigt. Der feste Rückstand wurde mit Röntgenpulverdiffraktometrie als ein Gemisch aus Silber und Nickeloxid identifiziert.

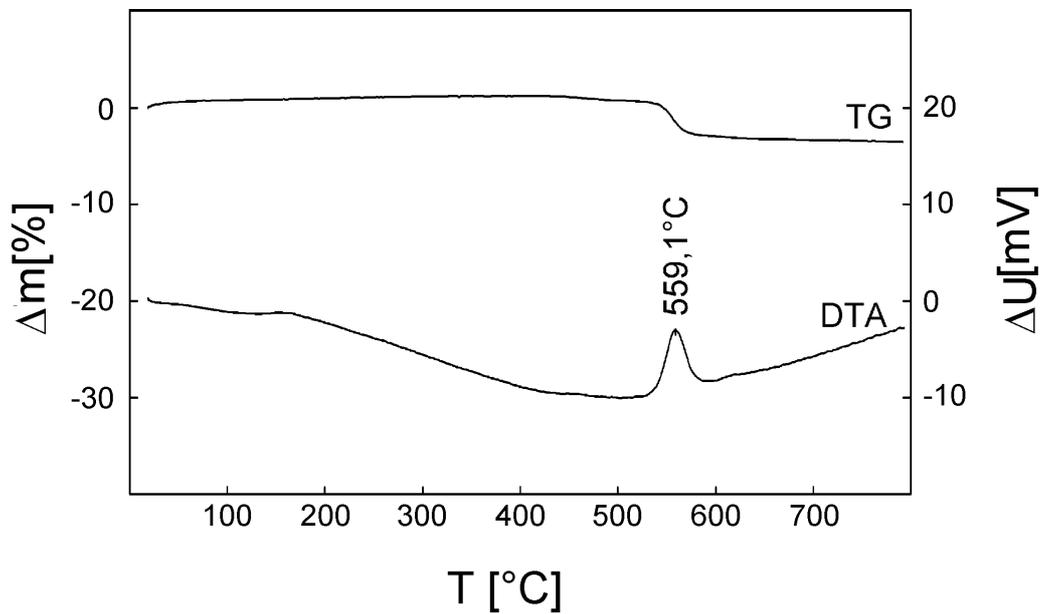


Abbildung 3.44: Differentialthermoanalyse und Thermogravimetrie an Ag_2NiO_2

Diese Zersetzungstemperatur ist für ein Silberoxid verhältnismäßig hoch: Ag_2O selbst zersetzt sich bereits bei 573 K. Auch dies kann als ein Hinweis für die ungewöhnlichen Bindungsverhältnisse der neuen Verbindung gesehen werden.

3.3.6 Untersuchungen zur Bandstruktur und den Bindungsverhältnissen

Sowohl die Kristallstruktur als auch die physikalischen Eigenschaften von Ag₂NiO₂ deuten darauf hin, dass in dieser Verbindung ungewöhnliche Bindungsverhältnisse vorliegen, die eine genauere Untersuchung lohnend machen.

Eine Möglichkeit detaillierte Einblicke in die Valenzzustände einer Verbindung zu bekommen stellt die XANES-Spektroskopie insbesondere in Verbindung mit der quantenchemischen FEFF8-Methode, die neben der Simulation der XANES-Spektren auch die Berechnung der elektronischen Bandstruktur ermöglicht (siehe Kapitel 2.2.9.4). An Ag₂NiO₂ wurden sowohl Messungen an der Nickel K-Kante als auch an der Silber L₃-Kante vorgenommen. Die Probensubstanz wurde zerkleinert und auf Trägern aus selbstklebender Kaptonfolie aufgetragen. Die Absorption wurde anschließend im Feinvakuum der Probenkammer bestimmt. Zum näheren Vergleich wurden im Fall des Silbers Messungen an Ag, Ag₂O sowie den Delafossiten AgFeO₂, AgCoO₂ und AgNiO₂ vorgenommen und im Falle des Nickels an elementarem Ni, NiO und AgNiO₂.

Bereits auf den ersten Blick zeigt das Ni K-XANES Spektrum von Ag₂NiO₂ eine deutliche Verschiebung der Lage der Absorptionskante zu höheren Energien im Vergleich zu den Referenzsubstanzen Ni und NiO (Abbildung 3.45).

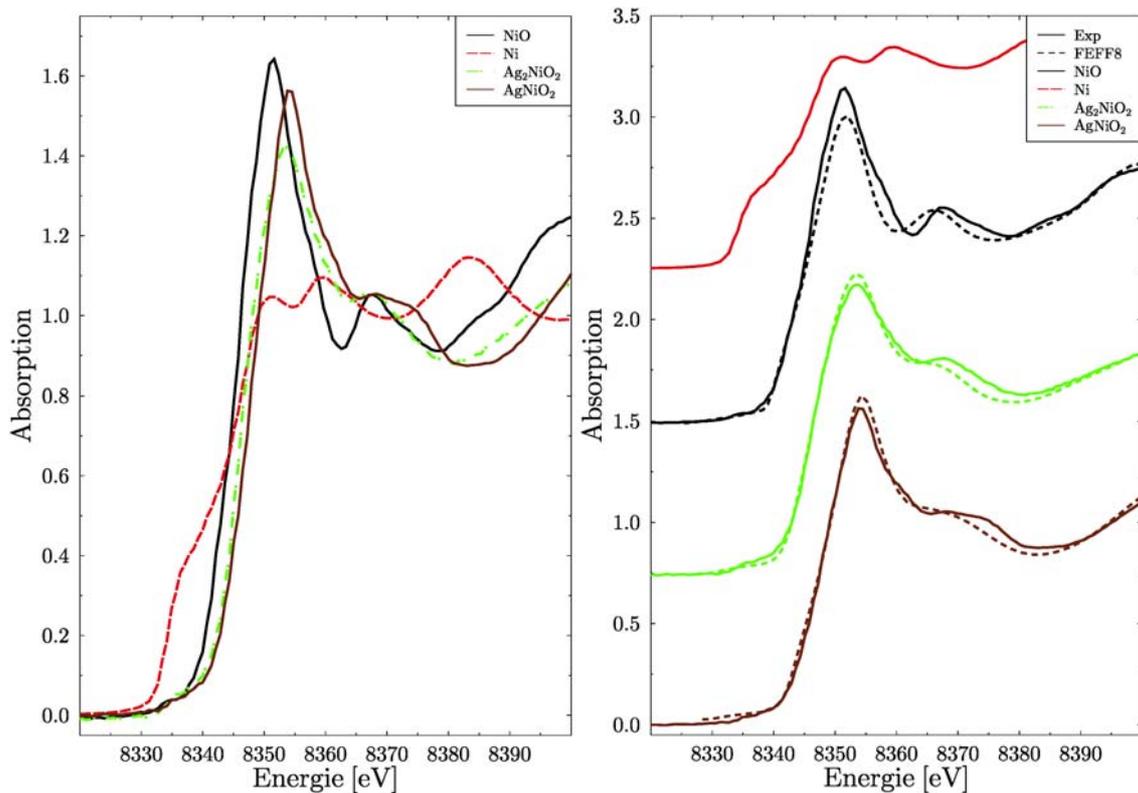


Abbildung 3.45: links die Ni K-XANES-Spektren von Ag₂NiO₂, AgNiO₂, NiO und Ni rechts: Vergleich der gemessenen Spektren mit den nach der FEFF8-Methode berechneten

Dies entspricht der häufig beobachteten Tendenz, dass die Absorptionskanten von Übergangsmetallverbindungen mit steigender Oxidationszahl zu höheren Energien verschoben werden. Vergleicht man mit dem XANES-Spektrum von AgNiO₂, so stellt man fest, dass die ersten Wendepunkte in den Absorptionsspektren beider Substanzen gut

miteinander übereinstimmen. Bereits dies ist ein gutes Indiz dafür, dass Nickel auch in Ag_2NiO_2 Verbindung als dreiwertig betrachtet werden kann.

Vergleicht man die gemessenen Spektren mit den theoretisch nach der FEFF8-Methode berechneten, so erkennt man eine gute Übereinstimmung zwischen den berechneten und den gemessenen Spektren. Man kann also auch die der Berechnung zugrundeliegende l-projizierte Zustandsdichte als Grundlage weiterer Diskussionen verwenden. In die Analyse der l-projizierten Zustandsdichte gehen zwei Aspekte ein. Gleiche oder ähnliche Koordinationsgeometrien führen zu vergleichbaren Hybridisierungen bei der Ausbildung der Molekülorbitale, was in vergleichbaren Strukturen in der Zustandsdichte seinen Ausdruck findet. Weiterhin ist die Lage der Strukturen auf der Energieskala ein Indiz für die formale Wertigkeit des betrachteten Atoms, wobei gegebenenfalls Unterschiede in den Fermienergien der betrachteten Verbindungen berücksichtigt werden müssen.

In Abbildung 3.46 werden auf der linken Seite die l-projizierten Zustandsdichten von Ag_2NiO_2 mit denjenigen von NiO verglichen. In der p-Zustandsdichte von Nickel findet man für NiO (braune Kurve) eine dreistufige Treppenstruktur im unbesetzten Bereich oberhalb der Fermienergie. Für Ag_2NiO_2 (grüne Kurve) ist diese Struktur zu deutlich höheren Energien verschoben. Wendet man sich nun dem Vergleich mit $AgNiO_2$ auf der rechten Seite des Diagramms zu, so findet man dieses Motiv auch im berechneten $AgNiO_2$ und zwar in derselben energetischen Lage wie im Falle von Ag_2NiO_2 . Allerdings ist sie bei $AgNiO_2$ deutlich weniger scharf als bei Ag_2NiO_2 .

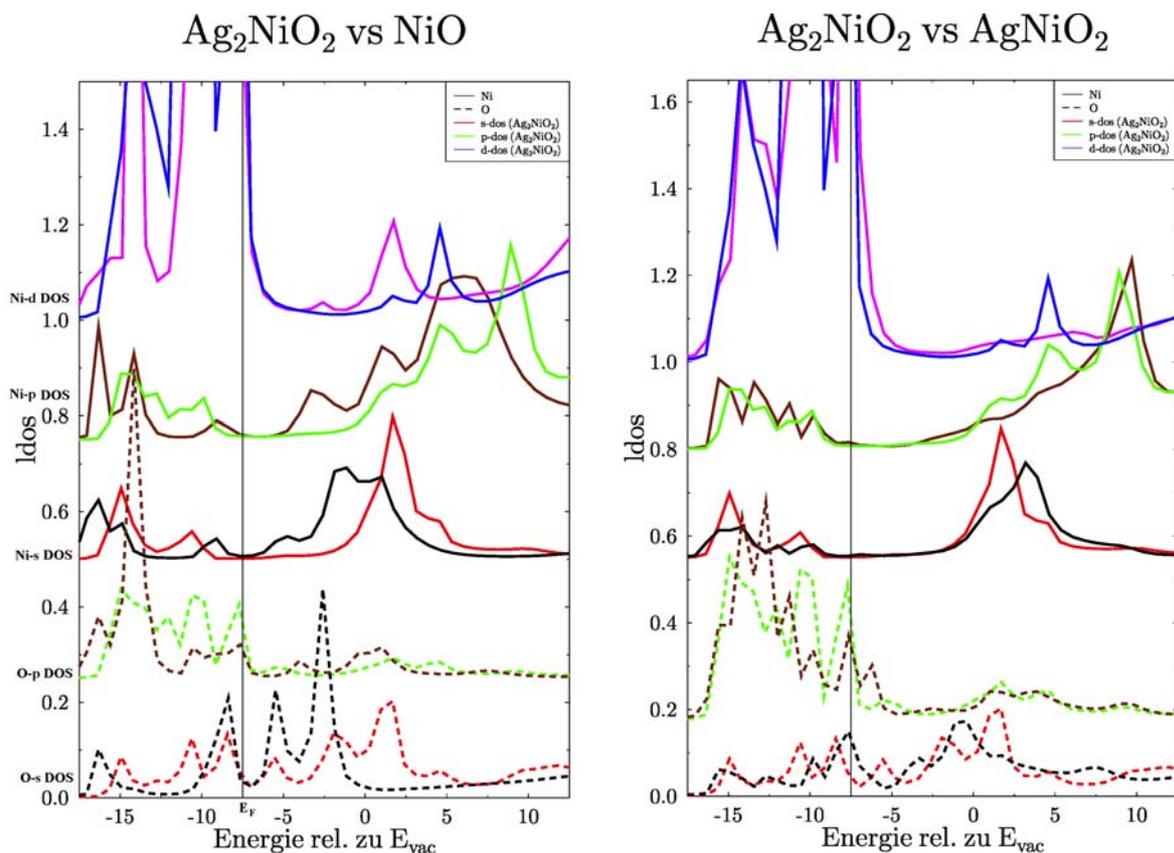
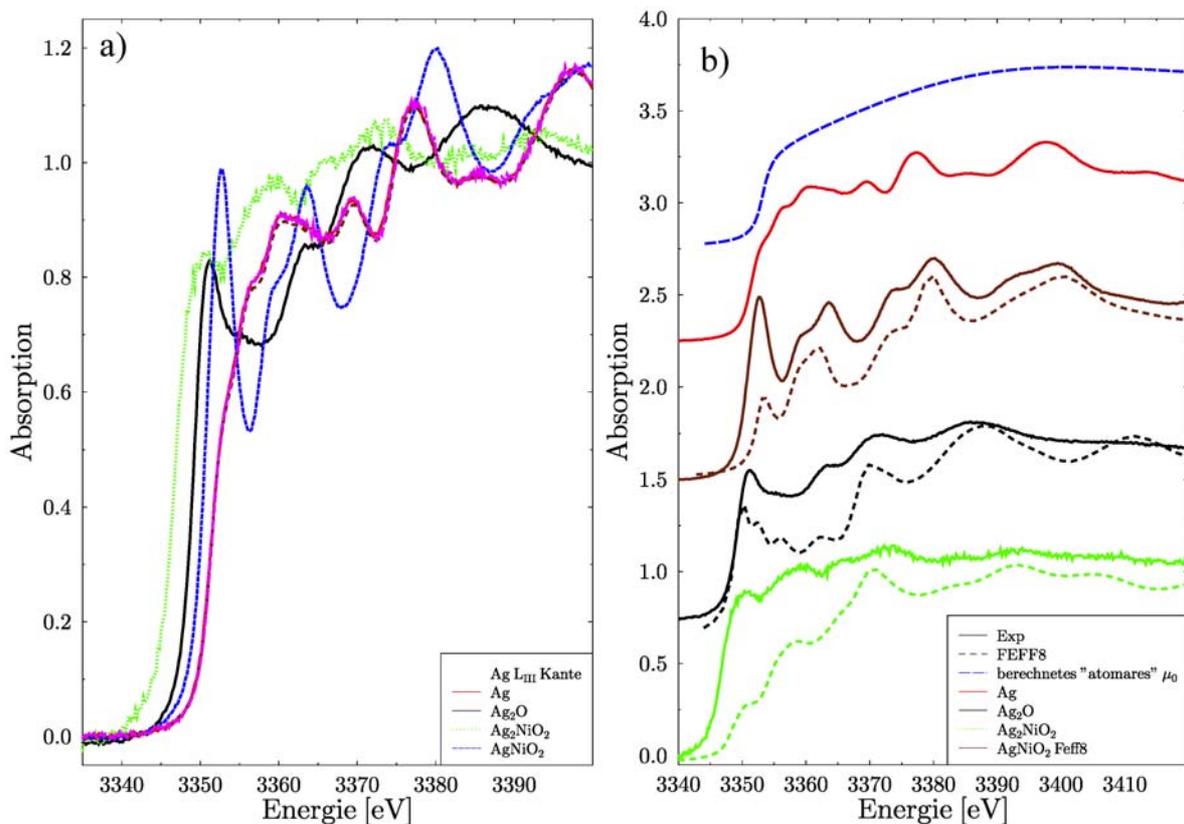


Abbildung 3.46: links l-DOS von Ag_2NiO_2 gegen NiO
rechts l-DOS von Ag_2NiO_2 und $AgNiO_2$

Ähnliche Tendenzen lassen sich auch in den s-Zustandsdichten finden. Somit unterstützt auch die Analyse der l-projizierten Zustandsdichten die Vermutung, dass Nickel in Ag_2NiO_2 als dreiwertig zu betrachten ist. Weiterhin fällt auf, dass die Zustandsdichte am Fermienergie von

Nickel dominiert wird. Das heißt, dass nach diesen Rechnungen Nickel der Träger der Leitfähigkeit ist und nicht, wie intuitiv vermutet, das suboxidische Silber.

Die Messungen an der Ag L₃-Kante liefern insofern ein zunächst überraschendes Resultat, als diese Kanten in Vergleich zur Kantenlage des elementaren Silbers allesamt eine Verschiebung der Kantenlage zu niedrigeren Energien aufweisen. Dieser Effekt ist allerdings aus der Literatur hinlänglich bekannt und mit der spezifischen s¹d¹⁰ Grundzustandskonfiguration des elementaren Silbers korreliert. Man kann der Abbildung 3.47 entnehmen, dass die Lage der Absorptionskante in diesem Fall nicht eindeutig von der Oxidationsstufe abhängt. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass ein Vorkantenpeak ganz oder teilweise mit der eigentlichen Absorptionskante überlappt. Dadurch wird für Silber die Kantenlage zu einem nicht anwendbaren Kriterium für die Oxidationsstufe. Eine in der Literatur beschriebene Faustregel besteht darin, die Fläche unter dem Vorkantenpeak zu bestimmen und hieraus auf die formale Wertigkeit des Silbers in der Verbindung zurückzuschließen (vergleiche Kapitel 2.2.8.3). Einen genaueren Einblick ermöglicht auch hier die Simulation der Spektren durch FEFF8-Rechnungen und darauf basierende Betrachtungen der l-projizierten Zustandsdichte. Vergleicht man zunächst berechnete und gemessene AgL₃ Kanten XANES-Spektren so fällt ins Auge, dass zwar der qualitative Verlauf der Spektren sehr gut wiedergegeben wird, nicht aber der quantitative. Die Ursache für diese Diskrepanz liegt bereits in der Berechnung des atomaren Wirkungsquerschnittes μ_0 des Silbers (blaue gestrichelte Linie). Anstelle des üblichen tangentialen Verlaufes zeigt er einen deutlichen Abfall in der Nähe der Absorptionskante. Die Ursache für den Unterschied zwischen berechneten und gemessenen Spektren liegt somit nicht in der berechneten Bandstruktur, do dass die den Spektren zugrundeliegenden l-projizierten Zustandsdichten zur Diskussion verwenden.



Eine zur lokalen Koordinationsgeometrie des Silbers isomorphe Struktur hat das Silbersubfluorid Ag₂F. Vergleicht man die berechneten l-projizierten Silberzustandsdichten

von Ag₂NiO₂ mit AgNiO₂ einerseits und Ag₂F andererseits, so fällt sofort die gute Übereinstimmung (Abbildung 3.48) in Form und Energieposition mit Ag₂F auf:

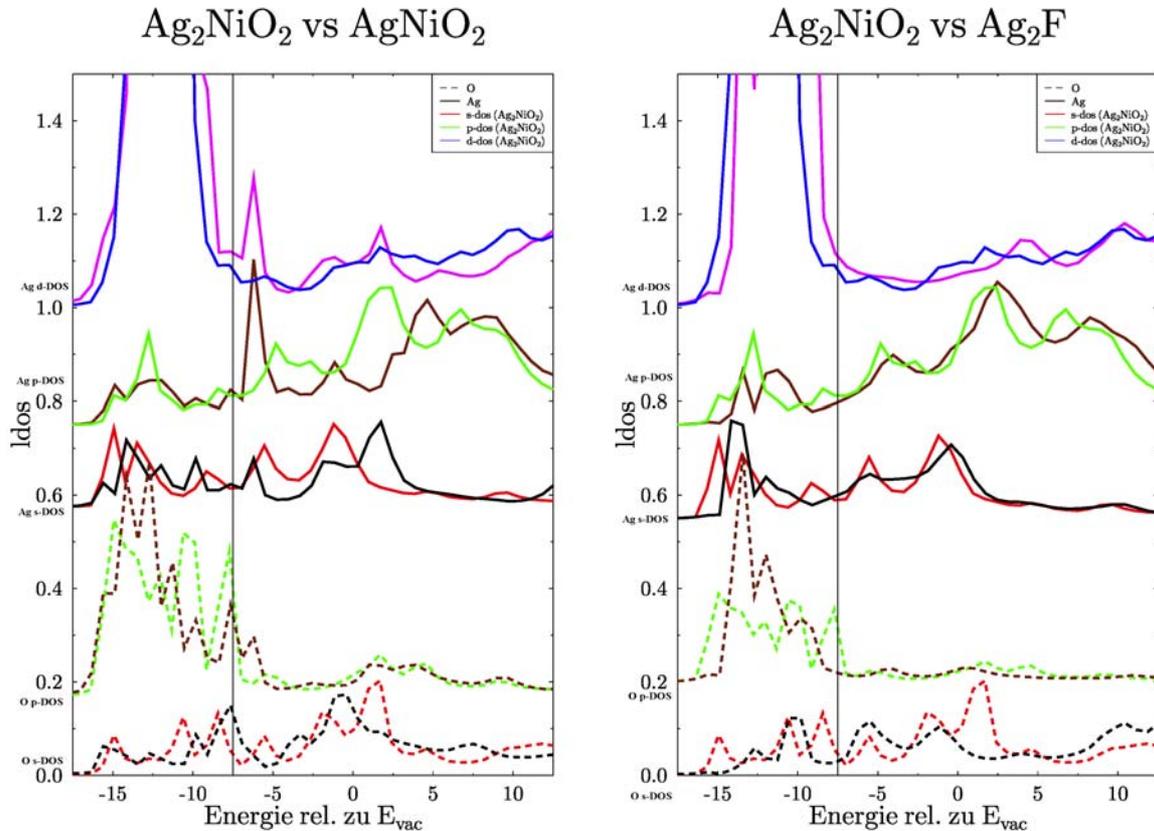


Abbildung 3.48: Vergleich der I-DOS von AgNiO₂, Ag₂NiO₂ und Ag₂F

Neben dem reinen Ladungsbilanzargument, das beim Vorliegen von dreiwertigem Nickel nur noch eine formale Wertigkeit von ½ am Silber zulässt spricht also auch der Vergleich der Zustandsdichten für diese formale Wertigkeit und für einen suboxidischen Bindungscharakter der Ag₂-Schichten.

Mit Hilfe der FEFF8-Methode kann man noch detailliertere Einblicke in die elektronische Struktur der Verbindung gewinnen. In Tabelle 3.6 sind die partiellen Ladungsdichteverchiebungen in Elektronen pro Atom für Ag₂NiO₂ sowie die Referenzsubstanzen zusammengestellt:

Tabelle 3.6: Ladungsdichteverchiebungen von Ag₂NiO₂ und diversen Referenzen:

	Ag ₂ NiO ₂	AgNiO ₂	NiO	Ag ₂ F	Ag ₃ O	Ag ₂ O
Δe _{tot} Ni	-0,07	-0,13	-0,16			
Δe _{tot} Ag	-0,25	-0,34		-0,12	-0,13	-0,14
Δe _{tot} O (F)	+0,29	+0,23	+0,16	+0,24	+0,40	+0,28
Δe _s Ni	-1,56	-1,46	-1,52			
Δe _s Ag	-0,42	-0,39		-0,36	-0,38	-0,33
Δe _s O(F)	-0,14	-0,15	-0,16	-0,01	-0,09	-0,11
Δe _p Ni	+0,80	+0,80	+0,64			
Δe _p Ag	+0,55	+0,58		+0,56	+0,63	+0,67
Δe _p O(F)	+0,34	+0,29	+0,23	+0,20	+0,41	+0,29
Δe _d Ni	+0,59	+0,54	+0,72			
Δe _d Ag	-0,38	-0,54		-0,31	-0,38	-0,45
Δe _d O(F)	+0,09	+0,09	+0,09	+0,04	+0,09	+0,10
E _F [eV]	-7,44	-7,66	-8,30	-6,08	-6,44	-5,73

Bezugspunkt für die Fermienergie ist die Vakuumenergie. Der Tabelle sind folgende Trends zu entnehmen.

1. Die Betrachtung der Nickelzustandsbesetzung zeigt:
 - a) Zunehmender Silbergehalt der Verbindungen reduziert den Gesamtladungstransfer vom Nickel zum Sauerstoff
 - b) Die Nickel 3d-Bandbesetzung ist beim Ag₂NiO₂ im Vergleich zum zweiwertigen Nickel in NiO erniedrigt.
 - c) Die Nickel 3d-Bandbesetzung in Ag₂NiO₂ stimmt gut mit derjenigen in AgNiO₂ überein.
 - d) Die 3p-Bandbesetzung des Nickels ist sowohl in Ag₂NiO₂ als auch in AgNiO₂ gegenüber derjenigen in NiO erhöht.

2. Die Betrachtung der Sauerstoffzustandsbesetzung zeigt:
 - a) In Gegenwart von Silber wird der Gesamtladungstransfer zum Sauerstoff erhöht

3. Die Betrachtung der Zustandsbesetzung am Silber zeigt:
 - a) Die Änderung der formalen Oxidationszahl wirkt sich nur schwach auf den Gesamtladungstransfer des Silbers aus. Erheblich stärker ist die Abhängigkeit von der Anwesenheit von Nickel im System.
 - b) Die d-Zustandsbesetzung des Silbers folgt der formalen Oxidationszahl, während die p-Zustandsbesetzung einen gegenläufigen Trend zeigt.

Sowohl die XANES-Messungen als auch die Rechnungen mit der FEFF8-Methode bestätigen die vermutete Zuordnung der formalen Oxidationsstufen. Wie erwartet, stimmt die elektronische Struktur bezüglich des Nickels sehr gut mit AgNiO₂ überein, während diejenige des Silbers gut mit Ag₂F übereinstimmt. Im Gegensatz zu Ag₂F, ist das Valenzband in Ag₂NiO₂ insbesondere an der Fermikante klar von Nickel- und Sauerstoffzustandsdichte dominiert. Dies widerspricht der ursprünglichen Vermutung, dass die metallische Leitung ausschließlich in den Silberlagen stattfindet. Nach den FEFF8-Rechnungen muss vielmehr davon ausgegangen werden, dass dies in den Nickel-Sauerstoff-Schichten stattfindet.

Bei der Beurteilung der FEFF8-Rechnungen muss beachtet werden, dass die Zustandsdichten aus einer Cluster-Rechnung auf einem Cluster von ca. 100 Atomen entstehen. Dies führt zu einer signifikanten Verbreiterung der elektronischen Strukturen im Vergleich zu anderen quantenchemischen Rechnungen. Der Vorteil der Methode liegt demgegenüber in ihrer engen Korrelation mit einem Experiment, der XANES-Spektroskopie.

Alternativ zur XANES-Spektroskopie bietet auch die Photoelektronenspektroskopie die Möglichkeit, einen direkten Einblick in die Elektronenstruktur von Materialien zu gewinnen. Im Gegensatz zu dieser handelt es sich jedoch um eine oberflächensensitive Methode (vgl. Kap.: 2.2.9). Für die Aufnahme von Photoelektronenspektren wurden Presslinge von 9 mm Durchmesser und 2-3 mm Stärke bei einem Druck von 770 MPa hergestellt. Ag₂NiO₂ wurde anschließend bei 300°C 10h lang im Sauerstoffstrom getempert, AgNiO₂ wurde 10h lang bei 300°C unter einem Sauerstoffdruck von 500 bar nachbehandelt. Der Anteil der Oberflächenkontaminationen wurde durch Abschleifen der Probenoberfläche im Ultrahochvakuum ($< 5 \cdot 10^{-10}$ mbar) der Probenpräparationskammer verringert. Dies wurde an der Sauerstoff 1s Bande überprüft (Abb. 3.49)

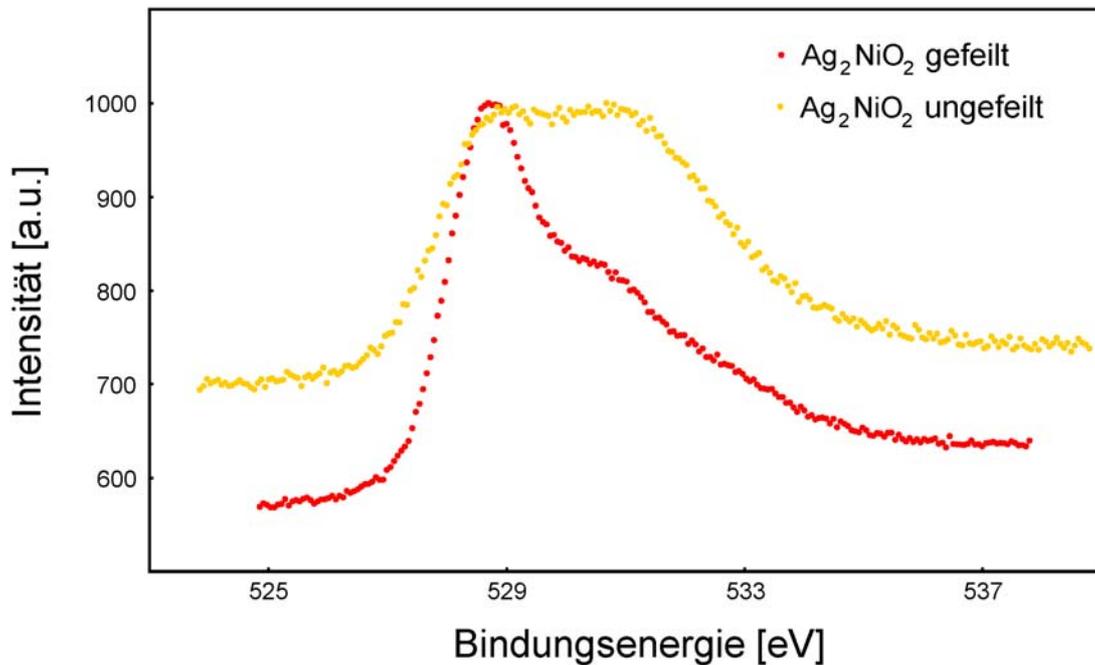


Abbildung 3.49: Sauerstoff 1s Bande von Ag_2NiO_2 vor und nach Abschleifen der Probenoberfläche

Nach dem Abschleifen der Oberfläche ist die Schulter, die auf Verunreinigungen wie Nickelcarbonat oder -Hydroxid zurückzuführen ist, deutlich reduziert. Das Übersichtsspektrum (Abbildung 3.50) spiegelt die chemische Zusammensetzung der Verbindung wieder.

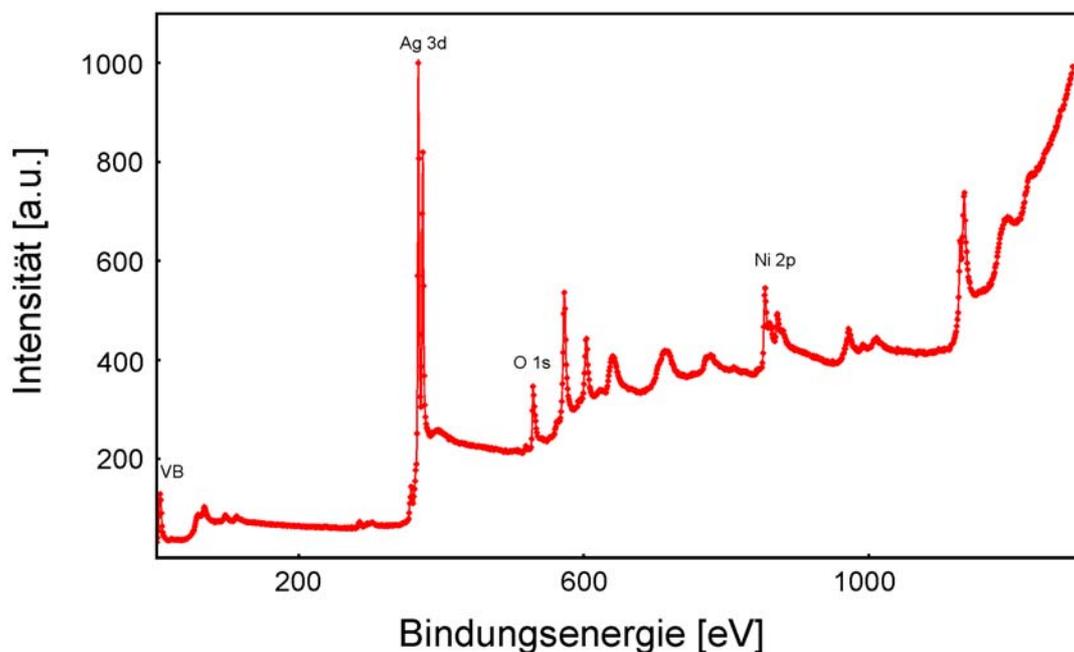


Abbildung 3.50: Übersichts-XP-Spektrum von Ag_2NiO_2

Das Photoelektronenspektrum ist allerdings nicht eine direkte Abbildung der Elektronenstruktur. Vielmehr muss berücksichtigt werden, dass Elektronen unterschiedlicher

Herkunft verschieden stark mit den eingestrahlenen Röntgen- oder UV-Quanten wechselwirken. Dies wird durch die tabellierten Wirkungsquerschnitte ¹⁰⁴ für den Photoionisationsprozess der verschiedenen Elektronen beschrieben.

1. Das Valenzband mit dem Fermi-niveau im Energiebereich von 0 bis 15 eV.
2. Das Sauerstoff 1s Band bei 530 eV, das zur Bestimmung der Sauberkeit der betrachteten Oberfläche herangezogen wurde.
3. Die Silber 3d Banden bei 365 bis 380 eV.
4. Die Nickel 2p Banden bei 850 bis 885 eV

Als Referenz wurden entsprechende Messungen an AgNiO₂ herangezogen. Um den Vergleich zu erleichtern wurden die Intensitäten jeweils auf einen Maximalwert von 1000 skaliert. Folgende Fragen sollten geklärt werden:

1. Die Oxidationsstufen von Silber und Nickel, respektive.
2. Energiebereiche, in denen die partiellen Zustandsdichten der Valenzelektronen der konstituierenden Atome auftreten.
3. Findet sich im Vergleich zu AgNiO₂ zusätzliche Elektronendichte am Fermi-niveau und welchen Elementen lässt sie sich zuordnen?

Abbildung 3.51 zeigt die Nickel 2p Banden von Ag₂NiO₂ und AgNiO₂ im Vergleich. Auffällig ist die Ähnlichkeit von Lage, Form und Struktur:

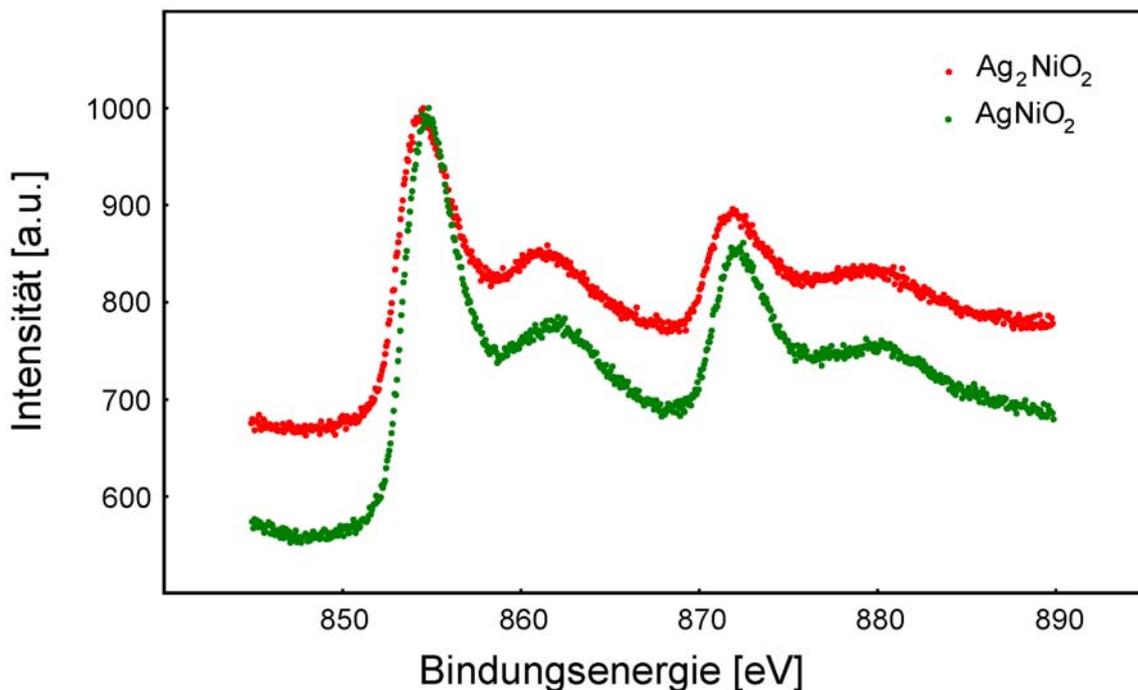


Abbildung 3.51: Ni 2p-Banden von Ag₂NiO₂ und AgNiO₂ im Vergleich

In beiden Fällen zerfällt die Ni 2p Bande in zwei Spin-Bahn-Komponenten, Ni 2p_{3/2} bzw. Ni 2p_{1/2}, mit je einer Hauptlinie und einer Satellitenlinie. Die Spektrenform, der Abstand zwischen Hauptlinie und Satellit, sowie deren Intensitätsverhältnisse wird durch Elektronenstrukturparameter bestimmt und ist für beide Verbindungen sehr ähnlich. Daraus lässt sich schließen, dass die Nickelelektronenzustände in beiden Verbindungen sehr ähnlich sind. Darüber hinaus ist eine ähnliche Spektrenform auch für andere oxidische Nickel 3

Verbindungen, speziell den Perovskiten $LnNiO_3$ ($Ln =$ Lanthanoid) ^{105, 106} beschrieben worden. Allerdings ist auch für zweiwertige Nickelverbindungen eine ähnliche Spektrenform bekannt.

Aufschluss über den Bindungszustand von Silber kann man aus dem Silber 3d Spektrum in Vergleich zu denjenigen von $AgNiO_2$ und elementarem Silber gewinnen (Abbildung 3.52).

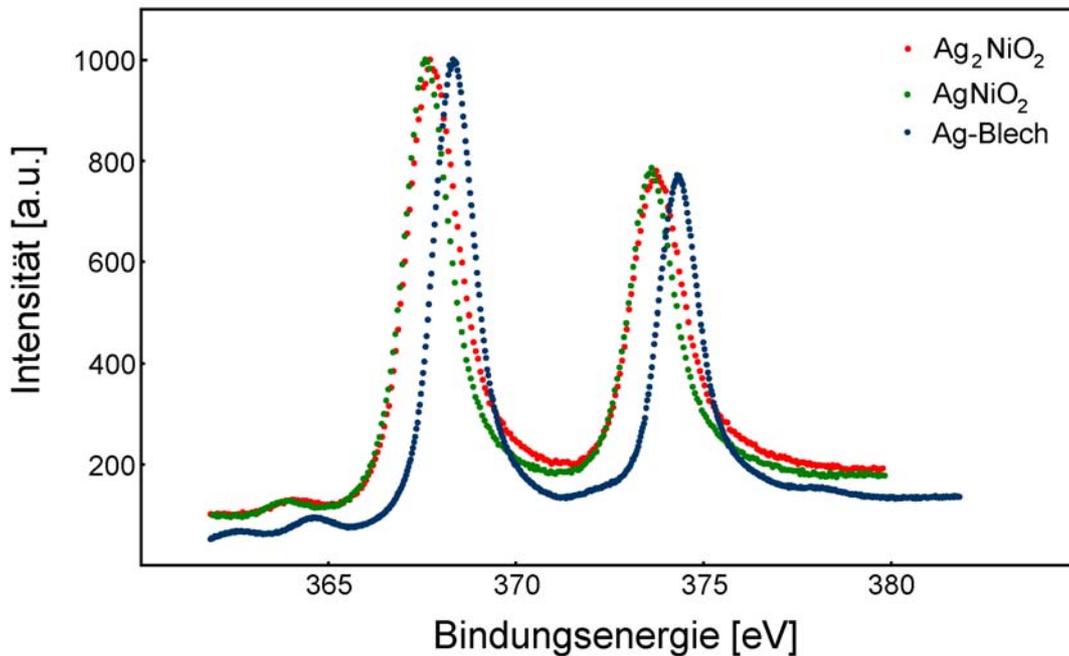


Abbildung 3.52: Ag 3d-Banden von Ag_2NiO_2 und $AgNiO_2$ und elementarem Silber im Vergleich

In beiden oxidischen Verbindungen findet man eine Verschiebung der Banden zu niedrigeren Bindungsenergien. Dies entspricht den Erwartungen, da eine entsprechender „inverser“ Trend auch aus den XANES-Messungen belegt ist. Im Falle von Ag_2NiO_2 findet sich ein leichter Trend zu höheren Energien, wie man es für ein suboxidisches Silber erwarten würde. Allerdings liegt die Bande sehr viel näher an derjenigen von $AgNiO_2$, als an derjenigen von elementarem Silber.

Die Intensitäten der Valenzbandspektren (Abb. 3.53 und Abb. 3.54) wurden auf die Ni 3d und O 2p-Banden normiert, da die zugrundeliegenden Zustandsdichten in beiden Verbindungen identisch sein muss. Die Photoionisationswirkungsquerschnitte zeigen, dass die XP-Valenzspektren beider Verbindungen (Abb.3.53) von Ag 4d-Elektronen dominiert werden. Der Vergleich der Spektren von $AgNiO_2$ (größerer Ni-Gehalt) und Ag_2NiO_2 zeigt, dass die Ag 4d Zustandsdichte zum Hauptpeak bei ca. 5 eV gehört, die Nickel 3d Zustände dagegen im Bereich kleinerer Bindungsenergien auftreten. Wie man in Abbildung 3.53 sieht, reichen diese in beiden Fällen an das Fermi-niveau heran, wenn sie nicht mit ihm überlappen.

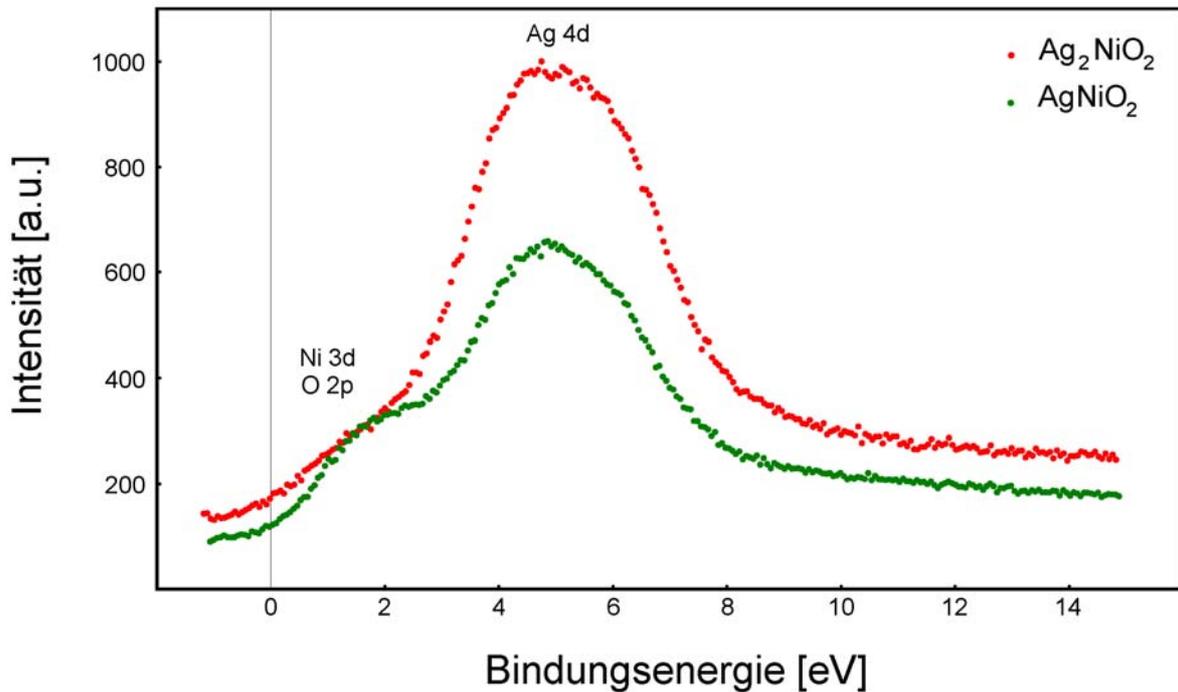


Abbildung 3.53: XP-Spektren von Ag_2NiO_2 und $AgNiO_2$ im Valenzbereich

Einen genaueren Einblick in den Valenzbereich gewinnt man mit ultravioletter Photoelektronenspektroskopie (Abb. 3.54):

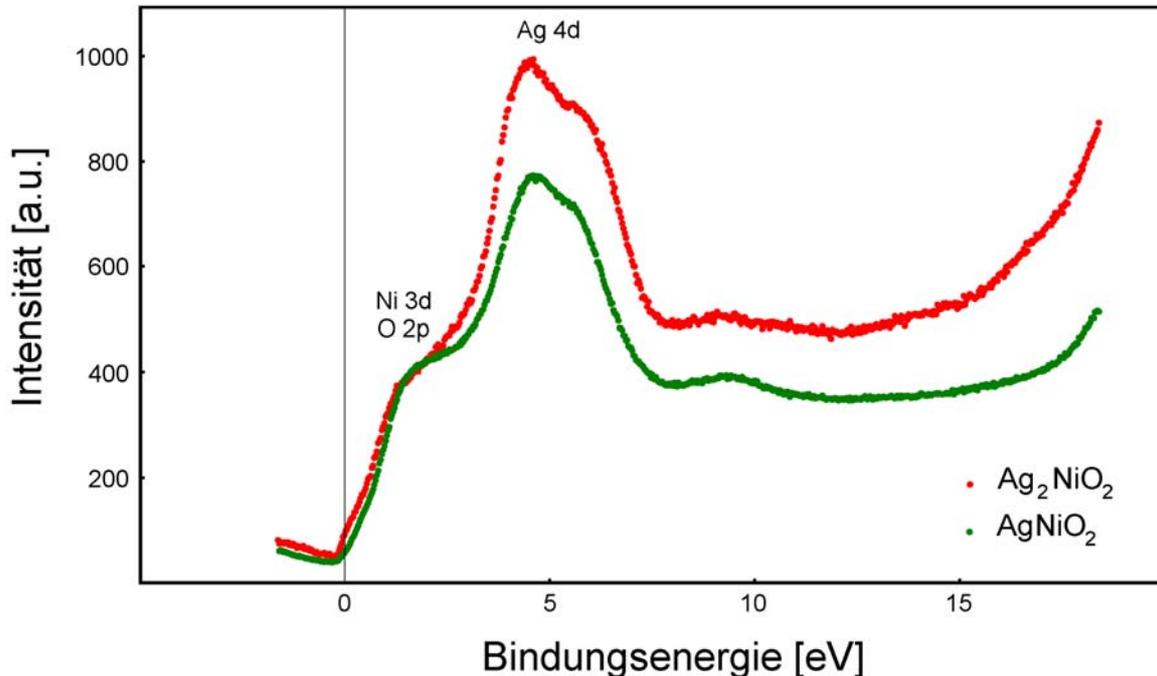


Abbildung 3.54: UP-Spektren von Ag_2NiO_2 und $AgNiO_2$ im Vergleich

Im Gegensatz zu den XP-Spektren werden sie im Bereich kleinerer Bindungsenergien nicht ausschließlich von den Nickel 3d-Zuständen sondern zusätzlich auch von den Sauerstoff 2p-Zuständen bestimmt. Die Valenzbandspektren belegen die große Ähnlichkeit der elektronischen Struktur beider Substanzen. Man kann sehr deutlich sehen, dass die Zustandsdichte zum Fermi-niveau hin abnimmt, jedoch in beiden Fällen am Fermi-niveau von

Null verschieden sind: Beide Verbindungen sind metallische Leiter, wie eine Ausschnittvergrößerung (Abbildung 3.55) zeigt:

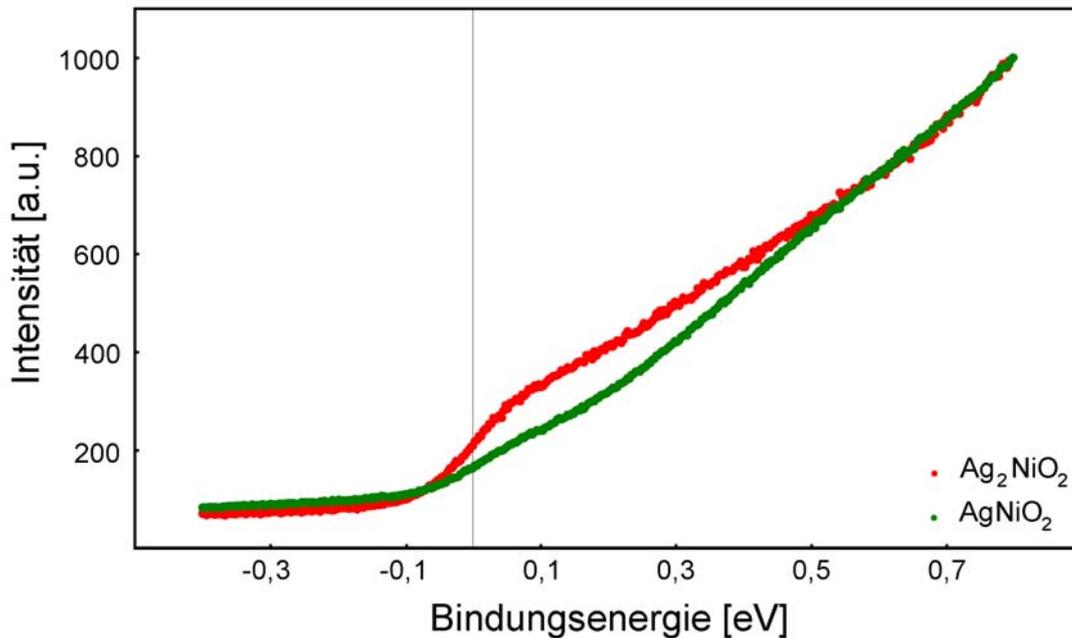


Abbildung 3.55: UP-Spektren von Ag_2NiO_2 und $AgNiO_2$

Von besonderem Interesse ist im Falle von Ag_2NiO_2 das Auftreten zusätzlicher Zustandsdichte am Fermi-niveau, diese kann durchaus auf Silber 5s-Zuständen beruhen, eine direkte Überprüfung dieser Hypothese ist jedoch nicht möglich, da die Ag 5s-Elektronen für alle Strahlungsarten nur einen geringen Wirkungsquerschnitt besitzen. Die relativ große Intensität in der Nähe des Fermi-niveaus und die Nähe zur NiO-Zustandsdichte könnte auf eine Mischung von Ag 5s und NiO-Zuständen hindeuten. Insgesamt stehen die photoelektronenspektroskopischen Untersuchungen im Einklang mit der Hypothese, dass Nickel in Ag_2NiO_2 dreiwertig ist, während Silber subvalent wie in Silbersubfluorid vorliegt. Weitere Aufschlüsse könnten gegebenenfalls mit Hilfe von photoelektronenspektroskopischer Untersuchung einer zweiwertigen Nickelverbindung mit ähnlicher Nickel-Sauerstoff-Koordination sowie des Silbersubfluorids erbracht werden. Weiterhin belegen die Photoelektronenspektren, dass sowohl Ag_2NiO_2 als auch $AgNiO_2$ metallische Leiter sind. Für Ag_2NiO_2 findet sich im Vergleich zu $AgNiO_2$ zusätzliche Elektronendichte am Fermi-niveau, die sich mit dem Auftreten zusätzlicher Silber 5s/5p-Zustandsdichte erklären lässt. Demnach findet die metallische Leitfähigkeit von Ag_2NiO_2 vorwiegend in den Ag_2 -Schichten statt, wobei eine gewisse Beteiligung der NiO_2 -Schichten nicht ausgeschlossen werden kann zumal auch $AgNiO_2$ ein metallischer Leiter ist. Dafür spricht auch das Fehlen einer Bandlücke bei $AgNiO_2$ auch bei tiefen Temperaturen (Abb. 3.56). Vergleicht man das Tieftemperatur- mit dem Raumtemperaturspektrum, so findet man eine Verschiebung von NiO-Zustandsdichte zu höheren Bindungsenergien, was möglicherweise eine Ausbildung einer Energielücke in der NiO-Zustandsdichte andeutet. Dennoch ist am Fermi-niveau Zustandsdichte vorhanden, so dass sich die Frage stellt, welche Herkunft diese hat. Nach dem in der Literatur¹⁰¹ beschriebenen Bild ergeben sich die Eigenschaften $AgNiO_2$ aus einem Überlapp von Nickel 3d- mit Silber 4d-Zuständen. Dies würde bedeuten, dass die Zustandsdichte am Fermi-niveau partiell Ag 4d-Charakter hat. Dagegen sprechen zwei Argumente:

1. Die Ag 4d-Zustände liegen, wie man aus den VB Spektren sieht, deutlich unterhalb des Fermi-niveaus, unterhalb der NiO-Zustände. Es gibt keine Hinweise, dass sich die Ag 4d-Zustände bis zur Fermienergie erstrecken.
2. Der Wirkungsquerschnitt für Ag 4d-Elektronen ist groß, der beobachtete Intensitätsbeitrag am Fermi-niveau hingegen gering.

Man könnte also vermuten, dass die Photoelektronenspektroskopie eher gegen das Valenzfluktuationsmodell spricht.

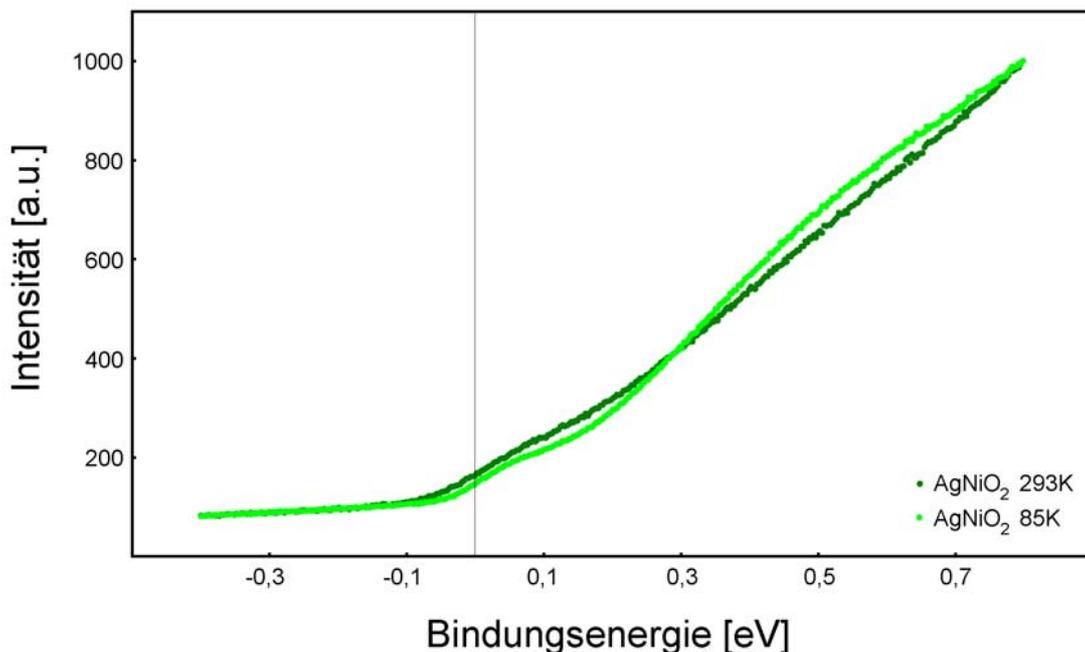


Abbildung 3.56: UP-Spektren am Fermi-niveau von $AgNiO_2$ bei 293 K und 85 K

Die Frage nach der Natur der Zustände am Fermi-niveau in $AgNiO_2$ bleibt zunächst offen. Zum genaueren Verständnis wurden auch Bandstrukturrechnungen an Ag_2NiO_2 , $AgNiO_2$ und Ag_2F durchgeführt. Hierfür wurden die Tight-Binding LMTO Methode, sowie die Hartree-Fock Methode mit Hilfe des Programms Crystal 98¹⁰⁷ verwendet. Ag_2NiO_2 und $AgNiO_2$ wurden für nichtspinpolarisierte Rechnungen in der Raumgruppe $R\bar{3}m$, sowie für spinpolarisierte Rechnungen in der alternativen Aufstellung in $C121$, die die Spinstruktur berücksichtigt, gerechnet. Bei der TB-LMTO Methode verhinderten Konvergenzprobleme das Auffinden eines spinpolarisierten Energieminimums. Zunächst seien die Ergebnisse der Rechnungen an den beiden Referenzverbindungen diskutiert. Am einfachsten ist die Bandstruktur der binären Verbindung Ag_2F . Abbildung 3.57 gibt links die Ergebnisse der TB-LMTO Rechnungen und rechts diejenigen der Hartree-Fock Methode wieder. Die Silberzustände sind mit oranger Farbe und die Fluorzustände mit Türkis hervorgehoben.

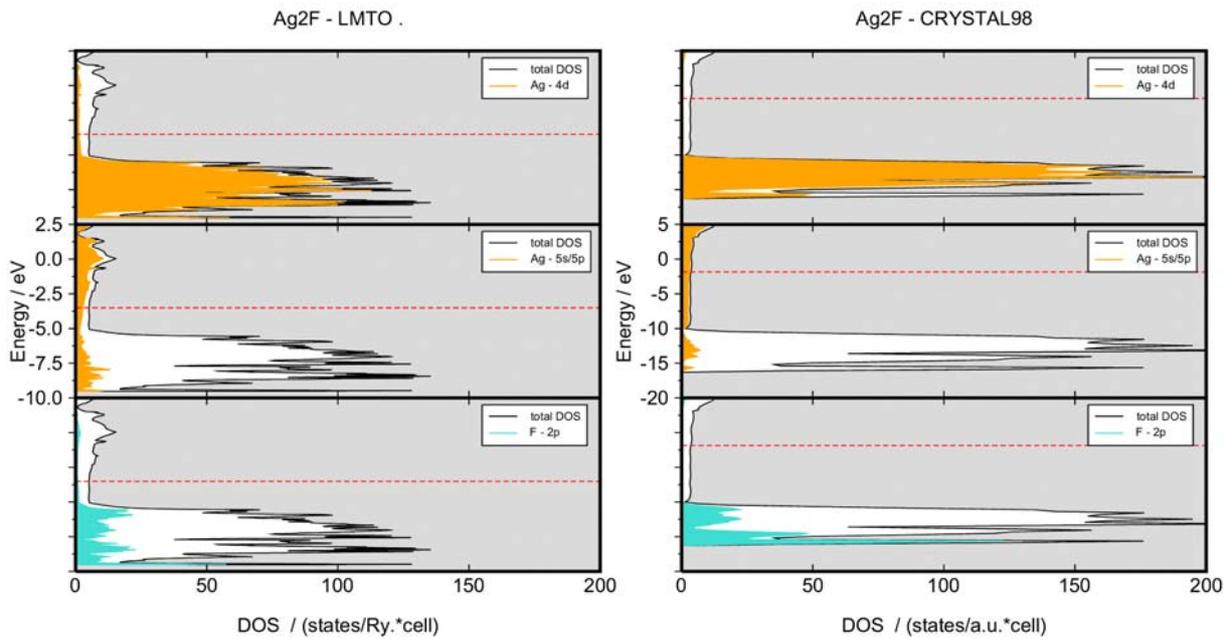
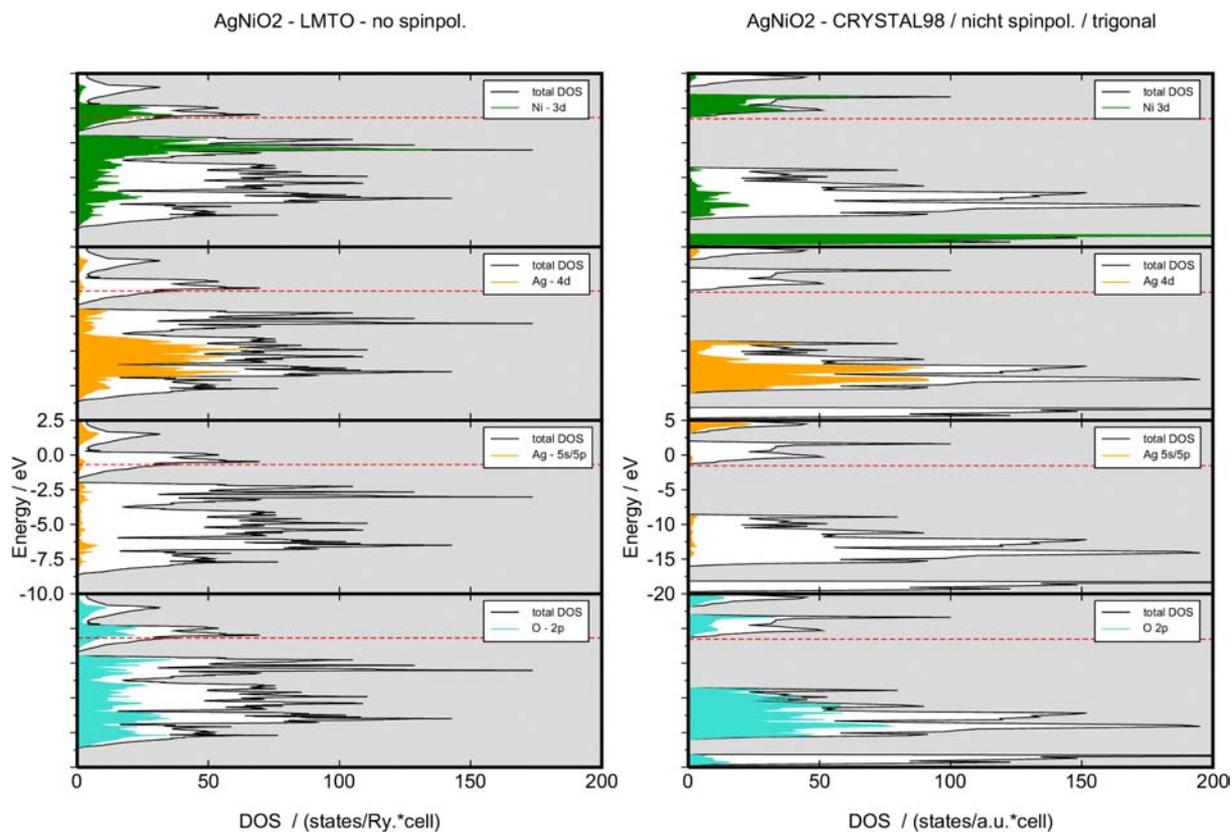


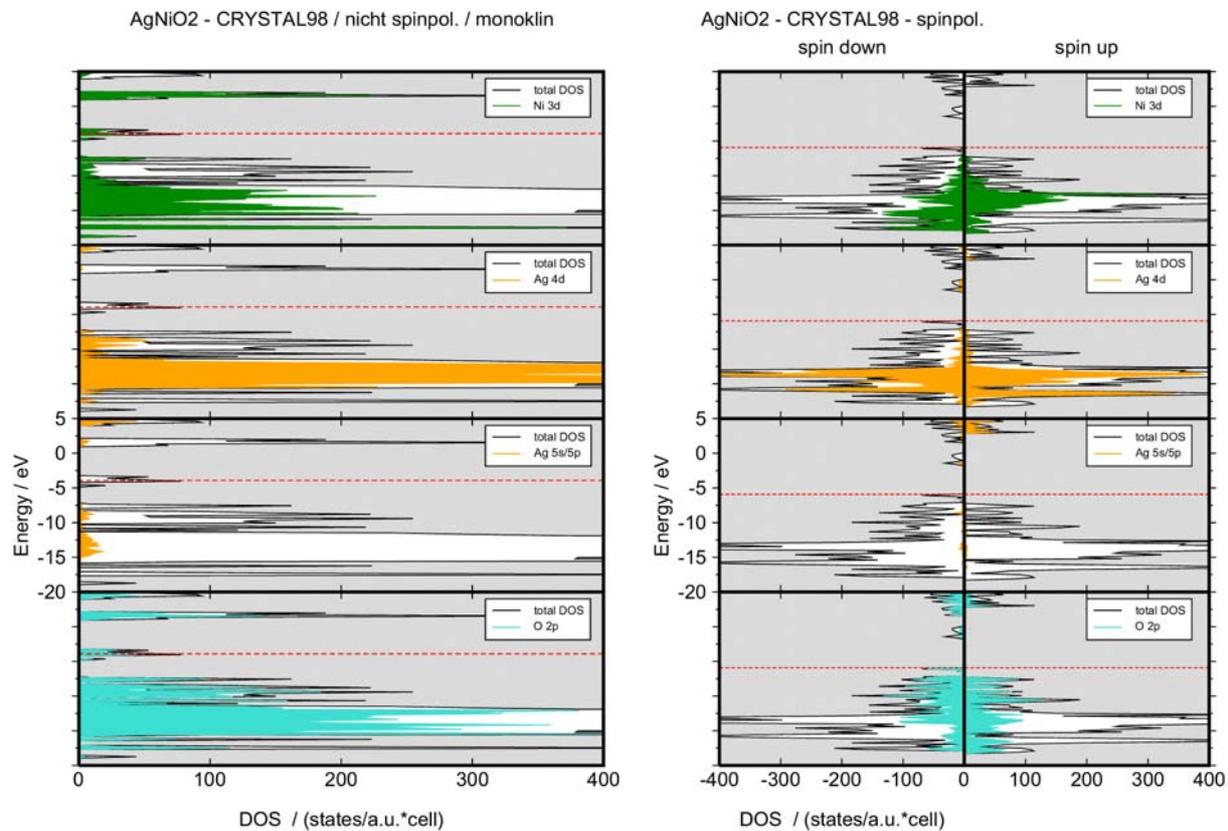
Abbildung 3.57: Ergebnisse der TB-LMTO- und der HF-Rechnungen an Ag_2F

Beim Vergleich fällt generell auf, dass die Silber 4d-Zustände sowie die Fluor 2p-Zustände in der HF-Rechnung mit einem Schwerpunkt von -13 eV energetisch deutlich tiefer liegen als in der TB-LMTO Rechnung (Schwerpunkt: $-7,5$ eV). Durch diese aus der Literatur bekannte Tatsache, lässt sich die Strukturierung des Valenzbandes in der HF-Rechnung deutlicher erkennen als in der LMTO-Rechnung. Dies kann jedoch zur Folge haben, dass Bandlücken in der HF-Methode signifikant überschätzt werden. Bezüglich des Fermi-niveaus machen beide Rechnungen identische Aussagen: Das Fermi-niveau ist erwartungsgemäß von Silber 5p- und 5s-Zuständen dominiert. Die metallische Leitfähigkeit des Silbersubfluorids findet demnach in den Silberdoppellagen statt.

Deutlich komplexer sind die Verhältnisse in der ternären Verbindung $AgNiO_2$. Die Tatsache, dass die 3d-Schale des Nickels nur unvollständig besetzt ist, und somit lokalisierte, ungepaarte Elektronen zu erwarten sind macht im Gegensatz zu Ag_2F spinpolarisierte Rechnungen in einer monoklinen Zelle erforderlich. Abbildung 3.58 stellt zunächst einmal die nichtspinpolarisierten TB-LMTO- und HF-Rechnungen in der trigonalen Raumgruppe $R-3m$ gegenüber. Die Sauerstoffzustände sind blau, die Silberzustände orange und die Nickelzustände grün markiert. Auch hier fällt auf, dass der Energiebereich der Valenzbänder in der HF-Rechnung gegenüber der LMTO-Rechnung deutlich gespreizt ist: ($-1,25$ bis -20 eV gegenüber $-0,625$ bis -10 eV in der LMTO-Rechnung). Betrachtet man den Bereich um das Fermi-niveau so wird es in der LMTO-Rechnung von Nickel und Sauerstoffzuständen dominiert, die aus dem antibindenden Bereich hereinragen, auch ein geringer Anteil an Silberzustandsdichte (sowohl 4d als auch 5s und 5p) findet sich hier. In der entsprechenden Hartree-Fock-Rechnung ist das entsprechende antibindende Band erheblich schmaler kurz oberhalb des Fermi-niveaus angesiedelt. Statt metallischer Leitfähigkeit findet man eine Bandlücke von 8 eV. Eine derartige, auf HF-Niveau berechnete Bandlücke wurde photoelektronenspektroskopisch nicht aufgefunden. Bereits die monokline Aufstellung der Elementarzelle führt zu einem anderen Ergebnis, wie in Abbildung 3.59 zu sehen ist:



3.58 LMTO- und HF-Rechnungen an $AgNiO_2$ in R-3 m



3.59 HF-Rechnungen an $AgNiO_2$ in C 1 2 1 links ohne, rechts mit Spinpolarisation

Die nichtspinpolarisierten Rechnungen liefern jetzt auch in der HF-Rechnung Nickel- und Sauerstoffzustandsdichte am Fermineau. Durch Einführung der Spinpolarisation geht diese jedoch verloren: Lediglich Sauerstoff 2p-Zustände finden sich noch am Fermineau. Silber- oder Nickelzustände sind dort nicht zu finden. Dies widerspricht der in der Literatur geäußerten Hypothese, dass sich die metallische Leitfähigkeit von $AgNiO_2$ auf die partielle Überlappung von Silber- und Nickelzuständen zurückführen lässt¹⁰¹. Weiterhin fällt auf, dass die am Fermineau gefundene Zustandsdichte des Sauerstoffs ausschließlich Spin down Charakter hat. Es ist jedoch nicht anzunehmen, dass das diamagnetische Sauerstoffanion tatsächlich Spinpolarisation aufweist. Vielmehr könnte es sich hierbei um ein Rechenartefakt handeln: Sowohl in den LMTO- als auch in den Hartree-Fock-Rechnungen wurde mit sogenannten minimalen Basissätzen gerechnet, d.h., je einem s-, drei p- und fünf d-Orbitalen pro Atom und Schale. Wenn also z. B. Die Anzahl der vorhandenen Nickelwellenfunktionen zur Beschreibung nicht ausreichen, so werden ggf. geeignete Wellenfunktionen von Nachbaratomen beigemischt. Dies wiederum kann bei einer spinpolarisierten Rechnung zur Folge haben, dass auch diamagnetische Atome ein gewisses Maß an Spinpolarisation erhalten, die keine Entsprechung in der physikalischen Wirklichkeit hat. Als Bilanz bleibt die Feststellung, dass in der TB-LMTO Rechnung $AgNiO_2$ wie in Literatur und im Experiment ein metallischer Leiter ist, während es nach den HF-Rechnungen ein Isolator ist. In dieser Hinsicht scheint die TB-LMTO-Methode die größere Wirklichkeitsnähe zu besitzen. Nach der hier vertretenen Arbeitshypothese kann man sich die Eigenschaften von Ag_2NiO_2 zusammengesetzt aus denjenigen von Ag_2F und $AgNiO_2$ vorstellen. Dies sollte sich in den Bandstrukturrechnungen widerspiegeln. In Abbildung 3.60 werden zunächst die Zustandsdichten der TB-LMTO-Rechnungen und der HF-Rechnungen, die in der kristallographischen Raumgruppe $R-3m$ durchgeführt wurden, einander gegenübergestellt:

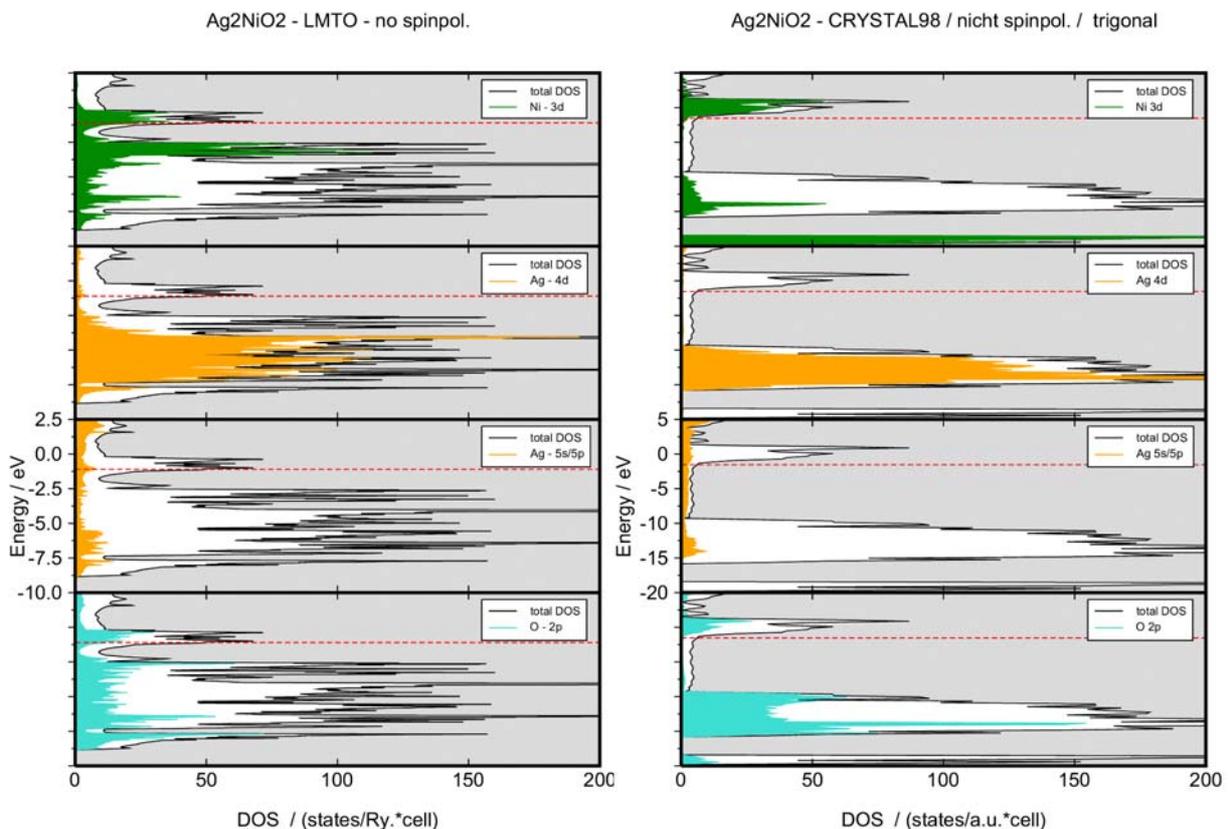
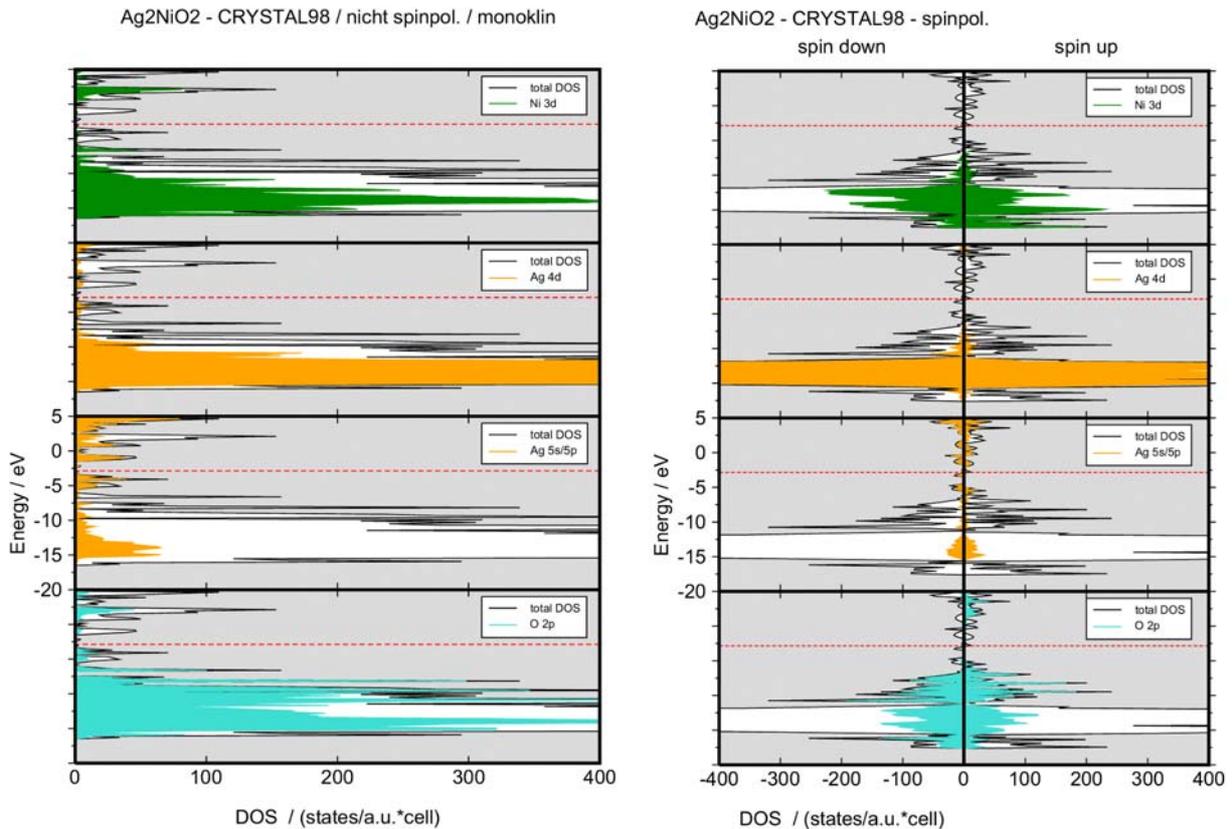


Abbildung 3.60: TB-LMT- und HF- Rechnungen an Ag_2NiO_2 in $R-3m$ im Vergleich

Auch hier beobachtet man eine deutliche Streckung des Valenzbereiches in der HF-Rechnung gegenüber der LMTO-Rechnung, so dass in der ersten die Strukturierung des Valenzbandes

deutlicher zu erkennen ist. In beiden Fällen findet sich elektronische Zustandsdichte am Fermineiveau. Nach der TB-LMTO Methode ist diese vorwiegend von Nickel-3d- und Sauerstoff-2p-Zuständen dominiert, während zusätzliche Silber-5s/5p-Zustände, die denen des Ag_2F entsprechen eine geringere Rolle spielen. In der HF-Rechnung finden sich die Nickel- und Sauerstoffzustände, die in der LMTO-Rechnung mit dem Fermineiveau überlappen vorwiegend im unbesetzten Bereich oberhalb des Fermineaus. Lediglich eine geringfügige Überschneidung mit dem Fermineiveau lässt sich beobachten: Am Fermineiveau finden sich ausschließlich Silber-5s/5p-Zustände, ähnlich wie im Silbersubfluorid. Wie man in Abbildung 3.61 erkennt, ändert auch die Transformation zur magnetischen Elementarzelle und die Berücksichtigung der Spinpolarisation nichts an diesem Bild:



3.61 HF-Rechnungen an Ag_2NiO_2 in C 1 2 1 links ohne, rechts mit Spinpolarisation

Die Zustände am Fermineiveau haben ausschließlich Silber-5s/5p-Charakter, die niedrigsten unbesetzten Zustände haben nunmehr allerdings Sauerstoff-2p- und Silber-5s/5p-Charakter. Generell zeigen alle Rechnungen übereinstimmend, dass in Ag_2NiO_2 ähnlich wie in Ag_2F zusätzlich Ag-5s/5p-Zustandsdichte am Fermineiveau vorliegt die zumindestens entscheidend an der metallischen Leitfähigkeit dieser Verbindung beteiligt ist.

Generell scheint das Ergebnis der quantenchemischen Rechnungen zu einem gewissen Maße davon abzuhängen, welche Rechenmethode man verwendet:

1. Alle auf der Dichtefunktionaltheorie beruhenden Methoden, also sowohl die FEFF8- als auch TB-LMTO Methode, schätzen die Größe von Bandlücken geringer ab, da die Valenzbänder sich über einen geringeren Energiebereich erstrecken als in Rechnungen, die auf dem Hartree-Fock-Ansatz beruhen. Diese der HF-Methode inhärente Überschätzung der Bandlücken führt dazu, dass $AgNiO_2$ den Hartree-Fock-Rechnungen zufolge ein Nichtleiter ist, während es

sowohl nach den experimentellen Befunden als auch nach den DFT-Rechnungen ein Metall oder zumindest ein Halbmetall ist.

2. Am Fermienergielevel von Ag_2NiO_2 finden sich in allen auf der Dichtefunktionaltheorie beruhenden Rechnungen nicht nur Silber 5s/5p-Zustände sondern auch Nickel 3d- und Sauerstoff 2p-Zustände. Im Falle der Hartree-Fock Rechnungen finden sich hier ausschließlich Silber 5s/5p-Zustände.
3. Im Falle der auf der Dichtefunktionaltheorie beruhenden Methoden verhinderten Konvergenzprobleme das Auffinden eines spinpolarisierten Energieminimum. Da eine langreichweitige Spinstruktur für Ag_2NiO_2 mit Hilfe von Neutronenbeugung unterhalb der Néeltemperatur nachgewiesen werden konnte sind die Hartree-Fock-Rechnungen zumindest in dieser Hinsicht wirklichkeitsnäher. Auffällig ist, dass im Falle der Spinpolarisierten Hartree-Fock-Rechnungen die Nickelzustände im antibindenden Bereich zu höheren Energien verschoben werden. Dies sind gerade die Zustände, die im Falle der dichtefunktionalen Rechnungen mit dem Fermienergielevel überlappen. Insofern ist das Auffinden des spinpolarisierten Minimums in künftigen LMTO-Rechnungen von besonderer Bedeutung.

Auch wenn also nicht alle Fragen abschließend geklärt werden konnten, so lässt sich doch an dieser Stelle Bilanz ziehen:

1. Sowohl alle rechnerischen als auch alle experimentelle Untersuchungen zur Elektronenstruktur von Ag_2NiO_2 stehen im Einklang mit den vermuteten Valenzen von +3 für Nickel und +1/2 für Silber. Die Frage nach den Oxidationsstufen kann man als abgeschlossen betrachten. Insbesondere wird dieses Bild sowohl durch die magnetischen Eigenschaften der Substanz als auch durch strukturelle Argumente gestützt.
2. Sowohl die TB-LMTO-Rechnungen als auch die Hartree-Fock-Rechnungen finden am Fermienergielevel von Ag_2NiO_2 zusätzliche Silber 5s/5p-Zustandsdichte, die in AgNiO_2 nicht vorliegt. Dies entspricht auch dem experimentellen Befund der Photoelektronenspektroskopie. Angesichts des geringen Wirkungsquerschnittes von Silber 5s/5p-Elektronen mit der Erregerstrahlung spricht dies dafür, dass die Ag_2 -Schichten zumindest zu einem ganz erheblichen Maße an der metallischen Leitfähigkeit von Ag_2NiO_2 beteiligt sind.
3. Welche Rolle die NiO_2 - Schichten bei der elektrischen Leitfähigkeit spielen, ist sowohl für AgNiO_2 als auch für Ag_2NiO_2 nicht abschließend geklärt. Geht man nach den Ergebnissen der DFT-Rechnungen (FEFF8, TB-LMTO), so finden sich am Fermienergielevel sowohl Nickel 3d- als auch Sauerstoff 2p-Zustände, die sich jedoch nicht in den auf der HF-Methode beruhenden Rechnungen finden. Betrachtet man die UP-Spektren am Fermienergielevel, so sieht man, dass in beiden Verbindungen Ni 3d- und O 2p-Zustandsdichte bis ans Fermienergielevel heranreicht, wenn sie nicht mit ihm überlappt. Für AgNiO_2 wurde auch bei 85 K keine Bandlücke entdeckt, so dass davon ausgegangen werden muss, dass die Verbindung auch bei tiefen Temperaturen ein metallischer Leiter ist.
4. Für AgNiO_2 wird in der Literatur ein Valenzfluktuationsmodell vorgeschlagen wonach das Nickel partiell zur Oxidationsstufe + 2 reduziert während Silber partiell zu + 2 oxidiert wird. Demnach müsste das Fermienergielevel durch Silber 4d-, Nickel 3d- sowie Sauerstoff 2p-Zustände charakterisiert sein. Dem widersprechen neben den quantenchemischen Rechnungen vor allem die Ergebnisse der Photoelektronenspektroskopie: Die Silber 4d-Zustände liegen im Schwerpunkt 5 eV unterhalb des Fermienergielevels, während die Nickel- und Sauerstoffzustände, die Schulter bei 2,5 eV bestimmen. Einen Elektronentransfer vom Silber zum Nickel

lässt dies eher unwahrscheinlich erscheinen. Einen alternativen Erklärungsansatz könnte die d^{10} - d^{10} -Wechselwirkung bieten: Eine partielle Mischung von Ag-4d- und Ag-5s-Zuständen kann sowohl die metallische Leitfähigkeit von AgNiO₂ als auch die geringe Intensität der elektronischen Zustandsdichte in den Photoelektronenspektren erklären. AgNiO₂ hat mit 2,939 Å einen deutlich geringeren Ag-Ag-Abstand als etwa das nichtleitende AgFeO₂ mit 3,039 Å¹⁰⁸.

Das vorgeschlagene Modell für Ag₂NiO₂ konnte also durch die Untersuchungen der Elektronenstruktur mit Hilfe experimenteller und theoretischer Methoden erhärtet und präzisiert werden. Darüberhinaus ergeben sich aus den Ergebnissen Fragen bezüglich der Genauigkeit der theoretischen Methode einerseits und bezüglich der Gültigkeit derzeitiger Modellvorstellungen für die Referenzsubstanz AgNiO₂ andererseits.

3.3.7 Chemische Hinweise auf Bildungsmechanismus

Das vorgestellte Modell von Ag₂NiO₂ basiert auf der Annahme, dass im Verlaufe der Bildung Nickel +2 zu Nickel +3 oxidiert wird, während Silber +1 partiell zu elementarem Silber reduziert wird. Dies wird durch den strukturechemischen Vergleich mit AgNiO₂ einerseits und Silbersuboxid und –subfluorid andererseits unterstützt. Auch die magnetochemischen Daten und die Röntgenabsorptionsmessungen lassen sich problemlos in dieser Hinsicht deuten. Darüberhinaus wird dieses Modell durch Versuche, Ag₂NiO₂ bei Temperaturen unterhalb von 473 K darzustellen, gestützt. Lösungen von Silber- und Nickelnitrat im geeigneten Verhältnis wurden durch Zugabe in 5 Molare Kaliumhydroxidlösung co-gefällt. Die resultierenden Suspensionen wurden in Teflonautoklaven mehrere Tage lang bei 473 K gehalten. Als Reaktionsprodukte werden AgNiO₂ und Silbermetall erhalten. Erst bei Temperaturen oberhalb von 490 K entsteht Ag₂NiO₂. Daraus resultiert ein zweistufiger Mechanismus für die Synthese von Ag₂NiO₂. Der erste Schritt besteht in einer Redoxreaktion, in deren Verlauf Nickel 2+ zu Nickel 3+ oxidiert und Ag₂O zu elementarem Silber reduziert wird. Erst bei höheren Temperaturen oberhalb von 490 K wird eine zusätzliche Silberlage zwischen den NiO₂-Schichten eingebaut, und die Schichtfolge zu derjenigen von Ag₂NiO₂ verschoben.

3.3.8 Zusammenfassung und Ausblick

Sowohl die strukturechemischen als auch die physikalischen Eigenschaften der im Rahmen dieser Arbeit erstmals dargestellten Verbindung Ag₂NiO₂ lassen sich am besten unter der Annahme erklären, dass Nickel in der Oxidationsstufe +3 und Silber in der Oxidationsstufe +½ vorliegt. Dieses zunächst etwas ungewöhnlich erscheinende Modell wird insbesondere im Vergleich mit dem im Delafossittyp kristallisierenden AgNiO₂, und den Subverbindungen des Silbers, insbesondere des Silbersubfluorids, plausibel. Besonders bemerkenswert ist hierbei die Kombination von metallischen Bindungsmotiven in den Ag₂-Schichten mit ionischen Bindungsmotiven in den NiO₂-Schichten, die sich nicht nur in den strukturellen sondern auch den komplexen, physikalischen Eigenschaften der Verbindung niederschlägt. Dadurch wird das System für eine genauere physikalische Untersuchungen interessant.

Durch Röntgenkantenabsorptionsspektroskopie, XANES, konnten zunächst die vorgeschlagenen Bindungszustände von Silber und Nickel untermauert werden. Dies ließ sich mit Hilfe quantenchemischer Simulationsmethoden weiter erhärten. Die sogenannten FEFF8 Rechnungen konnten nicht nur die Feinstruktur der Röntgenabsorptionsspektren gut

reproduzieren, sondern auch erste Modelle der Bandstruktur von Ag_2NiO_2 und einigen verwandten Verbindungen liefern. Durch Vergleich der l-projizierten Zustandsdichten ließ sich zeigen, dass die Bindungsverhältnisse des Nickels in Ag_2NiO_2 tatsächlich denjenigen in AgNiO_2 gleichen, während diejenigen des Silbers mit denen des Silbersubfluorids Ag_2F vergleichbar sind. Im Gegensatz zu Ag_2F ist die Zustandsdichte am Fermi-niveau allerdings nicht von Silberzuständen sondern von denen von Nickel und Sauerstoff dominiert. Demgegenüber zeigen genauere quantenchemische Rechnungen nach der TB-LMTO-Methode zusätzliche Ag 5s/5p-Zustandsdichte am Fermi-niveau. Nach den Rechnungen auf Hartree-Fock Basis ist diese sogar am Fermi-niveau bestimmend. Allerdings muss angemerkt werden, dass bei Hartree-Fock-Rechnungen die Größe von Bandlücken überschätzt wird, während sie von der LMTO-Methode eher unterschätzt wird. So ist nach den vorliegenden HF-Rechnungen AgNiO_2 ein Nichtleiter während es tatsächlich ein metallischer Leiter ist. Aufklärung der Elektronenstruktur wie auch der Verifizierung der Bandstrukturechnungen spielte insbesondere die Photoelektronenspektroskopie eine große Rolle: Sie zeigt deutlich bei Ag_2NiO_2 gegenüber AgNiO_2 zusätzliche Elektronendichte am Fermi-niveau, die sich zwanglos mit dem Auftreten von Ag 5s/5p-Zuständen erklären lässt. Im Falle von AgNiO_2 findet sich in den UP-Spektren bis 85 K keine Bandlücke. Die energetische Lage der Ni 2p- und der Ag 4d-Zustände respektive lässt jedoch das von P. Hagenmüller et al.¹⁰¹ vorgeschlagene Valenzfluktuationsmodell als eher wenig wahrscheinlich erscheinen. Dies ist sicherlich ein Anreiz, die derzeitigen Modelle der silberhaltigen Delafossite einer erneuten Prüfung zu unterziehen. Bezüglich der quantenchemischen Untersuchungen ist anzumerken, dass die Ergebnisse offensichtlich zu einem gewissen Maße von der verwendeten Näherungsmethode abhängen. Besonders auffällig macht sich dies beim Vergleich der Ergebnisse von DFT-Methoden mit denjenigen der Hartree-Fock-Methode bemerkbar.

Von besonderer Bedeutung war die Suche nach dem Grundzustand der Substanz. Es handelt sich um einen trigonalen, frustrierten Antiferromagneten. Ein möglicher Grundzustand für ein derartiges System ist der sogenannte RVB-Zustand, der auch als mögliche Erklärung für die Hochtemperatursupraleitfähigkeit herangezogen wird. In diesem Zustand liegt lediglich eine kurzreichweitige, dynamische antiferromagnetische Ordnung vor. Im Neutronenpulverdiffraktogramm findet man in diesem Fall keine magnetischen Überstruktureflexe. Stattdessen konnte mit Hilfe von Tieftemperaturneutronenbeugungsexperimenten eine magnetische Überstruktur nachgewiesen werden. Durch den Vergleich mit theoretischen Neutronenpulverdiffraktogrammen konnte sie als die auf Basis des Isingmodell für einen trigonalen, maximal frustrierten Antiferromagneten beruhende Tieftemperaturphase identifiziert werden. Damit konnte erstmals das Isingmodell für einen trigonalen, maximal frustrierten Antiferromagneten als tatsächlicher Grundzustand eines realen Systems nachgewiesen werden. Hieran schließt sich automatisch die Frage an, wie dieses System auf die Erhöhung der magnetischen Frustration durch partielle Oxidation oder Reduktion der NiO_2 -Schichten reagiert. Sollte sich im Rahmen der Dotierung tatsächlich ein RVB-Zustand realisieren lassen, so kann dieser durchaus mit Supraleitfähigkeit einhergehen. Für derartige Modifizierung eignet sich infolge der ausgeprägten Schichtstruktur die Intercalation kleiner Kationen wie Lithium oder Anionen wie dem Fluorid. Derzeit werden Versuche unternommen, die Verbindung unter milden Bedingungen zu fluorieren beziehungsweise mit Lithium zu intercalieren. Weiterhin stellt sich die Frage, nach dem magnetischen Grundzustand der Übergangsmetall-delafossite, deren MO_2 -Schichten isostrukturell zu den NiO_2 -Schichten des Ag_2NiO_2 sind.

3.4 Untersuchungen zur Kristallstruktur von Sr_{4+x}Pd_{3-x}O₉

Auf der Suche nach alternativen, potentiell supraleitenden Systemen sind unter Druck hoch oxidierte, ternäre Palladiumoxide schon seit einigen Jahren näher untersucht und charakterisiert worden. In diesem Zusammenhang sei auf die Arbeiten von G. Krämer und M. Jansen über die Verbindungen des Typs LnPd₂O₄ (Ln = Seltenerdmetall) ¹⁰⁹⁻¹¹¹ sowie im System Strontium-Palladium-Sauerstoff verwiesen. Dabei wurde erstmals ein Strontium-Palladium-Oxid der Zusammensetzung Sr₃Pd₂O₇ dargestellt und beschrieben ¹¹². Als Strukturmodelle wurden der hexagonale Perowskit BaNiO₃ sowie die von Haradem et al. beschriebene Verbindung Ba₃Pt₂O₇ ¹¹³ herangezogen, ohne eine befriedigende Strukturlösung zu erzielen. Dies machte eine erneute Untersuchung dieses Systems erforderlich. Diese basierte auf folgenden Überlegungen:

1. Die Röntgenpulverdiffraktogramme der Substanz enthalten neben einigen scharfen Reflexen auch weniger intensive, deutlich breitere Reflexe, die Aufschluss über die Überstruktur geben sollten.
2. Durch Synthesen bei höheren Temperaturen oder auch unter Verwendung geeigneter Flussmittel sollten Substanzen besserer Kristallinität, idealerweise Einkristalle erhalten werden.
3. Die breiten, weniger intensiven Reflexe können auch aus mehreren Reflexen, die miteinander überlappen, bestehen. Derartige Reflexe lassen sich auch bei feinkristallinen Materialien durch Röntgenpulverbeugung mit Synchrotronstrahlung auflösen bzw. separieren.
4. Als zusätzliche, experimentelle Methode bietet sich im Falle feinkristalliner Materialien die Transmissionselektronenmikroskopie an. Diese Methode ermöglicht die Durchstrahlung kleinster Kristallite, die Analyse ihrer Zusammensetzung unter Verwendung der Mikrosonde, sowie die Erzeugung von Elektronenbeugungsaufnahmen, mit deren Hilfe sich die Kristallsymmetrie erschließen und günstigstenfalls die Kristallstruktur lösen lässt.
5. Weiterhin sollten neben der ursprünglichen Zusammensetzung Sr₃Pd₂O₇ andere stöchiometrische Verhältnisse in Betracht gezogen werden. Eine ähnliche stöchiometrische Breite ist auch vom System Strontium-Nickel-Sauerstoff bekannt.

3.4.1 Experimentelle Details

Als Ausgangsstoffe dienten Strontiumperoxid und Palladiumoxid. Da kommerzielles Strontiumperoxid immer mit Strontiumhydroxid und -carbonat verunreinigt ist, erfolgte dessen Synthese aus kommerziellem Strontiumnitrat.

In einem typischen Ansatz werden 10 g Strontiumnitrat in 30 ml 35 %iger Wasserstoffperoxidlösung gelöst. Anschließend werden 16 ml einer konzentrierten Ammoniaklösung hinzugegeben, wobei ein farbloser Niederschlag ausfällt. Um eine vollständige Fällung zu erreichen, wird 15 Minuten lang gerührt. Anschließend wird der Niederschlag über einen Glasfiltertiegel G4 abgesaugt und mit bidestilliertem Wasser bis zur Neutralität gewaschen. Der Rückstand wird in ein Oxidationsrohr mit Staubschutz überführt und bei 10⁻³ mbar getrocknet. Dabei wird die Temperatur zunächst sehr langsam auf 100°C erhöht. Diese Temperatur wird gehalten, bis keine weitere Gasentwicklung mehr auftritt. Anschließend wird die Probe auf 300°C erhitzt und 12 Stunden lang bei dieser Temperatur gehalten. Das so erhaltene phasenreine Strontiumperoxid wird im Argongegenstrom in eine

Umfüllapparatur überführt und unter Argon in Glasampullen abgefüllt. Abbildung 3.62 gibt das Pulverdiffraktogramm von Strontiumperoxid wieder.

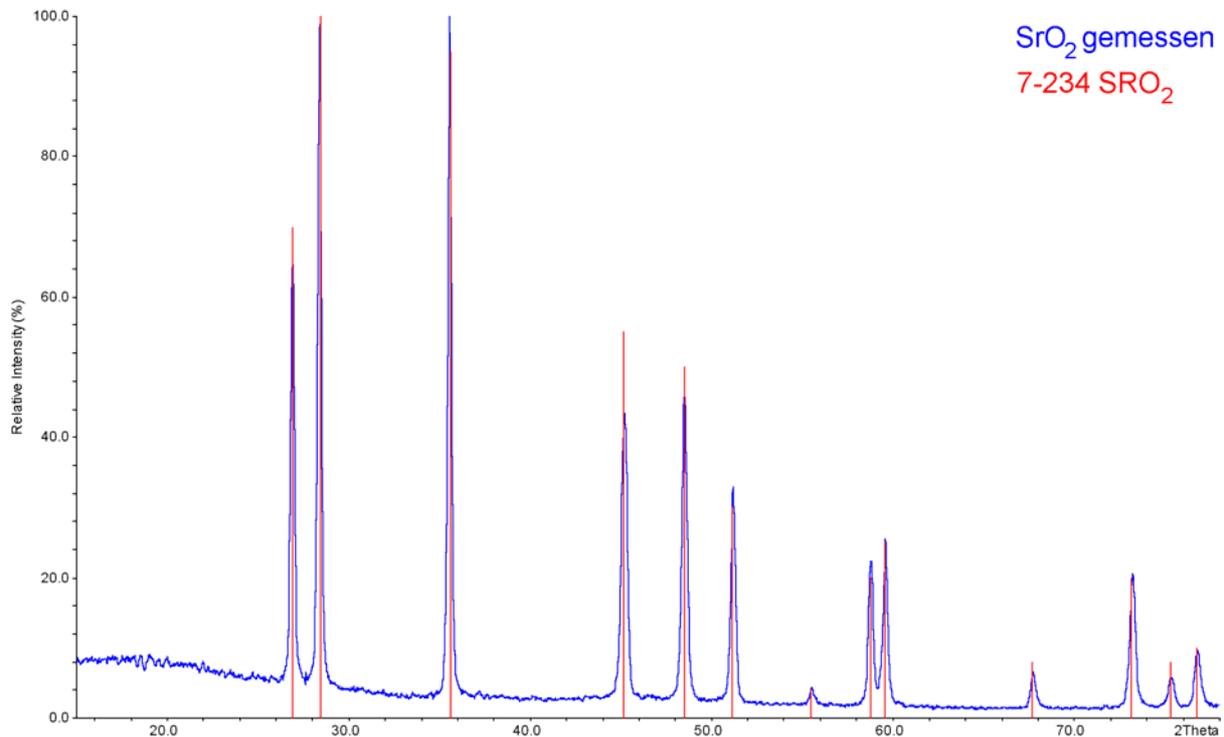


Abbildung 3.62: Pulverdiffraktogramm von Strontiumperoxid im Vergleich zu den Reflexen aus Literaturdaten (ICDD Nr. 7-234)

Die Synthese von Palladiumoxid erfolgte durch Pyrolyse von Palladiumnitrat im Sauerstoffstrom bei 773 K über Nacht. Palladiumnitrat wurde nach ⁹⁵ dargestellt.

Die besten Proben wurden nach folgender Vorschrift erhalten: Strontiumperoxid und Palladiumoxid werden im Handschuhkasten im Massenverhältnis 4:3 abgewogen und in einen Achatmahlbecher, der mit Parafilm gasdicht verschlossen wird, gegeben. In einer Kugelmühle wird das Gemenge zerkleinert, homogenisiert und anschließend erneut in den Handschuhkasten eingebracht und in ein gasdicht verschließbares Schraubdeckelglas eingefüllt. Für Hochdruckversuche werden je ca. 1g von der Ausgangsmischung in einen Korundfingertiegel überführt, der mit einem Tiegeldeckel lose verschlossen und in einen Hochdruckautoklaven des Typs 2 eingebracht wird. Die Probensubstanz wird bei 1073 K 50 h lang unter einem Sauerstoffdruck von 550 MPa getempert. Auf diese Weise wird ein feinkristallines, ziegelrotes Pulver erhalten.

Abweichend von der obigen Vorschrift wurden die Temperaturen bis 1273 K und die Sauerstoffdrücke bis zu 750 MPa variiert. Als Flussmittel wurden Strontiumnitrat, Strontiumhydroxid, Kaliumchlorid, Kaliumnitrat und Kaliumhydroxid verwendet. Hierdurch konnten jedoch nur Proben geringerer Kristallinität erzielt werden. Bei allen Versuchen mit Schmelz- bzw. Flussmitteln wurden anstelle der Korundtiegel Goldampullen verwendet

Es wurden Sr/Pd-Verhältnisse von 3:2, 4:3 und 17:11 getestet.

Die Pulverdaten wurden auf einem STOE StadiP Pulverdiffraktometer mit linearem Detektor bei einer Messzeit von 72 h gesammelt (siehe Kapitel 2.2.8).

3.4.2 Pulverdiffraktometrische Untersuchungen

Da keine Einkristalle zur Verfügung standen, wurde eine Strukturlösung aus Röntgenpulverbeugungsdaten versucht. Mit Ausnahme einiger, breiter Reflexe zwischen 15° und 30° lassen sich die Pulver trigonal in der Raumgruppe $P\ 3\ 2\ 1$ (150) indizieren, wie in Abbildung 3.63 gezeigt:

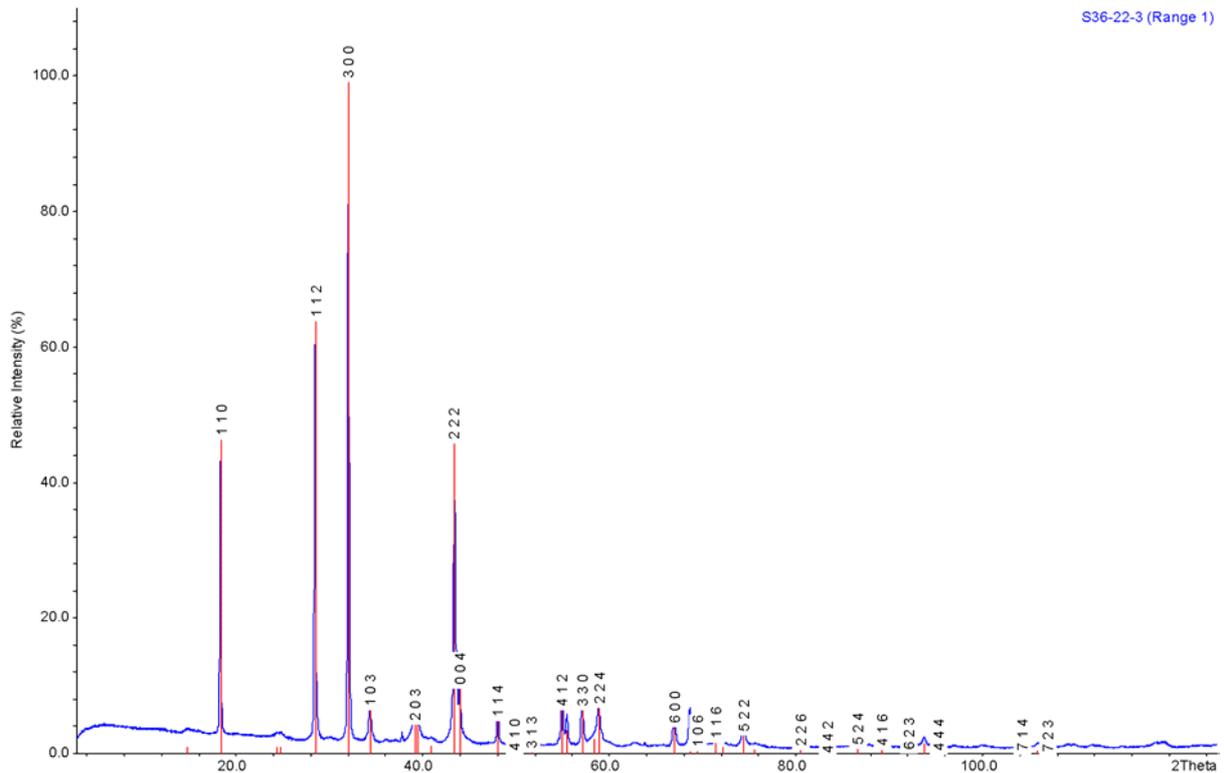


Abbildung 3.63: Indizierung des Pulverdiffraktogramms von $Sr_4Pd_3O_9$ in $P\ 3\ 2\ 1$

Tabelle 3.7 gibt die berechneten und die gemessenen Reflexe wieder. Die Gitterparameter wurden auf $a = 9,670(7)$ Å und $c = 8,227(4)$ Å mit einem Gütefaktor (Figure of Merit)¹² von 3,9 verfeinert.

Tabelle 3.7: indizierte und verfeinerte Reflexe von $Sr_4Pd_3O_9$ in $P\ 3\ 2\ 1$

N	2θ [obs]	H	K	L	2θ [calc]	obs-calc	Int.	d[obs]	d[calc]
1	14,765	*	*	*	*	*	0,80	5,9949	
2	18,345	1	1	0	18,334	0,0118	47,2	4,8321	4,8352
3	24,375	*	*	*	*	*	0,80	3,6488	
4	24,785	*	*	*	*	*	0,90	3,5894	
5	28,472	1	1	2	28,465	0,0078	64,7	3,1323	3,1332
6	32,036	3	0	0	32,035	0,001	100	2,7915	2,7916
7	34,348	1	0	3	34,382	-0,0342	7,3	2,6088	2,6063
8	39,138	2	0	3	39,237	-0,0989	5,2	2,2998	2,2942
9	39,51	*	*	*	*	*	5,4	2,2790	
10	40,849	*	*	*	*	*	1	2,2073	
11	43,391	2	2	2	43,378	0,0122	46,6	2,0837	2,0843
12	43,959	0	0	4	43,988	-0,0292	10,5	2,0581	2,0568

N	2Θ[obs]	H	K	L	2Θ[calc]	obs-calc	Int.	d[obs]	d[calc]
13	48,028	1	1	4	48,031	-0,0027	5,7	1,8928	1,8927
14	49,89	4	1	0	49,858	0,0324	0,8	1,8264	1,8275
15	51,686	3	1	3	51,519	0,1672	1,1	1,7671	1,7725
16	54,914	5	0	0	54,76	0,1539	7,3	1,6706	1,675
*	*	4	1	2	54,931	-0,0177	*	*	1,6701
17	55,432	3	0	4	55,444	-0,0124	3,5	1,6562	1,6559
18	57,072	1	0	5	56,991	0,0816	7,3	1,6125	1,6146
*	*	3	3	0	57,101	-0,0284	*	*	1,6117
19	58,389	4	2	0	58,248	0,141	2,1	1,5792	1,5827
*	*	3	3	1	58,289	0,0997	*	*	1,5817
20	58,892	2	2	4	58,906	-0,0139	7,6	1,5669	1,5666
21	66,979	6	0	0	66,99	-0,011	4,8	1,396	1,3958
22	68,671	4	1	4	68,643	0,0273	5	1,3657	1,3662
23	69,464	1	0	6	69,395	0,0691	1,3	1,352	1,3532
24	71,424	6	0	2	71,291	0,1328	2,5	1,3197	1,3218
*	*	1	1	6	71,453	-0,029	*	*	1,3192
*	*	5	1	3	71,476	-0,0523	*	*	1,3188
25	72,146	4	3	2	72,312	-0,1656	0,9	1,3082	1,3056
26	74,353	6	1	0	74,19	0,163	3,5	1,2748	1,2772
*	*	5	2	2	74,336	0,0172	*	*	1,275
27	75,628	2	1	6	75,499	0,1299	0,5	1,2564	1,2582
*	*	4	2	4	75,775	-0,1465	*	*	1,2543
28	80,491	2	2	6	80,456	0,0346	1,4	1,1923	1,1927
29	83,308	4	4	2	83,239	0,0692	0,4	1,159	1,1598
*	*	6	1	3	83,416	-0,1074	*	*	1,1578
30	86,592	5	2	4	86,582	0,0096	1,6	1,1233	1,1234
31	89,201	4	1	6	89,225	-0,0237	1,4	1,097	1,0968
*	*	7	0	3	89,247	-0,0458	*	*	1,0966
32	92,112	7	1	2	91,98	0,1318	0,9	1,0698	1,071
*	*	6	2	3	92,156	-0,0438	*	*	1,0694
33	93,71	2	2	7	93,561	0,1488	1,4	1,0557	1,057
*	*	4	3	5	93,689	0,0211	*	*	1,0559
*	*	6	3	0	93,781	-0,0713	*	*	1,0551
34	95,313	4	4	4	95,317	-0,0037	0,8	1,0422	1,0422
35	104,23	7	1	4	104,178	0,0517	0,7	0,976	0,9763
36	105,87	3	0	8	105,922	-0,0527	0,3	0,9653	0,965
37	106,98	5	2	6	106,919	0,0603	0,5	0,9584	0,9588
*	*	7	2	3	106,943	0,0372	*	*	0,9586

Ein erstes Strukturmodell in dieser Raumgruppe ließ sich von dem von Hk Müller-Buschbaum¹¹⁴ beschriebene Strontiumnickeloxid der Zusammensetzung Sr₁₂Ni_{7,5}O₂₇ ableiten. Die Struktur ist eng verwandt mit der hexagonalen Perowskitstruktur des BaNiO₃, in der Säulen flächenverknüpfter Oktaeder entlang der [001] Achse verlaufen, die hexagonal in der (001) Ebene gepackt sind. Die Zwischenräume zwischen den Nickel-Sauerstoffsträngen, werden von den Bariumatomen aufgefüllt. Zur Struktur von Sr₁₂Ni_{7,5}O₂₇ gelangt man, indem man jedes dritte NiO₆-Oktaeder durch ein Prisma ersetzt, das nur partiell besetzt ist. Eine Elementarzelle dieser Struktur ist in Abbildung 3.64 dargestellt:

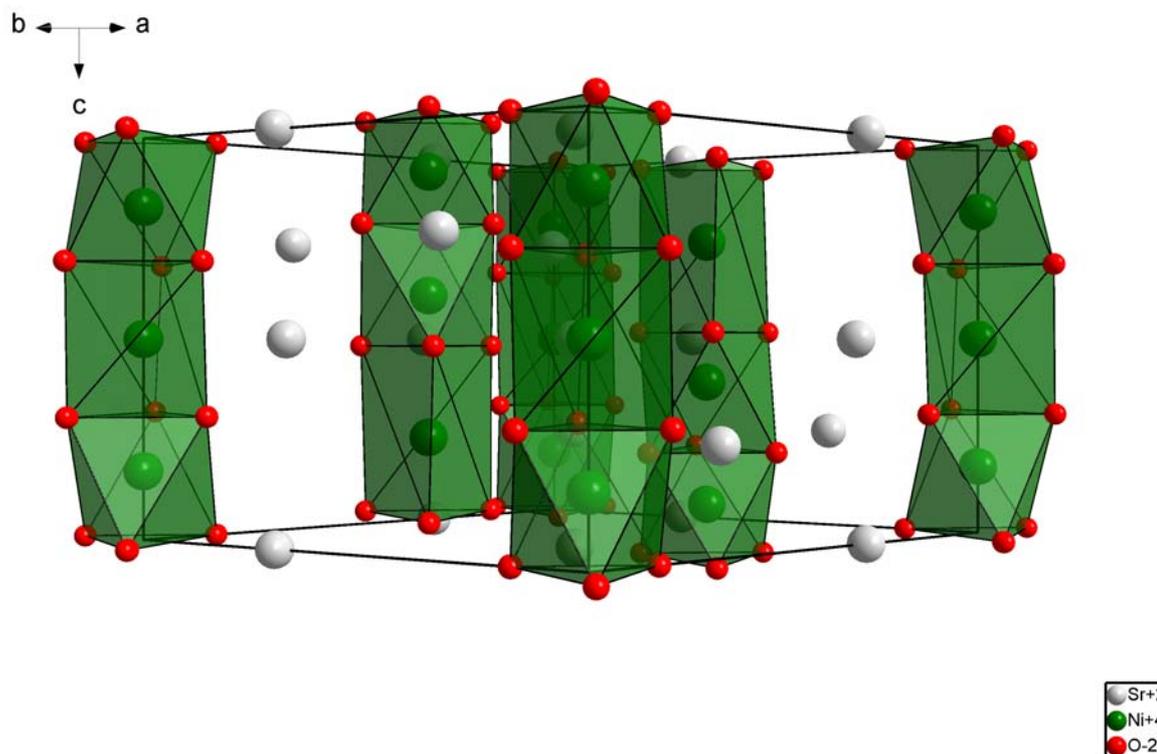


Abbildung 3.64: Kristallstruktur von $Sr_{12}Ni_{7,5}O_{27}$

Als Startmodell wurde eine vollständige Besetzung der Prismen durch die zweiwertigen Palladiumatome angenommen, man gelangt so zur Stöchiometrie $Sr_4Pd_3O_9$ und zu folgender Kristallstruktur (Tabelle 3.8):

Tabelle 3.8: Kristallographische Daten des Startmodells für $Sr_4Pd_3O_9$

Raumgruppe		$P 3 2 1$ (Nr. 150)			
Gitterparameter		$a = 9,670(7) \text{ \AA}$ $c = 8,227(4) \text{ \AA}$ $\gamma = 120^\circ$			
Atom	Ox.	Wyck.	X	Y	Z
Sr1	+2	$6g$	0	$2/3$	$1/4$
Sr2	+2	$3f$	$1/3$	0	$1/2$
Sr3	+2	$3e$	$1/3$	0	0
Pd1	+2	$1b$	0	0	$1/2$
Pd2	+4	$2d$	$1/3$	$2/3$	$1/3$
Pd3	+4	$2d$	$1/3$	$2/3$	0
Pd4	+2	$2d$	$1/3$	$2/3$	$2/3$
Pd5	+4	$2c$	0	0	$1/6$
O1	-2	$6g$	0,485	$2/3$	$1/6$
O2	-2	$6g$	$2/3$	0,183	$1/2$
O3	-2	$3e$	0,845	0	0
O4	-2	$6g$	$2/3$	0,184	$1/6$
O5	-2	$6g$	0	0,152	0,31

Das zugehörige theoretische Pulverdiffraktogramm in Abbildung 3.65 zeigt große Ähnlichkeiten mit dem gemessenen und lässt so eine Strukturverfeinerung aussichtsreich erscheinen.

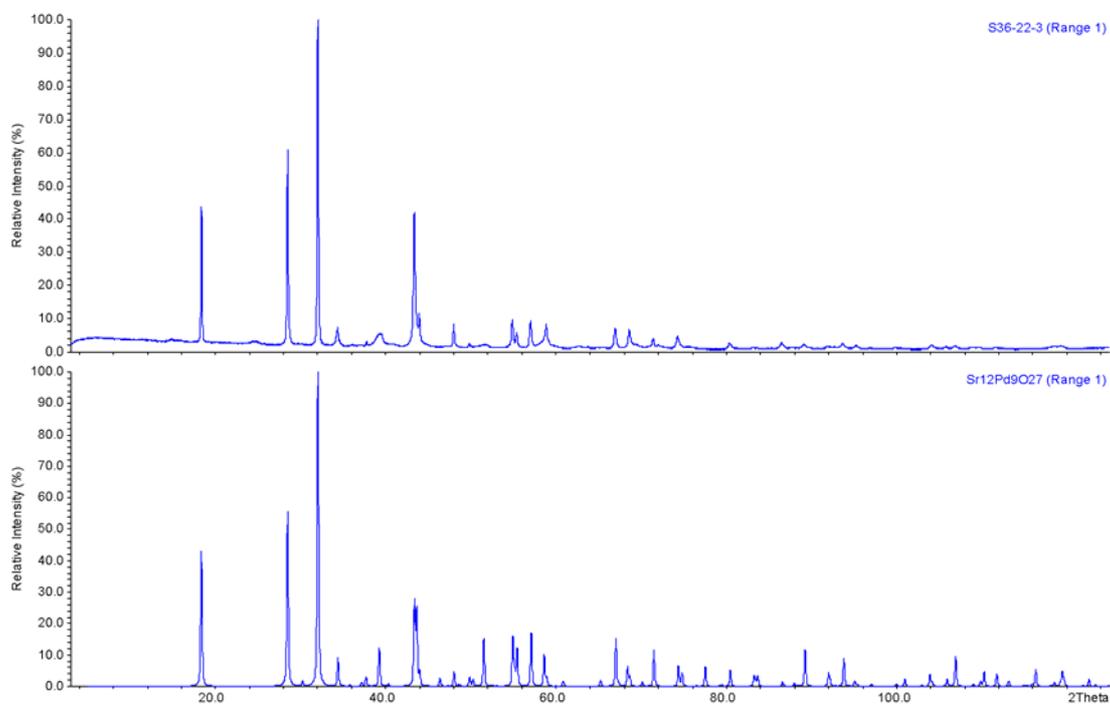


Abbildung 3.65: Gemessenes und theoretisches Pulverdiffraktogramm von $Sr_4Pd_3O_9$ in P 3 2 1

Eine Rietveldverfeinerung mit Diffrakt 97 konvergierte mit einem Bragg-R-Wert von 8,937. Rietveldverfeinerung und Differenzplot sind in Abbildung 3.66 wiedergegeben.

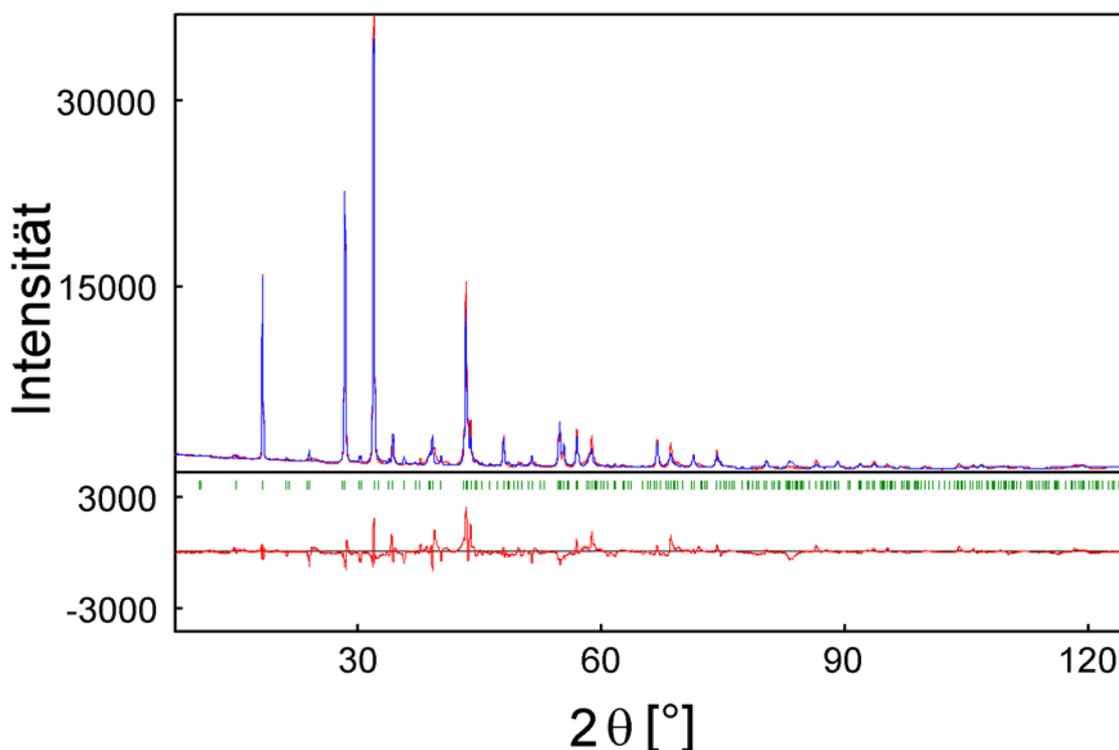


Abbildung 3.67: Rietveldverfeinerung und Differenzplot von $Sr_4Pd_3O_9$ in P 3 2 1

Die Ergebnisse sind in Tabelle 3.9 zusammengefasst:

Tabelle 3.9: Kristallographische Daten von Sr₄Pd₃O₉

Raumgruppe		<i>P 3 2 1 (150)</i>				
Gitterparameter		a = 9,670(7) Å b = 8,227 (4) Å γ = 120°				
Volumen in Å³		666,43 (19)				
Formeleinheiten pro Elementarzelle		3				
R_{bragg}		8,937 %				
R_p		11,695 %				
R_{wp}		16,862 %				
GOF		24,767 %				
Atom	Ox.	Wyck.	x	y	Z	B_{iso} in pm³
Sr1	+2	6g	0	2/3	1/4	-1,6(1)
Sr2	+2	3f	0,345(2)	0	1/2	2,5(4)
Sr3	+2	3e	0,315(1)	0	0	0,6(3)
Pd1	+2	1b	0	0	1/2	16(1)
Pd2	+4	2d	1/3	2/3	0,657(4)	18,6(3)
Pd3	+4	2d	1/3	2/3	0,281(3)	8,55(8)
Pd4	+2	2d	1/3	2/3	0,898(3)	9,3(7)
Pd5	+4	2c	0	0	0,152(1)	-1,2(2)
O1	-2	6g	0,5000	2/3	0,25	nicht verfeinert
O2	-2	6g	2/3	0,18298	0,50	nicht verfeinert
O3	-2	3e	0,822(6)	0	0	nicht verfeinert
O4	-2	6g	2/3	0,18400	0	nicht verfeinert
O5	-2	6g	0	0,15196	0,333333	nicht verfeinert

Bereits hier ist zu erkennen, dass die Strukturlösung trotz verhältnismäßig guter Profilanpassung noch nicht restlos überzeugend ist. Der deutlich zu hohe Goodness of Fit Wert, sowie negative und zu hohe isotrope Schwingungsfaktoren sind hierfür eindeutige Indizien. Betrachtet man die so erhaltene Struktur in Abbildung 3.67, so sieht man, dass die konstituierenden Atome in Positionen gewandert sind, die vom Ausgangsmodell deutlich verschieden sind:

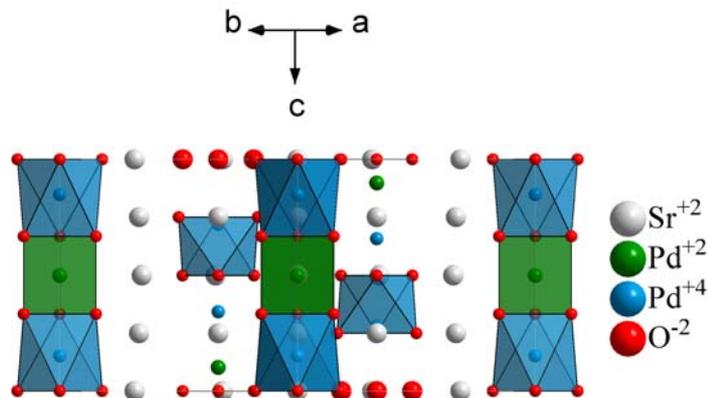


Abbildung 3.67: Struktur von Sr₄Pd₃O₉ entlang [110] nach Rietveldverfeinerung

Die Palladium-Sauerstoff-Säule, die direkt auf der c-Achse liegt, bleibt relativ unverändert. Lediglich eine gewisse Deformation der Koordinationspolyeder ist zu bemerken. Völlig anders verhält es sich mit den Säulen, die um jeweils $1/3$ entlang der x-Achse und $2/3$ in y-Achse ins Innere der Elementarzelle versetzt sind. Wie in Abbildung 3.68 dargestellt ist, werden die Palladiumatome entlang der c-Achse nach unten verschoben.

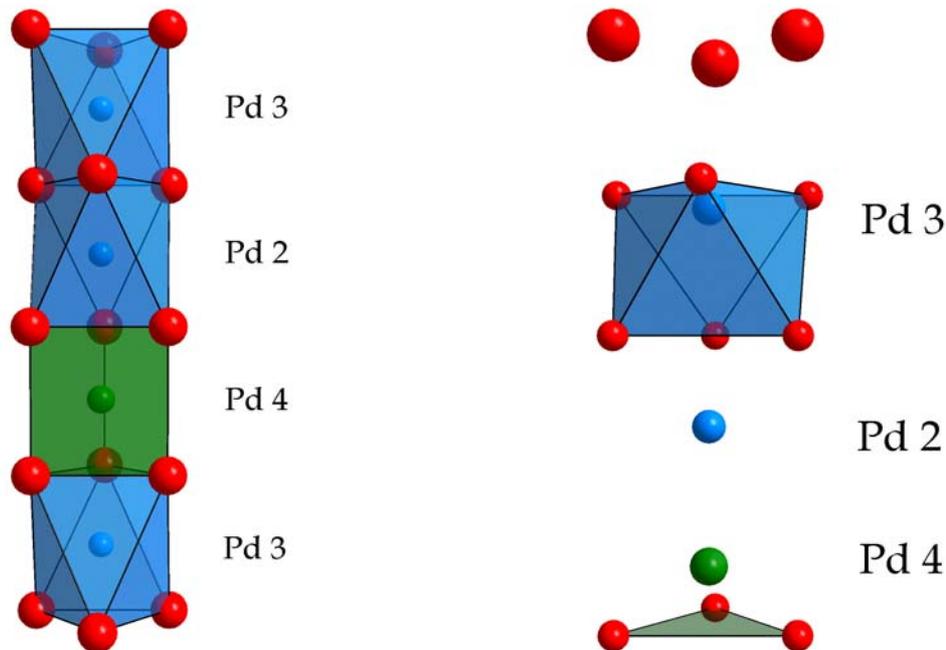


Abbildung 3.68: Palladium-Sauerstoff-Säulen im Inneren der Elementarzelle a) vor b) nach der Rietveldverfeinerung

Bei dieser Verschiebung schrumpft der Abstand zwischen den Palladiumatomen 2 und 4 auf $1,982(42)$ Å. Dies ist kürzer als eine Palladiumbindung im Metall und damit physikalisch unsinnig aber dafür ein deutlicher Hinweis auf eine mögliche Überstruktur. Das Strukturmodell scheint zwar einige Aspekte der Verbindung zu erfassen, ist jedoch weit von einer tatsächlichen Problemlösung entfernt. In dem Modell befindet sich zweiwertiges Palladium in trigonal prismatischer Umgebung und nicht, wie man erwarten würde, in quadratisch planarer. Diese Koordination ist für die Elektronenkonfiguration d^8 durch die Ausbildung eines low-spin-Komplexes energetisch besonders günstig. In diesem Fall hat Palladium keine ungepaarten Elektronen und ist diamagnetisch. Nach Messungen an Proben der nominellen Stöchiometrie $Sr_3Pd_2O_7$ ¹⁶¹ ist $Sr_{4+x}Pd_{3-x}O_9$ diamagnetisch. Das heißt, die zweiwertigen Palladiumatome sind eher in den Prismenflächen zu erwarten als in den Zentren der Prismen. Dies erreicht man, indem die Palladiumatome, die im Ausgangsmodell prismatisch umgeben waren, auf Positionen niedrigerer Punktsymmetrie gesetzt werden, die nunmehr nur zu einem Drittel besetzt sind. Das entsprechende Startmodell ist in Tabelle 3.10 wiedergegeben. Die Atome, deren Lage verändert wurde, sind durch fettgedruckte Buchstaben hervorgehoben.

Tabelle 3.10: Kristallographische Daten des Startmodells für $Sr_4Pd_3O_9$

Raumgruppe		$P\ 3\ 2\ 1$ (Nr. 150)				
Gitterparameter		$a = 9,670(7)\ \text{\AA}$ $c = 8,227(4)\ \text{\AA}$ $\gamma = 120^\circ$				
Atom	Ox.	Wyck.	x	Y	z	Besetzung
Sr1	+2	6g	0	2/3	1/4	1
Sr2	+2	3f	1/3	0	1/2	1
Sr3	+2	3e	1/3	0	0	1
Pd1	+2	3f	0,08	0,08	1/2	1/3
Pd2	+4	2d	1/3	2/3	1/3	1
Pd3	+4	2d	1/3	2/3	0	1
Pd4	+2	6g	0,255	0,595	2/3	1/3
Pd5	+4	2c	0	0	1/6	1
O1	-2	6g	0,485	2/3	1/6	1
O2	-2	6g	2/3	0,183	1/2	1
O3	-2	3e	0,845	0	0	1
O4	-2	6g	2/3	0,184	1/6	1
O5	-2	6g	0	0,152	0,31	1

Auch mit dieser Konfiguration lässt sich keine zufriedenstellende Profilanpassung im Rahmen der Rietveldverfeinerung erzielen (siehe Abbildung 3.69).

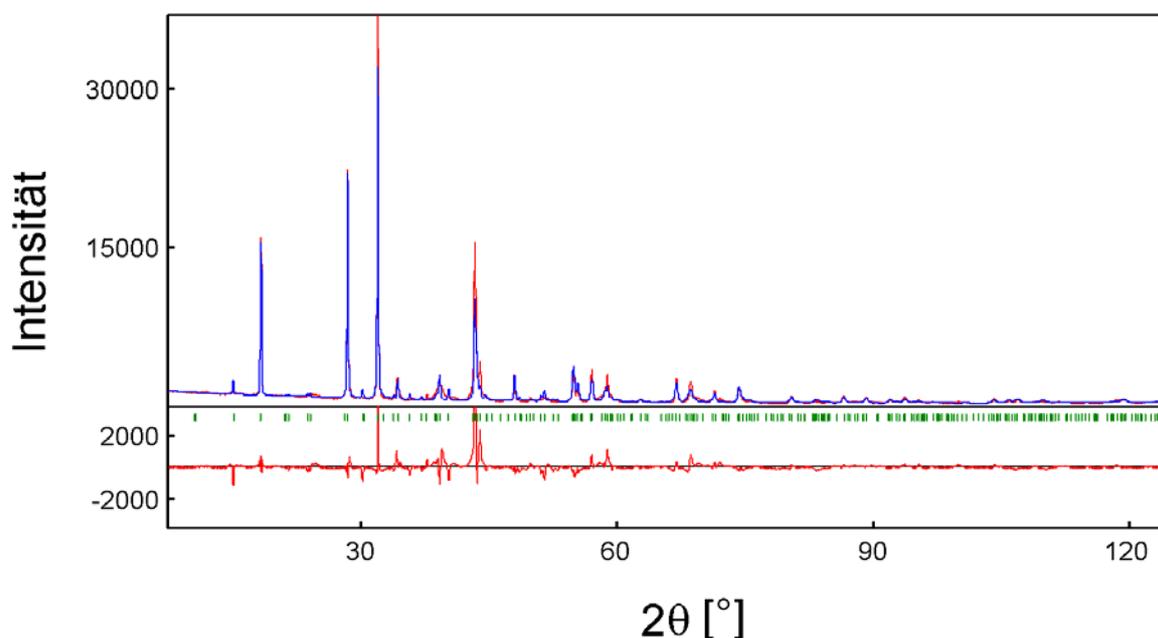


Abbildung 3.69: Rietveldverfeinerung und Differenzplot von $Sr_4Pd_3O_9$ unter Zugrundelage einer quadratisch-planaren Geometrie für das zweiwertige Palladium

Einige der starken Reflexe, insbesondere der 1 0 0 Reflex und die Reflexgruppe bei 43 bis 44° werden mit zu geringer Intensität angepasst, während einige der schwachen, breiten Reflexe, z.B. der 0 1 1 Reflex bei 15,083° mit viel zu hoher Intensität berechnet werden. Betrachtet man die in Tabelle 3.11 zusammengestellten Ergebnisse der Strukturlösung, fallen einmal mehr die negativen Temperaturfaktoren der Schweratome auf.

Tabelle 3.11: Rietveldverfeinerung von Sr₄Pd₃O₉ unter Berücksichtigung quadratisch-planarer Baueinheiten.

Raumgruppe		<i>P 3 2 1 (150)</i>					
Gitterparameter		a = 9,6718(5) Å c = 8,2262 (4) Å γ = 120°					
Volumen in Å ³		666,41(1)					
Formeleinheiten pro Elementarzelle		3					
R _{bragg}		11,541					
R _p		12,574					
R _{wp}		18,070					
GOF		28,409					
Atom	Ox.	Wyck.	x	y	z	B_{iso} in pm³	Besetzung
Sr1	+2	6g	0	2/3	1/4	2,21(2)	1
Sr2	+2	3f	0,342(1)	0	1/2	2,5(4)	1
Sr3	+2	3e	0,324(1)	0	0	0,6(3)	1
Pd1	+2	6g	0,08285	0,07998	1/2	16(1)	1/6
Pd2	+4	2d	1/3	2/3	0,401(4)	11,1(6)	1
Pd3	+4	2d	1/3	2/3	0,045(2)	7,7(5)	1
Pd4	+2	6g	0,25499	0,595	2/3	4(1)	1/3
Pd5	+4	2c	0	0	0,141(1)	-1,2(2)	1
O1	-2	6g	0,485	0,666	0,16662	nicht verfeinert	1
O2	-2	6g	2/3	0,18298	0,50	nicht verfeinert	1
O3	-2	3e	0,822(5)	0	0	nicht verfeinert	1
O4	-2	6g	2/3	0,18400	0,16662	nicht verfeinert	1
O5	-2	6g	0,99198	0,15196	0,31000	nicht verfeinert	1

Bei der Betrachtung der in Abbildung 3.70 dargestellten Struktur erkennt man, dass die Polyeder im Zuge der Verfeinerung zwar deformiert wurden, eine derart drastische Verschiebung einzelner Atome wie bei der Verfeinerung des ersten Strukturmodells wird aber nicht beobachtet.

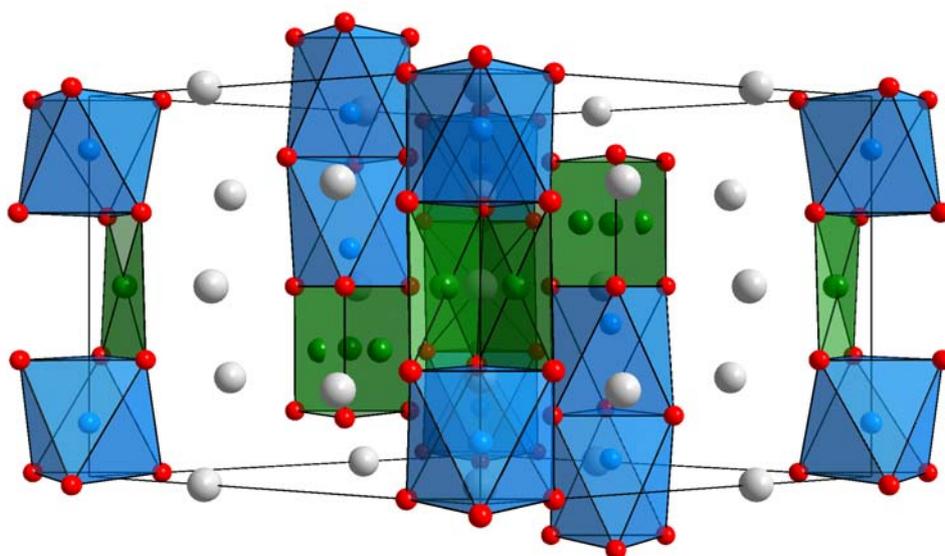


Abbildung 3.70: verfeinerte Struktur von Sr₄Pd₃O₉ unter Berücksichtigung quadratisch planarer Bauelemente entlang [110]

Demnach scheint das modifizierte Strukturmodell besser zu passen als das zuerst vorgeschlagene. Tabelle 3.12 gibt die gefundenen Palladium-Sauerstoffabstände wieder:

Tabelle 3.12: Palladium-Sauerstoffabstände in Sr₄Pd₃O₉

Atom	Ox.	Wyck.	Zielatom	Abstand (Å)	Mittlerer Abstand (Å)
Pd1	+2	6g	O5 ^{iv}	2,031 (1)	2,038 (1)
			O5 ^v	2,045 (1)	
			O5 ⁱ	2,001 (1)	
			O ⁱ	2,076 (1)	
Pd2	+4	2d	O2 ^{vi}	1,667 (16)	2,045 (21)
			O2 ^{vii}	1,666 (16)	
			O2 ^{iv}	1,667 (16)	
			O1 ^{viii}	2,424 (26)	
			O1 ^{ix}	2,424 (26)	
			O1	2,425 (26)	
Pd3	+4	2d	O4 ^x	2,265 (13)	2,021 (12)
			O4 ^{xi}	2,265 (13)	
			O4 ^{xii}	2,265 (13)	
			O1 ^{vii}	1,776 (10)	
			O1	1,776 (10)	
			O1 ^{ix}	1,776 (10)	
Pd4	+2	6g	O2 ^{vii}	1,824 (1)	1,859 (3)
			O2 ^{iv}	1,90 (1)	
			O4 ^{iv}	1,894 (1)	
			O4 ^{vii}	1,819 (1)	
Pd5	+4	2c	O3 ⁱ	2,000 (29)	2,026 (23)
			O3 ⁱⁱ	2,00 (4)	
			O5 ⁱ	2,052 (9)	
			O5 ⁱⁱ	2,052 (9)	
			O5 ⁱⁱⁱ	2,052 (9)	
			O3 ⁱ	2,00 (4)	

Symmetriecodes

- (i) 1-x+y, 1-x, z; (ii) -y, -1+x-y, z; (iii) -1+x, y, z; (iv) 1-x, 1-x+y, 1-z;
(v) y, -1+x, 1-z; (vi) x-y, 1-y, 1-z; (vii) y, x, 1-z; (viii) 1-y, 1+x-y, z;
(ix) -x+y, 1-x, z; (x) y, x, -z; (xi) x-y, 1-y, -z; (xii) 1-x, 1-x+y, -z.

Die mittleren Bindungsabstände sind im erwarteten Bereich für vierwertiges Palladium in oktaedrischer Koordination mit 2,021 bis 2,041 Å: In Zn₂PdO₄ findet man Palladium tetraedrisch von vier Sauerstoffatomen im Abstand von 1.842(1) Å umgeben¹¹⁵. Im Falle einer oktaedrischen Koordination müssen die Abstände schon auf Grund der größeren Anzahl von Liganden größer sein. Betrachtet man die zweiwertigen Palladiumatome, so erwartet man Palladium-Sauerstoffabstände im Bereich von 2,010 bis 2,035 Å. Für das Palladiumatom 1 ist dies mit 2,038(1) Å recht gut gegeben, während man im Falle des Palladiumatoms 4 mit 1,859(3) Å einen deutlich zu geringen Abstand findet. All dies deutet darauf hin, dass dieses Strukturmodell noch nicht als Strukturlösung zu betrachten ist.

Eine weitere Möglichkeit, das Strukturmodell zu modifizieren, besteht darin, die Prismen nicht vollständig mit Palladium sondern teilweise mit Strontiumatomen zu besetzen. In diesem Fall ist anzunehmen, dass die Strontiumatome im Gegensatz zu den Palladiumatome

die Zentren der Sauerstoffprismen besetzen. Genaueren Aufschluss hierüber sollten Untersuchungen am Transmissionselektronenmikroskop ergeben.

3.4.3 Transmissionselektronenmikroskopische Untersuchungen

Die Elementzusammensetzung und kleine Kristallite einer Probe, die als $Sr_3Pd_2O_7$ angesetzt war, wurden an einem Transmissionselektronenmikroskop, Jeol 2000FX, das mit einer energiedispersiven Mikroanalyse, Link AN10000, ausgestattet ist, überprüft. Die Zusammensetzung einzelner Kristallite der Probe wurde als $Sr_4(Sr_{1-x}Pd_x)Pd_2O_9$ mit $0,69 \leq x \leq 0,79$ bestimmt.

An einzelnen Kristalliten wurden Elektronenbeugungsaufnahmen vorgenommen. In Abbildung 3.71 sind die SAED-Beugungsbilder entlang a) der $[010]_{2H}$ und b) der $[1-10]_{2H}$ Zonenachse dargestellt. In der ersten Aufnahme entsprechen die intensivsten Reflexe einer hexagonale 2H Zelle und können den $(001)_{2H}$ und $(100)_{2H}$ -Ebenen zugeordnet werden.

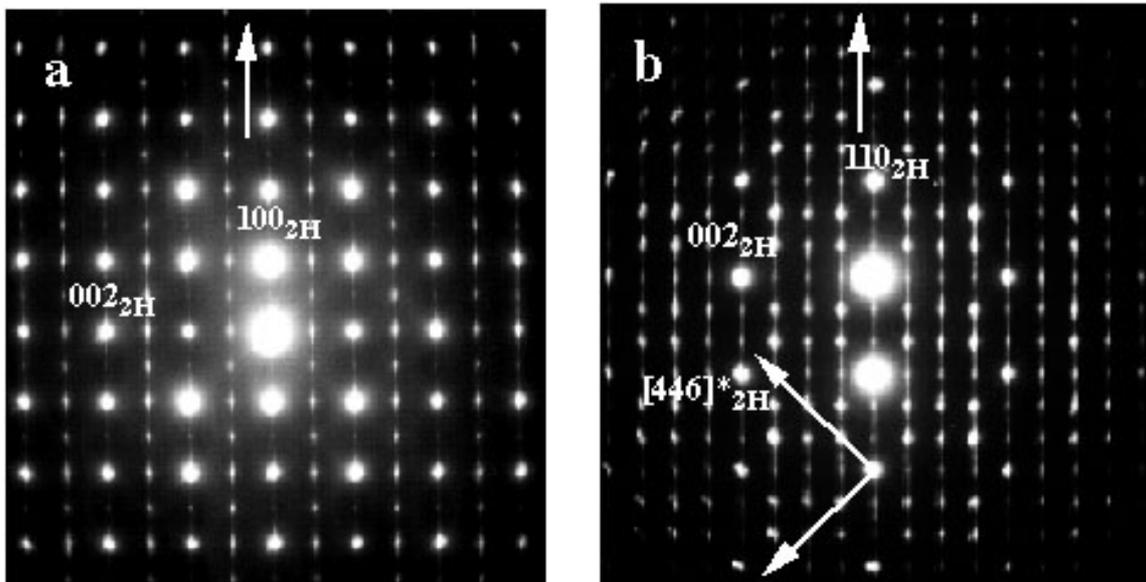


Abbildung 3.71: Elektronenbeugungsaufnahmen an $Sr_4(Sr_{1-x}Pd_x)Pd_2O_9$

Neben den charakteristischen Reflexen der 2H Unterzelle kann eine zweifache Überstruktur, die sowohl der $[001]_{2H}^*$ Richtung als auch der $[100]_{2H}^*$ Richtung folgt, beobachtet werden. In der zweiten Aufnahme erkennt man neben den Hauptreflexen, die der 2H Unterzelle zugeordnet werden können und den $(002)_{2H}$ und $(110)_{2H}$ Ebenen folgen, eine doppelte Überstruktur, die der $[001]_{2H}^*$ Richtung folgt, sowie eine dreifache Überstruktur in $[1-10]_{2H}^*$ Richtung. Alle diese Maxima können auf Basis einer orthorhombischen Zelle mit den Gitterkonstanten $a = 9,9 \text{ \AA}$, $b = 17,2 \text{ \AA}$ und $c = 8,2 \text{ \AA}$ indiziert werden. Parallel zur Basisebene (durch einen Pfeil markiert) ist eine beträchtliche Scherung zu beobachten.

Abbildung 3.72 zeigt eine HREM-Aufnahme entlang der $[110]_{2H}$ Zonenachse von $Sr_4(Sr_{1-x}Pd_x)Pd_2O_9$. Alle beobachteten Kristalle sind mit einem Zwillingwinkel von 90° verzwillingt, wie man in der Aufnahme entlang der gezackten Linie erkennen kann.

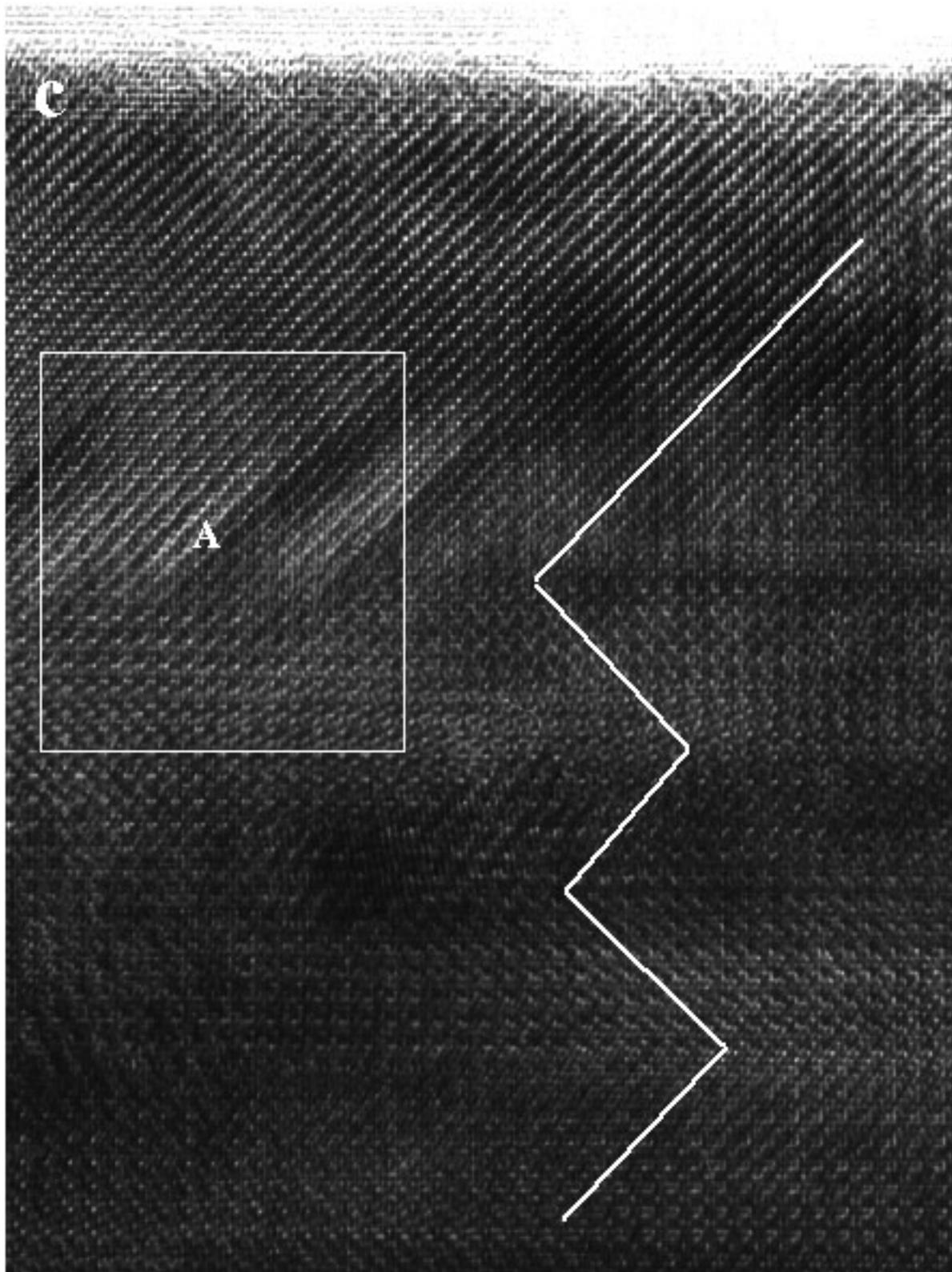


Abbildung 3.72: HREM-Aufnahme von $Sr_4(Sr_{1-x}Pd_x)Pd_2O_9$ entlang $[110]_{2H}$

Der mit A bezeichnet Ausschnitt ist in Abbildung 3.73 vergrößert dargestellt. Man erkennt einen scheinbar geordneten Bereich $d_{001} = 8,2 \text{ \AA}$ und $d_{020} = 8,6 \text{ \AA}$.

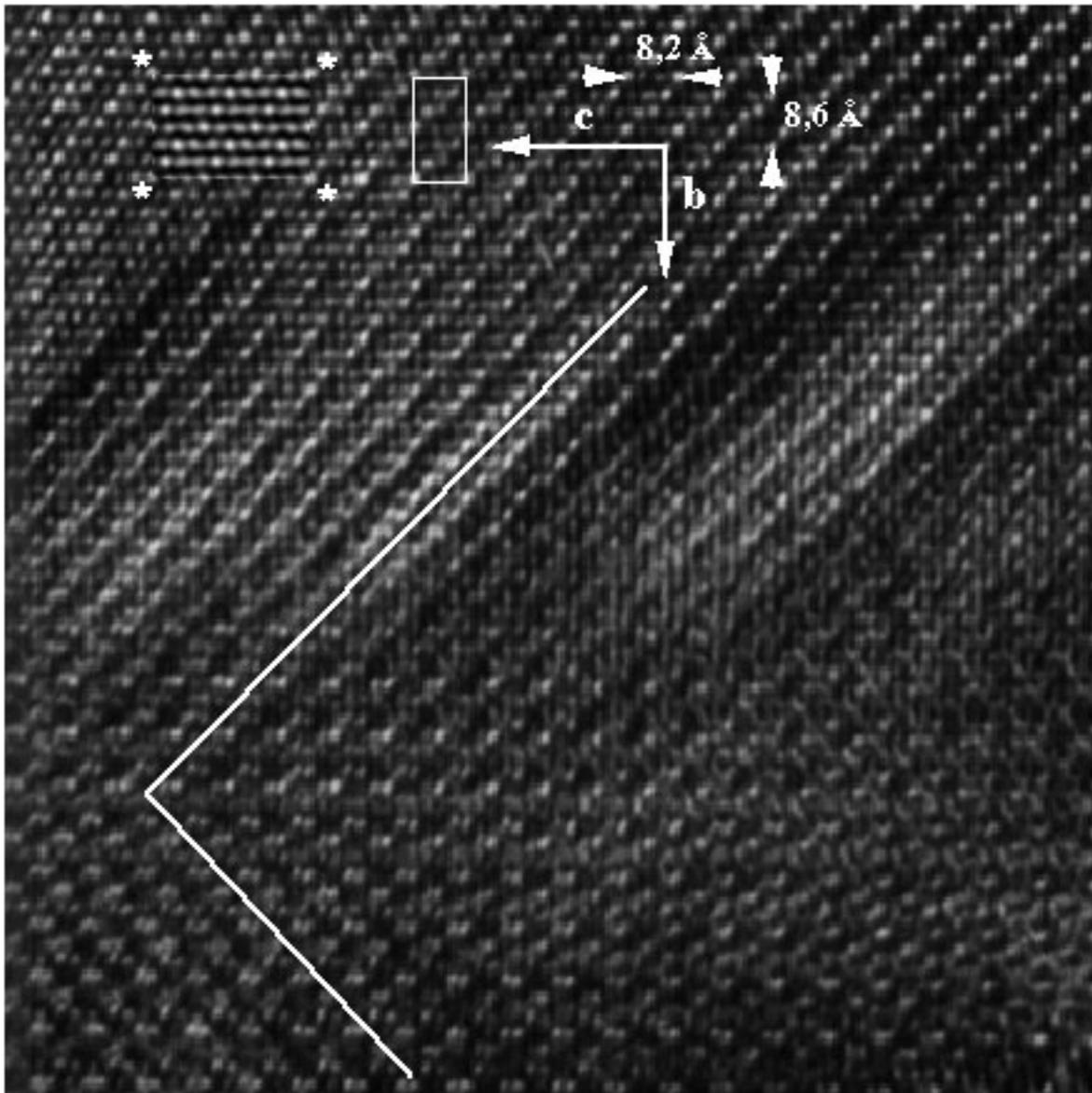


Abbildung 3.73: Vergrößerung des Ausschnittes A in Abbildung 3.72

Der Kontrastwechsel entlang der c-Achse zeigt ein Muster von einem hellen Fleck der mit je zwei dunkleren abwechselt. Dies lässt sich durch das Abwechseln von zwei Oktaedern mit einem trigonalen Prisma erklären. Das auf Basis dieses Modells berechnete Simulationsbild (oben links in Abbildung 3.73) mit $dt = 4 \text{ nm}$ und $df = -70 \text{ nm}$ passt ausgezeichnet zum gemessenen.

Auf diese Informationen aufbauend lässt sich ein Strukturmodell aufstellen, nach dem die Verbindung $Sr_4(Sr_{1-x}Pd_x)Pd_2O_9$ isostrukturell zu $Sr_4Ni_3O_9$ ¹¹⁶ ist. Die trigonale Symmetrie von $Sr_4Ni_3O_9$ wird zu orthorhombischer Symmetrie verzerrt, weil sich Palladium 2+, das eine quadratisch planare Umgebung bevorzugt, vermutlich nicht im Zentrum der trigonalen Pyramiden befindet, sondern eher in der Nähe einer der drei rechteckigen Prismenflächen. Das Auftreten von Scherungen und Zwillingen lässt sich unter Umständen auf eine ungeordnete Besetzung der Prismen durch Strontium und Palladium zurückführen. Weitere Untersuchungen ließen eine geringfügige Verzerrung der orthorhombischen Zelle ins Monokline als wahrscheinlich erscheinen. Das auf den elektronenmikroskopischen Aufnahmen basierende Strukturmodell ist in Abbildung 3.74 dargestellt:

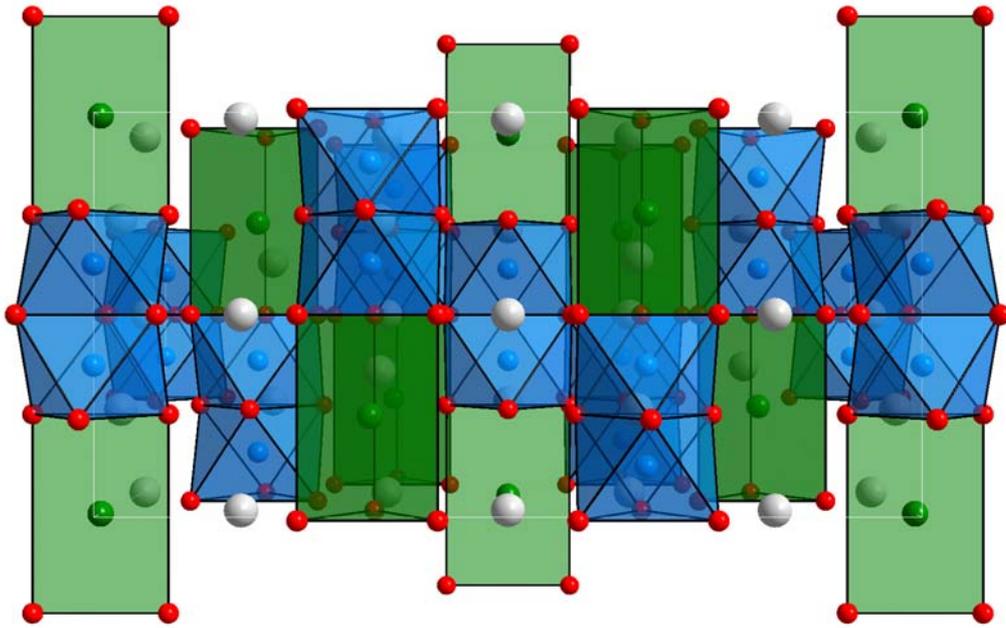


Abbildung 3.74: Strukturmodell von $Sr_{4+x}Pd_{3-x}O_9$ nach elektronenmikroskopischen Aufnahmen

Mit den vorhergehenden Strukturmodellen teilt es die Verwandtschaft zum hexagonalen Perowskit und das abwechselnde Muster von je zwei Oktaedern und einem Prisma in der Säule. In der Hälfte der Prismen ist das Zentrum von Palladiumatomen besetzt, während es im Falle der übrigen Prismen auf einer Prismenfläche sitzt. Hierdurch wird eine Zelle orthorhombischer Metrik erzwungen. Die Raumgruppe ist jedoch die monokline Raumgruppe $C 1 2 1$ (Nr. 5). Tabelle 3.12 gibt die kristallographischen Daten des resultierenden Strukturmodells wieder. Das Palladiumatom 1 ist quadratisch planar von Sauerstoff umgeben, während sich das Palladiumatom 3 in trigonal prismatischer Koordination befindet. Dieses Palladiumatom würde sich besonders für eine Mischbesetzung mit Strontium eignen. Der Diamagnetismus der Substanz widerspricht diesem Modell, da trigonal prismatisch umgebenes zweiwertiges Palladium zu Curie-Weiss-Paramagnetismus führen sollte. Darüberhinaus ist es fraglich ob eine geordnete, quadratisch planare Besetzung der Prismenflächen, wie sie dieses Modell suggeriert realistisch ist. Das in Abbildung 3.75 dargestellte, berechnete Röntgenpulverdiffraktogramm zeigt deutlich, dass diese Ordnung zu einer Vielzahl von Überstrukturreflexen führt, die jedoch nicht beobachtet werden. Dementsprechend ist auch jeder Versuch einer Strukturanpassung misslungen. In diesem Licht scheint die Annahme einer statistischen Ordnung wie im hexagonalen Strukturmodell als wahrscheinlich. Da die transmissionselektronischen Untersuchungen eine monokline Zelle orthorhombischer Metrik nahe legen, wurde das hexagonale Strukturmodell nach $C 1 2 1$ transformiert (Tabelle 3.14). Neben einer größeren Anzahl an unabhängigen Atomen kommt hier noch der monokline Winkel als zusätzlicher Freiheitsgrad hinzu. Das theoretische Pulverdiffraktogramm stimmt erwartungsgemäß gut mit dem gemessenen überein. Bislang konnte noch keine Verfeinerung zu einem befriedigenden Ergebnis gebracht werden. Es kann im übrigen nicht ausgeschlossen werden, dass die Zusatzreflexe in den Elektronenbeugungsaufnahmen, die auf eine orthorhombische Zelle hindeuten, auf die Verzwilligung der

Tabelle 3.13: kristallographische Daten des Strukturmodells für Sr₄Pd₃O₉ in *C 1 2 1* unter Annahme einer geordneten Prismenbesetzung

Raumgruppe		<i>C 1 2 1</i> (Nr. 5)				
Gitterparameter		a = 16,749(12) Å				
		b = 9,670(7) Å				
		c = 8,227 (4) Å				
		β = 90°				
Formeleinheiten pro Zelle		6				
Atom	Ox.	Wyck.	x	y	z	Besetzung
Pd1	+2	2a	0	0,91601	0	1
Pd2	+4	4c	0,00000	0,00000	0,37500	1
Pd3	+2	4c	0,16662	0,50000	0,25000	1
Pd4	+4	4c	0,16662	0,50000	0,62500	1
Pd5	+4	4c	0,16662	0,50000	0,87500	1
Sr1	+2	4c	0,83332	0,16662	0,25000	1
Sr2	+2	4c	0,33333	0,33333	0,00000	1
Sr3	+2	2a	0	0,32526	0	1
Sr4	+2	4c	0,00000	0,66666	0,25000	1
Sr5	+2	4c	0,16662	0,16662	0,34999	1
Sr6	+2	4c	0,16662	0,83332	0,50000	1
Sr7	+2	2b	0	0,31672	1/2	1
O1	-2	4c	0,25000	0,08331	0,00000	1
O2	-2	4c	0,16662	0,33333	0,00000	1
O3	-2	4c	0,41666	0,08331	0,00000	1
O4	-2	4c	0,00000	0,16662	0,25000	1
O5	-2	4c	0,16662	0,66666	0,75000	1
O6	-2	4c	0,41659	0,41659	0,25000	1
O7	-2	4c	0,58332	0,41666	0,25000	1
O8	-2	4c	0,75000	0,41666	0,25000	1
O9	-2	4c	0,91666	0,41666	0,25000	1
O10	-2	4c	0,08331	0,08331	0,50000	1
O11	-2	4c	0,25000	0,08331	0,50000	1
O12	-2	4c	0,41666	0,08331	0,50000	1
O13	-2	4c	0,16662	0,33333	0,50000	1
O14	-2	2b	0	5/6	1/2	1

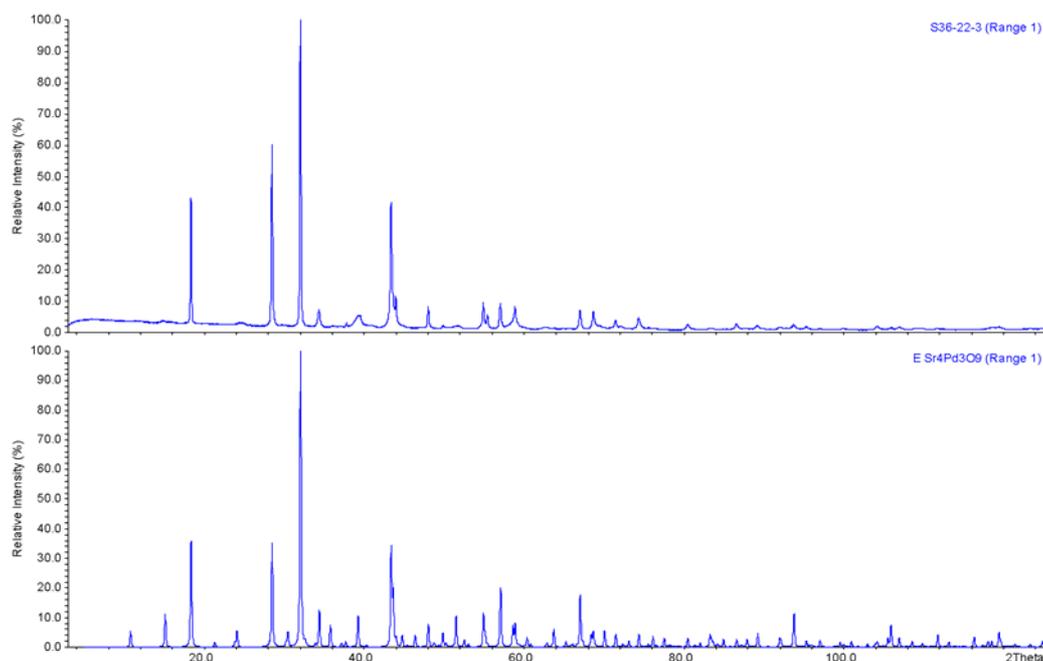


Abbildung 3.75: Vergleich des auf Basis der TEM-Untersuchungen erstellten Strukturmodells von Sr₄Pd₃O₉ mit dem gemessenen

Tabelle 3.13: kristallographische Daten des Strukturmodells für Sr₄Pd₃O₉ in C 1 2 1 unter Annahme einer statistischen Prismenbesetzung

Raumgruppe		C 1 2 1 (Nr. 5)				
Gitterparameter		a = 16,749(12) Å b = 9,670(7) Å c = 8,227 (4) Å β = 90°				
Formeleinheiten pro Zelle		6				
Atom	Ox.	Wyck.	x	y	z	Besetzung
Sr1	+2	4c	0,16666	0,33334	0,75000	1
Sr2	+2	4c	-0,66666	0,83334	0,75000	1
Sr3	+2	4c	0,500000	0,33333	0,75000	1
Sr4	+2	2b	1/2	0,66741	1/2	1
Sr5	+2	4c	0,33371	0,16629	0,50000	1
Sr6	+2	2a	1/2	0,68126	0	1
Sr7	+2	4c	0,34063	0,15937	0,00000	1
Pd1	+2	4c	046000	0,96000	0,50000	1/3
Pd2	+2	2b	1/2	0,08000	1/2	1/3
Pd3	+4	4c	0,33336	0,50000	0,35356	1
Pd4	+4	4c	0,33333	0,50000	0,07344	1
Pd5	+2	4c	-0,66660	0,41983	0,71346	1/3
Pd6	+2	4c	-0,70678	0,53998	0,71346	1/3
Pd7	+2	4c	-0,62662	0,54019	0,71346	1/3
Pd8	+4	4c	0,50000	0,00000	0,85994	1
O1	-2	4c	0,33334	0,34497	0,21344	1
O2	-2	4c	0,25581	0,57750	0,21344	1
O3	-2	4c	0,41084	0,57753	0,21344	1
O4	-2	4c	0,41337	0,42791	0,52343	1
O5	-2	4c	0,25727	0,41599	0,52343	1
O6	-2	4c	0,32936	0,65610	0,52343	1
O7	-2	2a	1/2	0,15500	0	1
O8	-2	4c	0,07750	0,42250	0,00000	1
O9	-2	4c	-0,59060	0,41578	0,90343	1
O10	-2	4c	-0,74681	0,42801	0,90343	1
O11	-2	4c	-0,66259	0,65621	0,90343	1
O12	-2	4c	-0,57598	0,08400	0,69000	1
O13	-2	4c	0,07999	0,57197	0,69000	1
O14	-2	4c	-0,50401	0,84403	0,69000	1

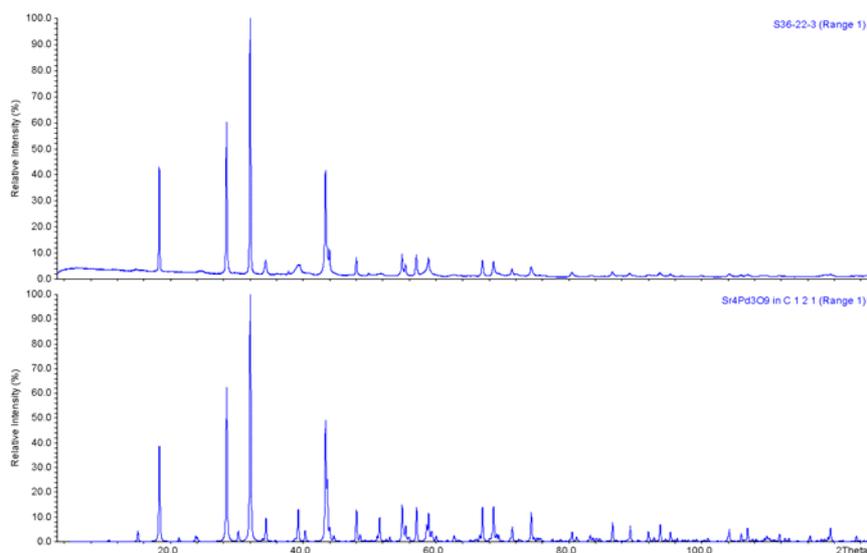


Abbildung 3.76: Vergleich des gemessenen Pulverdiffraktogramms mit dem theoretischen in Raumgruppe C 1 2 1 unter Annahme einer statistischen Verteilung der Prismenbesetzung

untersuchten Kristallite zurückzuführen ist.

3.4.4 Zusammenfassung und Ausblick

Sowohl die pulverdiffraktometrischen als auch elektronenmikroskopischen Untersuchungen an $Sr_4Pd_3O_9$ deuten auf ein Strukturmodell, das sich vom hexagonalen Perowskiten $BaNiO_3$ ableitet, wobei jedes dritte MO_6 -Oktaeder durch ein Prisma ersetzt ist. Indem Palladium(IV) die Oktaederzentren und Palladium(II) die Zentren der Prismenflächen besetzt, lässt sich für beide Palladiumsorten die bevorzugte Koordinationsgeometrie verwirklichen. Eine gewisse Plausibilität gewinnt das Modell auch dadurch, dass das vor kurzem beschriebene $Ca_{3,1}Cu_{0,9}RuO_6$ in einer ähnlichen Struktur kristallisiert¹¹⁷: Der wesentliche Unterschied besteht darin, dass in dieser Struktur jeweils ein Oktaeder mit einem Prisma abwechselt, Kupfer findet sich wie das zweiwertige Palladium auf den Prismenflächen wodurch eine durch den Jahn-Teller-Effekt begünstigte quadratisch planare Koordination erzielt wird. Die Frage, ob diese Besetzung zu einer orthorhombischen oder gar monokline Verzerrung der Struktur führt, konnte nicht abschließend geklärt werden: Während Elektronenbeugungsaufnahmen auf ein derartiges Bild hindeuten, sind die besten Indizierungen der Röntgenpulverdaten in der hexagonalen Raumgruppe $P 3 2 1$ (Nr. 150). In dieser Raumgruppe konnten auch Rietveldverfeinerungen durchgeführt werden, die aber derzeit zu noch nicht zu einem befriedigenden Ergebnis gekommen sind. Ziel weiterer Untersuchungen wird es sein, die Struktur durch die Kombination verschiedener Methoden zu lösen. Durch Röntgenbeugung mit Synchrotronstrahlung, können ggf. einige der Überstrukturreflexe besser aufgelöst werden. Die Leichtatomlagen können mit Hilfe von Neutronenbeugungsexperimenten erschlossen werden. Mit Hilfe von Röntgenabsorptionsspektroskopie (XANES und EXAFS) kann die lokale Geometrie um die Schweratome erforscht werden. Auch derartige Experimente könnten entscheidend zur Strukturklärung beitragen.

4 Bilanz und Ausblick

Ziele und Motivation dieser Arbeit waren die Suche nach und die Charakterisierung von neuen Übergangsmetalloxiden mit niedrigdimensionalen Bauelementen. Ein besonderes Augenmerk wurde dabei auf silberreiche Verbindungen gelegt, mit deren Hilfe Einblicke in die d^{10} - d^{10} -Wechselwirkung erlangt werden sollten.

Die Erwartungen des Chemikers an eine neue Verbindung sind vielfach durch einfache Konzepte und Analogieschlüsse geprägt. Eines dieser Konzepte ist dasjenige der formalen Oxidationsstufe. In den stabilsten binären Oxiden hat Silber die Oxidationsstufe +1, Palladium und Nickel die Oxidationsstufe +2. Für eine neue, ternäre Verbindung des Typs Ag_2MO_2 ($M = \text{Ni}, \text{Pd}$) würde man entsprechend von einwertigem Silber und einem zweiwertigen Übergangsmetall M ausgehen. Sucht man nun nach einem Strukturmodell für eine derartige Verbindung, würde man folgende lokalen Umgebungen vermuten:

1. Einwertiges Silber ist in oxidischer Umgebung linear von zwei Sauerstoffatome in einem Abstand von ungefähr 2,1 bis 2,3 Å umgeben. Zusätzliche Sauerstoffliganden sind in der Regel deutlich weiter entfernt.
2. Palladium ist in zweiwertigen Oxiden quadratisch planar koordiniert, wobei der Abstand zu den nächsten Sauerstoffnachbarn üblicherweise zwischen 2,0 und 2,1 Å liegt. Diese Koordination ist durch die Ausbildung eines low-spin Komplexes in der Elektronenkonfiguration d^8 besonders gut stabilisiert.
3. Auch das isoelektronische zweiwertige Nickel kann in Oxiden in quadratisch planarer Koordination vorkommen. Ein Beispiel hierfür ist Li_2NiO_2 ⁹⁴. Allerdings ist das Nickelion erheblich kleiner und damit schwerer polarisierbar als das Palladiumion. Entsprechend geringer ist die durch die quadratisch planare Koordination gewonnene zusätzliche Stabilisierungsenergie. Infolgedessen findet sich zweiwertiges Nickel in oxidischen Festkörpern am häufigsten in oktaedrischer Umgebung, wobei der Nickel-Sauerstoffabstand bei etwa 1,95 Å liegt.

Tatsächlich passen sowohl die Struktur als auch die physikalischen Eigenschaften von Ag_2PdO_2 hervorragend in dieses Schema: Silber ist ebenso erwartungsgemäß linear, Palladium quadratisch-planar koordiniert. Da in diesem Fall nur gepaarte Elektronen vorliegen, ist die Verbindung diamagnetisch. Wie bei den beiden binären Oxiden handelt es sich bei Ag_2PdO_2 um einen Nichtleiter mit einer nur geringen intrinsischen Bandlücke von 0,18(2) eV. Die Kristallstruktur von Ag_2PdO_2 ($I mmm$) zeigt Ähnlichkeiten mit derjenigen von Li_2PdO_2 ^{92,93}, das im Li_2CuO_2 -Typ⁹¹ kristallisiert. Deutlich verschieden von diesem Typ ist jedoch die Lage der A-Kationen (Ag bzw. Li), wodurch für Silber eine lineare, für Lithium jedoch eine tetraedische Koordination erreicht wird. Infolgedessen bilden die Kationen in Ag_2PdO_2 eine nur leicht verzerrte kubisch dichte Kugelpackung, wobei 2/3 der Oktaederlücken von Sauerstoff besetzt sind. Auf diese Weise lässt sich die Struktur von Ag_2PdO_2 als eine NaCl-Defektstruktur beschreiben, während eine derartige Beschreibung für den Li_2CuO_2 -Typ nicht möglich ist. Somit bildet Ag_2PdO_2 einen neuen, eigenen Strukturtyp. Angesichts der Tatsache, dass Li_2PdO_2 und Li_2NiO_2 isotyp sind, erscheint die Annahme, dass solches auch für Ag_2NiO_2 und Ag_2PdO_2 gelten könnte sehr plausibel, zumal auch diese beiden Verbindungen unter sehr ähnlichen Bedingungen dargestellt werden. Tatsächlich verrät der erste Blick auf die Pulverdiffraktogramme und auf die rasterelektronenmikroskopischen Aufnahmen, dass diese Annahme nicht stimmen kann. Das Pulverdiffraktogramm von Ag_2NiO_2 lässt sich nicht orthorhombisch in $I mmm$ sondern rhomboedrisch in der Raumgruppe $R\bar{3}m$ indizieren. Entsprechend unterschiedlich ist auch die Morphologie der Kristallite. Die Strukturlösung von Ag_2NiO_2 zeigt schließlich, dass nicht nur ein völlig

anderer und ebenfalls neuer Strukturtyp vorliegt, sondern auch, dass die Analogien in anderer Richtung zu suchen sind:

1. Silber liegt nicht in linearer Sauerstoffkoordination vor, sondern in Form hexagonaler Silberdoppellagen, wobei jedes Silberatom von je drei Sauerstoffatomen und drei plus sechs weiteren Silberatomen koordiniert ist. Vergleichbare Bindungsverhältnisse sind vom Silbersuboxid Ag_3O und dem Silbersubfluorid Ag_2F bekannt. Der Abstand zwischen den Silberatomen ist durch die Gitterkonstante a gegeben und zu einem erheblichen Umfang von der Nickel-Sauerstoff-Geometrie mitbestimmt. Der kürzere Ag-Ag-Abstand findet sich jedoch zwischen Silberatomen benachbarter Ebenen und ist mit $2,838(1) \text{ \AA}$ sogar noch geringer als in metallischem Silber. Da dieser Abstand nicht durch äußere Zwänge erzwungen ist, deutet er auf eine starke Wechselwirkung der Silberatome hin, die möglicherweise nicht vollständig mit der partiellen Besetzung der $5s$ Schale (pro Atom nur ein halbes s -Elektron!!) zu erklären ist. Vielmehr sollte eine zusätzliche Wechselwirkung der Silberatome im Rahmen der d^{10} - d^{10} -Wechselwirkung in Betracht gezogen werden. Auffällig ist die Tatsache, dass Ag_2F , in dem Silber identische Bindungsverhältnisse aufweist, das einzige bekannte Subfluorid ist. Dies spricht für eine besondere Stabilisierung dieser Verbindung. Angesichts dessen erscheint die Erklärung, dass sich in einem Oktaeder sechs Silberatome drei Elektronen teilen, unbefriedigend.
2. Nickel findet sich in $[\text{NiO}_2]$ – Schichten von kantenverknüpften Oktaedern, wie in dem schon seit längerem bekannten Delafossit AgNiO_2 . Auch Bindungsabstände und Winkel stimmen recht gut mit dem Delafossit überein, in dem das Nickel dreiwertig ist. Allerdings liegen sie in einem Rahmen, der auch für zweiwertiges Nickel charakteristisch ist, so dass der strukturchemische Vergleich keine eindeutigen Rückschlüsse auf die Bindungsverhältnisse zulässt.

Das zunächst unkonventionelle Modell, nach dem neben subvalentem Silber hochoxidiertes Nickel vorliegt, wird durch physikalische Sonden, speziell der Messung der magnetischen Suszeptibilität und der Röntgennahkantenspektroskopie (XANES) erhärtet. Das magnetische Moment entspricht im paramagnetischen Bereich einem ungepaarten Elektron, was dafür spricht, dass Nickel in der Elektronenkonfiguration d^7 im low-spin Zustand vorliegt. Die Verschiebung der Ni-K-Absorptionskante ist ebenfalls ein starkes Indiz für dreiwertiges Nickel. Ein theoretisches Modell dieser Verbindung muss folgende Fakten schlüssig erklären:

3. Suboxidischer Charakter der Silber-Sauerstoff-Teilstruktur.
4. Der Curie-Weiss-paramagnetische Bereich oberhalb von 56 K zeigt nur ein ungepaartes Elektron, obwohl zwei ungepaarte Elektronen vorliegen: Sofern Nickel dreiwertig ist, muss pro Formeleinheit ein ungepaartes Elektron in den Silberschichten vorliegen. Da dieses Elektron kein Curie-Weiss-Verhalten zeigt, muss es metallisch delokalisiert sein.
5. Aus den Tieftemperaturneutronenbeugungen geht hervor, dass der Grundzustand des Systems der eines triangularen, frustrierten Ising-Antiferromagneten ist. Es muss also ein spinpolarisiertes Energieminimum vorliegen.
6. Es gibt nur eine kristallographische Silberlage, eine Disproportionierung des Silbers wäre allenfalls in Form einer Ladungsdichtewelle (CDW, vergleiche BaBiO_3) denkbar.
7. Die Verbindung ist im Temperaturbereich zwischen 5 und 300 K ein guter, metallischer Leiter.

Die Ergebnisse der FEFF8-Rechnungen sind mit diesen Fakten insofern nicht in Einklang zu bringen, als die Niveaus an der Fermikante eindeutig Nickel und Sauerstoffcharakter haben. Dies erklärt zwar die metallische Leitfähigkeit, nicht aber, dass nur eine Sorte Silberatome im

System vorliegt. Die nicht spinpolarisierten TB-LMTO-Rechnungen zeigen zwar ebenfalls Nickel 3d- und Sauerstoff 2p-Zustände am Fermi-niveau, aber zusätzlich auch Silber-5s/5p-Zustandsdichte, die im Falle von AgNiO_2 nicht vorhanden ist. Geht man nach den Ergebnissen der Hartree-Fock-Rechnungen, so ist die Silber-5s/5p-Zustandsdichte am Fermi-niveau bestimmend. Im Falle der spinpolarisierten UHF-Rechnungen steigen die Nickel-Sauerstoffniveaus, die im Falle der TB-LMTO-Rechnungen mit dem Fermi-niveau überlappen, weit oberhalb des Fermi-niveaus. Nach diesen Rechnungen zu urteilen, findet die Leitfähigkeit in Ag_2NiO_2 fast ausschließlich in den Ag_2 -Schichten statt. Allerdings ist die Referenzverbindungen AgNiO_2 nach den UHF-Rechnungen ein Nichtleiter, was weder der Literatur noch den experimentellen Befunden entspricht. Da die quantenchemischen Rechnungen, je nach Methode zu etwas unterschiedlichen Ergebnissen führen, ist der Vergleich mit photoelektronenspektroskopischen Untersuchungen zur Elektronenstruktur von besonderer Bedeutung: Bezüglich des Fermi-niveaus zeigen diese einerseits Nickel 3d- und Sauerstoff 2p-Zustände, die sich bis ans Fermi-niveau erstrecken, andererseits im Falle von Ag_2NiO_2 gegenüber AgNiO_2 zusätzliche Elektronendichte, die sich möglicherweise auf zusätzliche Silber 5s/5p-Zustände zurückführen lässt. Für AgNiO_2 wurde im Gegensatz zu den UHF-Rechnungen keine Bandlücke gefunden. Allerdings stellen die UP-Spektren im Valenzbereich das gängige Valenzfluktuationsmodell in Frage: die Silber-4d-Zustände liegen in den Spektren energetisch tiefer als die Nickel 3d- und Sauerstoff 2p-Zustände, ein partieller Ladungsübertrag von Silber auf Nickel erscheint im Lichte dieser Ergebnisse eher unwahrscheinlich. Ein alternativer Erklärungsansatz lässt sich im Rahmen der d^{10} - d^{10} -Wechselwirkung entwickeln. Infolge der Hybridisierung der abgeschlossenen 4d-Schale mit unbesetzten 5s- und 5p-Niveaus kommt es zu Wechselwirkungen zwischen den Silberatomen, die je nach Abstand der Silberatomen halbleitende oder gar metallische Leitfähigkeit zur Folge haben kann.

Zusammen mit vielen Übergangsmetalldefosfiten wie auch AgNiO_2 ist Ag_2NiO_2 ein trigonaler, frustrierter Antiferromagnet. Nach theoretischen Überlegungen kommen für diese Systeme verschiedene Grundzustände in Frage. Im Falle eines RVB-Zustandes liegt zwischen den vorzugsweise antiferromagnetisch koppelnden Spins nur eine kurzreichweitige, fluktuierende Ordnung vor. Bei einem Spinglas findet sich dagegen eine statische Nahordnung der Spins, während eine Fernordnung fehlt. Demgegenüber schlägt das Isingmodell für einen triangularen Antiferromagneten eine statische Ordnung mit Translationssymmetrie als Grundzustand vor. Indem ein Drittel der beteiligten magnetischen Momente „neutral“ in der Ebene ausgerichtet ist, wird in diesem Modell eine energetisch ungünstige ferromagnetische Ausrichtung benachbarter Spinmomente verhindert. Mit Hilfe von Neutronenbeugungsexperimenten konnte dieser Zustand für Ag_2NiO_2 als Grundzustand nachgewiesen werden. Ag_2NiO_2 ist damit das erste System, in dem dieser Grundzustand erwiesenermaßen realisiert ist.

Insgesamt bestätigen die Untersuchungen der Bandstruktur so ein recht faszinierendes Modell von der neuen Verbindung: Sie vereinigt metallische, ionische und kovalente Bindungsmerkmale miteinander, indem schichtförmige, metallische $[\text{Ag}_2^+]_\infty$ -Polykationen mit Schichten ionisch-kovalenter $[\text{NiO}_2^-]_\infty$ -Anionen abwechseln. Gerade die Ausbildung dieser charakteristischen Silberteilstruktur ist besonders gut im Rahmen der d^{10} - d^{10} -Wechselwirkung zu verstehen, die in diesem Falle wie auch im Falle der anderen subvalenten Silberverbindungen durch die partielle Besetzung der 5s-Unterschale verstärkt wird. Die Wechselwirkung zwischen diesen Polyionen ihrerseits kann in erster Näherung als ionisch betrachtet werden. Dieses reizvolle Wechselspiel verschiedener Bindungstypen in einer Verbindung macht Ag_2NiO_2 besonders interessant für eine tiefgreifende und detaillierte Untersuchung, wie sie im Rahmen dieser Arbeit in Angriff genommen wurde.

Die Darstellungen weiterer isotyper Verbindungen mit anderen Übergangsmetallen ist zum weiteren Verständnis und auch im Hinblick auf mögliche Supraleitung von besonderem

Interesse. In dieser Hinsicht ist auch die Modifizierung von Ag_2NiO_2 selbst sehr interessant: Zum Beispiel könnte man versuchen, Lithium zwischen die $[\text{Ag}_2^+]_\infty$ - und die $[\text{NiO}_2]_\infty$ -Schichten zu intercalieren und die Auswirkungen auf die Ladungsbilanz sowie die elektrischen Transporteigenschaften zu untersuchen. Es ist denkbar, dass im Verlaufe dieser Modifizierung infolge der zusätzlichen magnetischen Frustration ein RVB-Grundzustand, der ggf. mit Supraleitung einhergeht, realisiert wird.

Bereits seit längerem sind Delafossite des Typs PdMO_2 ($M = \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$) bekannt, in denen Palladium die Stelle des Silbers einnimmt und linear koordiniert ist. Es ist daher durchaus vorstellbar, dass sich Silber in Ag_2NiO_2 zumindestens partiell durch Palladium ersetzen lässt. Auch hier sind Materialien mit besonderen Eigenschaften vorstellbar.

Im Rahmen der Suche nach alternativen supraleitenden Systemen wurde 1992 von G. Krämer erstmals eine Verbindung der nominellen Zusammensetzung $\text{Sr}_3\text{Pd}_2\text{O}_7$ beschrieben. Eine endgültige Strukturklärung stand jedoch aus. Neuere Untersuchungen mit Hilfe von Röntgenpulver- und Elektronenbeugung, sowie Transmissionselektronenmikroskopie zeigen, dass die Zusammensetzung besser mit $\text{Sr}_{4+x}\text{Pd}_{3-x}\text{O}_9$ wiedergegeben ist. Das Strukturmodell lässt sich von dem hexagonalen Perowskiten ableiten. Die PdO-Teilstruktur besteht aus PdO_3 -Säulen, die in der a,b-Ebene hexagonal gepackt sind. Im Gegensatz zum hexagonalen Perowskit, in dem die Säulen aus flächenverknüpften Oktaedern bestehen, alternieren in $\text{Sr}_{4+x}\text{Pd}_{3-x}\text{O}_9$ je zwei Oktaeder mit einem trigonalen Prisma. In den Oktaederzentren wird vierwertiges Palladium in den Prismen zweiwertiges Palladium vermutet. Die bevorzugte quadratisch planare Koordination des zweiwertigen Palladiums lässt sich durch Besetzung der Prismenflächen erreichen. Dies steht auch mit dem gemessenen Diamagnetismus der Verbindung im Einklang. Dennoch konnte auch dieses Modell bislang noch nicht befriedigend verfeinert werden. Zur endgültigen Strukturaufklärung sind weitere Untersuchungen erforderlich.

5 Literaturverzeichnis

- ¹ J. G. Bednorz, K. A. Müller, *Z. Phys.* **1986**, *B64*, 187.
- ² J. M. Thomas, K. Zamaraev, *Perspectives in Catalysis*, Blackwell, Oxford, **1991**.
- ³ J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, and J. Akimitsu, *Nature* (London), **2001**, *410*, 63.
- ⁴ M. Jansen, *Angew. Chem.* **1987**, *99*, 1136.
- ⁵ R. Nacken, *Chem. Ztg.* **1950**, *74*, 745.
- ⁶ A. Neuhaus, *Angew. Chem.* **1954**, *66*, 524.
- ⁷ H. Krischner, B. Koppelhuber-Bitschnau, *Röntgenstrukturanalyse und Rietveldmethode*, 5. Aufl., Vieweg & Sohn, Braunschweig 1994.
- ⁸ E. R. Wölfel, *Theorie und Praxis der Röntgenstrukturanalyse*, 3. Aufl., Vieweg & Sohn, Braunschweig 1987.
- ⁹ D. L. Bish, J. E. Post, *Modern Powder Diffraction*, in: *Reviews in Mineralogy*, 1st ed., Vol. 20, Mineralogical Society of America, Washington D.C., 1989.
- ¹⁰ Win X-Pow, Powder Software Manual Rev, Fa. Stoe&Cie GmbH, Darmstadt, 1999.
- ¹¹ G. Bergerhoff, R. Hundt, R. Sievers, I. D. Brown, *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* **1983**, *23*,66. FIZ Karlsruhe
- ¹² P. E. Werner, L. Eriksson. M. J. Westdahl, *J. Appl. Crystallogr.* **1985**, *18*, 367.
- ¹³ J. W. Visser, *J. Appl. Crystallogr.* **1969**, *2*, 89.
- ¹⁴ H. Putz, J. C. Schön, M. Jansen, *J. Appl. Crystallogr.* **1999**,*32*, 864.
- ¹⁵ K. D. M. Harris, M. Tremayne, *Chem. Mater.* **1996**, *8*, 2554.
- ¹⁶ H. M. Rietveld, *Acta Crystallogr.* **1967**, *22*, 151.
- ¹⁷ H. M. Rietveld, *J. Appl. Crystallogr.* **1969**, *2*, 65.
- ¹⁸ J. Rodriguez-Carvajal, Programm: *FullProf.99 Version 0.1*, January **1999** (JRC-LLB).
- ¹⁹ A. C. Larson, R. B. von Dreele, GSAS General Structure Analysis System, LAUR 86-748, LANL, Los Alamos, USA, 1994.
- ²⁰ T. Degen, *Diffrakt97*, V0.99, **1997**.
- ²¹ W. M. Elsasser, *C. R. Acad. Sci.* **1936**, *202*, 1029.
- ²² D.P. Mitchell, P. N. Powers, *Phys.Rev.* **1936**, *50*, 486.
- ²³ W. Kockelmann, H. Tietze-Jaensch, E. Jansen, W. Schäfer, *ROTAX 95/96 ActivityReport 95/96*, RAL Technical Report RAL-TR-97-018, 1997.
- ²⁴ *ISIS 97, The Rutherford Appleton Laboratory, ISIS Facilitya Annual report, 1996-97*, CLRC, Chilton, 1997.
- ²⁵ AK Neutronenstreuung, in: *Mitteilungen der deutschen Gesellschaft für Kristallographie e.V.*, **1997**, *15*.
- ²⁶ W. Schäfer, W. Kockelmann, E. Jansen, W. Schmidt, H. Tietze-Jaensch, G. Will, *Mater. Sci. Forum*, **1996**, *253*, 228-31.

- 27 W. Schäfer, E. Jansen, R. Skowronek, G. Will, W. Kockelmann, W. Schmidt, H. Tietze-Jaensch, *Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. Sect. A* **1995**, 364, 179.
- 28 M. Knoll, E. Ruska, *Z. Phys.* **1932**, 78, 318.
- 29 M. von Heidendahl, *Einführung in die Elektronenmikroskopie*, 1. Aufl., Vieweg & Sohn, Braunschweig, **1970**.
- 30 K. H. Lieser, *Einführung in die Kernchemie*, 2. Aufl., Verlag Chemie, Weinheim, **1980**.
- 31 J. C. Russ, *Fundamentals of Energy Dispersive X-Ray Analysis*, 1st ed., Butterworth, London, **1984**.
- 32 W. Raith (Hrsg.), *Bergmann-Schaefer – Lehrbuch der Experimentalphysik*, Band 6 Festkörper, Walter de Gruyter, Berlin, **1992**.
- 33 H. Lueken, *Magnetochemie*, B.G. Teubner, Stuttgart **1999**.
- 34 W. Buckel, *Supraleitung*, 5. Aufl., Verlag Chemie, Weinheim **1973**.
- 35 H. Krebs; *Z. anorg. allg. Chem.*, **1951**, 266, 175.
- 36 H. Krebs; *Angew. Chem.*, **1953**, 65, 293.
- 37 <http://www-elsa.physik.uni-bonn.de/Beschleunigeranlage/elsaplan.html> .
- 38 <http://syli04.physik.uni-bonn.de/xrabs.html>.
- 39 C. Linke, *Dissertation*, Bonn, **1996**.
- 40 P. Behrens, S. Aßmann, U. Bilow , C. Linke, M. Jansen, *Z. anorg. allg. Chem.* **1999**, 625, 111-116.
- 41 C. D. Wagner et al., *Handbook of X-Ray Photoelectron Spectroscopy*, Perkin Elmer.
- 42 D. Briggs, M. P. Seah, *Practical Surface Analysis I*, Wiley, **1990**.
- 43 M. Cardona, L. Ley : *Photoemission in Solids I + II*, Ed. M. Cardona, L. Ley , SpringerVerlag, **1978**.
- 44 S. Hüfner, *Photoelectron Spectroscopy*, Solid States Sciences 82, Springer Verlag, **1995**.
- 45 R. O. Jones und O. Gunnarsson, *Rev. Mod. Phys.***1989**, 61, 689.
- 46 P. Hohenberg und W. Kohn, *Phys. Rev.* **1964**, 136, B864.
- 47 W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **1965**, 140, A1133.
- 48 O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **1975**, 12, 3060.
- 49 A. L. Ankudinov, B. Ravel, J. J. Rehr, S. D. Conradson, *Phys. Rev. B*, **1998**, 58, 7565.
- 50 O. K. Andersen, O. Jepsen , *Physical Review Letters* **1984**, 53, 2571.
- 51 R. Hoffmann, *Solids and Surfaces: A Chemist's View on Bonding in Extended Structures.*, VCH, Weinheim, **1988**.
- 52 R. Ramirez, M. C. Böhme, *Int. J. Quant. Chem.* **1988**, XXXIV, 571.
- 53 H. K. Onnes, *Comm. Leiden*, **1911**, 120b.
- 54 W. Meissner, R. Ochsenfeld, *Naturwissenschaften* **1933**, 21, 787.
- 55 E .Hering, *Physik für Ingenieure*, VDI-Verlag, Düsseldorf **1988**.
- 56 J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, *Phys. Rev* **1957**, 108, 1175.
- 57 J. K. Hulm, C. K. Jones, R. A. Hein. J. W. Gibson, *J. Low Temp. Phys.* **1972**, 7, 291.

- 58 H. R. Khan, Ch. J. Raub, W. E. Gardner, W. A. Fertig, D. C. Johnston, M. B. Maple, *Mater. Res. Bull.* **1974**, *9*, 1129.
- 59 J. F. Schooley, W. R. Hosler, M. L. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **1980**, *45* 1352.
- 60 Ch. J. Raub, A. R. Sweedler, M. A. Jensen, S. Broadston, B. T. Matthias, *Phys. Rev. Lett.* **1964**, *13*, 746.
- 61 M. Greenblatt, W. H. McCarroll, R. Neifeld, M. Croft, J. V. Waszczak, *Solid State Commun.* **1984**, *51*, 671.
- 62 C. Schlenker, H. Schwenk, C. Escribe-Filippini, J. Marcus, *Physica B* **1985**, *135*, 511.
- 63 A. W. Sleight, T. A. Bither, P. E. Bierstedt, *Solid State Commun.* **1969**, *7*, 299.
- 64 D. C. Johnston, H. Prakash, W. H. Zachariasen, R. Viswanathan, *Mater. Res. Bull.* **1973**, *8*, 777.
- 65 A. Schilling, M. Cantoni, J. D. Guo, H. R. Ott, *Nature (London)* **1993**, *363*, 56.
- 66 E.V. Antipov, S. M. Loureiro, C. Chaillout, J. J. Capponi, P. Bordet, J. L. Tholence, S. N. Putilin, M. Marezio, *Physica C* **1993**, *215*, 1.
- 67 R., J. Cava, *J. Am. Ceram. Soc.* **2000**, *83* [1], 5.
- 68 P. W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **1975**, *34*, 953.
- 69 P. W. Anderson, *Science* **1987**, *235*, 1196.
- 70 P. W. Anderson, G. Baskaran, Z. Zou, T. Hsu. *Phys. Rev. Lett.* **1987**, *58*, 2790.
- 71 P. W. Anderson, *Mat. Res. Bull.* **1973**, *8*, 153.
- 72 L. E. Orgel, *J. Chem. Soc.* **1958**, 4186.
- 73 G. A. Barclay, B. F. Hoskins, *J. Chem. Soc.* **1963**, 2807.
- 74 M. Jansen, *Acta Crystallogr. Sect. B* **1977**, *33*, 3585.
- 75 R. Masse, J. C. Guitel, A. Durif, *Acta Crystallogr. Sect. B* **1979**, *35*, 1428.
- 76 M. Jansen, *Z. Naturforsch. B* **1975**, *30*, 854.
- 77 A. Bondi, *J. Phys. Chem.* **1964**, *68*, 441.
- 78 M. Jansen, H. L. Keller, *Angew. Chem.* **1979**, *91*, 500.
- 79 B. U. Köhler, M. Jansen, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1986**, *534*, 73.
- 80 I. D. Brown in M. O'Keefe, A. Navrotsky (Hrsg.): *Structure and Bonding in Crystals, Vol. II*, Academic Press, New York **1981**.
- 81 C. Friebe, M. Jansen, *Z. Naturforsch. B* **1984**, *39*, 739.
- 82 B. U. Köhler, W. Weppner, M. Jansen, *J. Solid State Chem.* **1985**, *57*, 227.
- 83 N. Kijima, K. Tanaka, F. Maruma. *Acta Crystallogr. Sect. B* **1983**, *39*, 569.
- 84 P. K. Mehrotra, R. Hoffmann, *Inorg. Chem.* **1978**, *17*, 2187.
- 85 A. Dedieu, R. Hoffmann, *J. Am. Chem. Soc.* **1978**, *100*, 2074.
- 86 Y. Jiang, S. Alvarez, R. Hoffmann, *Inorg. Chem.* **1985**, *24*, 749.
- 87 J.K. Burdett, *Prog. Solid State Chem.* **1984**, *15*, 173.
- 88 G. Argay, F. Naray –Szabo, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1966**, 329.

- 89 W. Beesk, P. G. Jones, H. Rumpel, E. Schwarzmann, G. M. Sheldrick, *J. Chem. Soc. Commun.* **1981**, 664.
- 90 Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, J. G. Bednorz, F. Lichtenberg, *Nature* **1994**, 372, 532
- 91 R. Hoppe, H. Rieck, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1979**, 379, 157.
- 92 B. L. Dubey, J. A. Gard, F. P. Glasser, A. R. West, *J. Solid State Chem.* **1973**, 6, 329.
- 93 R. Wolf, R. Hoppe, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1986**, 536, 77.
- 94 H. Rieck, R. Hoppe, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1972**, 392, 193.
- 95 G. Brauer, *Handbuch der Präparativen Anorganischen Chemie*, 3. Auflage, Stuttgart 1981.
- 96 H. D. Wasel-Nielen, R. Hoppe, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1970**, 395, 209.
- 97 H. Sabrowski, W. Bronger, *Z. Naturforsch. B* **1974**, 29, 10.
- 98 R. D. Shannon, D. B. Rogers, C. T. Prewitt, *Inorg. Chem* **1971**, 10, 713.
- 99 R. D. Shannon, D. B. Rogers, C. T. Prewitt, *Inorg. Chem* **1971**, 10, 719.
- 100 R. D. Shannon, D. B. Rogers, C. T. Prewitt, *Inorg. Chem* **1971**, 10, 723.
- 101 A. Wichainchai, P. Dordor, J. P. Doumerc, E. Marquestaut, M. Pouchard, P. Hagenmuller, A. Ammar, *J. Solid State Chem.* **1988**, 74, 126.
- 102 Y. J. Shin, J. P. Doumerc, P. Dordor, C. Delmas, M. Pouchard, P. Hagenmuller, *J. Solid State Chem.* **1993**, 107, 303.
- 103 R. Moessner, S. L. Sondhi, *Phys. Rev. B* **2001**, 63, 224401.
- 104 J.J. Yeh, I. Landau, *At.Data Nucl. Data Tables* **1985**, 32(1).
- 105 S. R. Barman, A. Chainani und D.D. Sharma; *Phys. Rev. B* **1994**, 49(12), 8475.
- 106 T. Mizokawa, A. Fujimori, T. Arima, Y. Tokura, N. Mori, J. Akimitsu *Phys. Rev. B* **1994**, 52(19), 13865.
- 107 P. Ugliengo, C. M. Zicovich-Wilson, V. R. Saunders, B. Civalleri, *Chem. Phys. Lett.* **1998**, 292(4-6), 394.
- 108 Okamoto, *Acta Crystallogr. Sec. B* **1972**, 28, 1774 .
- 109 G. Krämer, *Dissertation*, Universität Bonn, **1995**.
- 110 G. Krämer, M. Jansen, *J. Solid State Chem.* **1995**, 114, 206-10.
- 111 G. Krämer, E. Hägele, N. Wagner, M. Jansen, *Z. anorg. allg. Chem.* **1996**, 622, 1027-34.
- 112 G. Krämer, *Diplomarbeit*, Bonn, **1992**.
- 113 P.S. Haradem, B.L. Chamberland, L. Katz, A. Gleizes, *J. Solid State Chem.* **1977**, 21, 217.
- 114 M. Strunk, Hk. Müller-Buschbaum, *J. Alloys Comp.* **1994**, 209, 189.
- 115 G. Demazeau, I. Omeran, M. Pouchard, P. Hagenmueller, *Mat. Res. Bull.* **1976**, 11, 1449.
- 116 F. Abraham, S. Minaud, C. Renard, *JMACE* 1994, 4, 1763.
- 117 C. A. Moore, E. J. Cussen, P. D. Battle, *J. Solid State Chem.* **2000**, 153, 254.

7 Anhang

Tabelle A1: gemessene und berechnete Struktur Faktoren von Ag_2PdO_2 aus Röntgenpulverdaten.

Iref	H	K	L	Mul	Icod	D-space	Fosq	Fcsq	FoTsq	FcTsq	Phas
1	0	0	2	2	1121	4,94884	3,874E+04	3,174E+04	2,218E+03	1,815E+03	0
2	0	0	2	2	1021	4,94884	3,874E+04	3,174E+04	2,218E+03	1,815E+03	0
3	1	0	1	4	1121	4,13802	5,277E+03	3,956E+02	2,977E+02	1,724E+01	180
4	1	0	1	4	1021	4,13802	5,277E+03	3,956E+02	2,977E+02	1,724E+01	180
5	0	1	1	4	1021	2,87805	1,440E+04	1,939E+04	8,151E+02	1,102E+03	180
6	0	1	1	4	1121	2,87805	1,440E+04	1,939E+04	8,151E+02	1,102E+03	180
7	1	0	3	4	1021	2,67201	5,333E+05	5,456E+05	3,037E+04	3,108E+04	0
8	1	0	3	4	1121	2,67201	5,333E+05	5,456E+05	3,037E+04	3,108E+04	0
9	1	1	0	4	1121	2,51013	5,786E+05	5,794E+05	3,293E+04	3,298E+04	0
10	1	1	0	4	1021	2,51013	5,786E+05	5,794E+05	3,293E+04	3,298E+04	0
11	0	0	4	2	1121	2,47442	1,238E+05	9,509E+04	7,057E+03	5,408E+03	180
12	0	0	4	2	1021	2,47442	1,238E+05	9,509E+04	7,057E+03	5,408E+03	180
13	2	0	0	2	1121	2,27762	7,901E+05	7,667E+05	4,499E+04	4,364E+04	0
14	2	0	0	2	1021	2,27762	7,901E+05	7,667E+05	4,499E+04	4,364E+04	0
15	1	1	2	8	1121	2,23863	3,183E+04	2,563E+04	1,818E+03	1,461E+03	0
16	1	1	2	8	1021	2,23863	3,183E+04	2,563E+04	1,818E+03	1,461E+03	0
17	0	1	3	4	1021	2,22283	6,085E+05	6,338E+05	3,462E+04	3,607E+04	0
18	0	1	3	4	1121	2,22283	6,085E+05	6,338E+05	3,462E+04	3,607E+04	0
19	2	0	2	4	1121	2,06901	2,857E+04	1,688E+04	1,633E+03	9,619E+02	0
20	2	0	2	4	1021	2,06901	2,857E+04	1,688E+04	1,633E+03	9,619E+02	0
21	1	0	5	4	1021	1,81552	1,013E+05	9,373E+04	5,760E+03	5,324E+03	0
22	1	0	5	4	1121	1,81552	1,013E+05	9,373E+04	5,760E+03	5,324E+03	0
23	2	1	1	8	1121	1,78601	9,910E+03	8,417E+03	5,618E+02	4,760E+02	180
24	2	1	1	8	1021	1,78601	9,910E+03	8,417E+03	5,618E+02	4,760E+02	180
25	1	1	4	8	1021	1,76217	1,159E+04	1,415E+04	6,467E+02	7,938E+02	180
26	1	1	4	8	1121	1,76217	1,159E+04	1,415E+04	6,467E+02	7,938E+02	180
27	2	0	4	4	1021	1,67578	5,194E+04	4,662E+04	2,946E+03	2,640E+03	180
28	2	0	4	4	1121	1,67578	5,194E+04	4,662E+04	2,946E+03	2,640E+03	180
29	0	1	5	4	1121	1,65359	1,027E+05	1,037E+05	5,830E+03	5,886E+03	0
30	0	1	5	4	1021	1,65359	1,027E+05	1,037E+05	5,830E+03	5,886E+03	0
31	0	0	6	2	1021	1,64961	2,494E+05	2,269E+05	1,417E+04	1,287E+04	0
32	0	0	6	2	1121	1,64961	2,494E+05	2,269E+05	1,417E+04	1,287E+04	0
33	2	1	3	8	1021	1,59079	3,574E+05	3,477E+05	2,027E+04	1,971E+04	0
34	2	1	3	8	1121	1,59079	3,574E+05	3,477E+05	2,027E+04	1,971E+04	0
35	0	2	0	2	1021	1,50401	2,942E+05	3,556E+05	1,661E+04	2,014E+04	0
36	0	2	0	2	1121	1,50401	2,942E+05	3,556E+05	1,661E+04	2,014E+04	0
37	3	0	1	4	1021	1,50085	0,000E+00	1,723E+02	-2,128E+00	7,771E+00	180
38	3	0	1	4	1121	1,50085	0,000E+00	1,723E+02	-2,128E+00	7,771E+00	180
39	0	2	2	4	1121	1,43903	0,000E+00	9,132E+03	-6,558E+00	5,181E+02	0
40	0	2	2	4	1021	1,43903	0,000E+00	9,132E+03	-6,558E+00	5,181E+02	0
41	1	2	1	8	1121	1,41354	0,000E+00	1,390E+02	-1,871E+00	6,114E+00	180
42	1	2	1	8	1021	1,41354	0,000E+00	1,390E+02	-1,871E+00	6,114E+00	180
43	3	0	3	4	1021	1,37934	2,163E+05	1,821E+05	1,225E+04	1,029E+04	0
44	3	0	3	4	1121	1,37934	2,163E+05	1,821E+05	1,225E+04	1,029E+04	0
45	1	1	6	8	1121	1,37857	1,360E+05	1,217E+05	7,703E+03	6,881E+03	0
46	1	1	6	8	1021	1,37857	1,360E+05	1,217E+05	7,703E+03	6,881E+03	0
47	3	1	0	4	1021	1,3555	2,177E+05	1,971E+05	1,231E+04	1,113E+04	0
48	3	1	0	4	1121	1,3555	2,177E+05	1,971E+05	1,231E+04	1,113E+04	0
49	1	0	7	4	1021	1,3504	2,021E+04	1,343E+04	1,141E+03	7,517E+02	180
50	1	0	7	4	1121	1,3504	2,021E+04	1,343E+04	1,141E+03	7,517E+02	180
51	2	1	5	8	1121	1,33812	6,304E+04	6,226E+04	3,566E+03	3,521E+03	0
52	2	1	5	8	1021	1,33812	6,304E+04	6,226E+04	3,566E+03	3,521E+03	0
53	2	0	6	4	1021	1,33601	1,605E+05	1,353E+05	9,097E+03	7,650E+03	0
54	2	0	6	4	1121	1,33601	1,605E+05	1,353E+05	9,097E+03	7,650E+03	0
55	1	2	3	8	1121	1,31065	1,597E+05	1,586E+05	9,017E+03	8,953E+03	0
56	1	2	3	8	1021	1,31065	1,597E+05	1,586E+05	9,017E+03	8,953E+03	0
57	3	1	2	8	1021	1,30735	1,368E+04	9,354E+03	7,787E+02	5,299E+02	0
58	3	1	2	8	1121	1,30735	1,368E+04	9,354E+03	7,787E+02	5,299E+02	0
59	0	2	4	4	1121	1,28522	2,357E+04	2,124E+04	1,330E+03	1,196E+03	180
60	0	2	4	4	1021	1,28522	2,357E+04	2,124E+04	1,330E+03	1,196E+03	180
61	0	1	7	4	1021	1,27963	3,663E+04	2,983E+04	2,071E+03	1,680E+03	180

62	0	1	7	4	1121	1,27963	3,663E+04	2,983E+04	2,071E+03	1,680E+03	180
63	2	2	0	4	1121	1,25507	2,100E+05	2,152E+05	1,184E+04	1,215E+04	0
64	2	2	0	4	1021	1,25507	2,100E+05	2,152E+05	1,184E+04	1,215E+04	0
65	0	0	8	2	1121	1,23721	1,284E+05	1,212E+05	7,253E+03	6,838E+03	0
66	0	0	8	2	1021	1,23721	1,284E+05	1,212E+05	7,253E+03	6,838E+03	0
67	2	2	2	8	1121	1,21655	8,091E+03	6,120E+03	4,594E+02	3,462E+02	0
68	2	2	2	8	1021	1,21655	8,091E+03	6,120E+03	4,594E+02	3,462E+02	0
69	3	0	5	4	1021	1,2048	3,983E+04	3,616E+04	2,250E+03	2,039E+03	0
70	3	0	5	4	1121	1,2048	3,983E+04	3,616E+04	2,250E+03	2,039E+03	0
71	3	1	4	8	1021	1,18881	6,772E+03	4,914E+03	3,792E+02	2,724E+02	180
72	3	1	4	8	1121	1,18881	6,772E+03	4,914E+03	3,792E+02	2,724E+02	180
73	1	2	5	8	1021	1,15821	3,282E+04	3,195E+04	1,850E+03	1,800E+03	0
74	1	2	5	8	1121	1,15821	3,282E+04	3,195E+04	1,850E+03	1,800E+03	0
75	4	0	0	2	1021	1,13881	1,857E+05	1,555E+05	1,049E+04	8,757E+03	0
76	4	0	0	2	1121	1,13881	1,857E+05	1,555E+05	1,049E+04	8,757E+03	0
77	2	2	4	8	1121	1,11932	1,062E+04	1,233E+04	5,931E+02	6,914E+02	180
78	2	2	4	8	1021	1,11932	1,062E+04	1,233E+04	5,931E+02	6,914E+02	180
79	2	1	7	8	1121	1,11562	2,086E+04	1,755E+04	1,175E+03	9,844E+02	180
80	2	1	7	8	1021	1,11562	2,086E+04	1,755E+04	1,175E+03	9,844E+02	180
81	0	2	6	4	1121	1,11142	7,597E+04	7,511E+04	4,276E+03	4,227E+03	0
82	0	2	6	4	1021	1,11142	7,597E+04	7,511E+04	4,276E+03	4,227E+03	0
83	4	0	2	4	1121	1,1098	4,642E+03	4,721E+03	2,620E+02	2,665E+02	0
84	4	0	2	4	1021	1,1098	4,642E+03	4,721E+03	2,620E+02	2,665E+02	0
85	1	1	8	8	1121	1,10973	6,028E+04	6,162E+04	3,386E+03	3,463E+03	0
86	1	1	8	8	1021	1,10973	6,028E+04	6,162E+04	3,386E+03	3,463E+03	0
87	2	0	8	4	1121	1,08717	7,767E+04	7,760E+04	4,368E+03	4,365E+03	0
88	2	0	8	4	1021	1,08717	7,767E+04	7,760E+04	4,368E+03	4,365E+03	0
89	1	0	9	4	1021	1,06903	4,062E+04	2,525E+04	2,303E+03	1,420E+03	0
90	1	0	9	4	1121	1,06903	4,062E+04	2,525E+04	2,303E+03	1,420E+03	0
91	3	2	1	8	1021	1,06238	0,000E+00	2,216E+01	-7,915E-01	4,819E-01	180
92	3	2	1	8	1121	1,06238	0,000E+00	2,216E+01	-7,915E-01	4,819E-01	180
93	4	1	1	8	1121	1,05892	1,217E+03	1,067E+03	6,799E+01	5,937E+01	180
94	4	1	1	8	1021	1,05892	1,217E+03	1,067E+03	6,799E+01	5,937E+01	180
95	3	1	6	8	1021	1,04729	5,506E+04	5,071E+04	3,096E+03	2,847E+03	0
96	3	1	6	8	1121	1,04729	5,506E+04	5,071E+04	3,096E+03	2,847E+03	0
97	3	0	7	4	1121	1,03478	5,744E+03	4,935E+03	3,196E+02	2,731E+02	180
98	3	0	7	4	1021	1,03478	5,744E+03	4,935E+03	3,196E+02	2,731E+02	180
99	4	0	4	4	1121	1,0345	9,178E+03	8,590E+03	5,142E+02	4,805E+02	180
100	4	0	4	4	1021	1,0345	9,178E+03	8,590E+03	5,142E+02	4,805E+02	180
101	0	1	9	4	1021	1,03288	3,141E+04	2,109E+04	1,778E+03	1,185E+03	0
102	0	1	9	4	1121	1,03288	3,141E+04	2,109E+04	1,778E+03	1,185E+03	0
103	3	2	3	8	1121	1,01656	6,193E+04	6,714E+04	3,463E+03	3,763E+03	0
104	3	2	3	8	1021	1,01656	6,193E+04	6,714E+04	3,463E+03	3,763E+03	0
105	4	1	3	8	1021	1,01354	8,316E+04	8,550E+04	4,663E+03	4,798E+03	0
106	4	1	3	8	1121	1,01354	8,316E+04	8,550E+04	4,663E+03	4,798E+03	0
107	1	2	7	8	1021	1,00481	2,445E+03	4,282E+03	1,310E+02	2,365E+02	180
108	1	2	7	8	1121	1,00481	2,445E+03	4,282E+03	1,310E+02	2,365E+02	180
109	2	2	6	8	1021	0,99884	4,920E+04	4,959E+04	2,759E+03	2,782E+03	0
110	2	2	6	8	1121	0,99884	4,920E+04	4,959E+04	2,759E+03	2,782E+03	0
111	0	3	1	4	1021	0,99757	6,466E+02	7,381E+02	3,568E+01	4,093E+01	180
112	0	3	1	4	1121	0,99757	6,466E+02	7,381E+02	3,568E+01	4,093E+01	180
113	0	0	10	2	1121	0,98977	2,423E+04	5,634E+03	1,383E+03	3,144E+02	180
114	0	0	10	2	1021	0,98977	2,423E+04	5,634E+03	1,383E+03	3,144E+02	180
115	1	3	0	4	1021	0,97923	5,013E+04	6,506E+04	2,783E+03	3,641E+03	0
116	1	3	0	4	1121	0,97923	5,013E+04	6,506E+04	2,783E+03	3,641E+03	0
117	1	3	2	8	1021	0,96061	2,909E+03	3,549E+03	1,628E+02	1,996E+02	0
118	1	3	2	8	1121	0,96061	2,909E+03	3,549E+03	1,628E+02	1,996E+02	0
119	0	3	3	4	1021	0,95935	5,156E+04	6,746E+04	2,865E+03	3,778E+03	0
120	0	3	3	4	1121	0,95935	5,156E+04	6,746E+04	2,865E+03	3,778E+03	0
121	0	2	8	4	1121	0,95547	3,328E+04	4,572E+04	1,846E+03	2,561E+03	0
122	0	2	8	4	1021	0,95547	3,328E+04	4,572E+04	1,846E+03	2,561E+03	0
123	2	1	9	8	1121	0,94067	1,536E+04	1,440E+04	8,616E+02	8,063E+02	0
124	2	1	9	8	1021	0,94067	1,536E+04	1,440E+04	8,616E+02	8,063E+02	0
125	3	2	5	8	1121	0,9403	1,456E+04	1,459E+04	8,148E+02	8,167E+02	0
126	3	2	5	8	1021	0,9403	1,456E+04	1,459E+04	8,148E+02	8,167E+02	0
127	4	1	5	8	1021	0,93791	1,618E+04	1,773E+04	9,045E+02	9,936E+02	0
128	4	1	5	8	1121	0,93791	1,618E+04	1,773E+04	9,045E+02	9,936E+02	0
129	4	0	6	4	1021	0,93718	4,245E+04	3,754E+04	2,384E+03	2,101E+03	0
130	4	0	6	4	1121	0,93718	4,245E+04	3,754E+04	2,384E+03	2,101E+03	0
131	1	1	10	8	1121	0,92077	4,448E+03	1,530E+03	2,515E+02	8,382E+01	180
132	1	1	10	8	1021	0,92077	4,448E+03	1,530E+03	2,515E+02	8,382E+01	180

133	3	1	8	8	1121	0,9138	2,663E+04	2,799E+04	1,485E+03	1,563E+03	0
134	3	1	8	8	1021	0,9138	2,663E+04	2,799E+04	1,485E+03	1,563E+03	0
135	2	3	1	8	1021	0,91377	3,827E+02	3,979E+02	2,106E+01	2,194E+01	180
136	2	3	1	8	1121	0,91377	3,827E+02	3,979E+02	2,106E+01	2,194E+01	180
137	1	3	4	8	1021	0,91053	1,394E+03	1,328E+03	7,603E+01	7,224E+01	180
138	1	3	4	8	1121	0,91053	1,394E+03	1,328E+03	7,603E+01	7,224E+01	180
139	4	2	0	4	1121	0,90791	6,220E+04	6,046E+04	3,480E+03	3,380E+03	0
140	4	2	0	4	1021	0,90791	6,220E+04	6,046E+04	3,480E+03	3,380E+03	0
141	2	0	10	4	1021	0,90776	3,942E+03	3,483E+03	2,200E+02	1,936E+02	180
142	2	0	10	4	1121	0,90776	3,942E+03	3,483E+03	2,200E+02	1,936E+02	180
143	5	0	1	4	1121	0,90721	0,000E+00	7,594E+00	-3,860E-01	5,034E-02	0
144	5	0	1	4	1021	0,90721	0,000E+00	7,594E+00	-3,860E-01	5,034E-02	0
145	0	3	5	4	1021	0,89448	1,284E+04	1,426E+04	7,163E+02	7,977E+02	0
146	0	3	5	4	1121	0,89448	1,284E+04	1,426E+04	7,163E+02	7,977E+02	0
147	4	2	2	8	1021	0,893	3,294E+03	2,197E+03	1,863E+02	1,233E+02	0
148	4	2	2	8	1121	0,893	3,294E+03	2,197E+03	1,863E+02	1,233E+02	0
149	3	0	9	4	1021	0,89067	1,804E+04	1,178E+04	1,018E+03	6,588E+02	0
150	3	0	9	4	1121	0,89067	1,804E+04	1,178E+04	1,018E+03	6,588E+02	0
151	2	3	3	8	1126	0,88412	7,071E+04	4,578E+04	3,989E+03	2,557E+03	0
152	2	3	3	8	1026	0,88412	7,071E+04	4,578E+04	3,989E+03	2,557E+03	0
153	1	0	11	4	1121	0,88273	0,000E+00	1,215E+04	1,204E+04	1,227E+04	0
154	1	0	11	4	1021	0,88273	0,000E+00	1,215E+04	1,204E+04	1,227E+04	0
155	2	2	8	8	1021	0,88108	0,000E+00	1,219E+04	1,208E+04	1,231E+04	0
156	2	2	8	8	1121	0,88108	0,000E+00	1,219E+04	1,208E+04	1,231E+04	0
157	5	0	3	4	1121	0,87818	0,000E+00	1,226E+04	1,215E+04	1,237E+04	0
158	5	0	3	4	1021	0,87818	0,000E+00	1,226E+04	1,215E+04	1,237E+04	0

Tabelle A2: gemessene und berechnete Struktur Faktoren von Ag₂PdO₂ aus Neutronenpulverdaten, Raumtemperatur, Detektorbank 1

lref	H	K	L	Mul	lcod	D-space	Fosq	Fcsq	FoTsq	FcTsq	Phas
91	0	0	2	2	1021	4,95045	1,407E+00	2,300E-01	4,073E-01	6,658E-02	0
90	1	0	1	4	1021	4,13922	5,643E+00	4,978E+00	1,634E+00	1,441E+00	0
89	0	1	1	4	1021	2,87906	9,472E+00	1,027E+01	2,742E+00	2,975E+00	180
88	1	0	3	4	1021	2,67284	6,148E+00	5,909E+00	1,780E+00	1,711E+00	0
87	1	1	0	4	1021	2,51096	4,661E+00	4,853E+00	1,349E+00	1,405E+00	0
86	0	0	4	2	1021	2,47522	3,003E+01	3,073E+01	8,695E+00	8,896E+00	180
85	2	0	0	2	1021	2,27826	1,113E+02	1,077E+02	3,222E+01	3,117E+01	0
84	1	1	2	8	1021	2,23937	3,360E+00	3,214E+00	9,728E-01	9,304E-01	0
83	0	1	3	4	1021	2,22359	9,233E+01	8,784E+01	2,673E+01	2,543E+01	0
82	2	0	2	4	1021	2,06961	7,539E-01	2,448E-01	2,183E-01	7,088E-02	0
81	1	0	5	4	1021	1,8161	1,231E+00	1,833E+00	3,563E-01	5,306E-01	0
80	2	1	1	8	1021	1,78656	7,942E+00	8,921E+00	2,299E+00	2,583E+00	180
79	1	1	4	8	1021	1,76275	4,862E+00	5,131E+00	1,408E+00	1,486E+00	0
78	2	0	4	4	1021	1,67629	2,666E+01	2,698E+01	7,720E+00	7,812E+00	180
77	0	1	5	4	1021	1,65415	1,825E+01	1,838E+01	5,284E+00	5,322E+00	0
76	0	0	6	2	1021	1,65015	4,106E+01	4,088E+01	1,189E+01	1,184E+01	0
75	2	1	3	8	1021	1,59129	7,913E+01	7,894E+01	2,291E+01	2,285E+01	0
74	0	2	0	2	1021	1,50455	9,668E+01	9,371E+01	2,799E+01	2,713E+01	0
73	3	0	1	4	1021	1,50128	4,680E+00	4,514E+00	1,355E+00	1,307E+00	0
72	0	2	2	4	1021	1,43953	9,716E-01	2,609E-01	2,813E-01	7,554E-02	0
71	1	2	1	8	1021	1,41403	6,508E+00	4,448E+00	1,884E+00	1,288E+00	0
70	3	0	3	4	1021	1,37974	5,030E+00	4,663E+00	1,456E+00	1,350E+00	0
69	1	1	6	8	1021	1,37902	7,655E+00	7,130E+00	2,216E+00	2,064E+00	0
68	3	1	0	4	1021	1,35591	4,412E+00	3,785E+00	1,277E+00	1,096E+00	0
67	2	1	5	8	1021	1,33854	1,677E+01	1,672E+01	4,855E+00	4,840E+00	0
66	2	0	6	4	1021	1,33642	3,646E+01	3,683E+01	1,055E+01	1,066E+01	0
65	1	0	7	4	1021	1,35083	4,121E+00	3,624E+00	1,193E+00	1,049E+00	0
64	1	2	3	8	1021	1,3111	3,854E+00	4,505E+00	1,116E+00	1,304E+00	0
63	3	1	2	8	1021	1,30774	2,636E+00	2,854E+00	7,632E-01	8,263E-01	0
62	0	2	4	4	1021	1,28567	2,129E+01	2,280E+01	6,165E+00	6,602E+00	180
61	0	1	7	4	1021	1,28005	2,795E+01	2,756E+01	8,092E+00	7,978E+00	180
60	2	2	0	4	1021	1,25548	8,306E+01	8,419E+01	2,405E+01	2,437E+01	0
59	0	0	8	2	1021	1,23761	5,375E+01	4,822E+01	1,556E+01	1,396E+01	0
58	2	2	2	8	1021	1,21696	4,088E-01	2,710E-01	1,183E-01	7,845E-02	0
57	3	0	5	4	1021	1,20515	3,195E+00	1,572E+00	9,250E-01	4,550E-01	0
56	3	1	4	8	1021	1,18917	5,840E+00	4,716E+00	1,691E+00	1,365E+00	0
55	1	2	5	8	1021	1,1586	2,960E+00	1,537E+00	8,569E-01	4,450E-01	0

54	4	0	0	2	1021	1,13913	9,212E+01	7,805E+01	2,667E+01	2,260E+01	0
53	2	2	4	8	1021	1,11968	1,923E+01	2,001E+01	5,567E+00	5,793E+00	180
52	2	1	7	8	1021	1,11597	2,350E+01	2,420E+01	6,803E+00	7,006E+00	180
51	0	2	6	4	1021	1,11179	3,394E+01	3,220E+01	9,825E+00	9,322E+00	0
50	4	0	2	4	1021	1,11012	3,041E-01	2,769E-01	8,805E-02	8,016E-02	0
49	1	1	8	8	1021	1,1101	1,271E+00	1,156E+00	3,679E-01	3,347E-01	0
48	2	0	8	4	1021	1,08751	4,579E+01	4,350E+01	1,326E+01	1,259E+01	0
47	1	0	9	4	1021	1,06937	1,043E+01	8,842E+00	3,019E+00	2,560E+00	0
46	3	2	1	8	1021	1,06272	4,198E+00	4,007E+00	1,215E+00	1,160E+00	0
45	4	1	1	8	1021	1,05923	5,761E+00	5,813E+00	1,668E+00	1,683E+00	180
44	3	1	6	8	1021	1,04761	4,450E+00	5,775E+00	1,288E+00	1,672E+00	0
43	3	0	7	4	1021	1,03509	3,539E+00	3,410E+00	1,025E+00	9,872E-01	0
42	4	0	4	4	1021	1,03481	1,894E+01	1,824E+01	5,483E+00	5,281E+00	180
41	0	1	9	4	1021	1,03322	6,384E+00	6,136E+00	1,848E+00	1,777E+00	0
40	3	2	3	8	1021	1,01689	3,143E+00	3,567E+00	9,100E-01	1,033E+00	0
39	4	1	3	8	1021	1,01384	5,082E+01	5,735E+01	1,471E+01	1,660E+01	0
38	1	2	7	8	1021	1,00515	3,014E+00	3,376E+00	8,727E-01	9,775E-01	0
37	2	2	6	8	1026	0,99917	2,565E+01	2,902E+01	7,426E+00	8,403E+00	0
36	0	3	1	4	1026	0,99792	4,729E+00	5,342E+00	1,369E+00	1,547E+00	180
35	0	0	10	2	1026	0,99009	1,088E+01	1,212E+01	3,150E+00	3,510E+00	180
34	1	3	0	4	1026	0,97958	2,514E+00	2,757E+00	7,279E-01	7,983E-01	0
33	1	3	2	8	1026	0,96095	2,216E+00	2,439E+00	6,416E-01	7,060E-01	0
32	0	3	3	4	1026	0,95969	4,900E+01	5,389E+01	1,419E+01	1,560E+01	0
31	0	2	8	4	1026	0,95579	3,343E+01	3,808E+01	9,678E+00	1,103E+01	0
30	2	1	9	8	1026	0,94097	5,023E+00	5,595E+00	1,454E+00	1,620E+00	0
29	3	2	5	8	1026	0,9406	1,185E+00	1,320E+00	3,431E-01	3,822E-01	0
28	4	1	5	8	1026	0,93819	1,098E+01	1,260E+01	3,179E+00	3,647E+00	0
27	4	0	6	4	1026	0,93746	2,351E+01	2,697E+01	6,808E+00	7,810E+00	0
26	1	1	10	8	1021	0,92077	0,000E+00	1,759E+03	1,646E+03	1,896E+03	0
25	3	1	8	8	1021	0,9138	0,000E+00	1,746E+03	1,633E+03	1,883E+03	0
24	2	3	1	8	1021	0,91377	0,000E+00	1,746E+03	1,633E+03	1,883E+03	0
23	1	3	4	8	1021	0,91053	0,000E+00	1,740E+03	1,626E+03	1,877E+03	0
22	4	2	0	4	1021	0,90791	0,000E+00	1,735E+03	1,621E+03	1,872E+03	0
21	2	0	10	4	1021	0,90776	0,000E+00	1,735E+03	1,621E+03	1,872E+03	0
20	5	0	1	4	1021	0,90721	0,000E+00	1,734E+03	1,620E+03	1,871E+03	0
19	0	3	5	4	1021	0,89448	0,000E+00	1,710E+03	1,596E+03	1,846E+03	0
18	4	2	2	8	1021	0,893	0,000E+00	1,707E+03	1,593E+03	1,843E+03	0
17	3	0	9	4	1021	0,89067	0,000E+00	1,702E+03	1,589E+03	1,839E+03	0
16	2	3	3	8	1021	0,88412	0,000E+00	1,690E+03	1,576E+03	1,827E+03	0
15	1	0	11	4	1021	0,88273	0,000E+00	1,687E+03	1,574E+03	1,824E+03	0
14	2	2	8	8	1021	0,88108	0,000E+00	1,684E+03	1,571E+03	1,821E+03	0
13	5	0	3	4	1021	0,87818	0,000E+00	1,679E+03	1,565E+03	1,815E+03	0
12	5	1	0	4	1021	0,87193	0,000E+00	1,667E+03	1,553E+03	1,804E+03	0
11	1	2	9	8	1021	0,87135	0,000E+00	1,666E+03	1,552E+03	1,802E+03	0
10	0	1	11	4	1021	0,86205	0,000E+00	1,648E+03	1,534E+03	1,785E+03	0
9	5	1	2	8	1021	0,85871	0,000E+00	1,642E+03	1,528E+03	1,778E+03	0
8	3	2	7	8	1021	0,8525	0,000E+00	1,630E+03	1,516E+03	1,742E+03	0
7	4	2	4	8	1021	0,85234	0,000E+00	1,630E+03	1,516E+03	1,741E+03	0
6	4	1	7	8	1021	0,85071	0,000E+00	1,627E+03	1,513E+03	1,738E+03	0
5	1	3	6	8	1021	0,84205	0,000E+00	1,610E+03	1,496E+03	1,722E+03	0
4	4	0	8	4	1021	0,83789	0,000E+00	1,602E+03	1,488E+03	1,714E+03	0
3	3	3	0	4	1021	0,83671	0,000E+00	1,600E+03	1,486E+03	1,712E+03	0
2	2	3	5	8	1021	0,83257	0,000E+00	1,592E+03	1,478E+03	1,704E+03	0
1	5	0	5	4	1021	0,8276	0,000E+00	1,583E+03	1,469E+03	1,694E+03	0

Tabelle A3: gemessene und berechnete Struktur Faktoren von Ag_2PdO_2 aus Neutronenpulverdaten, Raumtemperatur, Detektorbank 2

Iref	H	K	L	Mul	Icod	D-space	Fosq	Fcsq	FoTsq	FcTsq	Phas
394	0	0	2	2	1021	4,94884	0,000E+00	2,262E+04	2,216E+04	2,311E+04	0
393	1	0	1	4	1021	4,13802	0,000E+00	1,891E+04	1,854E+04	1,935E+04	0
392	0	1	1	4	1021	2,87906	8,578E+00	8,665E+00	2,945E+00	2,975E+00	180
391	1	0	3	4	1021	2,67284	6,164E+00	4,983E+00	2,116E+00	1,711E+00	0
390	1	1	0	4	1021	2,51096	4,569E+00	4,093E+00	1,569E+00	1,405E+00	0
389	0	0	4	2	1021	2,47522	2,836E+01	2,591E+01	9,738E+00	8,896E+00	180
388	2	0	0	2	1021	2,27826	9,567E+01	9,080E+01	3,284E+01	3,117E+01	0
387	1	1	2	8	1021	2,23937	2,754E+00	2,710E+00	9,456E-01	9,304E-01	0
386	0	1	3	4	1021	2,22359	7,702E+01	7,408E+01	2,644E+01	2,543E+01	0

385	2	0	2	4	1021	2,06961	0,000E+00	2,065E-01	-2,369E-09	7,088E-02	0
384	1	0	5	4	1021	1,8161	1,395E+00	1,545E+00	4,790E-01	5,306E-01	0
383	2	1	1	8	1021	1,78656	6,983E+00	7,524E+00	2,397E+00	2,583E+00	180
382	1	1	4	8	1021	1,76275	4,546E+00	4,327E+00	1,561E+00	1,486E+00	0
381	2	0	4	4	1021	1,67629	2,569E+01	2,276E+01	8,819E+00	7,812E+00	180
380	0	1	5	4	1021	1,65415	1,631E+01	1,550E+01	5,600E+00	5,322E+00	0
379	0	0	6	2	1021	1,65015	3,671E+01	3,448E+01	1,260E+01	1,184E+01	0
378	2	1	3	8	1021	1,59129	6,893E+01	6,657E+01	2,367E+01	2,285E+01	0
377	0	2	0	2	1021	1,50455	8,075E+01	7,903E+01	2,772E+01	2,713E+01	0
376	3	0	1	4	1021	1,50128	3,599E+00	3,807E+00	1,236E+00	1,307E+00	0
375	0	2	2	4	1021	1,43953	0,000E+00	2,200E-01	2,974E-09	7,554E-02	0
374	1	2	1	8	1021	1,41403	4,534E+00	3,751E+00	1,557E+00	1,288E+00	0
373	3	0	3	4	1021	1,37974	4,038E+00	3,933E+00	1,386E+00	1,350E+00	0
372	1	1	6	8	1021	1,37902	6,096E+00	6,013E+00	2,093E+00	2,064E+00	0
371	3	1	0	4	1021	1,35591	4,411E+00	3,192E+00	1,514E+00	1,096E+00	0
370	1	0	7	4	1021	1,35083	3,631E+00	3,057E+00	1,247E+00	1,049E+00	0
369	2	1	5	8	1021	1,33854	1,415E+01	1,410E+01	4,856E+00	4,840E+00	0
368	2	0	6	4	1021	1,33642	3,117E+01	3,106E+01	1,070E+01	1,066E+01	0
367	1	2	3	8	1021	1,3111	2,527E+00	3,800E+00	8,677E-01	1,304E+00	0
366	3	1	2	8	1021	1,30774	1,687E+00	2,407E+00	5,792E-01	8,263E-01	0
365	0	2	4	4	1021	1,28567	1,793E+01	1,923E+01	6,155E+00	6,602E+00	180
364	0	1	7	4	1021	1,28005	2,398E+01	2,324E+01	8,233E+00	7,978E+00	180
363	2	2	0	4	1021	1,25548	6,780E+01	7,100E+01	2,328E+01	2,437E+01	0
362	0	0	8	2	1021	1,23761	4,062E+01	4,067E+01	1,395E+01	1,396E+01	0
361	2	2	2	8	1021	1,21696	0,000E+00	2,285E-01	-3,583E-09	7,845E-02	0
360	3	0	5	4	1021	1,20515	0,000E+00	1,325E+00	8,993E-09	4,550E-01	0
359	3	1	4	8	1021	1,18917	1,435E+00	3,977E+00	4,927E-01	1,365E+00	0
358	1	2	5	8	1021	1,1586	1,394E+00	1,296E+00	4,785E-01	4,450E-01	0
357	4	0	0	2	1021	1,13913	6,859E+01	6,582E+01	2,355E+01	2,260E+01	0
356	2	2	4	8	1021	1,11968	1,604E+01	1,688E+01	5,508E+00	5,793E+00	180
355	2	1	7	8	1021	1,11597	2,047E+01	2,041E+01	7,029E+00	7,006E+00	180
354	0	2	6	4	1021	1,11179	2,824E+01	2,715E+01	9,695E+00	9,322E+00	0
353	4	0	2	4	1021	1,11012	2,463E-01	2,335E-01	8,455E-02	8,016E-02	0
352	1	1	8	8	1021	1,1101	1,028E+00	9,749E-01	3,531E-01	3,347E-01	0
351	2	0	8	4	1021	1,08751	3,546E+01	3,668E+01	1,218E+01	1,259E+01	0
350	1	0	9	4	1021	1,06937	6,829E+00	7,457E+00	2,344E+00	2,560E+00	0
349	3	2	1	8	1021	1,06272	2,899E+00	3,379E+00	9,953E-01	1,160E+00	0
348	4	1	1	8	1021	1,05923	3,887E+00	4,902E+00	1,334E+00	1,683E+00	180
347	3	1	6	8	1021	1,04761	4,428E+00	4,870E+00	1,520E+00	1,672E+00	0
346	3	0	7	4	1021	1,03509	3,148E+00	2,875E+00	1,081E+00	9,872E-01	0
345	4	0	4	4	1021	1,03481	1,691E+01	1,538E+01	5,807E+00	5,281E+00	180
344	0	1	9	4	1021	1,03322	5,732E+00	5,175E+00	1,968E+00	1,777E+00	0
343	3	2	3	8	1021	1,01689	2,936E+00	3,008E+00	1,008E+00	1,033E+00	0
342	4	1	3	8	1021	1,01384	5,089E+01	4,837E+01	1,747E+01	1,660E+01	0
341	1	2	7	8	1021	1,00515	3,097E+00	2,847E+00	1,063E+00	9,775E-01	0
340	0	3	1	4	1021	0,99792	4,889E+00	4,505E+00	1,679E+00	1,547E+00	180
339	2	2	6	8	1021	0,99917	2,638E+01	2,448E+01	9,056E+00	8,403E+00	0
338	0	0	10	2	1021	0,99009	1,481E+01	1,022E+01	5,084E+00	3,510E+00	180
337	1	3	0	4	1021	0,97958	2,080E+00	2,325E+00	7,140E-01	7,983E-01	0
336	1	3	2	8	1021	0,96095	2,094E+00	2,056E+00	7,187E-01	7,060E-01	0
335	0	3	3	4	1021	0,95969	4,591E+01	4,545E+01	1,576E+01	1,560E+01	0
334	0	2	8	4	1021	0,95579	3,373E+01	3,212E+01	1,158E+01	1,103E+01	0
333	2	1	9	8	1021	0,94097	4,756E+00	4,719E+00	1,633E+00	1,620E+00	0
332	3	2	5	8	1021	0,9406	1,128E+00	1,113E+00	3,871E-01	3,822E-01	0
331	4	1	5	8	1021	0,93819	1,159E+01	1,062E+01	3,979E+00	3,647E+00	0
330	4	0	6	4	1021	0,93746	2,569E+01	2,275E+01	8,819E+00	7,810E+00	0
329	1	1	10	8	1021	0,92107	3,297E+00	1,254E+00	1,132E+00	4,306E-01	0
328	3	1	8	8	1021	0,91409	8,506E-01	7,949E-01	2,920E-01	2,729E-01	0
327	2	3	1	8	1021	0,91408	4,169E+00	3,897E+00	1,431E+00	1,338E+00	180
326	1	3	4	8	1021	0,91084	3,654E+00	3,527E+00	1,254E+00	1,211E+00	0
325	4	2	0	4	1021	0,90819	5,245E+01	5,153E+01	1,801E+01	1,769E+01	0
324	2	0	10	4	1021	0,90805	9,067E+00	8,911E+00	3,113E+00	3,059E+00	180
323	5	0	1	4	1021	0,90747	3,133E+00	3,080E+00	1,076E+00	1,057E+00	0
322	0	3	5	4	1021	0,89479	1,118E+01	1,005E+01	3,837E+00	3,451E+00	0
321	4	2	2	8	1021	0,89328	2,630E-01	2,442E-01	9,028E-02	8,382E-02	0
320	3	0	9	4	1021	0,89095	6,750E+00	6,181E+00	2,317E+00	2,122E+00	0
319	2	3	3	8	1021	0,88442	3,920E+01	4,088E+01	1,346E+01	1,403E+01	0
318	1	0	11	4	1021	0,88302	1,154E+00	1,184E+00	3,962E-01	4,064E-01	0
317	2	2	8	8	1021	0,88137	2,845E+01	2,898E+01	9,769E+00	9,951E+00	0
316	5	0	3	4	1021	0,87843	2,495E+00	2,470E+00	8,567E-01	8,480E-01	0
315	5	1	0	4	1021	0,87218	2,474E+00	1,960E+00	8,495E-01	6,728E-01	0

314	1	2	9	8	1021	0,87164	7,558E+00	6,014E+00	2,595E+00	2,065E+00	0
313	0	1	11	4	1021	0,86233	4,508E+01	4,327E+01	1,548E+01	1,485E+01	0
312	5	1	2	8	1021	0,85895	1,937E+00	1,884E+00	6,649E-01	6,467E-01	0
311	3	2	7	8	1021	0,85277	2,454E+00	2,647E+00	8,425E-01	9,086E-01	0
310	4	2	4	8	1021	0,85261	1,057E+01	1,138E+01	3,629E+00	3,908E+00	180
309	4	1	7	8	1021	0,85097	1,282E+01	1,380E+01	4,401E+00	4,737E+00	180
308	1	3	6	8	1021	0,84234	2,318E+00	3,720E+00	7,959E-01	1,277E+00	0
307	4	0	8	4	1021	0,83814	2,411E+01	2,696E+01	8,277E+00	9,256E+00	0
306	3	3	0	4	1021	0,83699	1,692E+00	1,826E+00	5,808E-01	6,270E-01	0
305	2	3	5	8	1021	0,83285	8,233E+00	9,151E+00	2,827E+00	3,142E+00	0
304	5	0	5	4	1021	0,82784	7,745E-01	9,788E-01	2,659E-01	3,360E-01	0
303	0	2	10	4	1021	0,82707	5,805E+00	7,453E+00	1,993E+00	2,559E+00	180
302	3	3	2	8	1021	0,82528	1,205E+00	1,816E+00	4,136E-01	6,234E-01	0
301	0	0	12	2	1021	0,82507	1,196E-01	1,849E-01	4,106E-02	6,347E-02	180
300	5	1	4	8	1021	0,82261	1,573E+00	3,288E+00	5,400E-01	1,129E+00	0
299	0	3	7	4	1021	0,81818	6,006E+00	1,278E+01	2,062E+00	4,387E+00	180
298	2	1	11	8	1021	0,80649	4,061E+01	3,895E+01	1,394E+01	1,337E+01	0
297	3	1	10	8	1021	0,7996	9,361E-01	1,221E+00	3,214E-01	4,192E-01	0
296	4	2	6	8	1021	0,79565	1,896E+01	1,795E+01	6,508E+00	6,164E+00	0
295	3	3	4	8	1021	0,79288	3,311E+00	3,191E+00	1,137E+00	1,095E+00	0
294	1	1	12	8	1021	0,78384	3,884E+00	6,557E+00	1,333E+00	2,251E+00	0
293	2	2	10	8	1021	0,77743	5,747E+00	6,488E+00	1,973E+00	2,227E+00	180
292	5	2	1	8	1021	0,77707	2,333E+00	2,705E+00	8,008E-01	9,285E-01	0
291	2	0	12	4	1021	0,77577	1,132E-01	1,481E-01	3,888E-02	5,085E-02	180
290	3	0	11	4	1021	0,77433	6,342E-01	9,366E-01	2,177E-01	3,215E-01	0
289	5	1	6	8	1021	0,7711	2,756E+00	3,216E+00	9,461E-01	1,104E+00	0
288	2	3	7	8	1021	0,77003	9,626E+00	1,121E+01	3,305E+00	3,847E+00	180
287	1	3	8	8	1021	0,76809	5,345E-01	6,147E-01	1,835E-01	2,110E-01	0
286	3	2	9	8	1021	0,76662	4,245E+00	4,991E+00	1,457E+00	1,713E+00	0
285	5	0	7	4	1021	0,76607	2,048E+00	2,469E+00	7,033E-01	8,477E-01	0
284	4	1	9	8	1021	0,76531	2,863E+00	3,585E+00	9,829E-01	1,231E+00	0
283	1	2	11	8	1021	0,76155	7,253E-01	9,053E-01	2,490E-01	3,108E-01	0
282	6	0	0	2	1021	0,75942	3,518E+01	3,865E+01	1,208E+01	1,327E+01	0
281	5	2	3	8	1021	0,7586	1,857E+00	1,902E+00	6,377E-01	6,529E-01	0
280	0	4	0	2	1021	0,75227	2,502E+01	3,795E+01	8,591E+00	1,303E+01	0
279	1	0	13	4	1021	0,75119	1,689E-01	2,482E-01	5,799E-02	8,522E-02	0
278	6	0	2	4	1021	0,75064	1,650E-01	2,474E-01	5,665E-02	8,493E-02	0
277	4	3	1	8	1021	0,75063	1,672E+00	2,509E+00	5,740E-01	8,613E-01	180
276	4	0	10	4	1021	0,74728	3,407E+00	5,879E+00	1,170E+00	2,018E+00	180
275	3	3	6	8	1021	0,74646	2,084E+00	3,028E+00	7,154E-01	1,040E+00	0
274	0	4	2	4	1021	0,74373	2,417E-01	2,473E-01	8,297E-02	8,490E-02	0
273	0	3	9	4	1021	0,7412	2,798E+00	3,398E+00	9,608E-01	1,167E+00	0
272	1	4	1	8	1021	0,74015	2,271E+00	2,570E+00	7,796E-01	8,822E-01	0
271	0	1	13	4	1021	0,73833	5,294E-01	5,017E-01	1,818E-01	1,723E-01	180
270	6	1	1	8	1021	0,7343	2,348E+00	2,359E+00	8,062E-01	8,099E-01	180
269	4	3	3	8	1021	0,73394	2,953E+01	2,978E+01	1,014E+01	1,022E+01	0
268	4	2	8	8	1021	0,7322	2,087E+01	2,133E+01	7,164E+00	7,323E+00	0
267	6	0	4	4	1021	0,72602	7,081E+00	7,956E+00	2,431E+00	2,732E+00	180
266	5	2	5	8	1021	0,7253	7,593E-01	8,244E-01	2,607E-01	2,830E-01	0
265	1	4	3	8	1021	0,72414	1,630E+00	1,722E+00	5,595E-01	5,913E-01	0
264	0	2	12	4	1021	0,72344	1,059E-01	1,098E-01	3,635E-02	3,769E-02	180
263	0	4	4	4	1021	0,71977	8,853E+00	7,777E+00	3,039E+00	2,670E+00	180
262	6	1	3	8	1021	0,71866	3,179E+01	2,851E+01	1,091E+01	9,788E+00	0
261	2	4	0	4	1021	0,71434	3,547E+01	3,414E+01	1,218E+01	1,172E+01	0
260	5	1	8	8	1021	0,71293	6,403E-01	5,359E-01	2,198E-01	1,840E-01	0
259	0	0	14	2	1021	0,70721	4,404E+01	3,067E+01	1,512E+01	1,053E+01	0
258	2	4	2	8	1021	0,70702	3,483E-01	2,461E-01	1,196E-01	8,450E-02	0
257	3	1	12	8	1021	0,70484	7,032E+00	5,539E+00	2,414E+00	1,902E+00	0
256	2	3	9	8	1021	0,70483	3,938E+00	3,103E+00	1,352E+00	1,065E+00	0
255	4	3	5	8	1021	0,70366	8,319E+00	6,912E+00	2,856E+00	2,373E+00	0
254	2	1	13	8	1021	0,70236	4,495E-01	4,066E-01	1,543E-01	1,396E-01	180
253	5	0	9	4	1021	0,70179	4,609E+00	4,260E+00	1,582E+00	1,462E+00	0
252	1	3	10	8	1021	0,69635	2,146E+00	1,153E+00	7,367E-01	3,959E-01	0
251	1	4	5	8	1021	0,69501	7,575E-01	7,722E-01	2,601E-01	2,651E-01	0
250	3	3	8	8	1021	0,69332	2,348E-01	5,066E-01	8,060E-02	1,739E-01	0
249	6	1	5	8	1021	0,69016	8,167E+00	6,650E+00	2,804E+00	2,283E+00	0
248	6	0	6	4	1021	0,68987	1,662E+01	1,360E+01	5,707E+00	4,669E+00	0
247	2	2	12	8	1021	0,68951	1,038E-01	8,610E-02	3,563E-02	2,956E-02	180
246	3	2	11	8	1021	0,68849	8,184E-01	7,199E-01	2,810E-01	2,471E-01	0
245	4	1	11	8	1021	0,68754	3,055E+01	2,843E+01	1,049E+01	9,761E+00	0
244	2	4	4	8	1021	0,68633	6,925E+00	6,808E+00	2,377E+00	2,337E+00	180

243	0	4	6	4	1021	0,6845	1,527E+01	1,336E+01	5,241E+00	4,587E+00	0
242	5	2	7	8	1021	0,68267	3,165E+00	2,229E+00	1,087E+00	7,654E-01	0
241	3	0	13	4	1021	0,68081	3,714E-01	2,677E-01	1,275E-01	9,191E-02	0
240	1	1	14	8	1021	0,68072	2,334E+00	1,688E+00	8,013E-01	5,795E-01	0
239	6	2	0	4	1021	0,67795	3,927E+01	3,032E+01	1,348E+01	1,041E+01	0
238	2	0	14	4	1021	0,67541	3,897E+01	2,759E+01	1,338E+01	9,472E+00	0
237	5	3	0	4	1021	0,67449	1,670E+00	1,138E+00	5,733E-01	3,907E-01	0
236	3	4	1	8	1021	0,67256	3,541E+00	2,281E+00	1,216E+00	7,832E-01	0
235	1	2	13	8	1021	0,67208	4,112E-01	2,699E-01	1,412E-01	9,265E-02	0
234	6	2	2	8	1021	0,67168	3,585E-01	2,437E-01	1,231E-01	8,366E-02	0
233	0	3	11	4	1021	0,6699	2,751E+01	2,674E+01	9,444E+00	9,181E+00	0
232	4	2	10	8	1021	0,66927	3,729E+00	4,263E+00	1,280E+00	1,464E+00	180
231	5	3	2	8	1021	0,66832	9,486E-01	1,406E+00	3,257E-01	4,828E-01	0
230	4	0	12	4	1021	0,66821	4,710E-02	7,198E-02	1,617E-02	2,471E-02	180
229	4	3	7	8	1021	0,66453	5,237E+00	7,541E+00	1,798E+00	2,589E+00	180
228	3	4	3	8	1021	0,66048	2,153E+00	1,378E+00	7,390E-01	4,730E-01	0
227	1	4	7	8	1021	0,65723	3,095E+00	2,139E+00	1,063E+00	7,342E-01	0
226	2	4	6	8	1021	0,65555	1,432E+01	1,206E+01	4,915E+00	4,142E+00	0
225	5	1	10	8	1021	0,65446	1,225E+00	1,108E+00	4,207E-01	3,803E-01	0
224	6	2	4	8	1021	0,65387	6,347E+00	5,861E+00	2,179E+00	2,012E+00	180
223	1	0	15	4	1021	0,65324	4,956E+00	4,681E+00	1,701E+00	1,607E+00	0
222	6	1	7	8	1021	0,65313	7,527E+00	7,138E+00	2,584E+00	2,451E+00	180
221	5	3	4	8	1021	0,65076	3,063E+00	2,569E+00	1,052E+00	8,820E-01	0
220	7	0	1	4	1021	0,64953	3,157E+00	2,169E+00	1,084E+00	7,447E-01	0
219	6	0	8	4	1021	0,64728	2,301E+01	1,620E+01	7,898E+00	5,561E+00	0
218	0	1	15	4	1021	0,64473	3,931E+00	2,833E+00	1,350E+00	9,726E-01	180
217	0	4	8	4	1021	0,64283	2,127E+01	1,592E+01	7,303E+00	5,464E+00	0
216	2	3	11	8	1021	0,6427	3,206E+01	2,409E+01	1,100E+01	8,271E+00	0
215	5	0	11	4	1021	0,64038	6,741E-01	5,940E-01	2,314E-01	2,039E-01	0
214	0	2	14	4	1021	0,64003	2,598E+01	2,407E+01	8,918E+00	8,264E+00	0
213	3	3	10	8	1021	0,63919	1,068E+00	1,088E+00	3,666E-01	3,734E-01	0
212	7	0	3	4	1021	0,63863	1,204E+00	1,257E+00	4,132E-01	4,316E-01	0
211	3	4	5	8	1021	0,63815	6,349E-01	6,659E-01	2,180E-01	2,286E-01	0
210	7	1	0	4	1021	0,63622	7,431E-01	9,660E-01	2,551E-01	3,316E-01	0
209	5	2	9	8	1021	0,636	2,441E+00	3,448E+00	8,379E-01	1,184E+00	0
208	7	1	2	8	1021	0,63103	8,999E-01	1,283E+00	3,089E-01	4,403E-01	0
207	1	3	12	8	1021	0,63106	3,099E+00	4,453E+00	1,064E+00	1,529E+00	0
206	4	4	0	4	1021	0,62774	2,563E+01	2,487E+01	8,800E+00	8,539E+00	0
205	6	2	6	8	1021	0,62709	1,138E+01	1,076E+01	3,906E+00	3,695E+00	0
204	3	1	14	8	1021	0,62704	1,421E+00	1,345E+00	4,879E-01	4,618E-01	0
203	5	3	6	8	1021	0,62435	1,759E+00	2,019E+00	6,038E-01	6,932E-01	0
202	4	4	2	8	1021	0,62275	2,553E-01	2,373E-01	8,766E-02	8,146E-02	0
201	4	3	9	8	1021	0,62126	3,308E+00	2,367E+00	1,136E+00	8,125E-01	0
200	2	1	15	8	1021	0,62037	3,489E+00	2,468E+00	1,198E+00	8,474E-01	180
199	3	2	13	8	1021	0,62026	3,945E-01	2,800E-01	1,354E-01	9,612E-02	0
198	4	1	13	8	1021	0,61957	2,869E-01	2,079E-01	9,849E-02	7,136E-02	180
197	0	0	16	2	1021	0,61881	2,115E+00	1,550E+00	7,260E-01	5,320E-01	0
196	2	4	8	8	1021	0,61868	1,957E+01	1,438E+01	6,720E+00	4,938E+00	0
195	7	0	5	4	1021	0,61838	8,436E-01	6,265E-01	2,896E-01	2,151E-01	0
194	7	1	4	8	1021	0,61619	2,443E+00	2,369E+00	8,388E-01	8,132E-01	0
193	2	2	14	8	1021	0,61617	2,230E+01	2,167E+01	7,657E+00	7,438E+00	0
192	1	4	9	8	1021	0,61528	2,808E+00	3,180E+00	9,641E-01	1,092E+00	0
191	6	1	9	8	1021	0,61191	0,000E+00	2,280E+00	2,900E-08	7,828E-01	0
190	4	2	12	8	1021	0,61069	0,000E+00	3,830E-02	4,117E-10	1,315E-02	180
189	0	3	13	4	1021	0,60657	2,232E-01	1,808E-01	7,663E-02	6,207E-02	180
188	3	0	15	4	1021	0,60537	5,859E+00	4,021E+00	2,011E+00	1,381E+00	0
187	3	4	7	8	1021	0,60854	9,197E-01	1,937E+00	3,157E-01	6,649E-01	0
186	4	4	4	8	1021	0,60848	2,280E+00	4,555E+00	7,827E-01	1,564E+00	180
185	6	3	1	8	1021	0,60433	1,563E+00	1,177E+00	5,365E-01	4,042E-01	180
184	6	0	10	4	1021	0,60258	3,623E+00	2,903E+00	1,244E+00	9,968E-01	180
183	4	0	14	4	1021	0,60083	2,116E+01	2,011E+01	7,264E+00	6,905E+00	0
182	1	1	16	8	1021	0,60083	1,382E-02	1,314E-02	4,744E-03	4,512E-03	0
181	0	5	1	4	1021	0,60071	1,184E+00	1,147E+00	4,064E-01	3,936E-01	180
180	5	1	12	8	1021	0,59938	3,474E+00	3,952E+00	1,193E+00	1,357E+00	0
179	1	2	15	8	1021	0,5992	3,445E+00	3,932E+00	1,183E+00	1,350E+00	0
178	0	4	10	4	1021	0,59899	2,493E+00	2,833E+00	8,558E-01	9,726E-01	180
177	2	0	16	4	1021	0,59717	1,516E+00	1,449E+00	5,203E-01	4,974E-01	0
176	1	5	0	4	1021	0,59664	8,348E-01	7,900E-01	2,866E-01	2,712E-01	0
175	7	2	1	8	1021	0,59633	1,988E+00	1,882E+00	6,825E-01	6,460E-01	0
174	6	3	3	8	1021	0,59552	1,877E+01	1,763E+01	6,446E+00	6,054E+00	0
173	6	2	8	8	1021	0,59459	1,444E+01	1,284E+01	4,958E+00	4,409E+00	0

172	7	1	6	8	1021	0,59362	2,164E+00	1,753E+00	7,428E-01	6,019E-01	0
171	1	5	2	8	1021	0,59235	1,511E+00	1,142E+00	5,188E-01	3,922E-01	0
170	5	3	8	8	1021	0,59225	4,627E-01	3,487E-01	1,588E-01	1,197E-01	0
169	0	5	3	4	1021	0,59206	2,312E+01	1,732E+01	7,937E+00	5,947E+00	0
168	7	0	7	4	1021	0,59132	2,557E+00	1,856E+00	8,780E-01	6,371E-01	0
167	5	2	11	8	1021	0,58923	5,918E-01	4,613E-01	2,032E-01	1,584E-01	0
166	7	2	3	8	1021	0,58786	1,074E+00	9,786E-01	3,689E-01	3,360E-01	0
165	3	3	12	8	1021	0,58758	4,001E+00	3,762E+00	1,374E+00	1,291E+00	0
164	4	4	6	8	1021	0,58672	8,936E+00	8,892E+00	3,068E+00	3,053E+00	0
163	2	3	13	8	1021	0,58615	1,463E-01	1,414E-01	5,022E-02	4,853E-02	180
162	5	0	13	4	1021	0,58439	4,392E-01	2,830E-01	1,508E-01	9,715E-02	0
161	2	5	1	8	1021	0,58086	2,776E+00	9,815E-01	9,532E-01	3,370E-01	180
160	1	5	4	8	1021	0,58002	5,110E+00	2,135E+00	1,754E+00	7,331E-01	0
159	2	4	10	8	1021	0,5793	5,012E+00	2,455E+00	1,721E+00	8,427E-01	180
158	5	4	1	8	1021	0,57915	3,527E+00	1,780E+00	1,211E+00	6,111E-01	0
157	6	3	5	8	1021	0,579	8,361E+00	4,345E+00	2,871E+00	1,492E+00	0
156	1	0	17	4	1021	0,57771	3,747E+00	2,448E+00	1,286E+00	8,405E-01	0
155	4	3	11	8	1021	0,57745	2,573E+01	1,763E+01	8,834E+00	6,054E+00	0
154	0	5	5	4	1021	0,57581	5,035E+00	4,276E+00	1,728E+00	1,468E+00	0
153	3	4	9	8	1021	0,57479	3,190E+00	2,649E+00	1,095E+00	9,093E-01	0
152	1	3	14	8	1021	0,57339	1,333E+00	1,008E+00	4,575E-01	3,459E-01	0
151	2	5	3	8	1021	0,57302	2,131E+01	1,561E+01	7,318E+00	5,358E+00	0
150	1	4	11	8	1021	0,57264	5,891E-01	4,194E-01	2,022E-01	1,440E-01	0
149	0	2	16	4	1021	0,57229	1,891E+00	1,327E+00	6,491E-01	4,556E-01	0
148	7	2	5	8	1021	0,57195	7,530E-01	5,294E-01	2,585E-01	1,818E-01	0
147	0	1	17	4	1021	0,57179	1,662E+01	1,177E+01	5,707E+00	4,040E+00	0
146	5	4	3	8	1021	0,57138	1,213E+00	8,901E-01	4,164E-01	3,056E-01	0
145	6	1	11	8	1021	0,56992	1,854E+01	1,689E+01	6,366E+00	5,799E+00	0
144	8	0	0	2	1021	0,56957	1,945E+01	1,848E+01	6,676E+00	6,346E+00	0
143	8	0	2	4	1021	0,56583	3,907E-01	2,234E-01	1,341E-01	7,670E-02	0
142	7	1	8	8	1021	0,56583	5,376E-01	3,069E-01	1,846E-01	1,053E-01	0
141	3	1	16	8	1021	0,56295	3,268E-02	2,027E-02	1,122E-02	6,960E-03	0
140	3	2	15	8	1021	0,56161	4,853E+00	3,374E+00	1,666E+00	1,158E+00	0
139	4	1	15	8	1021	0,56109	2,499E+00	1,625E+00	8,580E-01	5,580E-01	180
138	1	5	6	8	1021	0,56109	2,267E+00	1,473E+00	7,782E-01	5,058E-01	0
137	7	0	9	4	1021	0,56021	3,898E+00	2,456E+00	1,338E+00	8,432E-01	0
136	4	4	8	8	1021	0,55984	1,656E+01	1,063E+01	5,686E+00	3,648E+00	0
135	3	5	0	4	1021	0,5595	9,551E-01	6,306E-01	3,279E-01	2,165E-01	0
134	6	2	10	8	1021	0,55938	3,125E+00	2,088E+00	1,073E+00	7,168E-01	180
133	6	0	12	4	1021	0,55876	2,195E-02	1,573E-02	7,535E-03	5,399E-03	180
132	8	1	1	8	1021	0,55874	1,123E+00	8,074E-01	3,857E-01	2,772E-01	180
131	2	5	5	8	1021	0,55826	5,162E+00	3,899E+00	1,772E+00	1,339E+00	0
130	4	2	14	8	1021	0,55799	2,046E+01	1,581E+01	7,024E+00	5,429E+00	0
129	5	3	10	8	1021	0,55743	1,173E+00	9,391E-01	4,028E-01	3,224E-01	0
128	5	4	5	8	1021	0,55674	5,967E-01	4,965E-01	2,048E-01	1,705E-01	0
127	6	3	7	8	1021	0,55661	4,605E+00	3,866E+00	1,581E+00	1,327E+00	180
126	3	5	2	8	1021	0,55596	1,133E+00	9,998E-01	3,890E-01	3,432E-01	0
125	0	4	12	4	1021	0,5559	1,664E-02	1,475E-02	5,712E-03	5,064E-03	180
124	8	0	4	4	1021	0,55506	3,371E+00	3,106E+00	1,157E+00	1,066E+00	180
123	2	2	16	8	1021	0,55505	1,345E+00	1,240E+00	4,618E-01	4,256E-01	0
122	2	1	17	8	1021	0,55459	1,160E+01	1,060E+01	3,983E+00	3,640E+00	0
121	0	5	7	4	1021	0,55377	4,156E+00	3,778E+00	1,427E+00	1,297E+00	180
120	8	1	3	8	1021	0,55175	9,243E+00	1,372E+01	3,173E+00	4,709E+00	0
119	0	3	15	4	1021	0,55138	8,801E-01	1,497E+00	3,022E-01	5,139E-01	180
118	7	2	7	8	1021	0,55034	4,965E-01	1,641E+00	1,704E-01	5,633E-01	0
117	0	0	18	2	1021	0,55005	6,160E-01	3,037E+00	2,115E-01	1,043E+00	180
116	5	1	14	8	1021	0,54932	0,000E+00	8,622E-01	-1,185E-08	2,960E-01	0
115	7	3	0	4	1021	0,54603	0,000E+00	5,751E-01	-1,410E-09	1,974E-01	0
114	3	5	4	8	1021	0,54573	0,000E+00	1,891E+00	1,203E-08	6,492E-01	0
113	5	2	13	8	1021	0,54474	0,000E+00	2,803E-01	-5,591E-10	9,622E-02	0
112	3	0	17	4	1021	0,5438	1,075E+00	1,980E+00	3,690E-01	6,797E-01	0
111	4	0	16	4	1021	0,54376	6,643E-01	1,181E+00	2,281E-01	4,054E-01	0
110	7	3	2	8	1021	0,54274	5,416E-01	9,457E-01	1,859E-01	3,247E-01	0
109	3	3	14	8	1021	0,54019	2,358E-02	8,087E-01	8,095E-03	2,776E-01	0
108	2	4	12	8	1021	0,54005	1,404E-03	9,895E-03	4,819E-04	3,397E-03	180
107	3	4	11	8	1021	0,53957	1,585E-01	3,388E-01	5,442E-02	1,163E-01	0
106	1	2	17	8	1021	0,53931	1,099E+00	1,920E+00	3,771E-01	6,590E-01	0
105	8	1	5	8	1021	0,53853	2,249E+00	3,478E+00	7,721E-01	1,194E+00	0
104	8	0	6	4	1021	0,5384	4,249E+00	6,682E+00	1,459E+00	2,294E+00	0
103	2	5	7	8	1021	0,53811	2,003E+00	3,301E+00	6,877E-01	1,133E+00	180
102	1	5	8	8	1021	0,53744	1,499E-01	2,625E-01	5,147E-02	9,013E-02	0

101	1	1	18	8	1021	0,53731	1,235E+00	2,148E+00	4,241E-01	7,373E-01	0
100	5	4	7	8	1021	0,53675	9,929E-01	1,562E+00	3,409E-01	5,364E-01	0
99	2	3	15	8	1021	0,53591	1,011E+00	1,300E+00	3,470E-01	4,461E-01	180
98	4	3	13	8	1021	0,53539	5,325E-02	6,269E-02	1,828E-02	2,152E-02	180
97	7	1	10	8	1021	0,53524	7,657E-01	8,845E-01	2,629E-01	3,037E-01	0
96	2	0	18	4	1021	0,53469	2,371E+00	2,652E+00	8,140E-01	9,105E-01	180
95	5	0	15	4	1021	0,53457	2,641E+00	2,958E+00	9,067E-01	1,015E+00	0
94	6	4	0	4	1021	0,53445	1,309E+01	1,473E+01	4,495E+00	5,057E+00	0
93	7	3	4	8	1021	0,53321	1,150E+00	1,796E+00	3,947E-01	6,167E-01	0
92	8	2	0	4	1021	0,53267	6,514E+00	1,455E+01	2,236E+00	4,994E+00	0
91	1	4	13	8	1021	0,53155	2,290E-03	2,775E-01	7,861E-04	9,527E-02	0
90	6	4	2	8	1021	0,53136	0,000E+00	2,104E-01	2,274E-09	7,225E-02	0
89	4	5	1	8	1021	0,53135	0,000E+00	6,098E-01	-6,471E-09	2,094E-01	180
88	6	3	9	8	1021	0,53043	0,000E+00	1,515E+00	-2,372E-08	5,202E-01	0
87	4	4	10	8	1021	0,53016	0,000E+00	1,588E+00	2,350E-08	5,453E-01	180
86	3	5	6	8	1021	0,52987	0,000E+00	1,211E+00	1,192E-09	4,157E-01	0
85	8	2	2	8	1021	0,52962	0,000E+00	2,097E-01	-3,691E-09	7,199E-02	0
84	6	1	13	8	1021	0,52938	0,000E+00	5,539E-02	1,662E-10	1,902E-02	180
83	0	5	9	4	1021	0,52798	0,000E+00	1,492E+00	-2,031E-08	5,123E-01	0
82	7	0	11	4	1021	0,52745	0,000E+00	3,106E-01	2,036E-09	1,066E-01	0
81	4	5	3	8	1021	0,52534	0,000E+00	1,143E+01	-9,761E-08	3,925E+00	0
80	7	2	9	8	1021	0,525	2,326E-02	1,995E+00	7,986E-03	6,847E-01	0
79	6	2	12	8	1021	0,52381	1,159E-03	5,918E-03	3,980E-04	2,032E-03	180
78	1	3	16	8	1021	0,52316	4,437E-03	2,868E-02	1,523E-03	9,845E-03	0
77	6	4	4	8	1021	0,52241	5,342E-01	2,308E+00	1,834E-01	7,924E-01	180
76	5	3	12	8	1021	0,5222	7,531E-01	2,683E+00	2,586E-01	9,212E-01	0
75	8	2	4	8	1021	0,52075	1,397E+00	2,270E+00	4,795E-01	7,793E-01	180
74	8	1	7	8	1021	0,52038	1,883E+00	2,789E+00	6,466E-01	9,575E-01	180
73	7	3	6	8	1021	0,51839	1,030E+00	1,117E+00	3,535E-01	3,835E-01	0
72	1	0	19	4	1021	0,51772	1,421E-04	1,631E-04	4,880E-05	5,598E-05	0
71	6	0	14	4	1021	0,51755	1,027E+01	1,192E+01	3,524E+00	4,093E+00	0
70	8	0	8	4	1021	0,5174	6,860E+00	8,000E+00	2,355E+00	2,746E+00	0
69	0	2	18	4	1021	0,51661	2,093E+00	2,224E+00	7,184E-01	7,636E-01	180
68	0	4	14	4	1021	0,51527	1,232E+01	1,171E+01	4,228E+00	4,021E+00	0
67	2	5	9	8	1021	0,51435	9,432E-01	1,366E+00	3,238E-01	4,690E-01	0
66	4	5	5	8	1021	0,51389	1,351E+00	2,959E+00	4,638E-01	1,016E+00	0
65	0	1	19	4	1021	0,51346	1,266E+00	4,661E+00	4,346E-01	1,600E+00	0
64	5	4	9	8	1021	0,51316	3,339E-01	1,842E+00	1,146E-01	6,324E-01	0
63	3	2	17	8	1021	0,51142	5,048E-01	1,556E+00	1,733E-01	5,342E-01	0
62	4	2	16	8	1021	0,51138	3,388E-01	1,008E+00	1,163E-01	3,460E-01	0
61	4	1	17	8	1021	0,51103	3,582E+00	7,762E+00	1,230E+00	2,665E+00	0
60	1	5	10	8	1021	0,51102	3,785E-01	8,171E-01	1,299E-01	2,805E-01	0
59	3	5	8	8	1021	0,50982	1,831E-01	2,207E-01	6,287E-02	7,577E-02	0
58	3	1	18	8	1021	0,50971	1,614E+00	1,879E+00	5,542E-01	6,451E-01	0
57	6	4	6	8	1021	0,50844	5,869E+00	5,373E+00	2,015E+00	1,844E+00	0
56	8	2	6	8	1021	0,50692	6,266E+00	5,308E+00	2,151E+00	1,822E+00	0
55	9	0	1	4	1021	0,50562	1,808E+00	1,300E+00	6,208E-01	4,462E-01	0
54	3	4	13	8	1021	0,50478	3,672E-01	2,684E-01	1,260E-01	9,215E-02	0
53	5	1	16	8	1021	0,50469	4,425E-02	3,257E-02	1,519E-02	1,118E-02	0
52	7	1	12	8	1021	0,50382	3,000E+00	2,381E+00	1,030E+00	8,175E-01	0
51	2	2	18	8	1021	0,50382	2,442E+00	1,940E+00	8,382E-01	6,660E-01	180
50	5	2	15	8	1021	0,50372	3,078E+00	2,476E+00	1,057E+00	8,499E-01	0
49	0	3	17	4	1021	0,50366	9,007E+00	7,305E+00	3,092E+00	2,508E+00	0
48	2	4	14	8	1021	0,50257	1,081E+01	1,056E+01	3,711E+00	3,624E+00	0
47	6	3	11	8	1021	0,50238	1,052E+01	1,052E+01	3,612E+00	3,612E+00	0
46	5	5	0	4	1021	0,50219	4,006E-01	4,066E-01	1,375E-01	1,396E-01	0
45	0	6	0	2	1021	0,50152	1,131E+01	1,140E+01	3,883E+00	3,913E+00	0
44	2	1	19	8	1021	0,50089	4,482E+00	4,247E+00	1,539E+00	1,458E+00	0
43	9	0	3	4	1026	0,50043	5,942E-01	5,346E-01	2,040E-01	1,835E-01	0
42	0	5	11	4	1026	0,50029	1,164E+01	1,034E+01	3,997E+00	3,549E+00	0
41	5	5	2	8	1026	0,49963	8,912E-01	7,625E-01	3,060E-01	2,618E-01	0
40	4	4	12	8	1026	0,49958	2,230E-03	1,907E-03	7,655E-04	6,545E-04	180
39	7	3	8	8	1026	0,49957	2,405E-01	2,056E-01	8,257E-02	7,060E-02	0
38	9	1	0	4	1026	0,49926	4,619E-01	3,962E-01	1,586E-01	1,360E-01	0
37	0	6	2	4	1026	0,49896	2,235E-01	1,943E-01	7,672E-02	6,670E-02	0
36	8	1	9	8	1026	0,4988	1,395E+00	1,225E+00	4,788E-01	4,204E-01	0
35	4	5	7	8	1026	0,49804	2,425E+00	2,195E+00	8,327E-01	7,534E-01	180
34	1	6	1	8	1026	0,49787	1,372E+00	1,246E+00	4,711E-01	4,276E-01	0
33	7	2	11	8	1026	0,49775	2,696E-01	2,452E-01	9,257E-02	8,419E-02	0
32	3	3	16	8	1026	0,49758	3,760E-02	3,401E-02	1,291E-02	1,168E-02	0
31	9	1	2	8	1026	0,49674	8,349E-01	7,499E-01	2,866E-01	2,575E-01	0

30	4	3	15	8	1026	0,4963	9,462E-01	8,459E-01	3,248E-01	2,904E-01	180
29	4	0	18	4	1026	0,49533	2,000E+00	1,760E+00	6,867E-01	6,044E-01	180
28	0	0	20	2	1026	0,49504	3,194E+00	2,798E+00	1,097E+00	9,606E-01	0
27	7	0	13	4	1026	0,49483	3,014E-01	2,637E-01	1,035E-01	9,053E-02	0
26	8	3	1	8	1026	0,49467	4,404E-01	3,835E-01	1,512E-01	1,317E-01	180
25	8	0	10	4	1026	0,4937	1,209E+00	1,046E+00	4,151E-01	3,590E-01	180
24	1	4	15	8	1026	0,49323	2,653E+00	2,312E+00	9,107E-01	7,937E-01	0
23	1	6	3	8	1026	0,49291	5,740E-01	5,006E-01	1,971E-01	1,718E-01	0
22	3	0	19	4	1026	0,4929	1,134E-03	9,892E-04	3,894E-04	3,396E-04	0
21	5	5	4	8	1026	0,49217	1,740E+00	1,468E+00	5,972E-01	5,040E-01	0
20	2	3	17	8	1026	0,49178	7,769E+00	6,587E+00	2,667E+00	2,262E+00	0
19	7	4	1	8	1026	0,49163	1,418E+00	1,202E+00	4,870E-01	4,126E-01	0
18	0	6	4	4	1026	0,49153	1,977E+00	1,642E+00	6,786E-01	5,638E-01	180
17	6	1	15	8	1026	0,49149	9,592E-01	7,967E-01	3,293E-01	2,735E-01	180
16	5	0	17	4	1026	0,49075	1,469E+00	1,303E+00	5,042E-01	4,473E-01	0
15	6	4	8	8	1026	0,49065	7,260E+00	6,439E+00	2,493E+00	2,211E+00	0
14	9	0	5	4	1026	0,4905	3,824E-01	3,498E-01	1,313E-01	1,201E-01	0
13	8	3	3	8	1026	0,4898	9,907E+00	8,539E+00	3,401E+00	2,932E+00	0
12	2	6	0	4	1026	0,48979	1,192E+01	1,028E+01	4,093E+00	3,528E+00	0
11	1	2	19	8	1026	0,48955	1,209E-03	1,150E-03	4,150E-04	3,948E-04	0
10	9	1	4	8	1026	0,48941	1,519E+00	1,445E+00	5,216E-01	4,962E-01	0
9	6	2	14	8	1026	0,4894	9,878E+00	9,396E+00	3,391E+00	3,226E+00	0
8	8	2	8	8	1026	0,48928	6,688E+00	6,362E+00	2,296E+00	2,184E+00	0
7	2	5	11	8	1026	0,48865	9,087E+00	9,328E+00	3,120E+00	3,202E+00	0
6	5	3	14	8	1026	0,48809	5,141E-01	5,262E-01	1,765E-01	1,807E-01	0
5	5	4	11	8	1026	0,48763	2,266E-01	2,244E-01	7,781E-02	7,703E-02	0
4	2	6	2	8	1026	0,48741	1,960E-01	1,875E-01	6,730E-02	6,437E-02	0
3	3	5	10	8	1026	0,4871	7,755E-01	7,421E-01	2,663E-01	2,548E-01	0
2	7	4	3	8	1026	0,48685	5,726E-01	4,738E-01	1,966E-01	1,626E-01	0
1	1	1	20	8	1021	0,48554	0,000E+00	2,219E+03	2,165E+03	2,287E+03	0

Tabelle A4: gemessene und berechnete Struktur Faktoren von Ag₂PdO₂ aus Neutronenpulverdaten , Raumtemperatur, Detektorbank 3

lref	H	K	L	Mul	lcod	D-space	Fosq	Fcsq	FoTsq	FcTsq	Phas
1571	0	0	2	2	1021	4,94884	0,000E+00	3,308E+04	3,305E+04	3,311E+04	0
1570	1	0	1	4	1021	4,13802	0,000E+00	2,765E+04	2,762E+04	2,767E+04	0
1569	0	1	1	4	1021	2,87805	0,000E+00	1,922E+04	1,910E+04	1,954E+04	0
1568	1	0	3	4	1021	2,67201	0,000E+00	1,784E+04	1,772E+04	1,816E+04	0
1567	1	1	0	4	1021	2,51013	0,000E+00	1,676E+04	1,666E+04	1,708E+04	0
1566	0	0	4	2	1021	2,47442	0,000E+00	1,652E+04	1,643E+04	1,684E+04	0
1565	2	0	0	2	1021	2,27826	3,812E+02	4,531E+02	2,623E+01	3,117E+01	0
1564	1	1	2	8	1021	2,23937	1,167E+01	1,352E+01	8,028E-01	9,304E-01	0
1563	0	1	3	4	1021	2,22359	3,231E+02	3,697E+02	2,223E+01	2,543E+01	0
1562	2	0	2	4	1021	2,06961	2,106E+00	1,030E+00	1,449E-01	7,088E-02	0
1561	1	0	5	4	1021	1,8161	8,396E+00	7,712E+00	5,777E-01	5,306E-01	0
1560	2	1	1	8	1021	1,78656	3,885E+01	3,754E+01	2,673E+00	2,583E+00	180
1559	1	1	4	8	1021	1,76275	2,295E+01	2,159E+01	1,579E+00	1,486E+00	0
1558	2	0	4	4	1021	1,67629	1,299E+02	1,136E+02	8,935E+00	7,812E+00	180
1557	0	1	5	4	1021	1,65415	8,405E+01	7,735E+01	5,782E+00	5,322E+00	0
1556	0	0	6	2	1021	1,65015	1,941E+02	1,720E+02	1,335E+01	1,184E+01	0
1555	2	1	3	8	1021	1,59129	3,697E+02	3,322E+02	2,544E+01	2,285E+01	0
1554	0	2	0	2	1021	1,50455	4,226E+02	3,944E+02	2,908E+01	2,713E+01	0
1553	3	0	1	4	1021	1,50128	1,769E+01	1,900E+01	1,217E+00	1,307E+00	0
1552	0	2	2	4	1021	1,43953	0,000E+00	1,098E+00	2,974E-09	7,554E-02	0
1551	1	2	1	8	1021	1,41403	2,383E+01	1,872E+01	1,640E+00	1,288E+00	0
1550	3	0	3	4	1021	1,37974	2,016E+01	1,962E+01	1,387E+00	1,350E+00	0
1549	1	1	6	8	1021	1,37902	3,029E+01	3,001E+01	2,084E+00	2,064E+00	0
1548	3	1	0	4	1021	1,35591	1,877E+01	1,593E+01	1,291E+00	1,096E+00	0
1547	1	0	7	4	1021	1,35083	1,786E+01	1,525E+01	1,229E+00	1,049E+00	0
1546	2	1	5	8	1021	1,33854	7,848E+01	7,035E+01	5,400E+00	4,840E+00	0
1545	2	0	6	4	1021	1,33642	1,682E+02	1,550E+02	1,158E+01	1,066E+01	0
1544	1	2	3	8	1021	1,3111	1,751E+01	1,896E+01	1,205E+00	1,304E+00	0
1543	3	1	2	8	1021	1,30774	1,098E+01	1,201E+01	7,553E-01	8,263E-01	0
1542	0	2	4	4	1021	1,28567	9,829E+01	9,595E+01	6,762E+00	6,602E+00	180
1541	0	1	7	4	1021	1,28005	1,212E+02	1,160E+02	8,337E+00	7,978E+00	180
1540	2	2	0	4	1021	1,25548	3,813E+02	3,543E+02	2,624E+01	2,437E+01	0
1539	0	0	8	2	1021	1,23761	2,513E+02	2,029E+02	1,729E+01	1,396E+01	0

1538	2	2	2	8	1021	1,21696	0,000E+00	1,140E+00	-3,583E-09	7,845E-02	0
1537	3	0	5	4	1021	1,20515	0,000E+00	6,614E+00	8,993E-09	4,550E-01	0
1536	3	1	4	8	1021	1,18917	1,031E+01	1,985E+01	7,096E-01	1,365E+00	0
1535	1	2	5	8	1021	1,1586	0,000E+00	6,467E+00	3,587E-09	4,450E-01	0
1534	4	0	0	2	1021	1,13913	3,471E+02	3,285E+02	2,388E+01	2,260E+01	0
1533	2	2	4	8	1021	1,11968	9,030E+01	8,421E+01	6,213E+00	5,793E+00	180
1532	2	1	7	8	1021	1,11597	1,113E+02	1,018E+02	7,657E+00	7,006E+00	180
1531	0	2	6	4	1021	1,11179	1,427E+02	1,355E+02	9,818E+00	9,322E+00	0
1530	4	0	2	4	1021	1,11012	1,123E+00	1,165E+00	7,724E-02	8,016E-02	0
1529	1	1	8	8	1021	1,1101	4,678E+00	4,865E+00	3,219E-01	3,347E-01	0
1528	2	0	8	4	1021	1,08751	1,766E+02	1,831E+02	1,215E+01	1,259E+01	0
1527	1	0	9	4	1021	1,06937	3,529E+01	3,721E+01	2,428E+00	2,560E+00	0
1526	3	2	1	8	1021	1,06272	1,667E+01	1,686E+01	1,147E+00	1,160E+00	0
1525	4	1	1	8	1021	1,05923	2,128E+01	2,446E+01	1,464E+00	1,683E+00	180
1524	3	1	6	8	1021	1,04761	2,028E+01	2,430E+01	1,395E+00	1,672E+00	0
1523	3	0	7	4	1021	1,03509	1,493E+01	1,435E+01	1,027E+00	9,872E-01	0
1522	4	0	4	4	1021	1,03481	7,991E+01	7,677E+01	5,498E+00	5,281E+00	180
1521	0	1	9	4	1021	1,03322	2,697E+01	2,582E+01	1,855E+00	1,777E+00	0
1520	3	2	3	8	1021	1,01689	1,766E+01	1,501E+01	1,215E+00	1,033E+00	0
1519	4	1	3	8	1021	1,01384	2,711E+02	2,413E+02	1,865E+01	1,660E+01	0
1518	1	2	7	8	1021	1,00515	1,665E+01	1,421E+01	1,146E+00	9,775E-01	0
1517	2	2	6	8	1021	0,99917	1,336E+02	1,221E+02	9,192E+00	8,403E+00	0
1516	0	3	1	4	1021	0,99792	2,335E+01	2,248E+01	1,606E+00	1,547E+00	180
1515	0	0	10	2	1021	0,99009	5,097E+01	5,102E+01	3,506E+00	3,510E+00	180
1514	1	3	0	4	1021	0,97958	2,865E+00	1,160E+01	1,971E-01	7,983E-01	0
1513	1	3	2	8	1021	0,96095	1,084E+01	1,026E+01	7,459E-01	7,060E-01	0
1512	0	3	3	4	1021	0,95969	2,391E+02	2,268E+02	1,645E+01	1,560E+01	0
1511	0	2	8	4	1021	0,95579	1,683E+02	1,603E+02	1,158E+01	1,103E+01	0
1510	2	1	9	8	1021	0,94097	2,712E+01	2,355E+01	1,866E+00	1,620E+00	0
1509	3	2	5	8	1021	0,9406	6,374E+00	5,555E+00	4,385E-01	3,822E-01	0
1508	4	1	5	8	1021	0,93819	5,811E+01	5,300E+01	3,998E+00	3,647E+00	0
1507	4	0	6	4	1021	0,93746	1,206E+02	1,135E+02	8,297E+00	7,810E+00	0
1506	1	1	10	8	1021	0,92107	4,257E+00	6,259E+00	2,929E-01	4,306E-01	0
1505	3	1	8	8	1021	0,91409	4,026E+00	3,966E+00	2,770E-01	2,729E-01	0
1504	2	3	1	8	1021	0,91408	1,974E+01	1,945E+01	1,358E+00	1,338E+00	180
1503	1	3	4	8	1021	0,91084	1,947E+01	1,760E+01	1,339E+00	1,211E+00	0
1502	4	2	0	4	1021	0,90819	2,787E+02	2,571E+02	1,917E+01	1,769E+01	0
1501	2	0	10	4	1021	0,90805	4,809E+01	4,446E+01	3,309E+00	3,059E+00	180
1500	5	0	1	4	1021	0,90747	1,645E+01	1,537E+01	1,132E+00	1,057E+00	0
1499	0	3	5	4	1021	0,89479	5,814E+01	5,016E+01	4,000E+00	3,451E+00	0
1498	4	2	2	8	1021	0,89328	1,381E+00	1,218E+00	9,501E-02	8,382E-02	0
1497	3	0	9	4	1021	0,89095	3,307E+01	3,084E+01	2,275E+00	2,122E+00	0
1496	2	3	3	8	1021	0,88442	2,121E+02	2,040E+02	1,459E+01	1,403E+01	0
1495	1	0	11	4	1021	0,88302	6,158E+00	5,907E+00	4,237E-01	4,064E-01	0
1494	2	2	8	8	1021	0,88137	1,507E+02	1,446E+02	1,037E+01	9,951E+00	0
1493	5	0	3	4	1021	0,87843	1,507E+01	1,232E+01	1,037E+00	8,480E-01	0
1492	5	1	0	4	1021	0,87218	1,321E+01	9,779E+00	9,091E-01	6,728E-01	0
1491	1	2	9	8	1021	0,87164	3,935E+01	3,001E+01	2,707E+00	2,065E+00	0
1490	0	1	11	4	1021	0,86233	2,319E+02	2,159E+02	1,595E+01	1,485E+01	0
1489	5	1	2	8	1021	0,85895	9,615E+00	9,399E+00	6,615E-01	6,467E-01	0
1488	3	2	7	8	1021	0,85277	1,338E+01	1,321E+01	9,208E-01	9,086E-01	0
1487	4	2	4	8	1021	0,85261	5,743E+01	5,680E+01	3,951E+00	3,908E+00	180
1486	4	1	7	8	1021	0,85097	6,653E+01	6,885E+01	4,577E+00	4,737E+00	180
1485	1	3	6	8	1021	0,84234	1,332E+01	1,857E+01	9,161E-01	1,277E+00	0
1484	4	0	8	4	1021	0,83814	1,165E+02	1,345E+02	8,017E+00	9,256E+00	0
1483	3	3	0	4	1021	0,83699	7,506E+00	9,114E+00	5,164E-01	6,270E-01	0
1482	2	3	5	8	1021	0,83285	3,395E+01	4,566E+01	2,335E+00	3,142E+00	0
1481	5	0	5	4	1021	0,82784	3,521E+00	4,884E+00	2,422E-01	3,360E-01	0
1480	0	2	10	4	1021	0,82707	2,703E+01	3,719E+01	1,860E+00	2,559E+00	180
1479	3	3	2	8	1021	0,82528	6,335E+00	9,060E+00	4,359E-01	6,234E-01	0
1478	0	0	12	2	1021	0,82507	6,377E-01	9,226E-01	4,387E-02	6,347E-02	180
1477	5	1	4	8	1021	0,82261	9,968E+00	1,641E+01	6,858E-01	1,129E+00	0
1476	0	3	7	4	1021	0,81818	3,996E+01	6,376E+01	2,750E+00	4,387E+00	180
1475	2	1	11	8	1021	0,80649	1,901E+02	1,943E+02	1,308E+01	1,337E+01	0
1474	3	1	10	8	1021	0,7996	3,375E+00	6,093E+00	2,322E-01	4,192E-01	0
1473	4	2	6	8	1021	0,79565	7,835E+01	8,959E+01	5,391E+00	6,164E+00	0
1472	3	3	4	8	1021	0,79288	1,039E+01	1,592E+01	7,149E-01	1,095E+00	0
1471	1	1	12	8	1021	0,78384	1,626E+01	3,272E+01	1,119E+00	2,251E+00	0
1470	2	2	10	8	1021	0,77743	2,302E+01	3,237E+01	1,584E+00	2,227E+00	180
1469	5	2	1	8	1021	0,77707	9,458E+00	1,350E+01	6,507E-01	9,285E-01	0
1468	2	0	12	4	1021	0,77577	4,357E-01	7,392E-01	2,998E-02	5,085E-02	180

1467	3	0	11	4	1021	0,77433	2,251E+00	4,674E+00	1,549E-01	3,215E-01	0
1466	5	1	6	8	1021	0,7711	1,115E+01	1,605E+01	7,671E-01	1,104E+00	0
1465	2	3	7	8	1021	0,77003	4,239E+01	5,591E+01	2,916E+00	3,847E+00	180
1464	1	3	8	8	1021	0,76809	2,391E+00	3,067E+00	1,645E-01	2,110E-01	0
1463	3	2	9	8	1021	0,76662	1,945E+01	2,490E+01	1,338E+00	1,713E+00	0
1462	5	0	7	4	1021	0,76607	9,663E+00	1,232E+01	6,648E-01	8,477E-01	0
1461	4	1	9	8	1021	0,76531	1,392E+01	1,789E+01	9,575E-01	1,231E+00	0
1460	1	2	11	8	1021	0,76155	3,584E+00	4,518E+00	2,466E-01	3,108E-01	0
1459	6	0	0	2	1021	0,75942	1,792E+02	1,929E+02	1,233E+01	1,327E+01	0
1458	5	2	3	8	1021	0,7586	8,657E+00	9,490E+00	5,956E-01	6,529E-01	0
1457	0	4	0	2	1021	0,75227	1,532E+02	1,894E+02	1,054E+01	1,303E+01	0
1456	1	0	13	4	1021	0,75119	1,006E+00	1,239E+00	6,923E-02	8,522E-02	0
1455	6	0	2	4	1021	0,75064	1,008E+00	1,234E+00	6,936E-02	8,493E-02	0
1454	4	3	1	8	1021	0,75063	1,023E+01	1,252E+01	7,036E-01	8,613E-01	180
1453	4	0	10	4	1021	0,74728	2,717E+01	2,934E+01	1,869E+00	2,018E+00	180
1452	3	3	6	8	1021	0,74646	1,359E+01	1,511E+01	9,352E-01	1,040E+00	0
1451	0	4	2	4	1021	0,74373	1,064E+00	1,234E+00	7,322E-02	8,490E-02	0
1450	0	3	9	4	1021	0,7412	1,609E+01	1,696E+01	1,107E+00	1,167E+00	0
1449	1	4	1	8	1021	0,74015	1,235E+01	1,282E+01	8,496E-01	8,822E-01	0
1448	0	1	13	4	1021	0,73833	2,186E+00	2,504E+00	1,504E-01	1,723E-01	180
1447	6	1	1	8	1021	0,7343	1,114E+01	1,177E+01	7,666E-01	8,099E-01	180
1446	4	3	3	8	1021	0,73394	1,417E+02	1,486E+02	9,748E+00	1,022E+01	0
1445	4	2	8	8	1021	0,7322	1,020E+02	1,064E+02	7,021E+00	7,323E+00	0
1444	6	0	4	4	1021	0,72602	4,196E+01	3,970E+01	2,887E+00	2,732E+00	180
1443	5	2	5	8	1021	0,7253	3,991E+00	4,114E+00	2,746E-01	2,830E-01	0
1442	1	4	3	8	1021	0,72414	7,208E+00	8,595E+00	4,959E-01	5,913E-01	0
1441	0	2	12	4	1021	0,72344	4,381E-01	5,479E-01	3,014E-02	3,769E-02	180
1440	0	4	4	4	1021	0,71977	4,056E+01	3,881E+01	2,791E+00	2,670E+00	180
1439	6	1	3	8	1021	0,71866	1,558E+02	1,423E+02	1,072E+01	9,788E+00	0
1438	2	4	0	4	1021	0,71434	2,026E+02	1,703E+02	1,394E+01	1,172E+01	0
1437	5	1	8	8	1021	0,71293	3,486E+00	2,674E+00	2,399E-01	1,840E-01	0
1436	0	0	14	2	1021	0,70721	1,591E+02	1,530E+02	1,094E+01	1,053E+01	0
1435	2	4	2	8	1021	0,70702	1,289E+00	1,228E+00	8,868E-02	8,450E-02	0
1434	3	1	12	8	1021	0,70484	3,249E+01	2,764E+01	2,235E+00	1,902E+00	0
1433	2	3	9	8	1021	0,70483	1,820E+01	1,548E+01	1,252E+00	1,065E+00	0
1432	4	3	5	8	1021	0,70366	4,225E+01	3,449E+01	2,907E+00	2,373E+00	0
1431	2	1	13	8	1021	0,70236	2,741E+00	2,029E+00	1,886E-01	1,396E-01	180
1430	5	0	9	4	1021	0,70179	3,006E+01	2,126E+01	2,068E+00	1,462E+00	0
1429	1	3	10	8	1021	0,69635	9,754E+00	5,754E+00	6,711E-01	3,959E-01	0
1428	1	4	5	8	1021	0,69501	5,752E+00	3,853E+00	3,958E-01	2,651E-01	0
1427	3	3	8	8	1021	0,69332	3,124E+00	2,528E+00	2,149E-01	1,739E-01	0
1426	6	1	5	8	1021	0,69016	3,805E+01	3,318E+01	2,618E+00	2,283E+00	0
1425	6	0	6	4	1021	0,68987	7,773E+01	6,786E+01	5,348E+00	4,669E+00	0
1424	2	2	12	8	1021	0,68951	4,930E-01	4,296E-01	3,392E-02	2,956E-02	180
1423	3	2	11	8	1021	0,68849	4,167E+00	3,592E+00	2,867E-01	2,471E-01	0
1422	4	1	11	8	1021	0,68754	1,653E+02	1,419E+02	1,137E+01	9,761E+00	0
1421	2	4	4	8	1021	0,68633	3,923E+01	3,397E+01	2,699E+00	2,337E+00	180
1420	0	4	6	4	1021	0,6845	7,579E+01	6,667E+01	5,214E+00	4,587E+00	0
1419	5	2	7	8	1021	0,68267	1,181E+01	1,112E+01	8,126E-01	7,654E-01	0
1418	3	0	13	4	1021	0,68081	1,318E+00	1,336E+00	9,064E-02	9,191E-02	0
1417	1	1	14	8	1021	0,68072	8,329E+00	8,422E+00	5,730E-01	5,795E-01	0
1416	6	2	0	4	1021	0,67795	1,766E+02	1,513E+02	1,215E+01	1,041E+01	0
1415	2	0	14	4	1021	0,67541	1,630E+02	1,377E+02	1,121E+01	9,472E+00	0
1414	5	3	0	4	1021	0,67449	6,988E+00	5,679E+00	4,808E-01	3,907E-01	0
1413	3	4	1	8	1021	0,67256	1,467E+01	1,138E+01	1,009E+00	7,832E-01	0
1412	1	2	13	8	1021	0,67208	1,726E+00	1,347E+00	1,187E-01	9,265E-02	0
1411	6	2	2	8	1021	0,67168	1,540E+00	1,216E+00	1,060E-01	8,366E-02	0
1410	0	3	11	4	1021	0,6699	1,553E+02	1,334E+02	1,068E+01	9,181E+00	0
1409	4	2	10	8	1021	0,66927	2,443E+01	2,127E+01	1,681E+00	1,464E+00	180
1408	5	3	2	8	1021	0,66832	7,855E+00	7,018E+00	5,404E-01	4,828E-01	0
1407	4	0	12	4	1021	0,66821	3,992E-01	3,592E-01	2,746E-02	2,471E-02	180
1406	4	3	7	8	1021	0,66453	3,271E+01	3,763E+01	2,250E+00	2,589E+00	180
1405	3	4	3	8	1021	0,66048	6,238E+00	6,875E+00	4,292E-01	4,730E-01	0
1404	1	4	7	8	1021	0,65723	1,159E+01	1,067E+01	7,977E-01	7,342E-01	0
1403	2	4	6	8	1021	0,65555	6,550E+01	6,020E+01	4,506E+00	4,142E+00	0
1402	5	1	10	8	1021	0,65446	5,949E+00	5,527E+00	4,093E-01	3,803E-01	0
1401	6	2	4	8	1021	0,65387	3,171E+01	2,925E+01	2,182E+00	2,012E+00	180
1400	1	0	15	4	1021	0,65324	2,600E+01	2,336E+01	1,789E+00	1,607E+00	0
1399	6	1	7	8	1021	0,65313	3,994E+01	3,562E+01	2,748E+00	2,451E+00	180
1398	5	3	4	8	1021	0,65076	1,646E+01	1,282E+01	1,133E+00	8,820E-01	0
1397	7	0	1	4	1021	0,64953	1,416E+01	1,082E+01	9,744E-01	7,447E-01	0

1396	6	0	8	4	1021	0,64728	9,510E+01	8,082E+01	6,543E+00	5,561E+00	0
1395	0	1	15	4	1021	0,64473	1,540E+01	1,414E+01	1,059E+00	9,726E-01	180
1394	0	4	8	4	1021	0,64283	9,001E+01	7,942E+01	6,193E+00	5,464E+00	0
1393	2	3	11	8	1021	0,6427	1,377E+02	1,202E+02	9,476E+00	8,271E+00	0
1392	5	0	11	4	1021	0,64038	3,940E+00	2,964E+00	2,711E-01	2,039E-01	0
1391	0	2	14	4	1021	0,64003	1,612E+02	1,201E+02	1,109E+01	8,264E+00	0
1390	3	3	10	8	1021	0,63919	7,336E+00	5,427E+00	5,047E-01	3,734E-01	0
1389	7	0	3	4	1021	0,63863	8,549E+00	6,274E+00	5,882E-01	4,316E-01	0
1388	3	4	5	8	1021	0,63815	4,668E+00	3,323E+00	3,211E-01	2,286E-01	0
1387	7	1	0	4	1021	0,63622	7,671E+00	4,820E+00	5,278E-01	3,316E-01	0
1386	5	2	9	8	1021	0,636	2,727E+01	1,720E+01	1,876E+00	1,184E+00	0
1385	7	1	2	8	1021	0,63103	7,794E+00	6,400E+00	5,362E-01	4,403E-01	0
1384	1	3	12	8	1021	0,63106	2,709E+01	2,222E+01	1,864E+00	1,529E+00	0
1383	4	4	0	4	1021	0,62774	1,281E+02	1,241E+02	8,812E+00	8,539E+00	0
1382	6	2	6	8	1021	0,62709	5,538E+01	5,370E+01	3,810E+00	3,695E+00	0
1381	3	1	14	8	1021	0,62704	6,915E+00	6,712E+00	4,757E-01	4,618E-01	0
1380	5	3	6	8	1021	0,62435	6,683E+00	1,008E+01	4,598E-01	6,932E-01	0
1379	4	4	2	8	1021	0,62275	1,073E+00	1,184E+00	7,381E-02	8,146E-02	0
1378	4	3	9	8	1021	0,62126	1,190E+01	1,181E+01	8,186E-01	8,125E-01	0
1377	2	1	15	8	1021	0,62037	1,240E+01	1,232E+01	8,528E-01	8,474E-01	180
1376	3	2	13	8	1021	0,62026	1,405E+00	1,397E+00	9,668E-02	9,612E-02	0
1375	4	1	13	8	1021	0,61957	1,029E+00	1,037E+00	7,076E-02	7,136E-02	180
1374	0	0	16	2	1021	0,61881	7,399E+00	7,733E+00	5,091E-01	5,320E-01	0
1373	2	4	8	8	1021	0,61868	6,830E+01	7,177E+01	4,699E+00	4,938E+00	0
1372	7	0	5	4	1021	0,61838	2,949E+00	3,126E+00	2,029E-01	2,151E-01	0
1371	7	1	4	8	1021	0,61619	1,175E+01	1,182E+01	8,081E-01	8,132E-01	0
1370	2	2	14	8	1021	0,61617	1,074E+02	1,081E+02	7,391E+00	7,438E+00	0
1369	1	4	9	8	1021	0,61528	1,491E+01	1,587E+01	1,026E+00	1,092E+00	0
1368	6	1	9	8	1021	0,61191	3,882E-01	1,138E+01	2,671E-02	7,828E-01	0
1367	4	2	12	8	1021	0,61069	8,107E-02	1,911E-01	5,577E-03	1,315E-02	180
1366	3	4	7	8	1021	0,60854	6,810E+00	9,664E+00	4,685E-01	6,649E-01	0
1365	4	4	4	8	1021	0,60848	1,589E+01	2,273E+01	1,093E+00	1,564E+00	180
1364	0	3	13	4	1021	0,60657	2,696E-01	9,021E-01	1,855E-02	6,207E-02	180
1363	3	0	15	4	1021	0,60537	8,678E+00	2,007E+01	5,970E-01	1,381E+00	0
1362	6	3	1	8	1021	0,60433	4,263E+00	5,876E+00	2,933E-01	4,042E-01	180
1361	6	0	10	4	1021	0,60258	1,420E+01	1,449E+01	9,771E-01	9,968E-01	180
1360	4	0	14	4	1021	0,60083	1,098E+02	1,004E+02	7,557E+00	6,905E+00	0
1359	1	1	16	8	1021	0,60083	7,178E-02	6,559E-02	4,939E-03	4,512E-03	0
1358	0	5	1	4	1021	0,60071	6,272E+00	5,722E+00	4,315E-01	3,936E-01	180
1357	5	1	12	8	1021	0,59938	2,100E+01	1,972E+01	1,445E+00	1,357E+00	0
1356	1	2	15	8	1021	0,5992	2,084E+01	1,962E+01	1,434E+00	1,350E+00	0
1355	0	4	10	4	1021	0,59899	1,502E+01	1,414E+01	1,033E+00	9,726E-01	180
1354	2	0	16	4	1021	0,59717	8,526E+00	7,229E+00	5,866E-01	4,974E-01	0
1353	1	5	0	4	1021	0,59664	4,683E+00	3,942E+00	3,222E-01	2,712E-01	0
1352	7	2	1	8	1021	0,59633	1,109E+01	9,389E+00	7,627E-01	6,460E-01	0
1351	6	3	3	8	1021	0,59552	1,012E+02	8,800E+01	6,961E+00	6,054E+00	0
1350	6	2	8	8	1021	0,59459	7,250E+01	6,408E+01	4,988E+00	4,409E+00	0
1349	7	1	6	8	1021	0,59362	9,449E+00	8,749E+00	6,501E-01	6,019E-01	0
1348	1	5	2	8	1021	0,59235	5,843E+00	5,700E+00	4,020E-01	3,922E-01	0
1347	5	3	8	8	1021	0,59225	1,785E+00	1,740E+00	1,228E-01	1,197E-01	0
1346	0	5	3	4	1021	0,59206	8,893E+01	8,643E+01	6,118E+00	5,947E+00	0
1345	7	0	7	4	1021	0,59132	9,552E+00	9,260E+00	6,572E-01	6,371E-01	0
1344	5	2	11	8	1021	0,58923	1,646E+00	2,302E+00	1,132E-01	1,584E-01	0
1343	7	2	3	8	1021	0,58786	4,184E+00	4,883E+00	2,878E-01	3,360E-01	0
1342	3	3	12	8	1021	0,58758	1,714E+01	1,877E+01	1,179E+00	1,291E+00	0
1341	4	4	6	8	1021	0,58672	4,541E+01	4,437E+01	3,124E+00	3,053E+00	0
1340	2	3	13	8	1021	0,58615	7,303E-01	7,054E-01	5,025E-02	4,853E-02	180
1339	5	0	13	4	1021	0,58439	1,016E+00	1,412E+00	6,991E-02	9,715E-02	0
1338	2	5	1	8	1021	0,58086	4,505E+00	4,898E+00	3,099E-01	3,370E-01	180
1337	1	5	4	8	1021	0,58002	1,199E+01	1,066E+01	8,250E-01	7,331E-01	0
1336	2	4	10	8	1021	0,5793	1,448E+01	1,225E+01	9,961E-01	8,427E-01	180
1335	5	4	1	8	1021	0,57915	1,047E+01	8,882E+00	7,207E-01	6,111E-01	0
1334	6	3	5	8	1021	0,579	2,543E+01	2,168E+01	1,750E+00	1,492E+00	0
1333	1	0	17	4	1021	0,57771	1,348E+01	1,222E+01	9,274E-01	8,405E-01	0
1332	4	3	11	8	1021	0,57745	9,666E+01	8,799E+01	6,651E+00	6,054E+00	0
1331	0	5	5	4	1021	0,57581	2,400E+01	2,134E+01	1,651E+00	1,468E+00	0
1330	3	4	9	8	1021	0,57479	1,500E+01	1,322E+01	1,032E+00	9,093E-01	0
1329	1	3	14	8	1021	0,57339	5,551E+00	5,028E+00	3,819E-01	3,459E-01	0
1328	2	5	3	8	1021	0,57302	8,713E+01	7,788E+01	5,995E+00	5,358E+00	0
1327	1	4	11	8	1021	0,57264	2,412E+00	2,093E+00	1,659E-01	1,440E-01	0
1326	0	2	16	4	1021	0,57229	7,915E+00	6,623E+00	5,445E-01	4,556E-01	0

1325	7	2	5	8	1021	0,57195	3,281E+00	2,642E+00	2,257E-01	1,818E-01	0
1324	0	1	17	4	1021	0,57179	7,422E+01	5,873E+01	5,107E+00	4,040E+00	0
1323	5	4	3	8	1021	0,57138	5,840E+00	4,441E+00	4,018E-01	3,056E-01	0
1322	6	1	11	8	1021	0,56992	1,115E+02	8,429E+01	7,671E+00	5,799E+00	0
1321	8	0	0	2	1021	0,56957	1,206E+02	9,223E+01	8,298E+00	6,346E+00	0
1320	8	0	2	4	1021	0,56583	2,062E+00	1,115E+00	1,418E-01	7,670E-02	0
1319	7	1	8	8	1021	0,56583	2,835E+00	1,531E+00	1,950E-01	1,053E-01	0
1318	3	1	16	8	1021	0,56295	1,842E-01	1,012E-01	1,268E-02	6,960E-03	0
1317	3	2	15	8	1021	0,56161	2,600E+01	1,684E+01	1,788E+00	1,158E+00	0
1316	4	1	15	8	1021	0,56109	1,158E+01	8,110E+00	7,965E-01	5,580E-01	180
1315	1	5	6	8	1021	0,56109	1,048E+01	7,351E+00	7,214E-01	5,058E-01	0
1314	7	0	9	4	1021	0,56021	1,625E+01	1,226E+01	1,118E+00	8,432E-01	0
1313	4	4	8	8	1021	0,55984	6,926E+01	5,302E+01	4,765E+00	3,648E+00	0
1312	3	5	0	4	1021	0,5595	4,047E+00	3,147E+00	2,785E-01	2,165E-01	0
1311	6	2	10	8	1021	0,55938	1,332E+01	1,042E+01	9,165E-01	7,168E-01	180
1310	6	0	12	4	1021	0,55876	9,722E-02	7,848E-02	6,688E-03	5,399E-03	180
1309	8	1	1	8	1021	0,55874	4,986E+00	4,029E+00	3,430E-01	2,772E-01	180
1308	2	5	5	8	1021	0,55826	2,392E+01	1,946E+01	1,646E+00	1,339E+00	0
1307	4	2	14	8	1021	0,55799	9,777E+01	7,892E+01	6,726E+00	5,429E+00	0
1306	5	3	10	8	1021	0,55743	6,005E+00	4,686E+00	4,131E-01	3,224E-01	0
1305	5	4	5	8	1021	0,55674	3,286E+00	2,478E+00	2,261E-01	1,705E-01	0
1304	6	3	7	8	1021	0,55661	2,565E+01	1,929E+01	1,764E+00	1,327E+00	180
1303	3	5	2	8	1021	0,55596	6,602E+00	4,989E+00	4,542E-01	3,432E-01	0
1302	0	4	12	4	1021	0,5559	9,733E-02	7,360E-02	6,696E-03	5,064E-03	180
1301	8	0	4	4	1021	0,55506	2,080E+01	1,550E+01	1,431E+00	1,066E+00	180
1300	2	2	16	8	1021	0,55505	8,305E+00	6,185E+00	5,714E-01	4,256E-01	0
1299	2	1	17	8	1021	0,55459	7,293E+01	5,290E+01	5,017E+00	3,640E+00	0
1298	0	5	7	4	1021	0,55377	2,682E+01	1,885E+01	1,846E+00	1,297E+00	180
1297	8	1	3	8	1021	0,55175	8,852E+01	6,845E+01	6,090E+00	4,709E+00	0
1296	0	3	15	4	1021	0,55138	8,979E+00	7,469E+00	6,178E-01	5,139E-01	180
1295	7	2	7	8	1021	0,55034	6,145E+00	8,187E+00	4,228E-01	5,633E-01	0
1294	0	0	18	2	1021	0,55005	6,849E+00	1,515E+01	4,712E-01	1,043E+00	180
1293	5	1	14	8	1021	0,54932	0,000E+00	4,303E+00	-1,185E-08	2,960E-01	0
1292	7	3	0	4	1021	0,54603	1,110E-01	2,870E+00	7,640E-03	1,974E-01	0
1291	3	5	4	8	1021	0,54573	3,277E+00	9,436E+00	2,254E-01	6,492E-01	0
1290	5	2	13	8	1021	0,54474	1,260E+00	1,399E+00	8,669E-02	9,622E-02	0
1289	3	0	17	4	1021	0,5438	6,980E+00	9,880E+00	4,802E-01	6,797E-01	0
1288	4	0	16	4	1021	0,54376	4,032E+00	5,893E+00	2,774E-01	4,054E-01	0
1287	7	3	2	8	1021	0,54274	0,000E+00	4,719E+00	-2,787E-09	3,247E-01	0
1286	3	3	14	8	1021	0,54019	0,000E+00	4,036E+00	3,224E-09	2,776E-01	0
1285	2	4	12	8	1021	0,54005	0,000E+00	4,938E-02	-1,077E-10	3,397E-03	180
1284	3	4	11	8	1021	0,53957	1,483E-01	1,691E+00	1,020E-02	1,163E-01	0
1283	1	2	17	8	1021	0,53931	1,938E+00	9,579E+00	1,333E-01	6,590E-01	0
1282	8	1	5	8	1021	0,53853	8,821E+00	1,735E+01	6,069E-01	1,194E+00	0
1281	8	0	6	4	1021	0,5384	1,844E+01	3,334E+01	1,269E+00	2,294E+00	0
1280	2	5	7	8	1021	0,53811	1,040E+01	1,647E+01	7,158E-01	1,133E+00	180
1279	1	5	8	8	1021	0,53744	9,473E-01	1,310E+00	6,517E-02	9,013E-02	0
1278	1	1	18	8	1021	0,53731	7,771E+00	1,072E+01	5,346E-01	7,373E-01	0
1277	5	4	7	8	1021	0,53675	5,319E+00	7,797E+00	3,660E-01	5,364E-01	0
1276	2	3	15	8	1021	0,53591	3,994E+00	6,485E+00	2,748E-01	4,461E-01	180
1275	4	3	13	8	1021	0,53539	1,955E-01	3,128E-01	1,345E-02	2,152E-02	180
1274	7	1	10	8	1021	0,53524	2,770E+00	4,414E+00	1,906E-01	3,037E-01	0
1273	2	0	18	4	1021	0,53469	8,419E+00	1,323E+01	5,792E-01	9,105E-01	180
1272	5	0	15	4	1021	0,53457	9,467E+00	1,476E+01	6,513E-01	1,015E+00	0
1271	6	4	0	4	1021	0,53445	4,761E+01	7,351E+01	3,275E+00	5,057E+00	0
1270	7	3	4	8	1021	0,53321	6,348E+00	8,964E+00	4,367E-01	6,167E-01	0
1269	8	2	0	4	1021	0,53267	4,571E+01	7,258E+01	3,145E+00	4,994E+00	0
1268	1	4	13	8	1021	0,53155	3,110E-01	1,385E+00	2,140E-02	9,527E-02	0
1267	6	4	2	8	1021	0,53136	2,042E-01	1,050E+00	1,405E-02	7,225E-02	0
1266	4	5	1	8	1021	0,53135	5,904E-01	3,043E+00	4,062E-02	2,094E-01	180
1265	6	3	9	8	1021	0,53043	2,009E+00	7,561E+00	1,382E-01	5,202E-01	0
1264	4	4	10	8	1021	0,53016	1,905E+00	7,926E+00	1,311E-01	5,453E-01	180
1263	3	5	6	8	1021	0,52987	7,281E-01	6,043E+00	5,010E-02	4,157E-01	0
1262	8	2	2	8	1021	0,52962	0,000E+00	1,046E+00	-3,691E-09	7,199E-02	0
1261	6	1	13	8	1021	0,52938	0,000E+00	2,764E-01	1,662E-10	1,902E-02	180
1260	0	5	9	4	1021	0,52798	0,000E+00	7,446E+00	-2,031E-08	5,123E-01	0
1259	7	0	11	4	1021	0,52745	0,000E+00	1,550E+00	2,036E-09	1,066E-01	0
1258	4	5	3	8	1021	0,52534	3,233E+01	5,705E+01	2,224E+00	3,925E+00	0
1257	7	2	9	8	1021	0,525	4,967E+00	9,953E+00	3,418E-01	6,847E-01	0
1256	6	2	12	8	1021	0,52381	0,000E+00	2,953E-02	7,282E-11	2,032E-03	180
1255	1	3	16	8	1021	0,52316	8,323E-04	1,431E-01	5,726E-05	9,845E-03	0

1254	6	4	4	8	1021	0,52241	2,400E+00	1,152E+01	1,651E-01	7,924E-01	180
1253	5	3	12	8	1021	0,5222	3,483E+00	1,339E+01	2,396E-01	9,212E-01	0
1252	8	2	4	8	1021	0,52075	5,600E+00	1,133E+01	3,853E-01	7,793E-01	180
1251	8	1	7	8	1021	0,52038	8,751E+00	1,392E+01	6,021E-01	9,575E-01	180
1250	7	3	6	8	1021	0,51839	5,122E+00	5,575E+00	3,524E-01	3,835E-01	0
1249	1	0	19	4	1021	0,51772	7,600E-04	8,137E-04	5,229E-05	5,598E-05	0
1248	6	0	14	4	1021	0,51755	5,607E+01	5,949E+01	3,858E+00	4,093E+00	0
1247	8	0	8	4	1021	0,5174	3,786E+01	3,992E+01	2,605E+00	2,746E+00	0
1246	0	2	18	4	1021	0,51661	1,018E+01	1,110E+01	7,007E-01	7,636E-01	180
1245	0	4	14	4	1021	0,51527	4,208E+01	5,844E+01	2,895E+00	4,021E+00	0
1244	2	5	9	8	1021	0,51435	6,644E+00	6,817E+00	4,571E-01	4,690E-01	0
1243	4	5	5	8	1021	0,51389	1,613E+01	1,477E+01	1,110E+00	1,016E+00	0
1242	0	1	19	4	1021	0,51346	2,672E+01	2,326E+01	1,838E+00	1,600E+00	0
1241	5	4	9	8	1021	0,51316	1,064E+01	9,192E+00	7,322E-01	6,324E-01	0
1240	3	2	17	8	1021	0,51142	8,260E+00	7,765E+00	5,683E-01	5,342E-01	0
1239	4	2	16	8	1021	0,51138	5,342E+00	5,028E+00	3,675E-01	3,460E-01	0
1238	4	1	17	8	1021	0,51103	4,003E+01	3,873E+01	2,754E+00	2,665E+00	0
1237	1	5	10	8	1021	0,51102	4,211E+00	4,077E+00	2,897E-01	2,805E-01	0
1236	3	5	8	8	1021	0,50982	9,068E-01	1,101E+00	6,239E-02	7,577E-02	0
1235	3	1	18	8	1021	0,50971	7,574E+00	9,377E+00	5,211E-01	6,451E-01	0
1234	6	4	6	8	1021	0,50844	1,954E+01	2,681E+01	1,344E+00	1,844E+00	0
1233	8	2	6	8	1021	0,50692	2,254E+01	2,649E+01	1,551E+00	1,822E+00	0
1232	9	0	1	4	1021	0,50562	8,918E+00	6,486E+00	6,135E-01	4,462E-01	0
1231	3	4	13	8	1021	0,50478	1,779E+00	1,339E+00	1,224E-01	9,215E-02	0
1230	5	1	16	8	1021	0,50469	2,134E-01	1,625E-01	1,468E-02	1,118E-02	0
1229	7	1	12	8	1021	0,50382	1,415E+01	1,188E+01	9,734E-01	8,175E-01	0
1228	2	2	18	8	1021	0,50382	1,152E+01	9,680E+00	7,924E-01	6,660E-01	180
1227	5	2	15	8	1021	0,50372	1,458E+01	1,235E+01	1,003E+00	8,499E-01	0
1226	0	3	17	4	1021	0,50366	4,282E+01	3,645E+01	2,946E+00	2,508E+00	0
1225	2	4	14	8	1021	0,50257	6,098E+01	5,267E+01	4,196E+00	3,624E+00	0
1224	6	3	11	8	1021	0,50238	6,136E+01	5,250E+01	4,221E+00	3,612E+00	0
1223	5	5	0	4	1021	0,50219	2,404E+00	2,029E+00	1,654E-01	1,396E-01	0
1222	0	6	0	2	1021	0,50152	7,438E+01	5,688E+01	5,117E+00	3,913E+00	0
1221	2	1	19	8	1021	0,50089	3,122E+01	2,119E+01	2,148E+00	1,458E+00	0
1220	9	0	3	4	1021	0,50043	4,351E+00	2,668E+00	2,994E-01	1,835E-01	0
1219	0	5	11	4	1021	0,50029	8,714E+01	5,158E+01	5,995E+00	3,549E+00	0
1218	5	5	2	8	1021	0,49963	7,753E+00	3,805E+00	5,334E-01	2,618E-01	0
1217	4	4	12	8	1021	0,49958	1,961E-02	9,514E-03	1,349E-03	6,545E-04	180
1216	7	3	8	8	1021	0,49957	2,125E+00	1,026E+00	1,462E-01	7,060E-02	0
1215	9	1	0	4	1021	0,49926	4,367E+00	1,977E+00	3,005E-01	1,360E-01	0
1214	0	6	2	4	1021	0,49896	2,212E+00	9,695E-01	1,522E-01	6,670E-02	0
1213	8	1	9	8	1021	0,4988	1,394E+01	6,110E+00	9,591E-01	4,204E-01	0
1212	4	5	7	8	1021	0,49804	2,141E+01	1,095E+01	1,473E+00	7,534E-01	180
1211	1	6	1	8	1021	0,49787	1,160E+01	6,216E+00	7,983E-01	4,276E-01	0
1210	7	2	11	8	1021	0,49775	2,222E+00	1,224E+00	1,529E-01	8,419E-02	0
1209	3	3	16	8	1021	0,49758	3,007E-01	1,697E-01	2,069E-02	1,168E-02	0
1208	9	1	2	8	1021	0,49674	7,528E+00	3,742E+00	5,179E-01	2,575E-01	0
1207	4	3	15	8	1021	0,4963	9,607E+00	4,221E+00	6,610E-01	2,904E-01	180
1206	4	0	18	4	1021	0,49533	2,286E+01	8,784E+00	1,573E+00	6,044E-01	180
1205	0	0	20	2	1021	0,49504	3,728E+01	1,396E+01	2,565E+00	9,606E-01	0
1204	7	0	13	4	1021	0,49483	3,577E+00	1,316E+00	2,461E-01	9,053E-02	0
1203	8	3	1	8	1021	0,49467	5,251E+00	1,914E+00	3,613E-01	1,317E-01	180
1202	8	0	10	4	1021	0,4937	1,291E+01	5,219E+00	8,883E-01	3,590E-01	180
1201	1	4	15	8	1021	0,49323	2,488E+01	1,154E+01	1,712E+00	7,937E-01	0
1200	1	6	3	8	1021	0,49291	4,916E+00	2,498E+00	3,382E-01	1,718E-01	0
1199	3	0	19	4	1021	0,4929	9,671E-03	4,936E-03	6,654E-04	3,396E-04	0
1198	5	5	4	8	1021	0,49217	1,211E+01	7,326E+00	8,332E-01	5,040E-01	0
1197	2	3	17	8	1021	0,49178	4,996E+01	3,287E+01	3,437E+00	2,262E+00	0
1196	7	4	1	8	1021	0,49163	8,821E+00	5,997E+00	6,069E-01	4,126E-01	0
1195	0	6	4	4	1021	0,49153	1,180E+01	8,194E+00	8,117E-01	5,638E-01	180
1194	6	1	15	8	1021	0,49149	5,685E+00	3,976E+00	3,911E-01	2,735E-01	180
1193	5	0	17	4	1021	0,49075	8,043E+00	6,502E+00	5,534E-01	4,473E-01	0
1192	6	4	8	8	1021	0,49065	3,908E+01	3,213E+01	2,688E+00	2,211E+00	0
1191	9	0	5	4	1021	0,4905	2,073E+00	1,745E+00	1,426E-01	1,201E-01	0
1190	8	3	3	8	1021	0,4898	4,766E+01	4,261E+01	3,279E+00	2,932E+00	0
1189	2	6	0	4	1021	0,48979	5,733E+01	5,127E+01	3,944E+00	3,528E+00	0
1188	1	2	19	8	1021	0,48955	6,377E-03	5,738E-03	4,387E-04	3,948E-04	0
1187	9	1	4	8	1021	0,48941	7,998E+00	7,212E+00	5,503E-01	4,962E-01	0
1186	6	2	14	8	1021	0,4894	5,200E+01	4,689E+01	3,577E+00	3,226E+00	0
1185	8	2	8	8	1021	0,48928	3,516E+01	3,175E+01	2,419E+00	2,184E+00	0
1184	2	5	11	8	1021	0,48865	5,279E+01	4,655E+01	3,632E+00	3,202E+00	0

1183	5	3	14	8	1021	0,48809	3,311E+00	2,626E+00	2,278E-01	1,807E-01	0
1182	5	4	11	8	1021	0,48763	1,530E+00	1,120E+00	1,053E-01	7,703E-02	0
1181	2	6	2	8	1021	0,48741	1,296E+00	9,355E-01	8,920E-02	6,437E-02	0
1180	3	5	10	8	1021	0,4871	5,175E+00	3,703E+00	3,560E-01	2,548E-01	0
1179	7	4	3	8	1021	0,48685	3,363E+00	2,364E+00	2,314E-01	1,626E-01	0
1178	1	1	20	8	1021	0,4857	1,697E+01	1,186E+01	1,168E+00	8,157E-01	0
1177	2	0	20	4	1021	0,48376	1,791E+01	1,264E+01	1,232E+00	8,694E-01	0
1176	1	5	12	8	1021	0,48347	1,703E+01	1,024E+01	1,172E+00	7,048E-01	0
1175	1	6	5	8	1021	0,48342	2,849E+00	1,667E+00	1,960E-01	1,147E-01	0
1174	8	3	5	8	1021	0,48048	1,534E+01	1,140E+01	1,056E+00	7,844E-01	0
1173	2	6	4	8	1021	0,48047	9,563E+00	7,129E+00	6,579E-01	4,905E-01	180
1172	5	5	6	8	1021	0,48044	5,443E+00	4,108E+00	3,745E-01	2,826E-01	0
1171	0	6	6	4	1021	0,47984	2,161E+01	2,096E+01	1,487E+00	1,442E+00	0
1170	6	0	16	4	1021	0,47971	4,037E+00	4,160E+00	2,777E-01	2,862E-01	0
1169	1	3	18	8	1021	0,47961	7,273E+00	7,862E+00	5,004E-01	5,409E-01	0
1168	9	2	1	8	1021	0,47928	4,483E+00	5,559E+00	3,084E-01	3,825E-01	0
1167	4	5	9	8	1021	0,47903	3,893E+00	5,237E+00	2,679E-01	3,603E-01	0
1166	7	3	10	8	1021	0,47814	2,247E+00	3,553E+00	1,546E-01	2,444E-01	0
1165	0	4	16	4	1021	0,4779	2,563E+00	4,110E+00	1,764E-01	2,828E-01	0
1164	9	1	6	8	1021	0,47787	2,502E+00	4,014E+00	1,721E-01	2,762E-01	0
1163	7	4	5	8	1021	0,4777	1,003E+00	1,604E+00	6,898E-02	1,104E-01	0
1162	9	0	7	4	1021	0,47666	6,244E+00	5,874E+00	4,296E-01	4,041E-01	0
1161	3	6	1	8	1021	0,47568	8,279E+00	5,431E+00	5,696E-01	3,737E-01	0
1160	8	1	11	8	1021	0,47526	6,272E+01	4,098E+01	4,315E+00	2,820E+00	0
1159	9	2	3	8	1021	0,47485	3,083E+00	2,108E+00	2,121E-01	1,451E-01	0
1158	6	3	13	8	1021	0,47394	5,235E-02	5,024E-02	3,602E-03	3,456E-03	180
1157	7	1	14	8	1021	0,47299	2,526E+00	2,263E+00	1,738E-01	1,557E-01	0
1156	0	5	13	4	1021	0,47219	5,330E-02	4,624E-02	3,667E-03	3,181E-03	180
1155	3	4	15	8	1021	0,47162	8,709E+00	9,864E+00	5,992E-01	6,786E-01	0
1154	3	6	3	8	1021	0,47134	1,716E+00	2,036E+00	1,181E-01	1,401E-01	0
1153	6	5	1	8	1021	0,47113	1,154E+00	1,324E+00	7,938E-02	9,112E-02	180
1152	4	2	18	8	1021	0,47049	7,077E+00	6,398E+00	4,869E-01	4,402E-01	180
1151	6	4	10	8	1021	0,4703	4,340E+00	3,764E+00	2,986E-01	2,590E-01	180
1150	0	2	20	4	1021	0,47024	1,293E+01	1,111E+01	8,895E-01	7,646E-01	0
1149	1	6	7	8	1021	0,47016	6,636E+00	5,649E+00	4,565E-01	3,887E-01	0
1148	7	2	13	8	1021	0,47006	1,466E+00	1,240E+00	1,009E-01	8,529E-02	0
1147	2	6	6	8	1021	0,46954	2,250E+01	1,897E+01	1,548E+00	1,305E+00	0
1146	4	4	14	8	1021	0,46947	4,583E+01	3,861E+01	3,153E+00	2,656E+00	0
1145	8	2	10	8	1021	0,46909	4,421E+00	3,695E+00	3,042E-01	2,542E-01	180
1144	1	0	21	4	1021	0,46897	4,143E+00	3,467E+00	2,850E-01	2,385E-01	0
1143	8	0	12	4	1021	0,46873	5,048E-05	4,291E-05	3,473E-06	2,952E-06	180
1142	3	2	19	8	1021	0,4684	1,343E-02	1,199E-02	9,238E-04	8,246E-04	0
1141	4	1	19	8	1021	0,4681	1,697E+01	1,605E+01	1,167E+00	1,104E+00	0
1140	2	4	16	8	1021	0,46772	3,802E+00	3,830E+00	2,616E-01	2,635E-01	0
1139	8	3	7	8	1021	0,46745	7,120E+00	7,418E+00	4,899E-01	5,104E-01	180
1138	6	5	3	8	1021	0,46692	3,099E+01	3,409E+01	2,132E+00	2,346E+00	0
1137	5	2	17	8	1021	0,46655	4,715E+00	5,135E+00	3,244E-01	3,533E-01	0
1136	9	2	5	8	1021	0,46635	1,408E+00	1,480E+00	9,688E-02	1,018E-01	0
1135	0	1	21	4	1021	0,46579	4,930E+00	4,711E+00	3,392E-01	3,242E-01	180
1134	5	5	8	8	1021	0,46534	8,282E-01	7,873E-01	5,698E-02	5,417E-02	0
1133	5	1	18	8	1021	0,46525	7,464E+00	7,128E+00	5,135E-01	4,904E-01	0
1132	3	1	20	8	1021	0,46502	9,933E+00	9,723E+00	6,834E-01	6,690E-01	0
1131	7	4	7	8	1021	0,46489	5,444E+00	5,466E+00	3,745E-01	3,760E-01	0
1130	0	6	8	4	1021	0,4648	2,445E+01	2,515E+01	1,682E+00	1,730E+00	0
1129	7	0	15	4	1021	0,46347	3,646E+00	9,242E+00	2,509E-01	6,359E-01	0
1128	3	5	12	8	1021	0,46307	4,386E+00	8,652E+00	3,017E-01	5,953E-01	0
1127	9	1	8	8	1021	0,46301	4,196E-01	7,718E-01	2,887E-02	5,310E-02	0
1126	3	6	5	8	1021	0,46302	7,706E-01	1,444E+00	5,301E-02	9,933E-02	0
1125	0	3	19	4	1021	0,46242	1,606E+01	1,520E+01	1,105E+00	1,046E+00	0
1124	2	5	13	8	1021	0,46236	2,992E-02	2,714E-02	2,059E-03	1,867E-03	180
1123	5	4	13	8	1021	0,4615	1,675E+00	1,207E+00	1,153E-01	8,305E-02	0
1122	4	3	17	8	1021	0,46064	3,221E+01	2,414E+01	2,216E+00	1,661E+00	0
1121	2	2	20	8	1021	0,46054	1,341E+01	1,007E+01	9,225E-01	6,926E-01	0
1120	9	0	9	4	1021	0,45991	7,768E+00	5,960E+00	5,344E-01	4,100E-01	0
1119	3	3	18	8	1021	0,45967	8,556E+00	6,842E+00	5,887E-01	4,708E-01	0
1118	4	6	0	4	1021	0,459	3,667E+01	3,761E+01	2,523E+00	2,587E+00	0
1117	6	5	5	8	1021	0,45883	8,606E+00	9,355E+00	5,921E-01	6,436E-01	0
1116	1	4	17	8	1021	0,45819	4,346E+00	4,694E+00	2,990E-01	3,230E-01	0
1115	4	5	11	8	1021	0,45806	3,294E+01	3,424E+01	2,267E+00	2,356E+00	0
1114	6	2	16	8	1021	0,45704	4,247E+00	3,537E+00	2,922E-01	2,433E-01	0
1113	4	6	2	8	1021	0,45704	9,999E-01	8,326E-01	6,879E-02	5,728E-02	0

1112	6	1	17	8	1021	0,45679	2,796E+01	2,314E+01	1,923E+00	1,592E+00	0
1111	2	1	21	8	1021	0,45635	4,956E+00	4,065E+00	3,409E-01	2,797E-01	180
1110	1	5	14	8	1021	0,45603	2,316E+00	1,886E+00	1,594E-01	1,297E-01	0
1109	5	3	16	8	1021	0,45598	2,519E-01	2,050E-01	1,733E-02	1,410E-02	0
1108	10	0	0	2	1021	0,45565	4,408E+01	3,622E+01	3,033E+00	2,492E+00	0
1107	2	6	8	8	1021	0,45542	2,703E+01	2,277E+01	1,860E+00	1,567E+00	0
1106	7	3	12	8	1021	0,45534	9,459E+00	8,068E+00	6,508E-01	5,551E-01	0
1105	9	2	7	8	1021	0,4544	4,164E+00	5,096E+00	2,865E-01	3,506E-01	0
1104	8	4	0	4	1021	0,45409	2,263E+01	3,559E+01	1,557E+00	2,448E+00	0
1103	1	6	9	8	1021	0,45406	3,465E+00	5,631E+00	2,384E-01	3,874E-01	0
1102	4	0	20	4	1021	0,45402	5,555E+00	9,388E+00	3,822E-01	6,459E-01	0
1101	10	0	2	4	1021	0,45373	3,277E-01	8,202E-01	2,255E-02	5,643E-02	0
1100	2	3	19	8	1021	0,45318	0,000E+00	1,386E+01	-3,255E-09	9,537E-01	0
1099	5	0	19	4	1021	0,45237	0,000E+00	1,781E-02	-1,599E-11	1,225E-03	0
1098	8	4	2	8	1021	0,4522	0,000E+00	8,143E-01	2,725E-10	5,603E-02	0
1097	9	3	0	4	1021	0,45197	0,000E+00	1,221E+00	-1,348E-10	8,398E-02	0
1096	8	3	9	8	1021	0,45162	0,000E+00	4,093E+00	2,432E-09	2,816E-01	0
1095	3	6	7	8	1021	0,45133	0,000E+00	4,987E+00	1,403E-08	3,431E-01	0
1094	4	6	4	8	1021	0,45131	0,000E+00	4,675E+00	-7,498E-11	3,216E-01	180
1093	8	1	13	8	1021	0,45097	0,000E+00	1,174E-02	-1,058E-11	8,080E-04	180
1092	3	0	21	4	1021	0,45028	0,000E+00	3,125E+00	1,179E-09	2,150E-01	0
1091	9	3	2	8	1021	0,4501	0,000E+00	2,724E+00	7,361E-09	1,874E-01	0
1090	10	1	1	8	1021	0,45005	0,000E+00	8,941E-01	3,993E-10	6,151E-02	180
1089	0	0	22	2	1021	0,45004	0,000E+00	2,445E+01	-4,158E-08	1,682E+00	0
1088	7	4	9	8	1021	0,44931	5,739E+00	5,369E+00	3,948E-01	3,694E-01	0
1087	6	4	12	8	1021	0,44856	5,077E-03	2,385E-03	3,493E-04	1,641E-04	0
1086	10	0	4	4	1021	0,44812	8,129E+00	4,440E+00	5,593E-01	3,055E-01	180
1085	5	5	10	8	1021	0,44787	4,645E+00	3,006E+00	3,196E-01	2,068E-01	0
1084	1	2	21	8	1021	0,44772	4,238E+00	3,077E+00	2,915E-01	2,117E-01	0
1083	8	2	12	8	1021	0,44751	3,141E-03	2,662E-03	2,161E-04	1,832E-04	0
1082	6	5	7	8	1021	0,44745	6,165E+00	5,482E+00	4,241E-01	3,772E-01	180
1081	0	6	10	4	1021	0,44739	2,800E+00	2,579E+00	1,926E-01	1,775E-01	180
1080	8	4	4	8	1021	0,44664	2,775E+00	4,333E+00	1,909E-01	2,981E-01	180
1079	10	1	3	8	1021	0,44638	1,382E+01	2,711E+01	9,510E-01	1,865E+00	0
1078	6	3	15	8	1021	0,44618	9,327E-01	2,021E+00	6,417E-02	1,391E-01	180
1077	9	1	10	8	1021	0,44579	1,672E+00	2,966E+00	1,150E-01	2,041E-01	0
1076	6	0	18	4	1021	0,44547	3,441E+00	4,380E+00	2,368E-01	3,013E-01	180
1075	0	5	15	4	1021	0,44472	1,881E+00	1,970E+00	1,294E-01	1,355E-01	180
1074	9	3	4	8	1021	0,44462	4,983E+00	5,317E+00	3,428E-01	3,658E-01	0
1073	0	4	18	4	1021	0,44402	4,378E+00	4,275E+00	3,012E-01	2,941E-01	180
1072	8	0	14	4	1021	0,44359	3,598E+01	2,885E+01	2,476E+00	1,985E+00	0
1071	7	1	16	8	1021	0,44359	2,644E-01	2,119E-01	1,819E-02	1,458E-02	0
1070	1	1	22	8	1021	0,44298	1,116E-01	8,234E-02	7,677E-03	5,665E-03	0
1069	7	2	15	8	1021	0,44293	1,040E+01	7,713E+00	7,157E-01	5,306E-01	0
1068	4	6	6	8	1021	0,44221	1,448E+01	1,410E+01	9,964E-01	9,698E-01	0
1067	7	5	0	4	1021	0,44189	8,965E-01	1,083E+00	6,168E-02	7,450E-02	0
1066	1	3	20	8	1021	0,44183	5,994E+00	7,539E+00	4,124E-01	5,187E-01	0
1065	2	0	22	4	1021	0,44151	1,527E+01	2,216E+01	1,050E+00	1,524E+00	0
1064	9	0	11	4	1021	0,44126	4,473E-01	6,983E-01	3,077E-02	4,804E-02	0
1063	3	4	17	8	1021	0,44071	1,714E+00	3,833E+00	1,179E-01	2,637E-01	0
1062	4	4	16	8	1021	0,44069	1,357E+00	3,093E+00	9,337E-02	2,128E-01	0
1061	7	5	2	8	1021	0,44014	1,104E+00	2,510E+00	7,595E-02	1,727E-01	0
1060	9	2	9	8	1021	0,43982	3,313E+00	4,860E+00	2,280E-01	3,344E-01	0
1059	10	1	5	8	1021	0,43929	9,207E+00	7,634E+00	6,334E-01	5,252E-01	0
1058	10	0	6	4	1021	0,43922	1,718E+01	1,360E+01	1,182E+00	9,357E-01	0
1057	2	6	10	8	1021	0,43901	3,032E+00	2,208E+00	2,086E-01	1,519E-01	180
1056	5	6	1	8	1021	0,43894	5,738E+00	4,122E+00	3,947E-01	2,836E-01	0
1055	3	5	14	8	1021	0,43878	2,157E+00	1,537E+00	1,484E-01	1,057E-01	0
1054	8	4	6	8	1021	0,43782	1,175E+01	1,337E+01	8,081E-01	9,200E-01	0
1053	3	6	9	8	1021	0,43703	6,113E-01	4,714E+00	4,206E-02	3,243E-01	0
1052	2	5	15	8	1021	0,43648	1,410E-01	1,693E+00	9,702E-03	1,165E-01	180
1051	4	5	13	8	1021	0,4362	3,519E-04	1,526E-03	2,421E-05	1,050E-04	180
1050	10	2	0	4	1021	0,43609	8,188E+00	2,862E+01	5,633E-01	1,969E+00	0
1049	1	6	11	8	1021	0,43609	1,894E-01	6,575E-01	1,303E-02	4,524E-02	0
1048	9	3	6	8	1021	0,43591	9,492E-01	2,606E+00	6,530E-02	1,793E-01	0
1047	2	4	18	8	1021	0,43582	1,488E+00	3,711E+00	1,024E-01	2,553E-01	180
1046	5	4	15	8	1021	0,43575	3,056E+00	7,194E+00	2,103E-01	4,950E-01	0
1045	5	6	3	8	1021	0,43553	7,022E-01	1,367E+00	4,831E-02	9,403E-02	0
1044	7	5	4	8	1021	0,43502	3,869E+00	4,909E+00	2,662E-01	3,377E-01	0
1043	4	2	20	8	1021	0,43466	6,858E+00	7,494E+00	4,719E-01	5,156E-01	0
1042	10	2	2	8	1021	0,43441	6,907E-01	7,430E-01	4,752E-02	5,112E-02	0

1041	7	0	17	4	1021	0,43404	3,036E+00	3,526E+00	2,089E-01	2,426E-01	0
1040	8	3	11	8	1021	0,43393	2,118E+01	2,568E+01	1,457E+00	1,767E+00	0
1039	6	5	9	8	1021	0,4335	1,949E+00	3,392E+00	1,341E-01	2,334E-01	0
1038	5	2	19	8	1021	0,43321	7,572E-03	2,545E-02	5,210E-04	1,751E-03	0
1037	7	3	14	8	1021	0,4322	1,014E-01	1,414E+00	6,973E-03	9,725E-02	0
1036	7	4	11	8	1021	0,43187	2,187E-01	6,253E-01	1,504E-02	4,302E-02	0
1035	3	2	21	8	1021	0,43137	2,123E+00	2,759E+00	1,461E-01	1,898E-01	0
1034	0	2	22	4	1021	0,43116	1,715E+01	1,951E+01	1,180E+00	1,342E+00	0
1033	4	1	21	8	1021	0,43114	2,308E+00	2,594E+00	1,588E-01	1,784E-01	180
1032	5	1	20	8	1021	0,43053	7,260E+00	6,566E+00	4,995E-01	4,517E-01	0
1031	4	6	8	8	1021	0,43036	2,037E+01	1,693E+01	1,402E+00	1,165E+00	0
1030	1	5	16	8	1021	0,42951	3,885E-01	2,169E-01	2,673E-02	1,492E-02	0
1029	10	2	4	8	1021	0,42948	5,763E+00	3,198E+00	3,965E-01	2,200E-01	180
1028	0	7	1	4	1021	0,42947	1,019E+00	5,645E-01	7,013E-02	3,884E-02	180
1027	10	1	7	8	1021	0,42927	7,352E+00	3,997E+00	5,058E-01	2,750E-01	180
1026	5	5	12	8	1021	0,42898	1,131E+01	6,173E+00	7,784E-01	4,247E-01	0
1025	5	6	5	8	1021	0,42894	1,985E+00	1,084E+00	1,366E-01	7,460E-02	0
1024	1	0	23	4	1021	0,42857	1,733E+01	9,419E+00	1,192E+00	6,480E-01	0
1023	0	6	12	4	1021	0,42856	1,802E-02	9,789E-03	1,240E-03	6,735E-04	0
1022	4	3	19	8	1021	0,42846	1,948E+01	1,051E+01	1,341E+00	7,234E-01	0
1021	1	7	0	4	1021	0,42797	1,724E+00	9,073E-01	1,186E-01	6,242E-02	0
1020	10	0	8	4	1021	0,42759	3,008E+01	1,634E+01	2,070E+00	1,124E+00	0
1019	9	1	12	8	1021	0,42715	9,944E+00	6,048E+00	6,842E-01	4,161E-01	0
1018	6	2	18	8	1021	0,42714	5,193E+00	3,163E+00	3,573E-01	2,176E-01	180
1017	3	1	22	8	1021	0,42713	1,267E-01	7,765E-02	8,718E-03	5,342E-03	0
1016	8	1	15	8	1021	0,42686	2,013E+00	1,400E+00	1,385E-01	9,635E-02	180
1015	7	5	6	8	1021	0,42685	3,355E+00	2,338E+00	2,308E-01	1,609E-01	0
1014	0	3	21	4	1021	0,42668	3,068E+00	2,373E+00	2,111E-01	1,632E-01	180
1013	1	4	19	8	1021	0,42648	3,158E-02	2,818E-02	2,173E-03	1,939E-03	0
1012	6	4	14	8	1021	0,42638	2,401E+01	2,310E+01	1,652E+00	1,589E+00	0
1011	1	7	2	8	1021	0,42638	2,296E+00	2,218E+00	1,580E-01	1,526E-01	0
1010	8	4	8	8	1021	0,4263	1,571E+01	1,606E+01	1,081E+00	1,105E+00	0
1009	5	3	18	8	1021	0,42627	4,926E+00	5,153E+00	3,389E-01	3,545E-01	0
1008	0	7	3	4	1021	0,42627	1,999E+01	2,099E+01	1,376E+00	1,444E+00	0
1007	0	1	23	4	1021	0,42614	8,609E-01	9,975E-01	5,923E-02	6,863E-02	0
1006	3	3	20	8	1021	0,42609	5,200E+00	6,201E+00	3,577E-01	4,266E-01	0
1005	8	2	14	8	1021	0,42548	1,312E+01	2,281E+01	9,027E-01	1,569E+00	0
1004	6	1	19	8	1021	0,42536	5,438E+00	1,012E+01	3,741E-01	6,964E-01	0
1003	9	3	8	8	1021	0,42454	3,639E-01	5,349E-01	2,503E-02	3,680E-02	0
1002	2	2	22	8	1021	0,42364	1,346E+01	1,769E+01	9,261E-01	1,217E+00	0
1001	9	2	11	8	1021	0,42343	2,405E-01	5,635E-01	1,655E-02	3,877E-02	0
1000	2	7	1	8	1021	0,42203	0,000E+00	4,672E-01	-1,381E-09	3,214E-02	180
999	1	7	4	8	1021	0,42171	0,000E+00	4,348E+00	-4,778E-09	2,992E-01	0
998	9	0	13	4	1021	0,42162	0,000E+00	1,013E+00	7,672E-10	6,967E-02	0
997	10	2	6	8	1021	0,42162	0,000E+00	1,085E+01	-2,451E-09	7,468E-01	0
996	2	6	12	8	1021	0,42117	2,852E-04	1,343E-02	1,962E-05	9,241E-04	0
995	3	6	11	8	1021	0,42094	1,887E-01	5,459E-01	1,298E-02	3,756E-02	0
994	0	7	5	4	1021	0,42009	6,560E+00	6,082E+00	4,513E-01	4,185E-01	0
993	6	3	17	8	1021	0,41974	1,624E+01	1,450E+01	1,117E+00	9,978E-01	0
992	9	4	1	8	1021	0,41964	3,889E+00	3,448E+00	2,676E-01	2,373E-01	0
991	5	6	7	8	1021	0,4196	4,357E+00	3,852E+00	2,998E-01	2,650E-01	0
990	2	3	21	8	1021	0,41939	2,341E+00	2,036E+00	1,611E-01	1,401E-01	180
989	8	0	16	4	1021	0,41907	2,936E+00	2,523E+00	2,020E-01	1,736E-01	0
988	2	7	3	8	1021	0,419	2,195E+01	1,896E+01	1,510E+00	1,305E+00	0
987	2	1	23	8	1021	0,41887	1,049E+00	9,248E-01	7,220E-02	6,363E-02	0
986	5	0	21	4	1021	0,41875	2,756E+00	2,504E+00	1,896E-01	1,723E-01	0
985	4	0	22	4	1021	0,41856	1,686E+01	1,650E+01	1,160E+00	1,135E+00	0
984	0	5	17	4	1021	0,41852	1,428E+01	1,425E+01	9,827E-01	9,806E-01	0
983	6	6	0	4	1021	0,41849	2,232E+01	2,252E+01	1,535E+00	1,549E+00	0
982	6	5	11	8	1021	0,41778	1,635E+01	2,061E+01	1,125E+00	1,418E+00	0
981	1	6	13	8	1021	0,4171	5,969E-01	9,863E-01	4,107E-02	6,786E-02	0
980	7	2	17	8	1021	0,41703	1,459E+00	2,805E+00	1,004E-01	1,930E-01	0
979	6	6	2	8	1021	0,41701	3,265E-01	6,672E-01	2,246E-02	4,591E-02	0
978	10	1	9	8	1021	0,41691	9,229E-01	2,797E+00	6,349E-02	1,924E-01	0
977	9	4	3	8	1021	0,41666	0,000E+00	1,069E+00	-3,496E-09	7,355E-02	0
976	4	6	10	8	1021	0,41643	0,000E+00	1,371E+00	-8,832E-10	9,432E-02	180
975	7	5	8	8	1021	0,41616	0,000E+00	4,884E-01	7,309E-10	3,360E-02	0
974	7	1	18	8	1021	0,4161	0,000E+00	4,654E+00	8,930E-09	3,202E-01	0
973	8	3	13	8	1021	0,41521	0,000E+00	2,521E-03	5,223E-12	1,735E-04	0
972	3	5	16	8	1021	0,41501	3,561E-02	2,183E-01	2,450E-03	1,502E-02	0
971	6	0	20	4	1021	0,41471	4,424E+00	5,756E+00	3,044E-01	3,960E-01	0

970	10	3	1	8	1021	0,41449	3,472E-01	3,797E-01	2,389E-02	2,612E-02	180
969	4	5	15	8	1021	0,41427	9,731E-01	1,066E+00	6,695E-02	7,336E-02	180
968	1	7	6	8	1021	0,41426	1,814E+00	1,989E+00	1,248E-01	1,368E-01	0
967	3	0	23	4	1021	0,41416	6,989E+00	7,807E+00	4,809E-01	5,371E-01	0
966	10	0	10	4	1021	0,41392	1,143E+00	1,293E+00	7,866E-02	8,894E-02	180
965	11	0	1	4	1021	0,41387	2,901E+00	3,251E+00	1,996E-01	2,237E-01	0
964	4	4	18	8	1021	0,4137	2,272E+00	2,415E+00	1,563E-01	1,661E-01	180
963	3	7	0	4	1021	0,41362	7,256E-01	7,447E-01	4,992E-02	5,124E-02	0
962	0	4	20	4	1021	0,41354	5,754E+00	5,661E+00	3,959E-01	3,894E-01	0
961	7	4	13	8	1021	0,41341	1,044E+00	9,641E-01	7,181E-02	6,633E-02	0
960	8	5	1	8	1021	0,41332	4,146E-01	3,671E-01	2,853E-02	2,525E-02	180
959	2	7	5	8	1021	0,41312	6,770E+00	5,559E+00	4,657E-01	3,824E-01	0
958	8	4	10	8	1021	0,41275	1,699E+00	1,257E+00	1,169E-01	8,650E-02	180
957	6	6	4	8	1021	0,41264	3,157E+00	2,276E+00	2,172E-01	1,566E-01	180
956	0	0	24	2	1021	0,41254	2,946E-01	2,078E-01	2,027E-02	1,430E-02	180
955	3	4	19	8	1021	0,41228	4,919E-02	3,378E-02	3,384E-03	2,324E-03	0
954	3	7	2	8	1021	0,41219	2,801E+00	1,925E+00	1,927E-01	1,324E-01	0
953	1	2	23	8	1021	0,41217	1,104E+01	7,596E+00	7,598E-01	5,226E-01	0
952	10	3	3	8	1021	0,41161	2,143E+01	1,702E+01	1,474E+00	1,171E+00	0
951	2	5	17	8	1021	0,41163	1,633E+01	1,288E+01	1,124E+00	8,862E-01	0
950	10	2	8	8	1021	0,4113	1,396E+01	1,304E+01	9,608E-01	8,974E-01	0
949	0	7	7	4	1021	0,41129	2,969E+00	2,792E+00	2,043E-01	1,921E-01	180
948	9	3	10	8	1021	0,41116	2,219E+00	2,282E+00	1,527E-01	1,570E-01	0
947	11	0	3	4	1021	0,411	8,650E-01	9,876E-01	5,951E-02	6,795E-02	0
946	5	4	17	8	1021	0,41102	2,279E+00	2,572E+00	1,568E-01	1,769E-01	0
945	9	4	5	8	1021	0,41088	7,226E-01	9,051E-01	4,971E-02	6,227E-02	0
944	8	5	3	8	1021	0,41046	1,010E+01	1,672E+01	6,948E-01	1,151E+00	0
943	11	1	0	4	1021	0,41036	4,078E-01	7,104E-01	2,805E-02	4,887E-02	0
942	5	5	14	8	1021	0,40946	5,710E-01	1,031E+00	3,929E-02	7,096E-02	0
941	7	3	16	8	1021	0,40942	1,206E-01	2,177E-01	8,297E-03	1,498E-02	0
940	0	6	14	4	1021	0,40909	9,703E+00	1,796E+01	6,676E-01	1,236E+00	0
939	11	1	2	8	1021	0,40896	9,846E-01	1,860E+00	6,774E-02	1,279E-01	0
938	1	3	22	8	1021	0,40895	3,806E-02	7,198E-02	2,619E-03	4,953E-03	0
937	5	6	9	8	1021	0,40803	3,267E+00	3,312E+00	2,248E-01	2,279E-01	0
936	3	7	4	8	1021	0,40797	3,955E+00	3,781E+00	2,721E-01	2,601E-01	0
935	9	1	14	8	1021	0,40787	1,127E+00	1,007E+00	7,755E-02	6,930E-02	0
934	1	1	24	8	1021	0,40708	7,764E-01	6,111E-01	5,342E-02	4,204E-02	0
933	2	4	20	8	1021	0,40689	7,042E+00	5,138E+00	4,845E-01	3,535E-01	0
932	7	0	19	4	1021	0,4068	5,082E-02	3,582E-02	3,497E-03	2,464E-03	0
931	10	3	5	8	1021	0,40604	7,173E+00	5,049E+00	4,935E-01	3,474E-01	0
930	9	2	13	8	1021	0,40598	1,285E+00	9,179E-01	8,838E-02	6,315E-02	0
929	2	0	24	4	1021	0,40594	2,221E-01	1,608E-01	1,528E-02	1,106E-02	180
928	6	6	6	8	1021	0,40565	1,110E+01	8,631E+00	7,639E-01	5,938E-01	0
927	11	0	5	4	1021	0,40545	1,058E+00	8,533E-01	7,281E-02	5,871E-02	0
926	8	5	5	8	1021	0,40493	6,043E+00	4,971E+00	4,158E-01	3,420E-01	0
925	11	1	4	8	1021	0,40483	4,507E+00	3,654E+00	3,101E-01	2,514E-01	0
924	2	7	7	8	1021	0,40475	3,029E+00	2,417E+00	2,084E-01	1,663E-01	180
923	6	4	16	8	1021	0,40447	2,899E+00	2,156E+00	1,995E-01	1,483E-01	0
922	1	7	8	8	1021	0,40447	5,748E-01	4,268E-01	3,955E-02	2,937E-02	0
921	1	5	18	8	1021	0,40441	5,594E+00	4,095E+00	3,849E-01	2,817E-01	0
920	3	6	13	8	1021	0,40379	1,214E+00	9,039E-01	8,349E-02	6,219E-02	0
919	8	2	16	8	1021	0,4037	2,758E+00	2,137E+00	1,898E-01	1,470E-01	0
918	8	1	17	8	1021	0,40353	1,299E+01	1,136E+01	8,940E-01	7,818E-01	0
917	7	5	10	8	1021	0,40353	2,428E+00	2,127E+00	1,670E-01	1,464E-01	0
916	5	2	21	8	1021	0,40342	2,247E+00	2,190E+00	1,546E-01	1,506E-01	0
915	4	2	22	8	1021	0,40325	1,101E+01	1,319E+01	7,573E-01	9,074E-01	0
914	10	1	11	8	1021	0,40287	6,917E+00	1,644E+01	4,759E-01	1,131E+00	0
913	9	4	7	8	1021	0,40264	7,029E-01	3,252E+00	4,836E-02	2,237E-01	0
912	2	6	14	8	1021	0,40265	3,650E+00	1,623E+01	2,511E-01	1,116E+00	0
911	4	7	1	8	1021	0,40185	0,000E+00	2,576E-01	6,560E-10	1,772E-02	180
910	9	0	15	4	1021	0,40172	0,000E+00	4,897E+00	1,881E-09	3,369E-01	0
909	3	7	6	8	1021	0,40121	0,000E+00	1,657E+00	3,620E-09	1,140E-01	0
908	4	6	12	8	1021	0,40111	0,000E+00	2,459E-02	-1,674E-13	1,692E-03	0
907	6	5	13	8	1021	0,401	0,000E+00	1,063E-02	1,565E-11	7,312E-04	0
906	0	7	9	4	1021	0,40039	0,000E+00	2,255E+00	-1,722E-09	1,552E-01	0
905	5	1	22	8	1021	0,39994	0,000E+00	6,903E-02	-1,027E-10	4,749E-03	0
904	6	2	20	8	1021	0,3998	0,000E+00	4,611E+00	-1,088E-08	3,172E-01	0
903	4	3	21	8	1021	0,39957	0,000E+00	1,276E+00	2,218E-09	8,782E-02	180
902	3	2	23	8	1021	0,39931	1,152E-01	6,301E+00	7,924E-03	4,335E-01	0
901	4	7	3	8	1021	0,39923	3,388E-01	1,401E+01	2,331E-02	9,637E-01	0
900	4	1	23	8	1021	0,39912	2,064E-03	7,383E-01	1,420E-04	5,079E-02	0

899	10	2	10	8	1021	0,39909	0,000E+00	8,871E-01	3,779E-10	6,103E-02	180
898	5	3	20	8	1021	0,39909	0,000E+00	4,212E+00	5,602E-09	2,898E-01	0
897	11	2	1	8	1021	0,39905	0,000E+00	2,759E+00	-1,457E-09	1,898E-01	0
896	10	0	12	4	1021	0,39887	0,000E+00	2,587E-02	3,062E-11	1,780E-03	0
895	11	1	6	8	1021	0,39823	0,000E+00	1,586E+00	-2,187E-09	1,091E-01	0
894	10	3	7	8	1021	0,39808	0,000E+00	2,069E+00	1,623E-09	1,423E-01	180
893	1	4	21	8	1021	0,39797	0,000E+00	2,077E+00	-3,492E-09	1,429E-01	0
892	0	2	24	4	1021	0,39785	0,000E+00	1,131E-01	1,256E-10	7,784E-03	180
891	8	4	12	8	1021	0,39782	0,000E+00	2,647E-02	2,690E-12	1,821E-03	0
890	1	6	15	8	1021	0,3978	0,000E+00	4,653E+00	7,795E-09	3,201E-01	0
889	11	0	7	4	1021	0,39753	0,000E+00	3,075E+00	-2,412E-09	2,115E-01	0
888	6	1	21	8	1021	0,39705	0,000E+00	1,195E+00	-3,720E-09	8,225E-02	180
887	8	5	7	8	1021	0,39704	0,000E+00	2,017E+00	3,522E-09	1,388E-01	180
886	7	6	1	8	1021	0,39696	0,000E+00	2,692E+00	2,763E-09	1,852E-01	0
885	11	2	3	8	1021	0,39648	0,000E+00	7,956E-01	-3,505E-10	5,474E-02	0
884	6	6	8	8	1021	0,39644	0,000E+00	1,037E+01	-1,234E-08	7,136E-01	0
883	9	3	12	8	1021	0,39639	0,000E+00	4,107E+00	-7,159E-09	2,826E-01	0
882	3	3	22	8	1021	0,39638	0,000E+00	6,783E-02	1,914E-10	4,667E-03	0
881	8	3	15	8	1021	0,39616	4,518E-02	6,799E-01	3,108E-03	4,678E-02	180
880	8	0	18	4	1021	0,39566	1,387E+00	1,598E+00	9,539E-02	1,099E-01	180
879	0	3	23	4	1021	0,39558	6,713E-01	7,067E-01	4,618E-02	4,862E-02	0
878	6	3	19	8	1021	0,39496	4,465E+00	6,649E+00	3,072E-01	4,575E-01	0
877	5	6	11	8	1021	0,39484	2,036E-01	3,814E-01	1,401E-02	2,624E-02	0
876	3	1	24	8	1021	0,39467	2,250E-01	5,832E-01	1,548E-02	4,013E-02	0
875	7	4	15	8	1021	0,39459	1,565E+00	4,458E+00	1,077E-01	3,067E-01	0
874	1	0	25	4	1021	0,39455	1,537E-01	4,475E-01	1,057E-02	3,079E-02	0
873	7	6	3	8	1021	0,39443	2,839E-01	7,705E-01	1,953E-02	5,301E-02	0
872	2	7	9	8	1021	0,39434	8,812E-01	2,071E+00	6,063E-02	1,425E-01	0
871	4	7	5	8	1021	0,39414	2,850E+00	4,247E+00	1,961E-01	2,922E-01	0
870	0	5	19	4	1021	0,39394	6,331E+00	6,546E+00	4,356E-01	4,503E-01	0
869	4	5	17	8	1021	0,39284	5,872E+00	9,522E+00	4,040E-01	6,551E-01	0
868	1	7	10	8	1021	0,39284	1,174E+00	1,911E+00	8,077E-02	1,315E-01	0
867	7	2	19	8	1021	0,3927	1,973E-02	4,053E-02	1,357E-03	2,788E-03	0
866	0	1	25	4	1021	0,39265	5,801E+00	1,287E+01	3,991E-01	8,858E-01	0
865	9	4	9	8	1021	0,39239	9,673E-01	2,653E+00	6,655E-02	1,825E-01	0
864	3	7	8	8	1021	0,39229	1,381E-01	3,671E-01	9,504E-03	2,526E-02	0
863	3	5	18	8	1021	0,39224	1,389E+00	3,536E+00	9,558E-02	2,433E-01	0
862	2	2	24	8	1021	0,39192	5,619E-02	8,463E-02	3,866E-03	5,823E-03	180
861	11	2	5	8	1021	0,39149	8,398E-01	7,251E-01	5,778E-02	4,989E-02	0
860	7	1	20	8	1021	0,3907	3,927E-01	3,678E+00	2,701E-02	2,531E-01	0
859	5	5	16	8	1021	0,38994	0,000E+00	2,104E-01	7,722E-11	1,447E-02	0
858	2	3	23	8	1021	0,38975	0,000E+00	6,560E-01	-1,562E-09	4,514E-02	0
857	10	4	0	4	1021	0,38974	0,000E+00	1,420E+01	1,565E-08	9,771E-01	0
856	0	6	16	4	1021	0,38962	0,000E+00	1,800E+00	3,474E-09	1,239E-01	0
855	7	5	12	8	1021	0,38954	2,599E-01	3,721E+00	1,788E-02	2,560E-01	0
854	11	1	8	8	1021	0,38951	3,862E-02	3,541E-01	2,657E-03	2,436E-02	0
853	7	6	5	8	1021	0,38952	6,998E-02	7,076E-01	4,815E-03	4,868E-02	0
852	5	0	23	4	1021	0,38923	2,187E+00	5,375E+00	1,505E-01	3,698E-01	0
851	5	7	0	4	1021	0,38879	3,391E-01	5,078E-01	2,333E-02	3,494E-02	0
850	4	4	20	8	1021	0,38871	2,579E+00	3,849E+00	1,774E-01	2,648E-01	0
849	9	1	16	8	1021	0,38856	1,351E-01	2,095E-01	9,292E-03	1,442E-02	0
848	10	4	2	8	1021	0,38853	3,389E-01	5,332E-01	2,332E-02	3,669E-02	0
847	10	3	9	8	1021	0,38817	9,220E-01	1,891E+00	6,343E-02	1,301E-01	0
846	2	5	19	8	1021	0,38818	2,950E+00	5,975E+00	2,029E-01	4,111E-01	0
845	9	2	15	8	1021	0,38812	1,899E+00	4,074E+00	1,306E-01	2,803E-01	0
844	0	7	11	4	1021	0,3879	4,596E+00	1,277E+01	3,162E-01	8,784E-01	0
843	4	0	24	4	1021	0,38788	2,393E-02	6,813E-02	1,646E-03	4,687E-03	180
842	10	1	13	8	1021	0,38776	6,056E-03	2,127E-02	4,167E-04	1,463E-03	0
841	11	0	9	4	1021	0,38766	5,777E-01	2,468E+00	3,975E-02	1,698E-01	0
840	5	4	19	8	1021	0,38767	1,012E-02	4,197E-02	6,963E-04	2,887E-03	0
839	5	7	2	8	1021	0,38759	2,900E-01	1,446E+00	1,995E-02	9,948E-02	0
838	7	3	18	8	1021	0,38751	5,418E-01	3,326E+00	3,727E-02	2,288E-01	0
837	9	5	0	4	1021	0,38742	6,109E-02	4,965E-01	4,203E-03	3,416E-02	0
836	8	5	9	8	1021	0,3872	1,057E-01	1,864E+00	7,275E-03	1,282E-01	0
835	6	0	22	4	1021	0,38716	4,879E-01	1,013E+01	3,357E-02	6,971E-01	0
834	2	1	25	8	1021	0,38694	1,507E-01	1,165E+01	1,037E-02	8,016E-01	0
833	4	7	7	8	1021	0,38685	0,000E+00	1,559E+00	-2,691E-09	1,072E-01	180
832	3	4	21	8	1021	0,38635	0,000E+00	1,838E+00	1,382E-09	1,265E-01	0
831	9	5	2	8	1021	0,38624	0,000E+00	1,421E+00	4,825E-12	9,776E-02	0
830	0	4	22	4	1021	0,38621	0,000E+00	9,965E+00	-2,801E-08	6,856E-01	0
829	3	6	15	8	1021	0,3862	0,000E+00	3,963E+00	1,446E-08	2,727E-01	0

828	10	2	12	8	1021	0,38555	0,000E+00	3,329E-02	5,685E-11	2,291E-03	0
827	6	6	10	8	1021	0,38547	0,000E+00	5,966E-01	1,253E-09	4,105E-02	180
826	4	6	14	8	1021	0,38502	7,174E+00	1,198E+01	4,936E-01	8,240E-01	0
825	10	4	4	8	1021	0,38499	7,410E-01	1,159E+00	5,098E-02	7,971E-02	180
824	11	2	7	8	1021	0,38434	5,183E+00	2,627E+00	3,566E-01	1,807E-01	0
823	5	7	4	8	1021	0,38408	6,698E+00	2,843E+00	4,608E-01	1,956E-01	0
822	2	6	16	8	1021	0,38405	3,992E+00	1,673E+00	2,747E-01	1,151E-01	0
821	6	5	15	8	1021	0,38376	1,205E+00	4,761E-01	8,292E-02	3,276E-02	180
820	6	4	18	8	1021	0,38331	2,537E+00	1,156E+00	1,746E-01	7,956E-02	180
819	3	0	25	4	1021	0,38322	7,676E-01	3,767E-01	5,281E-02	2,592E-02	0
818	10	0	14	4	1021	0,38303	1,876E+01	1,155E+01	1,291E+00	7,943E-01	0
817	11	3	0	4	1021	0,38287	5,647E-01	4,596E-01	3,885E-02	3,162E-02	0
816	9	5	4	8	1021	0,38276	2,778E+00	2,794E+00	1,912E-01	1,922E-01	0
815	8	2	18	8	1021	0,38265	8,643E-01	1,135E+00	5,946E-02	7,812E-02	180
814	7	6	7	8	1021	0,38248	1,105E+00	2,565E+00	7,603E-02	1,765E-01	0
813	2	7	11	8	1021	0,3824	3,507E+00	1,155E+01	2,413E-01	7,948E-01	0
812	8	4	14	8	1021	0,38211	0,000E+00	1,135E+01	2,445E-08	7,807E-01	0
811	9	0	17	4	1021	0,38209	0,000E+00	1,606E+00	-4,808E-10	1,105E-01	0
810	7	0	21	4	1021	0,38183	0,000E+00	1,746E+00	2,432E-09	1,201E-01	0
809	11	3	2	8	1021	0,38173	0,000E+00	1,339E+00	1,297E-09	9,209E-02	0
808	3	7	10	8	1021	0,38166	0,000E+00	1,686E+00	-3,090E-09	1,160E-01	0
807	1	2	25	8	1021	0,38164	0,000E+00	3,674E-01	7,559E-10	2,528E-02	0
806	8	1	19	8	1021	0,38137	0,000E+00	5,335E+00	1,073E-09	3,671E-01	0
805	1	5	20	8	1021	0,38098	0,000E+00	3,111E+00	-5,891E-09	2,140E-01	0
804	9	3	14	8	1021	0,38084	0,000E+00	6,488E-01	1,683E-10	4,463E-02	0
803	0	0	26	2	1021	0,3808	0,000E+00	2,607E-02	-2,245E-11	1,794E-03	180
802	2	4	22	8	1021	0,38077	0,000E+00	9,043E+00	-9,881E-09	6,222E-01	0
801	9	4	11	8	1021	0,38062	0,000E+00	3,066E-01	-4,934E-10	2,109E-02	0
800	5	6	13	8	1021	0,38058	0,000E+00	7,466E-01	-7,354E-10	5,136E-02	0
799	1	3	24	8	1021	0,3802	0,000E+00	5,402E-01	-1,138E-09	3,716E-02	0
798	1	7	12	8	1021	0,3799	0,000E+00	3,208E+00	4,450E-09	2,207E-01	0
797	12	0	0	2	1021	0,37971	9,938E+00	1,181E+01	6,837E-01	8,123E-01	0
796	10	4	6	8	1021	0,3793	1,595E+01	5,558E+00	1,097E+00	3,824E-01	0
795	11	1	10	8	1021	0,37909	5,621E+00	1,635E+00	3,867E-01	1,125E-01	0
794	1	6	17	8	1021	0,37872	5,026E+00	1,511E+00	3,458E-01	1,039E-01	0
793	12	0	2	4	1021	0,3786	1,499E+00	4,846E-01	1,031E-01	3,334E-02	0
792	5	7	6	8	1021	0,37843	3,097E+00	1,157E+00	2,130E-01	7,960E-02	0
791	11	3	4	8	1021	0,37837	6,631E+00	2,631E+00	4,562E-01	1,810E-01	0
790	4	7	9	8	1021	0,37773	1,595E+00	1,606E+00	1,097E-01	1,105E-01	0
789	8	3	17	8	1021	0,3773	4,364E+00	7,176E+00	3,002E-01	4,937E-01	0
788	9	5	6	8	1021	0,37717	6,783E-01	1,132E+00	4,666E-02	7,791E-02	0
787	5	2	23	8	1021	0,37683	3,188E+00	4,346E+00	2,193E-01	2,990E-01	0
786	10	3	11	8	1021	0,37676	8,150E+00	1,038E+01	5,607E-01	7,142E-01	0
785	1	1	26	8	1021	0,3765	5,202E+00	4,899E+00	3,579E-01	3,370E-01	0
784	12	1	1	8	1021	0,37645	1,070E-01	9,520E-02	7,360E-03	6,550E-03	180
783	8	6	0	4	1021	0,3764	1,324E+01	1,107E+01	9,110E-01	7,618E-01	0
782	11	0	11	4	1021	0,37629	3,839E-01	2,859E-01	2,641E-02	1,967E-02	0
781	0	8	0	2	1021	0,37614	1,733E+01	1,102E+01	1,192E+00	7,579E-01	0
780	7	4	17	8	1021	0,37595	2,635E+00	1,435E+00	1,813E-01	9,875E-02	0
779	8	5	11	8	1021	0,37588	1,961E+01	1,020E+01	1,349E+00	7,020E-01	0
778	4	2	24	8	1021	0,3756	6,584E-02	3,081E-02	4,530E-03	2,120E-03	180
777	2	0	26	4	1021	0,37559	4,082E-02	1,908E-02	2,809E-03	1,313E-03	180
776	11	2	9	8	1021	0,3754	4,286E+00	2,022E+00	2,949E-01	1,391E-01	0
775	12	0	4	4	1021	0,37532	1,815E+00	8,761E-01	1,249E-01	6,027E-02	180
774	8	6	2	8	1021	0,37531	9,686E-01	4,685E-01	6,664E-02	3,223E-02	0
773	0	8	2	4	1021	0,37506	8,422E-01	4,672E-01	5,795E-02	3,214E-02	0
772	6	2	22	8	1021	0,37495	1,362E+01	8,113E+00	9,369E-01	5,582E-01	0
771	7	5	14	8	1021	0,37475	8,698E-01	5,814E-01	5,984E-02	4,000E-02	0
770	1	8	1	8	1021	0,37459	2,885E+00	2,004E+00	1,985E-01	1,379E-01	0
769	5	3	22	8	1021	0,37436	9,640E-02	6,000E-02	6,632E-03	4,128E-03	0
768	0	7	13	4	1021	0,37436	5,332E-02	3,309E-02	3,668E-03	2,276E-03	0
767	12	1	3	8	1021	0,37429	1,543E+01	8,935E+00	1,062E+00	6,148E-01	0
766	6	7	1	8	1021	0,37383	2,958E-01	8,397E-02	2,035E-02	5,777E-03	180
765	4	3	23	8	1021	0,37369	2,215E+00	5,255E-01	1,524E-01	3,616E-02	0
764	7	6	9	8	1021	0,37366	8,559E+00	1,963E+00	5,889E-01	1,350E-01	0
763	8	0	20	4	1021	0,37364	1,309E+01	2,939E+00	9,007E-01	2,022E-01	0
762	6	6	12	8	1021	0,37323	2,056E-01	3,936E-02	1,415E-02	2,708E-03	0
761	11	3	6	8	1021	0,37296	4,707E+00	1,052E+00	3,239E-01	7,239E-02	0
760	5	1	24	8	1021	0,37293	2,233E+00	5,145E-01	1,536E-01	3,540E-02	0
759	1	8	3	8	1021	0,37247	1,351E+00	5,318E-01	9,293E-02	3,659E-02	0
758	1	4	23	8	1021	0,37238	9,189E+00	4,006E+00	6,322E-01	2,756E-01	0

757	4	5	19	8	1021	0,37231	9,702E+00	4,547E+00	6,675E-01	3,128E-01	0
756	8	6	4	8	1021	0,37212	1,419E+00	7,939E-01	9,763E-02	5,462E-02	180
755	10	1	15	8	1021	0,3721	5,748E-01	3,257E-01	3,955E-02	2,241E-02	180
754	6	3	21	8	1021	0,37199	9,107E-01	5,667E-01	6,266E-02	3,899E-02	180
753	0	8	4	4	1021	0,37187	1,144E+00	7,877E-01	7,874E-02	5,419E-02	180
752	10	4	8	8	1021	0,37174	8,664E+00	6,676E+00	5,961E-01	4,593E-01	0
751	6	7	3	8	1021	0,37172	1,078E+01	8,488E+00	7,416E-01	5,839E-01	0
750	6	1	23	8	1021	0,37163	5,932E-01	5,098E-01	4,081E-02	3,507E-02	0
749	3	2	25	8	1021	0,37137	2,699E-01	3,105E-01	1,857E-02	2,137E-02	0
748	4	1	25	8	1021	0,37122	6,277E+00	8,645E+00	4,319E-01	5,948E-01	0
747	10	2	14	8	1021	0,37119	6,476E+00	9,166E+00	4,456E-01	6,306E-01	0
746	0	5	21	4	1021	0,37114	3,650E-01	5,506E-01	2,511E-02	3,788E-02	180
745	2	8	0	4	1021	0,37111	6,374E+00	9,962E+00	4,385E-01	6,854E-01	0
744	5	7	8	8	1021	0,37092	1,330E-01	2,735E-01	9,149E-03	1,882E-02	0
743	5	5	18	8	1021	0,37087	1,181E+00	2,625E+00	8,127E-02	1,806E-01	0
742	3	5	20	8	1021	0,37075	8,804E-01	2,574E+00	6,057E-02	1,771E-01	0
741	0	6	18	4	1021	0,3706	1,324E-01	7,955E-01	9,108E-03	5,473E-02	180
740	9	2	17	8	1021	0,37034	0,000E+00	1,290E+00	1,843E-09	8,873E-02	0
739	7	2	21	8	1021	0,3701	0,000E+00	1,509E+00	2,222E-09	1,039E-01	0
738	12	1	5	8	1021	0,37008	0,000E+00	2,847E+00	1,444E-10	1,959E-01	0
737	2	8	2	8	1021	0,37007	0,000E+00	4,427E-01	-2,126E-10	3,046E-02	0
736	12	0	6	4	1021	0,37004	0,000E+00	4,661E+00	-5,011E-10	3,206E-01	0
735	3	3	24	8	1021	0,37003	0,000E+00	5,036E-01	4,973E-10	3,465E-02	0
734	3	7	12	8	1021	0,36976	0,000E+00	2,711E+00	6,102E-10	1,865E-01	0
733	9	5	8	8	1021	0,36973	0,000E+00	2,688E-01	-3,492E-10	1,849E-02	0
732	9	1	18	8	1021	0,36969	0,000E+00	2,578E+00	1,310E-10	1,774E-01	0
731	2	7	13	8	1021	0,3694	0,000E+00	3,734E-02	-3,142E-11	2,569E-03	0
730	0	2	26	4	1021	0,36916	0,000E+00	1,222E-02	1,564E-11	8,409E-04	180
729	3	6	17	8	1021	0,36867	0,000E+00	1,248E+00	1,074E-09	8,588E-02	0
728	4	6	16	8	1021	0,36865	0,000E+00	1,341E+00	3,591E-09	9,224E-02	0
727	0	3	25	4	1021	0,36836	3,755E+00	8,157E+00	2,583E-01	5,612E-01	0
726	1	8	5	8	1021	0,36832	2,853E-01	5,312E-01	1,963E-02	3,654E-02	0
725	12	2	0	4	1021	0,36817	7,564E+00	9,374E+00	5,204E-01	6,449E-01	0
724	9	4	13	8	1021	0,3678	7,917E-01	6,549E-01	5,447E-02	4,505E-02	0
723	6	7	5	8	1021	0,36759	3,165E+00	2,720E+00	2,178E-01	1,871E-01	0
722	11	1	12	8	1021	0,36742	2,594E+00	2,602E+00	1,785E-01	1,791E-01	0
721	7	1	22	8	1021	0,36741	5,627E-02	5,736E-02	3,872E-03	3,947E-03	0
720	4	7	11	8	1021	0,3672	5,994E+00	8,565E+00	4,124E-01	5,893E-01	0
719	12	2	2	8	1021	0,36715	2,761E-01	4,283E-01	1,899E-02	2,947E-02	0
718	2	8	4	8	1021	0,36701	3,252E-01	6,740E-01	2,238E-02	4,637E-02	180
717	8	6	6	8	1021	0,36697	1,941E+00	4,384E+00	1,336E-01	3,016E-01	0
716	10	0	16	4	1021	0,36691	5,065E-01	1,305E+00	3,484E-02	8,979E-02	0
715	7	3	20	8	1021	0,36675	5,992E-01	2,380E+00	4,123E-02	1,638E-01	0
714	0	8	6	4	1021	0,36673	1,018E+00	4,363E+00	7,003E-02	3,002E-01	0
713	3	1	26	8	1021	0,36662	5,659E-01	4,100E+00	3,894E-02	2,821E-01	0
712	6	5	17	8	1021	0,36654	3,517E-01	5,782E+00	2,420E-02	3,978E-01	0
711	2	5	21	8	1021	0,36631	0,000E+00	4,650E-01	1,272E-09	3,199E-02	180
710	1	7	14	8	1021	0,36615	0,000E+00	4,942E-01	1,397E-09	3,400E-02	0
709	8	4	16	8	1021	0,3661	0,000E+00	1,289E+00	-2,923E-09	8,865E-02	0
708	5	4	21	8	1021	0,36588	0,000E+00	1,426E+00	2,387E-09	9,813E-02	0
707	2	6	18	8	1021	0,36579	0,000E+00	6,819E-01	1,375E-09	4,691E-02	180
706	11	3	8	8	1021	0,36576	0,000E+00	2,532E-01	4,828E-10	1,742E-02	0
705	4	4	22	8	1021	0,36576	0,000E+00	6,766E+00	3,402E-10	4,655E-01	0
704	5	6	15	8	1021	0,36575	0,000E+00	2,870E+00	-4,880E-09	1,975E-01	0
703	1	0	27	4	1021	0,36552	0,000E+00	4,771E-02	5,646E-11	3,283E-03	0
702	11	2	11	8	1021	0,36505	0,000E+00	2,363E-01	-2,050E-10	1,626E-02	0
701	9	3	16	8	1021	0,36498	0,000E+00	1,886E-01	-6,187E-11	1,297E-02	0
700	3	8	1	8	1021	0,36486	0,000E+00	1,730E+00	-1,871E-09	1,190E-01	0
699	2	2	26	8	1021	0,36441	0,000E+00	8,300E-03	7,124E-13	5,710E-04	180
698	10	3	13	8	1021	0,36431	0,000E+00	4,149E-02	-8,367E-11	2,855E-03	0
697	12	2	4	8	1021	0,36416	0,000E+00	6,127E-01	1,181E-09	4,216E-02	180
696	12	1	7	8	1021	0,36403	0,000E+00	7,940E-01	1,342E-09	5,463E-02	180
695	0	1	27	4	1021	0,36401	0,000E+00	4,814E-01	1,189E-09	3,312E-02	0
694	11	0	13	4	1021	0,36389	0,000E+00	6,265E-01	1,046E-09	4,310E-02	0
693	2	3	25	8	1021	0,36364	0,000E+00	7,388E+00	2,250E-08	5,083E-01	0
692	8	5	13	8	1021	0,36351	0,000E+00	4,212E-02	7,746E-12	2,898E-03	0
691	7	6	11	8	1021	0,36345	0,000E+00	2,298E-01	-6,213E-10	1,581E-02	0
690	5	0	25	4	1021	0,36322	0,000E+00	2,697E-01	-2,742E-10	1,856E-02	0
689	6	4	20	8	1021	0,36318	0,000E+00	2,393E+00	-2,741E-10	1,646E-01	0
688	9	0	19	4	1021	0,36312	0,000E+00	4,648E-02	-1,274E-11	3,198E-03	0
687	10	5	1	8	1021	0,36303	0,000E+00	4,685E-02	-3,385E-11	3,223E-03	180

686	12	0	8	4	1021	0,36301	0,000E+00	5,595E+00	-2,747E-10	3,850E-01	0
685	3	8	3	8	1021	0,36289	9,030E-02	4,449E-01	6,213E-03	3,061E-02	0
684	3	4	23	8	1021	0,36281	1,329E+00	3,332E+00	9,145E-02	2,292E-01	0
683	10	4	10	8	1021	0,36265	1,984E-01	2,654E-01	1,365E-02	1,826E-02	180
682	8	2	20	8	1021	0,36262	1,903E+00	2,366E+00	1,309E-01	1,628E-01	0
681	11	4	1	8	1021	0,36261	1,378E+00	1,669E+00	9,479E-02	1,148E-01	0
680	6	0	24	4	1021	0,3625	9,417E-03	8,910E-03	6,479E-04	6,130E-04	180
679	1	8	7	8	1021	0,36235	2,638E+00	1,930E+00	1,815E-01	1,328E-01	0
678	2	8	6	8	1021	0,36207	6,836E+00	3,964E+00	4,703E-01	2,727E-01	0
677	5	7	10	8	1021	0,36189	2,157E+00	1,303E+00	1,484E-01	8,964E-02	0
676	0	4	24	4	1021	0,36172	1,149E-02	8,079E-03	7,908E-04	5,558E-04	180
675	6	7	7	8	1021	0,36166	9,771E-01	7,336E-01	6,722E-02	5,047E-02	180
674	4	0	26	4	1021	0,36116	7,036E-03	6,126E-03	4,841E-04	4,215E-04	180
673	10	5	3	8	1021	0,36109	7,988E+00	6,791E+00	5,496E-01	4,672E-01	0
672	9	5	10	8	1021	0,36078	1,353E+00	1,282E+00	9,311E-02	8,822E-02	0
671	11	4	3	8	1021	0,36068	3,881E-01	4,262E-01	2,670E-02	2,932E-02	0
670	8	1	21	8	1021	0,36057	2,679E-01	3,757E-01	1,843E-02	2,585E-02	180
669	1	6	19	8	1021	0,36022	8,438E-03	4,668E-02	5,805E-04	3,212E-03	0
668	0	7	15	4	1021	0,36021	3,667E-02	2,091E-01	2,523E-03	1,439E-02	180
667	6	6	14	8	1021	0,36016	8,296E-01	7,248E+00	5,708E-02	4,987E-01	0
666	8	6	8	8	1021	0,36011	3,420E-01	5,262E+00	2,353E-02	3,621E-01	0
665	0	8	8	4	1021	0,35988	0,000E+00	5,237E+00	-1,019E-08	3,603E-01	0
664	7	5	16	8	1021	0,35961	0,000E+00	1,821E-01	-1,818E-10	1,253E-02	0
663	2	1	27	8	1021	0,35945	0,000E+00	4,597E-01	-9,852E-10	3,163E-02	0
662	12	2	6	8	1021	0,35933	0,000E+00	3,741E+00	9,563E-09	2,574E-01	0
661	1	5	22	8	1021	0,35929	0,000E+00	5,417E-02	-3,294E-11	3,727E-03	0
660	7	0	23	4	1021	0,35906	0,000E+00	3,087E+00	2,642E-09	2,124E-01	0
659	3	8	5	8	1021	0,35905	0,000E+00	4,611E-01	-1,138E-09	3,173E-02	0
658	8	3	19	8	1021	0,359	0,000E+00	3,518E+00	-6,554E-09	2,420E-01	0
657	7	7	0	4	1021	0,35871	0,000E+00	2,944E-01	9,530E-11	2,026E-02	0
656	7	4	19	8	1021	0,35783	0,000E+00	4,679E-02	-8,343E-12	3,219E-03	0
655	7	7	2	8	1021	0,35777	0,000E+00	9,360E-01	-2,833E-09	6,440E-02	0
654	10	5	5	8	1021	0,35731	0,000E+00	2,230E+00	7,325E-09	1,534E-01	0
653	2	4	24	8	1021	0,35724	0,000E+00	4,221E-03	-2,540E-12	2,904E-04	180
652	4	8	0	4	1021	0,35717	0,000E+00	7,375E+00	2,369E-08	5,074E-01	0
651	11	3	10	8	1021	0,3571	0,000E+00	1,214E+00	2,377E-09	8,352E-02	0
650	3	7	14	8	1021	0,35704	0,000E+00	4,120E-01	-3,837E-10	2,834E-02	0
649	11	4	5	8	1021	0,35691	0,000E+00	4,456E-01	-1,719E-10	3,066E-02	0
648	10	2	16	8	1021	0,35647	5,191E-01	1,101E+00	3,571E-02	7,572E-02	0
647	3	0	27	4	1021	0,35646	2,815E-02	5,466E-02	1,937E-03	3,760E-03	0
646	12	1	9	8	1021	0,3564	8,648E-01	1,102E+00	5,950E-02	7,579E-02	0
645	10	1	17	8	1021	0,35635	4,992E+00	4,632E+00	3,435E-01	3,186E-01	0
644	4	8	2	8	1021	0,35624	5,919E-01	3,750E-01	4,072E-02	2,580E-02	0
643	9	6	1	8	1021	0,35607	3,519E+00	1,497E+00	2,421E-01	1,030E-01	0
642	2	7	15	8	1021	0,35579	5,488E-01	1,743E-01	3,776E-02	1,199E-02	180
641	4	7	13	8	1021	0,35564	1,584E-01	4,783E-02	1,090E-02	3,291E-03	0
640	2	8	8	8	1021	0,35548	1,563E+01	4,757E+00	1,075E+00	3,272E-01	0
639	1	2	27	8	1021	0,35519	1,648E-01	5,552E-02	1,134E-02	3,819E-03	0
638	7	7	4	8	1021	0,355	4,924E+00	1,833E+00	3,387E-01	1,261E-01	0
637	11	1	14	8	1021	0,35493	1,013E+00	3,944E-01	6,968E-02	2,713E-02	0
636	1	3	26	8	1021	0,35493	8,330E+00	3,259E+00	5,731E-01	2,243E-01	0
635	12	3	1	8	1021	0,35489	6,788E-02	2,745E-02	4,670E-03	1,889E-03	180
634	1	8	9	8	1021	0,35483	3,227E+00	1,384E+00	2,220E-01	9,520E-02	0
633	12	0	10	4	1021	0,35453	2,451E-01	1,876E-01	1,686E-02	1,291E-02	180
632	9	4	15	8	1021	0,35436	1,071E+00	2,337E+00	7,367E-02	1,608E-01	0
631	9	6	3	8	1021	0,35424	0,000E+00	3,748E-01	5,234E-10	2,579E-02	0
630	6	7	9	8	1021	0,35418	0,000E+00	1,055E+00	2,198E-09	7,259E-02	0
629	11	2	13	8	1021	0,35369	0,000E+00	5,524E-01	-4,602E-10	3,801E-02	0
628	0	0	28	2	1021	0,3536	0,000E+00	4,826E+00	-1,323E-08	3,321E-01	0
627	3	8	7	8	1021	0,35352	0,000E+00	1,672E+00	3,118E-09	1,150E-01	0
626	4	8	4	8	1021	0,35351	0,000E+00	4,179E-01	1,784E-12	2,875E-02	180
625	8	0	22	4	1021	0,35311	0,000E+00	5,154E+00	-6,752E-09	3,546E-01	0
624	12	3	3	8	1021	0,35308	0,000E+00	5,666E+00	-4,531E-09	3,898E-01	0
623	5	2	25	8	1021	0,35308	0,000E+00	2,241E-01	-2,999E-10	1,542E-02	0
622	9	2	19	8	1021	0,35299	0,000E+00	4,686E-02	4,615E-11	3,224E-03	0
621	12	2	8	8	1021	0,35288	0,000E+00	4,488E+00	1,798E-09	3,088E-01	0
620	4	5	21	8	1021	0,35288	0,000E+00	2,758E-01	3,413E-10	1,898E-02	180
619	5	5	20	8	1021	0,35255	0,000E+00	1,768E+00	-1,692E-09	1,216E-01	0
618	6	2	24	8	1021	0,35242	0,000E+00	1,573E-03	-1,945E-12	1,082E-04	180
617	4	6	18	8	1021	0,35242	0,000E+00	4,253E-01	7,335E-10	2,926E-02	180
616	10	4	12	8	1021	0,3524	0,000E+00	4,638E-02	4,589E-12	3,191E-03	0

615	0	6	20	4	1021	0,35231	0,000E+00	1,898E+00	-2,466E-09	1,306E-01	0
614	7	6	13	8	1021	0,35224	0,000E+00	5,419E-01	-9,142E-10	3,728E-02	0
613	1	7	16	8	1021	0,35199	0,000E+00	1,720E-01	-4,111E-10	1,183E-02	0
612	5	3	24	8	1021	0,35193	0,000E+00	4,279E-01	5,900E-10	2,944E-02	0
611	10	5	7	8	1021	0,35186	0,000E+00	5,174E-01	1,412E-09	3,560E-02	180
610	8	6	10	8	1021	0,35183	0,000E+00	1,657E-01	1,666E-10	1,140E-02	180
609	5	7	12	8	1021	0,3517	0,000E+00	1,936E+00	1,493E-09	1,332E-01	0
608	0	8	10	4	1021	0,35162	0,000E+00	1,641E-01	-1,361E-10	1,129E-02	180
607	9	1	20	8	1021	0,35153	0,000E+00	1,728E+00	2,288E-09	1,189E-01	0
606	3	6	19	8	1021	0,35154	0,000E+00	4,683E-02	8,322E-11	3,222E-03	0
605	11	4	7	8	1021	0,35148	0,000E+00	1,615E+00	-7,049E-10	1,111E-01	0
604	10	3	15	8	1021	0,35124	0,000E+00	1,429E-01	-1,150E-10	9,830E-03	180
603	4	2	26	8	1021	0,35118	0,000E+00	1,719E-03	1,830E-12	1,183E-04	180
602	10	0	18	4	1021	0,35089	0,000E+00	4,012E-01	9,200E-10	2,760E-02	180
601	11	0	15	4	1021	0,35086	0,000E+00	2,185E+00	-4,055E-09	1,503E-01	0
600	6	3	23	8	1021	0,35084	0,000E+00	3,646E-01	-6,356E-10	2,509E-02	0
599	5	6	17	8	1021	0,35076	0,000E+00	8,572E-01	1,580E-10	5,898E-02	0
598	9	5	12	8	1021	0,35069	0,000E+00	1,897E+00	-1,864E-09	1,305E-01	0
597	3	5	22	8	1021	0,35067	0,000E+00	5,065E-02	-8,156E-11	3,485E-03	0
596	9	6	5	8	1021	0,35067	0,000E+00	4,018E-01	1,964E-10	2,765E-02	0
595	8	5	15	8	1021	0,35052	0,000E+00	1,383E-01	-3,657E-10	9,517E-03	180
594	7	7	6	8	1021	0,35052	0,000E+00	6,836E-01	-9,798E-10	4,703E-02	0
593	4	3	25	8	1021	0,35049	0,000E+00	5,496E+00	3,634E-09	3,781E-01	0
592	13	0	1	4	1021	0,35028	0,000E+00	1,352E+00	1,199E-09	9,303E-02	0
591	8	4	18	8	1021	0,35018	0,000E+00	3,903E-01	1,111E-10	2,685E-02	180
590	1	1	28	8	1021	0,35015	0,000E+00	7,658E-01	-1,204E-09	5,269E-02	0
589	0	5	23	4	1021	0,35012	0,000E+00	3,601E-01	-8,663E-10	2,477E-02	0
588	6	5	19	8	1021	0,34969	0,000E+00	2,891E+00	1,093E-09	1,989E-01	0
587	12	3	5	8	1021	0,34954	2,051E-01	1,897E+00	1,411E-02	1,305E-01	0
586	2	0	28	4	1021	0,34942	1,960E+00	4,371E+00	1,348E-01	3,008E-01	0
585	1	4	25	8	1021	0,34941	1,007E-01	2,089E-01	6,930E-03	1,437E-02	0
584	7	2	23	8	1021	0,34925	2,264E+00	2,502E+00	1,557E-01	1,721E-01	0
583	9	3	18	8	1021	0,3492	1,866E+00	1,821E+00	1,284E-01	1,253E-01	0
582	4	8	6	8	1021	0,34909	3,865E+00	2,977E+00	2,659E-01	2,048E-01	0
581	5	1	26	8	1021	0,34899	4,296E+00	2,875E+00	2,955E-01	1,978E-01	0
580	6	1	25	8	1021	0,34879	9,723E+00	5,277E+00	6,689E-01	3,630E-01	0
579	13	0	3	4	1021	0,34854	7,287E-01	3,331E-01	5,013E-02	2,291E-02	0
578	2	6	20	8	1021	0,34818	4,452E+00	1,729E+00	3,063E-01	1,189E-01	0
577	13	1	0	4	1021	0,34815	6,130E-01	2,372E-01	4,217E-02	1,632E-02	0
576	12	1	11	8	1021	0,34751	2,665E+00	5,494E+00	1,833E-01	3,780E-01	0
575	2	8	10	8	1021	0,3475	5,774E-02	1,345E-01	3,973E-03	9,251E-03	180
574	5	8	1	8	1021	0,34747	2,864E-01	1,284E+00	1,970E-02	8,837E-02	0
573	13	1	2	8	1021	0,34729	0,000E+00	7,804E-01	-1,662E-09	5,369E-02	0
572	11	3	12	8	1021	0,3473	0,000E+00	1,769E+00	3,468E-09	1,217E-01	0
571	7	3	22	8	1021	0,34728	0,000E+00	4,923E-02	-6,259E-11	3,387E-03	0
570	3	2	27	8	1021	0,34686	0,000E+00	6,030E-02	-1,957E-10	4,149E-03	0
569	4	1	27	8	1021	0,34673	0,000E+00	3,973E-01	-6,609E-10	2,733E-02	0
568	6	6	16	8	1021	0,34666	0,000E+00	9,239E-01	-2,009E-09	6,356E-02	0
567	3	3	26	8	1021	0,34662	0,000E+00	2,730E+00	4,378E-09	1,878E-01	0
566	3	8	9	8	1021	0,34652	0,000E+00	1,166E+00	-2,536E-09	8,019E-02	0
565	7	1	24	8	1021	0,34614	0,000E+00	4,015E-01	3,959E-10	2,762E-02	0
564	2	5	23	8	1021	0,34606	0,000E+00	3,349E-01	7,312E-10	2,304E-02	0
563	1	8	11	8	1021	0,34605	0,000E+00	1,663E-01	1,810E-10	1,144E-02	0
562	0	7	17	4	1021	0,34586	0,000E+00	3,616E+00	-4,751E-09	2,488E-01	0
561	5	8	3	8	1021	0,34577	0,000E+00	3,139E-01	-4,297E-11	2,160E-02	0
560	5	4	23	8	1021	0,3457	3,416E-01	2,309E+00	2,350E-02	1,588E-01	0
559	9	6	7	8	1021	0,3455	6,955E-01	1,452E+00	4,785E-02	9,990E-02	0
558	6	7	11	8	1021	0,34545	2,865E+00	5,222E+00	1,971E-01	3,593E-01	0
557	13	0	5	4	1021	0,34514	2,748E-01	3,650E-01	1,891E-02	2,511E-02	0
556	12	2	10	8	1021	0,34508	9,145E-02	1,189E-01	6,292E-03	8,180E-03	180
555	9	0	21	4	1021	0,34503	8,101E-01	1,036E+00	5,573E-02	7,131E-02	0
554	10	5	9	8	1021	0,34495	6,988E-01	8,752E-01	4,808E-02	6,022E-02	0
553	12	0	12	4	1021	0,34494	3,819E-02	4,758E-02	2,628E-03	3,274E-03	0
552	13	1	4	8	1021	0,34475	1,294E+00	1,523E+00	8,904E-02	1,048E-01	0
551	4	4	24	8	1021	0,34475	7,056E-06	8,301E-06	4,855E-07	5,711E-07	180
550	11	4	9	8	1021	0,3446	1,013E+00	1,118E+00	6,967E-02	7,694E-02	0
549	7	7	8	8	1021	0,34453	1,664E-01	1,786E-01	1,145E-02	1,229E-02	0
548	7	5	18	8	1021	0,34449	1,575E+00	1,665E+00	1,084E-01	1,146E-01	0
547	12	3	7	8	1021	0,34443	3,765E-01	3,869E-01	2,590E-02	2,662E-02	180
546	0	3	27	4	1021	0,34441	3,787E-01	3,857E-01	2,606E-02	2,653E-02	0
545	6	4	22	8	1021	0,34425	4,425E+00	4,185E+00	3,044E-01	2,880E-01	0

544	0	2	28	4	1021	0,34422	4,122E+00	3,848E+00	2,836E-01	2,647E-01	0
543	3	7	16	8	1021	0,34388	2,591E-01	1,601E-01	1,783E-02	1,102E-02	0
542	8	2	22	8	1021	0,34377	8,241E+00	4,137E+00	5,670E-01	2,846E-01	0
541	4	7	15	8	1021	0,34345	3,847E-01	9,859E-02	2,647E-02	6,783E-03	180
540	4	8	8	8	1021	0,34316	2,135E+01	3,568E+00	1,469E+00	2,455E-01	0
539	8	7	1	8	1021	0,34291	6,836E-02	9,750E-03	4,703E-03	6,708E-04	180
538	1	6	21	8	1021	0,34254	5,813E+00	9,927E-01	3,999E-01	6,830E-02	0
537	8	6	12	8	1021	0,34245	2,478E-01	4,781E-02	1,705E-02	3,290E-03	0
536	5	8	5	8	1021	0,34245	1,805E+00	3,477E-01	1,242E-01	2,392E-02	0
535	0	8	12	4	1021	0,34225	1,763E-01	4,783E-02	1,213E-02	3,291E-03	0
534	3	1	28	8	1021	0,34216	1,949E+00	6,361E-01	1,341E-01	4,377E-02	0
533	11	1	16	8	1021	0,34199	3,386E-01	1,572E-01	2,329E-02	1,082E-02	0
532	2	7	17	8	1021	0,34194	6,375E+00	3,279E+00	4,386E-01	2,256E-01	0
531	10	2	18	8	1021	0,34172	3,524E-01	2,761E-01	2,424E-02	1,900E-02	180
530	11	2	15	8	1021	0,34169	2,183E+00	1,813E+00	1,502E-01	1,247E-01	0
529	8	3	21	8	1021	0,34149	1,202E-01	1,644E-01	8,271E-03	1,131E-02	180
528	3	4	25	8	1021	0,34147	1,213E-01	1,785E-01	8,348E-03	1,228E-02	0
527	10	4	14	8	1021	0,34133	1,428E+00	4,616E+00	9,827E-02	3,176E-01	0
526	8	7	3	8	1021	0,34128	5,449E-01	4,245E+00	3,749E-02	2,920E-01	0
525	11	5	0	4	1021	0,34122	0,000E+00	2,042E-01	-1,678E-11	1,405E-02	0
524	8	1	23	8	1021	0,34121	0,000E+00	3,061E-01	-5,382E-10	2,106E-02	0
523	13	2	1	8	1021	0,34116	0,000E+00	1,139E+00	1,006E-09	7,833E-02	0
522	10	1	19	8	1021	0,34081	0,000E+00	2,361E+00	-2,596E-09	1,625E-01	0
521	5	7	14	8	1021	0,3407	0,000E+00	2,888E-01	-1,720E-10	1,987E-02	0
520	9	4	17	8	1021	0,34067	0,000E+00	6,782E-01	1,606E-09	4,666E-02	0
519	13	1	6	8	1021	0,34065	0,000E+00	5,521E-01	1,123E-09	3,798E-02	0
518	2	3	27	8	1021	0,34054	0,000E+00	3,663E-01	-6,461E-10	2,520E-02	0
517	7	4	21	8	1021	0,34049	0,000E+00	9,573E-01	1,173E-09	6,586E-02	0
516	1	0	29	4	1021	0,34046	0,000E+00	2,062E+00	2,261E-09	1,419E-01	0
515	11	5	2	8	1021	0,34041	0,000E+00	6,858E-01	-1,679E-09	4,718E-02	0
514	6	0	26	4	1021	0,3404	0,000E+00	4,031E-05	2,492E-14	2,773E-06	180
513	7	6	15	8	1021	0,34038	0,000E+00	1,763E+00	9,225E-10	1,213E-01	0
512	2	2	28	8	1021	0,34036	0,000E+00	3,487E+00	-6,381E-09	2,399E-01	0
511	13	0	7	4	1021	0,34021	0,000E+00	1,315E+00	7,421E-10	9,044E-02	0
510	5	0	27	4	1021	0,34019	0,000E+00	6,297E-02	-2,152E-10	4,333E-03	0
509	9	5	14	8	1021	0,33978	6,248E-02	2,828E-01	4,298E-03	1,946E-02	0
508	0	4	26	4	1021	0,33975	8,137E-06	1,927E-05	5,598E-07	1,326E-06	180
507	13	2	3	8	1021	0,33955	5,967E-01	2,738E-01	4,106E-02	1,884E-02	0
506	1	5	24	8	1021	0,33932	1,378E+00	3,694E-01	9,482E-02	2,542E-02	0
505	0	1	29	4	1021	0,33923	4,202E-01	1,022E-01	2,891E-02	7,030E-03	180
504	12	4	0	4	1021	0,33898	2,106E+01	4,720E+00	1,449E+00	3,247E-01	0
503	9	6	9	8	1021	0,33896	4,394E+00	9,868E-01	3,023E-01	6,789E-02	0
502	2	8	12	8	1021	0,33845	1,209E-01	4,799E-02	8,320E-03	3,302E-03	0
501	7	0	25	4	1021	0,33834	3,282E-01	1,674E-01	2,258E-02	1,151E-02	0
500	3	8	11	8	1021	0,33833	2,771E-01	1,425E-01	1,906E-02	9,801E-03	0
499	12	4	2	8	1021	0,33818	4,266E-01	2,896E-01	2,935E-02	1,992E-02	0
498	8	7	5	8	1021	0,33808	1,958E+00	1,466E+00	1,347E-01	1,009E-01	0
497	11	5	4	8	1021	0,33802	1,775E+00	1,334E+00	1,221E-01	9,180E-02	0
496	12	3	9	8	1021	0,33794	1,039E+00	7,520E-01	7,149E-02	5,174E-02	0
495	10	3	17	8	1021	0,3379	4,259E+00	2,953E+00	2,930E-01	2,032E-01	0
494	1	7	18	8	1021	0,33777	2,376E+00	1,455E+00	1,635E-01	1,001E-01	0
493	4	0	28	4	1021	0,33771	5,645E+00	3,253E+00	3,884E-01	2,238E-01	0
492	12	1	13	8	1021	0,33767	1,010E-01	5,660E-02	6,948E-03	3,894E-03	0
491	5	8	7	8	1021	0,33763	2,287E+00	1,250E+00	1,573E-01	8,600E-02	0
490	11	0	17	4	1021	0,33756	1,191E+00	6,286E-01	8,192E-02	4,325E-02	0
489	8	5	17	8	1021	0,33726	5,349E+00	2,904E+00	3,680E-01	1,998E-01	0
488	7	7	10	8	1021	0,33726	1,602E+00	8,701E-01	1,102E-01	5,986E-02	0
487	10	6	0	4	1021	0,33725	8,265E+00	4,508E+00	5,686E-01	3,101E-01	0
486	6	8	0	4	1021	0,33706	7,644E+00	4,485E+00	5,259E-01	3,086E-01	0
485	10	5	11	8	1021	0,33687	6,681E+00	4,189E+00	4,596E-01	2,882E-01	0
484	11	3	14	8	1021	0,33669	3,848E-01	2,632E-01	2,647E-02	1,811E-02	0
483	4	6	20	8	1021	0,33658	1,765E+00	1,308E+00	1,214E-01	9,001E-02	0
482	11	4	11	8	1021	0,33654	1,777E-01	1,373E-01	1,222E-02	9,445E-03	0
481	10	6	2	8	1021	0,33647	3,392E-01	2,817E-01	2,333E-02	1,938E-02	0
480	13	2	5	8	1021	0,3364	3,485E-01	3,105E-01	2,398E-02	2,136E-02	0
479	1	8	13	8	1021	0,33633	4,511E-01	4,287E-01	3,103E-02	2,950E-02	0
478	9	2	21	8	1021	0,3363	9,137E-01	8,867E-01	6,286E-02	6,101E-02	0
477	6	8	2	8	1021	0,33628	2,860E-01	2,809E-01	1,968E-02	1,932E-02	0
476	12	2	12	8	1021	0,33621	4,812E-02	4,799E-02	3,311E-03	3,302E-03	0
475	2	4	26	8	1021	0,33604	5,015E-05	4,121E-05	3,451E-06	2,835E-06	0
474	4	8	10	8	1021	0,33598	1,006E-01	7,153E-02	6,920E-03	4,921E-03	180

473	5	6	19	8	1021	0,33591	7,692E-02	4,527E-02	5,292E-03	3,114E-03	0
472	12	4	4	8	1021	0,33584	4,046E-01	1,976E-01	2,783E-02	1,359E-02	180
471	6	7	13	8	1021	0,33578	1,410E-01	5,711E-02	9,700E-03	3,929E-03	0
470	2	1	29	8	1021	0,33553	3,602E-01	8,447E-02	2,478E-02	5,811E-03	180
469	10	0	20	4	1021	0,33526	7,315E+00	1,265E+00	5,033E-01	8,703E-02	0
468	13	1	8	8	1021	0,33514	9,264E-01	1,503E-01	6,373E-02	1,034E-02	0
467	5	5	22	8	1021	0,33515	2,693E-01	4,399E-02	1,853E-02	3,026E-03	0
466	3	6	21	8	1021	0,33505	5,590E+00	8,660E-01	3,846E-01	5,958E-02	0
465	0	6	22	4	1021	0,33495	2,266E+01	3,308E+00	1,559E+00	2,276E-01	0
464	4	5	23	8	1021	0,33467	2,390E+00	2,696E-01	1,644E-01	1,855E-02	0
463	8	4	20	8	1021	0,33464	1,148E+01	1,245E+00	7,900E-01	8,566E-02	0
462	12	0	14	4	1021	0,33454	3,922E+01	3,853E+00	2,698E+00	2,651E-01	0
461	9	1	22	8	1021	0,33428	5,540E-01	4,360E-02	3,812E-02	3,000E-03	0
460	10	6	4	8	1021	0,33416	2,484E+00	1,823E-01	1,709E-01	1,254E-02	180
459	11	5	6	8	1021	0,33415	6,515E+00	4,752E-01	4,482E-01	3,270E-02	0
458	0	9	1	4	1021	0,33415	4,285E-02	3,135E-03	2,948E-03	2,157E-04	180
457	8	0	24	4	1021	0,33411	2,347E-02	1,680E-03	1,615E-03	1,156E-04	0
456	13	0	9	4	1021	0,33396	1,280E+01	8,786E-01	8,805E-01	6,045E-02	0
455	6	8	4	8	1021	0,33398	2,625E+00	1,807E-01	1,806E-01	1,243E-02	180
454	9	3	20	8	1021	0,33378	1,640E+01	1,131E+00	1,128E+00	7,779E-02	0
453	6	5	21	8	1021	0,33345	1,242E+00	1,082E-01	8,543E-02	7,441E-03	180
452	8	7	7	8	1021	0,33344	2,730E+00	2,396E-01	1,878E-01	1,648E-02	180
451	1	9	0	4	1021	0,33345	1,959E+00	1,713E-01	1,348E-01	1,179E-02	0
450	3	0	29	4	1021	0,33331	1,061E+01	1,744E+00	7,301E-01	1,200E-01	0
449	6	6	18	8	1021	0,33306	1,027E+00	1,862E-01	7,064E-02	1,281E-02	180
448	1	9	2	8	1021	0,33269	1,644E+00	5,873E-01	1,131E-01	4,041E-02	0
447	0	9	3	4	1021	0,33264	9,173E+00	3,373E+00	6,311E-01	2,321E-01	0
446	1	3	28	8	1021	0,3326	1,354E+00	5,019E-01	9,318E-02	3,453E-02	0
445	8	6	14	8	1021	0,33227	1,160E+01	3,619E+00	7,981E-01	2,490E-01	0
444	0	8	14	4	1021	0,33209	1,244E+01	3,601E+00	8,560E-01	2,477E-01	0
443	1	2	29	8	1021	0,33206	5,913E+00	1,702E+00	4,068E-01	1,171E-01	0
442	12	4	6	8	1021	0,33204	6,787E+00	1,948E+00	4,669E-01	1,340E-01	0
441	3	5	24	8	1021	0,33204	1,166E+00	3,344E-01	8,024E-02	2,301E-02	0
440	6	2	26	8	1021	0,33201	1,060E-03	3,031E-04	7,291E-05	2,085E-05	0
439	13	2	7	8	1021	0,33183	3,845E+00	1,110E+00	2,645E-01	7,640E-02	0
438	5	2	27	8	1021	0,33181	2,234E-01	6,473E-02	1,537E-02	4,453E-03	0
437	5	3	26	8	1021	0,3316	6,367E+00	1,917E+00	4,380E-01	1,319E-01	0
436	0	7	19	4	1021	0,3316	6,254E+00	1,883E+00	4,303E-01	1,296E-01	0
435	5	8	9	8	1021	0,33152	2,730E+00	8,288E-01	1,878E-01	5,702E-02	0
434	6	3	25	8	1021	0,33143	1,109E+01	3,369E+00	7,631E-01	2,318E-01	0
433	2	6	22	8	1021	0,33139	9,928E+00	3,008E+00	6,830E-01	2,069E-01	0
432	9	6	11	8	1021	0,33129	4,115E-01	1,229E-01	2,831E-02	8,453E-03	0
431	4	7	17	8	1021	0,33094	8,812E+00	2,447E+00	6,063E-01	1,684E-01	0
430	13	3	0	4	1021	0,33088	5,869E-01	1,613E-01	4,038E-02	1,110E-02	0
429	0	5	25	4	1021	0,33083	1,214E+01	3,313E+00	8,350E-01	2,280E-01	0
428	2	9	1	8	1021	0,33062	6,048E-03	1,622E-03	4,161E-04	1,116E-04	180
427	3	7	18	8	1021	0,33058	4,658E+00	1,247E+00	3,205E-01	8,577E-02	0
426	1	9	4	8	1021	0,33046	4,281E+00	1,138E+00	2,945E-01	7,830E-02	0
425	10	6	6	8	1021	0,33042	7,024E+00	1,864E+00	4,833E-01	1,283E-01	0
424	12	3	11	8	1021	0,33034	1,321E+01	3,502E+00	9,086E-01	2,409E-01	0
423	6	8	6	8	1021	0,33024	6,973E+00	1,855E+00	4,798E-01	1,276E-01	0
422	13	3	2	8	1021	0,33014	2,069E+00	5,566E-01	1,423E-01	3,829E-02	0
421	7	2	25	8	1021	0,33009	5,165E-01	1,404E-01	3,554E-02	9,657E-03	0
420	0	0	30	2	1021	0,33003	4,217E+00	1,164E+00	2,901E-01	8,007E-02	0
419	10	4	16	8	1021	0,32978	2,231E+00	6,571E-01	1,535E-01	4,521E-02	0
418	0	9	5	4	1021	0,32968	4,047E+00	1,194E+00	2,784E-01	8,214E-02	0
417	4	3	27	8	1021	0,32967	1,059E+00	3,119E-01	7,283E-02	2,146E-02	0
416	7	5	20	8	1021	0,32966	3,449E+00	1,015E+00	2,373E-01	6,986E-02	0
415	4	2	28	8	1021	0,32951	9,325E+00	2,598E+00	6,416E-01	1,788E-01	0
414	11	2	17	8	1021	0,32937	1,994E+00	5,104E-01	1,372E-01	3,511E-02	0
413	3	8	13	8	1021	0,32923	1,604E+00	3,802E-01	1,103E-01	2,616E-02	0
412	5	7	16	8	1021	0,3292	5,810E-01	1,363E-01	3,997E-02	9,376E-03	0
411	7	3	24	8	1021	0,32915	1,385E+00	3,205E-01	9,532E-02	2,205E-02	0
410	2	9	3	8	1021	0,32915	1,323E+01	3,059E+00	9,105E-01	2,105E-01	0
409	7	7	12	8	1021	0,32896	4,942E+00	1,169E+00	3,400E-01	8,043E-02	0
408	11	5	8	8	1021	0,32894	5,572E-01	1,333E-01	3,833E-02	9,168E-03	0
407	11	1	18	8	1021	0,32891	4,928E+00	1,201E+00	3,390E-01	8,261E-02	0
406	1	4	27	8	1021	0,32876	2,336E-01	6,491E-02	1,607E-02	4,466E-03	0
405	2	8	14	8	1021	0,32862	9,795E+00	3,263E+00	6,739E-01	2,245E-01	0
404	13	1	10	8	1021	0,32843	1,781E+00	7,325E-01	1,225E-01	5,040E-02	0
403	9	5	16	8	1021	0,32837	3,104E-01	1,349E-01	2,135E-02	9,278E-03	0

402	6	1	27	8	1021	0,32825	6,462E-01	3,049E-01	4,446E-02	2,098E-02	0
401	7	6	17	8	1021	0,32819	1,023E+00	4,948E-01	7,042E-02	3,404E-02	0
400	2	7	19	8	1021	0,32814	3,496E+00	1,722E+00	2,406E-01	1,185E-01	0
399	13	3	4	8	1021	0,32796	2,078E+00	1,077E+00	1,430E-01	7,409E-02	0
398	9	0	23	4	1021	0,32795	2,864E+00	1,488E+00	1,970E-01	1,024E-01	0
397	10	5	13	8	1021	0,32789	1,111E-01	5,830E-02	7,647E-03	4,011E-03	0
396	4	8	12	8	1021	0,32778	9,110E-02	4,733E-02	6,268E-03	3,256E-03	0
395	5	1	28	8	1021	0,32777	8,816E-01	4,415E-01	6,066E-02	3,038E-02	0
394	9	7	0	4	1021	0,32768	3,008E-01	1,495E-01	2,070E-02	1,029E-02	0
393	11	4	13	8	1021	0,32758	8,207E-01	3,692E-01	5,647E-02	2,540E-02	0
392	8	7	9	8	1021	0,32755	1,352E+00	5,903E-01	9,301E-02	4,061E-02	0
391	2	5	25	8	1021	0,3274	8,574E+00	3,006E+00	5,899E-01	2,068E-01	0
390	10	2	20	8	1021	0,32723	3,666E+00	1,024E+00	2,522E-01	7,046E-02	0
389	1	1	30	8	1021	0,32722	9,071E-03	2,483E-03	6,241E-04	1,709E-04	0
388	12	1	15	8	1021	0,32718	1,457E-01	3,841E-02	1,002E-02	2,643E-03	180
387	5	4	25	8	1021	0,32709	5,496E-01	1,313E-01	3,781E-02	9,035E-03	0
386	9	4	19	8	1021	0,32702	1,922E-01	4,332E-02	1,322E-02	2,980E-03	0
385	9	7	2	8	1021	0,32697	2,376E+00	5,196E-01	1,635E-01	3,575E-02	0
384	12	4	8	8	1021	0,32694	1,084E+01	2,328E+00	7,457E-01	1,602E-01	0
383	1	9	6	8	1021	0,32684	1,914E+00	3,979E-01	1,317E-01	2,737E-02	0
382	7	1	26	8	1021	0,32675	8,209E+00	1,692E+00	5,648E-01	1,164E-01	0
381	13	0	11	4	1021	0,32661	5,238E-01	1,110E-01	3,604E-02	7,633E-03	0
380	2	0	30	4	1021	0,32662	5,080E+00	1,073E+00	3,495E-01	7,380E-02	0
379	12	2	14	8	1021	0,32656	1,423E+01	3,075E+00	9,791E-01	2,115E-01	0
378	6	4	24	8	1021	0,32657	2,068E-02	4,465E-03	1,423E-03	3,072E-04	0
377	3	9	0	4	1021	0,32653	6,601E-01	1,454E-01	4,541E-02	1,000E-02	0
376	2	9	5	8	1021	0,32628	4,193E+00	1,094E+00	2,885E-01	7,526E-02	0
375	8	2	24	8	1021	0,32616	1,641E-02	4,635E-03	1,129E-03	3,189E-04	0
374	13	2	9	8	1021	0,32603	2,420E+00	7,233E-01	1,665E-01	4,976E-02	0
373	1	8	15	8	1021	0,32596	4,199E+00	1,266E+00	2,889E-01	8,713E-02	0
372	3	9	2	8	1021	0,32582	1,717E+00	5,065E-01	1,181E-01	3,485E-02	0
371	1	6	23	8	1021	0,32581	4,774E+00	1,405E+00	3,285E-01	9,664E-02	0
370	3	3	28	8	1021	0,32573	1,475E+00	4,188E-01	1,015E-01	2,881E-02	0
369	10	1	21	8	1021	0,32572	2,424E-01	6,852E-02	1,667E-02	4,715E-03	180
368	11	3	16	8	1021	0,32559	5,011E-01	1,301E-01	3,448E-02	8,948E-03	0
367	4	4	26	8	1021	0,32558	4,309E-03	1,115E-03	2,964E-04	7,669E-05	0
366	7	8	1	8	1021	0,3255	3,376E+00	8,163E-01	2,322E-01	5,616E-02	0
365	14	0	0	2	1021	0,32547	1,377E+01	3,234E+00	9,474E-01	2,225E-01	0
364	6	7	15	8	1021	0,32546	1,464E-01	3,415E-02	1,007E-02	2,349E-03	180
363	10	6	8	8	1021	0,32538	1,032E+01	2,228E+00	7,097E-01	1,533E-01	0
362	0	9	7	4	1021	0,32538	7,496E-01	1,610E-01	5,157E-02	1,108E-02	180
361	3	2	29	8	1021	0,32522	7,988E+00	1,439E+00	5,496E-01	9,901E-02	0
360	6	8	8	8	1021	0,32521	1,245E+01	2,217E+00	8,569E-01	1,526E-01	0
359	4	1	29	8	1021	0,32512	2,902E-01	4,630E-02	1,996E-02	3,185E-03	180
358	8	3	23	8	1021	0,32491	1,736E+00	2,200E-01	1,195E-01	1,514E-02	0
357	9	7	4	8	1021	0,32485	8,278E+00	1,003E+00	5,696E-01	6,903E-02	0
356	14	0	2	4	1021	0,32476	2,006E+00	2,302E-01	1,380E-01	1,584E-02	0
355	10	3	19	8	1021	0,32456	1,455E+01	1,564E+00	1,001E+00	1,076E-01	0
354	13	3	6	8	1021	0,32442	3,515E+00	3,743E-01	2,419E-01	2,575E-02	0
353	5	8	11	8	1021	0,32433	9,951E-01	1,054E-01	6,846E-02	7,254E-03	0
352	11	0	19	4	1021	0,32426	4,046E-01	4,256E-02	2,784E-02	2,928E-03	0
351	7	8	3	8	1021	0,3241	1,884E+00	1,898E-01	1,296E-01	1,306E-02	0
350	7	4	23	8	1021	0,32404	1,364E+01	1,338E+00	9,382E-01	9,207E-02	0
349	8	5	19	8	1021	0,324	1,607E+01	1,540E+00	1,106E+00	1,060E-01	0
348	1	7	20	8	1021	0,32376	1,051E+01	8,648E-01	7,234E-01	5,950E-02	0
347	3	9	4	8	1021	0,32372	1,218E+01	9,773E-01	8,377E-01	6,724E-02	0
346	12	0	16	4	1021	0,32364	7,512E+00	5,723E-01	5,169E-01	3,938E-02	0
345	14	1	1	8	1021	0,32341	1,791E-03	1,221E-04	1,232E-04	8,403E-06	180
344	8	1	25	8	1021	0,32327	4,047E+01	2,665E+00	2,784E+00	1,833E-01	0
343	0	3	29	4	1021	0,3232	6,283E-01	4,091E-02	4,323E-02	2,815E-03	180
342	9	6	13	8	1021	0,32273	4,953E+00	3,374E-01	3,407E-01	2,322E-02	0
341	14	0	4	4	1021	0,32269	1,446E+00	9,983E-02	9,947E-02	6,868E-03	180
340	11	5	10	8	1021	0,3226	9,014E+00	6,476E-01	6,202E-01	4,455E-02	0
339	0	2	30	4	1021	0,32237	1,137E+01	9,654E-01	7,821E-01	6,642E-02	0
338	3	4	27	8	1021	0,32212	5,449E-01	6,446E-02	3,749E-02	4,435E-03	0
337	2	9	7	8	1021	0,32211	1,110E+00	1,353E-01	7,636E-02	9,310E-03	180
336	14	1	3	8	1021	0,32203	1,763E+01	2,483E+00	1,213E+00	1,708E-01	0
335	1	9	8	8	1021	0,32197	7,067E-01	1,155E-01	4,862E-02	7,946E-03	0
334	12	3	13	8	1021	0,32185	2,721E-01	5,817E-02	1,872E-02	4,002E-03	0
333	8	6	16	8	1021	0,32158	1,730E+00	5,454E-01	1,190E-01	3,752E-02	0
332	5	6	21	8	1021	0,32143	2,324E+00	6,556E-01	1,599E-01	4,510E-02	0

331	0	8	16	4	1021	0,32142	1,974E+00	5,433E-01	1,358E-01	3,738E-02	0
330	9	7	6	8	1021	0,32141	1,274E+00	3,462E-01	8,767E-02	2,382E-02	0
329	7	8	5	8	1021	0,32136	9,160E-01	2,277E-01	6,302E-02	1,567E-02	0
328	4	6	22	8	1021	0,32135	9,259E+00	2,263E+00	6,370E-01	1,557E-01	0
327	1	5	26	8	1021	0,32099	1,130E+01	1,449E+00	7,777E-01	9,971E-02	0
326	12	5	1	8	1021	0,32096	3,358E-05	4,121E-06	2,310E-06	2,835E-07	180
325	13	1	12	8	1021	0,32076	9,709E+00	9,490E-01	6,680E-01	6,529E-02	0
324	12	4	10	8	1021	0,3207	2,596E-01	2,432E-02	1,786E-02	1,673E-03	180
323	3	1	30	8	1021	0,32067	4,635E-02	4,262E-03	3,189E-03	2,932E-04	0
322	4	9	1	8	1021	0,32064	8,341E-06	7,581E-07	5,738E-07	5,216E-08	180
321	8	7	11	8	1021	0,32061	2,930E+01	2,632E+00	2,016E+00	1,811E-01	0
320	6	0	28	4	1021	0,32056	2,249E+01	1,996E+00	1,547E+00	1,373E-01	0
319	9	2	23	8	1021	0,32043	1,354E+01	1,209E+00	9,314E-01	8,321E-02	0
318	3	9	6	8	1021	0,32032	3,604E+00	3,364E-01	2,479E-01	2,314E-02	0
317	10	0	22	4	1021	0,32019	2,156E+01	2,186E+00	1,484E+00	1,504E-01	0
316	0	4	28	4	1021	0,32001	1,633E+01	1,963E+00	1,123E+00	1,350E-01	0
315	2	3	29	8	1021	0,32	2,689E-01	3,295E-02	1,850E-02	2,267E-03	180
314	7	7	14	8	1021	0,31991	1,277E+00	1,731E-01	8,783E-02	1,191E-02	0
313	0	9	9	4	1021	0,3199	3,527E+00	4,868E-01	2,427E-01	3,349E-02	0
312	5	0	29	4	1021	0,31971	7,060E+00	1,247E+00	4,857E-01	8,580E-02	0
311	13	3	8	8	1021	0,31965	5,750E-01	1,100E-01	3,956E-02	7,565E-03	0
310	8	4	22	8	1021	0,31965	1,118E+01	2,151E+00	7,692E-01	1,480E-01	0
309	12	5	3	8	1021	0,31962	1,154E+01	2,307E+00	7,942E-01	1,587E-01	0
308	6	6	20	8	1021	0,3196	3,972E+00	8,265E-01	2,732E-01	5,686E-02	0
307	7	0	27	4	1021	0,31949	2,614E-01	6,396E-02	1,799E-02	4,401E-03	0
306	3	8	15	8	1021	0,31949	4,372E+00	1,075E+00	3,008E-01	7,397E-02	0
305	14	1	5	8	1021	0,31934	2,894E+00	9,077E-01	1,991E-01	6,245E-02	0
304	3	6	23	8	1021	0,31934	3,744E+00	1,172E+00	2,576E-01	8,067E-02	0
303	14	0	6	4	1021	0,31931	4,113E+00	1,360E+00	2,830E-01	9,358E-02	0
302	4	9	3	8	1021	0,31931	6,796E+00	2,284E+00	4,676E-01	1,572E-01	0
301	10	6	10	8	1021	0,31923	5,559E-02	2,146E-02	3,824E-03	1,476E-03	180
300	11	6	1	8	1021	0,31921	1,729E+00	7,035E-01	1,190E-01	4,840E-02	0
299	13	2	11	8	1021	0,31918	2,151E-01	9,372E-02	1,480E-02	6,448E-03	0
298	2	2	30	8	1021	0,31919	2,079E+00	8,897E-01	1,430E-01	6,121E-02	0
297	6	8	10	8	1021	0,31908	3,847E-02	2,116E-02	2,647E-03	1,456E-03	180
296	9	3	22	8	1021	0,31891	4,239E-02	3,664E-02	2,916E-03	2,521E-03	0
295	4	8	14	8	1021	0,31882	2,105E+00	2,432E+00	1,448E-01	1,673E-01	0
294	5	5	24	8	1021	0,31877	1,977E-01	2,705E-01	1,360E-02	1,861E-02	0
293	1	0	31	4	1021	0,3186	1,812E-01	8,001E-01	1,246E-02	5,505E-02	0
292	0	6	24	4	1021	0,3186	1,714E-03	7,978E-03	1,179E-04	5,489E-04	0
291	13	0	13	4	1021	0,3184	0,000E+00	3,100E-01	3,579E-10	2,133E-02	0
290	4	7	19	8	1021	0,31839	0,000E+00	1,316E+00	3,117E-09	9,057E-02	0
289	10	5	15	8	1021	0,31826	0,000E+00	1,985E-02	5,347E-11	1,366E-03	180
288	2	8	16	8	1021	0,31827	0,000E+00	5,037E-01	1,010E-09	3,465E-02	0
287	14	2	0	4	1021	0,31811	0,000E+00	2,583E+00	6,818E-09	1,777E-01	0
286	9	1	24	8	1021	0,31802	0,000E+00	2,669E-01	-1,154E-10	1,836E-02	0
285	10	4	18	8	1021	0,318	0,000E+00	8,311E-02	1,619E-10	5,718E-03	180
284	11	4	15	8	1021	0,31798	0,000E+00	1,033E+00	-2,999E-09	7,109E-02	0
283	6	5	23	8	1021	0,31796	0,000E+00	1,883E-01	4,203E-10	1,295E-02	0
282	11	6	3	8	1021	0,31789	0,000E+00	1,619E-01	-2,767E-10	1,114E-02	0
281	4	5	25	8	1021	0,3177	0,000E+00	2,248E+00	-5,044E-09	1,547E-01	0
280	0	7	21	4	1021	0,31766	0,000E+00	3,955E-02	-7,176E-11	2,721E-03	180
279	0	1	31	4	1021	0,3176	0,000E+00	1,057E+00	-2,344E-09	7,269E-02	0
278	13	4	1	8	1021	0,31755	0,000E+00	6,753E-01	-7,681E-10	4,646E-02	0
277	5	7	18	8	1021	0,31749	0,000E+00	9,132E-01	-1,500E-09	6,283E-02	0
276	14	2	2	8	1021	0,31745	0,000E+00	2,001E-01	-2,490E-10	1,376E-02	0
275	3	7	20	8	1021	0,31741	0,000E+00	7,211E-01	-1,813E-09	4,961E-02	0
274	7	8	7	8	1021	0,31737	0,000E+00	8,002E-01	-1,059E-09	5,505E-02	0
273	12	5	5	8	1021	0,31699	1,912E+00	8,497E-01	1,316E-01	5,846E-02	0
272	4	0	30	4	1021	0,31699	1,877E+00	8,398E-01	1,292E-01	5,778E-02	0
271	11	2	19	8	1021	0,31698	9,377E-02	4,026E-02	6,451E-03	2,770E-03	0
270	2	4	28	8	1021	0,3169	5,466E+00	1,782E+00	3,761E-01	1,226E-01	0
269	2	9	9	8	1021	0,31679	1,862E+00	4,485E-01	1,281E-01	3,085E-02	0
268	9	7	8	8	1021	0,31677	4,483E-01	1,033E-01	3,084E-02	7,105E-03	0
267	9	5	18	8	1021	0,31674	4,142E+00	8,960E-01	2,850E-01	6,165E-02	0
266	4	9	5	8	1021	0,31668	4,444E+00	8,423E-01	3,057E-01	5,795E-02	0
265	8	0	26	4	1021	0,31657	1,848E-02	2,746E-03	1,272E-03	1,889E-04	0
264	12	2	16	8	1021	0,3164	4,545E+00	4,811E-01	3,127E-01	3,310E-02	0
263	12	1	17	8	1021	0,31632	1,753E+01	1,586E+00	1,206E+00	1,091E-01	0
262	5	8	13	8	1021	0,31629	3,462E+00	2,969E-01	2,382E-01	2,043E-02	0
261	13	4	3	8	1021	0,31625	1,923E+00	1,550E-01	1,323E-01	1,067E-02	0

260	1	9	10	8	1021	0,31601	8,913E+00	5,580E-01	6,132E-01	3,839E-02	0
259	11	1	20	8	1021	0,31593	1,128E+01	6,902E-01	7,762E-01	4,749E-02	0
258	7	6	19	8	1021	0,31593	6,517E-01	3,989E-02	4,484E-02	2,744E-03	0
257	3	9	8	8	1021	0,31572	1,499E+00	1,009E-01	1,031E-01	6,942E-03	0
256	14	2	4	8	1021	0,31551	6,929E-01	6,467E-02	4,767E-02	4,449E-03	180
255	2	6	24	8	1021	0,31553	1,031E-01	9,346E-03	7,095E-03	6,430E-04	0
254	14	1	7	8	1021	0,31543	8,274E-01	9,231E-02	5,692E-02	6,351E-03	180
253	11	5	12	8	1021	0,31532	5,727E+00	8,189E-01	3,940E-01	5,634E-02	0
252	7	5	22	8	1021	0,31531	2,407E-01	3,498E-02	1,656E-02	2,407E-03	0
251	11	6	5	8	1021	0,3153	1,350E+00	1,985E-01	9,286E-02	1,365E-02	0
250	1	8	17	8	1021	0,31521	2,031E+00	3,445E-01	1,398E-01	2,370E-02	0
249	3	5	26	8	1021	0,31481	8,337E+00	1,215E+00	5,736E-01	8,362E-02	0
248	14	0	8	4	1021	0,31476	1,155E+01	1,622E+00	7,944E-01	1,116E-01	0
247	6	7	17	8	1021	0,31476	1,081E+01	1,509E+00	7,436E-01	1,039E-01	0
246	2	7	21	8	1021	0,31461	2,446E-01	3,135E-02	1,683E-02	2,157E-03	180
245	2	1	31	8	1021	0,31456	7,613E+00	9,611E-01	5,238E-01	6,612E-02	0
244	11	3	18	8	1021	0,31424	5,897E+00	8,398E-01	4,057E-01	5,778E-02	0
243	5	9	0	4	1021	0,31389	3,309E-01	1,056E-01	2,276E-02	7,265E-03	0
242	8	8	0	4	1021	0,31387	6,618E+00	2,253E+00	4,553E-01	1,550E-01	0
241	13	3	10	8	1021	0,31382	1,200E+00	5,298E-01	8,256E-02	3,645E-02	0
240	13	4	5	8	1021	0,3137	1,215E-01	1,911E-01	8,357E-03	1,315E-02	0
239	6	3	27	8	1021	0,31366	3,175E-02	2,346E-01	2,185E-03	1,614E-02	0
238	9	4	21	8	1021	0,31362	0,000E+00	5,477E-01	-1,664E-10	3,768E-02	0
237	12	4	12	8	1021	0,31355	0,000E+00	4,393E-02	5,593E-11	3,022E-03	0
236	9	6	15	8	1021	0,31353	0,000E+00	9,162E-01	2,283E-09	6,304E-02	0
235	6	2	28	8	1021	0,31352	0,000E+00	1,598E+00	3,064E-10	1,100E-01	0
234	0	9	11	4	1021	0,31342	0,000E+00	2,097E+00	4,684E-09	1,443E-01	0
233	5	9	2	8	1021	0,31326	0,000E+00	3,762E-01	4,408E-10	2,588E-02	0
232	8	8	2	8	1021	0,31324	0,000E+00	1,835E-01	-3,326E-10	1,262E-02	0
231	10	2	22	8	1021	0,31318	0,000E+00	1,761E+00	-4,761E-10	1,211E-01	0
230	5	3	28	8	1021	0,31318	0,000E+00	2,932E-01	-7,407E-10	2,018E-02	0
229	12	5	7	8	1021	0,31316	0,000E+00	8,032E-02	4,301E-11	5,526E-03	180
228	0	5	27	4	1021	0,31315	0,000E+00	2,322E-01	-2,286E-10	1,598E-02	0
227	4	9	7	8	1021	0,31286	6,330E-02	7,883E-02	4,355E-03	5,423E-03	180
226	8	7	13	8	1021	0,31283	7,483E-02	5,637E-02	5,148E-03	3,878E-03	0
225	1	3	30	8	1021	0,31276	1,801E-02	6,502E-03	1,239E-03	4,473E-04	0
224	12	3	15	8	1021	0,31273	4,033E-02	1,217E-02	2,774E-03	8,376E-04	180
223	5	2	29	8	1021	0,31273	3,434E+00	1,029E+00	2,362E-01	7,077E-02	0
222	3	0	31	4	1021	0,31255	4,617E+00	6,640E-01	3,177E-01	4,568E-02	0
221	10	7	1	8	1021	0,31253	4,891E-03	6,619E-04	3,365E-04	4,554E-05	0
220	7	2	27	8	1021	0,31252	4,608E-01	6,182E-02	3,171E-02	4,253E-03	0
219	12	0	18	4	1021	0,31249	4,798E-01	5,880E-02	3,301E-02	4,045E-03	180
218	14	2	6	8	1021	0,31236	1,129E+01	1,099E+00	7,768E-01	7,559E-02	0
217	13	1	14	8	1021	0,31235	1,461E+00	1,410E-01	1,005E-01	9,699E-03	0
216	7	3	26	8	1021	0,31235	1,178E+01	1,130E+00	8,104E-01	7,775E-02	0
215	7	8	9	8	1021	0,31228	5,604E+00	4,992E-01	3,855E-01	3,435E-02	0
214	10	6	12	8	1021	0,31217	5,153E-01	4,346E-02	3,545E-02	2,990E-03	0
213	6	8	12	8	1021	0,31203	4,889E-01	4,341E-02	3,363E-02	2,987E-03	0
212	9	0	25	4	1021	0,31194	9,112E-01	9,180E-02	6,269E-02	6,316E-03	0
211	1	2	31	8	1021	0,31169	2,239E+00	6,462E-01	1,540E-01	4,446E-02	0
210	11	6	7	8	1021	0,31153	0,000E+00	6,907E-01	1,542E-09	4,752E-02	0
209	13	2	13	8	1021	0,3115	0,000E+00	2,682E-01	2,577E-11	1,845E-02	0
208	10	3	21	8	1021	0,31145	0,000E+00	2,419E-02	3,661E-11	1,664E-03	180
207	5	9	4	8	1021	0,31139	0,000E+00	7,188E-01	-1,225E-09	4,945E-02	0
206	8	8	4	8	1021	0,31138	0,000E+00	4,908E-02	6,716E-11	3,377E-03	180
205	10	7	3	8	1021	0,31129	0,000E+00	1,766E+00	-1,288E-09	1,215E-01	0
204	10	1	23	8	1021	0,31124	0,000E+00	1,604E-01	-2,446E-10	1,104E-02	0
203	11	0	21	4	1021	0,31119	0,000E+00	5,162E-01	-4,486E-10	3,552E-02	0
202	9	7	10	8	1021	0,31109	0,000E+00	4,957E-01	7,198E-10	3,410E-02	0
201	8	5	21	8	1021	0,31095	0,000E+00	2,317E-02	-9,711E-12	1,594E-03	180
200	4	3	29	8	1021	0,31093	0,000E+00	1,633E-02	-2,368E-11	1,124E-03	180
199	8	6	18	8	1021	0,31063	0,000E+00	5,195E-02	9,257E-12	3,574E-03	180
198	2	9	11	8	1021	0,31049	0,000E+00	1,903E+00	-3,753E-09	1,310E-01	0
197	0	8	18	4	1021	0,31048	0,000E+00	5,143E-02	1,842E-11	3,538E-03	180
196	14	1	9	8	1021	0,31043	0,000E+00	3,764E-01	-7,861E-10	2,590E-02	0
195	7	7	16	8	1021	0,31034	7,972E-02	1,032E-01	5,485E-03	7,101E-03	0
194	2	5	27	8	1021	0,31023	5,337E-01	2,189E-01	3,672E-02	1,506E-02	0
193	4	2	30	8	1021	0,31018	2,160E+00	6,964E-01	1,486E-01	4,791E-02	0
192	1	4	29	8	1021	0,31017	3,144E+00	9,555E-01	2,163E-01	6,574E-02	0
191	6	4	26	8	1021	0,31013	1,526E-02	4,035E-03	1,050E-03	2,776E-04	0
190	1	7	22	8	1021	0,31013	1,240E-01	3,258E-02	8,528E-03	2,241E-03	0

189	3	9	10	8	1021	0,3101	2,021E+00	4,836E-01	1,390E-01	3,327E-02	0
188	1	6	25	8	1021	0,31009	3,732E-01	8,765E-02	2,567E-02	6,030E-03	0
187	13	4	7	8	1021	0,30999	3,435E+00	6,633E-01	2,363E-01	4,564E-02	0
186	5	4	27	8	1021	0,30997	3,203E-01	6,076E-02	2,204E-02	4,180E-03	0
185	8	2	26	8	1021	0,30978	2,202E-02	4,104E-03	1,515E-03	2,824E-04	0
184	6	1	29	8	1021	0,30974	7,418E-02	1,472E-02	5,103E-03	1,012E-03	180
183	13	0	15	4	1021	0,30956	2,211E+00	8,192E-01	1,521E-01	5,636E-02	0
182	14	3	1	8	1021	0,30943	0,000E+00	1,196E-03	-1,160E-12	8,230E-05	0
181	0	0	32	2	1021	0,3094	0,000E+00	1,438E-02	-2,108E-11	9,897E-04	180
180	3	8	17	8	1021	0,30935	0,000E+00	2,888E-01	2,481E-10	1,987E-02	0
179	4	8	16	8	1021	0,30934	0,000E+00	4,010E-01	4,724E-10	2,759E-02	0
178	8	3	25	8	1021	0,30931	0,000E+00	1,712E+00	2,733E-09	1,178E-01	0
177	14	0	10	4	1021	0,30919	0,000E+00	7,698E-03	-7,531E-12	5,296E-04	180
176	1	9	12	8	1021	0,30915	0,000E+00	6,867E-01	1,156E-09	4,724E-02	0
175	7	1	28	8	1021	0,30907	0,000E+00	2,590E-01	-6,137E-10	1,782E-02	0
174	10	7	5	8	1021	0,30885	0,000E+00	6,689E-01	1,469E-09	4,602E-02	0
173	5	1	30	8	1021	0,30867	0,000E+00	7,592E-03	-2,396E-11	5,223E-04	0
172	7	4	25	8	1021	0,30856	0,000E+00	8,431E-02	1,788E-10	5,800E-03	0
171	5	9	6	8	1021	0,30836	0,000E+00	2,414E-01	-7,492E-10	1,661E-02	0
170	8	8	6	8	1021	0,30834	0,000E+00	9,653E-01	-1,995E-09	6,641E-02	0
169	12	5	9	8	1021	0,30827	0,000E+00	3,539E-01	-4,472E-10	2,435E-02	0
168	14	3	3	8	1021	0,30822	0,000E+00	1,593E+00	3,142E-09	1,096E-01	0
167	10	5	17	8	1021	0,30823	0,000E+00	1,218E+00	-1,489E-09	8,377E-02	0
166	14	2	8	8	1021	0,30809	0,000E+00	1,308E+00	2,583E-09	8,996E-02	0
165	4	4	28	8	1021	0,30809	0,000E+00	1,334E+00	-3,488E-09	9,175E-02	0
164	11	4	17	8	1021	0,30797	0,000E+00	2,768E-01	-3,457E-10	1,904E-02	0
163	4	9	9	8	1021	0,30798	0,000E+00	3,509E-01	5,921E-10	2,415E-02	0
162	2	8	18	8	1021	0,30764	0,000E+00	4,215E-02	4,102E-11	2,900E-03	180
161	5	8	15	8	1021	0,30762	0,000E+00	7,742E-01	-8,878E-10	5,327E-02	0
160	5	6	23	8	1021	0,30749	0,000E+00	8,185E-01	1,031E-09	5,631E-02	0
159	11	5	14	8	1021	0,30732	0,000E+00	1,222E-01	-4,984E-11	8,405E-03	0
158	13	3	12	8	1021	0,30711	0,000E+00	6,461E-01	9,954E-10	4,445E-02	0
157	1	1	32	8	1021	0,30708	0,000E+00	5,776E-01	-1,837E-10	3,974E-02	0
156	3	3	30	8	1021	0,30702	0,000E+00	8,006E-03	8,427E-12	5,508E-04	0
155	4	6	24	8	1021	0,30682	0,000E+00	1,290E-02	-2,380E-11	8,874E-04	0
154	8	1	27	8	1021	0,30672	0,000E+00	2,031E-01	4,632E-11	1,398E-02	0
153	11	6	9	8	1021	0,30671	0,000E+00	4,239E-01	4,714E-10	2,917E-02	0
152	2	0	32	4	1021	0,30659	0,000E+00	1,084E-02	-1,793E-11	7,460E-04	180
151	6	6	22	8	1021	0,30647	0,000E+00	1,412E+00	3,154E-09	9,716E-02	0
150	7	8	11	8	1021	0,30624	0,000E+00	6,837E-02	1,886E-10	4,704E-03	0
149	10	4	20	8	1021	0,30622	0,000E+00	5,480E-01	1,799E-09	3,770E-02	0
148	0	9	13	4	1021	0,30614	0,000E+00	5,387E-02	-9,581E-11	3,706E-03	0
147	3	2	31	8	1021	0,30602	0,000E+00	5,370E-01	1,742E-09	3,695E-02	0
146	4	7	21	8	1021	0,30598	0,000E+00	1,464E-02	-2,521E-11	1,007E-03	180
145	12	2	18	8	1021	0,30596	0,000E+00	3,727E-02	4,939E-11	2,564E-03	180
144	4	1	31	8	1021	0,30593	0,000E+00	7,247E-01	6,138E-11	4,986E-02	0
143	14	3	5	8	1021	0,30586	0,000E+00	6,097E-01	-1,092E-09	4,195E-02	0
142	6	9	1	8	1021	0,30585	0,000E+00	1,927E-03	5,332E-12	1,326E-04	0
141	10	0	24	4	1021	0,30582	0,000E+00	1,326E-02	-1,002E-11	9,123E-04	0
140	5	7	20	8	1021	0,30576	0,000E+00	5,030E-01	7,468E-10	3,461E-02	0
139	12	4	14	8	1021	0,30568	0,000E+00	1,572E+00	3,198E-09	1,081E-01	0
138	9	2	25	8	1021	0,30544	0,000E+00	7,776E-02	-7,136E-11	5,350E-03	0
137	8	4	24	8	1021	0,30535	0,000E+00	1,342E-02	-3,353E-12	9,236E-04	0
136	10	7	7	8	1021	0,30531	0,000E+00	4,749E-02	4,816E-11	3,267E-03	180
135	12	1	19	8	1021	0,3053	0,000E+00	8,828E-01	-8,529E-10	6,074E-02	0
134	13	4	9	8	1021	0,30523	0,000E+00	4,053E-01	-4,198E-10	2,789E-02	0
133	9	5	20	8	1021	0,3051	0,000E+00	4,922E-01	-5,631E-10	3,387E-02	0
132	11	2	21	8	1021	0,30474	0,000E+00	4,377E-01	4,484E-10	3,011E-02	0
131	9	3	24	8	1021	0,3047	0,000E+00	2,054E-01	2,278E-10	1,413E-02	0
130	6	9	3	8	1021	0,30469	0,000E+00	1,410E+00	-1,690E-09	9,697E-02	0
129	3	4	29	8	1021	0,30458	0,000E+00	8,077E-01	1,731E-09	5,557E-02	0
128	9	7	12	8	1021	0,30455	0,000E+00	5,977E-01	9,640E-10	4,112E-02	0
127	3	7	22	8	1021	0,30454	0,000E+00	2,998E-02	5,395E-11	2,063E-03	0
126	14	1	11	8	1021	0,3045	0,000E+00	1,548E+00	-2,380E-09	1,065E-01	0
125	3	6	25	8	1021	0,3045	0,000E+00	7,586E-02	-1,255E-10	5,219E-03	0
124	8	7	15	8	1021	0,30444	0,000E+00	4,867E-03	3,078E-12	3,349E-04	180
123	10	6	14	8	1021	0,30441	0,000E+00	1,503E+00	1,466E-09	1,034E-01	0
122	0	3	31	4	1021	0,30433	0,000E+00	6,860E-01	5,245E-10	4,720E-02	0
121	1	8	19	8	1021	0,3043	0,000E+00	3,527E-02	-9,915E-11	2,427E-03	0
120	6	8	14	8	1021	0,30427	0,000E+00	1,495E+00	1,552E-09	1,029E-01	0
119	5	9	8	8	1021	0,30425	0,000E+00	7,720E-02	1,397E-10	5,312E-03	0

118	8	8	8	8	1021	0,30424	0,000E+00	1,148E+00	-2,717E-09	7,895E-02	0
117	1	5	28	8	1021	0,30419	0,000E+00	2,222E-01	-3,424E-11	1,528E-02	0
116	0	7	23	4	1021	0,30418	0,000E+00	1,341E-01	9,430E-12	9,226E-03	0
115	9	6	17	8	1021	0,30393	0,000E+00	2,436E-01	-8,706E-10	1,676E-02	0
114	6	7	19	8	1021	0,30389	0,000E+00	8,433E-01	-6,694E-10	5,802E-02	0
113	7	6	21	8	1021	0,3038	0,000E+00	4,269E-01	8,800E-10	2,937E-02	0
112	15	0	1	4	1021	0,30363	0,000E+00	4,658E-01	1,370E-09	3,205E-02	0
111	3	9	12	8	1021	0,30361	0,000E+00	5,808E-01	-9,623E-10	3,996E-02	0
110	13	1	16	8	1021	0,30342	0,000E+00	9,106E-02	-1,408E-10	6,265E-03	0
109	5	5	26	8	1021	0,30343	0,000E+00	8,555E-01	1,491E-09	5,886E-02	0
108	2	9	13	8	1021	0,30342	0,000E+00	5,259E-02	3,503E-11	3,618E-03	0
107	6	5	25	8	1021	0,3033	0,000E+00	1,390E+00	-1,727E-11	9,561E-02	0
106	0	6	26	4	1021	0,30328	0,000E+00	5,342E-03	-1,159E-11	3,675E-04	0
105	11	1	22	8	1021	0,30323	0,000E+00	2,937E-02	9,398E-11	2,021E-03	0
104	13	2	15	8	1021	0,30321	0,000E+00	6,784E-01	1,107E-09	4,668E-02	0
103	12	3	17	8	1021	0,3032	0,000E+00	1,023E+00	2,137E-09	7,037E-02	0
102	0	2	32	4	1021	0,30306	0,000E+00	7,310E-03	-2,904E-13	5,029E-04	180
101	13	5	0	4	1021	0,30288	0,000E+00	7,809E-02	-8,106E-11	5,373E-03	0
100	14	2	10	8	1021	0,30286	0,000E+00	3,154E-03	4,260E-12	2,170E-04	180
99	11	3	20	8	1021	0,30286	0,000E+00	4,571E-01	3,411E-10	3,145E-02	0
98	9	1	26	8	1021	0,30278	0,000E+00	8,376E-01	1,277E-09	5,762E-02	0
97	14	0	12	4	1021	0,30276	0,000E+00	3,969E-02	7,866E-11	2,730E-03	0
96	12	6	0	4	1021	0,30273	0,000E+00	1,535E+00	2,854E-09	1,056E-01	0
95	6	0	30	4	1021	0,30268	0,000E+00	5,581E-01	-1,836E-09	3,840E-02	0
94	15	0	3	4	1021	0,30249	0,000E+00	1,056E-01	-6,231E-11	7,266E-03	0
93	12	5	11	8	1021	0,30246	0,000E+00	1,440E+00	-6,217E-10	9,904E-02	0
92	14	3	7	8	1021	0,30242	0,000E+00	3,836E-02	7,012E-11	2,639E-03	180
91	6	9	5	8	1021	0,30241	0,000E+00	5,462E-01	-9,042E-11	3,758E-02	0
90	7	0	29	4	1021	0,30235	0,000E+00	7,534E-01	-1,299E-09	5,183E-02	0
89	13	5	2	8	1021	0,30231	0,000E+00	2,810E-01	-1,620E-10	1,934E-02	0
88	15	1	0	4	1021	0,30223	0,000E+00	7,666E-02	2,998E-11	5,274E-03	0
87	0	4	30	4	1021	0,30222	0,000E+00	5,503E-01	-1,591E-10	3,786E-02	0
86	4	9	11	8	1021	0,30219	0,000E+00	1,426E+00	2,348E-09	9,808E-02	0
85	12	6	2	8	1021	0,30217	0,000E+00	1,430E-01	9,663E-13	9,838E-03	0
84	4	5	27	8	1021	0,30195	2,545E-02	1,825E-01	1,751E-03	1,256E-02	0
83	9	8	1	8	1021	0,30179	1,994E-01	4,417E-01	1,372E-02	3,039E-02	0
82	15	1	2	8	1021	0,30167	7,460E-02	2,760E-01	5,133E-03	1,899E-02	0
81	3	1	32	8	1021	0,30165	1,052E-01	4,951E-01	7,239E-03	3,407E-02	0
80	2	3	31	8	1021	0,30165	1,322E-01	6,248E-01	9,094E-03	4,299E-02	0
79	1	9	14	8	1021	0,3016	6,923E-03	1,032E-01	4,763E-04	7,098E-03	0
78	7	5	24	8	1021	0,30155	0,000E+00	1,916E-01	-3,950E-10	1,318E-02	0
77	2	7	23	8	1021	0,3015	0,000E+00	1,249E-01	1,018E-10	8,592E-03	0
76	5	0	31	4	1021	0,30141	0,000E+00	4,590E-01	1,340E-09	3,158E-02	0
75	12	0	20	4	1021	0,30129	0,000E+00	4,650E-01	1,744E-09	3,199E-02	0
74	11	6	11	8	1021	0,30099	0,000E+00	5,963E-02	1,465E-10	4,102E-03	0
73	0	10	0	2	1021	0,30091	0,000E+00	1,436E+00	-5,494E-10	9,878E-02	0
72	10	7	9	8	1021	0,30077	0,000E+00	2,827E-01	-6,177E-10	1,945E-02	0
71	9	8	3	8	1021	0,30067	0,000E+00	1,001E-01	-2,164E-10	6,886E-03	0
70	13	5	4	8	1021	0,30064	0,000E+00	5,312E-01	-1,294E-09	3,655E-02	0
69	9	4	23	8	1021	0,30063	0,000E+00	6,526E-01	-3,850E-10	4,490E-02	0
68	2	6	26	8	1021	0,30063	0,000E+00	5,801E-03	-2,493E-12	3,991E-04	0
67	12	6	4	8	1021	0,30049	0,000E+00	2,111E-02	1,085E-11	1,452E-03	180
66	7	7	18	8	1021	0,30046	0,000E+00	5,696E-01	-6,632E-10	3,919E-02	0
65	8	0	28	4	1021	0,30042	0,000E+00	1,017E+00	-6,979E-10	6,996E-02	0
64	2	2	32	8	1021	0,30041	0,000E+00	5,239E-03	8,303E-12	3,605E-04	180
63	0	10	2	4	1026	0,30035	0,000E+00	1,368E-01	4,565E-10	9,415E-03	0
62	13	0	17	4	1026	0,30031	0,000E+00	2,165E-01	-1,958E-10	1,489E-02	0
61	15	0	5	4	1026	0,30026	0,000E+00	1,359E-01	-5,144E-11	9,351E-03	0
60	1	10	1	8	1026	0,30012	0,000E+00	4,205E-01	-7,093E-11	2,893E-02	0
59	15	1	4	8	1026	0,3	0,000E+00	5,213E-01	1,503E-09	3,586E-02	0
58	13	3	14	8	1026	0,2997	0,000E+00	9,736E-02	-2,300E-10	6,699E-03	0
57	10	2	24	8	1026	0,29969	0,000E+00	1,516E-02	-9,655E-12	1,043E-03	0
56	8	6	20	8	1026	0,29963	0,000E+00	4,393E-01	-4,885E-10	3,022E-02	0
55	13	4	11	8	1026	0,29959	0,000E+00	5,744E-02	9,484E-11	3,952E-03	0
54	2	4	30	8	1026	0,2996	0,000E+00	5,071E-01	3,298E-11	3,489E-02	0
53	4	8	18	8	1026	0,29956	0,000E+00	2,239E-02	4,576E-11	1,541E-03	180
52	0	8	20	4	1026	0,29949	0,000E+00	4,373E-01	-2,799E-10	3,009E-02	0
51	7	8	13	8	1026	0,29945	0,000E+00	2,017E-01	-7,394E-11	1,388E-02	0
50	1	0	33	4	1026	0,29938	0,000E+00	4,486E-03	-8,273E-13	3,086E-04	0
49	5	9	10	8	1026	0,29921	0,000E+00	3,619E-01	4,355E-10	2,490E-02	0
48	8	8	10	8	1026	0,2992	0,000E+00	1,584E-03	2,365E-13	1,090E-04	180

47	6	9	7	8	1026	0,29908	0,000E+00	2,951E-02	6,481E-11	2,030E-03	180
46	1	10	3	8	1026	0,29902	0,000E+00	9,524E-02	-1,798E-11	6,552E-03	0
45	3	8	19	8	1026	0,29902	0,000E+00	3,290E-02	1,331E-11	2,264E-03	0
44	3	5	28	8	1026	0,29891	0,000E+00	1,869E-01	-2,570E-10	1,286E-02	0
43	11	5	16	8	1026	0,29888	0,000E+00	8,308E-02	1,521E-10	5,716E-03	0
42	10	3	23	8	1026	0,29871	0,000E+00	1,157E-01	4,517E-10	7,963E-03	0
41	14	4	0	4	1026	0,29871	0,000E+00	1,323E+00	-3,433E-09	9,100E-02	0
40	0	10	4	4	1026	0,29871	0,000E+00	1,801E-02	-7,886E-12	1,239E-03	180
39	4	0	32	4	1026	0,29858	0,000E+00	4,064E-03	8,882E-12	2,796E-04	180
38	0	1	33	4	1026	0,29855	0,000E+00	8,433E-01	4,989E-10	5,802E-02	0
37	5	8	17	8	1026	0,29853	0,000E+00	2,040E-01	-5,030E-11	1,403E-02	0
36	11	0	23	4	1026	0,29848	0,000E+00	6,062E-01	-2,449E-10	4,170E-02	0
35	9	8	5	8	1026	0,29848	0,000E+00	1,295E-01	-1,120E-11	8,908E-03	0
34	2	10	0	4	1026	0,29832	0,000E+00	1,303E+00	9,397E-10	8,967E-02	0
33	11	7	0	4	1026	0,29828	0,000E+00	6,835E-02	3,841E-12	4,703E-03	0
32	8	5	23	8	1026	0,29827	0,000E+00	1,143E-01	-3,153E-10	7,866E-03	0
31	0	9	15	4	1026	0,29826	0,000E+00	1,905E-03	4,711E-12	1,310E-04	180
30	14	4	2	8	1026	0,29817	0,000E+00	1,296E-01	-1,379E-10	8,916E-03	0
29	14	3	9	8	1026	0,298	0,000E+00	2,592E-01	6,961E-10	1,783E-02	0
28	10	5	19	8	1026	0,29801	0,000E+00	6,913E-01	-7,279E-10	4,756E-02	0
27	13	5	6	8	1026	0,2979	0,000E+00	1,755E-01	-2,360E-10	1,208E-02	0
26	14	1	13	8	1026	0,29781	0,000E+00	4,955E-02	8,487E-11	3,409E-03	0
25	11	4	19	8	1026	0,29778	0,000E+00	3,233E-02	6,722E-12	2,224E-03	0
24	2	10	2	8	1026	0,29778	0,000E+00	1,283E-01	-2,281E-11	8,830E-03	0
23	12	6	6	8	1026	0,29776	0,000E+00	6,706E-01	-7,503E-10	4,614E-02	0
22	11	7	2	8	1026	0,29774	0,000E+00	2,463E-01	9,068E-10	1,695E-02	0
21	15	2	1	8	1026	0,29763	0,000E+00	3,900E-01	-3,180E-10	2,684E-02	0
20	10	1	25	8	1026	0,29745	0,000E+00	1,122E+00	-1,760E-09	7,718E-02	0
19	7	9	0	4	1026	0,29741	0,000E+00	6,661E-02	1,082E-10	4,582E-03	0
18	6	3	29	8	1026	0,29739	0,000E+00	3,827E-03	-2,582E-12	2,633E-04	180
17	9	7	14	8	1026	0,29732	0,000E+00	9,044E-02	1,748E-10	6,223E-03	0
16	12	4	16	8	1026	0,29729	0,000E+00	2,848E-01	-6,298E-11	1,959E-02	0
15	15	1	6	8	1026	0,29729	0,000E+00	1,721E-01	1,826E-10	1,184E-02	0
14	1	7	24	8	1021	0,29691	0,000E+00	1,981E+03	1,955E+03	2,006E+03	0
13	15	0	7	4	1021	0,29691	0,000E+00	1,981E+03	1,955E+03	2,006E+03	0
12	9	0	27	4	1021	0,29689	0,000E+00	1,981E+03	1,955E+03	2,006E+03	0
11	0	5	29	4	1021	0,29686	0,000E+00	1,981E+03	1,955E+03	2,005E+03	0
10	2	8	20	8	1021	0,29684	0,000E+00	1,981E+03	1,955E+03	2,005E+03	0
9	7	9	2	8	1021	0,29677	0,000E+00	1,980E+03	1,954E+03	2,005E+03	0
8	1	10	5	8	1021	0,29676	0,000E+00	1,980E+03	1,954E+03	2,005E+03	0
7	14	2	12	8	1021	0,29673	0,000E+00	1,980E+03	1,954E+03	2,005E+03	0
6	7	3	28	8	1021	0,29671	0,000E+00	1,980E+03	1,954E+03	2,004E+03	0
5	6	2	30	8	1021	0,29664	0,000E+00	1,979E+03	1,954E+03	2,004E+03	0
4	15	2	3	8	1021	0,29647	0,000E+00	1,978E+03	1,952E+03	2,003E+03	0
3	14	4	4	8	1021	0,29647	0,000E+00	1,978E+03	1,952E+03	2,003E+03	0
2	3	9	14	8	1021	0,29635	0,000E+00	1,978E+03	1,952E+03	2,002E+03	0
1	5	3	30	8	1021	0,29635	0,000E+00	1,978E+03	1,952E+03	2,002E+03	0

Tabelle A5: Gemessene und berechnete Struktur Faktoren von Ag_2NiO_2 aus Röntgenpulverdaten

h	k	l	2Theta	D-Value	Mult.	Fobs	Fcalc	Icalc	Iobs
0	0	3	11,009	8,03	2	12,818	13,173	203	192
0	0	9	33,45	2,677	2	47,451	46,299	290	304
1	0	1	35,588	2,52	6	19,533	18,613	125	138
0	1	2	36,188	2,48	6	33,613	32,896	380	396
1	0	4	38,506	2,336	6	35,12	34,58	375	386
0	1	5	40,169	2,243	6	58,688	58,15	982	1000
1	0	7	44,351	2,041	6	36,474	36,734	329	324
0	0	12	45,127	2,007	2	33,937	32,61	84	91
0	1	8	46,812	1,939	6	6,302	6,261	9	9
1	0	10	52,354	1,746	6	33,246	33,156	202	204
0	1	11	55,401	1,657	6	10,268	10,352	18	18
0	0	15	57,323	1,606	2	13,857	12,943	9	10
1	0	13	61,986	1,496	6	16,951	17,372	43	41
1	1	0	63,526	1,463	6	48,989	49,112	329	328
1	1	3	64,698	1,44	12	11,116	11,447	35	33
0	1	14	65,514	1,424	6	37,431	38,775	196	183
0	0	18	70,278	1,338	2	25,648	24,371	24	26
1	0	16	73,036	1,294	6	15,398	15,846	28	27
1	1	9	73,73	1,284	12	30,337	32,418	235	206
0	2	1	74,988	1,265	6	11,85	11,607	15	15
2	0	2	75,352	1,26	6	19,957	19,287	40	43
0	2	4	76,8	1,24	6	21,99	21,731	50	51
0	1	17	77,039	1,237	6	13,402	13,461	19	19
2	0	5	77,881	1,226	6	33,895	33,264	116	120
0	2	7	80,743	1,189	6	22,398	22,152	49	50
1	1	12	81,296	1,182	12	20,188	20,914	87	81
0	0	21	84,364	1,147	2	18,241	17,704	10	11
1	0	19	85,58	1,134	6	29,404	29,539	83	82
0	2	10	86,757	1,121	6	20,871	20,99	41	41
2	0	11	89,219	1,097	6	7,609	7,992	6	5
1	1	15	90,82	1,082	12	9,118	9,409	16	15
0	2	13	94,849	1,046	6	10,26	10,61	10	9
2	0	14	98,033	1,02	6	25,316	25,867	58	55
0	0	24	100,245	1,004	2	21,567	20,61	12	13
1	1	18	102,518	0,988	12	17,045	16,844	48	49
0	2	16	105,214	0,969	6	12,377	12,019	12	13
0	1	23	105,455	0,968	6	21,639	20,202	34	39
2	1	1	107,169	0,957	12	8,379	8,162	11	12
1	2	2	107,537	0,955	12	14,982	14,413	35	38
2	1	4	109,018	0,946	12	16,08	15,666	41	43
2	0	17	109,263	0,945	6	9,775	9,432	7	8
1	2	5	110,137	0,94	12	25,18	23,416	92	106
2	1	7	113,163	0,923	12	17,177	16,444	45	49
1	1	21	117,129	0,903	12	14,2	13,539	31	34
1	0	25	117,567	0,901	6	9,209	8,852	7	7
0	2	19	118,499	0,896	6	21,634	20,28	35	40
2	1	10	119,843	0,89	12	15,631	15,189	40	42
1	2	11	122,723	0,878	12	6,237	6,581	8	7
0	1	26	124,547	0,87	6	12,612	12,672	14	14

Tabelle A6: gemessene und berechnete Struktur Faktoren von Ag_2NiO_2 aus Neutronenpulverdaten, Raumtemperatur, Detektorbank 1

Iref	H	K	L	Mul	Icod	D-space	Fosq	Fcsq	FoTsq	FcTsq	Phas
46	0	0	3	2	1021	8,02488	2,99E+01	3,05E+01	1,03E+01	1,06E+01	0
45	0	0	6	2	1021	4,01244	1,71E+01	1,68E+01	4,83E+00	4,76E+00	0
44	0	0	9	2	1021	2,67496	4,75E+01	5,01E+01	1,26E+01	1,32E+01	0
43	1	0	1	6	1021	2,51897	8,08E+00	7,70E+00	2,12E+00	2,02E+00	0
42	1	0	-2	6	1021	2,47859	6,78E-03	8,15E-03	1,77E-03	2,13E-03	180
41	1	0	4	6	1021	2,33456	1,30E+01	1,28E+01	3,37E+00	3,32E+00	0
40	1	0	-5	6	1021	2,24163	3,01E+02	2,89E+02	7,78E+01	7,48E+01	0
39	1	0	7	6	1021	2,03947	2,78E+01	2,79E+01	7,12E+00	7,14E+00	180
38	0	0	12	2	1021	2,00622	4,82E+01	4,64E+01	1,23E+01	1,19E+01	180

37	1	0	-8	6	1021	1,93783	1,16E+02	1,20E+02	2,95E+01	3,07E+01	0
36	1	0	10	6	1021	1,74498	1,06E+02	1,16E+02	2,66E+01	2,93E+01	0
35	1	0	-11	6	1021	1,65602	3,15E+01	3,77E+01	7,90E+00	9,47E+00	0
34	0	0	15	2	1021	1,60498	0,00E+00	1,27E+01	-5,88E-08	3,18E+00	0
33	1	0	13	6	1021	1,49494	1,49E+02	1,51E+02	3,72E+01	3,76E+01	0
32	1	1	0	6	1021	1,46235	3,77E+02	3,66E+02	9,37E+01	9,10E+01	0
31	1	1	3	12	1021	1,43866	4,01E+01	3,89E+01	9,95E+00	9,65E+00	0
30	1	0	-14	6	1021	1,42271	1,51E+02	1,44E+02	3,75E+01	3,58E+01	0
29	1	1	6	12	1021	1,37395	1,85E+01	1,83E+01	4,58E+00	4,54E+00	0
28	0	0	18	2	1021	1,33748	1,13E+02	1,14E+02	2,79E+01	2,83E+01	0
27	1	0	16	6	1021	1,29362	3,23E+01	4,09E+01	7,96E+00	1,01E+01	0
26	1	1	9	12	1021	1,28313	5,15E+01	4,99E+01	1,27E+01	1,23E+01	0
25	2	0	-1	6	1021	1,26469	1,01E+01	8,40E+00	2,49E+00	2,07E+00	0
24	2	0	2	6	1021	1,25948	1,43E-02	1,14E-02	3,52E-03	2,80E-03	0
23	2	0	-4	6	1021	1,2393	1,46E+01	1,34E+01	3,60E+00	3,31E+00	0
22	1	0	-17	6	1021	1,23607	1,05E+01	1,07E+01	2,57E+00	2,63E+00	180
21	2	0	5	6	1021	1,22478	2,89E+02	2,70E+02	7,11E+01	6,63E+01	0
20	2	0	-7	6	1021	1,18842	1,74E+01	2,31E+01	4,26E+00	5,66E+00	180
19	1	1	12	12	1021	1,18174	3,65E+01	3,89E+01	8,95E+00	9,54E+00	180
18	2	0	8	6	1021	1,16728	1,17E+02	1,12E+02	2,87E+01	2,74E+01	0
17	0	0	21	2	1021	1,14641	9,88E+00	1,94E+01	2,42E+00	4,74E+00	0
16	1	0	19	6	1021	1,1332	2,15E+02	2,41E+02	5,26E+01	5,91E+01	0
15	2	0	-10	6	1021	1,12082	1,31E+02	1,08E+02	3,19E+01	2,64E+01	0
14	2	0	11	6	1021	1,09615	2,94E+01	3,56E+01	7,18E+00	8,69E+00	0
13	1	0	-20	6	1021	1,0872	2,42E+00	1,96E+00	5,91E-01	4,78E-01	180
12	1	1	15	12	1021	1,08095	1,68E+01	1,29E+01	4,10E+00	3,14E+00	0
11	2	0	-13	6	1021	1,04537	1,31E+02	1,38E+02	3,18E+01	3,35E+01	0
10	2	0	14	6	1021	1,01974	1,26E+02	1,33E+02	3,07E+01	3,22E+01	0
9	1	0	22	6	1021	1,00456	1,02E+01	1,05E+01	2,47E+00	2,56E+00	0
8	0	0	24	2	1021	1,00311	2,68E+02	2,50E+02	6,50E+01	6,08E+01	0
7	1	1	18	12	1026	0,98694	1,29E+02	1,05E+02	3,13E+01	2,55E+01	0
6	2	0	-16	6	1026	0,96892	4,28E+01	3,78E+01	1,04E+01	9,18E+00	0
5	1	0	-23	6	1026	0,96737	6,89E+01	6,02E+01	1,67E+01	1,46E+01	0
4	2	1	1	12	1026	0,95658	1,04E+01	8,67E+00	2,53E+00	2,10E+00	0
3	2	1	-2	12	1026	0,95432	9,16E-02	8,30E-02	2,22E-02	2,01E-02	0
2	2	1	4	12	1026	0,94545	2,27E+01	1,35E+01	5,49E+00	3,28E+00	0
1	2	0	17	6	1026	0,94402	1,36E+01	8,10E+00	3,29E+00	1,96E+00	180

Tabelle A7: gemessene und berechnete Struktur Faktoren von Ag_2NiO_2 aus Neutronenpulverdaten, Raumtemperatur, Detektorbank 2

Iref	H	K	L	Mul	Icod	D-space	Fosq	Fcsq	FoTsq	FcTsq	Phas
343	0	0	3	2	1021	8,02488	0,00E+00	3,67E+04	3,67E+04	3,68E+04	0
342	0	0	6	2	1021	4,01244	1,52E+01	1,19E+01	6,11E+00	4,76E+00	0
341	0	0	9	2	1021	2,67496	3,93E+01	3,53E+01	1,47E+01	1,32E+01	0
340	1	0	1	6	1021	2,51897	5,59E+00	5,43E+00	2,08E+00	2,02E+00	0
339	1	0	-2	6	1021	2,47859	2,34E-01	5,74E-03	8,70E-02	2,13E-03	180
338	1	0	4	6	1021	2,33456	8,89E+00	8,99E+00	3,28E+00	3,32E+00	0
337	1	0	-5	6	1021	2,24163	2,01E+02	2,04E+02	7,39E+01	7,48E+01	0
336	1	0	7	6	1021	2,03947	2,07E+01	1,96E+01	7,52E+00	7,14E+00	180
335	0	0	12	2	1021	2,00622	3,42E+01	3,27E+01	1,24E+01	1,19E+01	180
334	1	0	-8	6	1021	1,93783	8,27E+01	8,48E+01	2,99E+01	3,07E+01	0
333	1	0	10	6	1021	1,74498	8,06E+01	8,19E+01	2,89E+01	2,93E+01	0
332	1	0	-11	6	1021	1,65602	2,80E+01	2,66E+01	9,98E+00	9,47E+00	0
331	0	0	15	2	1021	1,60498	0,00E+00	8,95E+00	-5,88E-08	3,18E+00	0
330	1	0	13	6	1021	1,49494	1,19E+02	1,06E+02	4,21E+01	3,76E+01	0
329	1	1	0	6	1021	1,46235	2,75E+02	2,58E+02	9,70E+01	9,10E+01	0
328	1	1	3	12	1021	1,43866	2,87E+01	2,74E+01	1,01E+01	9,65E+00	0
327	1	0	-14	6	1021	1,42271	1,03E+02	1,02E+02	3,61E+01	3,58E+01	0
326	1	1	6	12	1021	1,37395	1,18E+01	1,29E+01	4,15E+00	4,54E+00	0
325	0	0	18	2	1021	1,33748	6,25E+01	8,06E+01	2,19E+01	2,83E+01	0
324	1	0	16	6	1021	1,29362	2,31E+01	2,88E+01	8,06E+00	1,01E+01	0
323	1	1	9	12	1021	1,28313	3,29E+01	3,52E+01	1,15E+01	1,23E+01	0
322	2	0	-1	6	1021	1,26469	3,90E+00	5,92E+00	1,36E+00	2,07E+00	0
321	2	0	2	6	1021	1,25948	4,20E-03	8,02E-03	1,47E-03	2,80E-03	0
320	2	0	-4	6	1021	1,2393	1,35E+01	9,47E+00	4,72E+00	3,31E+00	0
319	1	0	-17	6	1021	1,23607	9,65E+00	7,54E+00	3,37E+00	2,63E+00	180
318	2	0	5	6	1021	1,22478	2,04E+02	1,90E+02	7,10E+01	6,63E+01	0
317	2	0	-7	6	1021	1,18842	1,35E+01	1,63E+01	4,68E+00	5,66E+00	180
316	1	1	12	12	1021	1,18174	2,50E+01	2,74E+01	8,70E+00	9,54E+00	180

315	2	0	8	6	1021	1,16728	7,32E+01	7,88E+01	2,54E+01	2,74E+01	0
314	0	0	21	2	1021	1,14641	1,22E+01	1,37E+01	4,22E+00	4,74E+00	0
313	1	0	19	6	1021	1,1332	1,65E+02	1,70E+02	5,72E+01	5,91E+01	0
312	2	0	-10	6	1021	1,12082	7,09E+01	7,62E+01	2,46E+01	2,64E+01	0
311	2	0	11	6	1021	1,09615	1,32E+01	2,51E+01	4,59E+00	8,69E+00	0
310	1	0	-20	6	1021	1,0872	2,45E-01	1,38E+00	8,47E-02	4,78E-01	180
309	1	1	15	12	1021	1,08095	4,72E+00	9,08E+00	1,63E+00	3,14E+00	0
308	2	0	-13	6	1021	1,04537	6,58E+01	9,71E+01	2,27E+01	3,35E+01	0
307	2	0	14	6	1021	1,01974	7,85E+01	9,34E+01	2,71E+01	3,22E+01	0
306	1	0	22	6	1021	1,00456	5,66E+00	7,42E+00	1,95E+00	2,56E+00	0
305	0	0	24	2	1021	1,00311	1,52E+02	1,76E+02	5,23E+01	6,08E+01	0
304	1	1	18	12	1021	0,98694	6,55E+01	7,39E+01	2,25E+01	2,55E+01	0
303	2	0	-16	6	1021	0,96892	2,13E+01	2,67E+01	7,33E+00	9,18E+00	0
302	1	0	-23	6	1021	0,96737	3,90E+01	4,24E+01	1,34E+01	1,46E+01	0
301	2	1	1	12	1021	0,95658	6,32E+00	6,11E+00	2,17E+00	2,10E+00	0
300	2	1	-2	12	1021	0,95432	6,93E-02	5,85E-02	2,38E-02	2,01E-02	0
299	2	1	4	12	1021	0,94545	9,59E+00	9,53E+00	3,30E+00	3,28E+00	0
298	2	0	17	6	1021	0,94402	5,37E+00	5,71E+00	1,84E+00	1,96E+00	180
297	2	1	-5	12	1021	0,93896	1,71E+02	1,71E+02	5,88E+01	5,88E+01	0
296	2	1	7	12	1021	0,92227	1,08E+01	1,30E+01	3,71E+00	4,45E+00	180
295	2	1	-8	12	1021	0,91228	7,47E+01	7,13E+01	2,56E+01	2,45E+01	0
294	1	1	21	12	1021	0,90222	1,19E+01	1,29E+01	4,07E+00	4,43E+00	0
293	2	0	-19	6	1021	0,89573	1,42E+02	1,53E+02	4,86E+01	5,24E+01	0
292	1	0	25	6	1021	0,90012	4,01E+00	4,64E+00	1,37E+00	1,59E+00	180
291	0	0	27	2	1021	0,89165	7,04E+01	7,01E+01	2,41E+01	2,40E+01	0
290	2	1	10	12	1021	0,88958	7,10E+01	6,95E+01	2,43E+01	2,38E+01	0
289	2	1	-11	12	1021	0,8771	2,48E+01	2,33E+01	8,50E+00	7,98E+00	0
288	2	0	20	6	1021	0,87249	1,94E-01	8,26E-01	6,63E-02	2,83E-01	180
287	1	0	-26	6	1021	0,86966	0,00E+00	9,78E-01	5,81E-10	3,35E-01	0
286	2	1	13	12	1021	0,85042	9,39E+01	8,75E+01	3,21E+01	2,99E+01	0
285	3	0	0	6	1021	0,84429	2,25E+02	2,08E+02	7,68E+01	7,09E+01	0
284	3	0	-3	6	1021	0,83966	2,70E+01	2,37E+01	9,23E+00	8,11E+00	0
283	3	0	3	6	1021	0,83966	2,70E+01	2,37E+01	9,23E+00	8,11E+00	0
282	2	1	-14	12	1021	0,83645	9,39E+01	8,48E+01	3,21E+01	2,90E+01	0
281	2	0	-22	6	1021	0,82801	8,02E+00	7,35E+00	2,74E+00	2,51E+00	0
280	1	1	24	12	1021	0,8272	1,74E+02	1,58E+02	5,93E+01	5,38E+01	0
279	3	0	-6	6	1021	0,8262	1,36E+01	1,21E+01	4,65E+00	4,12E+00	0
278	3	0	6	6	1021	0,8262	1,36E+01	1,21E+01	4,65E+00	4,12E+00	0
277	1	0	28	6	1021	0,81418	3,21E+01	2,53E+01	1,09E+01	8,63E+00	0
276	2	1	16	12	1021	0,80771	2,67E+01	2,45E+01	9,12E+00	8,37E+00	0
275	2	0	23	6	1021	0,80682	4,26E+01	3,93E+01	1,45E+01	1,34E+01	0
274	3	0	-9	6	1021	0,80514	3,47E+01	3,11E+01	1,19E+01	1,06E+01	0
273	3	0	9	6	1021	0,80514	3,47E+01	3,11E+01	1,19E+01	1,06E+01	0
272	0	0	30	2	1021	0,80249	3,95E-01	2,70E-01	1,35E-01	9,20E-02	180
271	2	1	-17	12	1021	0,79311	3,81E-02	4,23E+00	1,30E-02	1,44E+00	180
270	1	0	-29	6	1021	0,78887	8,05E+01	9,59E+01	2,75E+01	3,27E+01	0
269	3	0	12	6	1021	0,77819	1,14E+01	1,79E+01	3,90E+00	6,09E+00	180
268	3	0	-12	6	1021	0,77819	1,14E+01	1,79E+01	3,90E+00	6,09E+00	180
267	2	0	-25	6	1021	0,76655	3,46E+00	3,36E+00	1,18E+00	1,15E+00	180
266	2	1	19	12	1021	0,76383	1,32E+02	1,37E+02	4,49E+01	4,66E+01	0
265	1	1	27	12	1021	0,7613	5,46E+01	6,34E+01	1,86E+01	2,16E+01	0
264	2	1	-20	12	1021	0,74927	0,00E+00	4,42E-01	-3,04E-09	1,50E-01	180
263	2	0	26	6	1021	0,74747	0,00E+00	1,14E+00	-8,65E-09	3,89E-01	0
262	3	0	-15	6	1021	0,74721	0,00E+00	8,88E+00	-1,05E-07	3,02E+00	0
261	3	0	15	6	1021	0,74721	0,00E+00	8,88E+00	-1,05E-07	3,02E+00	0
260	1	0	31	6	1021	0,74248	0,00E+00	8,40E-01	-1,35E-08	2,86E-01	180
259	2	2	0	6	1021	0,73118	1,61E+02	1,85E+02	5,47E+01	6,27E+01	0
258	0	0	33	2	1021	0,72953	2,32E+01	2,66E+01	7,88E+00	9,02E+00	0
257	2	2	3	12	1021	0,72816	1,92E+01	2,19E+01	6,51E+00	7,44E+00	0
256	1	0	-32	6	1021	0,72119	1,34E+02	1,31E+02	4,57E+01	4,44E+01	0
255	2	1	22	12	1021	0,72053	7,32E+00	7,23E+00	2,49E+00	2,46E+00	0
254	2	2	6	12	1021	0,71933	1,16E+01	1,16E+01	3,94E+00	3,92E+00	0
253	3	0	-18	6	1021	0,71394	5,57E+01	6,10E+01	1,89E+01	2,07E+01	0
252	3	0	18	6	1021	0,71394	5,57E+01	6,10E+01	1,89E+01	2,07E+01	0
251	2	0	-28	6	1021	0,71136	2,49E+01	2,38E+01	8,46E+00	8,09E+00	0
250	2	1	-23	12	1021	0,70643	3,78E+01	3,63E+01	1,28E+01	1,23E+01	0
249	2	2	9	12	1021	0,7053	2,88E+01	2,90E+01	9,79E+00	9,83E+00	0
248	1	1	30	12	1021	0,70352	1,14E-01	1,09E-01	3,87E-02	3,70E-02	180
247	3	1	-1	12	1021	0,70219	7,11E+00	6,26E+00	2,41E+00	2,12E+00	0
246	3	1	2	12	1021	0,7013	2,77E-01	2,52E-01	9,41E-02	8,54E-02	0
245	3	1	-4	12	1021	0,69775	1,11E+01	9,34E+00	3,76E+00	3,17E+00	0
244	3	1	5	12	1021	0,69513	1,39E+02	1,36E+02	4,71E+01	4,63E+01	0
243	2	0	29	6	1021	0,69429	8,39E+01	8,59E+01	2,85E+01	2,91E+01	0
242	3	1	-7	12	1021	0,68828	6,26E+00	7,92E+00	2,12E+00	2,69E+00	180
241	2	2	12	12	1021	0,68697	1,40E+01	1,42E+01	4,74E+00	4,82E+00	180
240	3	1	8	12	1021	0,6841	5,52E+01	5,78E+01	1,87E+01	1,96E+01	0
239	1	0	34	6	1021	0,68193	2,05E+01	2,25E+01	6,96E+00	7,61E+00	0

238	3	0	-21	6	1021	0,67982	1,01E+01	1,14E+01	3,43E+00	3,86E+00	0
237	3	0	21	6	1021	0,67982	1,01E+01	1,14E+01	3,43E+00	3,86E+00	0
236	2	1	25	12	1021	0,67893	2,07E+00	2,37E+00	7,02E-01	8,04E-01	180
235	3	1	-10	12	1021	0,67437	4,34E+01	5,73E+01	1,47E+01	1,94E+01	0
234	3	1	11	12	1021	0,66888	2,13E+01	1,99E+01	7,21E+00	6,75E+00	0
233	0	0	36	2	1021	0,66874	6,97E-01	6,55E-01	2,36E-01	2,22E-01	180
232	2	1	-26	12	1021	0,66556	9,42E-01	1,30E+00	3,19E-01	4,39E-01	0
231	2	2	15	12	1021	0,66538	6,28E+00	8,70E+00	2,13E+00	2,95E+00	0
230	1	0	-35	6	1021	0,6638	2,96E+00	4,79E+00	1,00E+00	1,62E+00	0
229	2	0	-31	6	1021	0,66204	2,70E-01	4,81E-01	9,13E-02	1,63E-01	180
228	3	1	-13	12	1021	0,65682	7,25E+01	7,07E+01	2,46E+01	2,39E+01	0
227	1	1	33	12	1021	0,65281	2,96E+01	2,48E+01	1,00E+01	8,41E+00	0
226	3	1	14	12	1021	0,65032	8,14E+01	6,94E+01	2,75E+01	2,35E+01	0
225	2	0	32	6	1021	0,64681	1,15E+02	1,16E+02	3,90E+01	3,94E+01	0
224	3	0	-24	6	1021	0,64594	1,16E+02	1,25E+02	3,93E+01	4,23E+01	0
223	3	0	24	6	1021	0,64594	1,16E+02	1,25E+02	3,93E+01	4,23E+01	0
222	2	2	18	12	1021	0,64157	5,13E+01	5,52E+01	1,74E+01	1,87E+01	0
221	2	1	28	12	1021	0,63969	2,15E+01	2,24E+01	7,26E+00	7,57E+00	0
220	3	1	-16	12	1021	0,63654	2,36E+01	2,06E+01	7,97E+00	6,98E+00	0
219	4	0	1	6	1021	0,633	9,09E+00	6,25E+00	3,07E+00	2,11E+00	0
218	4	0	-2	6	1021	0,63234	5,37E-01	3,73E-01	1,82E-01	1,26E-01	0
217	1	0	37	6	1021	0,6302	1,50E+02	1,30E+02	5,08E+01	4,41E+01	0
216	4	0	4	6	1021	0,62974	1,01E+01	9,17E+00	3,43E+00	3,10E+00	0
215	3	1	17	12	1021	0,62932	2,29E+00	2,15E+00	7,75E-01	7,25E-01	180
214	4	0	-5	6	1021	0,62781	1,15E+02	1,22E+02	3,88E+01	4,11E+01	0
213	2	1	-29	12	1021	0,62719	6,83E+01	7,69E+01	2,31E+01	2,60E+01	0
212	4	0	7	6	1021	0,62275	9,19E+00	6,07E+00	3,11E+00	2,05E+00	180
211	4	0	-8	6	1021	0,61965	7,01E+01	5,20E+01	2,37E+01	1,76E+01	0
210	2	0	-34	6	1021	0,61804	2,67E+01	2,08E+01	9,04E+00	7,02E+00	0
209	0	0	39	2	1021	0,6173	5,79E-03	4,50E-03	1,96E-03	1,52E-03	0
208	2	2	21	12	1021	0,61647	1,34E+01	1,07E+01	4,54E+00	3,61E+00	0
207	1	0	-38	6	1021	0,61461	3,99E+01	3,74E+01	1,35E+01	1,26E+01	0
206	3	1	-19	12	1021	0,61439	1,13E+02	1,09E+02	3,82E+01	3,69E+01	0
205	3	0	-27	6	1021	0,61306	4,44E+01	5,17E+01	1,50E+01	1,75E+01	0
204	3	0	27	6	1021	0,61306	4,44E+01	5,17E+01	1,50E+01	1,75E+01	0
203	1	1	36	12	1021	0,60816	2,78E-01	3,43E-01	9,38E-02	1,16E-01	180
202	4	0	10	6	1021	0,61239	3,98E+01	5,19E+01	1,35E+01	1,75E+01	0
201	3	1	20	12	1021	0,60673	4,47E-02	5,97E-02	1,51E-02	2,02E-02	180
200	2	0	35	6	1021	0,60445	0,00E+00	4,70E+00	-2,58E-09	1,59E+00	0
199	4	0	-11	6	1021	0,60827	1,46E+01	1,84E+01	4,93E+00	6,21E+00	0
198	2	1	31	12	1021	0,60311	0,00E+00	2,42E-01	3,12E-10	8,15E-02	180
197	4	0	13	6	1021	0,59916	6,53E+01	6,34E+01	2,21E+01	2,14E+01	0
196	4	0	-14	6	1021	0,59421	8,57E+01	6,27E+01	2,89E+01	2,12E+01	0
195	2	1	-32	12	1021	0,59153	1,01E+02	1,04E+02	3,39E+01	3,50E+01	0
194	3	1	-22	12	1021	0,59116	6,22E+00	6,90E+00	2,10E+00	2,33E+00	0
193	2	2	24	12	1021	0,59087	9,49E+01	1,11E+02	3,20E+01	3,75E+01	0
192	1	0	40	6	1021	0,58556	1,13E+01	1,65E+01	3,82E+00	5,58E+00	0
191	4	0	16	6	1021	0,58364	1,73E+01	1,89E+01	5,82E+00	6,38E+00	0
190	3	1	23	12	1021	0,5833	2,98E+01	3,09E+01	1,01E+01	1,04E+01	0
189	3	0	-30	6	1021	0,58166	2,46E-05	2,04E-05	8,29E-06	6,88E-06	180
188	3	0	30	6	1021	0,58166	2,46E-05	2,04E-05	8,29E-06	6,88E-06	180
187	3	2	1	12	1021	0,58091	8,15E+00	6,21E+00	2,75E+00	2,09E+00	0
186	3	2	-2	12	1021	0,5804	6,69E-01	5,01E-01	2,26E-01	1,69E-01	0
185	2	0	-37	6	1021	0,57875	1,34E+02	1,16E+02	4,51E+01	3,91E+01	0
184	3	2	4	12	1021	0,57839	9,89E+00	8,95E+00	3,33E+00	3,02E+00	0
183	4	0	-17	6	1021	0,57806	1,54E+00	1,46E+00	5,21E-01	4,91E-01	180
182	3	2	-5	12	1021	0,57689	9,72E+01	1,08E+02	3,28E+01	3,65E+01	0
181	0	0	42	2	1021	0,57321	7,72E+01	8,30E+01	2,60E+01	2,80E+01	0
180	3	2	7	12	1021	0,57296	4,42E+00	4,60E+00	1,49E+00	1,55E+00	180
179	1	0	-41	6	1021	0,57202	2,80E+00	2,55E+00	9,45E-01	8,58E-01	0
178	3	2	-8	12	1021	0,57054	5,59E+01	4,68E+01	1,89E+01	1,58E+01	0
177	2	1	34	12	1021	0,56928	2,52E+01	1,92E+01	8,51E+00	6,48E+00	0
176	1	1	39	12	1021	0,56871	6,08E-02	4,54E-02	2,05E-02	1,53E-02	0
175	3	1	-25	12	1021	0,56753	1,26E+00	1,06E+00	4,25E-01	3,56E-01	180
174	2	0	38	6	1021	0,5666	3,41E+01	3,42E+01	1,15E+01	1,15E+01	0
173	4	0	19	6	1021	0,56643	9,35E+01	9,74E+01	3,15E+01	3,28E+01	0
172	2	2	27	12	1021	0,56539	3,57E+01	4,66E+01	1,20E+01	1,57E+01	0
171	3	2	10	12	1021	0,56486	3,24E+01	4,70E+01	1,09E+01	1,59E+01	0
170	3	2	-11	12	1021	0,56162	7,56E+00	1,70E+01	2,55E+00	5,72E+00	0
169	4	0	-20	6	1021	0,56041	2,01E-03	4,24E-03	6,76E-04	1,43E-03	180
168	3	1	26	12	1021	0,55965	7,16E-01	1,56E+00	2,41E-01	5,25E-01	0
167	2	1	-35	12	1021	0,55861	2,14E+00	4,60E+00	7,21E-01	1,55E+00	0
166	3	2	13	12	1021	0,55443	7,36E+01	5,69E+01	2,48E+01	1,92E+01	0
165	4	1	0	12	1021	0,55272	1,21E+02	1,29E+02	4,06E+01	4,35E+01	0
164	3	0	-33	6	1021	0,55201	1,88E+01	2,17E+01	6,32E+00	7,29E+00	0
163	3	0	33	6	1021	0,55201	1,88E+01	2,17E+01	6,32E+00	7,29E+00	0
162	4	1	-3	12	1021	0,55141	1,45E+01	1,72E+01	4,87E+00	5,78E+00	0

161	4	1	3	12	1021	0,55141	1,45E+01	1,72E+01	4,87E+00	5,78E+00	0
160	3	2	-14	12	1021	0,5505	4,79E+01	5,66E+01	1,61E+01	1,91E+01	0
159	4	0	22	6	1021	0,54807	6,66E+00	6,70E+00	2,24E+00	2,26E+00	0
158	4	1	-6	12	1021	0,54755	8,46E+00	9,97E+00	2,85E+00	3,36E+00	0
157	4	1	6	12	1021	0,54755	8,46E+00	9,97E+00	2,85E+00	3,36E+00	0
156	1	0	43	6	1021	0,54668	2,47E+01	4,65E+01	8,31E+00	1,57E+01	0
155	3	1	-28	12	1021	0,544	1,59E+01	1,97E+01	5,34E+00	6,62E+00	0
154	2	0	-40	6	1021	0,5436	1,45E+01	1,52E+01	4,87E+00	5,13E+00	0
153	3	2	16	12	1021	0,54206	1,92E+01	1,73E+01	6,45E+00	5,84E+00	0
152	4	0	-23	6	1021	0,54179	3,09E+01	2,85E+01	1,04E+01	9,59E+00	0
151	4	1	9	12	1021	0,54128	2,40E+01	2,33E+01	8,09E+00	7,83E+00	0
150	4	1	-9	12	1021	0,54128	2,40E+01	2,33E+01	8,09E+00	7,83E+00	0
149	2	2	30	12	1021	0,54048	1,71E-02	1,81E-02	5,75E-03	6,08E-03	0
148	2	1	37	12	1021	0,53814	8,95E+01	1,03E+02	3,01E+01	3,47E+01	0
147	3	2	-17	12	1021	0,53758	8,55E-01	9,47E-01	2,88E-01	3,19E-01	180
146	3	1	29	12	1021	0,53626	5,60E+01	6,17E+01	1,89E+01	2,08E+01	0
145	0	0	45	2	1021	0,53499	1,62E+01	2,04E+01	5,46E+00	6,86E+00	0
144	1	0	-44	6	1021	0,53481	4,17E+00	5,31E+00	1,40E+00	1,79E+00	180
143	1	1	42	12	1021	0,53367	5,44E+01	7,44E+01	1,83E+01	2,50E+01	0
142	4	1	12	12	1021	0,53286	4,81E+00	6,78E+00	1,62E+00	2,28E+00	180
141	4	1	-12	12	1021	0,53286	4,81E+00	6,78E+00	1,62E+00	2,28E+00	180
140	2	0	41	6	1021	0,53271	1,92E+00	2,70E+00	6,45E-01	9,09E-01	0
139	4	0	25	6	1021	0,52908	7,65E-01	6,50E-01	2,57E-01	2,19E-01	180
138	2	1	-38	12	1021	0,52833	3,24E+01	3,13E+01	1,09E+01	1,05E+01	0
137	3	2	19	12	1021	0,52819	8,92E+01	8,69E+01	3,00E+01	2,92E+01	0
136	3	0	36	6	1021	0,52422	0,00E+00	4,11E-02	8,39E-11	1,38E-02	180
135	3	0	-36	6	1021	0,52422	0,00E+00	4,11E-02	-2,08E-11	1,38E-02	180
134	3	2	-20	12	1021	0,5233	0,00E+00	9,08E-03	3,27E-11	3,05E-03	0
133	4	0	-26	6	1021	0,52268	0,00E+00	1,67E+00	2,57E-08	5,61E-01	0
132	4	1	-15	12	1021	0,5226	0,00E+00	7,98E+00	-1,03E-08	2,68E+00	0
131	4	1	15	12	1021	0,5226	0,00E+00	7,98E+00	-1,03E-08	2,68E+00	0
130	3	1	-31	12	1021	0,52097	0,00E+00	2,07E-02	-1,79E-10	6,94E-03	180
129	2	2	33	12	1021	0,51644	3,59E+01	2,02E+01	1,21E+01	6,78E+00	0
128	3	1	32	12	1021	0,51345	9,42E+01	8,23E+01	3,17E+01	2,77E+01	0
127	3	2	22	12	1021	0,51321	7,33E+00	6,49E+00	2,46E+00	2,18E+00	0
126	1	0	46	6	1021	0,51253	2,54E+01	2,38E+01	8,53E+00	8,01E+00	0
125	2	0	-43	6	1021	0,51207	4,21E+01	4,20E+01	1,41E+01	1,41E+01	0
124	4	1	18	12	1021	0,51082	3,59E+01	4,10E+01	1,21E+01	1,38E+01	0
123	4	1	-18	12	1021	0,51082	3,59E+01	4,10E+01	1,21E+01	1,38E+01	0
122	4	0	28	6	1021	0,50987	1,54E+01	1,84E+01	5,18E+00	6,19E+00	0
121	2	1	40	12	1021	0,50953	1,17E+01	1,40E+01	3,93E+00	4,72E+00	0
120	3	2	-23	12	1021	0,50804	1,81E+01	2,62E+01	6,07E+00	8,82E+00	0
119	5	0	-1	6	1021	0,50646	3,17E+00	6,04E+00	1,06E+00	2,03E+00	0
118	5	0	2	6	1021	0,50613	3,99E-01	7,53E-01	1,34E-01	2,53E-01	0
117	5	0	-4	6	1021	0,50479	6,21E+00	8,44E+00	2,09E+00	2,84E+00	0
116	5	0	5	6	1021	0,50379	5,41E+01	8,60E+01	1,82E+01	2,89E+01	0
115	4	0	-29	6	1021	0,50347	3,08E+01	5,53E+01	1,03E+01	1,86E+01	0
114	1	1	45	12	1021	0,50242	6,13E+00	1,86E+01	2,06E+00	6,26E+00	0
113	2	0	44	6	1021	0,50228	1,19E+00	3,99E+00	3,99E-01	1,34E+00	180
112	1	0	-47	6	1021	0,50206	8,12E+00	3,25E+01	2,73E+00	1,09E+01	0
111	0	0	48	2	1021	0,50155	5,39E+00	4,05E+01	1,81E+00	1,36E+01	0
110	5	0	-7	6	1021	0,50117	1,37E-01	2,51E+00	4,59E-02	8,42E-01	180
109	2	1	-41	12	1026	0,50053	0,00E+00	2,83E+00	-2,96E-08	9,50E-01	0
108	5	0	8	6	1026	0,49955	0,00E+00	3,79E+01	3,79E-07	1,27E+01	0
107	3	1	-34	12	1026	0,4987	1,94E+00	1,64E+01	6,52E-01	5,52E+00	0
106	3	0	39	6	1026	0,49831	3,72E-02	2,11E-01	1,25E-02	7,08E-02	0
105	3	0	-39	6	1026	0,49831	3,72E-02	2,11E-01	1,25E-02	7,08E-02	0
104	4	1	21	12	1026	0,49787	1,93E+00	8,80E+00	6,49E-01	2,96E+00	0
103	4	1	-21	12	1026	0,49787	1,93E+00	8,80E+00	6,49E-01	2,96E+00	0
102	3	2	25	12	1026	0,49752	8,93E-02	3,67E-01	3,00E-02	1,23E-01	180
101	5	0	-10	6	1026	0,49572	1,26E+01	3,86E+01	4,24E+00	1,30E+01	0
100	5	0	11	6	1026	0,49353	4,80E+00	1,45E+01	1,61E+00	4,85E+00	0
99	2	2	36	12	1026	0,49347	5,34E-04	1,60E-03	1,79E-04	5,38E-04	180
98	3	2	-26	12	1026	0,49219	6,66E-01	1,76E+00	2,24E-01	5,91E-01	0
97	3	1	35	12	1026	0,49148	1,50E+00	4,37E+00	5,04E-01	1,47E+00	0
96	4	0	31	6	1026	0,49076	8,20E-06	2,00E-05	2,75E-06	6,72E-06	0
95	5	0	-13	6	1026	0,48862	5,77E+00	4,60E+01	1,94E+00	1,54E+01	0
94	3	3	0	6	1026	0,48745	0,00E+00	1,02E+02	-1,25E-06	3,42E+01	0
93	3	3	3	12	1026	0,48655	0,00E+00	1,46E+01	2,36E-07	4,89E+00	0
92	5	0	14	6	1021	0,48593	0,00E+00	2,22E+03	2,15E+03	2,29E+03	0
91	4	0	-32	6	1021	0,48446	0,00E+00	2,22E+03	2,15E+03	2,29E+03	0
90	4	1	24	12	1021	0,48409	0,00E+00	2,22E+03	2,14E+03	2,28E+03	0
89	4	1	-24	12	1021	0,48409	0,00E+00	2,22E+03	2,14E+03	2,28E+03	0
88	3	3	6	12	1021	0,48389	0,00E+00	2,21E+03	2,14E+03	2,28E+03	0
87	2	0	-46	6	1021	0,48369	0,00E+00	2,21E+03	2,14E+03	2,28E+03	0
86	2	1	43	12	1021	0,48329	0,00E+00	2,21E+03	2,14E+03	2,28E+03	0
85	1	0	49	6	1021	0,48233	0,00E+00	2,21E+03	2,14E+03	2,28E+03	0

84	3	2	28	12	1021	0,48144	0,00E+00	2,20E+03	2,13E+03	2,27E+03	0
83	5	0	-16	6	1021	0,4801	0,00E+00	2,20E+03	2,13E+03	2,27E+03	0
82	3	3	9	12	1021	0,47955	0,00E+00	2,19E+03	2,12E+03	2,26E+03	0
81	4	2	-1	12	1021	0,47857	0,00E+00	2,19E+03	2,12E+03	2,26E+03	0
80	4	2	2	12	1021	0,47829	0,00E+00	2,19E+03	2,12E+03	2,26E+03	0
79	3	1	-37	12	1021	0,47736	0,00E+00	2,18E+03	2,11E+03	2,25E+03	0
78	4	2	-4	12	1021	0,47716	0,00E+00	2,18E+03	2,11E+03	2,25E+03	0
77	5	0	17	6	1021	0,47698	0,00E+00	2,18E+03	2,11E+03	2,25E+03	0
76	4	2	5	12	1021	0,47632	0,00E+00	2,18E+03	2,11E+03	2,25E+03	0
75	3	2	-29	12	1021	0,47605	0,00E+00	2,18E+03	2,11E+03	2,25E+03	0
74	2	1	-44	12	1021	0,47504	0,00E+00	2,17E+03	2,10E+03	2,24E+03	0
73	2	0	47	6	1021	0,47486	0,00E+00	2,17E+03	2,10E+03	2,24E+03	0
72	1	1	48	12	1021	0,47443	0,00E+00	2,17E+03	2,10E+03	2,24E+03	0
71	3	0	-42	6	1021	0,47424	0,00E+00	2,17E+03	2,10E+03	2,24E+03	0
70	3	0	42	6	1021	0,47424	0,00E+00	2,17E+03	2,10E+03	2,24E+03	0
69	4	2	-7	12	1021	0,4741	0,00E+00	2,17E+03	2,10E+03	2,24E+03	0
68	3	3	12	12	1021	0,47367	0,00E+00	2,17E+03	2,10E+03	2,24E+03	0
67	1	0	-50	6	1021	0,47302	0,00E+00	2,16E+03	2,09E+03	2,23E+03	0
66	4	2	8	12	1021	0,47272	0,00E+00	2,16E+03	2,09E+03	2,23E+03	0
65	0	0	51	2	1021	0,47205	0,00E+00	2,16E+03	2,09E+03	2,23E+03	0
64	4	0	34	6	1021	0,47201	0,00E+00	2,16E+03	2,09E+03	2,23E+03	0
63	2	2	39	12	1021	0,47168	0,00E+00	2,16E+03	2,09E+03	2,23E+03	0
62	3	1	38	12	1021	0,47048	0,00E+00	2,15E+03	2,08E+03	2,22E+03	0
61	5	0	-19	6	1021	0,47038	0,00E+00	2,15E+03	2,08E+03	2,22E+03	0
60	4	1	27	12	1021	0,46978	0,00E+00	2,15E+03	2,08E+03	2,22E+03	0
59	4	1	-27	12	1021	0,46978	0,00E+00	2,15E+03	2,08E+03	2,22E+03	0
58	4	2	-10	12	1021	0,46948	0,00E+00	2,15E+03	2,08E+03	2,22E+03	0
57	4	2	11	12	1021	0,46761	0,00E+00	2,14E+03	2,07E+03	2,21E+03	0
56	5	0	20	6	1021	0,46691	0,00E+00	2,14E+03	2,07E+03	2,21E+03	0
55	3	3	15	12	1021	0,46641	0,00E+00	2,13E+03	2,06E+03	2,20E+03	0
54	4	0	-35	6	1021	0,46587	0,00E+00	2,13E+03	2,06E+03	2,20E+03	0
53	3	2	31	12	1021	0,46526	0,00E+00	2,13E+03	2,06E+03	2,20E+03	0
52	4	2	-13	12	1021	0,46344	0,00E+00	2,12E+03	2,05E+03	2,19E+03	0
51	2	0	-49	6	1021	0,45806	0,00E+00	2,10E+03	2,04E+03	2,17E+03	0
50	3	3	18	12	1021	0,45798	0,00E+00	2,10E+03	2,04E+03	2,16E+03	0
49	4	2	14	12	1021	0,46114	0,00E+00	2,11E+03	2,04E+03	2,18E+03	0
48	3	1	-40	12	1021	0,45706	0,00E+00	2,09E+03	2,04E+03	2,16E+03	0
47	4	2	-16	12	1021	0,45614	0,00E+00	2,09E+03	2,03E+03	2,16E+03	0
46	3	2	-32	12	1021	0,45988	0,00E+00	2,10E+03	2,03E+03	2,17E+03	0
45	5	0	23	6	1021	0,45598	0,00E+00	2,09E+03	2,03E+03	2,16E+03	0
44	5	0	-22	6	1021	0,45971	0,00E+00	2,10E+03	2,03E+03	2,17E+03	0
43	1	0	52	6	1021	0,45543	0,00E+00	2,08E+03	2,03E+03	2,15E+03	0
42	2	1	46	12	1021	0,45922	0,00E+00	2,10E+03	2,03E+03	2,17E+03	0
41	4	1	30	12	1021	0,4552	0,00E+00	2,08E+03	2,03E+03	2,15E+03	0
40	4	1	-30	12	1021	0,4552	0,00E+00	2,08E+03	2,03E+03	2,15E+03	0
39	5	1	1	12	1021	0,45484	0,00E+00	2,08E+03	2,03E+03	2,15E+03	0
38	5	1	-2	12	1021	0,45459	0,00E+00	2,08E+03	2,03E+03	2,15E+03	0
37	4	0	37	6	1021	0,4538	0,00E+00	2,08E+03	2,02E+03	2,15E+03	0
36	5	1	4	12	1021	0,45362	0,00E+00	2,08E+03	2,02E+03	2,14E+03	0
35	4	2	17	12	1021	0,45346	0,00E+00	2,08E+03	2,02E+03	2,14E+03	0
34	5	1	-5	12	1021	0,4529	0,00E+00	2,07E+03	2,02E+03	2,14E+03	0
33	3	0	45	6	1021	0,4519	0,00E+00	2,07E+03	2,01E+03	2,14E+03	0
32	3	0	-45	6	1021	0,4519	0,00E+00	2,07E+03	2,01E+03	2,14E+03	0
31	2	1	-47	12	1021	0,45164	0,00E+00	2,07E+03	2,01E+03	2,14E+03	0
30	2	2	42	12	1021	0,45111	0,00E+00	2,06E+03	2,01E+03	2,13E+03	0
29	5	1	7	12	1021	0,45099	0,00E+00	2,06E+03	2,01E+03	2,13E+03	0
28	3	1	41	12	1021	0,45053	0,00E+00	2,06E+03	2,01E+03	2,13E+03	0
27	2	0	50	6	1021	0,45006	0,00E+00	2,06E+03	2,01E+03	2,13E+03	0
26	5	1	-8	12	1021	0,44981	0,00E+00	2,06E+03	2,00E+03	2,13E+03	0
25	1	1	51	12	1021	0,44923	0,00E+00	2,06E+03	2,00E+03	2,12E+03	0
24	3	2	34	12	1021	0,44919	0,00E+00	2,06E+03	2,00E+03	2,12E+03	0
23	3	3	21	12	1021	0,44858	0,00E+00	2,05E+03	2,00E+03	2,12E+03	0
22	5	0	-25	6	1021	0,44833	0,00E+00	2,05E+03	2,00E+03	2,12E+03	0
21	4	0	-38	6	1021	0,44787	0,00E+00	2,05E+03	2,00E+03	2,12E+03	0
20	4	2	-19	12	1021	0,44778	0,00E+00	2,05E+03	2,00E+03	2,12E+03	0
19	1	0	-53	6	1021	0,44711	0,00E+00	2,05E+03	1,99E+03	2,12E+03	0
18	5	1	10	12	1021	0,44701	0,00E+00	2,05E+03	1,99E+03	2,11E+03	0
17	0	0	54	2	1021	0,44583	0,00E+00	2,04E+03	1,99E+03	2,11E+03	0
16	5	1	-11	12	1021	0,4454	0,00E+00	2,04E+03	1,98E+03	2,11E+03	0
15	4	2	20	12	1021	0,44479	0,00E+00	2,04E+03	1,98E+03	2,10E+03	0
14	5	0	26	6	1021	0,44441	0,00E+00	2,03E+03	1,98E+03	2,10E+03	0
13	3	2	-35	12	1021	0,44389	0,00E+00	2,03E+03	1,98E+03	2,10E+03	0
12	5	1	13	12	1021	0,44178	0,00E+00	2,02E+03	1,97E+03	2,09E+03	0
11	4	1	33	12	1021	0,44056	0,00E+00	2,02E+03	1,96E+03	2,08E+03	0
10	4	1	-33	12	1021	0,44056	0,00E+00	2,02E+03	1,96E+03	2,08E+03	0
9	5	1	-14	12	1021	0,43979	0,00E+00	2,01E+03	1,96E+03	2,08E+03	0
8	4	2	-22	12	1021	0,43855	0,00E+00	2,01E+03	1,95E+03	2,08E+03	0

7	3	3	24	12	1021	0,43843	0,00E+00	2,01E+03	1,95E+03	2,08E+03	0
6	3	1	-43	12	1021	0,43783	0,00E+00	2,00E+03	1,95E+03	2,07E+03	0
5	2	1	49	12	1021	0,43711	0,00E+00	2,00E+03	1,95E+03	2,07E+03	0
4	5	0	-28	6	1021	0,43645	0,00E+00	2,00E+03	1,94E+03	2,07E+03	0
3	4	0	40	6	1021	0,43625	0,00E+00	2,00E+03	1,94E+03	2,07E+03	0
2	5	1	16	12	1021	0,43545	0,00E+00	1,99E+03	1,94E+03	2,06E+03	0
1	4	2	23	12	1021	0,43531	0,00E+00	1,99E+03	1,94E+03	2,06E+03	0

Tabelle A8: gemessene und berechnete Struktur Faktoren von Ag_2NiO_2 aus Neutronenpulverdaten, Raumtemperatur, Detektorbank 3

Iref	H	K	L	Mul	Icod	D-space	Fosq	Fcsq	FoTsq	FcTsq	Phas
1006	0	0	3	2	1021	8,02488	0,00E+00	5,36E+04	5,35E+04	5,36E+04	0
1005	0	0	6	2	1021	4,01244	0,00E+00	2,68E+04	2,68E+04	2,68E+04	0
1004	0	0	9	2	1021	2,67496	9,55E+01	1,60E+02	7,92E+00	1,32E+01	0
1003	1	0	1	6	1021	2,51897	1,68E+01	2,46E+01	1,38E+00	2,02E+00	0
1002	1	0	-2	6	1021	2,47859	2,03E+00	2,60E-02	1,66E-01	2,13E-03	180
1001	1	0	4	6	1021	2,33456	4,39E+01	4,08E+01	3,57E+00	3,32E+00	0
1000	1	0	-5	6	1021	2,24163	8,66E+02	9,27E+02	6,99E+01	7,48E+01	0
999	1	0	7	6	1021	2,03947	9,96E+01	8,95E+01	7,94E+00	7,14E+00	180
998	0	0	12	2	1021	2,00622	1,74E+02	1,49E+02	1,38E+01	1,19E+01	180
997	1	0	-8	6	1021	1,93783	4,02E+02	3,87E+02	3,18E+01	3,07E+01	0
996	1	0	10	6	1021	1,74498	4,01E+02	3,75E+02	3,14E+01	2,93E+01	0
995	1	0	-11	6	1021	1,65602	1,41E+02	1,22E+02	1,10E+01	9,47E+00	0
994	0	0	15	2	1021	1,60498	1,86E+01	4,10E+01	1,44E+00	3,18E+00	0
993	1	0	13	6	1021	1,49494	5,19E+02	4,88E+02	4,00E+01	3,76E+01	0
992	1	1	0	6	1021	1,46235	1,26E+03	1,18E+03	9,69E+01	9,10E+01	0
991	1	1	3	12	1021	1,43866	1,34E+02	1,26E+02	1,03E+01	9,65E+00	0
990	1	0	-14	6	1021	1,42271	4,73E+02	4,67E+02	3,63E+01	3,58E+01	0
989	1	1	6	12	1021	1,37395	5,41E+01	5,94E+01	4,13E+00	4,54E+00	0
988	0	0	18	2	1021	1,33748	2,81E+02	3,71E+02	2,15E+01	2,83E+01	0
987	1	0	16	6	1021	1,29362	1,05E+02	1,33E+02	7,95E+00	1,01E+01	0
986	1	1	9	12	1021	1,28313	1,59E+02	1,62E+02	1,21E+01	1,23E+01	0
985	2	0	-1	6	1021	1,26469	2,40E+01	2,73E+01	1,82E+00	2,07E+00	0
984	2	0	2	6	1021	1,25948	6,10E-03	3,69E-02	4,63E-04	2,80E-03	0
983	2	0	-4	6	1021	1,2393	5,89E+01	4,36E+01	4,47E+00	3,31E+00	0
982	1	0	-17	6	1021	1,23607	4,40E+01	3,47E+01	3,34E+00	2,63E+00	180
981	2	0	5	6	1021	1,22478	9,63E+02	8,76E+02	7,29E+01	6,63E+01	0
980	2	0	-7	6	1021	1,18842	6,44E+01	7,49E+01	4,87E+00	5,66E+00	180
979	1	1	12	12	1021	1,18174	1,19E+02	1,26E+02	9,00E+00	9,54E+00	180
978	2	0	8	6	1021	1,16728	3,54E+02	3,63E+02	2,67E+01	2,74E+01	0
977	0	0	21	2	1021	1,14641	5,25E+01	6,29E+01	3,95E+00	4,74E+00	0
976	1	0	19	6	1021	1,1332	7,78E+02	7,84E+02	5,86E+01	5,91E+01	0
975	2	0	-10	6	1021	1,12082	3,42E+02	3,51E+02	2,57E+01	2,64E+01	0
974	2	0	11	6	1021	1,09615	6,37E+01	1,16E+02	4,78E+00	8,69E+00	0
973	1	0	-20	6	1021	1,0872	1,76E+00	6,37E+00	1,32E-01	4,78E-01	180
972	1	1	15	12	1021	1,08095	2,46E+01	4,19E+01	1,85E+00	3,14E+00	0
971	2	0	-13	6	1021	1,04537	3,62E+02	4,48E+02	2,71E+01	3,35E+01	0
970	2	0	14	6	1021	1,01974	3,57E+02	4,31E+02	2,67E+01	3,22E+01	0
969	1	0	22	6	1021	1,00456	2,94E+01	3,43E+01	2,19E+00	2,56E+00	0
968	0	0	24	2	1021	1,00311	7,17E+02	8,14E+02	5,35E+01	6,08E+01	0
967	1	1	18	12	1021	0,98694	3,15E+02	3,41E+02	2,35E+01	2,55E+01	0
966	2	0	-16	6	1021	0,96892	1,06E+02	1,23E+02	7,86E+00	9,18E+00	0
965	1	0	-23	6	1021	0,96737	1,73E+02	1,96E+02	1,29E+01	1,46E+01	0
964	2	1	1	12	1021	0,95658	3,40E+01	2,82E+01	2,53E+00	2,10E+00	0
963	2	1	-2	12	1021	0,95432	3,38E-01	2,70E-01	2,52E-02	2,01E-02	0
962	2	1	4	12	1021	0,94545	4,74E+01	4,40E+01	3,52E+00	3,28E+00	0
961	2	0	17	6	1021	0,94402	2,72E+01	2,64E+01	2,02E+00	1,96E+00	180
960	2	1	-5	12	1021	0,93896	7,97E+02	7,90E+02	5,92E+01	5,88E+01	0
959	2	1	7	12	1021	0,92227	4,94E+01	5,99E+01	3,67E+00	4,45E+00	180
958	2	1	-8	12	1021	0,91228	3,26E+02	3,30E+02	2,42E+01	2,45E+01	0
957	1	1	21	12	1021	0,90222	6,09E+01	5,97E+01	4,52E+00	4,43E+00	0
956	1	0	25	6	1021	0,90012	2,11E+01	2,14E+01	1,57E+00	1,59E+00	180
955	2	0	-19	6	1021	0,89573	6,81E+02	7,07E+02	5,05E+01	5,24E+01	0
954	0	0	27	2	1021	0,89165	3,20E+02	3,24E+02	2,37E+01	2,40E+01	0
953	2	1	10	12	1021	0,88958	3,23E+02	3,21E+02	2,39E+01	2,38E+01	0
952	2	1	-11	12	1021	0,8771	1,04E+02	1,08E+02	7,68E+00	7,98E+00	0
951	2	0	20	6	1021	0,87249	1,64E+00	3,82E+00	1,22E-01	2,83E-01	180
950	1	0	-26	6	1021	0,86966	3,66E+00	4,52E+00	2,71E-01	3,35E-01	0

949	2	1	13	12	1021	0,85042	4,01E+02	4,05E+02	2,96E+01	2,99E+01	0
948	3	0	0	6	1021	0,84429	1,00E+03	9,60E+02	7,42E+01	7,09E+01	0
947	3	0	3	6	1021	0,83966	1,14E+02	1,10E+02	8,43E+00	8,11E+00	0
946	3	0	-3	6	1021	0,83966	1,14E+02	1,10E+02	8,43E+00	8,11E+00	0
945	2	1	-14	12	1021	0,83645	4,10E+02	3,92E+02	3,03E+01	2,90E+01	0
944	2	0	-22	6	1021	0,82801	3,35E+01	3,40E+01	2,47E+00	2,51E+00	0
943	1	1	24	12	1021	0,8272	7,31E+02	7,29E+02	5,40E+01	5,38E+01	0
942	3	0	6	6	1021	0,8262	5,78E+01	5,59E+01	4,27E+00	4,12E+00	0
941	3	0	-6	6	1021	0,8262	5,78E+01	5,59E+01	4,27E+00	4,12E+00	0
940	1	0	28	6	1021	0,81418	1,04E+02	1,17E+02	7,70E+00	8,63E+00	0
939	2	1	16	12	1021	0,80771	1,08E+02	1,14E+02	7,99E+00	8,37E+00	0
938	2	0	23	6	1021	0,80682	1,78E+02	1,82E+02	1,31E+01	1,34E+01	0
937	3	0	9	6	1021	0,80514	1,45E+02	1,44E+02	1,07E+01	1,06E+01	0
936	3	0	-9	6	1021	0,80514	1,45E+02	1,44E+02	1,07E+01	1,06E+01	0
935	0	0	30	2	1021	0,80249	3,53E-01	1,25E+00	2,60E-02	9,20E-02	180
934	2	1	-17	12	1021	0,79311	6,85E+00	1,96E+01	5,05E-01	1,44E+00	180
933	1	0	-29	6	1021	0,78887	3,38E+02	4,44E+02	2,49E+01	3,27E+01	0
932	3	0	-12	6	1021	0,77819	3,16E+01	8,27E+01	2,32E+00	6,09E+00	180
931	3	0	12	6	1021	0,77819	3,16E+01	8,27E+01	2,32E+00	6,09E+00	180
930	2	0	-25	6	1021	0,76655	1,16E+01	1,56E+01	8,53E-01	1,15E+00	180
929	2	1	19	12	1021	0,76383	5,35E+02	6,34E+02	3,94E+01	4,66E+01	0
928	1	1	27	12	1021	0,7613	2,67E+02	2,94E+02	1,96E+01	2,16E+01	0
927	2	1	-20	12	1021	0,74927	0,00E+00	2,05E+00	-3,04E-09	1,50E-01	180
926	2	0	26	6	1021	0,74747	0,00E+00	5,29E+00	-8,65E-09	3,89E-01	0
925	3	0	15	6	1021	0,74721	0,00E+00	4,11E+01	-1,05E-07	3,02E+00	0
924	3	0	-15	6	1021	0,74721	0,00E+00	4,11E+01	-1,05E-07	3,02E+00	0
923	1	0	31	6	1021	0,74248	0,00E+00	3,89E+00	-1,35E-08	2,86E-01	180
922	2	2	0	6	1021	0,73118	6,75E+02	8,55E+02	4,95E+01	6,27E+01	0
921	0	0	33	2	1021	0,72953	1,13E+02	1,23E+02	8,25E+00	9,02E+00	0
920	2	2	3	12	1021	0,72816	9,54E+01	1,01E+02	7,00E+00	7,44E+00	0
919	1	0	-32	6	1021	0,72119	5,82E+02	6,06E+02	4,27E+01	4,44E+01	0
918	2	1	22	12	1021	0,72053	3,28E+01	3,35E+01	2,41E+00	2,46E+00	0
917	2	2	6	12	1021	0,71933	5,22E+01	5,35E+01	3,83E+00	3,92E+00	0
916	3	0	-18	6	1021	0,71394	2,68E+02	2,82E+02	1,97E+01	2,07E+01	0
915	3	0	18	6	1021	0,71394	2,68E+02	2,82E+02	1,97E+01	2,07E+01	0
914	2	0	-28	6	1021	0,71136	1,12E+02	1,10E+02	8,19E+00	8,09E+00	0
913	2	1	-23	12	1021	0,70643	1,69E+02	1,68E+02	1,24E+01	1,23E+01	0
912	2	2	9	12	1021	0,7053	1,44E+02	1,34E+02	1,06E+01	9,83E+00	0
911	1	1	30	12	1021	0,70352	6,19E-01	5,05E-01	4,54E-02	3,70E-02	180
910	3	1	-1	12	1021	0,70219	3,65E+01	2,90E+01	2,67E+00	2,12E+00	0
909	3	1	2	12	1021	0,7013	1,44E+00	1,17E+00	1,06E-01	8,54E-02	0
908	3	1	-4	12	1021	0,69775	4,20E+01	4,33E+01	3,07E+00	3,17E+00	0
907	3	1	5	12	1021	0,69513	6,53E+02	6,32E+02	4,78E+01	4,63E+01	0
906	2	0	29	6	1021	0,69429	4,12E+02	3,98E+02	3,02E+01	2,91E+01	0
905	3	1	-7	12	1021	0,68828	2,95E+01	3,67E+01	2,16E+00	2,69E+00	180
904	2	2	12	12	1021	0,68697	5,16E+01	6,59E+01	3,77E+00	4,82E+00	180
903	3	1	8	12	1021	0,6841	2,47E+02	2,68E+02	1,81E+01	1,96E+01	0
902	1	0	34	6	1021	0,68193	8,87E+01	1,04E+02	6,49E+00	7,61E+00	0
901	3	0	-21	6	1021	0,67982	3,66E+01	5,28E+01	2,68E+00	3,86E+00	0
900	3	0	21	6	1021	0,67982	3,66E+01	5,28E+01	2,68E+00	3,86E+00	0
899	2	1	25	12	1021	0,67893	7,07E+00	1,10E+01	5,17E-01	8,04E-01	180
898	3	1	-10	12	1021	0,67437	2,37E+02	2,66E+02	1,73E+01	1,94E+01	0
897	3	1	11	12	1021	0,66888	8,38E+01	9,23E+01	6,13E+00	6,75E+00	0
896	0	0	36	2	1021	0,66874	2,79E+00	3,04E+00	2,04E-01	2,22E-01	180
895	2	1	-26	12	1021	0,66556	7,21E+00	6,01E+00	5,27E-01	4,39E-01	0
894	2	2	15	12	1021	0,66538	4,85E+01	4,03E+01	3,54E+00	2,95E+00	0
893	1	0	-35	6	1021	0,6638	2,69E+01	2,22E+01	1,96E+00	1,62E+00	0
892	2	0	-31	6	1021	0,66204	2,49E+00	2,23E+00	1,82E-01	1,63E-01	180
891	3	1	-13	12	1021	0,65682	3,24E+02	3,28E+02	2,37E+01	2,39E+01	0
890	1	1	33	12	1021	0,65281	1,18E+02	1,15E+02	8,64E+00	8,41E+00	0
889	3	1	14	12	1021	0,65032	3,27E+02	3,22E+02	2,39E+01	2,35E+01	0
888	2	0	32	6	1021	0,64681	5,53E+02	5,40E+02	4,04E+01	3,94E+01	0
887	3	0	24	6	1021	0,64594	5,92E+02	5,80E+02	4,32E+01	4,23E+01	0
886	3	0	-24	6	1021	0,64594	5,92E+02	5,80E+02	4,32E+01	4,23E+01	0
885	2	2	18	12	1021	0,64157	2,79E+02	2,56E+02	2,04E+01	1,87E+01	0
884	2	1	28	12	1021	0,63969	1,13E+02	1,04E+02	8,25E+00	7,57E+00	0
883	3	1	-16	12	1021	0,63654	1,10E+02	9,56E+01	8,02E+00	6,98E+00	0
882	4	0	1	6	1021	0,633	3,08E+01	2,90E+01	2,24E+00	2,11E+00	0
881	4	0	-2	6	1021	0,63234	1,88E+00	1,73E+00	1,37E-01	1,26E-01	0
880	1	0	37	6	1021	0,6302	6,18E+02	6,05E+02	4,50E+01	4,41E+01	0
879	4	0	4	6	1021	0,62974	4,33E+01	4,25E+01	3,16E+00	3,10E+00	0

878	3	1	17	12	1021	0,62932	1,02E+01	9,95E+00	7,44E-01	7,25E-01	180
877	4	0	-5	6	1021	0,62781	5,95E+02	5,64E+02	4,33E+01	4,11E+01	0
876	2	1	-29	12	1021	0,62719	3,73E+02	3,57E+02	2,72E+01	2,60E+01	0
875	4	0	7	6	1021	0,62275	3,09E+01	2,82E+01	2,25E+00	2,05E+00	180
874	4	0	-8	6	1021	0,61965	2,60E+02	2,41E+02	1,90E+01	1,76E+01	0
873	2	0	-34	6	1021	0,61804	9,49E+01	9,64E+01	6,91E+00	7,02E+00	0
872	0	0	39	2	1021	0,6173	1,97E-02	2,09E-02	1,44E-03	1,52E-03	0
871	2	2	21	12	1021	0,61647	4,69E+01	4,96E+01	3,42E+00	3,61E+00	0
870	1	0	-38	6	1021	0,61461	1,73E+02	1,74E+02	1,26E+01	1,26E+01	0
869	3	1	-19	12	1021	0,61439	5,05E+02	5,06E+02	3,68E+01	3,69E+01	0
868	3	0	-27	6	1021	0,61306	2,41E+02	2,40E+02	1,75E+01	1,75E+01	0
867	3	0	27	6	1021	0,61306	2,41E+02	2,40E+02	1,75E+01	1,75E+01	0
866	4	0	10	6	1021	0,61239	2,42E+02	2,41E+02	1,76E+01	1,75E+01	0
865	4	0	-11	6	1021	0,60827	1,01E+02	8,53E+01	7,36E+00	6,21E+00	0
864	1	1	36	12	1021	0,60816	1,85E+00	1,59E+00	1,35E-01	1,16E-01	180
863	3	1	20	12	1021	0,60673	5,95E-02	2,77E-01	4,33E-03	2,02E-02	180
862	2	0	35	6	1021	0,60445	2,28E+01	2,18E+01	1,66E+00	1,59E+00	0
861	2	1	31	12	1021	0,60311	1,59E+00	1,12E+00	1,16E-01	8,15E-02	180
860	4	0	13	6	1021	0,59916	3,23E+02	2,94E+02	2,35E+01	2,14E+01	0
859	4	0	-14	6	1021	0,59421	3,24E+02	2,91E+02	2,36E+01	2,12E+01	0
858	2	1	-32	12	1021	0,59153	4,90E+02	4,81E+02	3,57E+01	3,50E+01	0
857	3	1	-22	12	1021	0,59116	3,22E+01	3,20E+01	2,34E+00	2,33E+00	0
856	2	2	24	12	1021	0,59087	5,15E+02	5,16E+02	3,75E+01	3,75E+01	0
855	1	0	40	6	1021	0,58556	8,77E+01	7,67E+01	6,37E+00	5,58E+00	0
854	4	0	16	6	1021	0,58364	9,36E+01	8,78E+01	6,80E+00	6,38E+00	0
853	3	1	23	12	1021	0,5833	1,50E+02	1,44E+02	1,09E+01	1,04E+01	0
852	3	0	30	6	1021	0,58166	1,04E-04	9,46E-05	7,53E-06	6,88E-06	180
851	3	0	-30	6	1021	0,58166	1,04E-04	9,46E-05	7,53E-06	6,88E-06	180
850	3	2	1	12	1021	0,58091	3,25E+01	2,88E+01	2,36E+00	2,09E+00	0
849	3	2	-2	12	1021	0,5804	2,65E+00	2,33E+00	1,92E-01	1,69E-01	0
848	2	0	-37	6	1021	0,57875	5,58E+02	5,38E+02	4,06E+01	3,91E+01	0
847	3	2	4	12	1021	0,57839	4,27E+01	4,15E+01	3,10E+00	3,02E+00	0
846	4	0	-17	6	1021	0,57806	6,92E+00	6,76E+00	5,03E-01	4,91E-01	180
845	3	2	-5	12	1021	0,57689	4,97E+02	5,03E+02	3,61E+01	3,65E+01	0
844	0	0	42	2	1021	0,57321	4,17E+02	3,85E+02	3,03E+01	2,80E+01	0
843	3	2	7	12	1021	0,57296	2,27E+01	2,13E+01	1,65E+00	1,55E+00	180
842	1	0	-41	6	1021	0,57202	1,27E+01	1,18E+01	9,20E-01	8,58E-01	0
841	3	2	-8	12	1021	0,57054	2,40E+02	2,17E+02	1,74E+01	1,58E+01	0
840	2	1	34	12	1021	0,56928	9,38E+01	8,92E+01	6,81E+00	6,48E+00	0
839	1	1	39	12	1021	0,56871	2,22E-01	2,11E-01	1,61E-02	1,53E-02	0
838	3	1	-25	12	1021	0,56753	5,15E+00	4,91E+00	3,74E-01	3,56E-01	180
837	2	0	38	6	1021	0,5666	1,64E+02	1,59E+02	1,19E+01	1,15E+01	0
836	4	0	19	6	1021	0,56643	4,62E+02	4,52E+02	3,36E+01	3,28E+01	0
835	2	2	27	12	1021	0,56539	2,14E+02	2,17E+02	1,55E+01	1,57E+01	0
834	3	2	10	12	1021	0,56486	2,11E+02	2,18E+02	1,53E+01	1,59E+01	0
833	3	2	-11	12	1021	0,56162	1,11E+02	7,87E+01	8,08E+00	5,72E+00	0
832	4	0	-20	6	1021	0,56041	2,70E-02	1,97E-02	1,96E-03	1,43E-03	180
831	3	1	26	12	1021	0,55965	1,20E+01	7,24E+00	8,70E-01	5,25E-01	0
830	2	1	-35	12	1021	0,55861	4,04E+01	2,14E+01	2,93E+00	1,55E+00	0
829	3	2	13	12	1021	0,55443	3,17E+02	2,64E+02	2,30E+01	1,92E+01	0
828	4	1	0	12	1021	0,55272	6,46E+02	5,99E+02	4,69E+01	4,35E+01	0
827	3	0	-33	6	1021	0,55201	1,04E+02	1,01E+02	7,52E+00	7,29E+00	0
826	3	0	33	6	1021	0,55201	1,04E+02	1,01E+02	7,52E+00	7,29E+00	0
825	4	1	-3	12	1021	0,55141	8,09E+01	7,96E+01	5,87E+00	5,78E+00	0
824	4	1	3	12	1021	0,55141	8,09E+01	7,96E+01	5,87E+00	5,78E+00	0
823	3	2	-14	12	1021	0,5505	2,79E+02	2,63E+02	2,03E+01	1,91E+01	0
822	4	0	22	6	1021	0,54807	4,37E+01	3,11E+01	3,17E+00	2,26E+00	0
821	4	1	-6	12	1021	0,54755	6,15E+01	4,63E+01	4,46E+00	3,36E+00	0
820	4	1	6	12	1021	0,54755	6,15E+01	4,63E+01	4,46E+00	3,36E+00	0
819	1	0	43	6	1021	0,54668	2,64E+02	2,16E+02	1,92E+01	1,57E+01	0
818	3	1	-28	12	1021	0,544	1,14E+02	9,14E+01	8,30E+00	6,62E+00	0
817	2	0	-40	6	1021	0,5436	8,78E+01	7,07E+01	6,37E+00	5,13E+00	0
816	3	2	16	12	1021	0,54206	9,40E+01	8,05E+01	6,81E+00	5,84E+00	0
815	4	0	-23	6	1021	0,54179	1,52E+02	1,32E+02	1,10E+01	9,59E+00	0
814	4	1	9	12	1021	0,54128	1,21E+02	1,08E+02	8,79E+00	7,83E+00	0
813	4	1	-9	12	1021	0,54128	1,21E+02	1,08E+02	8,79E+00	7,83E+00	0
812	2	2	30	12	1021	0,54048	9,53E-02	8,38E-02	6,91E-03	6,08E-03	0
811	2	1	37	12	1021	0,53814	4,98E+02	4,79E+02	3,61E+01	3,47E+01	0
810	3	2	-17	12	1021	0,53758	4,45E+00	4,40E+00	3,23E-01	3,19E-01	180
809	3	1	29	12	1021	0,53626	2,95E+02	2,87E+02	2,14E+01	2,08E+01	0
808	0	0	45	2	1021	0,53499	1,07E+02	9,46E+01	7,78E+00	6,86E+00	0

807	1	0	-44	6	1021	0,53481	2,81E+01	2,46E+01	2,04E+00	1,79E+00	180
806	1	1	42	12	1021	0,53367	3,57E+02	3,46E+02	2,58E+01	2,50E+01	0
805	4	1	12	12	1021	0,53286	2,94E+01	3,15E+01	2,13E+00	2,28E+00	180
804	4	1	-12	12	1021	0,53286	2,94E+01	3,15E+01	2,13E+00	2,28E+00	180
803	2	0	41	6	1021	0,53271	1,17E+01	1,25E+01	8,48E-01	9,09E-01	0
802	4	0	25	6	1021	0,52908	3,10E+00	3,02E+00	2,25E-01	2,19E-01	180
801	2	1	-38	12	1021	0,52833	1,28E+02	1,46E+02	9,26E+00	1,05E+01	0
800	3	2	19	12	1021	0,52819	3,42E+02	4,04E+02	2,48E+01	2,92E+01	0
799	3	0	36	6	1021	0,52422	0,00E+00	1,91E-01	8,39E-11	1,38E-02	180
798	3	0	-36	6	1021	0,52422	0,00E+00	1,91E-01	-2,08E-11	1,38E-02	180
797	3	2	-20	12	1021	0,5233	1,85E-02	4,22E-02	1,34E-03	3,05E-03	0
796	4	0	-26	6	1021	0,52268	5,68E+00	7,74E+00	4,11E-01	5,61E-01	0
795	4	1	-15	12	1021	0,5226	2,89E+01	3,71E+01	2,09E+00	2,68E+00	0
794	4	1	15	12	1021	0,5226	2,89E+01	3,71E+01	2,09E+00	2,68E+00	0
793	3	1	-31	12	1021	0,52097	1,94E-01	9,59E-02	1,41E-02	6,94E-03	180
792	2	2	33	12	1021	0,51644	8,69E+01	9,37E+01	6,29E+00	6,78E+00	0
791	3	1	32	12	1021	0,51345	3,65E+02	3,82E+02	2,64E+01	2,77E+01	0
790	3	2	22	12	1021	0,51321	2,81E+01	3,02E+01	2,03E+00	2,18E+00	0
789	1	0	46	6	1021	0,51253	9,81E+01	1,11E+02	7,10E+00	8,01E+00	0
788	2	0	-43	6	1021	0,51207	1,71E+02	1,95E+02	1,23E+01	1,41E+01	0
787	4	1	18	12	1021	0,51082	1,62E+02	1,91E+02	1,18E+01	1,38E+01	0
786	4	1	-18	12	1021	0,51082	1,62E+02	1,91E+02	1,18E+01	1,38E+01	0
785	4	0	28	6	1021	0,50987	7,14E+01	8,56E+01	5,16E+00	6,19E+00	0
784	2	1	40	12	1021	0,50953	5,55E+01	6,52E+01	4,02E+00	4,72E+00	0
783	3	2	-23	12	1021	0,50804	1,22E+02	1,22E+02	8,79E+00	8,82E+00	0
782	5	0	-1	6	1021	0,50646	3,26E+01	2,80E+01	2,36E+00	2,03E+00	0
781	5	0	5	6	1021	0,50379	3,67E+02	4,00E+02	2,65E+01	2,89E+01	0
780	5	0	2	6	1021	0,50613	3,92E+00	3,50E+00	2,83E-01	2,53E-01	0
779	4	0	-29	6	1021	0,50347	2,27E+02	2,57E+02	1,65E+01	1,86E+01	0
778	1	1	45	12	1021	0,50242	6,73E+01	8,66E+01	4,86E+00	6,26E+00	0
777	2	0	44	6	1021	0,50228	1,41E+01	1,86E+01	1,02E+00	1,34E+00	180
776	5	0	-4	6	1021	0,50479	3,86E+01	3,92E+01	2,79E+00	2,84E+00	0
775	1	0	-47	6	1021	0,50206	1,12E+02	1,51E+02	8,11E+00	1,09E+01	0
774	0	0	48	2	1021	0,50155	1,30E+02	1,88E+02	9,37E+00	1,36E+01	0
773	5	0	-7	6	1021	0,50117	7,49E+00	1,16E+01	5,41E-01	8,42E-01	180
772	2	1	-41	12	1021	0,50053	8,40E+00	1,31E+01	6,07E-01	9,50E-01	0
771	5	0	8	6	1021	0,49955	1,37E+02	1,76E+02	9,87E+00	1,27E+01	0
770	3	1	-34	12	1021	0,4987	5,51E+01	7,64E+01	3,98E+00	5,52E+00	0
769	3	0	39	6	1021	0,49831	7,04E-01	9,79E-01	5,09E-02	7,08E-02	0
768	3	0	-39	6	1021	0,49831	7,04E-01	9,79E-01	5,09E-02	7,08E-02	0
767	4	1	21	12	1021	0,49787	3,01E+01	4,09E+01	2,18E+00	2,96E+00	0
766	4	1	-21	12	1021	0,49787	3,01E+01	4,09E+01	2,18E+00	2,96E+00	0
765	3	2	25	12	1021	0,49752	1,28E+00	1,71E+00	9,23E-02	1,23E-01	180
764	5	0	-10	6	1021	0,49572	1,25E+02	1,80E+02	9,00E+00	1,30E+01	0
763	5	0	11	6	1021	0,49353	5,13E+01	6,72E+01	3,71E+00	4,85E+00	0
762	2	2	36	12	1021	0,49347	5,61E-03	7,45E-03	4,06E-04	5,38E-04	180
761	3	2	-26	12	1021	0,49219	8,79E+00	8,17E+00	6,35E-01	5,91E-01	0
760	3	1	35	12	1021	0,49148	2,89E+01	2,03E+01	2,09E+00	1,47E+00	0
759	4	0	31	6	1021	0,49076	1,37E-04	9,31E-05	9,87E-06	6,72E-06	0
758	5	0	-13	6	1021	0,48862	2,42E+02	2,14E+02	1,75E+01	1,54E+01	0
757	3	3	0	6	1021	0,48745	4,78E+02	4,73E+02	3,45E+01	3,42E+01	0
756	3	3	3	12	1021	0,48655	6,43E+01	6,77E+01	4,64E+00	4,89E+00	0
755	5	0	14	6	1021	0,48593	2,30E+02	2,15E+02	1,66E+01	1,55E+01	0
754	4	0	-32	6	1021	0,48446	3,44E+02	3,41E+02	2,49E+01	2,46E+01	0
753	4	1	24	12	1021	0,48409	3,41E+02	3,65E+02	2,46E+01	2,63E+01	0
752	4	1	-24	12	1021	0,48409	3,41E+02	3,65E+02	2,46E+01	2,63E+01	0
751	3	3	6	12	1021	0,48389	3,78E+01	4,17E+01	2,73E+00	3,01E+00	0
750	2	0	-46	6	1021	0,48369	9,06E+01	1,02E+02	6,54E+00	7,37E+00	0
749	2	1	43	12	1021	0,48329	1,57E+02	1,76E+02	1,14E+01	1,27E+01	0
748	1	0	49	6	1021	0,48233	2,19E+01	2,00E+01	1,58E+00	1,45E+00	180
747	3	2	28	12	1021	0,48144	1,13E+02	8,00E+01	8,13E+00	5,78E+00	0
746	5	0	-16	6	1021	0,4801	1,05E+02	6,79E+01	7,54E+00	4,90E+00	0
745	3	3	9	12	1021	0,47955	1,47E+02	9,31E+01	1,06E+01	6,72E+00	0
744	4	2	-1	12	1021	0,47857	4,26E+01	2,75E+01	3,08E+00	1,98E+00	0
743	4	2	2	12	1021	0,47829	6,00E+00	4,04E+00	4,33E-01	2,92E-01	0
742	3	1	-37	12	1021	0,47736	4,51E+02	3,80E+02	3,26E+01	2,74E+01	0
741	4	2	-4	12	1021	0,47716	4,32E+01	3,79E+01	3,12E+00	2,74E+00	0
740	5	0	17	6	1021	0,47698	1,66E+00	1,50E+00	1,20E-01	1,08E-01	180
739	4	2	5	12	1021	0,47632	3,68E+02	3,56E+02	2,66E+01	2,57E+01	0
738	3	2	-29	12	1021	0,47605	2,37E+02	2,30E+02	1,71E+01	1,66E+01	0
737	2	1	-44	12	1021	0,47504	1,45E+01	1,37E+01	1,05E+00	9,92E-01	180

736	2	0	47	6	1021	0,47486	1,44E+02	1,38E+02	1,04E+01	9,98E+00	0
735	1	1	48	12	1021	0,47443	1,72E+02	1,69E+02	1,24E+01	1,22E+01	0
734	3	0	-42	6	1021	0,47424	2,80E+02	2,78E+02	2,02E+01	2,01E+01	0
733	3	0	42	6	1021	0,47424	2,80E+02	2,78E+02	2,02E+01	2,01E+01	0
732	4	2	-7	12	1021	0,4741	8,36E+00	8,33E+00	6,03E-01	6,01E-01	180
731	3	3	12	12	1021	0,47367	1,85E+01	1,82E+01	1,33E+00	1,31E+00	180
730	1	0	-50	6	1021	0,47302	6,99E+01	6,46E+01	5,05E+00	4,66E+00	0
729	4	2	8	12	1021	0,47272	1,80E+02	1,59E+02	1,30E+01	1,15E+01	0
728	0	0	51	2	1021	0,47205	3,41E+02	2,71E+02	2,46E+01	1,95E+01	0
727	4	0	34	6	1021	0,47201	8,97E+01	7,07E+01	6,47E+00	5,10E+00	0
726	2	2	39	12	1021	0,47168	1,94E+00	1,47E+00	1,40E-01	1,06E-01	0
725	3	1	38	12	1021	0,47048	1,40E+02	1,22E+02	1,01E+01	8,80E+00	0
724	5	0	-19	6	1021	0,47038	3,59E+02	3,22E+02	2,59E+01	2,32E+01	0
723	4	1	-27	12	1021	0,46978	1,52E+02	1,60E+02	1,10E+01	1,15E+01	0
722	4	1	27	12	1021	0,46978	1,52E+02	1,60E+02	1,10E+01	1,15E+01	0
721	4	2	-10	12	1021	0,46948	1,44E+02	1,63E+02	1,04E+01	1,18E+01	0
720	4	2	11	12	1021	0,46761	5,26E+01	6,21E+01	3,80E+00	4,48E+00	0
719	5	0	20	6	1021	0,46691	5,78E-01	6,21E-01	4,17E-02	4,48E-02	0
718	3	3	15	12	1021	0,46641	4,13E+01	3,45E+01	2,98E+00	2,49E+00	0
717	4	0	-35	6	1021	0,46587	3,37E+01	1,97E+01	2,43E+00	1,42E+00	0
716	3	2	31	12	1021	0,46526	1,95E-01	8,76E-02	1,41E-02	6,32E-03	0
715	4	2	-13	12	1021	0,46344	2,57E+02	1,92E+02	1,86E+01	1,39E+01	0
714	4	2	14	12	1021	0,46114	2,20E+02	1,94E+02	1,59E+01	1,40E+01	0
713	3	2	-32	12	1021	0,45988	2,98E+02	3,04E+02	2,15E+01	2,19E+01	0
712	5	0	-22	6	1021	0,45971	2,74E+01	2,81E+01	1,97E+00	2,03E+00	0
711	2	1	46	12	1021	0,45922	9,19E+01	9,40E+01	6,63E+00	6,78E+00	0
710	2	0	-49	6	1021	0,45806	1,58E+01	1,50E+01	1,14E+00	1,08E+00	180
709	3	3	18	12	1021	0,45798	1,65E+02	1,57E+02	1,19E+01	1,13E+01	0
708	3	1	-40	12	1021	0,45706	6,09E+01	5,55E+01	4,39E+00	4,00E+00	0
707	4	2	-16	12	1021	0,45614	7,60E+01	6,24E+01	5,48E+00	4,50E+00	0
706	5	0	23	6	1021	0,45598	1,30E+02	1,03E+02	9,34E+00	7,46E+00	0
705	1	0	52	6	1021	0,45543	6,50E+01	4,81E+01	4,68E+00	3,47E+00	0
704	4	1	30	12	1021	0,4552	1,42E+00	1,02E+00	1,02E-01	7,36E-02	0
703	4	1	-30	12	1021	0,4552	1,42E+00	1,02E+00	1,02E-01	7,36E-02	0
702	5	1	1	12	1021	0,45484	3,82E+01	2,68E+01	2,75E+00	1,93E+00	0
701	5	1	-2	12	1021	0,45459	6,47E+00	4,55E+00	4,67E-01	3,28E-01	0
700	4	0	37	6	1021	0,4538	4,26E+02	3,39E+02	3,07E+01	2,44E+01	0
699	5	1	4	12	1021	0,45362	4,43E+01	3,65E+01	3,19E+00	2,63E+00	0
698	4	2	17	12	1021	0,45346	8,50E-01	7,24E-01	6,13E-02	5,22E-02	180
697	5	1	-5	12	1021	0,4529	3,48E+02	3,18E+02	2,51E+01	2,29E+01	0
696	3	0	45	6	1021	0,4519	7,70E+01	7,26E+01	5,55E+00	5,23E+00	0
695	3	0	-45	6	1021	0,4519	7,70E+01	7,26E+01	5,55E+00	5,23E+00	0
694	2	1	-47	12	1021	0,45164	1,33E+02	1,26E+02	9,55E+00	9,11E+00	0
693	2	2	42	12	1021	0,45111	2,60E+02	2,50E+02	1,87E+01	1,80E+01	0
692	5	1	7	12	1021	0,45099	6,06E+00	5,79E+00	4,37E-01	4,17E-01	180
691	3	1	41	12	1021	0,45053	1,50E+01	1,40E+01	1,08E+00	1,01E+00	0
690	2	0	50	6	1021	0,45006	6,39E+01	5,98E+01	4,61E+00	4,31E+00	0
689	5	1	-8	12	1021	0,44981	1,52E+02	1,43E+02	1,09E+01	1,03E+01	0
688	1	1	51	12	1021	0,44923	2,59E+02	2,43E+02	1,87E+01	1,75E+01	0
687	3	2	34	12	1021	0,44919	6,99E+01	6,54E+01	5,04E+00	4,71E+00	0
686	3	3	21	12	1021	0,44858	3,95E+01	3,59E+01	2,84E+00	2,59E+00	0
685	5	0	-25	6	1021	0,44833	3,47E-01	3,17E-01	2,50E-02	2,29E-02	180
684	4	0	-38	6	1021	0,44787	1,15E+02	1,12E+02	8,28E+00	8,05E+00	0
683	4	2	-19	12	1021	0,44778	2,92E+02	2,88E+02	2,10E+01	2,08E+01	0
682	1	0	-53	6	1021	0,44711	8,20E+01	8,98E+01	5,91E+00	6,47E+00	0
681	5	1	10	12	1021	0,44701	1,35E+02	1,48E+02	9,70E+00	1,06E+01	0
680	0	0	54	2	1021	0,44583	4,50E-02	4,02E-02	3,24E-03	2,90E-03	180
679	5	1	-11	12	1021	0,4454	7,18E+01	5,74E+01	5,17E+00	4,13E+00	0
678	4	2	20	12	1021	0,44479	1,54E+00	1,06E+00	1,11E-01	7,66E-02	0
677	5	0	26	6	1021	0,44441	1,47E+01	8,82E+00	1,06E+00	6,35E-01	0
676	3	2	-35	12	1021	0,44389	4,27E+01	1,91E+01	3,07E+00	1,38E+00	0
675	5	1	13	12	1021	0,44178	2,32E+02	1,73E+02	1,67E+01	1,24E+01	0
674	4	1	33	12	1021	0,44056	7,58E+01	7,57E+01	5,46E+00	5,45E+00	0
673	4	1	-33	12	1021	0,44056	7,58E+01	7,57E+01	5,46E+00	5,45E+00	0
672	5	1	-14	12	1021	0,43979	1,77E+02	1,76E+02	1,27E+01	1,27E+01	0
671	4	2	-22	12	1021	0,43855	2,28E+01	2,71E+01	1,64E+00	1,95E+00	0
670	3	3	24	12	1021	0,43843	2,37E+02	2,90E+02	1,70E+01	2,09E+01	0
669	3	1	-43	12	1021	0,43783	1,03E+02	1,44E+02	7,43E+00	1,04E+01	0
668	2	1	49	12	1021	0,43711	7,16E+00	1,11E+01	5,16E-01	7,97E-01	180
667	5	0	-28	6	1021	0,43645	5,01E+01	6,98E+01	3,60E+00	5,03E+00	0
666	4	0	40	6	1021	0,43625	3,75E+01	5,12E+01	2,70E+00	3,69E+00	0

665	5	1	16	12	1021	0,43545	4,70E+01	5,74E+01	3,38E+00	4,13E+00	0
664	4	2	23	12	1021	0,43531	8,01E+01	9,52E+01	5,77E+00	6,86E+00	0
663	2	0	-52	6	1021	0,43483	4,06E+01	4,56E+01	2,93E+00	3,29E+00	0
662	3	2	37	12	1021	0,43341	2,27E+02	3,02E+02	1,64E+01	2,17E+01	0
661	5	1	-17	12	1021	0,43312	1,90E-01	2,63E-01	1,37E-02	1,90E-02	180
660	5	0	29	6	1021	0,43242	1,16E+02	1,86E+02	8,32E+00	1,34E+01	0
659	2	2	45	12	1021	0,43176	3,66E+01	6,66E+01	2,63E+00	4,79E+00	0
658	3	1	44	12	1021	0,43167	3,91E+00	7,08E+00	2,82E-01	5,09E-01	180
657	1	0	55	6	1021	0,43133	2,28E+01	3,80E+01	1,64E+00	2,74E+00	0
656	3	0	48	6	1021	0,43121	8,64E+01	1,38E+02	6,22E+00	9,91E+00	0
655	3	0	-48	6	1021	0,43121	8,64E+01	1,38E+02	6,22E+00	9,91E+00	0
654	4	0	-41	6	1021	0,43056	1,11E+01	1,42E+01	7,96E-01	1,02E+00	0
653	2	1	-50	12	1021	0,43015	4,48E+01	5,55E+01	3,22E+00	3,99E+00	0
652	4	2	-25	12	1021	0,42863	4,47E-02	6,08E-02	3,22E-03	4,37E-03	180
651	3	2	-38	12	1021	0,42823	6,18E+01	1,02E+02	4,45E+00	7,36E+00	0
650	5	1	19	12	1021	0,42816	1,48E+02	2,58E+02	1,07E+01	1,85E+01	0
649	3	3	27	12	1021	0,42771	5,23E+01	1,31E+02	3,76E+00	9,40E+00	0
648	2	0	53	6	1021	0,42757	2,79E+01	8,19E+01	2,01E+00	5,89E+00	0
647	1	1	54	12	1021	0,42645	0,00E+00	5,19E-03	-1,04E-11	3,74E-04	0
646	4	1	-36	12	1021	0,42604	0,00E+00	5,73E-01	-9,49E-10	4,12E-02	0
645	4	1	36	12	1021	0,42604	0,00E+00	5,73E-01	-9,49E-10	4,12E-02	0
644	5	1	-20	12	1021	0,42554	1,85E-01	1,55E+00	1,33E-02	1,12E-01	0
643	4	2	26	12	1021	0,42521	2,28E+00	9,04E+00	1,64E-01	6,50E-01	0
642	5	0	-31	6	1021	0,42429	2,26E-01	6,08E-01	1,63E-02	4,37E-02	0
641	1	0	-56	6	1021	0,42384	1,65E+02	3,21E+02	1,19E+01	2,31E+01	0
640	0	0	57	2	1021	0,42236	1,04E+01	2,08E+01	7,47E-01	1,49E+00	0
639	6	0	0	6	1021	0,42214	1,53E+02	3,32E+02	1,10E+01	2,39E+01	0
638	6	0	-3	6	1021	0,42156	2,27E+01	5,33E+01	1,63E+00	3,83E+00	0
637	6	0	3	6	1021	0,42156	2,27E+01	5,33E+01	1,63E+00	3,83E+00	0
636	5	0	32	6	1021	0,4202	1,79E+02	2,42E+02	1,29E+01	1,74E+01	0
635	5	1	22	12	1021	0,42007	1,87E+01	2,60E+01	1,34E+00	1,87E+00	0
634	6	0	6	6	1021	0,41983	2,35E+01	3,53E+01	1,69E+00	2,54E+00	0
633	6	0	-6	6	1021	0,41983	2,35E+01	3,53E+01	1,69E+00	2,54E+00	0
632	3	1	-46	12	1021	0,41969	5,08E+01	7,98E+01	3,66E+00	5,74E+00	0
631	4	0	43	6	1021	0,41944	8,02E+01	1,30E+02	5,77E+00	9,37E+00	0
630	4	2	-28	12	1021	0,41822	5,20E+01	6,52E+01	3,74E+00	4,69E+00	0
629	3	2	40	12	1021	0,41804	3,92E+01	4,73E+01	2,82E+00	3,40E+00	0
628	5	1	-23	12	1021	0,41722	8,53E+01	8,77E+01	6,14E+00	6,31E+00	0
627	6	0	9	6	1021	0,41698	7,36E+01	7,42E+01	5,29E+00	5,34E+00	0
626	6	0	-9	6	1021	0,41698	7,36E+01	7,42E+01	5,29E+00	5,34E+00	0
625	2	1	52	12	1021	0,41679	4,33E+01	4,32E+01	3,12E+00	3,11E+00	0
624	3	3	30	12	1021	0,41661	1,88E+00	1,87E+00	1,35E-01	1,34E-01	0
623	4	3	1	12	1021	0,41634	2,53E+01	2,53E+01	1,82E+00	1,82E+00	0
622	4	3	-2	12	1021	0,41615	5,30E+00	5,40E+00	3,81E-01	3,89E-01	0
621	4	3	4	12	1021	0,41541	2,74E+01	3,37E+01	1,97E+00	2,42E+00	0
620	4	3	-5	12	1021	0,41485	1,64E+02	2,54E+02	1,18E+01	1,82E+01	0
619	4	2	29	12	1021	0,41467	9,99E+01	1,67E+02	7,19E+00	1,20E+01	0
618	4	0	-44	6	1021	0,41401	2,38E+00	4,87E+00	1,71E-01	3,50E-01	180
617	3	1	47	12	1021	0,41388	5,11E+01	1,06E+02	3,68E+00	7,60E+00	0
616	2	0	-55	6	1021	0,41371	1,77E+01	3,61E+01	1,27E+00	2,59E+00	0
615	2	2	48	12	1021	0,4136	6,27E+01	1,24E+02	4,51E+00	8,93E+00	0
614	4	3	7	12	1021	0,41338	1,37E+00	2,48E+00	9,87E-02	1,78E-01	180
613	6	0	-12	6	1021	0,4131	4,47E+00	7,06E+00	3,21E-01	5,08E-01	180
612	6	0	12	6	1021	0,4131	4,47E+00	7,06E+00	3,21E-01	5,08E-01	180
611	3	2	-41	12	1021	0,41303	9,29E+00	1,43E+01	6,68E-01	1,03E+00	0
610	4	3	-8	12	1021	0,41247	7,84E+01	1,17E+02	5,63E+00	8,38E+00	0
609	3	0	51	6	1021	0,41202	1,21E+02	1,96E+02	8,66E+00	1,41E+01	0
608	3	0	-51	6	1021	0,41202	1,21E+02	1,96E+02	8,66E+00	1,41E+01	0
607	5	0	-34	6	1021	0,41199	3,43E+01	5,60E+01	2,47E+00	4,03E+00	0
606	4	1	39	12	1021	0,41178	1,78E+00	2,98E+00	1,28E-01	2,14E-01	0
605	4	1	-39	12	1021	0,41178	1,78E+00	2,98E+00	1,28E-01	2,14E-01	0
604	5	1	25	12	1021	0,41133	8,70E-04	1,42E-03	6,26E-05	1,02E-04	0
603	2	1	-53	12	1021	0,41039	5,30E+01	7,47E+01	3,81E+00	5,37E+00	0
602	4	3	10	12	1021	0,41031	8,73E+01	1,22E+02	6,28E+00	8,75E+00	0
601	1	0	58	6	1021	0,40962	1,68E+01	1,97E+01	1,21E+00	1,42E+00	0
600	4	3	-11	12	1021	0,40906	4,87E+01	4,90E+01	3,50E+00	3,52E+00	0
599	5	1	-26	12	1021	0,4083	1,26E+01	9,19E+00	9,08E-01	6,61E-01	0
598	6	0	15	6	1021	0,40826	4,22E+01	3,05E+01	3,03E+00	2,19E+00	0
597	6	0	-15	6	1021	0,40826	4,22E+01	3,05E+01	3,03E+00	2,19E+00	0
596	5	0	35	6	1021	0,40789	2,46E+01	1,79E+01	1,77E+00	1,28E+00	0
595	4	2	-31	12	1021	0,40748	1,21E+00	9,64E-01	8,73E-02	6,93E-02	0

594	2	0	56	6	1021	0,40709	3,36E+02	2,86E+02	2,42E+01	2,06E+01	0
593	4	3	13	12	1021	0,40626	1,54E+02	1,40E+02	1,11E+01	1,01E+01	0
592	1	1	57	12	1021	0,40578	1,99E+01	2,04E+01	1,43E+00	1,47E+00	0
591	5	2	0	12	1021	0,40558	2,72E+02	2,96E+02	1,95E+01	2,13E+01	0
590	3	3	33	12	1021	0,4053	5,53E+01	6,54E+01	3,98E+00	4,70E+00	0
589	5	2	-3	12	1021	0,40507	3,95E+01	4,92E+01	2,84E+00	3,54E+00	0
588	5	2	3	12	1021	0,40507	3,95E+01	4,92E+01	2,84E+00	3,54E+00	0
587	4	3	-14	12	1021	0,40471	1,11E+02	1,44E+02	7,98E+00	1,03E+01	0
586	4	2	32	12	1021	0,40385	1,68E+02	2,17E+02	1,21E+01	1,56E+01	0
585	5	2	-6	12	1021	0,40353	2,59E+01	3,34E+01	1,86E+00	2,40E+00	0
584	5	2	6	12	1021	0,40353	2,59E+01	3,34E+01	1,86E+00	2,40E+00	0
583	4	0	46	6	1021	0,40341	5,73E+01	7,35E+01	4,12E+00	5,28E+00	0
582	3	2	43	12	1021	0,40318	9,38E+01	1,18E+02	6,74E+00	8,48E+00	0
581	1	0	-59	6	1021	0,40285	2,11E+01	2,56E+01	1,52E+00	1,84E+00	0
580	3	1	-49	12	1021	0,40262	4,70E+00	5,63E+00	3,38E-01	4,04E-01	180
579	6	0	18	6	1021	0,40257	9,75E+01	1,17E+02	7,01E+00	8,39E+00	0
578	6	0	-18	6	1021	0,40257	9,75E+01	1,17E+02	7,01E+00	8,39E+00	0
577	5	1	28	12	1021	0,4021	4,96E+01	6,08E+01	3,56E+00	4,37E+00	0
576	4	3	16	12	1021	0,40132	3,44E+01	4,86E+01	2,47E+00	3,49E+00	0
575	0	0	60	2	1021	0,40124	2,22E+01	3,17E+01	1,60E+00	2,28E+00	0
574	5	2	-9	12	1021	0,401	4,77E+01	6,87E+01	3,43E+00	4,94E+00	0
573	5	2	9	12	1021	0,401	4,77E+01	6,87E+01	3,43E+00	4,94E+00	0
572	5	0	-37	6	1026	0,39972	1,78E+02	2,41E+02	1,28E+01	1,73E+01	0
571	4	3	-17	12	1026	0,39949	2,91E-03	3,91E-03	2,09E-04	2,81E-04	0
570	5	1	-29	12	1026	0,39894	1,12E+02	1,50E+02	8,07E+00	1,08E+01	0
569	3	2	-44	12	1026	0,39835	2,42E+00	3,22E+00	1,74E-01	2,31E-01	180
568	4	0	-47	6	1026	0,39824	7,23E+01	9,68E+01	5,19E+00	6,95E+00	0
567	2	1	55	12	1026	0,39808	2,56E+01	3,41E+01	1,84E+00	2,45E+00	0
566	4	1	-42	12	1026	0,39788	1,36E+02	1,81E+02	9,75E+00	1,30E+01	0
565	4	1	42	12	1026	0,39788	1,36E+02	1,81E+02	9,75E+00	1,30E+01	0
564	5	2	-12	12	1026	0,39754	3,69E+00	4,90E+00	2,65E-01	3,52E-01	180
563	5	2	12	12	1026	0,39754	3,69E+00	4,90E+00	2,65E-01	3,52E-01	180
562	3	1	50	12	1026	0,39716	3,60E+01	4,77E+01	2,59E+00	3,42E+00	0
561	2	2	51	12	1026	0,39658	1,33E+02	1,76E+02	9,57E+00	1,26E+01	0
560	4	2	-34	12	1026	0,39656	3,93E+01	5,18E+01	2,82E+00	3,72E+00	0
559	6	0	21	6	1026	0,39614	2,24E+01	2,96E+01	1,61E+00	2,13E+00	0
558	6	0	-21	6	1026	0,39614	2,24E+01	2,96E+01	1,61E+00	2,13E+00	0
557	5	0	38	6	1026	0,39565	6,66E+01	8,58E+01	4,78E+00	6,16E+00	0
556	4	3	19	12	1026	0,39559	1,60E+02	2,06E+02	1,15E+01	1,48E+01	0
555	2	0	-58	6	1026	0,39443	1,32E+01	1,90E+01	9,48E-01	1,36E+00	0
554	3	0	-54	6	1026	0,39424	1,99E-01	2,86E-01	1,43E-02	2,06E-02	0
553	3	0	54	6	1026	0,39424	1,99E-01	2,86E-01	1,43E-02	2,06E-02	0
552	3	3	36	12	1026	0,39391	8,60E-01	1,37E+00	6,17E-02	9,87E-02	0
551	4	3	-20	12	1026	0,39352	2,01E+00	2,55E+00	1,44E-01	1,83E-01	0
550	5	2	-15	12	1021	0,39322	0,00E+00	2,62E+03	2,57E+03	2,68E+03	0
549	5	2	15	12	1021	0,39322	0,00E+00	2,62E+03	2,57E+03	2,68E+03	0
548	4	2	35	12	1021	0,3929	0,00E+00	2,62E+03	2,57E+03	2,68E+03	0
547	5	1	31	12	1021	0,39253	0,00E+00	2,62E+03	2,57E+03	2,67E+03	0
546	2	1	-56	12	1021	0,39218	0,00E+00	2,62E+03	2,57E+03	2,67E+03	0
545	1	0	61	6	1021	0,38996	0,00E+00	2,60E+03	2,55E+03	2,66E+03	0
544	5	1	-32	12	1021	0,38928	0,00E+00	2,60E+03	2,55E+03	2,65E+03	0
543	4	3	22	12	1021	0,38918	0,00E+00	2,60E+03	2,55E+03	2,65E+03	0
542	6	0	24	6	1021	0,38909	0,00E+00	2,60E+03	2,54E+03	2,65E+03	0
541	6	0	-24	6	1021	0,38909	0,00E+00	2,60E+03	2,54E+03	2,65E+03	0
540	3	2	46	12	1021	0,38888	0,00E+00	2,60E+03	2,54E+03	2,65E+03	0
539	2	0	59	6	1021	0,38838	0,00E+00	2,59E+03	2,54E+03	2,65E+03	0
538	4	0	49	6	1021	0,38818	0,00E+00	2,59E+03	2,54E+03	2,64E+03	0
537	5	2	18	12	1021	0,38813	0,00E+00	2,59E+03	2,54E+03	2,64E+03	0
536	5	2	-18	12	1021	0,38813	0,00E+00	2,59E+03	2,54E+03	2,64E+03	0
535	5	0	-40	6	1021	0,38757	0,00E+00	2,59E+03	2,53E+03	2,64E+03	0
534	1	1	60	12	1021	0,38694	0,00E+00	2,58E+03	2,53E+03	2,64E+03	0
533	4	3	-23	12	1021	0,38691	0,00E+00	2,58E+03	2,53E+03	2,64E+03	0
532	3	1	-52	12	1021	0,38657	0,00E+00	2,58E+03	2,53E+03	2,63E+03	0
531	6	1	-1	12	1021	0,38621	0,00E+00	2,58E+03	2,53E+03	2,63E+03	0
530	6	1	2	12	1021	0,38606	0,00E+00	2,58E+03	2,52E+03	2,63E+03	0
529	4	2	-37	12	1021	0,38557	0,00E+00	2,57E+03	2,52E+03	2,63E+03	0
528	6	1	-4	12	1021	0,38547	0,00E+00	2,57E+03	2,52E+03	2,63E+03	0
527	6	1	5	12	1021	0,38502	0,00E+00	2,57E+03	2,52E+03	2,62E+03	0
526	4	1	45	12	1021	0,38441	0,00E+00	2,57E+03	2,51E+03	2,62E+03	0
525	4	1	-45	12	1021	0,38441	0,00E+00	2,57E+03	2,51E+03	2,62E+03	0
524	3	2	-47	12	1021	0,38425	0,00E+00	2,57E+03	2,51E+03	2,62E+03	0

523	6	1	-7	12	1021	0,38385	0,00E+00	2,56E+03	2,51E+03	2,61E+03	0
522	1	0	-62	6	1021	0,38382	0,00E+00	2,56E+03	2,51E+03	2,61E+03	0
521	5	0	41	6	1021	0,38356	0,00E+00	2,56E+03	2,51E+03	2,61E+03	0
520	4	0	-50	6	1021	0,38327	0,00E+00	2,56E+03	2,51E+03	2,61E+03	0
519	6	1	8	12	1021	0,38312	0,00E+00	2,56E+03	2,50E+03	2,61E+03	0
518	5	1	34	12	1021	0,38273	0,00E+00	2,55E+03	2,50E+03	2,61E+03	0
517	3	3	39	12	1021	0,38256	0,00E+00	2,55E+03	2,50E+03	2,61E+03	0
516	5	2	21	12	1021	0,38236	0,00E+00	2,55E+03	2,50E+03	2,60E+03	0
515	5	2	-21	12	1021	0,38236	0,00E+00	2,55E+03	2,50E+03	2,60E+03	0
514	4	3	25	12	1021	0,3822	0,00E+00	2,55E+03	2,50E+03	2,60E+03	0
513	0	0	63	2	1021	0,38214	0,00E+00	2,55E+03	2,50E+03	2,60E+03	0
512	4	2	38	12	1021	0,38192	0,00E+00	2,55E+03	2,50E+03	2,60E+03	0
511	6	0	-27	6	1021	0,38154	0,00E+00	2,55E+03	2,49E+03	2,60E+03	0
510	6	0	27	6	1021	0,38154	0,00E+00	2,55E+03	2,49E+03	2,60E+03	0
509	3	1	53	12	1021	0,38144	0,00E+00	2,55E+03	2,49E+03	2,60E+03	0
508	6	1	-10	12	1021	0,38138	0,00E+00	2,55E+03	2,49E+03	2,60E+03	0
507	2	1	58	12	1021	0,38082	0,00E+00	2,54E+03	2,49E+03	2,59E+03	0
506	2	2	54	12	1021	0,38065	0,00E+00	2,54E+03	2,49E+03	2,59E+03	0
505	6	1	11	12	1021	0,38038	0,00E+00	2,54E+03	2,49E+03	2,59E+03	0
504	4	3	-26	12	1021	0,37977	0,00E+00	2,54E+03	2,48E+03	2,59E+03	0
503	5	1	-35	12	1021	0,37944	0,00E+00	2,53E+03	2,48E+03	2,59E+03	0
502	6	1	14	12	1021	0,37687	0,00E+00	2,52E+03	2,48E+03	2,57E+03	0
501	2	0	-61	6	1021	0,37679	0,00E+00	2,52E+03	2,48E+03	2,57E+03	0
500	5	2	24	12	1021	0,37601	0,00E+00	2,51E+03	2,47E+03	2,56E+03	0
499	5	2	-24	12	1021	0,37601	0,00E+00	2,51E+03	2,47E+03	2,56E+03	0
498	6	1	-13	12	1021	0,37812	0,00E+00	2,52E+03	2,47E+03	2,58E+03	0
497	5	0	-43	6	1021	0,37564	0,00E+00	2,51E+03	2,47E+03	2,56E+03	0
496	3	0	57	6	1021	0,37773	0,00E+00	2,52E+03	2,47E+03	2,57E+03	0
495	3	0	-57	6	1021	0,37773	0,00E+00	2,52E+03	2,47E+03	2,57E+03	0
494	2	1	-59	12	1021	0,37537	0,00E+00	2,51E+03	2,47E+03	2,56E+03	0
493	3	2	49	12	1021	0,37518	0,00E+00	2,50E+03	2,47E+03	2,56E+03	0
492	4	3	28	12	1021	0,37477	0,00E+00	2,50E+03	2,46E+03	2,55E+03	0
491	4	2	-40	12	1021	0,37463	0,00E+00	2,50E+03	2,46E+03	2,55E+03	0
490	6	1	-16	12	1021	0,37413	0,00E+00	2,50E+03	2,46E+03	2,55E+03	0
489	4	0	52	6	1021	0,37373	0,00E+00	2,49E+03	2,46E+03	2,55E+03	0
488	6	0	30	6	1021	0,37361	0,00E+00	2,49E+03	2,46E+03	2,55E+03	0
487	6	0	-30	6	1021	0,37361	0,00E+00	2,49E+03	2,46E+03	2,55E+03	0
486	5	1	37	12	1021	0,37283	0,00E+00	2,49E+03	2,45E+03	2,54E+03	0
485	6	1	17	12	1021	0,37265	0,00E+00	2,49E+03	2,45E+03	2,54E+03	0
484	4	3	-29	12	1021	0,3722	0,00E+00	2,48E+03	2,45E+03	2,54E+03	0
483	1	1	-64	6	1021	0,37209	0,00E+00	2,48E+03	2,45E+03	2,54E+03	0
482	5	0	44	6	1021	0,37172	0,00E+00	2,48E+03	2,44E+03	2,53E+03	0
481	3	1	-55	12	1021	0,3715	0,00E+00	2,48E+03	2,44E+03	2,53E+03	0
480	4	1	48	12	1021	0,37143	0,00E+00	2,48E+03	2,44E+03	2,53E+03	0
479	4	1	-48	12	1021	0,37143	0,00E+00	2,48E+03	2,44E+03	2,53E+03	0
478	3	3	42	12	1021	0,37134	0,00E+00	2,48E+03	2,44E+03	2,53E+03	0
477	2	0	62	6	1021	0,37124	0,00E+00	2,48E+03	2,44E+03	2,53E+03	0
476	4	2	41	12	1021	0,37101	0,00E+00	2,48E+03	2,44E+03	2,53E+03	0
475	3	2	-50	12	1021	0,37075	0,00E+00	2,47E+03	2,44E+03	2,53E+03	0
474	1	1	63	12	1021	0,36972	0,00E+00	2,47E+03	2,43E+03	2,52E+03	0
473	5	1	-38	12	1021	0,36952	0,00E+00	2,47E+03	2,43E+03	2,52E+03	0
472	6	1	-19	12	1021	0,36947	0,00E+00	2,47E+03	2,43E+03	2,52E+03	0
471	5	2	-27	12	1021	0,36919	0,00E+00	2,46E+03	2,43E+03	2,52E+03	0
470	5	2	27	12	1021	0,36919	0,00E+00	2,46E+03	2,43E+03	2,52E+03	0
469	4	0	-53	6	1021	0,36909	0,00E+00	2,46E+03	2,43E+03	2,52E+03	0
468	6	1	20	12	1021	0,36779	0,00E+00	2,46E+03	2,42E+03	2,51E+03	0
467	4	3	31	12	1021	0,36698	0,00E+00	2,45E+03	2,41E+03	2,50E+03	0
466	3	1	56	12	1021	0,36669	0,00E+00	2,45E+03	2,41E+03	2,50E+03	0
465	1	-1	63	6	1021	0,36648	0,00E+00	2,45E+03	2,41E+03	2,50E+03	0
464	2	2	57	12	1021	0,36573	0,00E+00	2,44E+03	2,40E+03	2,49E+03	0
463	4	4	0	6	1021	0,36559	0,00E+00	2,44E+03	2,40E+03	2,49E+03	0
462	6	0	33	6	1021	0,36538	0,00E+00	2,44E+03	2,40E+03	2,49E+03	0
461	6	0	-33	6	1021	0,36538	0,00E+00	2,44E+03	2,40E+03	2,49E+03	0
460	4	4	3	12	1021	0,36521	0,00E+00	2,44E+03	2,40E+03	2,49E+03	0
459	2	1	61	12	1021	0,36488	0,00E+00	2,44E+03	2,40E+03	2,49E+03	0
458	0	1	-62	2	1021	0,36477	0,00E+00	2,43E+03	2,40E+03	2,49E+03	0
457	4	3	-32	12	1021	0,36432	0,00E+00	2,43E+03	2,39E+03	2,48E+03	0
456	6	1	-22	12	1021	0,36423	0,00E+00	2,43E+03	2,39E+03	2,48E+03	0
455	4	4	6	12	1021	0,36408	0,00E+00	2,43E+03	2,39E+03	2,48E+03	0
454	5	0	-46	6	1021	0,36399	0,00E+00	2,43E+03	2,39E+03	2,48E+03	0
453	4	2	-43	12	1021	0,36382	0,00E+00	2,43E+03	2,39E+03	2,48E+03	0

452	5	1	40	12	1021	0,36291	0,00E+00	2,42E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
451	3	0	-60	6	1021	0,3624	0,00E+00	2,42E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
450	3	0	60	6	1021	0,3624	0,00E+00	2,42E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
449	6	1	23	12	1021	0,36237	0,00E+00	2,42E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
448	4	4	9	12	1021	0,36222	0,00E+00	2,42E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
447	3	2	52	12	1021	0,3621	0,00E+00	2,42E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
446	5	2	30	12	1021	0,36198	0,00E+00	2,42E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
445	5	2	-30	12	1021	0,36198	0,00E+00	2,42E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
444	5	3	-1	12	1021	0,3618	0,00E+00	2,42E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
443	7	0	1	6	1021	0,3618	0,00E+00	2,42E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
442	5	3	2	12	1021	0,36168	0,00E+00	2,41E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
441	7	0	-2	6	1021	0,36168	0,00E+00	2,41E+03	2,38E+03	2,47E+03	0
440	7	0	4	6	1021	0,36119	0,00E+00	2,41E+03	2,37E+03	2,46E+03	0
439	5	3	-4	12	1021	0,36119	0,00E+00	2,41E+03	2,37E+03	2,46E+03	0
438	7	0	-5	6	1021	0,36082	0,00E+00	2,41E+03	2,37E+03	2,46E+03	0
437	5	3	5	12	1021	0,36082	0,00E+00	2,41E+03	2,37E+03	2,46E+03	0
436	2	0	-64	6	1021	0,3606	0,00E+00	2,41E+03	2,37E+03	2,46E+03	0
435	3	3	45	12	1021	0,36032	0,00E+00	2,41E+03	2,37E+03	2,46E+03	0
434	4	2	44	12	1021	0,36026	0,00E+00	2,40E+03	2,37E+03	2,46E+03	0
433	5	0	47	6	1021	0,36018	0,00E+00	2,40E+03	2,37E+03	2,46E+03	0
432	4	0	55	6	1021	0,36007	0,00E+00	2,40E+03	2,37E+03	2,46E+03	0
431	5	3	-7	12	1021	0,35985	0,00E+00	2,40E+03	2,36E+03	2,45E+03	0
430	7	0	7	6	1021	0,35985	0,00E+00	2,40E+03	2,36E+03	2,45E+03	0
429	2	1	-62	12	1021	0,35983	0,00E+00	2,40E+03	2,36E+03	2,45E+03	0
428	4	4	12	12	1021	0,35967	0,00E+00	2,40E+03	2,36E+03	2,45E+03	0
427	5	1	-41	12	1021	0,35962	0,00E+00	2,40E+03	2,36E+03	2,45E+03	0
426	7	0	-8	6	1021	0,35925	0,00E+00	2,40E+03	2,36E+03	2,45E+03	0
425	5	3	8	12	1021	0,35925	0,00E+00	2,40E+03	2,36E+03	2,45E+03	0
424	4	1	51	12	1021	0,35896	0,00E+00	2,40E+03	2,36E+03	2,45E+03	0
423	4	1	-51	12	1021	0,35896	0,00E+00	2,40E+03	2,36E+03	2,45E+03	0
422	4	3	34	12	1021	0,35894	0,00E+00	2,40E+03	2,36E+03	2,45E+03	0
421	6	1	-25	12	1021	0,3585	0,00E+00	2,39E+03	2,35E+03	2,45E+03	0
420	3	2	-53	12	1021	0,35787	0,00E+00	2,39E+03	2,35E+03	2,44E+03	0
419	7	0	10	6	1021	0,35782	0,00E+00	2,39E+03	2,35E+03	2,44E+03	0
418	5	3	-10	12	1021	0,35782	0,00E+00	2,39E+03	2,35E+03	2,44E+03	0
417	3	1	-58	12	1021	0,35736	0,00E+00	2,39E+03	2,35E+03	2,44E+03	0
416	5	3	11	12	1021	0,35699	0,00E+00	2,38E+03	2,34E+03	2,44E+03	0
415	7	0	-11	6	1021	0,35699	0,00E+00	2,38E+03	2,34E+03	2,44E+03	0
414	6	0	36	6	1021	0,35697	0,00E+00	2,38E+03	2,34E+03	2,44E+03	0
413	6	0	-36	6	1021	0,35697	0,00E+00	2,38E+03	2,34E+03	2,44E+03	0
412	6	1	26	12	1021	0,35649	0,00E+00	2,38E+03	2,34E+03	2,43E+03	0
411	4	4	15	12	1021	0,35646	0,00E+00	2,38E+03	2,34E+03	2,43E+03	0
410	4	3	-35	12	1021	0,35621	0,00E+00	2,38E+03	2,34E+03	2,43E+03	0
409	1	1	-61	6	1021	0,35576	0,00E+00	2,37E+03	2,34E+03	2,43E+03	0
408	4	0	-56	6	1021	0,35568	0,00E+00	2,37E+03	2,34E+03	2,43E+03	0
407	2	1	-63	6	1021	0,35549	0,00E+00	2,37E+03	2,33E+03	2,43E+03	0
406	7	0	13	6	1021	0,35512	0,00E+00	2,37E+03	2,33E+03	2,42E+03	0
405	5	3	-13	12	1021	0,35512	0,00E+00	2,37E+03	2,33E+03	2,42E+03	0
404	5	2	33	12	1021	0,35448	0,00E+00	2,37E+03	2,33E+03	2,42E+03	0
403	5	2	-33	12	1021	0,35448	0,00E+00	2,37E+03	2,33E+03	2,42E+03	0
402	5	3	14	12	1021	0,35408	0,00E+00	2,36E+03	2,33E+03	2,42E+03	0
401	7	0	-14	6	1021	0,35408	0,00E+00	2,36E+03	2,33E+03	2,42E+03	0
400	1	2	-62	12	1021	0,35392	0,00E+00	2,36E+03	2,32E+03	2,41E+03	0
399	4	2	-46	12	1021	0,35321	0,00E+00	2,36E+03	2,32E+03	2,41E+03	0
398	5	1	43	12	1021	0,35306	0,00E+00	2,36E+03	2,32E+03	2,41E+03	0
397	3	1	59	12	1021	0,35284	0,00E+00	2,36E+03	2,32E+03	2,41E+03	0
396	5	0	-49	6	1021	0,35268	0,00E+00	2,35E+03	2,32E+03	2,41E+03	0
395	4	4	18	12	1021	0,35265	0,00E+00	2,35E+03	2,32E+03	2,41E+03	0
394	6	1	-28	12	1021	0,35234	0,00E+00	2,35E+03	2,31E+03	2,40E+03	0
393	7	0	16	6	1021	0,35181	0,00E+00	2,35E+03	2,31E+03	2,40E+03	0
392	5	3	-16	12	1021	0,35181	0,00E+00	2,35E+03	2,31E+03	2,40E+03	0
391	2	2	60	12	1021	0,35176	0,00E+00	2,35E+03	2,31E+03	2,40E+03	0
390	6	2	1	12	1021	0,35121	0,00E+00	2,34E+03	2,31E+03	2,40E+03	0
389	6	2	-2	12	1021	0,3511	0,00E+00	2,34E+03	2,31E+03	2,40E+03	0
388	4	3	37	12	1021	0,35073	0,00E+00	2,34E+03	2,30E+03	2,39E+03	0
387	6	2	4	12	1021	0,35065	0,00E+00	2,34E+03	2,30E+03	2,39E+03	0
386	1	-1	60	6	1021	0,35063	0,00E+00	2,34E+03	2,30E+03	2,39E+03	0
385	7	0	-17	6	1021	0,35058	0,00E+00	2,34E+03	2,30E+03	2,39E+03	0
384	5	3	17	12	1021	0,35058	0,00E+00	2,34E+03	2,30E+03	2,39E+03	0
383	6	2	-5	12	1021	0,35031	0,00E+00	2,34E+03	2,30E+03	2,39E+03	0
382	6	1	29	12	1021	0,35021	0,00E+00	2,34E+03	2,30E+03	2,39E+03	0

381	2	2	-64	12	1021	0,35011	0,00E+00	2,34E+03	2,30E+03	2,39E+03	0
380	5	1	-44	12	1021	0,3498	0,00E+00	2,33E+03	2,30E+03	2,39E+03	0
379	4	2	47	12	1021	0,34973	0,00E+00	2,33E+03	2,30E+03	2,39E+03	0
378	3	2	55	12	1021	0,34962	0,00E+00	2,33E+03	2,30E+03	2,39E+03	0
377	3	3	48	12	1021	0,34956	0,00E+00	2,33E+03	2,30E+03	2,39E+03	0
376	6	2	7	12	1021	0,34943	0,00E+00	2,33E+03	2,29E+03	2,38E+03	0
375	5	0	50	6	1021	0,349	0,00E+00	2,33E+03	2,29E+03	2,38E+03	0
374	0	1	-59	2	1021	0,34891	0,00E+00	2,33E+03	2,29E+03	2,38E+03	0
373	6	2	-8	12	1021	0,34888	0,00E+00	2,33E+03	2,29E+03	2,38E+03	0
372	6	0	-39	6	1021	0,34846	0,00E+00	2,33E+03	2,29E+03	2,38E+03	0
371	6	0	39	6	1021	0,34846	0,00E+00	2,33E+03	2,29E+03	2,38E+03	0
370	4	4	21	12	1021	0,34831	0,00E+00	2,32E+03	2,29E+03	2,38E+03	0
369	3	0	63	6	1021	0,34814	0,00E+00	2,32E+03	2,29E+03	2,38E+03	0
368	3	0	-63	6	1021	0,34814	0,00E+00	2,32E+03	2,29E+03	2,38E+03	0
367	4	3	-38	12	1021	0,34797	0,00E+00	2,32E+03	2,28E+03	2,37E+03	0
366	7	0	19	6	1021	0,34793	0,00E+00	2,32E+03	2,28E+03	2,37E+03	0
365	5	3	-19	12	1021	0,34793	0,00E+00	2,32E+03	2,28E+03	2,37E+03	0
364	6	2	10	12	1021	0,34757	0,00E+00	2,32E+03	2,28E+03	2,37E+03	0
363	4	0	58	6	1021	0,34714	0,00E+00	2,32E+03	2,28E+03	2,37E+03	0
362	4	1	54	12	1021	0,34701	0,00E+00	2,32E+03	2,28E+03	2,37E+03	0
361	4	1	-54	12	1021	0,34701	0,00E+00	2,32E+03	2,28E+03	2,37E+03	0
360	6	2	-11	12	1021	0,34681	0,00E+00	2,31E+03	2,28E+03	2,37E+03	0
359	5	2	-36	12	1021	0,34679	0,00E+00	2,31E+03	2,28E+03	2,37E+03	0
358	5	2	36	12	1021	0,34679	0,00E+00	2,31E+03	2,28E+03	2,37E+03	0
357	7	0	-20	6	1021	0,34652	0,00E+00	2,31E+03	2,27E+03	2,37E+03	0
356	5	3	20	12	1021	0,34652	0,00E+00	2,31E+03	2,27E+03	2,37E+03	0
355	6	1	-31	12	1021	0,34584	0,00E+00	2,31E+03	2,27E+03	2,36E+03	0
354	2	-1	61	6	1021	0,34568	0,00E+00	2,31E+03	2,27E+03	2,36E+03	0
353	3	2	-56	12	1021	0,3456	0,00E+00	2,31E+03	2,27E+03	2,36E+03	0
352	2	0	63	12	1021	0,34543	0,00E+00	2,31E+03	2,27E+03	2,36E+03	0
351	6	2	13	12	1021	0,34509	0,00E+00	2,30E+03	2,27E+03	2,36E+03	0
350	6	2	-14	12	1021	0,34414	0,00E+00	2,30E+03	2,26E+03	2,35E+03	0
349	3	1	-61	12	1021	0,34408	0,00E+00	2,30E+03	2,26E+03	2,35E+03	0
348	6	1	32	12	1021	0,34362	0,00E+00	2,29E+03	2,26E+03	2,35E+03	0
347	7	0	22	6	1021	0,34354	0,00E+00	2,29E+03	2,25E+03	2,35E+03	0
346	5	3	-22	12	1021	0,34354	0,00E+00	2,29E+03	2,25E+03	2,35E+03	0
345	4	4	24	12	1021	0,34349	0,00E+00	2,29E+03	2,25E+03	2,34E+03	0
344	5	1	46	12	1021	0,34334	0,00E+00	2,29E+03	2,25E+03	2,34E+03	0
343	4	0	-59	6	1021	0,343	0,00E+00	2,29E+03	2,25E+03	2,34E+03	0
342	4	2	-49	12	1021	0,34285	0,00E+00	2,29E+03	2,25E+03	2,34E+03	0
341	4	3	40	12	1021	0,34244	0,00E+00	2,29E+03	2,25E+03	2,34E+03	0
340	6	2	16	12	1021	0,34205	0,00E+00	2,28E+03	2,24E+03	2,34E+03	0
339	7	0	-23	6	1021	0,34198	0,00E+00	2,28E+03	2,24E+03	2,33E+03	0
338	5	3	23	12	1021	0,34198	0,00E+00	2,28E+03	2,24E+03	2,33E+03	0
337	5	0	-52	6	1021	0,34175	0,00E+00	2,28E+03	2,24E+03	2,33E+03	0
336	2	1	-60	6	1021	0,34097	0,00E+00	2,28E+03	2,24E+03	2,33E+03	0
335	6	2	-17	12	1021	0,34092	0,00E+00	2,28E+03	2,24E+03	2,33E+03	0
334	1	1	-58	6	1021	0,3408	0,00E+00	2,27E+03	2,24E+03	2,33E+03	0
333	5	1	-47	12	1021	0,34014	0,00E+00	2,27E+03	2,23E+03	2,32E+03	0
332	6	0	-42	6	1021	0,33991	0,00E+00	2,27E+03	2,23E+03	2,32E+03	0
331	6	0	42	6	1021	0,33991	0,00E+00	2,27E+03	2,23E+03	2,32E+03	0
330	3	1	62	12	1021	0,33984	0,00E+00	2,27E+03	2,23E+03	2,32E+03	0
329	4	3	-41	12	1021	0,33966	0,00E+00	2,27E+03	2,23E+03	2,32E+03	0
328	4	2	50	12	1021	0,33946	0,00E+00	2,27E+03	2,23E+03	2,32E+03	0
327	1	2	-59	12	1021	0,33938	0,00E+00	2,27E+03	2,23E+03	2,32E+03	0
326	3	3	51	12	1021	0,3391	0,00E+00	2,26E+03	2,23E+03	2,32E+03	0
325	6	1	-34	12	1021	0,33909	0,00E+00	2,26E+03	2,23E+03	2,32E+03	0
324	5	2	-39	12	1021	0,33897	0,00E+00	2,26E+03	2,22E+03	2,31E+03	0
323	5	2	39	12	1021	0,33897	0,00E+00	2,26E+03	2,22E+03	2,31E+03	0
322	7	0	25	6	1021	0,33872	0,00E+00	2,26E+03	2,22E+03	2,31E+03	0
321	5	3	-25	12	1021	0,33872	0,00E+00	2,26E+03	2,22E+03	2,31E+03	0
320	2	2	63	12	1021	0,33867	0,00E+00	2,26E+03	2,22E+03	2,31E+03	0
319	6	2	19	12	1021	0,33848	0,00E+00	2,26E+03	2,22E+03	2,31E+03	0
318	4	4	27	12	1021	0,33826	0,00E+00	2,26E+03	2,22E+03	2,31E+03	0
317	5	0	53	6	1021	0,33819	0,00E+00	2,26E+03	2,22E+03	2,31E+03	0
316	3	2	58	12	1021	0,33776	0,00E+00	2,25E+03	2,22E+03	2,31E+03	0
315	6	2	-20	12	1021	0,33718	0,00E+00	2,25E+03	2,21E+03	2,30E+03	0
314	5	3	26	12	1021	0,33702	0,00E+00	2,25E+03	2,21E+03	2,30E+03	0
313	7	0	-26	6	1021	0,33702	0,00E+00	2,25E+03	2,21E+03	2,30E+03	0
312	6	1	35	12	1021	0,33679	0,00E+00	2,25E+03	2,21E+03	2,30E+03	0
311	2	2	-61	12	1021	0,33641	0,00E+00	2,25E+03	2,21E+03	2,30E+03	0

310	1	-1	57	6	1021	0,33608	0,00E+00	2,24E+03	2,21E+03	2,30E+03	0
309	4	1	-57	12	1021	0,3356	0,00E+00	2,24E+03	2,20E+03	2,29E+03	0
308	4	1	57	12	1021	0,3356	0,00E+00	2,24E+03	2,20E+03	2,29E+03	0
307	7	1	0	12	1021	0,33549	0,00E+00	2,24E+03	2,20E+03	2,29E+03	0
306	7	1	3	12	1021	0,33519	0,00E+00	2,24E+03	2,20E+03	2,29E+03	0
305	7	1	-3	12	1021	0,33519	0,00E+00	2,24E+03	2,20E+03	2,29E+03	0
304	4	0	61	6	1021	0,33494	0,00E+00	2,24E+03	2,20E+03	2,29E+03	0
303	3	-1	62	6	1021	0,33485	0,00E+00	2,24E+03	2,20E+03	2,29E+03	0
302	3	1	-62	6	1021	0,33485	0,00E+00	2,24E+03	2,20E+03	2,29E+03	0
301	6	2	22	12	1021	0,33444	0,00E+00	2,23E+03	2,19E+03	2,28E+03	0
300	0	1	-56	2	1021	0,33437	0,00E+00	2,23E+03	2,19E+03	2,28E+03	0
299	7	1	6	12	1021	0,33432	0,00E+00	2,23E+03	2,19E+03	2,28E+03	0
298	7	1	-6	12	1021	0,33432	0,00E+00	2,23E+03	2,19E+03	2,28E+03	0
297	4	3	43	12	1021	0,33412	0,00E+00	2,23E+03	2,19E+03	2,28E+03	0
296	3	2	-59	12	1021	0,33393	0,00E+00	2,23E+03	2,19E+03	2,28E+03	0
295	5	1	49	12	1021	0,3338	0,00E+00	2,23E+03	2,19E+03	2,28E+03	0
294	5	3	-28	12	1021	0,33351	0,00E+00	2,23E+03	2,19E+03	2,28E+03	0
293	7	0	28	6	1021	0,33351	0,00E+00	2,23E+03	2,19E+03	2,28E+03	0
292	6	2	-23	12	1021	0,333	0,00E+00	2,22E+03	2,18E+03	2,27E+03	0
291	7	1	9	12	1021	0,33288	0,00E+00	2,22E+03	2,18E+03	2,27E+03	0
290	7	1	-9	12	1021	0,33288	0,00E+00	2,22E+03	2,18E+03	2,27E+03	0
289	4	2	-52	12	1021	0,33278	0,00E+00	2,22E+03	2,18E+03	2,27E+03	0
288	4	4	30	12	1021	0,33269	0,00E+00	2,22E+03	2,18E+03	2,27E+03	0
287	6	1	-37	12	1021	0,33214	0,00E+00	2,22E+03	2,18E+03	2,27E+03	0
286	2	0	60	12	1021	0,33206	0,00E+00	2,22E+03	2,18E+03	2,27E+03	0
285	2	-1	58	6	1021	0,3319	0,00E+00	2,22E+03	2,18E+03	2,27E+03	0
284	5	3	29	12	1021	0,3317	0,00E+00	2,21E+03	2,18E+03	2,27E+03	0
283	7	0	-29	6	1021	0,3317	0,00E+00	2,21E+03	2,18E+03	2,27E+03	0
282	3	1	-64	12	1021	0,33162	0,00E+00	2,21E+03	2,18E+03	2,27E+03	0
281	6	0	-45	6	1021	0,3314	0,00E+00	2,21E+03	2,17E+03	2,26E+03	0
280	6	0	45	6	1021	0,3314	0,00E+00	2,21E+03	2,17E+03	2,26E+03	0
279	4	3	-44	12	1021	0,33136	0,00E+00	2,21E+03	2,17E+03	2,26E+03	0
278	5	0	-55	6	1021	0,3312	0,00E+00	2,21E+03	2,17E+03	2,26E+03	0
277	5	2	42	12	1021	0,33109	0,00E+00	2,21E+03	2,17E+03	2,26E+03	0
276	5	2	-42	12	1021	0,33109	0,00E+00	2,21E+03	2,17E+03	2,26E+03	0
275	4	0	-62	6	1021	0,33102	0,00E+00	2,21E+03	2,17E+03	2,26E+03	0
274	7	1	-12	12	1021	0,33089	0,00E+00	2,21E+03	2,17E+03	2,26E+03	0
273	7	1	12	12	1021	0,33089	0,00E+00	2,21E+03	2,17E+03	2,26E+03	0
272	5	1	-50	12	1021	0,33067	0,00E+00	2,21E+03	2,17E+03	2,26E+03	0
271	6	2	25	12	1021	0,32998	0,00E+00	2,20E+03	2,16E+03	2,25E+03	0
270	6	1	38	12	1021	0,3298	0,00E+00	2,20E+03	2,16E+03	2,25E+03	0
269	4	2	53	12	1021	0,32949	0,00E+00	2,20E+03	2,16E+03	2,25E+03	0
268	3	3	54	12	1021	0,32898	0,00E+00	2,20E+03	2,16E+03	2,25E+03	0
267	6	2	-26	12	1021	0,32841	0,00E+00	2,19E+03	2,15E+03	2,24E+03	0
266	7	1	-15	12	1021	0,32839	0,00E+00	2,19E+03	2,15E+03	2,24E+03	0
265	7	1	15	12	1021	0,32839	0,00E+00	2,19E+03	2,15E+03	2,24E+03	0
264	7	0	31	6	1021	0,32799	0,00E+00	2,19E+03	2,15E+03	2,24E+03	0
263	5	3	-31	12	1021	0,32798	0,00E+00	2,19E+03	2,15E+03	2,24E+03	0
262	5	0	56	6	1021	0,32778	0,00E+00	2,19E+03	2,15E+03	2,24E+03	0
261	3	2	-63	12	1021	0,32763	0,00E+00	2,19E+03	2,15E+03	2,24E+03	0
260	2	1	-57	6	1021	0,32754	0,00E+00	2,19E+03	2,15E+03	2,24E+03	0
259	1	1	-55	6	1021	0,32703	0,00E+00	2,18E+03	2,14E+03	2,23E+03	0
258	4	4	33	12	1021	0,32684	0,00E+00	2,18E+03	2,14E+03	2,23E+03	0
257	3	2	61	12	1021	0,32648	0,00E+00	2,18E+03	2,14E+03	2,23E+03	0
256	2	3	-62	12	1021	0,3264	0,00E+00	2,18E+03	2,14E+03	2,23E+03	0
255	7	0	-32	6	1021	0,32608	0,00E+00	2,18E+03	2,14E+03	2,23E+03	0
254	5	3	32	12	1021	0,32608	0,00E+00	2,18E+03	2,14E+03	2,23E+03	0
253	1	2	-56	12	1021	0,32596	0,00E+00	2,18E+03	2,14E+03	2,23E+03	0
252	4	3	46	12	1021	0,32585	0,00E+00	2,17E+03	2,14E+03	2,23E+03	0
251	7	1	-18	12	1021	0,32541	0,00E+00	2,17E+03	2,13E+03	2,22E+03	0
250	7	1	18	12	1021	0,32541	0,00E+00	2,17E+03	2,13E+03	2,22E+03	0
249	6	2	28	12	1021	0,32516	0,00E+00	2,17E+03	2,13E+03	2,22E+03	0
248	6	1	-40	12	1021	0,32507	0,00E+00	2,17E+03	2,13E+03	2,22E+03	0
247	4	1	60	12	1021	0,3247	0,00E+00	2,17E+03	2,13E+03	2,22E+03	0
246	4	1	-60	12	1021	0,3247	0,00E+00	2,17E+03	2,13E+03	2,22E+03	0
245	5	1	52	12	1021	0,32449	0,00E+00	2,17E+03	2,13E+03	2,22E+03	0
244	5	4	1	12	1021	0,32427	0,00E+00	2,16E+03	2,13E+03	2,22E+03	0
243	5	4	-2	12	1021	0,32418	0,00E+00	2,16E+03	2,13E+03	2,22E+03	0
242	5	4	4	12	1021	0,32383	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
241	2	2	-58	12	1021	0,32367	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
240	5	4	-5	12	1021	0,32357	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0

239	6	2	-29	12	1021	0,32348	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
238	4	1	-64	6	1021	0,3234	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
237	5	2	45	12	1021	0,3232	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
236	5	2	-45	12	1021	0,3232	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
235	4	3	-47	12	1021	0,32311	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
234	4	2	-55	12	1021	0,32302	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
233	6	0	48	6	1021	0,32297	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
232	6	0	-48	6	1021	0,32297	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
231	5	4	7	12	1021	0,32287	0,00E+00	2,16E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
230	3	2	-62	12	1021	0,32285	0,00E+00	2,15E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
229	6	1	41	12	1021	0,3227	0,00E+00	2,15E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
228	1	-1	54	6	1021	0,32268	0,00E+00	2,15E+03	2,12E+03	2,21E+03	0
227	3	1	-59	6	1021	0,32246	0,00E+00	2,15E+03	2,11E+03	2,20E+03	0
226	3	-1	59	6	1021	0,32246	0,00E+00	2,15E+03	2,11E+03	2,20E+03	0
225	5	4	-8	12	1021	0,32243	0,00E+00	2,15E+03	2,11E+03	2,20E+03	0
224	7	0	34	6	1021	0,32221	0,00E+00	2,15E+03	2,11E+03	2,20E+03	0
223	5	3	-34	12	1021	0,32221	0,00E+00	2,15E+03	2,11E+03	2,20E+03	0
222	7	1	-21	12	1021	0,32198	0,00E+00	2,15E+03	2,11E+03	2,20E+03	0
221	7	1	21	12	1021	0,32198	0,00E+00	2,15E+03	2,11E+03	2,20E+03	0
220	5	1	-53	12	1021	0,32143	0,00E+00	2,15E+03	2,11E+03	2,20E+03	0
219	5	4	10	12	1021	0,3214	0,00E+00	2,15E+03	2,11E+03	2,20E+03	0
218	5	0	-58	6	1021	0,32106	0,00E+00	2,14E+03	2,10E+03	2,19E+03	0
217	0	1	-53	2	1021	0,321	0,00E+00	2,14E+03	2,10E+03	2,19E+03	0
216	5	4	-11	12	1021	0,3208	0,00E+00	2,14E+03	2,10E+03	2,19E+03	0
215	4	4	36	12	1021	0,32078	0,00E+00	2,14E+03	2,10E+03	2,19E+03	0
214	7	0	-35	6	1021	0,32023	0,00E+00	2,14E+03	2,10E+03	2,19E+03	0
213	5	3	35	12	1021	0,32023	0,00E+00	2,14E+03	2,10E+03	2,19E+03	0
212	6	2	31	12	1021	0,32003	0,00E+00	2,14E+03	2,10E+03	2,19E+03	0
211	3	0	61	12	1021	0,3199	0,00E+00	2,14E+03	2,10E+03	2,19E+03	0
210	4	2	56	12	1021	0,31984	0,00E+00	2,13E+03	2,10E+03	2,19E+03	0
209	4	-1	63	6	1021	0,31971	0,00E+00	2,13E+03	2,10E+03	2,19E+03	0
208	2	0	57	12	1021	0,31962	0,00E+00	2,13E+03	2,09E+03	2,19E+03	0
207	5	4	13	12	1021	0,31944	0,00E+00	2,13E+03	2,09E+03	2,18E+03	0
206	3	3	57	12	1021	0,31921	0,00E+00	2,13E+03	2,09E+03	2,18E+03	0
205	2	-1	55	6	1021	0,31915	0,00E+00	2,13E+03	2,09E+03	2,18E+03	0
204	6	3	0	12	1021	0,31911	0,00E+00	2,13E+03	2,09E+03	2,18E+03	0
203	6	3	-3	12	1021	0,31886	0,00E+00	2,13E+03	2,09E+03	2,18E+03	0
202	6	3	3	12	1021	0,31886	0,00E+00	2,13E+03	2,09E+03	2,18E+03	0
201	5	4	-14	12	1021	0,31868	0,00E+00	2,13E+03	2,09E+03	2,18E+03	0
200	6	2	-32	12	1021	0,31827	0,00E+00	2,12E+03	2,09E+03	2,18E+03	0
199	7	1	24	12	1021	0,31816	0,00E+00	2,12E+03	2,09E+03	2,18E+03	0
198	7	1	-24	12	1021	0,31816	0,00E+00	2,12E+03	2,09E+03	2,18E+03	0
197	6	3	6	12	1021	0,31811	0,00E+00	2,12E+03	2,08E+03	2,18E+03	0
196	6	3	-6	12	1021	0,31811	0,00E+00	2,12E+03	2,08E+03	2,18E+03	0
195	6	1	-43	12	1021	0,31794	0,00E+00	2,12E+03	2,08E+03	2,17E+03	0
194	5	0	59	6	1021	0,31778	0,00E+00	2,12E+03	2,08E+03	2,17E+03	0
193	4	3	49	12	1021	0,31766	0,00E+00	2,12E+03	2,08E+03	2,17E+03	0
192	5	4	16	12	1021	0,31702	0,00E+00	2,12E+03	2,08E+03	2,17E+03	0
191	6	3	-9	12	1021	0,31686	0,00E+00	2,11E+03	2,08E+03	2,17E+03	0
190	6	3	9	12	1021	0,31686	0,00E+00	2,11E+03	2,08E+03	2,17E+03	0
189	8	0	-1	6	1021	0,31658	0,00E+00	2,11E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
188	8	0	2	6	1021	0,3165	0,00E+00	2,11E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
187	7	0	37	6	1021	0,31623	0,00E+00	2,11E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
186	5	3	-37	12	1021	0,31623	0,00E+00	2,11E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
185	8	0	-4	6	1021	0,31617	0,00E+00	2,11E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
184	3	2	-60	12	1021	0,31616	0,00E+00	2,11E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
183	5	4	-17	12	1021	0,31612	0,00E+00	2,11E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
182	8	0	5	6	1021	0,31593	0,00E+00	2,11E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
181	3	3	-64	12	1021	0,31577	0,00E+00	2,11E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
180	6	1	44	12	1021	0,31555	0,00E+00	2,11E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
179	5	1	55	12	1021	0,31542	0,00E+00	2,11E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
178	5	2	48	12	1021	0,31537	0,00E+00	2,10E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
177	5	2	-48	12	1021	0,31537	0,00E+00	2,10E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
176	8	0	-7	6	1021	0,31528	0,00E+00	2,10E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
175	6	3	-12	12	1021	0,31515	0,00E+00	2,10E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
174	6	3	12	12	1021	0,31515	0,00E+00	2,10E+03	2,07E+03	2,16E+03	0
173	2	1	-54	6	1021	0,3151	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,16E+03	0
172	4	3	-50	12	1021	0,31496	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
171	2	3	-59	12	1021	0,31489	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
170	8	0	8	6	1021	0,31487	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
169	6	0	-51	6	1021	0,31467	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0

168	6	0	51	6	1021	0,31467	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
167	6	2	34	12	1021	0,31466	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
166	4	4	39	12	1021	0,31456	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
165	4	1	63	12	1021	0,31433	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
164	4	1	-63	12	1021	0,31433	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
163	1	1	-52	6	1021	0,31432	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
162	7	0	-38	6	1021	0,3142	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
161	5	3	38	12	1021	0,3142	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
160	5	4	19	12	1021	0,31417	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
159	7	1	-27	12	1021	0,314	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
158	7	1	27	12	1021	0,314	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
157	8	0	-10	6	1021	0,31391	0,00E+00	2,10E+03	2,06E+03	2,15E+03	0
156	4	2	-58	12	1021	0,3136	0,00E+00	2,09E+03	2,05E+03	2,15E+03	0
155	1	2	-53	12	1021	0,31353	0,00E+00	2,09E+03	2,05E+03	2,14E+03	0
154	8	0	11	6	1021	0,31335	0,00E+00	2,09E+03	2,05E+03	2,14E+03	0
153	5	4	-20	12	1021	0,31314	0,00E+00	2,09E+03	2,05E+03	2,14E+03	0
152	6	3	15	12	1021	0,31299	0,00E+00	2,09E+03	2,05E+03	2,14E+03	0
151	6	3	-15	12	1021	0,31299	0,00E+00	2,09E+03	2,05E+03	2,14E+03	0
150	6	2	-35	12	1021	0,31282	0,00E+00	2,09E+03	2,05E+03	2,14E+03	0
149	4	1	-61	6	1021	0,31251	0,00E+00	2,09E+03	2,05E+03	2,14E+03	0
148	5	1	-56	12	1021	0,31246	0,00E+00	2,09E+03	2,05E+03	2,14E+03	0
147	3	1	63	12	1021	0,31233	0,00E+00	2,08E+03	2,05E+03	2,14E+03	0
146	8	0	-13	6	1021	0,31208	0,00E+00	2,08E+03	2,04E+03	2,13E+03	0
145	2	2	-55	12	1021	0,31181	0,00E+00	2,08E+03	2,04E+03	2,13E+03	0
144	8	0	14	6	1021	0,31138	0,00E+00	2,08E+03	2,04E+03	2,13E+03	0
143	5	0	-61	6	1021	0,31133	0,00E+00	2,08E+03	2,04E+03	2,13E+03	0
142	5	4	22	12	1021	0,31093	0,00E+00	2,08E+03	2,04E+03	2,13E+03	0
141	3	1	-56	6	1021	0,31088	0,00E+00	2,07E+03	2,04E+03	2,13E+03	0
140	3	-1	56	6	1021	0,31088	0,00E+00	2,07E+03	2,04E+03	2,13E+03	0
139	6	1	-46	12	1021	0,31078	0,00E+00	2,07E+03	2,04E+03	2,13E+03	0
138	4	2	59	12	1021	0,31053	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
137	6	3	-18	12	1021	0,3104	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
136	6	3	18	12	1021	0,3104	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
135	1	-1	51	6	1021	0,3103	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
134	7	0	40	6	1021	0,31011	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
133	5	3	-40	12	1021	0,31011	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
132	8	0	-16	6	1021	0,30982	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
131	3	3	60	12	1021	0,30979	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
130	5	4	-23	12	1021	0,30977	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
129	4	3	52	12	1021	0,3096	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
128	7	1	30	12	1021	0,30953	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
127	7	1	-30	12	1021	0,30953	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
126	7	2	-1	12	1021	0,30941	0,00E+00	2,07E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
125	7	2	2	12	1021	0,30934	0,00E+00	2,06E+03	2,03E+03	2,12E+03	0
124	6	2	37	12	1021	0,30909	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,11E+03	0
123	7	2	-4	12	1021	0,30903	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,11E+03	0
122	4	-1	60	6	1021	0,30902	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,11E+03	0
121	8	0	17	6	1021	0,30898	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,11E+03	0
120	3	0	58	12	1021	0,30889	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,11E+03	0
119	7	2	5	12	1021	0,3088	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,11E+03	0
118	0	1	-50	2	1021	0,30865	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,11E+03	0
117	6	1	47	12	1021	0,3084	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,11E+03	0
116	4	4	42	12	1021	0,30823	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,09E+03	0
115	7	2	-7	12	1021	0,30819	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,09E+03	0
114	5	0	62	6	1021	0,30818	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,09E+03	0
113	7	0	-41	6	1021	0,30805	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,09E+03	0
112	5	3	41	12	1021	0,30805	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,09E+03	0
111	2	0	54	12	1021	0,30803	0,00E+00	2,06E+03	2,02E+03	2,09E+03	0
110	7	2	8	12	1021	0,30782	0,00E+00	2,05E+03	2,02E+03	2,09E+03	0
109	5	2	-51	12	1021	0,30763	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,09E+03	0
108	5	2	51	12	1021	0,30763	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,09E+03	0
107	6	3	21	12	1021	0,30742	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,09E+03	0
106	6	3	-21	12	1021	0,30742	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,09E+03	0
105	5	4	25	12	1021	0,30734	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,09E+03	0
104	2	-1	52	6	1021	0,3073	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,09E+03	0
103	6	2	-38	12	1021	0,30719	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,09E+03	0
102	8	0	-19	6	1021	0,30716	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,09E+03	0
101	4	3	-53	12	1021	0,30695	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,09E+03	0
100	7	2	-10	12	1021	0,30691	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,09E+03	0
99	5	1	58	12	1021	0,30662	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,08E+03	0
98	6	0	-54	6	1021	0,30653	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,08E+03	0

97	6	0	54	6	1021	0,30653	0,00E+00	2,05E+03	2,01E+03	2,08E+03	0
96	7	2	11	12	1021	0,30639	0,00E+00	2,04E+03	2,01E+03	2,08E+03	0
95	8	0	20	6	1021	0,30619	0,00E+00	2,04E+03	2,01E+03	2,08E+03	0
94	5	4	-26	12	1021	0,30607	0,00E+00	2,04E+03	2,00E+03	2,08E+03	0
93	3	3	-61	12	1021	0,30561	0,00E+00	2,04E+03	2,00E+03	2,08E+03	0
92	3	2	-57	12	1021	0,30537	0,00E+00	2,04E+03	2,00E+03	2,08E+03	0
91	7	2	-13	12	1021	0,30521	0,00E+00	2,04E+03	2,00E+03	2,07E+03	0
90	7	1	-33	12	1021	0,3048	0,00E+00	2,03E+03	2,00E+03	2,07E+03	0
89	7	1	33	12	1021	0,3048	0,00E+00	2,03E+03	2,00E+03	2,07E+03	0
88	7	2	14	12	1021	0,30455	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,07E+03	0
87	4	2	-61	12	1021	0,30451	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,07E+03	0
86	4	2	-62	12	1021	0,30444	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,07E+03	0
85	4	0	62	12	1021	0,30444	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,07E+03	0
84	8	0	-22	6	1021	0,30414	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,07E+03	0
83	6	3	24	12	1021	0,30409	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,07E+03	0
82	6	3	-24	12	1021	0,30409	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,07E+03	0
81	2	3	-56	12	1021	0,30408	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,07E+03	0
80	7	0	43	6	1021	0,3039	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,07E+03	0
79	5	3	-43	12	1021	0,3039	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,07E+03	0
78	5	1	-59	12	1021	0,30376	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,06E+03	0
77	6	1	-49	12	1021	0,30366	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,06E+03	0
76	2	1	-51	6	1021	0,30354	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,06E+03	0
75	5	4	28	12	1021	0,30343	0,00E+00	2,03E+03	1,99E+03	2,06E+03	0
74	6	2	40	12	1021	0,30336	0,00E+00	2,02E+03	1,99E+03	2,06E+03	0
73	7	2	-16	12	1021	0,3031	0,00E+00	2,02E+03	1,98E+03	2,06E+03	0
72	8	0	23	6	1021	0,30305	0,00E+00	2,02E+03	1,98E+03	2,06E+03	0
71	1	1	-49	6	1021	0,30256	0,00E+00	2,02E+03	1,98E+03	2,06E+03	0
70	3	1	60	12	1021	0,30234	0,00E+00	2,02E+03	1,98E+03	2,05E+03	0
69	7	2	17	12	1021	0,30231	0,00E+00	2,02E+03	1,98E+03	2,05E+03	0
68	4	1	-58	6	1021	0,30222	0,00E+00	2,02E+03	1,98E+03	2,05E+03	0
67	5	4	-29	12	1021	0,30207	0,00E+00	2,02E+03	1,98E+03	2,05E+03	0
66	5	0	-64	6	1021	0,30201	0,00E+00	2,02E+03	1,98E+03	2,05E+03	0
65	1	2	-50	12	1021	0,302	0,00E+00	2,02E+03	1,98E+03	2,05E+03	0
64	4	4	45	12	1021	0,30184	0,00E+00	2,01E+03	1,98E+03	2,05E+03	0
63	5	3	44	12	1021	0,30181	0,00E+00	2,01E+03	1,98E+03	2,05E+03	0
62	7	0	-44	6	1021	0,30181	0,00E+00	2,01E+03	1,98E+03	2,05E+03	0
61	4	3	55	12	1021	0,3017	0,00E+00	2,01E+03	1,98E+03	2,05E+03	0
60	4	2	62	12	1021	0,30156	0,00E+00	2,01E+03	1,97E+03	2,05E+03	0
59	6	2	-41	12	1021	0,30143	0,00E+00	2,01E+03	1,97E+03	2,05E+03	0
58	6	1	50	12	1021	0,30129	0,00E+00	2,01E+03	1,97E+03	2,05E+03	0
57	8	0	-25	6	1021	0,30077	0,00E+00	2,01E+03	1,97E+03	2,04E+03	0
56	3	3	63	12	1021	0,30074	0,00E+00	2,01E+03	1,97E+03	2,04E+03	0
55	2	2	-52	12	1021	0,30074	0,00E+00	2,01E+03	1,97E+03	2,04E+03	0
54	7	2	-19	12	1021	0,30061	0,00E+00	2,01E+03	1,97E+03	2,04E+03	0
53	6	3	27	12	1021	0,30045	0,00E+00	2,01E+03	1,97E+03	2,04E+03	0
52	6	3	-27	12	1021	0,30045	0,00E+00	2,01E+03	1,97E+03	2,04E+03	0
51	3	1	-53	6	1021	0,30004	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,04E+03	0
50	3	-1	53	6	1021	0,30004	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,04E+03	0
49	5	2	54	12	1021	0,30001	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,04E+03	0
48	5	2	-54	12	1021	0,30001	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,04E+03	0
47	7	1	36	12	1021	0,29987	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,04E+03	0
46	7	1	-36	12	1021	0,29987	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,04E+03	0
45	7	2	20	12	1021	0,2997	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,04E+03	0
44	8	0	26	6	1021	0,29958	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,04E+03	0
43	5	4	31	12	1021	0,29926	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,03E+03	0
42	4	3	-56	12	1021	0,2991	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,03E+03	0
41	5	1	-63	6	1021	0,29899	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,03E+03	0
40	4	-1	57	6	1021	0,29892	0,00E+00	2,00E+03	1,96E+03	2,03E+03	0
39	1	-1	48	6	1021	0,29883	0,00E+00	1,99E+03	1,96E+03	2,03E+03	0
38	6	0	57	6	1021	0,29858	0,00E+00	1,99E+03	1,95E+03	2,03E+03	0
37	6	0	-57	6	1021	0,29858	0,00E+00	1,99E+03	1,95E+03	2,03E+03	0
36	3	0	55	12	1021	0,29853	0,00E+00	1,99E+03	1,95E+03	2,03E+03	0
35	5	1	61	12	1021	0,29811	0,00E+00	1,99E+03	1,95E+03	2,03E+03	0
34	5	4	-32	12	1021	0,29781	0,00E+00	1,99E+03	1,95E+03	2,02E+03	0
33	7	2	-22	12	1021	0,29776	0,00E+00	1,99E+03	1,95E+03	2,02E+03	0
32	7	0	46	6	1021	0,29763	0,00E+00	1,99E+03	1,95E+03	2,02E+03	0
31	5	3	-46	12	1021	0,29763	0,00E+00	1,99E+03	1,95E+03	2,02E+03	0
30	6	2	43	12	1021	0,29754	0,00E+00	1,99E+03	1,95E+03	2,02E+03	0
29	0	1	-47	2	1021	0,29722	0,00E+00	1,98E+03	1,95E+03	2,02E+03	0
28	2	0	51	12	1021	0,29721	0,00E+00	1,98E+03	1,95E+03	2,02E+03	0
27	8	0	-28	6	1021	0,29711	0,00E+00	1,98E+03	1,94E+03	2,02E+03	0

26	7	2	23	12	1021	0,29674	0,00E+00	1,98E+03	1,94E+03	2,02E+03	0
25	6	1	-52	12	1021	0,29659	0,00E+00	1,98E+03	1,94E+03	2,02E+03	0
24	6	3	-30	12	1021	0,29653	0,00E+00	1,98E+03	1,94E+03	2,02E+03	0
23	6	3	30	12	1021	0,29653	0,00E+00	1,98E+03	1,94E+03	2,02E+03	0
22	8	1	1	12	1021	0,29643	0,00E+00	1,98E+03	1,94E+03	2,02E+03	0
21	8	1	-2	12	1021	0,29636	0,00E+00	1,98E+03	1,94E+03	2,01E+03	0
20	2	-1	49	6	1021	0,29629	0,00E+00	1,98E+03	1,94E+03	2,01E+03	0
19	8	1	4	12	1021	0,29609	0,00E+00	1,98E+03	1,94E+03	2,01E+03	0
18	3	3	-58	12	1021	0,29597	0,00E+00	1,98E+03	1,94E+03	2,01E+03	0
17	8	1	-5	12	1021	0,29589	0,00E+00	1,97E+03	1,94E+03	2,01E+03	0
16	8	0	29	6	1021	0,29582	0,00E+00	1,97E+03	1,94E+03	2,01E+03	0
15	4	2	-64	12	1021	0,29577	0,00E+00	1,97E+03	1,94E+03	2,01E+03	0
14	6	2	-44	12	1021	0,29558	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,01E+03	0
13	5	3	47	12	1021	0,29554	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,01E+03	0
12	7	0	-47	6	1021	0,29554	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,01E+03	0
11	4	4	48	12	1021	0,29543	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,01E+03	0
10	8	1	7	12	1021	0,29535	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,01E+03	0
9	5	1	-62	12	1021	0,29534	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,01E+03	0
8	3	2	-54	12	1021	0,29521	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,01E+03	0
7	4	2	-59	12	1021	0,29504	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,01E+03	0
6	4	0	59	12	1021	0,29504	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,01E+03	0
5	8	1	-8	12	1021	0,29502	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,01E+03	0
4	5	4	34	12	1021	0,29485	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,00E+03	0
3	7	1	39	12	1021	0,29477	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,00E+03	0
2	7	1	-39	12	1021	0,29477	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,00E+03	0
1	7	2	-25	12	1021	0,2946	0,00E+00	1,97E+03	1,93E+03	2,00E+03	0

Tabelle A 10: Kristallographische Daten Von Ag_2NiO_2 aus Einkristallröntgenstrukturverfeinerung:

Metrik

Summenformel	$\text{Ag}_6 \text{Ni}_3 \text{O}_6$
Formelmasse	919.28
Kristallsystem	trigonal
Raumgruppe	$R\bar{3}m$ (no. 166)
Gitterparameter	$a = 2.9193(4) \text{ \AA}$ $c = 24.0309(41) \text{ \AA}$
Zellvolumen	$177.36(5) \text{ \AA}^3$
Berechnete Dichte	8.606 g/cm^3
Pearson Code	hR5
Formeltyp	AB_2N_2
Wyckoff Sequenz	c^2a

Atomkoordinaten

Atom	Ox.	Wyck.	x	y	z
Ag	+1	6c	0	0	0.21395
Ni	+3	3a	0	0	0
O	-2	6c	0	0	0.37589

Anisotropische Schwingungsfaktoren (in \AA^2)

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Ag	0.01203	0.01203	0.01093	0.00601	0.00000	0.00000
Ni	0.00595	0.00595	0.00837	0.00297	0.00000	0.00000
O	0.01254	0.01254	0.01182	0.00627	0.00000	0.00000

Tabelle A 11: gemessene und berechnete Struktur Faktoren für $\text{Sr}_4\text{Pd}_3\text{O}_9$ aus Röntgenpulverdaten, Aufstellung in P 3 2 1 (Nr. 150)

h	k	l	2Theta	D-Value	Mult.	Fobs	Fcalc	Icalc	Iobs
0	1	1	15,084	5,869	6	2,156	2,163	8	8
1	1	0	18,332	4,836	6	22,502	22,498	565	565
1	1	1	21,296	4,169	12	2,144	2,284	9	8
2	0	1	23,823	3,732	6	3,525	3,752	9	8
0	1	2	24,086	3,692	6	4,947	5,904	23	16
1	0	2	24,086	3,692	6	4,23	5,049	17	12
1	2	0	28,166	3,166	6	3,439	3,639	6	6
2	1	0	28,166	3,166	6	3,513	3,718	7	6
1	1	2	28,466	3,133	12	31,919	32,366	1000	973
1	2	1	30,226	2,954	12	2,657	3,09	8	6
2	1	1	30,226	2,954	12	3,655	4,251	15	11
2	0	2	30,437	2,934	6	5,597	6,694	19	13
0	3	0	32,032	2,792	3	64,377	64,661	799	792
3	0	0	32,032	2,792	3	67,696	67,995	884	876
0	3	1	33,879	2,644	6	4,813	5,026	9	8
3	0	1	33,879	2,644	6	5,127	5,354	10	9
0	1	3	34,386	2,606	6	19,569	19,373	126	128
1	2	2	35,763	2,509	12	4,759	5,848	21	14
2	1	2	35,763	2,509	12	3,368	4,139	11	7
2	2	0	37,155	2,418	6	5,063	5,246	8	7
1	1	3	37,682	2,385	12	3,779	3,615	7	8
1	3	0	38,731	2,323	6	5,528	5,299	8	8
3	1	0	38,731	2,323	6	5,7	5,464	8	9
2	2	1	38,788	2,32	12	5,956	5,801	18	19
0	3	2	38,958	2,31	6	9,212	8,865	21	23
3	0	2	38,958	2,31	6	9,797	9,427	24	26
0	2	3	39,24	2,294	6	7,173	7,157	13	14
2	0	3	39,24	2,294	6	21,205	21,161	118	118
1	3	1	40,31	2,236	12	7,837	8,414	36	31
3	1	1	40,31	2,236	12	3,437	3,691	7	6
0	4	0	43,169	2,094	3	7,216	6,4	5	6
4	0	0	43,169	2,094	3	7,588	6,73	5	6
2	2	2	43,377	2,084	12	45,746	41,831	771	922
1	2	3	43,635	2,073	12	18,524	17,582	135	150
2	1	3	43,635	2,073	12	10,061	9,55	40	44
0	0	4	43,994	2,057	2	46,454	40,362	117	155
0	4	1	44,618	2,029	6	5,666	5,863	7	7
4	0	1	44,618	2,029	6	6,684	6,917	10	9
1	3	2	44,77	2,023	12	3,645	3,842	6	6
3	1	2	44,77	2,023	12	3,674	3,872	6	6
0	1	4	45,373	1,997	6	6,319	6,775	9	8
1	1	4	48,036	1,893	12	20,25	20,719	159	152
3	2	1	48,62	1,871	12	4,736	5,409	11	8
2	2	3	50,27	1,814	12	7,282	7,9	21	18
1	4	1	51,155	1,784	12	4,442	4,64	7	7
4	1	1	51,155	1,784	12	4,632	4,839	8	7
1	3	3	51,519	1,772	12	5,01	5,63	10	8
3	1	3	51,519	1,772	12	11,23	12,62	52	41
2	3	2	52,523	1,741	12	4,808	5,146	8	7
1	4	2	54,928	1,67	12	19,65	21,51	137	114
4	1	2	54,928	1,67	12	20,527	22,469	150	125
0	4	3	55,145	1,664	6	8,23	9,324	13	10
0	3	4	55,448	1,656	6	19,442	21,196	66	55
3	0	4	55,448	1,656	6	20,361	22,197	72	61
0	1	5	56,999	1,614	6	6,418	6,068	5	6
3	3	0	57,094	1,612	6	40,327	38,38	205	227
2	4	0	58,241	1,583	6	6,492	5,712	4	6
4	2	0	58,241	1,583	6	6,633	5,835	5	6
3	3	1	58,283	1,582	12	6,621	5,844	9	12
2	3	3	58,617	1,574	12	14,641	13,328	48	57
3	2	3	58,617	1,574	12	9,732	8,859	21	25
2	2	4	58,908	1,567	12	25,338	21,515	123	171
2	4	1	59,416	1,554	12	4,643	4,159	5	6
4	2	1	59,416	1,554	12	4,681	4,193	5	6
1	4	3	60,861	1,521	12	5,351	6,092	9	7
4	1	3	60,861	1,521	12	5,581	6,353	10	8

3	3	2	61,764	1,501	12	8,448	9,574	23	18
4	2	2	62,858	1,477	12	5,029	4,72	5	6
5	0	3	65,212	1,429	6	10,785	11,401	15	13
1	5	2	66,081	1,413	12	4,92	5,257	6	5
0	6	0	66,983	1,396	3	42,016	41,809	96	97
6	0	0	66,983	1,396	3	44,182	43,965	106	107
2	4	3	68,376	1,371	12	5,576	5,536	7	7
4	2	3	68,376	1,371	12	9,105	9,039	17	18
1	4	4	68,644	1,366	12	18,513	16,18	56	73
4	1	4	68,644	1,366	12	19,242	16,817	60	79
3	4	1	69,111	1,358	12	5,466	4,805	5	6
4	3	1	69,111	1,358	12	6,714	5,902	7	10
0	1	6	69,406	1,353	6	8,488	7,426	6	8
1	0	6	69,406	1,353	6	9,809	8,582	8	10
1	3	5	70,022	1,343	12	6,402	5,95	7	9
0	6	2	71,285	1,322	6	7,541	7,37	6	6
6	0	2	71,285	1,322	6	8,031	7,85	6	7
1	1	6	71,463	1,319	12	21,441	20,811	88	93
1	5	3	71,473	1,319	12	9,041	8,776	16	17
2	5	2	74,329	1,275	12	18,179	17,254	57	64
5	2	2	74,329	1,275	12	18,776	17,82	61	68
3	3	4	74,772	1,269	12	15,318	15,84	48	45
1	2	6	75,508	1,258	12	5,327	5,241	5	5
2	1	6	75,508	1,258	12	6,06	5,962	7	7
2	2	6	80,464	1,193	12	20,435	20,629	75	73
1	3	6	81,445	1,181	12	5,581	5,9	6	5
4	4	2	83,231	1,16	12	16,301	20,144	69	45
0	6	4	83,661	1,155	6	14,728	18,144	28	18
6	0	4	83,661	1,155	6	15,662	19,296	31	21
2	5	4	86,579	1,123	12	14,136	12,571	26	33
5	2	4	86,579	1,123	12	14,585	12,97	27	35
4	4	3	88,27	1,106	12	6,274	6,067	6	6
1	4	6	89,231	1,097	12	15,416	15,555	39	38
4	1	6	89,231	1,097	12	15,906	16,05	41	40
3	5	3	89,24	1,097	12	6,983	7,048	8	8
5	3	3	89,24	1,097	12	7,564	7,634	9	9
1	7	2	91,97	1,071	12	13,36	13,555	29	28
7	1	2	91,97	1,071	12	14,058	14,263	32	31
2	6	3	92,148	1,07	12	6,976	6,958	8	8
6	2	3	92,148	1,07	12	6,162	6,147	6	6
3	6	0	93,769	1,055	6	22,167	20,811	33	38
6	3	0	93,769	1,055	6	22,645	21,26	35	39
4	4	4	95,312	1,042	12	13,523	12,581	24	28
0	0	8	97,029	1,028	2	17,871	17,816	8	8
3	6	2	97,809	1,022	12	8,186	8,623	11	10
6	3	2	97,809	1,022	12	8,395	8,843	12	11
1	1	8	99,969	1,006	12	10,67	10,257	16	17
1	7	4	104,171	0,976	12	11,174	10,11	15	18
7	1	4	104,171	0,976	12	11,768	10,647	17	20
0	3	8	105,939	0,965	6	12,542	12,024	11	11
3	0	8	105,939	0,965	6	12,874	12,343	11	12
2	5	6	106,922	0,959	12	13,281	13,217	25	26
5	2	6	106,922	0,959	12	13,651	13,586	27	27
2	2	8	108,988	0,946	12	10,239	9,997	15	15
5	5	2	109,808	0,941	12	9,924	9,933	14	14
3	6	4	110,263	0,939	12	9,431	9,85	14	13
6	3	4	110,263	0,939	12	9,675	10,105	15	14
0	9	0	111,729	0,931	3	17,036	16,936	10	11
9	0	0	111,729	0,931	3	17,914	17,81	12	12
4	4	6	116,316	0,907	12	12,31	13,204	26	22
1	4	8	118,53	0,896	12	9,363	8,82	12	13
4	1	8	118,53	0,896	12	9,604	9,047	12	14
2	8	2	119,414	0,892	12	12,59	11,966	21	24
8	2	2	119,414	0,892	12	13,13	12,48	23	26
5	5	4	123,32	0,875	12	10,024	10,018	15	15

Tabelle A 12: gemessene und berechnete Strukturaktoren für $\text{Sr}_4\text{Pd}_3\text{O}_9$ aus Röntgenpulverdaten, Aufstellung in P 3 2 1 (Nr. 150) unter Berücksichtigung quadratisch planarer Bauelemente.

h	k	l	2Theta	D-Value	Mult.	Fobs	Fcalc	Icalc	Iobs
0	1	1	15,083	5,869	6	4,337	5,275	44	30
1	1	0	18,331	4,836	6	23,219	23,059	572	580
0	0	2	21,588	4,113	2	5,499	5,82	9	8
2	0	1	23,822	3,732	6	3,727	4,051	11	9
0	1	2	24,085	3,692	6	3,566	3,742	9	8
1	1	2	28,465	3,133	12	32,94	32,972	1000	998
1	2	1	30,224	2,955	12	4,823	5,937	29	19
2	1	1	30,224	2,955	12	3,436	4,229	15	10
0	3	0	32,03	2,792	3	65,291	63,025	732	785
3	0	0	32,03	2,792	3	70,399	67,957	850	913
0	3	1	33,878	2,644	6	4,203	4,341	6	6
3	0	1	33,878	2,644	6	5,748	5,937	12	11
1	0	3	34,386	2,606	6	19	17,444	98	117
2	1	2	35,762	2,509	12	5,286	6,241	23	17
2	2	0	37,153	2,418	6	6,838	7,373	15	13
2	2	1	38,786	2,32	12	5,991	5,276	14	19
0	3	2	38,957	2,31	6	8,075	7,083	13	17
3	0	2	38,957	2,31	6	7,796	6,838	12	16
0	2	3	39,239	2,294	6	22,195	22,066	124	125
2	0	3	39,239	2,294	6	8,306	8,258	17	18
1	3	1	40,308	2,236	12	5,624	6,437	20	15
3	1	1	40,308	2,236	12	8,355	9,564	44	34
2	2	2	43,375	2,084	12	45,362	37,783	606	874
1	2	3	43,634	2,073	12	9,262	8,674	32	36
2	1	3	43,634	2,073	12	23,647	22,147	206	235
0	0	4	43,994	2,057	2	40,616	30,757	65	114
0	4	1	44,616	2,029	6	9,772	9,94	20	19
1	3	2	44,768	2,023	12	5,083	5,277	11	10
1	1	4	48,036	1,893	12	21,21	22,307	177	160
2	3	1	48,617	1,871	12	4,439	5,152	9	7
3	2	1	48,617	1,871	12	4,491	5,212	9	7
2	2	3	50,268	1,814	12	4,655	4,668	7	7
1	4	1	51,152	1,784	12	5,935	6,814	15	11
4	1	1	51,152	1,784	12	7,085	8,133	21	16
1	3	3	51,517	1,773	12	12,505	14,988	71	50
3	1	3	51,517	1,773	12	4,471	5,358	9	6
3	2	2	52,521	1,741	12	6,33	7,14	16	12
2	1	4	53,058	1,725	12	5,037	5,66	10	8
1	4	2	54,925	1,67	12	19,704	21,096	127	111
4	1	2	54,925	1,67	12	20,715	22,178	140	123
4	0	3	55,143	1,664	6	10,609	11,879	20	16
0	3	4	55,446	1,656	6	19,365	20,884	61	53
3	0	4	55,446	1,656	6	21,341	23,015	75	64
1	0	5	56,998	1,614	6	10,785	10,032	14	16
3	3	0	57,091	1,612	6	39,821	37,064	185	213
3	3	1	58,28	1,582	12	10,151	9,121	22	27
2	3	3	58,615	1,574	12	7,251	6,715	12	14
3	2	3	58,615	1,574	12	16,554	15,33	61	71
2	2	4	58,906	1,567	12	25,272	21,676	120	163
1	1	5	59,28	1,558	12	6,569	6,136	10	11
2	4	1	59,413	1,554	12	5,27	5,213	7	7
4	2	1	59,413	1,554	12	10,395	10,282	27	27
1	3	4	60,032	1,54	12	7,376	7,396	14	14
0	2	5	60,401	1,531	6	8,541	8,956	10	9
3	3	2	61,761	1,501	12	6,39	6,804	11	10
1	5	1	62,735	1,48	12	7,299	7,413	13	12
5	1	1	62,735	1,48	12	4,721	4,794	5	5
2	4	2	62,855	1,477	12	5,924	6,042	8	8
4	0	4	63,335	1,467	6	7,177	7,198	6	6
2	1	5	63,693	1,46	12	6,507	6,547	10	10
0	5	3	65,209	1,43	6	7,872	7,911	7	7
3	2	4	66,545	1,404	12	6,45	7,206	11	9
0	6	0	66,979	1,396	3	41,522	41,407	91	91
6	0	0	66,979	1,396	3	44,771	44,647	106	106

3	3	3	67,327	1,39	12	5,239	5,451	6	6
0	6	1	68,066	1,376	6	7,209	8,013	7	5
6	0	1	68,066	1,376	6	8,222	9,138	9	7
0	0	6	68,366	1,371	2	20,334	21,354	16	14
2	4	3	68,373	1,371	12	7,91	8,278	14	13
4	2	3	68,373	1,371	12	4,925	5,154	5	5
1	4	4	68,641	1,366	12	19,129	17,45	63	75
4	1	4	68,641	1,366	12	19,744	18,012	67	80
3	4	1	69,107	1,358	12	10,608	9,707	19	23
4	3	1	69,107	1,358	12	7,755	7,096	10	12
0	1	6	69,405	1,353	6	11,245	9,859	10	13
2	5	0	70,103	1,341	6	8,102	7,507	6	7
5	2	0	70,103	1,341	6	8,433	7,813	6	7
2	5	1	71,168	1,324	12	6,58	6,429	8	8
5	2	1	71,168	1,324	12	7,04	6,878	9	10
1	1	6	71,462	1,319	12	21,267	20,141	79	88
5	1	3	71,469	1,319	12	6,598	6,247	8	8
3	4	2	72,301	1,306	12	5,557	4,951	5	6
4	3	2	72,301	1,306	12	5,55	4,944	5	6
2	0	6	72,481	1,303	6	9,801	9,055	8	9
2	5	2	74,325	1,275	12	20,232	21,189	83	76
5	2	2	74,325	1,275	12	21,679	22,704	96	87
3	3	4	74,769	1,269	12	14,118	15,251	43	37
6	1	1	75,219	1,262	12	7,525	7,943	12	10
1	2	6	75,506	1,258	12	7,319	7,489	10	10
2	4	4	75,771	1,254	12	7,819	7,854	11	11
5	1	4	78,752	1,214	12	5,991	6,973	8	6
4	4	0	79,158	1,209	6	8,157	9,391	8	6
4	4	1	80,18	1,196	12	7,653	8,2	11	10
2	2	6	80,462	1,193	12	19,74	19,752	66	66
3	5	1	81,162	1,184	12	5,522	5,695	5	5
4	4	2	83,226	1,16	12	13,516	15,191	38	30
0	6	4	83,657	1,155	6	11,823	13,544	15	11
6	0	4	83,657	1,155	6	13,079	14,983	18	14
4	3	4	84,631	1,144	12	7,761	8,498	12	10
2	5	4	86,575	1,123	12	16,762	16,237	42	44
5	2	4	86,575	1,123	12	17,394	16,848	45	48
1	4	6	89,228	1,097	12	14,032	13,566	28	30
4	1	6	89,228	1,097	12	14,562	14,079	30	33
3	5	3	89,235	1,097	12	7,352	7,108	8	8
1	6	4	90,454	1,085	12	6,374	6,124	6	6
1	7	2	91,965	1,071	12	12,956	13,205	26	25
7	1	2	91,965	1,071	12	13,77	14,035	30	28
4	5	1	92,828	1,063	12	9,09	8,921	12	12
5	4	1	92,828	1,063	12	11,416	11,204	19	19
3	4	5	93,684	1,056	12	6,306	5,89	5	6
3	6	0	93,763	1,055	6	20,885	19,54	28	32
6	3	0	93,763	1,055	6	21,56	20,171	30	34
3	6	1	94,77	1,047	12	7,518	7,552	8	8
6	3	1	94,77	1,047	12	7,564	7,598	8	8
4	4	4	95,307	1,042	12	14,902	14,278	30	33
4	5	2	95,851	1,038	12	6,454	6,589	6	6
3	5	4	96,281	1,034	12	7,477	7,876	9	8
0	0	8	97,027	1,028	2	24,189	24,088	14	14
7	2	1	98,674	1,015	12	6,956	7,202	7	7
6	2	4	99,216	1,011	12	6,883	6,871	7	7
4	5	3	100,931	0,999	12	7,251	7,368	8	7
5	4	3	100,931	0,999	12	7,783	7,908	9	9
6	0	6	103,901	0,978	6	8,791	8,945	6	5
1	7	4	104,165	0,976	12	11,396	11,184	18	18
7	1	4	104,165	0,976	12	12,285	12,056	20	21
4	4	5	104,496	0,974	12	6,717	6,56	6	6
5	5	0	105,581	0,967	6	10,388	10,987	8	8
0	3	8	105,937	0,965	6	17,128	18,29	23	21
3	0	8	105,937	0,965	6	17,788	18,995	25	22
2	5	6	106,917	0,959	12	14,131	15,402	33	28
5	2	6	106,917	0,959	12	14,913	16,254	37	31
6	4	1	107,641	0,954	12	6,314	6,74	6	6
5	4	4	108,203	0,951	12	8,468	8,998	11	10
2	2	8	108,985	0,946	12	9,892	9,886	14	14
2	4	7	109,445	0,944	12	6,236	6,436	6	5

4	2	7	109,445	0,944	12	7,614	7,858	9	8
5	5	2	109,801	0,942	12	14,727	15,84	35	30
3	6	4	110,256	0,939	12	8,687	9,641	13	11
6	3	4	110,256	0,939	12	8,659	9,61	13	10
0	9	0	111,721	0,931	3	18,807	18,619	12	12
9	0	0	111,721	0,931	3	20,279	20,076	14	14
1	5	7	112,56	0,926	12	6,156	6,028	5	5
8	1	3	113,116	0,923	12	6,408	6,482	6	6
4	4	6	116,31	0,907	12	8,699	9,213	12	11
4	5	5	118,048	0,898	12	9,688	9,766	14	13
5	4	5	118,048	0,898	12	7,598	7,659	8	8
1	1	9	118,113	0,898	12	6,838	6,86	7	7
1	4	8	118,526	0,896	12	6,61	6,449	6	6
4	1	8	118,526	0,896	12	6,865	6,698	6	7
3	4	7	119,022	0,894	12	7,903	7,848	9	9
4	3	7	119,022	0,894	12	7,718	7,664	8	9
2	8	2	119,405	0,892	12	13,957	14,089	28	28
8	2	2	119,405	0,892	12	14,889	15,03	32	32
5	5	4	123,311	0,875	12	13,309	13,521	27	26
4	6	4	124,479	0,87	12	6,001	6,034	5	5

Publikationen

Martin Schreyer, Martin Jansen, „Synthesis and Characterization of Ag_2NiO_2 Showing an Uncommon Charge Distribution”, in Vorbereitung.

Martin Schreyer, Martin Jansen, „Synthesis, structure and properties of Ag_2PdO_2 ”, *Solid State Sciences* **2001**, *30*, 25-30.

P. E. Kazin, V. V. Poltavets, M. S. Kuznetsov, D. D. Zaytsev, Yu. D. Tretyakov, M. Jansen, M. Schreyer, „Phase compatibility and preparation of Bi-2212– $\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{In}_2\text{O}_4$ composite”, *Superconductor Science and Technology* **1998**, *11*, 880-886.

Poster und Präsentationen

M. Jansen, Th. Adelsberger, M. Schreyer, P. E. Kazin, Yu. D. Tretyakov, V. I. Putlayev, O. A. Shlyakhtin, V. V. Lennikov, A. Larrea, G. F. de la Fuente, „Introduction of alien phase precipitates in Bi-2212 and Bi(Pb)-2223 for flux pinning enhancement“ Posterpräsentation auf der VDI-Konferenz „Supraleitung und Tieftemperaturtechnik“, 10. – 11. Juni 1996, Köln.

Ich versichere hiermit an Eides Statt,
die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und
die verwendeten Hilfsmittel angegeben zu haben.

Bonn, im Oktober 2001