FACULTAD DE QUIMICA
CASILLA CORREO 1167
MONTEVIDEO
URUGUAY

Química Cuántica

CALCULO DE COORDENADAS Y DISTANCIAS
EN MOLECULAS TRIDIMENSIONALES.

Germán Krebs
1970

NOTA:

Esta es una reproducción de un documento cuyo registro fotográfico ha sido conservado por el autor. Se trata de un trabajo no publicado, parte de la línea de trabajos de la sección Química Cuántica y Espectroquímica de la Facultad de Química de la UdelaR y cuyo principal valor es como testimonio histórico de las actividades de la época en que fue realizado.

Titulo: Cálculo de coordenadas y distancias en moléculas 3D.

Tema: Química Cuántica

Autor: Germán Krebs

Fecha: 1970

Nombre de archivo: 1970 calculo coord. Y dist moleculas 3D G Krebs.pdf

Buenos Aires, abril de 2021.

Germán Krebs

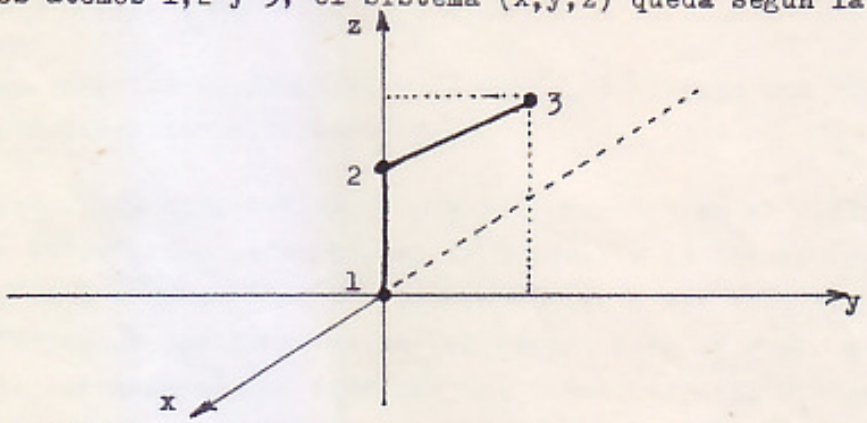
RESUMEN

Se construye un método sistemático de cálculo de las coordenadas atómicas en moléculas tridimensionales.
Se utilizan versores dirigidos a lo largo de los enlaces, un sistema de coordenadas esféricas asociadas a cada átomo y operaciones de simetría.
La subrutina Fortran programada se probó en el Sistema IBM 360/44 del Centro de Computación de la Universidad.
Este cálculo de coordenadas se utiliza luego en los programas de química cuántica.

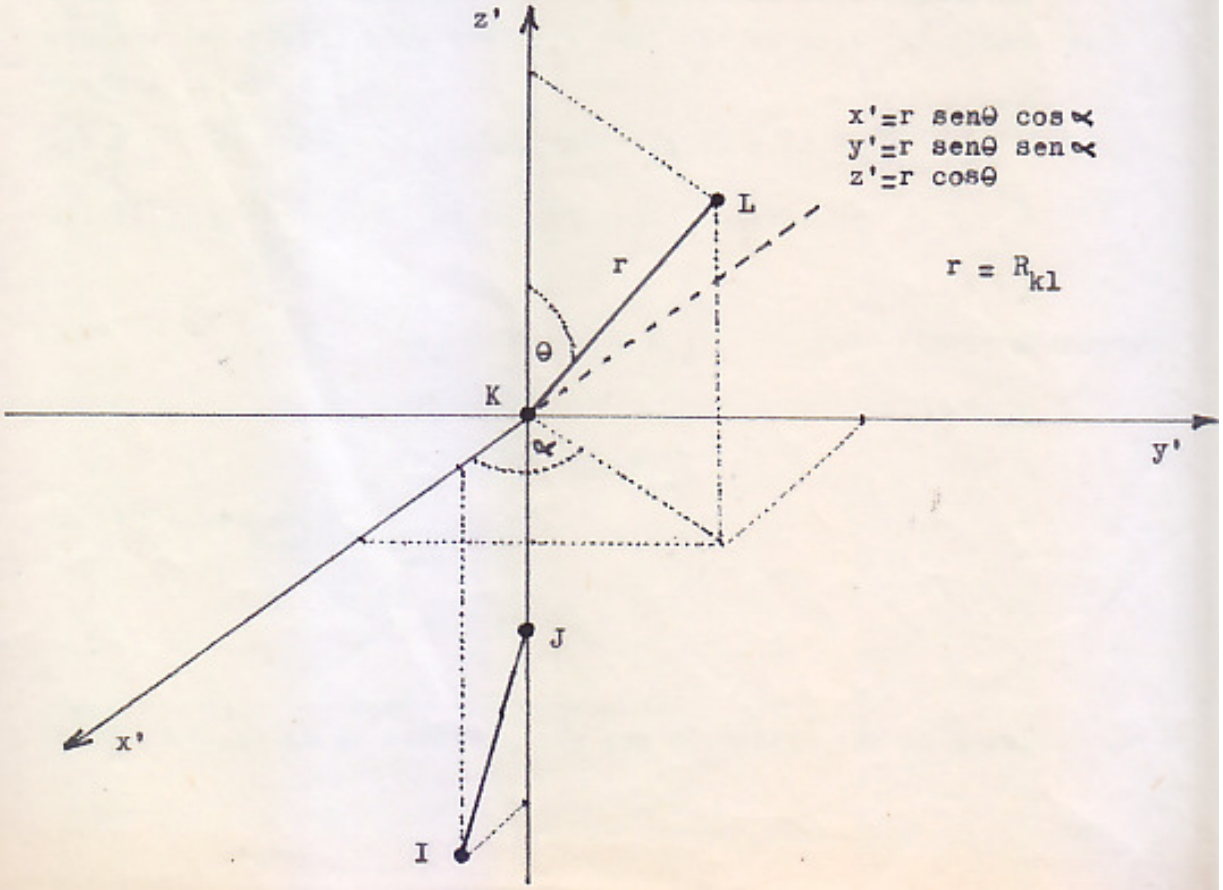
FUNDAMENTOS

Se utilizarán dos sistemas de coordenadas cartesianas (y coordenadas esféricas asociadas a uno de los sistemas de ejes cartesianos.): El sistema fundamental (x,y,z) sobre el cual se fija la molécula; el sistema auxiliar (x',y',z') , variable durante el cálculo, y fijo sobre una zona de la molécula; ademas, el sistema auxiliar (r,θ,∝),asociado al (x',y',z').

Sean los átomos 1,2 y 3; el sistema (x,y,z) queda según la figura:



Siendo I,J,K,L cuatro átomos consecutivos, unidos por enlaces, los sistemas auxiliares se definen según la siguiente figura:



Supongamos que en una zona dada de la molécula conocemos los versores (I,J) y (J,K), siendo sus componentes en (x,y,z): a_{ij}, b_{ij}, c_{ij} y a_{jk}, b_{jk}, c_{jk} respectivamente.

Podemos conocer tambien el producto vectorial de ambos, (I,J)x(J,K) , de componentes p_1, p_2, p_3 :

$$\begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{ij}c_{jk}-c_{ij}b_{jk} \\ c_{ij}a_{jk}-a_{ij}c_{jk} \\ a_{ij}b_{jk}-b_{ij}a_{jk} \end{bmatrix}$$

(Los tres versores (I,J),(J,K) y (I,J)x(J,K)* forman una "base", ya que son linealmente independientes).

Si conocemos las componentes de dichos versores en el sistema auxiliar (x',y',z'), podremos hallar la matriz de transformación de (x',y',z') a un sistema de ejes paralelos a los (x,y,z). Luego, conociendo las coordenadas del centro K en (x,y,z), podremos hacer la traslación de ejes que nos lleva definitivamente al sistema (x,y,z).

Veamos ahora las componentes de los versores mencionados en el sistema (x',y',z') (con esto, en realidad estamos definiendo el sistema (x',y',z')):

sea ϕ_{ik} el ángulo de enlace entre (I,J) y (J,K);

si $(I,J) = \begin{bmatrix} u_1 \\ v_1 \\ w_1 \end{bmatrix}$ en (x',y',z') será:

$$u_1 = -\text{sen}(\pi - \phi_{ik}) \qquad \text{(ver figura anterior).}$$

$$v_1 = 0$$

$$w_1 = \cos(\pi - \phi_{ik})$$

es evidente que:

$$(J,K) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

---

* El producto no es versor ; hay que dividirlo por su módulo.

el producto vectorial (en (x',y',z')) es:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ +\mathrm{sen}(\pi - \phi_{ik}) \\ 0 \end{bmatrix}$$

por lo cual consideraremos el versor $\begin{bmatrix} 0 \\ +1 \\ 0 \end{bmatrix}$

El conocimiento de los tres versores en ambos sistemas nos permite hallar la matriz de transformación (T_{st}) entre ambas "bases".

Tendremos:

$$\begin{bmatrix} a_{ij} \\ b_{ij} \\ c_{ij} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{st} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ 0 \\ w_1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_{jk} \\ b_{jk} \\ c_{jk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{st} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{st} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

que forman un sistema de 9 ecuaciones donde las 9 incógnitas son los elementos de la matriz de transformación.

Las seis últimas ecuaciones dan en forma inmediata:

$T_{13} = a_{jk}$; $T_{23} = b_{jk}$; $T_{33} = c_{jk}$

$T_{12} = p_1$; $T_{22} = p_2$; $T_{32} = p_3$

Calculados los anteriores, pueden obtenerse los restantes:

$T_{11} = (a_{ij} - w_1 T_{13})/u_1$
$T_{21} = (b_{ij} - w_1 T_{23})/u_1$
$T_{31} = (c_{ij} - w_1 T_{33})/u_1$

El versor (K,L) en el sistema (x',y',z') es:

$$\begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{bmatrix} \quad \text{con} \quad \begin{aligned} s_1 &= \operatorname{sen}\theta \cos\alpha \\ s_2 &= \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\alpha \\ s_3 &= \cos\theta \end{aligned}$$

siendo $\theta = \pi - \phi_{jl}$

de donde se tiene

$$\begin{bmatrix} a_{kl} \\ b_{kl} \\ c_{kl} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{st} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{bmatrix}$$

Teniendo en cuenta que $r = R_{kl}$, las coordenadas del centro L, en el sistema (x,y,z) seran:

$$x_l = x_k + a_{kl}R_{kl}$$
$$y_l = y_k + b_{kl}R_{kl}$$
$$z_l = z_k + c_{kl}R_{kl}$$

Convenciones e indizados para los ángulos:

ángulo de enlace entre (J,K) y (K,L) : ϕ_{jl} entre 0 y π .

ángulo de "torsión" del plano (J,KL) respecto al plano (I,JK) : α_{kl} entre 0 y 2π.

La convención para α es la que se usa en química orgánica como "R" (rectus), o sea:

mirando de J hacia K, gira L en sentido horario.

APLICACION DE OPERACIONES DE SIMETRIA

Cuando la molécula posee elementos de simetría, se calculan por el método indicado las coordenadas de algunos átomos, y se obtienen las de los demas utilizando operaciones de simetría.
Para utilizar los elementos de simetría, conviene llevar la molécula a un sistema de coordenadas con el orígen en el centro de simetría, si lo tiene, haciendo coincidir, ademas, uno de los ejes coordenados (o dos si es posible) con un eje de simetría.
Esto se consigue con una transformación del tipo:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

donde la matriz (m_{ij}) y el vector (b_j) se dan como datos.

Luego se aplican las operaciones de simetría por medio de combinaciones lineales del tipo:

$$x_l = \alpha_1 x_i + \alpha_2 y_j + \alpha_3 z_k$$

$$y_l = \beta_1 x_m + \beta_2 y_n + \beta_3 z_p$$

$$z_l = \gamma_1 x_q + \gamma_2 y_r + \gamma_3 z_s$$

donde los que figuran en los segundos miembros fueron calculados antes (o sea, x_l, y_l, z_l se obtienen por simetría).

PROGRAMA FORTRAN

Se usa una poligonal sobre los enlaces de la molécula, cuidando de no cerrar ciclos, y numerando los centros de 1 a N, sin retrocesos en la poligonal, a efectos de utilizar sentencias "DO" en la programación Fortran.

En el programa se leen los datos necesarios, se fijan las condiciones iniciales (definición del sistema (x,y,z)), luego se procede al cálculo de las coordenadas de los centros por el método expuesto al principio de este informe.

Despues se hace el cambio de ejes para colocar la molécula en forma simétrica , aplicando luego las operaciones de simetría para calcular las coordenadas de los restantes átomos.

Equivalencia de nombres de variables entre los fundamentos expuestos y el programa Fortran:

FUNDAMENTOS	PROGRAMA
x_i	X(I)
y_i	Y(I)
z_i	Z(I)
a_{ij}	A(I,J)
b_{ij}	B(I,J)
c_{ij}	C(I,J)
R_{ij}	R(I,J)
ϕ_{ij}	PHI(I,J)
α_{ij}	ALFA(I,J)
s_1	S1
s_2	S2
s_3	S3
p_1	P1
p_2	P2
p_3	P3
u_1	U1
w_1	W1
θ	THETA
T_{12}	T12
T_{23}	T23 ,etc.

Las restantes son variables auxiliares.

```
                    ***************************************************
                    ***************************************************

                     888      8          8     8      8          8  88888
                    8   8    8          8    86     88         8       8
                    8   8   8 88       8      8      8        8       8
                    8   8   88  8    8        8      8      8       8
                     888     888    8         8      8     8       8

                    ***************************************************
                    ***************************************************
ESS SDSLST
ESS SDSOPT
 FORTRAN
   MODEL 44  PS        VERSION 3,  LEVEL 2   DATE  721106
      DIMENSION IQUIM(40),X(40),Y(40),Z(40),A(40),B(40),C(40),
     *ALFA(40),PHI(40),R(40,40),II(40),JJ(40),RR(40),ALF(40),FI(40)
      DIMENSION TITULO(20),AZ(3,3),RAYA(33),XX(40),YY(40),ZZ(40),BZ(3)
      DATA RAYA /33='****'/
      EQUIVALENCE (N,NATOM),(XX(1),RR(1)),(YY(1),ALF(1)),(ZZ(1),FI(1))
      PI=3.14159265
 2741 READ(5,2743,END=2742)TITULO
 2743 FORMAT(20A4)
      WRITE(6,2992)RAYA
 2992 FORMAT(//1X33A4//)
      WRITE(6,2744)TITULO
 2744 FORMAT(1X,20A4)
      READ(5,1)NATOM,NCALC,MENLA,MANGU
    1 FORMAT(4I3)
      DO 2772 I=1,N
      X(I)=0.0
      Y(I)=0.0
      Z(I)=0.0
      XX(I)=0.0
      YY(I)=0.0
      ZZ(I)=0.0
      A(I)=0.0
      B(I)=0.0
      C(I)=0.0
      ALFA(I)=0.0
      PHI(I)=0.0
      DO 2772 J=1,N
 2772 R(I,J)=0.0
      READ(5,9999)(IQUIM(I),I=1,NATOM)
 9999 FORMAT(40I2)
      READ(5,3)(II(M),JJ(M),RR(M),ALF(M),M=1,MENLA)
    3 FORMAT(3 (2I2,2F10.5))
      DO 4 M=1,MENLA
      I=II(M)
      J=JJ(M)
      WRITE(6,101)IQUIM(I),IQUIM(J),RR(M),IQUIM(I),IQUIM(J),ALF(M)
  101 FORMAT(1X,'R(',I2,',',I2,')=',F10.5,2X,'ALFA(',I2,',',I2,')=',F10.
     15)
      R(I,J)=RR(M)
      R(J,I)=R(I,J)
    4 ALFA(J)=PI*ALF(M)/180.
      READ(5,5)(II(M),JJ(M),FI(M),M=1,MANGU)
    5 FORMAT(7(2I2,F7.1))
      DO 6 M=1,MANGU
      I=II(M)
      J=JJ(M)
      WRITE(6,102)IQUIM(I),IQUIM(J),FI(M)
  102 FORMAT(5X,'PHI(',I2,',',I2,')=',F10.5)
    6 PHI(J)=PI*FI(M)/180.0
  MODEL 44  PS        VERSION 3,  LEVEL 2   DATE  721106
C
C     CONDICIONES INICIALES
      FI13=PI-PHI(3)
      COS13=COS(FI13)
      SEN13=SIN(FI13)
      Z(2)=R(1,2)
      Y(3)=R(2,3)*SEN13
      Z(3)=R(1,2)+R(2,3)*COS13
      C(2)=1.0
```

```
C
      DO 7 I=4,NCALC
      IF(R(2,I))8,9,8
    8 COSPHI=PI-PHI(I)
      SENPHI=SIN(COSPHI)
      COSPHI=COS(COSPHI)
      SENALF=SIN(ALFA(I))
      COSALF=COS(ALFA(I))
      X(I)=R(2,I)*SENPHI*COSALF
      Y(I)=R(2,I)*SENPHI*SENALF
      Z(I)=R(2,I)*COSPHI+R(1,2)
      A(I)=SENPHI*COSALF
      B(I)=SENPHI*SENALF
      C(I)=COSPHI
    9 CONTINUE
    7 CONTINUE
C
C     CALCULO DE COORDENADAS Y VERSORES DE 0 A NCALC
C
      DO 10 K=3,NCALC
      DO 10 L=K,NCALC
      IF(R(K,L))12,10,12
   12 DO 13 J=1,K
      IF(R(J,K))14,13,14
   14 DO 15 I=1,J
      IF(R(I,J))18,15,18
   18 CONTINUE
      WRITE(6,4004)I,J,K,L
 4004 FORMAT('    I,J,K,L = ',4(1X,I2))
C
C     CALCULO DE UN NUEVO VERSOR Y COORDENADAS
C
      PHIJL=PI-PHI(L)
      SENJL=SIN(PHIJL)
      COSJL=COS(PHIJL)
      ALFAKL=ALFA(L)
IV  MODEL 44  PS        VERSION 3,  LEVEL 2   DATE  721106                PAG
      COSKL=COS(ALFAKL)
      SENKL=SIN(ALFAKL)
      S1=SENJL*COSKL
      S2=SENJL*SENKL
      S3=COSJL
      P1=B(J)*C(K)-C(J)*B(K)
      P2=C(J)*A(K)-A(J)*C(K)
      P3=A(J)*B(K)-B(J)*A(K)
      PMODUL=SQRT(P1*P1+P2*P2+P3*P3)
      P1=P1/PMODUL
      P2=P2/PMODUL
      P3=P3/PMODUL
      PHIIK=PI-PHI(K)
      COSIK=COS(PHIIK)
      SENIK=SIN(PHIIK)
      W1=COSIK
      U1=-SENIK
C
C     ELEMENTOS MATRIZ TRANSFORMACION
C
      T11=(A(J)-A(K)*W1)/U1
      T12=P1
      T13=A(K)
      T21=(B(J)-B(K)*W1)/U1
      T22=P2
      T23=B(K)
      T31=(C(J)-C(K)*W1)/U1
      T32=P3
      T33=C(K)
C
C     NUEVOS VERSORES
C
      A(L)=T11*S1+T12*S2+T13*S3
      B(L)=T21*S1+T22*S2+T23*S3
      C(L)=T31*S1+T32*S2+T33*S3
C
C     NUEVAS COORDENADAS
C
      X(L)=X(K)+A(L)*R(K,L)
      Y(L)=Y(K)+B(L)*R(K,L)
      Z(L)=Z(K)+C(L)*R(K,L)
   15 CONTINUE
   13 CONTINUE
   10 CONTINUE
      DO 4001 I=1,N
 4001 WRITE(6,51)I,X(I),Y(I),Z(I)
      DO 808 I=1,N
      DO 808 J=1,N
  808 R(I,J)=SQRT((X(I)-X(J))**2+(Y(I)-Y(J))**2+(Z(I)-Z(J))**2)
V  MODEL 44  PS        VERSION 3,  LEVEL 2   DATE  721106                PAG
      WRITE(6,779)
  779 FORMAT(///'    DISTANCIAS'/)
      DO 778 I=1,N
  778 WRITE(6,777)(R (I,J),J=1,I     )
  777 FORMAT(19(1X,F6.3))
C
```

```
  200 FORMAT(8F10.5)
      DO 201 I=1,NCALC
      XA=X(I)
      YA=Y(I)
      ZA=Z(I)
      X(I)=AZ(1,1)*XA+AZ(1,2)*YA+AZ(1,3)*ZA+BZ(1)
      Y(I)=AZ(2,1)*XA+AZ(2,2)*YA+AZ(2,3)*ZA+BZ(2)
  201 Z(I)=AZ(3,1)*XA+AZ(3,2)*YA+AZ(3,3)*ZA+BZ(3)
C
C     APLICACION OPERACIONES DE SIMETRIA
C     REINDIZADO
      DO 2335 I=1,N
      XX(I)=X(I)
      YY(I)=Y(I)
 2335 ZZ(I)=Z(I)
      DO 2336 I=1,N
      J=IQUIM(I)
      X(J)=XX(I)
      Y(J)=YY(I)
 2336 Z(J)=ZZ(I)
      WRITE(6,50)
   50 FORMAT(1X//10X,'RESULTADOS'//1X,'I        X
     1Z'/)
      DO 4000 I=1,N
 4000 WRITE(6,51)I,X(I),Y(I),Z(I)
   51 FORMAT(1X,I2,3F12.4)
      WRITE(7,2882)(X(I),Y(I),Z(I),I=1,N)
      WRITE(6,2882)(X(I),Y(I),Z(I),I=1,N)
 2882 FORMAT(8F10.5)
      GO TO 2741
 2742 STOP
      END
IV    MODEL 44  PS        VERSION 3,  LEVEL 2   DATE  721106

EMORY REQUIREMENTS 0034C8 BYTES
IGHEST SEVERITY CODE WAS  0
```

```
      CICLOOCTANONA-ENOL
R( 1, 2)=   0.96000  ALFA( 1, 2)=    0.0
R( 2, 3)=   1.43000  ALFA( 2, 3)=   90.00000
R( 3, 4)=   1.34000  ALFA( 3, 4)=    0.0
R( 4, 5)=   1.07000  ALFA( 4, 5)=    0.0
R( 4, 6)=   1.54000  ALFA( 4, 6)=    0.0
R( 6, 7)=   1.09000  ALFA( 6, 7)=  170.00000
R( 6, 8)=   1.09000  ALFA( 6, 8)=   50.00000
R( 6, 9)=   1.54000  ALFA( 6, 9)=  290.00000
R( 9,10)=   1.09000  ALFA( 9,10)=  260.00000
R( 9,11)=   1.09000  ALFA( 9,11)=  140.00000
R( 9,12)=   1.54000  ALFA( 9,12)=   20.00000
R(12,13)=   1.09000  ALFA(12,13)=    0.0
R(12,14)=   1.09000  ALFA(12,14)=  240.00000
R(12,15)=   1.54000  ALFA(12,15)=  120.00000
R(15,16)=   1.09000  ALFA(15,16)=    0.0
R(15,17)=   1.09000  ALFA(15,17)=  120.00000
```

```
R(18,21)=    1.54000   ALFA(18,21)=    0.0
R(21,22)=    1.09000   ALFA(21,22)=   30.00000
R(21,23)=    1.09000   ALFA(21,23)=  150.00000
     PHI( 1, 3)= 110.00000
     PHI( 2, 4)= 120.00000
     PHI( 3, 5)= 120.00000
     PHI( 3, 6)= 120.00000
     PHI( 4, 7)= 109.50000
     PHI( 4, 8)= 109.50000
     PHI( 4, 9)= 109.50000
     PHI( 6,10)= 109.50000
     PHI( 6,11)= 109.50000
     PHI( 6,12)= 108.00000
     PHI( 9,13)= 109.50000
     PHI( 9,14)= 109.50000
     PHI( 9,15)= 108.00000
     PHI(12,16)= 109.50000
     PHI(12,17)= 109.50000
     PHI(12,18)= 109.50000
     PHI(15,19)= 109.50000
     PHI(15,20)= 109.50000
     PHI(15,21)= 109.50000
     PHI(18,22)= 109.50000
     PHI(18,23)= 109.50000
  I,J,K,L =    1  2  3  4
  I,J,K,L =    2  3  4  5
  I,J,K,L =    2  3  4  6
  I,J,K,L =    3  4  6  7
  I,J,K,L =    3  4  6  8
  I,J,K,L =    3  4  6  9
  I,J,K,L =    4  6  9 10
  I,J,K,L =    4  6  9 11
  I,J,K,L =    4  6  9 12
  I,J,K,L =    6  9 12 13
  I,J,K,L =    6  9 12 14
  I,J,K,L =    6  9 12 15
  I,J,K,L =    9 12 15 16
  I,J,K,L =    9 12 15 17
  I,J,K,L =    9 12 15 18
  I,J,K,L =   12 15 18 19
  I,J,K,L =   12 15 18 20
  I,J,K,L =   12 15 18 21
  I,J,K,L =   15 18 21 22
  I,J,K,L =   15 18 21 23
 1       0.0          0.0          0.0
 2       0.0          0.0          0.9600
 3       0.0          1.3438       1.4491
 4       0.0          2.3703       0.5878
 5       0.0          2.1845      -0.4660
 6       0.0          2.1028      -0.9289
 7      -0.1784       3.0361      -1.4629
 8      -0.7871       1.3892      -1.1725
 9       1.3641       1.5246      -1.3489
10       1.9765       2.3153      -1.7824
11       1.2136       0.7365      -2.0866
12       2.0460       0.9529      -0.0920
13       1.3980       1.0995       0.7721
14       2.9932       1.4664       0.0735
15       2.2897      -0.5498      -0.3247
16       1.9217      -0.8295      -1.3118
17       3.3577      -0.7591      -0.2628
18       1.5448      -1.3637       0.7497
19       0.8251      -2.0269       0.2698
20       2.2610      -1.9565       1.3187
21       0.8039      -0.4044       1.6996
22       0.5193       0.4971       1.1570
23      -0.0907      -0.8933       2.0854


   DISTANCIAS

 0.0
 0.960   0.0
 1.976   1.430   0.0
 2.442   2.399   1.340   0.0
 2.234   2.609   2.091   1.070   0.0
 2.299   2.827   2.496   1.540   0.470   0.0
 3.375   3.888   3.373   2.163   1.323   1.090   0.0
 1.981   2.664   2.738   2.163   1.323   1.090   1.780   0.0
 2.450   3.085   3.118   2.515   1.754   1.540   2.163   2.163   0.0
 3.528   4.097   3.911   3.087   2.378   2.163   2.295   2.978   1.090   0.0
 2.524   3.361   3.787   3.361   2.489   2.163   2.760   2.294   1.090   1.78
 2.259   2.490   2.591   2.580   2.417   2.492   3.342   3.063   1.540   2.17
 1.939   1.788   1.572   1.898   2.160   2.420   3.351   2.939   2.163   2.88
 3.334   3.449   3.296   3.169   3.125   3.220   3.858   3.981   2.163   2.28
 2.377   2.682   3.460   3.821   3.569   3.556   4.500   3.734   2.492   3.23
 2.470   3.089   4.005   4.188   3.673   3.527   4.402   3.504   2.420   3.18
 3.452   3.653   4.316   4.668   4.470   4.462   5.324   4.756   3.220   3.69
 2.193   2.071   3.195   4.044   4.056   4.150   5.218   4.088   3.575   4.48
 2.205   2.295   3.665   4.485   4.354   4.379   5.445   4.043   3.940   4.93
 3.268   3.011   4.003   4.936   5.044   5.162   6.214   5.166   4.476   5.28
 0.0
```

3.013	1.090	0.0							
2.270	1.440	2.328	3.592	3.999	4.251	5.295	4.038	4.445	5.4
2.692	1.090	1.780	0.0						

RESULTADOS

I	X	Y	Z
1	0.0	0.0	0.0
2	0.0	0.0	0.9600
3	0.0	1.3438	1.4491
4	0.0	2.3703	0.5878
5	0.0	2.1845	-0.4660
6	0.0	2.1028	-0.9289
7	-0.1784	3.0361	-1.4629
8	-0.7871	1.3892	-1.1725
9	1.3641	1.5246	-1.3489
10	1.9765	2.3153	-1.7824
11	1.2136	0.7365	-2.0866
12	2.0460	0.9529	-0.0920
13	1.3980	1.0995	0.7721
14	2.9932	1.4664	0.0735
15	2.2897	-0.5498	-0.3247
16	1.9217	-0.8295	-1.3118
17	3.3577	-0.7591	-0.2628
18	1.5448	-1.3637	0.7497
19	0.8251	-2.0269	0.2698
20	2.2610	-1.9565	1.3187
21	0.8039	-0.4044	1.6996
22	0.5193	0.4971	1.1570
23	-0.0907	-0.8933	2.0854

0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.96000	0.0
1.44909	0.0	2.37026	0.58775	0.0	2.18445	-0.4659
2.10283	-0.92885	-0.17842	3.03615	-1.46288	-0.78709	1.3892
1.36412	1.52461	-1.34889	1.97653	2.31526	-1.78241	1.2136
-2.08663	2.04604	0.95291	-0.09201	1.39801	1.09954	0.7720
1.46638	0.07349	2.28973	-0.54979	-0.32466	1.92174	-0.8295
3.35766	-0.75905	-0.26284	1.54484	-1.36374	0.74969	0.8251
0.26979	2.26104	-1.95646	1.31875	0.80386	-0.40445	1.6995
0.49707	1.15703	-0.09070	-0.89334	2.08538		
STOP	0					

/Ñ

TIEMPO 00 01 37 6 9