



República Federativa do Brasil
Ministério da Economia
Instituto Nacional da Propriedade Industrial

(21) PI 0911298-7 A2



(22) Data do Depósito: 14/04/2009

(43) Data da Publicação Nacional: 18/08/2020

(54) Título: SOLVATO DE DMSO NO ESTADO SÓLIDO, COMPOSTO BENZIDRIL ÉSTER DE ÁCIDOS (6R, 7R)-7-{2-(5-AMINO-[1,2,4]TIADIAZOL-3-IL)-2-[(Z)-TRITIOXIIMINO]ACETILAMINO)-3-[(R)-1'-TERC-BUTOXICARBONIL-2-OXO-[1,3']BIPYRROLIDINIL-(3E)-ILI-DENOMETIL]-8-EXO-5-TIA-1-AZA-BICICLO[4.2.0]OCT-2-ENO-2-CARBOXÍLICO CRISTALINO; SEU PROCESSO DE PRODUÇÃO E USO

(51) Int. Cl.: C07D 501/12; C07D 501/54; A61P 31/00; A61K 31/546.

(30) Prioridade Unionista: 15/04/2008 EP 08 154517.0.

(71) Depositante(es): BASILEA PHARMACEUTICA AG.

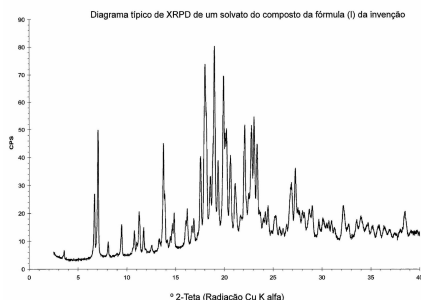
(72) Inventor(es): MARCO ALPEGIANI; WALTER CABRI; MARKUS HEUBES; DAVIDE LONGONI; MICHAEL SCHLEIMER.

(86) Pedido PCT: PCT EP2009054405 de 14/04/2009

(87) Publicação PCT: WO 2009/127623 de 22/10/2009

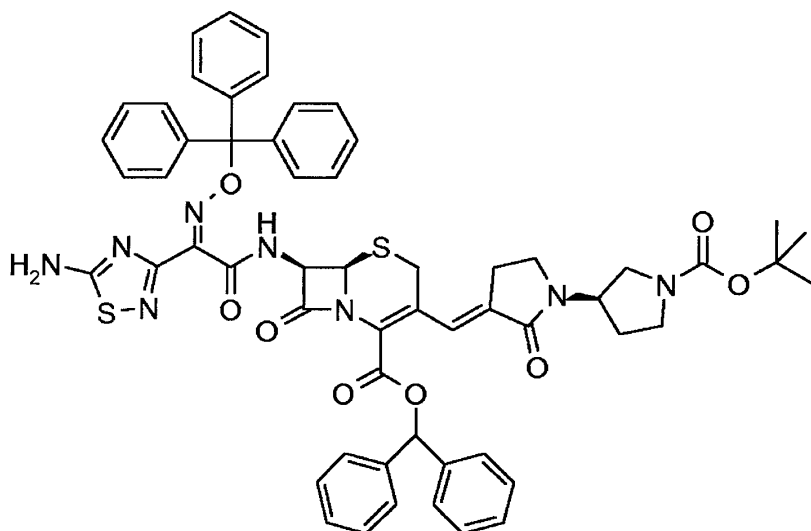
(85) Data da Fase Nacional: 13/10/2010

(57) Resumo: SOLVATO DE DMSO NO ESTADO SÓLIDO, COMPOSTO BENZIDRIL ÉSTER DE ÁCIDO (6R,7R)-7-{2-(5-AMINO-[1,2,4]TIA- DIAZOL-3-IL)-2-[(Z)-TRITIOXIIMINO]ACETILAMINO)-3-[(R)-1'-TERC-BUTOXICARBONIL-2-OXO-[1,3']BIPYRROLIDINIL-(3E)-ILI-DENOMETIL]-8- OXO-5-TIA-1-AZA BICICLO[4.2.0]OCT-2-ENO-2-CARBOXILICO CRISTALINO; SEU PROCESSO DE PRODUÇÃO E USO. A presente invenção descreve um solvato de DMSO, no estado sólido, de um composto da fórmula (I) o qual é um intermediário útil para preparar os antibióticos de amplo espectro Ceftobiprol e Ceftobiprol Medocaril.



Relatório Descritivo da Patente de Invenção para "SOLVATO DE DMSO NO ESTADO SÓLIDO, COMPOSTO BENZIDRIL ÉSTER DE ÁCIDO (6R,7R)-7-{2-(5-AMINO-[1,2,4]TIADIAZOL-3-IL)-2-[(Z)-TRITIOXIIMINO]-ACETILAMINO}-3-[(R)-1'-TERC-BUTOXICARBONIL-2-OXO-[1,3]BIPIR-
5 ROLIDINIL-(3E)-ILI-DENOMETIL]-8-OXO-5-TIA-1-AZA-BICICLO[4.2.0]OCT-2-ENO-2-CARBOXÍLICO CRISTALINO; SEU PROCESSO DE PRODUÇÃO E USO".

A presente invenção refere-se a um solvato de DMSO no estado sólido, em especial substancialmente na forma cristalina do composto da fórmula (I) e a um processo aperfeiçoado para a produção do composto da fórmula (I):



(I),

empregando o referido solvato. O composto da fórmula (I) é um intermediário para produção de certas cefalosporinas, particularmente, os antibióticos de amplo espectro Ceftobiprol (BAL9141-000) e Ceftobiprol Medocaril (BAL5788). A invenção refere-se além do mais a processos para a produção de Ceftobiprol ou Ceftobiprol Medocaril utilizando o referido solvato de DMSO e a forma substancialmente cristalina do composto da fórmula (I).

O composto da fórmula I e seu uso na produção dos antibióticos Ceftobiprol (BAL9141-000) e Ceftobiprol Medocaril (BAL5788) são conhecidos.

Conforme descrito mais detalhadamente no documento WO 01/90111, o composto (I) pode ser preparado, por exemplo, reagindo brometo de (1'-terc-butoxicarbonil-2-oxo-[1,3']-(R)-bipirrolidinil-3-(R,S)-il)-trifenil-fosfônio com benzidril éster de ácido 7-[2-(5-amino-[1,2,4]tia-diazol-3-il)-2-tritiloxiiminoacetilamino]-3-formil-8-oxo-5-tia-1-aza-biciclo [4.2.0]oct-2-eno-2-carboxílico em uma mistura de cloreto de metileno/tolueno/THF na presença de t-C₄H₉OK.

O composto bruto seco da fórmula (I) obtido de acordo com o documento WO 01/90111 é purificado convencionalmente, por exemplo, transformando-o em uma pasta de cimento com cloreto de metileno e acetato de etila em temperatura ambiente ou ligeiramente elevada que é, então, filtrada, separada e secada. Seguindo esse procedimento, o produto se precipita em agregados formados por somente partículas de certa forma pequenas, indicando baixo desempenho da filtração e, por conseguinte, eliminação insuficiente de impurezas. Consequentemente, o produto intermediário obtido de acordo com o documento WO 01/90111 não gera Ceftobiprol e Ceftobiprol Medocaril com pureza e rendimento aceitáveis. O processo, além disso, não é muito adequado para produção industrial em alta escala.

Para a produção de alguns derivados de cefalosporina, sabe-se que os respectivos derivados de cefalosporina, ou um intermediário ou precursores destes são convertidos em solvatos cristalinos específicos, os quais são opcionalmente ainda purificados e, posteriormente processados para os compostos desejados de cefalosporina.

A Patente U.S. 4 734 408, por exemplo, descreve um processo de fabricação de sulfato di-hidratado de sin-7-[2-(2-aminotiazol-4-il)-2-metoxiimino-acetamido]-3-(3-metil-3-H-imidazol[4,5-c]-piridin-5-ilmetil)-3-cefem-4-carboxilato cristalino, em que o referido derivado de cefalosporina é, por exemplo, dissolvido em água para fornecer uma solução aquosa deste, à qual dimetilacetamida ou dimetilformamida é adicionada para formar os respectivos solvatos cristalinos, especialmente solvato de dimetilacetamida hidratada ou solvato de dimetilformamida hidratada do referido derivado de cefalosporina, o qual é, então, novamente dissolvido em ácido sulfúrico a

quoso. Essa solução pode ser então resfriada e/ou misturada com antissolvente solúvel em água para o referido derivado de cefalosporina, como acetona, THF ou acetonitrila, para que a cefalosporina desejada precipite em forma sólida cristalina purificada.

5 A Patente U.S. 4 237 279 descreve um processo para a purificação e o fácil isolamento de 4'-nitrobenzil-7-fenoxiacetamido-3-hidróxi-3-cefem-4-carboxilato ou seu 1-óxido, o qual é um importante intermediário na produção de certas cefalosporinas, especialmente ácido 7-[D-(2-amino-2-fenilacetamido)]3-cloro-3-cefem-4-carboxílico. Neste processo, o referido
10 intermediário é convertido em um de seus solvatos cristalinos, selecionados a partir de o solvato de ácido acético, o solvato de ácido propiônico ou o solvato de cloreto de metileno, o qual é então isolado e transformado em pasta de cimento com metanol para formar um solvato de metanol do referido intermediário, do qual o metanol é, em seguida, removido secando o solvato
15 sob vácuo para fornecer o 4'-nitrobenzil-7-fenoxiacetamido-3-hidróxi-3-cefem-4-carboxilato anidro não solvatado e purificado, ou seu 1-óxido.

 A Patente U.S. 6 903 211 descreve a produção de ainda outro solvato específico de cefalosporina, a saber, Cefprozil DMF-solvato, o qual é útil na produção de Cefprozil. O processo é descrito de modo a ser evitado o
20 uso de cromatografia de adsorção ou métodos de recristalização em qualquer estágio, para facilitar, dessa forma, a operação em escala industrial e resultar em enriquecimento do (Z)-isômero desejado do solvato.

 Independentemente de o uso de certos solvatos cristalinos em todos os processos supracitados, é claramente visível que os referidos processos de produção são especificamente ajustados para produzir apenas
25 aquelas cefalosporinas para as quais cada uma das respectivas citações especificamente se refere. Não há indicação, nem nas referidas citações, nem na técnica anterior em geral, de que os processos e/ou tipos de solvato expostos poderiam, em maneira análoga, serem também bem-sucedidos na
30 produção de outras cefalosporinas. Não há também qualquer indicação na técnica anterior de que a estratégia comum exposta nestas citações, a saber, o uso da produção de intermediário de certo solvato, com meio para

melhorar a pureza de produtos finais, poderia ser empregado para outros derivados de cefalosporina de qualquer modo. Finalmente, porém não menos importante, não há qualquer orientação em todas as referidas citações, sobre qual solvato poderia ser empregado com êxito para outros derivados de cefalosporina e, especialmente, na produção de Ceftobiprol ou Ceftobiprol Medocaril.

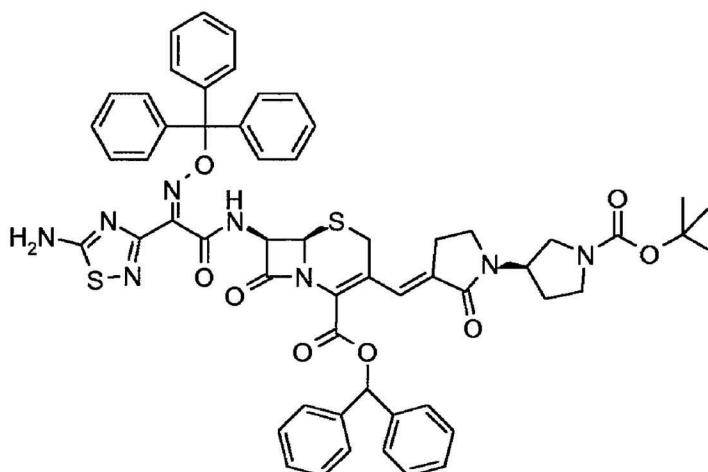
Por conseguinte, existe ainda uma questão não resolvida sobre como superar as desvantagens mencionadas acima da técnica anterior no que diz respeito à produção dos derivados supramencionados de cefalosporina via o composto da fórmula (I) como intermediário. Consequentemente, a presente invenção tem como objetivo aperfeiçoar o desempenho da produção de Ceftobiprol ou Ceftobiprol Medocaril, especialmente em escala industrial, e ao mesmo tempo melhorar a pureza das referidas cefalosporinas.

A presente invenção está fundamentada no novo achado de que a purificação do composto da fórmula (I) pode também ser melhorada se um solvato específico do referido composto, a saber, um solvato de DMSO (dimetilsulfóxido) do referido composto, for utilizado como intermediário na produção, o qual é isolado, e o solvato isolado é, em seguida, novamente convertido, opcionalmente em condição úmida, no composto da fórmula (I), o qual é geralmente obtido em forma substancialmente cristalina nessa maneira. Além do mais, foi constatado que os derivados finais de cefalosporina, Ceftobiprol ou Ceftobiprol Medocaril, se produzidos de acordo com a presente invenção via o referido solvato de DMSO do composto da fórmula (I), são também significativamente melhorados em termos de pureza, em comparação com a produção da técnica anterior.

Por conseguinte, a presente invenção refere-se a um solvato de DMSO no estado sólido do composto da fórmula (I), uma concretização substancialmente cristalina do referido solvato de DMSO, um processo para a produção do referido solvato, um processo aperfeiçoado para a produção de um composto da fórmula (I) via o referido solvato, uma forma substancialmente cristalina do composto da fórmula (I) que pode ser obtida com o referido processo e que é um intermediário de valor, especialmente para a

produção de Ceftobiprol e Ceftobiprol Medocaril de alta pureza e a um processo melhorado para a produção de Ceftobiprol e Ceftobiprol Medocaril via os novos intermediários de acordo com a presente invenção.

Assim sendo, um primeiro objeto da presente invenção é um
5 solvato de DMSO no estado sólido do composto da fórmula (I):



A razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO no referido solvato de DMSO no estado sólido é geralmente de aproximadamente 1:1 a 1:3, especialmente de aproximadamente 1:1,75 a aproximadamente 1:2,75. Mais preferida é razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO de aproximadamente 1:2 a aproximadamente 1:2,5, sendo que o termo "solvato de DMSO de acordo com a invenção", no presente pedido de patente, pretende-se referir ao solvato de DMSO com razão molar de aproximadamente 1:2 a aproximadamente 1:2,5, se nada mais for enunciado. Com respeito à razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO, o termo "aproximadamente" é utilizado para incluir variações mínimas, geralmente de ± 10 por cento, no máximo, para permitir certas quantidades de DMSO livre, possivelmente aderidas ou incorporadas no material, e para outras variações habituais de medição.

Para fins deste pedido de patente, o termo "sólido" é entendido na maneira usual, a saber, que a substância indicada como "sólida" possui temperatura de fusão ou, se a substância se descompuser antes que seja

fundida, temperatura de decomposição, acima de temperaturas ambiente habituais, especialmente acima de aproximadamente 25 a 30°C.

Para fins deste pedido de patente, o termo "substancialmente cristalino" significa que um diagrama de Difração de Raio x em Pó (XRPD) de uma substância correspondente exibe um ou mais picos distintos com altura máxima correspondendo a pelo menos cinco vezes mais, de preferência, sete vezes mais a sua largura na metade do máximo. De modo geral, o grau de cristalinidade de uma substância aumenta com o valor que se eleva em média para a razão da altura de um determinado pico para sua largura na metade do máximo. Reflexões de raio x em ângulo 2-teta muito baixo e/ou de maior intensidade relativa são normalmente mais significativas para avaliar o grau de cristalinidade de um composto porque, em ângulos 2-teta mais altos, frequentemente há sobreposição de várias reflexões fazendo com que se assemelhem a único pico largo, especialmente se as referidas reflexões forem de intensidade muito baixa. Além de exibir uma pluralidade de picos agudos, o diagrama de XRPD mostrará, além do mais, uma linha base substancialmente constante (linha base = linha que liga a mínima da curva do diagrama de XRPD) na varredura de todo o intervalo 2-teta, indicando ausência substancial de material amorfo na amostra registrada. "Linha base substancialmente constante" significa, para fins deste pedido de patente, que a linha base não se eleva, de preferência, mais do que a altura do pico mais baixo do referido diagrama.

Solvato de DMSO substancialmente cristalino ou cristalino, de acordo com a presente invenção, exibe picos de Difração de Raio x em pó como definidos no parágrafo precedente, e registrados com Radiação Cu K alfa e fornecidos em [$^{\circ}$ 2-teta] em aproximadamente 7,0; 13,7; 18,0; 19,0; 19,9; 20,1; 20,2; 22,1; 22,8; 23,0; 23,3; todos os quais com intensidade relativa acima de aproximadamente 55%.

Uma amostra média do solvato de DMSO de um composto da fórmula (I) como descrito acima exibe essencialmente o perfil de Difração de Raio x em Pó listado na Tabela 1 abaixo, embora possa haver ligeiros desvios nos valores exatos para 2-teta e, especialmente na intensidade relativa

(Rel. Int.) entre diferentes cargas do solvato e dependendo do preparo da amostra em teste com XRPD, conforme aqueles versados na técnica apreciarão. Os ângulos 2-teta possuem geralmente um erro de aproximadamente $\pm 0,2^\circ$. No entanto, os valores para a intensidade relativa dos picos dependem reconhecidamente mais de certas propriedades da amostra do que da posição da linha, por exemplo, do tamanho dos cristais e de sua orientação na amostra. Variações de $\pm 20\%$ das intensidades mostradas para os picos podem, portanto, possivelmente ocorrer.

Cabe observar também que a Tabela 1 lista somente os picos com intensidade relativa de aproximadamente 30% no mínimo, cuja presença é normalmente suficiente para caracterizar os cristais, ficando, por conseguinte, claro que picos adicionais poderão ser ainda encontrados no perfil de XRPD do referido solvato.

Tabela 1

2 Θ [°]	Rel Int*	2 Θ [°]	Rel Int*
6,7	w	20,2	st
7,0	m	20,6	w
13,7	m	21,1	w
17,5	w	22,1	m
18,0	vst	22,8	m
18,5	w	23,0	m
19,0	vst	23,3	m
19,3	w	26,8	w
19,9	vst	27,3	m
20,1	m	32,2	w

* Na Tabela 1, vst representa intensidade relativa de 100% a 90%; st representa intensidade relativa abaixo de 90% a 75%; m representa intensidade relativa abaixo de 75% a 55 % e w representa intensidade relativa abaixo de 55% a 30%.

A Tabela 2 apresenta os valores numéricos para as intensidades relativas dos 20 principais picos intensos de XRPD de uma amostra típica do solvato de DMSO de acordo com a invenção e indica as variações típicas

dos valores medidos para a intensidade relativa.

Tabela 2

2 θ [°]	Rel Int [%]	2 θ [°]	Rel Int [%]
6,7	35 $\pm$ 7	20,2	77 $\pm$ 15
7,0	65 $\pm$ 13	20,6	50 $\pm$ 10
13,7	58 $\pm$ 12	21,1	39 $\pm$ 8
17,5	46 $\pm$ 9	22,1	64 $\pm$ 13
18,0	100 $\pm$ 20	22,8	62 $\pm$ 12
18,5	47 $\pm$ 9	23,0	68 $\pm$ 14
19,0	93 $\pm$ 19	23,3	69 $\pm$ 14
19,3	47 $\pm$ 9	26,8	44 $\pm$ 9
19,9	87 $\pm$ 18	27,3	54 $\pm$ 11
20,1	68 $\pm$ 14	32,2	31 $\pm$ 6

Outro objeto da presente invenção é um processo preferido para a produção de um solvato de DMSO substancialmente cristalino ou cristalino do composto da fórmula (I), conforme descrito acima, em que um composto bruto da fórmula (I) é suspenso em acetato de etila, DMSO é adicionado à referida suspensão em quantidade suficiente para dissolver todo ou pelo menos substancialmente todo o composto da fórmula (I), e em que o solvato de DMSO do composto da fórmula (I), que se cristaliza a partir da solução, é separado da fase líquida.

Em outra característica, a presente invenção refere-se a um processo preferido para a produção de uma forma purificada do composto da fórmula (I) a partir da forma bruta do referido composto, em que o composto bruto da fórmula (I) é convertido em solvato de DMSO no estado sólido, conforme descrito acima de preferência em um solvato de DMSO correspondente substancialmente cristalino ou cristalino, especificamente na maneira descrita neste pedido de patente e, mais especificamente em um solvato de DMSO substancialmente cristalino ou cristalino, em que a razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO é de aproximadamente 1:1,75 a 1:2,75, sendo este solvato de DMSO isolado de preferência em forma úmida, e novamente dissolvido em cloreto de metileno, no qual o composto da fórmula

(I) precipita e o referido composto da fórmula (I) purificado precipitado é isolado.

A invenção refere-se também ao composto da fórmula (I) como pode ser obtido pelo processo descrito no parágrafo precedente.

- 5 A invenção refere-se além do mais a um composto da fórmula (I) que exhibe essencialmente o seguinte perfil de Difração de Raio x em Pó, registrado com radiação Cu K alfa, pelo qual pode ser facilmente caracterizado:

2 θ [°]	Rel Int [%]
4,7	100 $\pm$ 20
6,2	21 $\pm$ 4
9,1	9,5 $\pm$ 2
9,3	15,5 $\pm$ 3
9,6	11,5 $\pm$ 2
11,8	12 $\pm$ 2
14,5	10 $\pm$ 2
15,8	10 $\pm$ 2
16,1	18 $\pm$ 4
18,3	14 $\pm$ 3

2 θ [°]	Rel Int [%]
18,4	13,5 $\pm$ 3
18,7	10,5 $\pm$ 2
20,6	14,5 $\pm$ 3
21,8	9,5 $\pm$ 2
22,3	13,5 $\pm$ 3
22,7	13 $\pm$ 3
23,9	10,5 $\pm$ 2
25,2	11 $\pm$ 2
28,1	9 $\pm$ 2

- 10 O erro na medição dos valores 2-teta é geralmente de $\pm 0,2^\circ$, as variações típicas dos valores indicados para a intensidade relativa são fornecidas na tabela.

Ainda outro objeto da presente invenção é um composto da fórmula (I) supramencionada, compreendendo cristais com os seguintes parâmetros cristalográficos:

- | | | |
|----|------------------------------|--|
| 15 | Sistema cristalográfico | Monoclínico |
| | Grupo espacial | C2 |
| | Dimensões da célula unitária | $a = 39,292(6)$ Ang $\alpha = 90^\circ$.
$b = 9,955(2)$ Ang $\beta = 103,191(10)^\circ$
$c = 16,813(2)$ Ang $\gamma = 90^\circ$. |
| 20 | Volume | $6402,8(18)$ (Ang) ³ |
| | Z | 4 fórmulas unitárias por célula unitária |

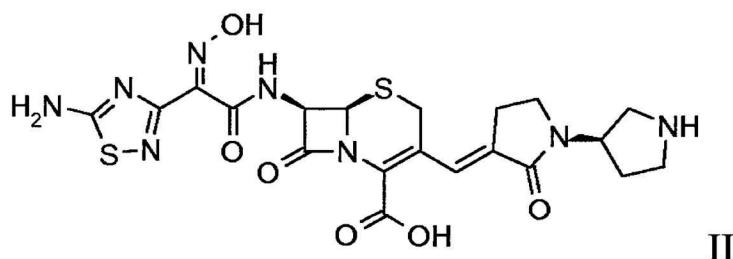
Densidade (calculada) 1,167 mg/m³.

A figura 1 apresenta um diagrama típico de XRPD de um solvato de DMSO do composto da fórmula (I) de acordo com a invenção.

A figura 2 apresenta um diagrama típico de XRPD do composto da fórmula (I) conforme pode ser obtido via seu solvato de DMSO de acordo com a invenção.

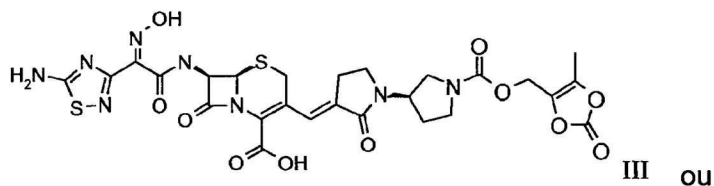
A figura 3 retrata a molécula do composto da fórmula (I) em três dimensões com esquema para rotulagem conforme calculado a partir da análise por raio x.

Em ainda outra característica, a presente invenção refere-se a um processo para a produção de Ceftobiprol, ou seja, o composto da fórmula II:

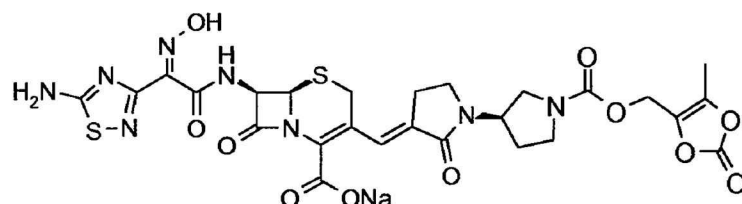


em que um composto da fórmula (I) é convertido em um solvato de DMSO no estado sólido, especificamente na maneira aqui descrita e mais especificamente em um solvato de DMSO substancialmente cristalino ou cristalino, em que a razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO é de aproximadamente 1:1,75 a 1:2,75, de preferência, de aproximadamente 1:2 a aproximadamente 1:2,5, sendo este solvato de DMSO no estado sólido isolado de preferência em forma úmida, e novamente dissolvido em cloreto de metileno, no qual o composto da fórmula (I) precipita, e o composto da fórmula (I) purificado precipitado é isolado e convertido em Ceftobiprol. A conversão para Ceftobiprol pode ser realizada conforme descrito, por exemplo, no documento EP 0 849 269 ou WO 99/65920 ou em maneira análoga, por exemplo, removendo os grupos de proteção por meio de tratamento com ácido trifluoracético e trietil silano, seguido por neutralização com hidrogenocarbonato de sódio.

A invenção refere-se além do mais a um processo para a produção de Ceftobiprol Medocaril, ou seja, o composto da fórmula III:



de Ceftobiprol Medocaril em forma de seu sal de sódio, ou seja, o composto da fórmula:



- 5 em que um composto da fórmula (I) é convertido em um solvato de DMSO no estado sólido, especificamente na maneira aqui descrita e mais especificamente em um solvato de DMSO substancialmente cristalino ou cristalino, em que a razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO é de aproximadamente 1:1,75 a 1:2,75, de preferência de aproximadamente 1:2 a
- 10 aproximadamente 1:2,5, sendo este solvato de DMSO no estado sólido isolado de preferência em forma úmida, e novamente dissolvido em cloreto de metileno, no qual o composto da fórmula (I) precipita, e o composto da fórmula (I) purificado precipitado é isolado e convertido em Ceftobiprol Medocaril (fórmula III) e seu sal de sódio. A última conversão pode ser realizada, por
- 15 exemplo, conforme descrita no documento WO01/90111, por exemplo, por tratamento com 4-nitro-fenil éster de 5-metil-2-oxo-[1,3]dioxol-4-ilmetil éster de ácido carbônico em DMSO e, opcionalmente, precipitação subsequente de seu sal de sódio por tratamento com etilhexanoato de sódio.

- 20 Mais especificamente, foi constatado que o solvato de DMSO de acordo com a presente invenção se precipita de uma mistura de acetato de etila e DMSO em temperaturas ambiente, geralmente de aproximadamente 15°C a 30°C, por exemplo, 20 a 27°C, tal como aproximadamente 25°C, en-

quanto que o composto puro da fórmula (I) é rapidamente solúvel nestas misturas nas referidas temperaturas. É, portanto, possível dissolver o composto bruto da fórmula (I) em uma mistura de acetato de etila e DMSO. O solvato de DMSO de acordo com a presente invenção menos solúvel se precipita da referida mistura de solvente. Este solvato de DMSO contém geralmente menos impurezas do que o composto bruto da fórmula (I). Além disso, o solvato de DMSO forma cristais sob as referidas condições, os quais são de tamanho relativamente grande de modo que podem ser de imediato e muito rapidamente separados do solvente, por exemplo, por centrifugação e/ou filtração.

Em cloreto de metileno, por outro lado, o solvato de DMSO de acordo com a presente invenção é rapidamente solúvel em temperaturas no intervalo conforme indicado no parágrafo precedente (solubilidade em torno de 70g/l a aproximadamente 25°C). O composto da fórmula (I) é significativamente menos solúvel em cloreto de metileno sob as referidas condições (solubilidade em torno de 8g/l a aproximadamente 25°C). Por conseguinte, dissolver o solvato de DMSO em cloreto de metileno resulta em que o composto da fórmula (I) se precipite desta solução. Esse precipitado do composto da fórmula (I) é novamente em geral de pureza maior do que o solvato de DMSO dissolvido, e de tal tamanho de partículas que pode ser filtrado ou centrifugado e separado muito rapidamente do solvente. Adicionalmente, o precipitado do composto da fórmula (I) está em geral em forma substancialmente cristalina quando se precipita do cloreto de metileno. Mais especificamente, o precipitado compreende o composto da fórmula (I) pelo parcialmente em forma de monocristais.

As duas etapas supramencionadas de cristalização aumentam fortemente a pureza do composto bruto da fórmula (I). O percentual de composto da fórmula (I) no material aumenta geralmente de aproximadamente 84 a 87 por cento, no material bruto, para aproximadamente 97 e mais por cento no material purificado, recuperado do solvato de DMSO de acordo com a presente invenção. A tabela a seguir apresenta o efeito de purificação do processo de acordo com a presente invenção para três lotes industriais

do composto da fórmula (I).

Tabela 3: Comparação entre a pureza do composto bruto da fórmula I ["BAL1026 bruto"], do solvato de DMSO obtido a partir do mesmo ["BAL1026 solvato"] e do composto purificado recuperado da fórmula (I) ["BAL1026 recuperado"]. O percentual indica a quantidade do produto desejado no material total obtido e é determinado com LC (cromatografia líquida).

Produto	Lote nº	Pureza (área %)
BAL1026 bruto	05R0004	84,4
BAL1026 solvato	05R0004	95,2
BAL1026 recuperado	05R0004	97,0

BAL1026 bruto	06R0001	87,4
BAL1026 solvato	06R0001	95,8
BAL1026 recuperado	06R0001	97,3

BAL1026 bruto	06R0002	86,0
BAL1026 solvato	06R0002	94,3
BAL1026 recuperado	06R0002	97,0

BAL1026 bruto	06R0014	86,3
BAL1026 solvato	06R0014	95,4
BAL1026 recuperado	06R0014	97,3

Além do mais, a pureza do composto da fórmula (I), quando purificado via um solvato de DMSO no estado sólido como intermediário de acordo com a presente invenção, é muito melhor do que a pureza de um material correspondente purificado convencionalmente. Esse fato é evidente a partir da Tabela 4. A pureza do composto da fórmula (I), dessa forma, é de aproximadamente 90 por cento para um lote produzido do modo convencional e de aproximadamente 97 por cento em lotes produzidos de acordo com a presente invenção.

Tabela 4:

	Lotes de produção do Composto (I)					
	Arte anterior			Presente invenção		
	03/001	03/002	03/003	04R0001	04R0002	04R0003
	Área %	Área %	Área %	Área %	Área %	Área %
Composto (I)	90,6	89,9	90,7	96,8	97,3	97,1

Como já mencionado acima, foi constatado também que o processo para a produção do composto da fórmula (I) de acordo com a presente invenção leva vantajosamente a um material compreendendo o composto da fórmula (I) em forma pelo menos parcialmente de monocristais. Estes monocristais possuem os parâmetros de monocristal mencionados acima e, de acordo com as informações disponíveis para os inventores, não haviam sido ainda disponibilizados antes para o público.

Quando o processo preferido de purificação é conduzido para o composto da fórmula (I) de acordo com a presente invenção, o composto bruto da fórmula (I) é suspenso em acetato de etila para formar uma pasta de cimento.

O processo para produzir o composto bruto da fórmula (I) não é fundamental para a presente invenção. Em particular, foi constatado que a purificação do referido composto via seu solvato de DMSO de acordo com a presente invenção resulta em material de qualidade uniforme, tais como cristalinidade e, em particular, pureza, independentemente da pureza dos intermediários do processo anterior para o material da fórmula (I).

O composto bruto da fórmula (I) é opcionalmente secado antes da purificação.

De preferência, a razão do composto bruto da fórmula (I) para acetato de etila é de 1 para 10 a 1 para 40 (peso/volume) na referida pasta de cimento. Embora uma quantidade menor de acetato de etila, correspondendo a uma razão de 1:10, dificulte a agitação da pasta de cimento, quantidades de acetato de etila correspondentes a uma razão de 1:40 e mais torna mais lenta a filtração do solvato de DMSO. Mais preferivelmente, a razão de

composto sólido bruto da fórmula (I) para acetato de etila é, portanto, de 1 para 15 a 1 para 20 (peso/volume), em especial, de aproximadamente 1 para 17 (peso/volume).

5 Após a transformação em pasta de cimento do composto da fórmula (I) no acetato de etila, DMSO é adicionado à referida suspensão em quantidade para dissolver todo ou substancialmente todo o composto da fórmula (I). A razão preferida do composto da fórmula I para DMSO varia de 1 para 20 a 1 para 26, Mais preferida é uma razão de aproximadamente 1 para 23.

10 Durante a formação do solvato, a temperatura da mistura da reação pode ser mantida em aproximadamente 15 a 50°C. Surpreendentemente, contudo, verificou-se ser possível utilizar temperaturas ambiente durante a formação do solvato sem qualquer efeito prejudicial sobre a qualidade do produto. É, portanto, preferido manter a temperatura em aproximada-
15 mente 20 a 30°C, especialmente, em aproximadamente 23 a 27°C, durante a formação do solvato.

A formação do solvato do composto da fórmula (I) finaliza geralmente em um período de tempo de aproximadamente 15 minutos a várias horas, por exemplo, em 1 a 10, de preferência, em 2 a 6 horas.

20 Após o período de tempo para formação do solvato e/ou desenvolvimento de seu cristal, a suspensão de solvato de DMSO precipitado e/ou em precipitação é vantajosamente resfriada até uma temperatura de aproximadamente menos 5 a 10°C, de preferência, de 0 a 4°C, e mantida naquela temperatura, opcionalmente com agitação, por algum tempo adicional, por
25 exemplo, por aproximadamente 0,25 a 5 horas, de preferência de 1 a 3 horas, antes de separar o solvato de DMSO do licor-mãe.

A separação do solvato de DMSO precipitado pode ser vantajosamente realizada por centrifugação e/ou filtração porque os tempos de filtração são muito curtos graças à excelente cristalinidade do solvato de DM-
30 SO de acordo com a invenção.

O solvato de DMSO isolado do composto da fórmula (I) pode ser processado adiante no estado, a fim de recuperar o composto da fórmula (I),

ou pode ser também opcionalmente secado previamente.

O composto da fórmula (I) que pode ser recuperado do referido solvato de acordo com a presente invenção é, em geral, de pureza significativamente melhor, quando comparada à pureza do solvato e, especialmente,
5 quando comparada ao composto bruto da fórmula (I).

Para recuperar o composto da fórmula (I), o solvato de DMSO isolado no estado sólido do composto da fórmula (I), em especial, um solvato de DMSO produzido como descrito acima e, mais especialmente, um solvato de DMSO, em que a razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO é
10 de aproximadamente 1:2, é novamente dissolvido em tal quantidade de cloreto de metileno. O composto purificado da fórmula (I) precipita no referido solvente e é isolado em seguida.

O solvato de DMSO isolado é adicionado de preferência ao solvente em temperatura ambiente ou ligeiramente elevadas, por exemplo, no
15 intervalo de 20 a 30°C, mais preferivelmente de 23 a 27°C. A mistura obtida é então vantajosamente deixada em repouso por algum tempo, por exemplo, por aproximadamente 15 minutos a algumas horas, de preferência de aproximadamente 1 a 2 horas e preferivelmente sob agitação, para permitir a cristalização apropriada do composto da fórmula (I).

Em seguida, a mistura da reação é vantajosamente resfriada, por exemplo, até uma temperatura de aproximadamente 0 a 4°C, e deixada em repouso na referida temperatura por algum tempo, por exemplo, por 30 minutos a 5 horas, de preferência por 1 a 3 horas, antes que o precipitado do composto da fórmula (I) formado durante a referida etapa do processo seja
25 separado.

O precipitado é então centrifugado ou filtrado, opcionalmente lavado, e secado sob vácuo para obter o composto purificado da fórmula (I).

O composto purificado da fórmula (I) é de preferência ainda
30 processado para produzir Cefotobiprol pela separação por clivagem de tritila dos grupos de proteção benzidril e terc-butoxicarbonila. Métodos, portanto, são comumente conhecidos daqueles versados na técnica e, por exemplo,

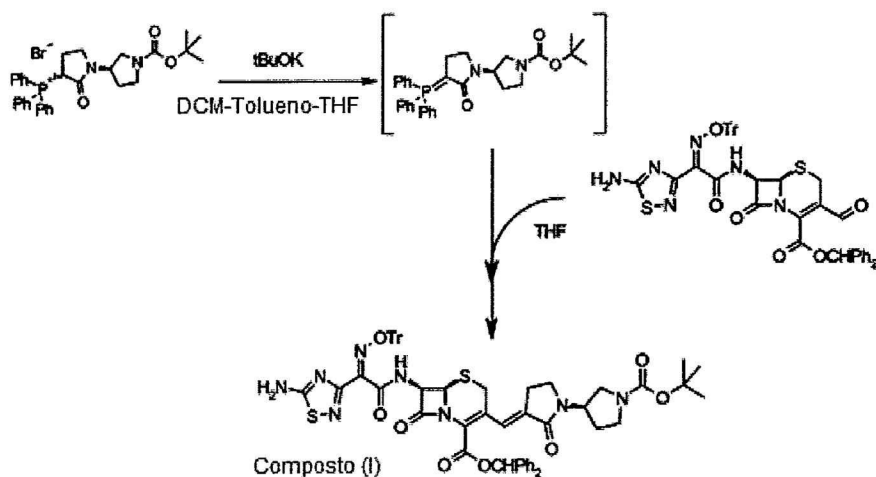
descritos mais detalhadamente nos documentos WO 01/90111 ou EP-A 0 849 269.

Ainda outra alternativa preferida, o composto da fórmula (I) é adicionalmente processado para produzir Ceftobiprol Medocaril. Esse processamento pode ser efetuado, por exemplo, de acordo com o documento WO 01/90111, convertendo o composto purificado da fórmula (I) para Ceftobiprol como descrito acima e fazendo com que este reaja com 4-nitro-fenil éster de 5-metil-2-oxo-[1,3]dioxol-4-ilmetil de ácido carbônico.

O uso do composto purificado da fórmula (I) conforme obtido de acordo com a presente invenção para a produção de Ceftobiprol ou Ceftobiprol Medocaril resulta em qualidade significativamente melhorada dos referidos produtos finais de cefalosporina, Ceftobiprol ou Ceftobiprol Medocaril, cuja pureza (quantidade do composto desejado no produto final fabricado) aumenta geralmente em aproximadamente 2 a 3 por cento (absoluta). Além disso, o rendimento dos produtos finais melhoram também significativamente porque as etapas adicionais de purificação necessárias no processamento convencional da técnica anterior podem ser evitadas quando se trabalha de acordo com a presente invenção.

Exemplo 1:

Este exemplo mostra a purificação de um lote industrial do composto da fórmula (I), produzido de acordo com o seguinte Esquema de Síntese ("Composto (I)"):



Descrição do Método

O reator é carregado com aproximadamente 1 mol do composto bruto úmido (I) e 10,4 litros de acetato de etila. A mistura é aquecida até 23 – 27°C e agitada. Após 15 minutos adicionais, 10,4 litros de acetato de etila são adicionados e o volume do solvente é reduzido por meio de destilação a vácuo antes que 1,84 kg de DMSO sejam adicionados em gotas durante 15 min. A mistura é agitada até que quase todo o material se dissolva.

O composto (I) se cristaliza como solvato de DMSO a partir da mistura da reação. Em seguida, 6,9 litros adicionais de acetato de etila são adicionados e a suspensão resultante é agitada por 0,25 h a 0 - 5°C. O solvato de DMSO no estado sólido do Composto (I) é isolado por centrifugação e lavado com 1,85 litro adicional de acetato de etila.

O solvato de DMSO úmido do Composto (I) (aproximadamente 3 kg) é então dissolvido a 23 – 27°C com 13,8 litros de cloreto de metileno (DCM). A partir desta solução, o Composto (I) purificado se cristaliza. Um volume adicional de 13,8 litros de acetato de etila é adicionado. A suspensão resultante é agitada por 0,5 h a 0 - 5°C e centrifugada. O produto purificado é lavado com cloreto de metileno / acetato de etila 1/1 (v/v) e secado em vácuo.

Exemplo 2:

Determinação da configuração absoluta de benzidril éster de

ácido (6R,7R)-7-{2-(5-amino-[1,2,4]tiadiazol-3-il)-2-[(Z)-tritoloxiimino]-acetil-amino}-3-[(R)-1'-terc-butoxicarbonil-2-oxo-[1,3']bipirrolidinil-(3E)-ilidenometil]-8-oxo-5-tia-1-aza-biciclo[4.2.0]oct-2-eno-2-carboxílico (Composto da fórmula (I)) por Análise de Estrutura por Raio x de Monocristais

5 Cristal medido: Placa incolor 0,050 x 0,040 x 0,006 mm³

Quiralidade: *R*(C24); *R*(C29); *R*(C49)

Procedimento experimental

A fim de ser obtido um monocristal adequado para Análise por Raio x de Monocristal, aproximadamente 20 mg do solvato de DMSO do
 10 composto da fórmula (I) mencionado acima foram dissolvidos em quantidade suficiente de acetonitrila para se obter uma solução transparente. Esta solução foi deixada em repouso para que evaporasse muito lentamente em temperatura ambiente. Um monocristal apropriado foi então escolhido e separado do precipitado cristalino sob o microscópico. A estrutura do cristal foi de-
 15 terminada com difratômetro Bruker-Nonius, equipado com detector de área Proteum-CCD, anodo rotativo FR591 com radiação CuK_α, espelhos de Montel como monocromadores e acessório Kryoflex de baixa temperatura (T = 90 K). Coleta de dados de varreduras Ômega e phi em esfera completa. Programas utilizados: Coleta de dados: Proteum V. 1.37 (Bruker-Nonius
 20 2002), Redução de dados: Saint + Versão 6.22 (Bruker-Nonius 2001) e correção por absorção: SADABS V. 2.03 (2002). A solução da estrutura cristalográfica foi obtida usando métodos indiretos como implantados em SHELX-TL Versão 6.10 (Sheldrick, Universität Göttingen (Alemanha), 2000) e visualizada com o programa XP. Átomos ausentes foram subsequentemente local-
 25 lizados a partir de síntese de Fourier diferença e adicionados à lista de átomos. O refinamento pelo método de mínimos quadrados em F², utilizando todas as intensidades medidas, foi realizado com o programa SHELXTL Versão 6.10 (Sheldrick, Universität Göttingen (Alemanha), 2000). Todos os átomos diferentes de hidrogênio foram refinados, incluindo parâmetros de
 30 deslocamento anisotrópico.

Quiralidade

Verificação de quiralidade*	Estrutura correta	Estrutura invertida
Parâmetro de Flack (desvio padrão)	0,024(0,030)	0,955 (0,032)
Twin Basf (desvio padrão)	0,02 (0,03)	0,98 (0,03)
Valor wR2 (com parâmetro de Flack)	0,2322	0,2485
Quiralidade	R(C24); R(C29); R(C49)	SC24); S(C29); S(C49)

*H. D. Flack, *Acta Cryst*, 1983, A39, 876-881

H. D. Flack, G. Bernardinelli, *Acta Cryst*, 1999, A55, 908-915

H. D. Flack, G. Bernardinelli, *J. Appl. Cryst*, 2000, 33, 1143-1148.

5 Tabelas

Tabela 1: Dados cristalográficos e refinamento de estrutura.

	Fórmula empírica	C59.45 H54 N8.98 O10.42 S2
	Peso da fórmula	1125,07
	Temperatura	90(2) K
10	Comprimento de onda	1.54178 Angstroem (Ang)
	Sistema cristalográfico	Monoclínico
	Grupo espacial	C2
	Dimensões da Célula unitária	a = 39.292(6) Ang alfa = 90°. b = 9.955(2) Ang beta= 103.191(10)°. c= 16.813(2) Ang gama = 90°.
15	Volume	6402,8(18) Ang ³
	Z	4
	Densidade (calculada)	1,167 Mg/m ³
	Coeficiente de absorção	1.252 mm ⁻¹
20	F(000)	2356
	Tamanho do cristal	0,050 x 0,040 x 0,006 mm ³
	Variação de teta para	
	Coleta de dados	2,70 a 71,32°
	Intervalos de índices	-47 ≤ h ≤ 43, -12 ≤ k ≤ 10, -20 ≤ l ≤ 20
25	Reflexões coletadas	28170
	Reflexões independentes	10433 [R(int) = 0,0622]

	Integridade para teta = 71,32°	92,6 %
	Correção por absorção	SADABS (Bruker-AXS)
	Método de refinamento	Matriz completa de mínimos quadrados em F2
	Dados / restrições / parâmetros	10433 / 1 / 804
5	Grau de adequação em F2	0,999
	Índices R finais [$>2\sigma(I)$]	R1 = 0,0777, wR2 = 0,2128
	Índices R (todos os dados)	R1 = 0,1068, wR2 = 0,2322
	Parâmetro absoluto de estrutura	0,02(3)
	Maior diferença, pico e poço	0,421 e -0,329 e.(Ang) ⁻³

10 Tabela 2: Comprimentos [Ang] e ângulos [°] de ligações (conforme a figura 3)

S(l)-N(l)	1,690(5)	C(12)-C(13)	1,405(10)	C(54)-C(55)	1,501(12)
S(l)-C(2)	1,749(6)	C(13)-C(14)	1,388(10)	C(54)-C(56)	1,530(11)
N(l)-C(l)	1,324(7)	C(14)-C(15)	1,398(11)	C(54)-C(57)	1,536(12)
O(1)-N(4)	1,408(5)	C(15)-C(16)	1,385(9)	N(1L)-N(3L)	0,82(2)
O(1)-C(4)	1,490(6)	C(17)-C(22)	1,378(9)	N(1L)-N(2L)	0,97(4)
C(l)-N(2)	1,351(6)	C(17)-C(18)	1,405(8)	N(1L)-C(2LB)	1,11(3)
C(l)-C(3)	1,488(8)	C(18)-C(19)	1,399(8)	N(1L)-C(1LC)	1,15(3)
S(2)-C(29)	1,823(6)	C(19)-C(20)	1,402(10)	N(1L)-C(1LA)	1,68(3)
S(2)-C(28)	1,827(6)	C(20)-C(21)	1,331(10)	N(1L)-O(10W)	1,71(4)
N(2)-C(2)	1,335(7)	C(21)-C(22)	1,418(10)	N(1L)-C(2L)	1,82(6)
O(2)-C(23)	1,227(7)	C(24)-C(29)	1,539(8)	C(1LA)-C(2LC)	0,82(3)
C(2)-N(3)	1,320(7)	C(24)-C(25)	1,543(8)	C(1LA)-N(3L)	1,15(2)
O(3)-C(25)	1,201(6)	C(26)-C(27)	1,362(7)	C(1LA)-C(5LD)	1,49(5)
C(3)-N(4)	1,286(7)	C(26)-C(30)	1,476(7)	C(1LA)-C(3LD)	1,55(5)
C(3)-C(23)	1,529(7)	C(27)-C(44)	1,485(8)	C(1LA)-C(2LB)	1,58(3)
O(4)-C(30)	1,226(7)	C(27)-C(28)	1,521(9)	C(1LA)-C(2LD)	1,59(5)
C(4)-C(11)	1,516(9)	C(31)-C(38)	1,386(10)	C(1LA)-C(2L)	1,60(6)
C(4)-C(17)	1,518(8)	C(31)-C(32)	1,548(9)	C(1LC)-C(2L)	1,17(6)
C(4)-C(5)	1,544(8)	C(31)-C(38')	1,907(17)	C(1LC)-N(2L)	1,19(4)
O(5)-C(30)	1,346(7)	C(32)-C(37)	1,344(10)	C(1LC)-C(2LB)	1,19(4)
O(5)-C(31)	1,468(7)	C(32)-C(33)	1,389(9)	C(1LC)-O(10W)	1,76(5)

C(5)-C(6)	1,394(8)	C(33)-C(34)	1,412(10)	C(1LC)-N(3L)	1,80(4)
C(5)-C(10)	1,415(9)	C(34)-C(35)	1,395(10)	C(1LC)-C(5LD)	1,84(6)
N(5)-C(23)	1,335(7)	C(35)-C(36)	1,348(10)	C(2LB)-C(2L)	1,31(6)
N(5)-C(24)	1,439(6)	C(36)-C(37)	1,418(11)	C(2LB)-N(2L)	1,33(4)
O(6)-C(48)	1,235(7)	C(38)-C(39)	1,3900	C(2LB)-N(3L)	1,38(3)
N(6)-C(26)	1,390(6)	C(38)-C(43)	1,3900	C(2LB)-C(2LC)	1,49(4)
N(6)-C(25)	1,427(6)	C(39)-C(40)	1,3900	C(2LB)-C(2LD)	1,63(5)
N(6)-C(29)	1,468(7)	C(40)-C(41)	1,3900	C(2LB)-C(5LD)	1,84(5)
C(6)-C(7)	1,386(9)	C(41)-C(42)	1,3900	C(2L)-C(5LD)	0,73(6)
O(7)-C(53)	1,232(8)	C(42)-C(43)	1,3900	C(2L)-C(2LC)	1,23(6)
N(7)-C(48)	1,370(7)	C(38')-C(39')	1,3900	C(2L)-C(2LD)	1,69(7)
N(7)-C(47)	1,463(8)	C(38')-C(43')	1,3900	C(2L)-C(3LD)	1,88(8)
N(7)-C(49)	1,470(6)	C(39')-C(40')	1,3900	N(2L)-N(3L)	1,74(4)
C(7)-C(8)	1,368(11)	C(40')-C(41')	1,3900	N(2L)-C(4LD)	1,81(7)
O(8)-C(53)	1,348(7)	C(41')-C(42')	1,3900	C(2LC)-C(2LD)	0,90(4)
O(8)-C(54)	1,494(9)	C(42')-C(43')	1,3900	C(2LC)-C(5LD)	1,01(4)
N(8)-C(53)	1,357(8)	C(44)-C(45)	1,325(8)	C(2LC)-C(3LD)	1,64(6)
N(8)-C(50)	1,469(9)	C(45)-C(48)	1,482(7)	C(2LC)-N(3L)	1,77(4)
N(8)-C(51)	1,483(7)	C(45)-C(46)	1,509(9)	O(1W)-O(6W)	0,82(2)
C(8)-C(9)	1,390(11)	C(46)-C(47)	1,554(8)	O(1W)-O(2W)	1,19(2)
C(9)-C(10)	1,427(8)	C(49)-C(50)	1,526(9)	O(1W)-O(3W)	1,68(3)
C(11)-C(12)	1,398(8)	C(49)-C(52)	1,543(9)	O(2W)-O(6W)	1,13(2)
C(11)-C(16)	1,412(8)	C(51)-C(52)	1,523(9)	O(2W)-O(3W)	1,57(3)
O(4W)-O(5W)	1,47(4)	O(9W)-C(3LD)#1	1,87(7)	C(3LD)-O(9W)#1	1,87(7)
O(4W)-O(7W)	1,80(5)	O(11W)-C(4LD)#2	1,79(8)	C(4LD)-O(11W)#3	1,79(8)
O(5W)-O(7W)	1,24(4)	C(2LD)-C(5LD)	1,62(6)		
O(8W)-O(9W)	1,27(6)	C(3LD)-C(5LD)	1,32(6)		
N(l)-S(l)-C(2)	91,7(2)	C(12)-C(11)-C(16)		118,1(6)	
C(l)-N(l)-S(l)	107,2(4)	C(12)-C(11)-C(4)		122,4(5)	
N(4)-O(l)-C(4)	115,2(3)	C(16)-C(11)-C(4)		119,5(5)	
N(l)-C(l)-N(2)	120,9(5)	C(11)-C(12)-C(13)		121,3(6)	
N(l)-C(l)-C(3)	119,0(4)	C(14)-C(13)-C(12)		119,2(7)	

N(2)-C(1)-C(3)	120,0(5)	C(13)-C(14)-C(15)	120,5(7)
C(29)-S(2)-C(28)	92,4(3)	C(16)-C(15)-C(14)	119,9(7)
C(2)-N(2)-C(1)	109,0(4)	C(15)-C(16)-C(11)	120,9(6)
N(3)-C(2)-N(2)	124,9(5)	C(22)-C(17)-C(18)	118,3(6)
N(3)-C(2)-S(1)	123,8(4)	C(22)-C(17)-C(4)	121,4(5)
N(2)-C(2)-S(1)	111,3(4)	C(18)-C(17)-C(4)	120,3(5)
N(4)-C(3)-C(1)	118,4(4)	C(19)-C(18)-C(17)	120,8(6)
N(4)-C(3)-C(23)	123,3(4)	C(18)-C(19)-C(20)	119,3(6)
C(1)-C(3)-C(23)	118,1(4)	C(21)-C(20)-C(19)	120,1(6)
C(3)-N(4)-O(1)	110,3(4)	C(20)-C(21)-C(22)	121,4(7)
O(1)-C(4)-C(11)	108,0(5)	C(17)-C(22)-C(21)	120,1(6)
O(1)-C(4)-C(17)	110,8(4)	O(2)-C(23)-N(5)	124,4(5)
C(11)-C(4)-C(17)	111,7(4)	O(2)-C(23)-C(3)	117,8(5)
O(1)-C(4)-C(5)	101,2(4)	N(5)-C(23)-C(3)	117,8(5)
C(11)-C(4)-C(5)	112,9(5)	N(5)-C(24)-C(29)	120,3(5)
C(17)-C(4)-C(5)	111,7(5)	N(5)-C(24)-C(25)	118,8(5)
C(30)-O(5)-C(31)	116,4(5)	C(29)-C(24)-C(25)	86,4(4)
C(6)-C(5)-C(10)	118,5(5)	O(3)-C(25)-N(6)	132,8(5)
C(6)-C(5)-C(4)	120,4(5)	O(3)-C(25)-C(24)	137,8(5)
C(10)-C(5)-C(4)	121,1(5)	N(6)-C(25)-C(24)	89,4(4)
C(23)-N(5)-C(24)	117,1(5)	C(27)-C(26)-N(6)	118,6(5)
C(26)-N(6)-C(25)	135,4(4)	C(27)-C(26)-C(30)	123,7(5)
C(26)-N(6)-C(29)	124,8(4)	N(6)-C(26)-C(30)	117,6(4)
C(25)-N(6)-C(29)	93,5(4)	C(26)-C(27)-C(44)	124,6(5)
C(7)-C(6)-C(5)	120,5(6)	C(26)-C(27)-C(28)	125,1(5)
C(48)-N(7)-C(47)	113,6(4)	C(44)-C(27)-C(28)	109,5(5)
C(48)-N(7)-C(49)	122,3(5)	C(27)-C(28)-S(2)	115,6(4)
C(47)-N(7)-C(49)	123,9(5)	N(6)-C(29)-C(24)	88,0(4)
C(8)-C(7)-C(6)	121,4(6)	N(6)-C(29)-S(2)	109,8(4)
C(53)-O(8)-C(54)	120,8(6)	C(24)-C(29)-S(2)	117,2(4)
C(53)-N(8)-C(50)	125,7(5)	O(4)-C(30)-O(5)	122,7(5)
C(53)-N(8)-C(51)	123,0(5)	O(4)-C(30)-C(26)	122,1(5)

C(50)-N(8)-C(51)	110,9(5)	O(5)-C(30)-C(26)	115,2(4)
C(7)-C(8)-C(9)	120,8(6)	C(38)-C(31)-O(5)	111,4(7)
C(8)-C(9)-C(10)	118,5(7)	C(38)-C(31)-C(32)	114,4(7)
C(5)-C(10)-C(9)	120,4(6)	O(5)-C(31)-C(32)	111,9(5)
C(38)-C(31)-C(38')	26,5(7)	C(55)-C(54)-C(56)	112,0(7)
O(5)-C(31)-C(38')	99,1(6)	O(8)-C(54)-C(57)	109,2(6)
C(32)-C(31)-C(38')	100,3(7)	C(55)-C(54)-C(57)	113,4(9)
C(37)-C(32)-C(33)	119,1(6)	C(56)-C(54)-C(57)	108,2(7)
C(37)-C(32)-C(31)	118,8(6)	N(3L)-N(1L)-N(2L)	151(4)
C(33)-C(32)-C(31)	121,8(6)	N(3L)-N(1L)-C(2LB)	90(2)
C(32)-C(33)-C(34)	119,4(6)	N(2L)-N(1L)-C(2LB)	79(3)
C(35)-C(34)-C(33)	120,1(6)	N(3L)-N(1L)-C(1LC)	131(3)
C(36)-C(35)-C(34)	119,7(6)	N(2L)-N(1L)-C(1LC)	68(3)
C(35)-C(36)-C(37)	119,4(7)	C(2LB)-N(IL)-C(1LC)	64(2)
C(32)-C(37)-C(36)	122,0(7)	N(3L)-N(1L)-C(1LA)	38,5(17)
C(31)-C(38)-C(39)	116,6(8)	N(2L)-N(1L)-C(1LA)	144(3)
C(31)-C(38)-C(43)	123,0(8)	C(2LB)-N(1L)-C(1LA)	65,3(18)
C(39)-C(38)-C(43)	120,0	C(1LC)-N(1L)-C(1LA)	92(2)
C(40)-C(39)-C(38)	120,0	N(3L)-N(IL)-O(10W)	97(2)
C(39)-C(40)-C(41)	120,0	N(2L)-N(IL)-O(10W)	111(3)
C(42)-C(41)-C(40)	120,0	C(2LB)-N(IL)-O(10W)	127(2)
C(43)-C(42)-C(41)	120,0	C(ILC)-N(IL)-O(10W)	73(2)
C(42)-C(43)-C(38)	120,0	C(1LA)-N(IL)-O(10W)	89,2(16)
C(39)-C(38)-C(43')	120,0	N(3L)-N(1L)-C(2L)	93(3)
C(39)-C(38)-C(31)	125,9(8)	N(2L)-N(1L)-C(2L)	98(3)
C(43)-C(38)-C(31)	114,1(8)	C(2LB)-N(1L)-C(2L)	45(2)
C(40)-C(39)-C(38')	120,0	C(1LC)-N(1L)-C(2L)	39(2)
C(39)-C(40)-C(4r)	120,0	C(1LA)-N(1L)-C(2L)	54(2)
C(40)-C(41)-C(42')	120,0	O(10W)-N(IL)-C(2L)	82(2)
C(43)-C(42)-C(4r)	120,0	C(2LC)-C(1LA)-N(3L)	127(3)
C(42)-C(43)-C(38')	120,0	C(2LC)-C(1LA)-C(5LD)	41(3)
C(45)-C(44)-C(27)	125,7(6)	N(3L)-C(1LA)-C(5LD)	120(3)

C(44)-C(45)-C(48)	121,8(5)	C(2LC)-C(1LA)-C(3LD)	81(3)
C(44)-C(45)-C(46)	128,9(5)	N(3L)-C(1LA)-C(3LD)	129(3)
C(48)-C(45)-C(46)	109,3(5)	C(5LD)-C(1LA)-C(3LD)	52(2)
C(45)-C(46)-C(47)	102,3(5)	C(2LC)-C(1LA)-C(2LB)	69(3)
N(7)-C(47)-C(46)	105,0(5)	N(3L)-C(1LA)-C(2LB)	58,3(16)
O(6)-C(48)-N(7)	124,9(5)	C(5LD)-C(1LA)-C(2LB)	74(2)
O(6)-C(48)-C(45)	128,3(5)	C(3LD)-C(1LA)-C(2LB)	121(2)
N(7)-C(48)-C(45)	106,9(5)	C(2LC)-C(1LA)-C(2LD)	24(3)
N(7)-C(49)-C(50)	110,8(5)	N(3L)-C(1LA)-C(2LD)	114(2)
N(7)-C(49)-C(52)	113,0(4)	C(5LD)-C(1LA)-C(2LD)	64(3)
C(50)-C(49)-C(52)	103,2(5)	C(3LD)-C(1LA)-C(2LD)	104(3)
N(8)-C(50)-C(49)	104,3(5)	C(2LB)-C(1LA)-C(2LD)	62(2)
N(8)-C(51)-C(52)	105,1(5)	C(2LC)-C(1LA)-C(2L)	49(3)
C(51)-C(52)-C(49)	105,2(5)	N(3L)-C(1LA)-C(2L)	94(3)
O(7)-C(53)-O(8)	125,4(6)	C(5LD)-C(1LA)-C(2L)	27(2)
O(7)-C(53)-N(8)	122,9(5)	C(3LD)-C(1LA)-C(2L)	73(3)
O(8)-C(53)-N(8)	111,7(6)	C(2LB)-C(1LA)-C(2L)	49(2)
O(8)-C(54)-C(55)	110,9(7)	C(2LD)-C(1LA)-C(2L)	64(3)
O(8)-C(54)-C(56)	102,5(7)	C(2LC)-C(1LA)-N(IL)	106(3)
N(3L)-C(1LA)-N(1L)	26,3(11)	C(2LC)-C(2LB)-C(1LA)	31,0(13)
C(5LD)-C(1LA)-N(1L)	93(2)	N(1L)-C(2LB)-C(2LD)	134(3)
C(3LD)-C(1LA)-N(1L)	116(2)	C(1LC)-C(2LB)-C(2LD)	125(3)
C(2LB)-C(1LA)-N(1L)	39,8(12)	C(2L)-C(2LB)-C(2LD)	70(3)
C(2LD)-C(1LA)-N(1L)	101(2)	N(2L)-C(2LB)-C(2LD)	179(3)
C(2L)-C(1LA)-N(1L)	68(2)	N(3L)-C(2LB)-C(2LD)	100(2)
N(1L)-C(1LC)-C(2L)	104(4)	C(2LC)-C(2LB)-C(2LD)	33,3(17)
N(1L)-C(1LC)-N(2L)	49(2)	C(1LA)-C(2LB)-C(2LD)	59(2)
C(2L)-C(1LC)-N(2L)	135(4)	N(1L)-C(2LB)-C(5LD)	100(2)
N(1L)-C(1LC)-C(2LB)	57(2)	C(1LC)-C(2LB)-C(5LD)	71(2)
C(2L)-C(1LC)-C(2LB)	67(3)	C(2L)-C(2LB)-C(5LD)	19(3)
N(2L)-C(1LC)-C(2LB)	68(3)	N(2L)-C(2LB)-C(5LD)	126(3)
N(IL)-C(ILC)-O(10W)	69(2)	N(3L)-C(2LB)-C(5LD)	89,2(19)

C(2L)-C(ILC)-O(10W)	103(4)	C(2LC)-C(2LB)-C(5LD)	33,3(16)
N(2L)-C(ILC)-O(10W)	98(3)	C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)	50,7(17)
C(2LB)-C(ILC)-O(10W)	118(3)	C(2LD)-C(2LB)-C(5LD)	55(2)
N(1L)-C(1LC)-N(3L)	20,3(13)	C(5LD)-C(2L)-C(1LC)	149(8)
C(2L)-C(1LC)-N(3L)	84(3)	C(5LD)-C(2L)-C(2LC)	55(5)
N(2L)-C(1LC)-N(3L)	68(3)	C(1LC)-C(2L)-C(2LC)	120(5)
C(2LB)-C(1LC)-N(3L)	50,1(18)	C(5LD)-C(2L)-C(2LB)	127(7)
O(10W)-C(ILC)-N(3L)	68,1(17)	C(1LC)-C(2L)-C(2LB)	57(3)
N(1L)-C(1LC)-C(5LD)	98(3)	C(2LC)-C(2L)-C(2LB)	72(3)
C(2L)-C(1LC)-C(5LD)	12(3)	C(5LD)-C(2L)-C(1LA)	67(6)
N(2L)-C(1LC)-C(5LD)	138(3)	C(1LC)-C(2L)-C(1LA)	95(4)
C(2LB)-C(1LC)-C(5LD)	71(2)	C(2LC)-C(2L)-C(1LA)	30(2)
O(10W)-C(ILC)-C(5LD)	91(2)	C(2LB)-C(2L)-C(1LA)	65(3)
N(3L)-C(1LC)-C(5LD)	78,0(18)	C(5LD)-C(2L)-C(2LD)	72(6)
N(1L)-C(2LB)-C(1LC)	60(2)	C(1LC)-C(2L)-C(2LD)	121(5)
N(1L)-C(2LB)-C(2L)	98(3)	C(2LC)-C(2L)-C(2LD)	31(2)
C(1LC)-C(2LB)-C(2L)	56(3)	C(2LB)-C(2L)-C(2LD)	64(3)
N(1L)-C(2LB)-N(2L)	45,8(19)	C(1LA)-C(2L)-C(2LD)	58(3)
C(1LC)-C(2LB)-N(2L)	56(2)	C(5LD)-C(2L)-N(1L)	123(7)
C(2L)-C(2LB)-N(2L)	112(4)	C(1LC)-C(2L)-N(1L)	38(2)
N(1L)-C(2LB)-N(3L)	36,6(13)	C(2LC)-C(2L)-N(1L)	82(3)
C(1LC)-C(2LB)-N(3L)	88(2)	C(2LB)-C(2L)-N(1L)	37,1(19)
C(2L)-C(2LB)-N(3L)	99(3)	C(1LA)-C(2L)-N(1L)	58(2)
N(2L)-C(2LB)-N(3L)	80(2)	C(2LD)-C(2L)-N(1L)	92(3)
N(1L)-C(2LB)-C(2LC)	104(3)	C(5LD)-C(2L)-C(3LD)	32(5)
C(1LC)-C(2LB)-C(2LC)	101(3)	C(1LC)-C(2L)-C(3LD)	117(4)
C(2L)-C(2LB)-C(2LC)	52(3)	C(2LC)-C(2L)-C(3LD)	59(3)
N(2L)-C(2LB)-C(2LC)	147(3)	C(2LB)-C(2L)-C(3LD)	116(4)
N(3L)-C(2LB)-C(2LC)	76,3(19)	C(1LA)-C(2L)-C(3LD)	52(2)
N(1L)-C(2LB)-C(1LA)	75(2)	C(2LD)-C(2L)-C(3LD)	88(4)
C(1LC)-C(2LB)-C(1LA)	96(2)	N(1L)-C(2L)-C(3LD)	95(3)
C(2L)-C(2LB)-C(1LA)	67(3)	N(1L)-N(2L)-C(1LC)	63(3)

N(2L)-C(2LB)-C(1LA)	121(3)	N(1L)-N(2L)-C(2LB)	55(2)
N(3L)-C(2LB)-C(1LA)	45,3(13)	C(1LC)-N(2L)-C(2LB)	56(2)
N(1L)-N(2L)-N(3L)	13,2(16)	O(6W)-O(2W)-O(3W)	113(2)
C(1LC)-N(2L)-N(3L)	73(3)	O(1W)-O(2W)-O(3W)	73,5(16)
C(2LB)-N(2L)-N(3L)	51,4(19)	O(2W)-O(3W)-O(1W)	42,9(10)
N(1L)-N(2L)-C(4LD)	148(4)	O(5W)-O(4W)-O(7W)	43,3(15)
C(1LC)-N(2L)-C(4LD)	86(3)	O(1W)-O(6W)-O(2W)	74(2)
C(2LB)-N(2L)-C(4LD)	115(3)	O(7W)-O(5W)-O(4W)	83(2)
N(3L)-N(2L)-C(4LD)	159(3)	O(5W)-O(7W)-O(4W)	54,2(19)
C(1LA)-C(2LC)-C(2LD)	134(6)	O(8W)-O(9W)-C(3LD)#1	171(4)
C(1LA)-C(2LC)-C(5LD)	107(5)	N(IL)-O(10W)-C(ILC)	38,7(13)
C(2LD)-C(2LC)-C(5LD)	116(5)	C(2LC)-C(2LD)-C(1LA)	22(3)
C(1LA)-C(2LC)-C(2L)	101(4)	C(2LC)-C(2LD)-C(5LD)	34(3)
C(2LD)-C(2LC)-C(2L)	104(5)	C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)	55(2)
C(5LD)-C(2LC)-C(2L)	37(3)	C(2LC)-C(2LD)-C(2LB)	65(3)
C(1LA)-C(2LC)-C(2LB)	80(3)	C(1LA)-C(2LD)-C(2LB)	59(2)
C(2LD)-C(2LC)-C(2LB)	82(4)	C(5LD)-C(2LD)-C(2LB)	69(3)
C(5LD)-C(2LC)-C(2LB)	93(3)	C(2LC)-C(2LD)-C(2L)	45(3)
C(2L)-C(2LC)-C(2LB)	57(3)	C(1LA)-C(2LD)-C(2L)	58(3)
C(1LA)-C(2LC)-C(3LD)	69(3)	C(5LD)-C(2LD)-C(2L)	25(2)
C(2LD)-C(2LC)-C(3LD)	153(5)	C(2LB)-C(2LD)-C(2L)	46(2)
C(5LD)-C(2LC)-C(3LD)	54(3)	C(5LD)-C(3LD)-C(1LA)	62(3)
C(2L)-C(2LC)-C(3LD)	80(4)	C(5LD)-C(3LD)-C(2LC)	38(2)
C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)	121(3)	C(1LA)-C(3LD)-C(2LC)	29,8(14)
C(1LA)-C(2LC)-N(3L)	31(2)	C(5LD)-C(3LD)-O(9W)#1	134(4)
C(2LD)-C(2LC)-N(3L)	115(4)	C(ILA)-C(3LD)-O(9W)#1	146(4)
C(5LD)-C(2LC)-N(3L)	107(3)	C(2LC)-C(3LD)-O(9W)#1	139(3)
C(2L)-C(2LC)-N(3L)	83(3)	C(5LD)-C(3LD)-C(2L)	17(3)
C(2LB)-C(2LC)-N(3L)	49,1(15)	C(1LA)-C(3LD)-C(2L)	55(2)
C(3LD)-C(2LC)-N(3L)	91(2)	C(2LC)-C(3LD)-C(2L)	40(2)
N(1L)-N(3L)-C(1LA)	115(2)	O(9W)#1-C(3LD)-C(2L)	150(4)
N(1L)-N(3L)-C(2LB)	53,6(19)	O(11W)#3-C(4LD)-N(2L)	138(4)

C(1LA)-N(3L)-C(2LB)	76,4(18)	C(2L)-C(5LD)-C(2LC)	88(6)
N(1L)-N(3L)-N(2L)	15,7(19)	C(2L)-C(5LD)-C(3LD)	130(7)
C(1LA)-N(3L)-N(2L)	121(2)	C(2LC)-C(5LD)-C(3LD)	88(4)
C(2LB)-N(3L)-N(2L)	48,9(16)	C(2L)-C(5LD)-C(1LA)	85(6)
N(1L)-N(3L)-C(2LC)	98(2)	C(2LC)-C(5LD)-C(1LA)	32(2)
C(1LA)-N(3L)-C(2LC)	21,9(14)	C(3LD)-C(5LD)-C(1LA)	67(3)
C(2LB)-N(3L)-C(2LC)	54,7(16)	C(2L)-C(5LD)-C(2LD)	83(6)
N(2L)-N(3L)-C(2LC)	100,8(18)	C(2LC)-C(5LD)-C(2LD)	30(3)
N(1L)-N(3L)-C(1LC)	29,1(19)	C(3LD)-C(5LD)-C(2LD)	114(4)
C(1LA)-N(3L)-C(1LC)	86,2(17)	C(1LA)-C(5LD)-C(2LD)	61(3)
C(2LB)-N(3L)-C(1LC)	41,6(14)	C(2L)-C(5LD)-C(1LC)	19(5)
N(2L)-N(3L)-C(1LC)	39,3(15)	C(2LC)-C(5LD)-C(1LC)	89(3)
C(2LC)-N(3L)-C(1LC)	71,3(15)	C(3LD)-C(5LD)-C(1LC)	111(3)
O(6W)-O(1W)-O(2W)	65(2)	C(1LA)-C(5LD)-C(1LC)	76(2)
O(6W)-O(1W)-O(3W)	127(2)	C(2LD)-C(5LD)-C(1LC)	93(3)
O(2W)-O(1W)-O(3W)	63,6(14)	C(2L)-C(5LD)-C(2LB)	34(5)
O(6W)-O(2W)-O(1W)	41,2(13)	C(2LC)-C(5LD)-C(2LB)	54(3)
O(6W)-O(2W)-O(1W)	41,2(13)	C(2LC)-C(5LD)-C(2LB)	54(3)
C(3LD)-C(5LD)-C(2LB)	117(4)	C(2LD)-C(5LD)-C(2LB)	55(2)
C(1LA)-C(5LD)-C(2LB)	55,3(18)	C(1LC)-C(5LD)-C(2LB)	3,8(15)

Transformações de simetria utilizadas para gerar átomos equivalentes:

#1 -x+1, y, -z+1 #2 -x+1, y-1, -z+1 #3 -x+1, y+1, -z+1

Tabela 3: Ângulos de torção [°] (conforme a figura 3)

C(2)-S(I)-N(I)-C(I)	-0,3(5)	C(4)-C(11)-C(12)-C(13)	179,5(6)
S(I)-N(I)-C(I)-N(2)	-0,1(8)	C(11)-C(12)-C(13)-C(14)	1,1(10)
S(I)-N(I)-C(I)-C(3)	-175,6(5)	C(12)-C(13)-C(14)-C(15)	-2,3(11)
N(I)-C(I)-N(2)-C(2)	0,6(8)	C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	2,9(11)
C(3)-C(I)-N(2)-C(2)	176,0(6)	C(14)-C(15)-C(16)-C(11)	-2,1(10)
C(I)-N(2)-C(2)-N(3)	178,5(7)	C(12)-C(11)-C(16)-C(15)	0,8(8)
C(I)-N(2)-C(2)-S(I)	-0,7(7)	C(4)-C(11)-C(16)-C(15)	-179,0(5)
N(I)-S(I)-C(2)-N(3)	-178,7(6)	O(1)-C(4)-C(17)-C(22)	-36,4(7)

N(l)-S(l)-C(2)-N(2)	0,6(5)	C(11)-C(4)-C(17)-C(22)	-156,9(5)
N(l)-C(l)-C(3)-N(4)	167,3(6)	C(5)-C(4)-C(17)-C(22)	75,6(6)
N(2)-C(l)-C(3)-N(4)	-8,3(9)	O(1)-C(4)-C(17)-C(18)	145,2(5)
N(l)-C(l)-C(3)-C(23)	-18,2(9)	C(11)-C(4)-C(17)-C(18)	24,8(7)
N(2)-C(l)-C(3)-C(23)	166,2(5)	C(5)-C(4)-C(17)-C(18)	-102,7(6)
C(l)-C(3)-N(4)-O(1)	-176,3(5)	C(22)-C(17)-C(18)-C(19)	0,7(8)
C(23)-C(3)-N(4)-O(l)	9,6(8)	C(4)-C(17)-C(18)-C(19)	179,1(5)
C(4)-O(l)-N(4)-C(3)	-175,7(5)	C(17)-C(18)-C(19)-C(20)	1,1(8)
N(4)-O(1)-C(4)-C(11)	82,8(5)	C(18)-C(19)-C(20)-C(21)	-1,9(9)
N(4)-O(l)-C(4)-C(17)	-39,8(6)	C(19)-C(20)-C(21)-C(22)	0,8(10)
N(4)-O(l)-C(4)-C(5)	-158,5(5)	C(18)-C(17)-C(22)-C(21)	-1,8(8)
O(1)-C(4)-C(5)-C(6)	-37,2(7)	C(4)-C(17)-C(22)-C(21)	179,8(5)
C(11)-C(4)-C(5)-C(6)	77,9(6)	C(20)-C(21)-C(22)-C(17)	1,1(10)
C(17)-C(4)-C(5)-C(6)	-155,2(5)	C(24)-N(5)-C(23)-O(2)	-3,5(8)
O(l)-C(4)-C(5)-C(10)	140,1(5)	C(24)-N(5)-C(23)-C(3)	177,3(5)
C(11)-C(4)-C(5)-C(10)	-104,8(6)	N(4)-C(3)-C(23)-O(2)	103,8(7)
C(17)-C(4)-C(5)-C(10)	22,1(7)	C(l)-C(3)-C(23)-O(2)	-70,4(7)
C(10)-C(5)-C(6)-C(7)	0,5(9)	N(4)-C(3)-C(23)-N(5)	-76,9(7)
C(4)-C(5)-C(6)-C(7)	177,9(5)	C(l)-C(3)-C(23)-N(5)	108,9(6)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	0,1(10)	C(23)-N(5)-C(24)-C(29)	95,1(6)
C(6)-C(7)-C(8)-C(9)	0,7(11)	C(23)-N(5)-C(24)-C(25)	-161,1(5)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-2,0(11)	C(26)-N(6)-C(25)-O(3)	-16,3(10)
C(6)-C(5)-C(10)-C(9)	-1,8(9)	C(29)-N(6)-C(25)-O(3)	-167,5(6)
C(4)-C(5)-C(10)-C(9)	-179,2(6)	C(26)-N(6)-C(25)-C(24)	163,8(5)
C(8)-C(9)-C(10)-C(5)	2,6(10)	C(29)-N(6)-C(25)-C(24)	12,7(4)
O(1)-C(4)-C(11)-C(12)	125,3(5)	N(5)-C(24)-C(25)-O(3)	45,2(9)
C(17)-C(4)-C(11)-C(12)	-112,6(5)	C(29)-C(24)-C(25)-O(3)	168,1(7)
C(5)-C(4)-C(11)-C(12)	14,3(7)	N(5)-C(24)-C(25)-N(6)	-135,0(5)
O(1)-C(4)-C(11)-C(16)	-54,9(6)	C(29)-C(24)-C(25)-N(6)	-12,1(4)
C(17)-C(4)-C(11)-C(16)	67,2(6)	C(25)-N(6)-C(26)-C(27)	-135,6(6)
C(5)-C(4)-C(11)-C(16)	-165,9(5)	C(29)-N(6)-C(26)-C(27)	8,5(7)
C(16)-C(11)-C(12)-C(13)	-0,3(8)	C(25)-N(6)-C(26)-C(30)	47,3(7)

C(29)-N(6)-C(26)- C(30)C(26)-C(30)	-168,6(5)	C(40)-C(41)-C(42)-C(43)	0,0
N(6)-C(26)-C(27)-C(44)	-159,0(6)	C(41)-C(42)-C(43)-C(38)	0,0
C(30)-C(26)-C(27)-C(44)	17,9(9)	C(31)-C(38)-C(43)-C(42)	172,8(9)
N(6)-C(26)-C(27)-C(28)	9,9(9)	C(39)-C(38)-C(43)-C(42)	0,0
C(30)-C(26)-C(27)-C(28)	-173,2(6)	C(38)-C(31)-C(38')-C(39')	-149(2)
C(26)-C(27)-C(28)-S(2)	17,0(10)	O(5)-C(31)-C(38')-C(39')	-28,1(14)
C(44)-C(27)-C(28)-S(2)	-172,7(6)	C(32)-C(31)-C(38')-C(39')	86,4(14)
C(29)-S(2)-C(28)-C(27)	-46,7(7)	C(38)-C(31)-C(38')-C(43')	30,3(14)
C(26)-N(6)-C(29)-C(24)	-168,3(5)	O(5)-C(31)-C(38')-C(43')	150,8(9)
C(25)-N(6)-C(29)-C(24)	-12,7(4)	C(32)-C(31)-C(38')-C(43')	-94,7(10)
C(26)-N(6)-C(29)-S(2)	-50,1(6)	C(43')-C(38')-C(39')-C(40')	0,0
C(25)-N(6)-C(29)-S(2)	105,6(4)	C(31)-C(38')-C(39')-C(40')	178,8(15)
N(5)-C(24)-C(29)-N(6)	133,2(5)	C(38')-C(39')-C(40')-C(40')	0,0
C(25)-C(24)-C(29)-N(6)	11,8(4)	C(39')-C(40')-C(41')-C(42')	0,0
N(5)-C(24)-C(29)-S(2)	21,9(7)	C(40')-C(41')-C(42')-C(43')	0,0
C(25)-C(24)-C(29)-S(2)	-99,5(4)	C(41')-C(42')-C(43')-C(38')	0,0
C(28)-S(2)-C(29)-N(6)	60,2(5)	C(39')-C(38')-C(43')-C(42')	0,0
C(28)-S(2)-C(29)-C(24)	158,5(5)	C(31)-C(38')-C(43')-C(42')	-179,0(14)
C(31)-O(5)-C(30)-O(4)	-2,8(7)	C(26)-C(27)-C(44)-C(45)	49,5(10)
C(31)-O(5)-C(30)-C(26)	177,9(4)	C(28)-C(27)-C(44)-C(45)	-120,8(7)
C(27)-C(26)-C(30)-O(4)	29,4(8)	C(27)-C(44)-C(45)-C(48)	167,6(6)
N(6)-C(26)-C(30)-O(4)	-153,7(5)	C(27)-C(44)-C(45)-C(46)	-8,8(11)
C(27)-C(26)-C(30)-O(5)	-151,4(5)	C(44)-C(45)-C(46)-C(47)	160,2(6)
N(6)-C(26)-C(30)-O(5)	25,6(6)	C(48)-C(45)-C(46)-C(47)	-16,6(7)
C(30)-O(5)-C(31)-C(38)	-160,8(8)	C(48)-N(7)-C(47)-C(46)	-10,9(8)
C(30)-O(5)-C(31)-C(32)	69,7(7)	C(49)-N(7)-C(47)-C(46)	174,1(5)
C(30)-O(5)-C(31)-C(38')	174,8(7)	C(45)-C(46)-C(47)-N(7)	16,1(7)
C(38)-C(31)-C(32)-C(37)	72,3(12)	C(47)-N(7)-C(48)-O(6)	-178,1(6)
O(5)-C(31)-C(32)-C(37)	-159,8(8)	C(49)-N(7)-C(48)-O(6)	-3,0(8)
C(38')-C(31)-C(32)-C(37)	95,9(9)	C(47)-N(7)-C(48)-C(45)	0,4(6)
C(38)-C(31)-C(32)-C(33)	-102,0(10)	C(49)-N(7)-C(48)-C(45)	175,5(5)

O(5)-C(31)-C(32)-C(33)	25,9(10)	C(44)-C(45)-C(48)-O(6)	12,2(9)
C(38')-C(31)-C(32)-C(33)	-78,3(8)	C(46)-C(45)-C(48)-O(6)	-170,8(6)
C(37)-C(32)-C(33)-C(34)	4,7(11)	C(44)-C(45)-C(48)-N(7)	-166,2(5)
C(31)-C(32)-C(33)-C(34)	178,9(6)	C(46)-C(45)-C(48)-N(7)	10,8(6)
C(32)-C(33)-C(34)-C(35)	-3,2(10)	C(48)-N(7)-C(49)-C(50)	122,8(6)
C(33)-C(34)-C(35)-C(36)	-1,0(11)	C(47)-N(7)-C(49)-C(50)	-62,6(7)
C(34)-C(35)-C(36)-C(37)	3,5(13)	C(48)-N(7)-C(49)-C(52)	-121,9(6)
C(33)-C(32)-C(37)-C(36)	-2,2(13)	C(47)-N(7)-C(49)-C(52)	52,7(8)
C(31)-C(32)-C(37)-C(36)	-176,6(8)	C(53)-N(8)-C(50)-C(49)	-150,7(5)
C(35)-C(36)-C(37)-C(32)	-2,0(15)	C(51)-N(8)-C(50)-C(49)	21,6(6)
O(5)-C(31)-C(38)-C(39)	-55,5(9)	N(7)-C(49)-C(50)-N(8)	88,8(6)
C(32)-C(31)-C(38)-C(39)	72,7(8)	C(52)-C(49)-C(50)-N(8)	-32,4(6)
C(38')-C(31)-C(38)-C(39)	10,5(16)	C(53)-N(8)-C(51)-C(52)	171,1(5)
O(5)-C(31)-C(38)-C(43)	131,4(8)	C(50)-N(8)-C(51)-C(52)	-1,4(6)
C(32)-C(31)-C(38)-C(43)	-100,4(8)	N(8)-C(51)-C(52)-C(49)	-19,2(5)
C(38')-C(31)-C(38)-C(43)	-163(2)	N(7)-C(49)-C(52)-C(51)	-87,8(6)
C(31)-C(38)-C(39)-C(40)	-173,3(8)	C(50)-C(49)-C(52)-C(51)	32,0(5)
C(43)-C(38)-C(39)-C(40)	0,0	C(54)-O(8)-C(53)-O(7)	-3,7(9)
C(38)-C(39)-C(40)-C(41)	0,0	C(54)-O(8)-C(53)-N(8)	177,0(5)
C(39)-C(40)-C(41)-C(42)	0,0	C(50)-N(8)-C(53)-O(7)	170,1(5)

C(51)-N(8)-C(53)-O(7)	-1,3(8)	N(3L)-N(1L)-C(1LA)-C(2LD)	-121(3)
C(50)-N(8)-C(53)-O(8)	-10,7(8)	N(2L)-N(1L)-C(1LA)-C(2LD)	10(5)
C(51)-N(8)-C(53)-O(8)	177,9(5)	C(2LB)-N(1L)-C(1LA)-C(2LD)	4(2)
C(53)-O(8)-C(54)-C(55)	64,0(8)	C(1LC)-N(1L)-C(1LA)-C(2LD)	64(3)
C(53)-O(8)-C(54)-C(56)	-176,4(6)	O(10W)-N(1L)-C(1LA)-C(2LD)	136(2)
C(53)-O(8)-C(54)-C(57)	-61,8(8)	C(2L)-N(1L)-C(1LA)-C(2LD)	55(3)
N(3L)-N(1L)-C(1LA)-C(2LC)	-145(4)	N(3L)-N(1L)-C(1LA)-C(2L)	-176(4)
N(2L)-N(1L)-C(1LA)-C(2LC)	-14(6)	N(2L)-N(1L)-C(1LA)-C(2L)	-45(5)
C(2LB)-N(1L)-C(1LA)-C(2LC)	-21(3)	C(2LB)-N(1L)-C(1LA)-C(2L)	-51(2)
C(1LC)-N(1L)-C(1LA)-C(2LC)	39(4)	C(1LC)-N(1L)-C(1LA)-C(2L)	8(3)
O(10W)-N(1L)-C(1LA)-C(2LC)	112(3)	O(10W)-N(1L)-C(1LA)-C(2L)	81(2)
C(2L)-N(1L)-C(1LA)-C(2LC)	31(4)	N(3L)-N(1L)-C(1LC)-C(2L)	-14(6)
N(2L)-N(1L)-C(1LA)-N(3L)	131(6)	N(2L)-N(1L)-C(1LC)-C(2L)	139(5)
C(2LB)-N(1L)-C(1LA)-N(3L)	125(3)	C(2LB)-N(1L)-C(1LC)-C(2L)	50(4)
C(1LC)-N(1L)-C(1LA)-N(3L)	-175(4)	C(1LA)-N(1L)-C(1LC)-C(2L)	-11(4)
O(10W)-N(1L)-C(1LA)-N(3L)	-103(3)	O(10W)-N(1L)-C(1LC)-C(2L)	-99(4)
C(2L)-N(1L)-C(1LA)-N(3L)	176(4)	N(3L)-N(1L)-C(1LC)-N(2L)	-153(4)
N(3L)-N(1L)-C(1LA)-C(5LD)	175(3)	C(2LB)-N(1L)-C(1LC)-N(2L)	-89(3)
N(2L)-N(1L)-C(1LA)-C(5LD)	-53(5)	C(1LA)-N(1L)-C(1LC)-N(2L)	-150(3)
C(2LB)-N(1L)-C(1LA)-C(5LD)	-60(2)	O(10W)-N(1L)-C(1LC)-N(2L)	122(3)
C(1LC)-N(1L)-C(1LA)-C(5LD)	0(3)	C(2L)-N(1L)-C(1LC)-N(2L)	-139(4)
O(10W)-N(1L)-C(1LA)-C(5LD)	73(2)	N(3L)-N(1L)-C(1LC)-C(2LB)	-65(4)
C(2L)-N(1L)-C(1LA)-C(5LD)	-8(3)	N(2L)-N(1L)-C(1LC)-C(2LB)	89(3)
N(3L)-N(1L)-C(1LA)-C(3LD)	127(4)	C(1LA)-N(1L)-C(1LC)-C(2LB)	-61(2)
N(2L)-N(1L)-C(1LA)-C(3LD)	-102(5)	O(10W)-N(1L)-C(1LC)-C(2LB)	-149(3)
C(2LB)-N(1L)-C(1LA)-C(3LD)	-108(3)	C(2L)-N(1L)-C(1LC)-C(2LB)	-50(4)
C(1LC)-N(1L)-C(1LA)-C(3LD)	-49(3)	N(3L)-N(1L)-C(1LC)-O(10W)	85(4)
O(10W)-N(1L)-C(1LA)-C(3LD)	24(3)	N(2L)-N(1L)-C(1LC)-O(10W)	-122(3)
C(2L)-N(1L)-C(1LA)-C(3LD)	-57(3)	C(2LB)-N(1L)-C(1LC)-O(10W)	149(3)
N(3L)-N(1L)-C(1LA)-C(2LB)	-125(3)	C(1LA)-N(1L)-C(1LC)-O(10W)	88,4(17)
N(2L)-N(1L)-C(1LA)-C(2LB)	6(5)	C(2L)-N(1L)-C(1LC)-O(10W)	99(4)
C(1LC)-N(1L)-C(1LA)-C(2LB)	60(2)	N(2L)-N(1L)-C(1LC)-N(3L)	153(4)
O(10W)-N(1L)-C(1LA)-C(2LB)	132(2)	C(2LB)-N(1L)-C(1LC)-N(3L)	65(4)
C(2L)-N(1L)-C(1LA)-C(2LB)	51(2)	C(1LA)-N(1L)-C(1LC)-N(3L)	4(3)

O(10W)-N(1L)-C(1LC)-N(3L)	-85(4)
C(2L)-N(1L)-C(1LC)-N(3L)	14(6)
N(3L)-N(1L)-C(1LC)-C(5LD)	-4(4)
N(2L)-N(1L)-C(1LC)-C(5LD)	150(3)
C(2LB)-N(1L)-C(1LC)-C(5LD)	61(2)
C(1LA)-N(1L)-C(1LC)-C(5LD)	0(2)
O(10W)-N(1L)-C(1LC)-C(5LD)	-88(2)
C(2L)-N(1L)-C(1LC)-C(5LD)	11(3)
N(3L)-N(1L)-C(2LB)-C(1LC)	137(3)
N(2L)-N(1L)-C(2LB)-C(1LC)	-70(3)
C(1LA)-N(1L)-C(2LB)-C(1LC)	106(2)
O(10W)-N(1L)-C(2LB)-C(1LC)	38(3)
C(2L)-N(1L)-C(2LB)-C(1LC)	43(3)
N(3L)-N(1L)-C(2LB)-C(2L)	94(4)
N(2L)-N(1L)-C(2LB)-C(2L)	-113(4)
C(1LC)-N(1L)-C(2LB)-C(2L)	-43(3)
C(1LA)-N(1L)-C(2LB)-C(2L)	63(3)
O(10W)-N(1L)-C(2LB)-C(2L)	-5(4)
N(3L)-N(1L)-C(2LB)-N(2L)	-153(3)
C(1LC)-N(1L)-C(2LB)-N(2L)	70(3)
C(1LA)-N(1L)-C(2LB)-N(2L)	176(3)
O(10W)-N(1L)-C(2LB)-N(2L)	108(4)
C(2L)-N(1L)-C(2LB)-N(2L)	113(4)
N(2L)-N(1L)-C(2LB)-N(3L)	153(3)
C(1LC)-N(1L)-C(2LB)-N(3L)	-137(3)
C(1LA)-N(1L)-C(2LB)-N(3L)	-30,7(19)
O(10W)-N(1L)-C(2LB)-N(3L)	-99(3)
C(2L)-N(1L)-C(2LB)-N(3L)	-94(4)
N(3L)-N(1L)-C(2LB)-C(2LC)	42(3)
N(2L)-N(1L)-C(2LB)-C(2LC)	-165(3)
C(1LC)-N(1L)-C(2LB)-C(2LC)	-95(3)
C(1LA)-N(1L)-C(2LB)-C(2LC)	11,1(18)
O(10W)-N(1L)-C(2LB)-C(2LC)	-57(3)
C(2L)-N(1L)-C(2LB)-C(2LC)	-52(3)

C(2L)-C(1LA)-C(2LB)-C(2LC)	-53(4)	C(5LD)-C(1LC)-C(2L)-C(1LA)	-53(14)
- N(1L)-C(1LA)-C(2LB)-C(2LC)	-159(3)	N(1L)-C(1LC)-C(2L)-C(2LD)	-44(6)
C(2LC)-C(1LA)-C(2LB)-C(2LD)	-26(3)	N(2L)-C(1LC)-C(2L)-C(2LD)	1(9)
- N(3L)-C(1LA)-C(2LB)-C(2LD)	150(3)	C(2LB)-C(1LC)-C(2L)-C(2LD)	1(4)
- C(5LD)-C(1LA)-C(2LB)-C(2LD)	-68(3)	O(10W)-C(1LC)-C(2L)-C(2LD)	-114(5)
- C(3LD)-C(1LA)-C(2LB)-C(2LD)	-90(3)	N(3L)-C(1LC)-C(2L)-C(2LD)	-49(5)
C(2L)-C(1LA)-C(2LB)-C(2LD)	-79(3)	C(5LD)-C(1LC)-C(2L)-C(2LD)	-108(17)
N(1L)-C(1LA)-C(2LB)-C(2LD)	176(3)	N(2L)-C(1LC)-C(2L)-N(1L)	45(5)
C(2LC)-C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)	43(3)	C(2LB)-C(1LC)-C(2L)-N(1L)	44(3)
N(3L)-C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)	-141(2)	O(10W)-C(1LC)-C(2L)-N(1L)	-71(3)
C(3LD)-C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)	-22(3)	N(3L)-C(1LC)-C(2L)-N(1L)	-5,0(19)
C(2LD)-C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)	68(3)	C(5LD)-C(1LC)-C(2L)-N(1L)	-64(16)
C(2L)-C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)	-11(3)	N(1L)-C(1LC)-C(2L)-C(3LD)	61(5)
- N(1L)-C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)	-116(2)	N(2L)-C(1LC)-C(2L)-C(3LD)	106(6)
N(IL)-C(1LC)-C(2L)-C(5LD)	64(16)	C(2LB)-C(1LC)-C(2L)-C(3LD)	105(4)
N(2L)-C(1LC)-C(2L)-C(5LD)	109(15)	O(10W)-C(1LC)-C(2L)-C(3LD)	-10(5)
C(2LB)-C(1LC)-C(2L)-C(5LD)	109(16)	N(3L)-C(1LC)-C(2L)-C(3LD)	56(4)
O(10W)-C(1LC)-C(2L)-C(5LD)	-6(16)	C(5LD)-C(1LC)-C(2L)-C(3LD)	-3(12)
N(3L)-C(1LC)-C(2L)-C(5LD)	59(15)	N(IL)-C(2LB)-C(2L)-C(5LD)	-97(9)
N(1L)-C(1LC)-C(2L)-C(2LC)	-7(7)	C(1LC)-C(2LB)-C(2L)-C(5LD)	-142(10)
N(2L)-C(1LC)-C(2L)-C(2LC)	37(9)	N(2L)-C(2LB)-C(2L)-C(5LD)	-142(9)
C(2LB)-C(1LC)-C(2L)-C(2LC)	37(5)	N(3L)-C(2LB)-C(2L)-C(5LD)	-60(9)
O(10W)-C(1LC)-C(2L)-C(2LC)	-78(6)	C(2LC)-C(2LB)-C(2L)-C(5LD)	5(8)
N(3L)-C(1LC)-C(2L)-C(2LC)	-12(5)	C(1LA)-C(2LB)-C(2L)-C(5LD)	-27(8)
C(5LD)-C(1LC)-C(2L)-C(2LC)	-72(15)	C(2LD)-C(2LB)-C(2L)-C(5LD)	37(9)
N(1L)-C(1LC)-C(2L)-C(2LB)	-44(3)	N(1L)-C(2LB)-C(2L)-C(1LC)	45(3)
N(2L)-C(1LC)-C(2L)-C(2LB)	0(6)	N(2L)-C(2LB)-C(2L)-C(1LC)	0(4)
O(10W)-C(1LC)-C(2L)-C(2LB)	-115(3)	N(3L)-C(2LB)-C(2L)-C(1LC)	82(3)
N(3L)-C(1LC)-C(2L)-C(2LB)	-49,1(19)	C(2LC)-C(2LB)-C(2L)-C(1LC)	147(4)
C(5LD)-C(1LC)-C(2L)-C(2LB)	-109(16)	C(1LA)-C(2LB)-C(2L)-C(1LC)	115(3)
N(1L)-C(1LC)-C(2L)-C(1LA)	11(4)	C(2LD)-C(2LB)-C(2L)-C(1LC)	180(4)
N(2L)-C(1LC)-C(2L)-C(1LA)	56(7)	C(5LD)-C(2LB)-C(2L)-C(1LC)	142(11)
C(2LB)-C(1LC)-C(2L)-C(1LA)	55(3)	N(1L)-C(2LB)-C(2L)-C(2LC)	-102(3)
O(10W)-C(1LC)-C(2L)-C(1LA)	-60(3)	C(1LC)-C(2LB)-C(2L)-C(2LC)	-147(4)
N(3L)-C(1LC)-C(2L)-C(1LA)	6(2)		

N(2L)-C(2LB)-C(2L)-C(2LC)	-147(3)	C(2LC)-C(1LA)-C(2L)-C(5LD)	60(6)
N(3L)-C(2LB)-C(2L)-C(2LC)	-65(3)	N(3L)-C(1LA)-C(2L)-C(5LD)	-163(6)
C(1LA)-C(2LB)-C(2L)-C(2LC)	-32(2)	C(3LD)-C(1LA)-C(2L)-C(5LD)	-33(5)
C(2LD)-C(2LB)-C(2L)-C(2LC)	33(3)	C(2LB)-C(1LA)-C(2L)-C(5LD)	157(7)
C(5LD)-C(2LB)-C(2L)-C(2LC)	-5(8)	C(2LD)-C(1LA)-C(2L)-C(5LD)	82(6)
N(1L)-C(2LB)-C(2L)-C(1LA)	-70(2)		
C(1LC)-C(2LB)-C(2L)-C(1LA)	-115(3)		
N(2L)-C(2LB)-C(2L)-C(1LA)	-115(3)		
N(3L)-C(2LB)-C(2L)-C(1LA)	-33(2)		
C(2LC)-C(2LB)-C(2L)-C(1LA)	32(2)		
C(2LD)-C(2LB)-C(2L)-C(1LA)	65(2)		
C(5LD)-C(2LB)-C(2L)-C(1LA)	27(8)		
N(1L)-C(2LB)-C(2L)-C(2LD)	-134(3)		
C(1LC)-C(2LB)-C(2L)-C(2LD)	-180(4)		
N(2L)-C(2LB)-C(2L)-C(2LD)	-180(3)		
N(3L)-C(2LB)-C(2L)-C(2LD)	-98(3)		
C(2LC)-C(2LB)-C(2L)-C(2LD)	-33(3)		
C(1LA)-C(2LB)-C(2L)-C(2LD)	-65(2)		
C(5LD)-C(2LB)-C(2L)-C(2LD)	-37(9)		
C(1LC)-C(2LB)-C(2L)-N(1L)	-45(3)		
N(2L)-C(2LB)-C(2L)-N(1L)	-45(2)		
N(3L)-C(2LB)-C(2L)-N(1L)	36,9(14)		
C(2LC)-C(2LB)-C(2L)-N(1L)	102(3)		
C(1LA)-C(2LB)-C(2L)-N(1L)	70(2)		
C(2LD)-C(2LB)-C(2L)-N(1L)	134(3)		
C(5LD)-C(2LB)-C(2L)-N(1L)	97(9)		
N(1L)-C(2LB)-C(2L)-C(3LD)	-61(5)		
C(1LC)-C(2LB)-C(2L)-C(3LD)	-106(5)		
N(2L)-C(2LB)-C(2L)-C(3LD)	-106(4)		
N(3L)-C(2LB)-C(2L)-C(3LD)	-24(5)		
C(2LC)-C(2LB)-C(2L)-C(3LD)	41(3)		
C(1LA)-C(2LB)-C(2L)-C(3LD)	9(3)		
C(2LD)-C(2LB)-C(2L)-C(3LD)	73(4)		
C(5LD)-C(2LB)-C(2L)-C(3LD)	36(7)		

N(1L)-C(1LA)-C(2L)-C(5LD)	-161(6)	N(3L)-C(1LA)-C(2L)-C(3LD)	-130(3)
C(2LC)-C(1LA)-C(2L)-C(1LC)	-147(6)	C(5LD)-C(1LA)-C(2L)-C(3LD)	33(6)
N(3L)-C(1LA)-C(2L)-C(1LC)	-10(4)	C(2LB)-C(1LA)-C(2L)-C(3LD)	-170(4)
C(5LD)-C(1LA)-C(2L)-C(1LC)	153(8)	C(2LD)-C(1LA)-C(2L)-C(3LD)	116(3)
C(3LD)-C(1LA)-C(2L)-C(1LC)	120(4)	N(IL)-C(1LA)-C(2L)-C(3LD)	-128(2)
C(2LB)-C(1LA)-C(2L)-C(1LC)	-50(3)	N(3L)-N(1L)-C(2L)-C(5LD)	23(8)
C(2LD)-C(1LA)-C(2L)-C(1LC)	-124(4)	N(2L)-N(1L)-C(2L)-C(5LD)	176(8)
N(IL)-C(1LA)-C(2L)-C(1LC)	-8(3)	C(2LB)-N(1L)-C(2L)-C(5LD)	110(9)
N(3L)-C(1LA)-C(2L)-C(2LC)	137(4)	C(1LC)-N(1L)-C(2L)-C(5LD)	-146(10)
C(5LD)-C(1LA)-C(2L)-C(2LC)	-60(6)	C(1LA)-N(1L)-C(2L)-C(5LD)	20(7)
C(3LD)-C(1LA)-C(2L)-C(2LC)	-93(5)	O(10W)-N(IL)-C(2L)-C(5LD)	-74(8)
C(2LB)-C(1LA)-C(2L)-C(2LC)	97(4)	N(3L)-N(1L)-C(2L)-C(1LC)	169(4)
C(2LD)-C(1LA)-C(2L)-C(2LC)	23(4)	N(2L)-N(1L)-C(2L)-C(1LC)	-38(4)
N(1L)-C(1LA)-C(2L)-C(2LC)	139(4)	C(2LB)-N(1L)-C(2L)-C(1LC)	-104(5)
C(2LC)-C(1LA)-C(2L)-C(2LB)	-97(4)	C(1LA)-N(1L)-C(2L)-C(1LC)	167(5)
N(3L)-C(1LA)-C(2L)-C(2LB)	40(3)	O(10W)-1M(1L)-C(2L)-C(1LC)	72(4)
C(5LD)-C(1LA)-C(2L)-C(2LB)	-157(7)	N(3L)-N(1L)-C(2L)-C(2LC)	-17(3)
C(3LD)-C(1LA)-C(2L)-C(2LB)	170(4)	N(2L)-N(1L)-C(2L)-C(2LC)	136(4)
C(2LD)-C(1LA)-C(2L)-C(2LB)	-74(3)	C(2LB)-N(1L)-C(2L)-C(2LC)	70(3)
N(1L)-C(1LA)-C(2L)-C(2LB)	42(2)	C(1LC)-N(1L)-C(2L)-C(2LC)	174(6)
C(2LC)-C(1LA)-C(2L)-C(2LD)	-23(4)	C(1LA)-N(1L)-C(2L)-C(2LC)	-20(2)
N(3L)-C(1LA)-C(2L)-C(2LD)	115(3)	O(10W)-N(1L)-C(2L)-C(2LC)	-114(3)
C(5LD)-C(1LA)-C(2L)-C(2LD)	-82(6)	N(3L)-N(1L)-C(2L)-C(2LB)	-87(3)
C(3LD)-C(1LA)-C(2L)-C(2LD)	-116(3)	N(2L)-N(1L)-C(2L)-C(2LB)	66(4)
C(2LB)-C(1LA)-C(2L)-C(2LD)	74(3)	C(1LC)-N(1L)-C(2L)-C(2LB)	104(5)
N(1L)-C(1LA)-C(2L)-C(2LD)	116(3)	C(1LA)-N(1L)-C(2L)-C(2LB)	-89(3)
C(2LC)-C(1LA)-C(2L)-N(1L)	-139(4)	O(10W)-N(1L)-C(2L)-C(2LB)	176(4)
N(3L)-C(1LA)-C(2L)-N(1L)	-1,6(16)	N(3L)-N(1L)-C(2L)-C(1LA)	2(2)
C(5LD)-C(1LA)-C(2L)-N(1L)	161(6)	N(2L)-N(1L)-C(2L)-C(1LA)	155(3)
C(3LD)-C(1LA)-C(2L)-N(1L)	128(2)	C(2LB)-N(1L)-C(2L)-C(1LA)	89(3)
C(2LB)-C(1LA)-C(2L)-N(1L)	-42(2)	C(1LC)-N(1L)-C(2L)-C(1LA)	-167(5)
C(2LD)-C(1LA)-C(2L)-N(1L)	-116(3)	O(10W)-N(IL)-C(2L)-C(1LA)	-95(2)
C(2LC)-C(1LA)-C(2L)-C(3LD)	93(5)	N(3L)-N(1L)-C(2L)-C(2LD)	-47(3)
		N(2L)-N(1L)-C(2L)-C(2LD)	106(4)

C(2LB)-N(1L)-C(2L)-C(2LD)	40(3)
C(1LC)-N(1L)-C(2L)-C(2LD)	144(5)
C(1LA)-N(1L)-C(2L)-C(2LD)	-49(3)
O(10W)-N(IL)-C(2L)-C(2LD)	-144(3)
N(3L)-N(1L)-C(2L)-C(3LD)	41(3)
N(2L)-N(1L)-C(2L)-C(3LD)	-166(3)
C(2LB)-N(1L)-C(2L)-C(3LD)	128(4)
C(1LC)-N(1L)-C(2L)-C(3LD)	-128(5)
C(1LA)-N(1L)-C(2L)-C(3LD)	39(2)
O(10W)-N(IL)-C(2L)-C(3LD)	-56(3)
N(3L)-N(1L)-N(2L)-C(1LC)	135(7)
C(2LB)-N(1L)-N(2L)-C(1LC)	66(2)
C(1LA)-N(1L)-N(2L)-C(1LC)	60(5)
O(10W)-N(IL)-N(2L)-C(1LC)	-60(3)
C(2L)-N(1L)-N(2L)-C(1LC)	24(3)
N(3L)-N(1L)-N(2L)-C(2LB)	69(7)
C(1LC)-N(1L)-N(2L)-C(2LB)	-66(2)
C(1LA)-N(1L)-N(2L)-C(2LB)	-6(4)
O(10W)-N(IL)-N(2L)-C(2LB)	-126(3)
C(2L)-N(1L)-N(2L)-C(2LB)	-41(2)
C(2LB)-N(1L)-N(2L)-N(3L)	-69(7)
C(1LC)-N(1L)-N(2L)-N(3L)	-135(7)
C(1LA)-N(1L)-N(2L)-N(3L)	-75(7)
O(10W)-N(1L)-N(2L)-N(3L)	165(8)
C(2L)-N(1L)-N(2L)-N(3L)	-111(7)
N(3L)-N(1L)-N(2L)-C(4LD)	151(6)
C(2LB)-N(1L)-N(2L)-C(4LD)	82(7)
C(1LC)-N(1L)-N(2L)-C(4LD)	16(6)
C(1LA)-N(1L)-N(2L)-C(4LD)	76(8)
O(10W)-N(1L)-N(2L)-C(4LD)	-44(7)
C(2L)-N(1L)-N(2L)-C(4LD)	41(7)
C(2L)-C(1LC)-N(2L)-N(1L)	-65(6)
C(2LB)-C(1LC)-N(2L)-N(1L)	-64(2)
O(10W)-C(1LC)-N(2L)-N(IL)	53(3)

C(5LD)-C(1LC)-N(2L)-N(1L)	-48(5)	C(2LC)-C(2LB)-N(2L)-N(3L)	43(5)
N(1L)-C(1LC)-N(2L)-C(2LB)	64(2)	C(1LA)-C(2LB)-N(2L)-N(3L)	20,2(19)
C(2L)-C(1LC)-N(2L)-C(2LB)	0(6)	C(2LD)-C(2LB)-N(2L)-N(3L)	-74(100)
O(10W)-C(1LC)-N(2L)-C(2LB)	117(3)	C(5LD)-C(2LB)-N(2L)-N(3L)	81(3)
N(3L)-C(1LC)-N(2L)-C(2LB)	54,5(18)	N(1L)-C(2LB)-N(2L)-C(4LD)	-144(4)
C(5LD)-C(1LC)-N(2L)-C(2LB)	16(4)	C(1LC)-C(2LB)-N(2L)-C(4LD)	-65(3)
N(1L)-C(1LC)-N(2L)-N(3L)	9,7(17)	C(2L)-C(2LB)-N(2L)-C(4LD)	-65(5)
C(2L)-C(1LC)-N(2L)-N(3L)	-55(6)	N(3L)-C(2LB)-N(2L)-C(4LD)	-160(3)
C(2LB)-C(1LC)-N(2L)-N(3L)	-54,5(18)	C(2LC)-C(2LB)-N(2L)-C(4LD)	-117(5)
O(10W)-C(1LC)-N(2L)-N(3L)	62,5(19)	C(1LA)-C(2LB)-N(2L)-C(4LD)	-140(3)
C(5LD)-C(1LC)-N(2L)-N(3L)	-38(4)	C(2LD)-C(2LB)-N(2L)-C(4LD)	126(100)
N(1L)-C(1LC)-N(2L)-C(4LD)	-171(3)	C(5LD)-C(2LB)-N(2L)-C(4LD)	-79(4)
C(2L)-C(1LC)-N(2L)-C(4LD)	124(6)	N(3L)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LD)	64(8)
C(2LB)-C(1LC)-N(2L)-C(4LD)	124(3)	C(5LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LD)	159(9)
O(10W)-C(1LC)-N(2L)-C(4LD)	-119(3)	C(3LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LD)	-163(7)
N(3L)-C(1LC)-N(2L)-C(4LD)	179(2)	C(2LB)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LD)	69(7)
C(5LD)-C(1LC)-N(2L)-C(4LD)	141(4)	C(2L)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LD)	122(8)
C(1LC)-C(2LB)-N(2L)-N(1L)	79(3)	N(1L)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LD)	83(7)
C(2L)-C(2LB)-N(2L)-N(1L)	79(4)	N(3L)-C(1LA)-C(2LC)-C(5LD)	-94(5)
N(3L)-C(2LB)-N(2L)-N(1L)	-16(2)	C(3LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(5LD)	38(4)
C(2LC)-C(2LB)-N(2L)-N(1L)	27(6)	C(2LB)-C(1LA)-C(2LC)-C(5LD)	-90(4)
C(1LA)-C(2LB)-N(2L)-N(1L)	4(3)	C(2LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(5LD)	-159(9)
C(2LD)-C(2LB)-N(2L)-N(1L)	-90(100)	C(2L)-C(1LA)-C(2LC)-C(5LD)	-37(4)
C(5LD)-C(2LB)-N(2L)-N(1L)	66(4)	N(1L)-C(1LA)-C(2LC)-C(5LD)	-76(4)
N(1L)-C(2LB)-N(2L)-C(1LC)	-79(3)	N(3L)-C(1LA)-C(2LC)-C(2L)	-57(5)
C(2L)-C(2LB)-N(2L)-C(1LC)	0(4)	C(5LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(2L)	37(4)
N(3L)-C(2LB)-N(2L)-C(1LC)	-95(3)	C(3LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(2L)	75(4)
C(2LC)-C(2LB)-N(2L)-C(1LC)	-52(5)	C(2LB)-C(1LA)-C(2LC)-C(2L)	-53(3)
C(1LA)-C(2LB)-N(2L)-C(1LC)	-75(3)	C(2LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(2L)	-122(8)
C(2LD)-C(2LB)-N(2L)-C(1LC)	-169(100)	N(1L)-C(1LA)-C(2LC)-C(2L)	-39(4)
C(5LD)-C(2LB)-N(2L)-C(1LC)	-13(4)	N(3L)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LB)	-4(4)
N(1L)-C(2LB)-N(2L)-N(3L)	16(2)	C(5LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LB)	90(4)
C(1LC)-C(2LB)-N(2L)-N(3L)	95(3)	C(3LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LB)	128(2)
C(2L)-C(2LB)-N(2L)-N(3L)	95(3)	C(2LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LB)	-69(7)

C(2L)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LB)	53(3)
N(1L)-C(1LA)-C(2LC)-C(2LB)	14(2)
N(3L)-C(1LA)-C(2LC)-C(3LD)	-133(4)
C(5LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(3LD)	-38(4)
C(2LB)-C(1LA)-C(2LC)-C(3LD)	-128(2)
C(2LD)-C(1LA)-C(2LC)-C(3LD)	163(7)
C(2L)-C(1LA)-C(2LC)-C(3LD)	-75(4)
N(1L)-C(1LA)-C(2LC)-C(3LD)	-114(3)
C(5LD)-C(1LA)-C(2LC)-N(3L)	94(5)
C(3LD)-C(1LA)-C(2LC)-N(3L)	133(4)
C(2LB)-C(1LA)-C(2LC)-N(3L)	4(4)
C(2LD)-C(1LA)-C(2LC)-N(3L)	-64(8)
C(2L)-C(1LA)-C(2LC)-N(3L)	57(5)
N(1L)-C(1LA)-C(2LC)-N(3L)	18(2)
C(5LD)-C(2L)-C(2LC)-C(1LA)	-105(7)
C(1LC)-C(2L)-C(2LC)-C(1LA)	39(7)
C(2LB)-C(2L)-C(2LC)-C(1LA)	71(4)
C(2LD)-C(2L)-C(2LC)-C(1LA)	141(6)
N(1L)-C(2L)-C(2LC)-C(1LA)	34(4)
C(3LD)-C(2L)-C(2LC)-C(1LA)	-66(4)
C(5LD)-C(2L)-C(2LC)-C(2LD)	115(7)
C(1LC)-C(2L)-C(2LC)-C(2LD)	-102(6)
C(2LB)-C(2L)-C(2LC)-C(2LD)	-70(5)
C(1LA)-C(2L)-C(2LC)-C(2LD)	-141(6)
N(1L)-C(2L)-C(2LC)-C(2LD)	-107(4)
C(3LD)-C(2L)-C(2LC)-C(2LD)	153(5)
C(1LC)-C(2L)-C(2LC)-C(5LD)	143(10)
C(2LB)-C(2L)-C(2LC)-C(5LD)	176(7)
C(1LA)-C(2L)-C(2LC)-C(5LD)	105(7)
C(2LD)-C(2L)-C(2LC)-C(5LD)	-115(7)
N(1L)-C(2L)-C(2LC)-C(5LD)	139(7)
C(3LD)-C(2L)-C(2LC)-C(5LD)	38(6)
C(5LD)-C(2L)-C(2LC)-C(2LB)	-176(7)
C(1LC)-C(2L)-C(2LC)-C(2LB)	-32(4)

C(1LA)-C(2L)-C(2LC)-C(2LB)	-71(4)	N(2L)-C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)	66(6)
C(2LD)-C(2L)-C(2LC)-C(2LB)	70(5)	N(3L)-C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)	110(3)
N(1L)-C(2L)-C(2LC)-C(2LB)	-36,6(17)	C(1LA)-C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)	107(5)
C(3LD)-C(2L)-C(2LC)-C(2LB)	-137(3)	C(2LD)-C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)	-116(5)
C(5LD)-C(2L)-C(2LC)-C(3LD)	-38(6)	N(IL)-C(2LB)-C(2LC)-C(2L)	89(4)
C(1LC)-C(2L)-C(2LC)-C(3LD)	105(5)	C(1LC)-C(2LB)-C(2LC)-C(2L)	27(4)
C(2LB)-C(2L)-C(2LC)-C(3LD)	137(3)	N(2L)-C(2LB)-C(2LC)-C(2L)	69(6)
C(1LA)-C(2L)-C(2LC)-C(3LD)	66(4)	N(3L)-C(2LB)-C(2LC)-C(2L)	113(4)
C(2LD)-C(2L)-C(2LC)-C(3LD)	-153(5)	C(1LA)-C(2LB)-C(2LC)-C(2L)	110(4)
N(1L)-C(2L)-C(2LC)-C(3LD)	100(3)	C(2LD)-C(2LB)-C(2LC)-C(2L)	-113(5)
C(5LD)-C(2L)-C(2LC)-N(3L)	-131(6)	C(5LD)-C(2LB)-C(2LC)-C(2L)	3(4)
C(1LC)-C(2L)-C(2LC)-N(3L)	12(5)	N(1L)-C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)	37(4)
C(2LB)-C(2L)-C(2LC)-N(3L)	45(2)	C(1LC)-C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)	-24(4)
C(1LA)-C(2L)-C(2LC)-N(3L)	-26(3)	C(2L)-C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)	-51(4)
C(2LD)-C(2L)-C(2LC)-N(3L)	114(4)	N(2L)-C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)	17(7)
N(1L)-C(2L)-C(2LC)-N(3L)	7,9(16)	N(3L)-C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)	62(3)
C(3LD)-C(2L)-C(2LC)-N(3L)	-93(2)	C(1LA)-C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)	58(3)
N(1L)-C(2LB)-C(2LC)-C(1LA)	-21(3)	C(2LD)-C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)	-164(6)
C(1LC)-C(2LB)-C(2LC)-C(1LA)	-82(3)	C(5LD)-C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)	-49(3)
C(2L)-C(2LB)-C(2LC)-C(1LA)	-110(4)	N(1L)-C(2LB)-C(2LC)-N(3L)	-24,1(16)
N(2L)-C(2LB)-C(2LC)-C(1LA)	-41(6)	C(1LC)-C(2LB)-C(2LC)-N(3L)	-85(2)
N(3L)-C(2LB)-C(2LC)-C(1LA)	3(3)	C(2L)-C(2LB)-C(2LC)-N(3L)	-113(4)
C(2LD)-C(2LB)-C(2LC)-C(1LA)	137(5)	N(2L)-C(2LB)-C(2LC)-N(3L)	-44(5)
C(5LD)-C(2LB)-C(2LC)-C(1LA)	-107(5)	C(1LA)-C(2LB)-C(2LC)-N(3L)	-3(3)
N(1L)-C(2LB)-C(2LC)-C(2LD)	-158(4)	C(2LD)-C(2LB)-C(2LC)-N(3L)	134(4)
C(1LC)-C(2LB)-C(2LC)-C(2LD)	140(4)	C(5LD)-C(2LB)-C(2LC)-N(3L)	-110(3)
C(2L)-C(2LB)-C(2LC)-C(2LD)	113(5)	N(2L)-N(IL)-N(3L)-C(1LA)	-115(7)
N(2L)-C(2LB)-C(2LC)-C(2LD)	-178(6)	C(2LB)-N(1L)-N(3L)-C(1LA)	-48(3)
N(3L)-C(2LB)-C(2LC)-C(2LD)	-134(4)	C(1LC)-N(1L)-N(3L)-C(1LA)	6(5)
C(ILA)-C(2LB)-C(2LC)-C(2LD)	-137(5)	O(10W)-N(IL)-N(3L)-C(ILA)	80(3)
C(5LD)-C(2LB)-C(2LC)-C(2LD)	116(5)	C(2L)-N(1L)-N(3L)-C(1LA)	-3(3)
N(1L)-C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)	86(4)	N(2L)-N(1L)-N(3L)-C(2LB)	-67(7)
C(1LC)-C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)	25(4)	C(1LC)-N(1L)-N(3L)-C(2LB)	54(3)
C(2L)-C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)	-3(4)	C(1LA)-N(1L)-N(3L)-C(2LB)	48(3)
		O(10W)-N(1L)-N(3L)-C(2LB)	128(2)

C(2L)-N(1L)-N(3L)-C(2LB)	45(2)
C(2LB)-N(1L)-N(3L)-N(2L)	67(7)
C(1LC)-N(1L)-N(3L)-N(2L)	121(9)
C(1LA)-N(1L)-N(3L)-N(2L)	115(7)
O(10W)-N(1L)-N(3L)-N(2L)	-166(8)
C(2L)-N(1L)-N(3L)-N(2L)	112(8)
N(2L)-N(1L)-N(3L)-C(2LC)	-100(7)
C(2LB)-N(1L)-N(3L)-C(2LC)	-33(2)
C(1LC)-N(1L)-N(3L)-C(2LC)	21(4)
C(1LA)-N(1L)-N(3L)-C(2LC)	14,8(19)
O(10W)-N(1L)-N(3L)-C(2LC)	94,3(19)
C(2L)-N(1L)-N(3L)-C(2LC)	12(2)
N(2L)-N(1L)-N(3L)-C(1LC)	-121(9)
C(2LB)-N(1L)-N(3L)-C(1LC)	-54(3)
C(1LA)-N(1L)-N(3L)-C(1LC)	-6(5)
O(10W)-N(1L)-N(3L)-C(1LC)	73(3)
C(2L)-N(1L)-N(3L)-C(1LC)	-9(3)
C(2LC)-C(1LA)-N(3L)-N(1L)	43(5)
C(5LD)-C(1LA)-N(3L)-N(1L)	-5(4)
C(3LD)-C(1LA)-N(3L)-N(1L)	-68(4)
C(2LB)-C(1LA)-N(3L)-N(1L)	38(2)
C(2LD)-C(1LA)-N(3L)-N(1L)	67(3)
C(2L)-C(1LA)-N(3L)-N(1L)	3(3)
C(2LC)-C(1LA)-N(3L)-C(2LB)	5(4)
C(5LD)-C(1LA)-N(3L)-C(2LB)	-44(3)
C(3LD)-C(1LA)-N(3L)-C(2LB)	-106(3)
C(2LD)-C(1LA)-N(3L)-C(2LB)	29(2)
C(2L)-C(1LA)-N(3L)-C(2LB)	-35(2)
N(1L)-C(1LA)-N(3L)-C(2LB)	-38(2)
C(2LC)-C(1LA)-N(3L)-N(2L)	26(5)
C(5LD)-C(1LA)-N(3L)-N(2L)	-22(4)
C(3LD)-C(1LA)-N(3L)-N(2L)	-85(4)
C(2LB)-C(1LA)-N(3L)-N(2L)	21(2)

C(2LD)-C(1LA)-N(3L)-N(2L)	50(3)	C(1LA)-C(2LB)-N(3L)-N(2L)	-155(2)
C(2L)-C(1LA)-N(3L)-N(2L)	-13(3)	C(2LD)-C(2LB)-N(3L)-N(2L)	179(3)
N(1L)-C(1LA)-N(3L)-N(2L)	-17(2)	C(5LD)-C(2LB)-N(3L)-N(2L)	-126(3)
C(5LD)-C(1LA)-N(3L)-C(2LC)	-48(4)	N(1L)-C(2LB)-N(3L)-C(2LC)	138(3)
C(3LD)-C(1LA)-N(3L)-C(2LC)	-111(5)	C(1LC)-C(2LB)-N(3L)-C(2LC)	102(3)
C(2LB)-C(1LA)-N(3L)-C(2LC)	-5(4)	C(2L)-C(2LB)-N(3L)-C(2LC)	47(3)
C(2LD)-C(1LA)-N(3L)-C(2LC)	24(4)	N(2L)-C(2LB)-N(3L)-C(2LC)	158(3)
C(2L)-C(1LA)-N(3L)-C(2LC)	-39(4)	C(1LA)-C(2LB)-N(3L)-C(2LC)	2,2(19)
N(1L)-C(1LA)-N(3L)-C(2LC)	-43(5)	C(2LD)-C(2LB)-N(3L)-C(2LC)	-24(2)
C(2LC)-C(1LA)-N(3L)-C(1LC)	46(4)	C(5LD)-C(2LB)-N(3L)-C(2LC)	31,0(16)
C(5LD)-C(1LA)-N(3L)-C(1LC)	-3(3)	N(1L)-C(2LB)-N(3L)-C(1LC)	36(3)
C(3LD)-C(1LA)-N(3L)-C(1LC)	-65(3)	C(2L)-C(2LB)-N(3L)-C(1LC)	-55(3)
C(2LB)-C(1LA)-N(3L)-C(1LC)	41,0(14)	N(2L)-C(2LB)-N(3L)-C(1LC)	56(2)
C(2LD)-C(1LA)-N(3L)-C(1LC)	70(2)	C(2LC)-C(2LB)-N(3L)-C(1LC)	-102(3)
C(2L)-C(1LA)-N(3L)-C(1LC)	6(2)	C(1LA)-C(2LB)-N(3L)-C(1LC)	-100(2)
N(1L)-C(1LA)-N(3L)-C(1LC)	3(2)	C(2LD)-C(2LB)-N(3L)-C(1LC)	-125(3)
C(1LC)-C(2LB)-N(3L)-N(1L)	-36(3)	C(5LD)-C(2LB)-N(3L)-C(1LC)	-71(2)
C(2L)-C(2LB)-N(3L)-N(1L)	-91(4)	C(1LC)-N(2L)-N(3L)-N(1L)	-41(7)
N(2L)-C(2LB)-N(3L)-N(1L)	19(2)	C(2LB)-N(2L)-N(3L)-N(1L)	-101(8)
C(2LC)-C(2LB)-N(3L)-N(1L)	-138(3)	C(4LD)-N(2L)-N(3L)-N(1L)	-44(9)
C(1LA)-C(2LB)-N(3L)-N(1L)	-136(3)	N(1L)-N(2L)-N(3L)-C(1LA)	73(8)
C(2LD)-C(2LB)-N(3L)-N(1L)	-162(3)	C(1LC)-N(2L)-N(3L)-C(1LA)	32(3)
C(5LD)-C(2LB)-N(3L)-N(1L)	-107(3)	C(2LB)-N(2L)-N(3L)-C(1LA)	-28(3)
N(1L)-C(2LB)-N(3L)-C(1LA)	136(3)	C(4LD)-N(2L)-N(3L)-C(1LA)	29(9)
C(1LC)-C(2LB)-N(3L)-C(1LA)	100(2)	N(1L)-N(2L)-N(3L)-C(2LB)	101(8)
C(2L)-C(2LB)-N(3L)-C(1LA)	45(3)	C(1LC)-N(2L)-N(3L)-C(2LB)	60(2)
N(2L)-C(2LB)-N(3L)-C(1LA)	155(2)	C(4LD)-N(2L)-N(3L)-C(2LB)	57(7)
C(2LC)-C(2LB)-N(3L)-C(1LA)	-2,2(19)	N(1L)-N(2L)-N(3L)-C(2LC)	83(7)
C(2LD)-C(2LB)-N(3L)-C(1LA)	-26(2)	C(1LC)-N(2L)-N(3L)-C(2LC)	41(3)
C(5LD)-C(2LB)-N(3L)-C(1LA)	28,8(19)	C(2LB)-N(2L)-N(3L)-C(2LC)	-19(2)
N(1L)-C(2LB)-N(3L)-N(2L)	-19(2)	C(4LD)-N(2L)-N(3L)-C(2LC)	38(8)
C(1LC)-C(2LB)-N(3L)-N(2L)	-56(2)	N(1L)-N(2L)-N(3L)-C(1LC)	41(7)
C(2L)-C(2LB)-N(3L)-N(2L)	-110(4)	C(2LB)-N(2L)-N(3L)-C(1LC)	-60(2)
C(2LC)-C(2LB)-N(3L)-N(2L)	-158(3)	C(4LD)-N(2L)-N(3L)-C(1LC)	-3(7)

C(1LA)-C(2LC)-N(3L)-N(1L)	-142(5)
C(2LD)-C(2LC)-N(3L)-N(1L)	84(5)
C(5LD)-C(2LC)-N(3L)-N(1L)	-46(4)
C(2L)-C(2LC)-N(3L)-N(1L)	-18(4)
C(2LB)-C(2LC)-N(3L)-N(1L)	33(2)
C(3LD)-C(2LC)-N(3L)-N(1L)	-98(3)
C(2LD)-C(2LC)-N(3L)-C(1LA)	-134(7)
C(5LD)-C(2LC)-N(3L)-C(1LA)	96(6)
C(2L)-C(2LC)-N(3L)-C(1LA)	124(6)
C(2LB)-C(2LC)-N(3L)-C(1LA)	174(5)
C(3LD)-C(2LC)-N(3L)-C(1LA)	43(4)
C(1LA)-C(2LC)-N(3L)-C(2LB)	-174(5)
C(2LD)-C(2LC)-N(3L)-C(2LB)	52(4)
C(5LD)-C(2LC)-N(3L)-C(2LB)	-79(4)
C(2L)-C(2LC)-N(3L)-C(2LB)	-51(3)
C(3LD)-C(2LC)-N(3L)-C(2LB)	-131(3)
C(1LA)-C(2LC)-N(3L)-N(2L)	-157(4)
C(2LD)-C(2LC)-N(3L)-N(2L)	69(5)
C(5LD)-C(2LC)-N(3L)-N(2L)	-62(4)
C(2L)-C(2LC)-N(3L)-N(2L)	-34(3)
C(2LB)-C(2LC)-N(3L)-N(2L)	17(2)
C(3LD)-C(2LC)-N(3L)-N(2L)	-114(2)
C(1LA)-C(2LC)-N(3L)-C(1LC)	-131(4)
C(2LD)-C(2LC)-N(3L)-C(1LC)	95(5)
C(5LD)-C(2LC)-N(3L)-C(1LC)	-35(4)
C(2L)-C(2LC)-N(3L)-C(1LC)	-7(3)
C(2LB)-C(2LC)-N(3L)-C(1LC)	43,3(17)
C(3LD)-C(2LC)-N(3L)-C(1LC)	-88(2)
C(2L)-C(1LC)-N(3L)-N(1L)	166(5)
N(2L)-C(1LC)-N(3L)-N(1L)	21(4)
C(2LB)-C(1LC)-N(3L)-N(1L)	101(4)
O(10W)-C(1LC)-N(3L)-N(1L)	-87(4)
C(5LD)-C(1LC)-N(3L)-N(1L)	176(4)
N(1L)-C(1LC)-N(3L)-C(1LA)	-175(4)

		N(2L)-C(1LC)-O(10W)-N(1L)	-40(2)
C(2L)-C(1LC)-N(3L)-C(1LA)	-9(3)	C(2LB)-C(1LC)-O(10W)-N(1L)	29(2)
N(2L)-C(1LC)-N(3L)-C(1LA)	-153(3)	N(3L)-C(1LC)-O(10W)-N(1L)	21,9(14)
C(2LB)-C(1LC)-N(3L)-C(1LA)	-74(2)	C(5LD)-C(1LC)-O(10W)-N(1L)	98(2)
O(10W)-C(1LC)-N(3L)-C(1LA)	98(2)	C(5LD)-C(2LC)-C(2LD)-C(1LA)	157(10)
C(5LD)-C(1LC)-N(3L)-C(1LA)	1,8(19)	C(2L)-C(2LC)-C(2LD)-C(1LA)	120(8)
N(1L)-C(1LC)-N(3L)-C(2LB)	-101(4)	C(2LB)-C(2LC)-C(2LD)-C(1LA)	68(6)
C(2L)-C(1LC)-N(3L)-C(2LB)	65(3)	C(3LD)-C(2LC)-C(2LD)-C(1LA)	-143(15)
N(2L)-C(1LC)-N(3L)-C(2LB)	-79(3)	N(3L)-C(2LC)-C(2LD)-C(1LA)	31(4)
O(10W)-C(1LC)-N(3L)-C(2LB)	172(3)	C(1LA)-C(2LC)-C(2LD)-C(5LD)	-157(10)
C(5LD)-C(1LC)-N(3L)-C(2LB)	76(3)	C(2L)-C(2LC)-C(2LD)-C(5LD)	-37(4)
N(1L)-C(1LC)-N(3L)-N(2L)	-21(4)	C(2LB)-C(2LC)-C(2LD)-C(5LD)	-89(5)
C(2L)-C(1LC)-N(3L)-N(2L)	144(4)	C(3LD)-C(2LC)-C(2LD)-C(5LD)	59(10)
C(2LB)-C(1LC)-N(3L)-N(2L)	79(3)	N(3L)-C(2LC)-C(2LD)-C(5LD)	-126(6)
O(10W)-C(1LC)-N(3L)-N(2L)	-109(3)	C(1LA)-C(2LC)-C(2LD)-C(2LB)	-68(6)
C(5LD)-C(1LC)-N(3L)-N(2L)	155(3)	C(5LD)-C(2LC)-C(2LD)-C(2LB)	89(5)
N(1L)-C(1LC)-N(3L)-C(2LC)	-158(4)	C(2L)-C(2LC)-C(2LD)-C(2LB)	52(4)
C(2L)-C(1LC)-N(3L)-C(2LC)	8(3)	C(3LD)-C(2LC)-C(2LD)-C(2LB)	149(11)
N(2L)-C(1LC)-N(3L)-C(2LC)	-137(3)	N(3L)-C(2LC)-C(2LD)-C(2LB)	-37(3)
C(2LB)-C(1LC)-N(3L)-C(2LC)	-57(2)	C(1LA)-C(2LC)-C(2LD)-C(2L)	-120(8)
O(10W)-C(1LC)-N(3L)-C(2LC)	115(2)	C(5LD)-C(2LC)-C(2LD)-C(2L)	37(4)
C(5LD)-C(1LC)-N(3L)-C(2LC)	18,2(18)	C(2LB)-C(2LC)-C(2LD)-C(2L)	-52(4)
O(3W)-O(1W)-O(2W)-O(6W)	166(2)	C(3LD)-C(2LC)-C(2LD)-C(2L)	96(11)
O(6W)-O(1W)-O(2W)-O(3W)	-166(2)	N(3L)-C(2LC)-C(2LD)-C(2L)	-89(4)
O(6W)-O(2W)-O(3W)-O(1W)	-10,2(17)	N(3L)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LC)	-128(7)
O(6W)-O(1W)-O(3W)-O(2W)	16(3)	C(5LD)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LC)	-15(7)
O(3W)-O(1W)-O(6W)-O(2W)	-16(3)	C(3LD)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LC)	17(7)
O(3W)-O(2W)-O(6W)-O(1W)	15(2)	C(2LB)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LC)	-100(7)
N(3L)-N(1L)-O(10W)-C(1LC)	-130(3)	C(2L)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LC)	-46(7)
N(2L)-N(1L)-O(10W)-C(1LC)	57(3)	N(1L)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LC)	-103(7)
C(2LB)-N(1L)-O(10W)-C(1LC)	-35(3)	C(2LC)-C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)	15(7)
C(1LA)-N(1L)-O(10W)-C(1LC)	-93(2)	N(3L)-C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)	-113(3)
C(2L)-N(1L)-O(10W)-C(1LC)	-39(2)	C(3LD)-C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)	32(3)
C(2L)-C(1LC)-O(10W)-N(1L)	100(4)	C(2LB)-C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)	-85(3)

C(2L)-C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)	-30(2)
N(1L)-C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)	-88(3)
C(2LC)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LB)	100(7)
N(3L)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LB)	-27(2)
C(5LD)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LB)	85(3)
C(3LD)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LB)	118(3)
C(2L)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LB)	55(3)
N(1L)-C(1LA)-C(2LD)-C(2LB)	-2,9(17)
C(2LC)-C(1LA)-C(2LD)-C(2L)	46(7)
N(3L)-C(1LA)-C(2LD)-C(2L)	-82(3)
C(5LD)-C(1LA)-C(2LD)-C(2L)	30(2)
C(3LD)-C(1LA)-C(2LD)-C(2L)	63(3)
C(2LB)-C(1LA)-C(2LD)-C(2L)	-55(3)
N(1L)-C(1LA)-C(2LD)-C(2L)	-58(3)
N(1L)-C(2LB)-C(2LD)-C(2LC)	30(5)
C(1LC)-C(2LB)-C(2LD)-C(2LC)	-50(5)
C(2L)-C(2LB)-C(2LD)-C(2LC)	-51(4)
N(2L)-C(2LB)-C(2LD)-C(2LC)	119(100)
N(3L)-C(2LB)-C(2LD)-C(2LC)	45(4)
C(1LA)-C(2LB)-C(2LD)-C(2LC)	24(3)
C(5LD)-C(2LB)-C(2LD)-C(2LC)	-37(3)
N(1L)-C(2LB)-C(2LD)-C(1LA)	6(4)
C(1LC)-C(2LB)-C(2LD)-C(1LA)	-74(3)
C(2L)-C(2LB)-C(2LD)-C(1LA)	-74(3)
N(2L)-C(2LB)-C(2LD)-C(1LA)	95(100)
N(3L)-C(2LB)-C(2LD)-C(1LA)	21,0(18)
C(2LC)-C(2LB)-C(2LD)-C(1LA)	-24(3)
C(5LD)-C(2LB)-C(2LD)-C(1LA)	-61(2)
N(1L)-C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)	67(4)
C(1LC)-C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)	-13(4)
C(2L)-C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)	-14(3)
N(2L)-C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)	156(100)
N(3L)-C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)	82(2)
C(2LC)-C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)	37(3)

C(1LA)-C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)	61(2)	N(3L)-C(1LA)-C(3LD)-C(5LD)	100(4)
		C(2LB)-C(1LA)-C(3LD)-C(5LD)	28(4)
N(1L)-C(2LB)-C(2LD)-C(2L)	81(4)	C(2LD)-C(1LA)-C(3LD)-C(5LD)	-38(3)
C(1LC)-C(2LB)-C(2LD)-C(2L)	1(4)	C(2L)-C(1LA)-C(3LD)-C(5LD)	19(3)
N(2L)-C(2LB)-C(2LD)-C(2L)	169(100)	N(1L)-C(1LA)-C(3LD)-C(5LD)	73(3)
N(3L)-C(2LB)-C(2LD)-C(2L)	95(3)	N(3L)-C(1LA)-C(3LD)-C(2LC)	131(4)
C(2LC)-C(2LB)-C(2LD)-C(2L)	51(4)	C(5LD)-C(1LA)-C(3LD)-C(2LC)	31(3)
C(1LA)-C(2LB)-C(2LD)-C(2L)	74(3)	C(2LB)-C(1LA)-C(3LD)-C(2LC)	58(3)
C(5LD)-C(2LB)-C(2LD)-C(2L)	14(3)	C(2LD)-C(1LA)-C(3LD)-C(2LC)	-7(3)
C(5LD)-C(2L)-C(2LD)-C(2LC)	-52(6)	C(2L)-C(1LA)-C(3LD)-C(2LC)	50(3)
C(1LC)-C(2L)-C(2LD)-C(2LC)	97(7)	N(1L)-C(1LA)-C(3LD)-C(2LC)	104(3)
C(2LB)-C(2L)-C(2LD)-C(2LC)	97(5)	C(2LC)-C(1LA)-C(3LD)-O(9W)#1	97(6)
C(1LA)-C(2L)-C(2LD)-C(2LC)	22(4)	N(3L)-C(1LA)-C(3LD)-O(9W)#1	-132(5)
N(1L)-C(2L)-C(2LD)-C(2LC)	72(5)	C(5LD)-C(1LA)-C(3LD)-O(9W)#1	128(7)
C(3LD)-C(2L)-C(2LD)-C(2LC)	-23(4)	C(2LB)-C(1LA)-C(3LD)-O(9W)#1	156(5)
C(5LD)-C(2L)-C(2LD)-C(1LA)	-74(6)	C(2LD)-C(1LA)-C(3LD)-O(9W)#1	90(6)
C(1LC)-C(2L)-C(2LD)-C(1LA)	75(5)	C(2L)-C(1LA)-C(3LD)-O(9W)#1	147(7)
C(2LC)-C(2L)-C(2LD)-C(1LA)	-22(4)	N(1L)-C(1LA)-C(3LD)-O(9W)#1	-159(5)
C(2LB)-C(2L)-C(2LD)-C(1LA)	75(3)	C(2LC)-C(1LA)-C(3LD)-C(2L)	-50(3)
N(1L)-C(2L)-C(2LD)-C(1LA)	50(2)	N(3L)-C(1LA)-C(3LD)-C(2L)	81(4)
C(3LD)-C(2L)-C(2LD)-C(1LA)	-45(2)	C(5LD)-C(1LA)-C(3LD)-C(2L)	-19(3)
C(1LC)-C(2L)-C(2LD)-C(5LD)	149(9)	C(2LB)-C(1LA)-C(3LD)-C(2L)	9(3)
C(2LC)-C(2L)-C(2LD)-C(5LD)	52(6)	C(2LD)-C(1LA)-C(3LD)-C(2L)	-57(3)
C(2LB)-C(2L)-C(2LD)-C(5LD)	149(7)	N(1L)-C(1LA)-C(3LD)-C(2L)	54(3)
C(1LA)-C(2L)-C(2LD)-C(5LD)	74(6)	C(1LA)-C(2LC)-C(3LD)-C(5LD)	133(5)
N(1L)-C(2L)-C(2LD)-C(5LD)	124(7)	C(2LD)-C(2LC)-C(3LD)-C(5LD)	-75(11)
C(3LD)-C(2L)-C(2LD)-C(5LD)	29(5)	C(2L)-C(2LC)-C(3LD)-C(5LD)	27(4)
C(5LD)-C(2L)-C(2LD)-C(2LB)	-149(7)	C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)-C(5LD)	69(4)
C(1LC)-C(2L)-C(2LD)-C(2LB)	0(4)	N(3L)-C(2LC)-C(3LD)-C(5LD)	110(4)
C(2LC)-C(2L)-C(2LD)-C(2LB)	-97(5)	C(2LD)-C(2LC)-C(3LD)-C(1LA)	152(12)
C(1LA)-C(2L)-C(2LD)-C(2LB)	-75(3)	C(5LD)-C(2LC)-C(3LD)-C(1LA)	-133(5)
N(1L)-C(2L)-C(2LD)-C(2LB)	-25,5(19)	C(2L)-C(2LC)-C(3LD)-C(1LA)	-106(4)
C(3LD)-C(2L)-C(2LD)-C(2LB)	-120(4)	C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)-C(1LA)	-64(3)
C(2LC)-C(1LA)-C(3LD)-C(5LD)	-31(3)	N(3L)-C(2LC)-C(3LD)-C(1LA)	-23(2)

C(1LA)-C(2LC)-C(3LD)-O(9W)#1	-122(5)	C(2LD)-C(2L)-C(3LD)-O(9W)#1	-93(7)
C(2LD)-C(2LC)-C(3LD)-O(9W)#1	31(13)	N(1L)-C(2L)-C(3LD)-O(9W)#1	175(6)
C(5LD)-C(2LC)-C(3LD)-O(9W)#1	105(6)		
C(2L)-C(2LC)-C(3LD)-O(9W)#1	133(6)	N(1L)-N(2L)-C(4LD)-O(11W)#3	126(7)
C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)-O(9W)#1	174(4)	C(1LC)-N(2L)-C(4LD)-O(11W)#3	140(6)
N(3L)-C(2LC)-C(3LD)-O(9W)#1	-144(5)	C(2LB)-N(2L)-C(4LD)-O(11W)#3	-170(5)
C(1LA)-C(2LC)-C(3LD)-C(2L)	106(4)	N(3L)-N(2L)-C(4LD)-O(11W)#3	143(7)
C(2LD)-C(2LC)-C(3LD)-C(2L)	-102(12)	C(1LC)-C(2L)-C(5LD)-C(2LC)	-92(15)
C(5LD)-C(2LC)-C(3LD)-C(2L)	-27(4)	C(2LB)-C(2L)-C(5LD)-C(2LC)	-5(9)
C(2LB)-C(2LC)-C(3LD)-C(2L)	41(3)	C(1LA)-C(2L)-C(5LD)-C(2LC)	-32(2)
N(3L)-C(2LC)-C(3LD)-C(2L)	83(3)	C(2LD)-C(2L)-C(5LD)-C(2LC)	30(3)
C(1LC)-C(2L)-C(3LD)-C(5LD)	177(12)	N(1L)-C(2L)-C(5LD)-C(2LC)	-51(7)
C(2LC)-C(2L)-C(3LD)-C(5LD)	-73(9)	C(3LD)-C(2L)-C(5LD)-C(2LC)	-86(8)
C(2LB)-C(2L)-C(3LD)-C(5LD)	-119(11)	C(1LC)-C(2L)-C(5LD)-C(3LD)	-6(21)
C(1LA)-C(2L)-C(3LD)-C(5LD)	-109(9)	C(2LC)-C(2L)-C(5LD)-C(3LD)	86(8)
C(2LD)-C(2L)-C(3LD)-C(5LD)	-59(9)	C(2LB)-C(2L)-C(5LD)-C(3LD)	81(11)
N(1L)-C(2L)-C(3LD)-C(5LD)	-151(10)	C(1LA)-C(2L)-C(5LD)-C(3LD)	54(7)
C(5LD)-C(2L)-C(3LD)-C(1LA)	109(9)	C(2LD)-C(2L)-C(5LD)-C(3LD)	116(8)
C(1LC)-C(2L)-C(3LD)-C(1LA)	-75(4)	N(1L)-C(2L)-C(5LD)-C(3LD)	35(11)
C(2LC)-C(2L)-C(3LD)-C(1LA)	36(2)	C(1LC)-C(2L)-C(5LD)-C(1LA)	-60(15)
C(2LB)-C(2L)-C(3LD)-C(1LA)	-10(4)	C(2LC)-C(2L)-C(5LD)-C(1LA)	32(2)
C(2LD)-C(2L)-C(3LD)-C(1LA)	49(3)	C(2LB)-C(2L)-C(5LD)-C(1LA)	27(8)
N(1L)-C(2L)-C(3LD)-C(1LA)	-42(2)	C(2LD)-C(2L)-C(5LD)-C(1LA)	62(2)
C(5LD)-C(2L)-C(3LD)-C(2LC)	73(9)	N(1L)-C(2L)-C(5LD)-C(1LA)	-19(6)
C(1LC)-C(2L)-C(3LD)-C(2LC)	-111(6)	C(3LD)-C(2L)-C(5LD)-C(1LA)	-54(7)
C(2LB)-C(2L)-C(3LD)-C(2LC)	-46(4)	C(1LC)-C(2L)-C(5LD)-C(2LD)	-121(14)
C(1LA)-C(2L)-C(3LD)-C(2LC)	-36(2)	C(2LC)-C(2L)-C(5LD)-C(2LD)	-30(3)
C(2LD)-C(2L)-C(3LD)-C(2LC)	14(3)	C(2LB)-C(2L)-C(5LD)-C(2LD)	-35(8)
N(1L)-C(2L)-C(3LD)-C(2LC)	-78(3)	C(1LA)-C(2L)-C(5LD)-C(2LD)	-62(2)
C(5LD)-C(2L)-C(3LD)-O(9W)#1	-34(12)	N(1L)-C(2L)-C(5LD)-C(2LD)	-80(6)
C(1LC)-C(2L)-C(3LD)-O(9W)#1	143(6)	C(3LD)-C(2L)-C(5LD)-C(2LD)	-116(8)
C(2LC)-C(2L)-C(3LD)-O(9W)#1	107(7)	C(2LC)-C(2L)-C(5LD)-C(1LC)	92(15)
C(2LB)-C(2L)-C(3LD)-O(9W)#1	-153(6)	C(2LB)-C(2L)-C(5LD)-C(1LC)	86(16)
C(1LA)-C(2L)-C(3LD)-O(9W)#1	-142(7)	C(1LA)-C(2L)-C(5LD)-C(1LC)	60(15)
		C(2LD)-C(2L)-C(5LD)-C(1LC)	121(14)

N(IL)-C(2L)-C(5LD)-C(1LC)	41(11)	C(ILA)-C(2LC)-C(5LD)-C(2LB)	81(4)
C(3LD)-C(2L)-C(5LD)-C(1LC)	6(21)	C(2LD)-C(2LC)-C(5LD)-C(2LB)	-82(5)
C(ILC)-C(2L)-C(5LD)-C(2LB)	-86(16)	C(2L)-C(2LC)-C(5LD)-C(2LB)	-4(6)
C(2LC)-C(2L)-C(5LD)-C(2LB)	5(9)	C(3LD)-C(2LC)-C(5LD)-C(2LB)	127(3)
C(1LA)-C(2L)-C(5LD)-C(2LB)	-27(8)	N(3L)-C(2LC)-C(5LD)-C(2LB)	47,9(18)
C(2LD)-C(2L)-C(5LD)-C(2LB)	35(8)	C(1LA)-C(3LD)-C(5LD)-C(2L)	-62(9)
N(1L)-C(2L)-C(5LD)-C(2LB)	-45(5)	C(2LC)-C(3LD)-C(5LD)-C(2L)	-86(9)
C(3LD)-C(2L)-C(5LD)-C(2LB)	-81(11)	O(9W)#1-C(3LD)-C(5LD)-C(2L)	157(8)
C(1LA)-C(2LC)-C(5LD)-C(2L)	85(7)	C(1LA)-C(3LD)-C(5LD)-C(2LC)	24(3)
C(2LD)-C(2LC)-C(5LD)-C(2L)	-78(8)	O(9W)#1-C(3LD)-C(5LD)-C(2LC)	-117(5)
C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)-C(2L)	4(6)	C(2L)-C(3LD)-C(5LD)-C(2LC)	86(9)
C(3LD)-C(2LC)-C(5LD)-C(2L)	130(7)	C(2LC)-C(3LD)-C(5LD)-C(1LA)	-24(3)
N(3L)-C(2LC)-C(5LD)-C(2L)	52(7)	O(9W)#1-C(3LD)-C(5LD)-C(1LA)	-142(5)
C(ILA)-C(2LC)-C(5LD)-C(3LD)	-46(5)	C(2L)-C(3LD)-C(5LD)-C(1LA)	62(9)
C(2LD)-C(2LC)-C(5LD)-C(3LD)	151(5)	C(1LA)-C(3LD)-C(5LD)-C(2LD)	40(3)
C(2L)-C(2LC)-C(5LD)-C(3LD)	-130(7)	C(2LC)-C(3LD)-C(5LD)-C(2LD)	15(3)
C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)-C(3LD)	-127(3)	O(9W)#1-C(3LD)-C(5LD)-C(2LD)	-102(5)
N(3L)-C(2LC)-C(5LD)-C(3LD)	-79(4)	C(2L)-C(3LD)-C(5LD)-C(2LD)	101(10)
C(2LD)-C(2LC)-C(5LD)-C(1LA)	-163(7)	C(1LA)-C(3LD)-C(5LD)-C(1LC)	-64(3)
C(2L)-C(2LC)-C(5LD)-C(1LA)	-85(7)	C(2LC)-C(3LD)-C(5LD)-C(1LC)	-88(4)
C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)-C(1LA)	-81(4)	O(9W)#1-C(3LD)-C(5LD)-C(1LC)	155(4)
C(3LD)-C(2LC)-C(5LD)-C(1LA)	46(5)	C(2L)-C(3LD)-C(5LD)-C(1LC)	-2(7)
N(3L)-C(2LC)-C(5LD)-C(1LA)	-33(2)	C(1LA)-C(3LD)-C(5LD)-C(2LB)	-23(3)
C(1LA)-C(2LC)-C(5LD)-C(2LD)	163(7)	C(2LC)-C(3LD)-C(5LD)-C(2LB)	-47(3)
C(2L)-C(2LC)-C(5LD)-C(2LD)	78(8)	O(9W)#1-C(3LD)-C(5LD)-C(2LB)	-164(4)
C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)-C(2LD)	82(5)	C(2L)-C(3LD)-C(5LD)-C(2LB)	39(8)
C(3LD)-C(2LC)-C(5LD)-C(2LD)	-151(5)	C(2LC)-C(1LA)-C(5LD)-C(2L)	-94(7)
N(3L)-C(2LC)-C(5LD)-C(2LD)	130(6)	N(3L)-C(1LA)-C(5LD)-C(2L)	20(7)
C(1LA)-C(2LC)-C(5LD)-C(1LC)	65(4)	C(3LD)-C(1LA)-C(5LD)-C(2L)	138(7)
C(2LD)-C(2LC)-C(5LD)-C(1LC)	-98(5)	C(2LB)-C(1LA)-C(5LD)-C(2L)	-18(6)
C(2L)-C(2LC)-C(5LD)-C(1LC)	-19(5)	C(2LD)-C(1LA)-C(5LD)-C(2L)	-84(6)
C(2LB)-C(2LC)-C(5LD)-C(1LC)	-15(2)	N(IL)-C(1LA)-C(5LD)-C(2L)	17(6)
C(3LD)-C(2LC)-C(5LD)-C(1LC)	111(3)	N(3L)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LC)	113(5)
N(3L)-C(2LC)-C(5LD)-C(1LC)	32(3)	C(3LD)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LC)	-129(5)

C(2LB)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LC)	76(4)	C(2L)-C(2LD)-C(5LD)-C(2LC)	-99(8)
C(2LD)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LC)	10(4)	C(2LC)-C(2LD)-C(5LD)-C(3LD)	-32(6)
C(2L)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LC)	94(7)	C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)-C(3LD)	-42(4)
N(1L)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LC)	111(4)	C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)-C(3LD)	-108(4)
C(2LC)-C(1LA)-C(5LD)-C(3LD)	129(5)	C(2L)-C(2LD)-C(5LD)-C(3LD)	-131(8)
N(3L)-C(1LA)-C(5LD)-C(3LD)	-118(3)	C(2LC)-C(2LD)-C(5LD)-C(1LA)	10(4)
C(2LB)-C(1LA)-C(5LD)-C(3LD)	-156(3)	C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)-C(1LA)	-66(2)
C(2LD)-C(1LA)-C(5LD)-C(3LD)	138(4)	C(2L)-C(2LD)-C(5LD)-C(1LA)	-89(6)
C(2L)-C(1LA)-C(5LD)-C(3LD)	-138(7)	C(2LC)-C(2LD)-C(5LD)-C(1LC)	83(5)
N(1L)-C(1LA)-C(5LD)-C(3LD)	-120(3)	C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)-C(1LC)	73(2)
C(2LC)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LD)	-10(4)	C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)-C(1LC)	7(2)
N(3L)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LD)	104(3)	C(2L)-C(2LD)-C(5LD)-C(1LC)	-16(5)
C(3LD)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LD)	-138(4)	C(2LC)-C(2LD)-C(5LD)-C(2LB)	76(5)
C(2LB)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LD)	66(2)	C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)-C(2LB)	66(2)
C(2L)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LD)	84(6)	C(2L)-C(2LD)-C(5LD)-C(2LB)	-23(6)
N(1L)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LD)	101(2)	N(1L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2L)	-118(16)
C(2LC)-C(1LA)-C(5LD)-C(1LC)	-111(5)	N(2L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2L)	-83(16)
N(3L)-C(1LA)-C(5LD)-C(1LC)	3(3)	C(2LB)-C(1LC)-C(5LD)-C(2L)	-67(15)
C(3LD)-C(1LA)-C(5LD)-C(1LC)	121(3)	O(10W)-C(1LC)-C(5LD)-C(2L)	174(16)
C(2LB)-C(1LA)-C(5LD)-C(1LC)	-35,0(16)	N(3L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2L)	-119(16)
C(2LD)-C(1LA)-C(5LD)-C(1LC)	-101(3)	N(1L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LC)	-30(4)
C(2L)-C(1LA)-C(5LD)-C(1LC)	-17(5)	C(2L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LC)	88(16)
N(1L)-C(1LA)-C(5LD)-C(1LC)	0,1(16)	N(2L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LC)	4(6)
C(2LC)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LB)	-76(4)	C(2LB)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LC)	21(3)
N(3L)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LB)	38(2)	O(10W)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LC)	-98(3)
C(3LD)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LB)	156(3)	N(3L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LC)	-31(3)
C(2LD)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LB)	-66(2)	N(1L)-C(1LC)-C(5LD)-C(3LD)	58(4)
C(2L)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LB)	18(6)	C(2L)-C(1LC)-C(5LD)-C(3LD)	175(17)
N(1L)-C(1LA)-C(5LD)-C(2LB)	35,1(13)	N(2L)-C(1LC)-C(5LD)-C(3LD)	92(6)
C(2LC)-C(2LD)-C(5LD)-C(2L)	99(8)	C(2LB)-C(1LC)-C(5LD)-C(3LD)	108(4)
C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)-C(2L)	89(6)	O(10W)-C(1LC)-C(5LD)-C(3LD)	-11(4)
C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)-C(2L)	23(6)	N(3L)-C(1LC)-C(5LD)-C(3LD)	56(3)
C(1LA)-C(2LD)-C(5LD)-C(2LC)	-10(4)	N(1L)-C(1LC)-C(5LD)-C(1LA)	0(2)
C(2LB)-C(2LD)-C(5LD)-C(2LC)	-76(5)	C(2L)-C(1LC)-C(5LD)-C(1LA)	117(16)
		N(2L)-C(1LC)-C(5LD)-C(1LA)	34(5)
		C(2LB)-C(1LC)-C(5LD)-C(1LA)	50(2)

O(10W)-C(1LC)-C(5LD)-C(1LA)	-69(2)
N(3L)-C(1LC)-C(5LD)-C(1LA)	-1,5(16)
N(1L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LD)	-60(3)
C(2L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LD)	58(15)
N(2L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LD)	-25(6)
C(2LB)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LD)	-9(3)
O(10W)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LD)	-128(3)
N(3L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LD)	-61(2)
N(1L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LB)	-50(2)
C(2L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LB)	67(15)
N(2L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LB)	-16(4)
O(10W)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LB)	-119(3)
N(3L)-C(1LC)-C(5LD)-C(2LB)	-51,7(18)
N(1L)-C(2LB)-C(5LD)-C(2L)	86(10)
C(1LC)-C(2LB)-C(5LD)-C(2L)	32(9)
N(2L)-C(2LB)-C(5LD)-C(2L)	44(10)
N(3L)-C(2LB)-C(5LD)-C(2L)	121(10)
C(2LC)-C(2LB)-C(5LD)-C(2L)	-173(11)
C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)-C(2L)	147(10)
C(2LD)-C(2LB)-C(5LD)-C(2L)	-136(10)
N(1L)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LC)	-101(4)
C(1LC)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LC)	-154(4)
C(2L)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LC)	173(11)
N(2L)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LC)	-142(4)
N(3L)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LC)	-66(3)
C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LC)	-39(3)
C(2LD)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LC)	37(3)
N(1L)-C(2LB)-C(5LD)-C(3LD)	-36(4)
C(1LC)-C(2LB)-C(5LD)-C(3LD)	-89(4)
C(2L)-C(2LB)-C(5LD)-C(3LD)	-122(11)
N(2L)-C(2LB)-C(5LD)-C(3LD)	-78(5)
N(3L)-C(2LB)-C(5LD)-C(3LD)	-1(4)
C(2LC)-C(2LB)-C(5LD)-C(3LD)	65(4)
C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)-C(3LD)	25(3)

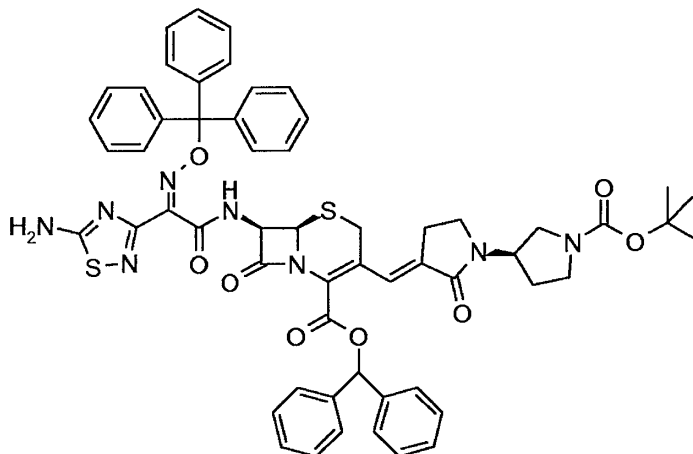
C(2LD)-C(2LB)-C(5LD)-C(3LD)	102(5)	N(2L)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LD)	-179(4)
N(1L)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LA)	-62(2)	N(3L)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LD)	-103(3)
C(1LC)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LA)	-115(3)	C(2LC)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LD)	-37(3)
C(2L)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LA)	-147(10)	C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LD)	-76(3)
N(2L)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LA)	-103(4)	N(1L)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LC)	53(2)
N(3L)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LA)	-26,3(17)	C(2L)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LC)	-32(9)
C(2LC)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LA)	39(3)	N(2L)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LC)	12(3)
C(2LD)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LA)	76(3)	N(3L)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LC)	88(2)
N(1L)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LD)	-138(3)	C(2LC)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LC)	154(4)
C(1LC)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LD)	169(3)	C(1LA)-C(2LB)-C(5LD)-C(1LC)	115(3)
		C(2L)-C(2LB)-C(5LD)-C(2LD)	136(2)

Transformações de simetria utilizadas para gerar átomos equivalentes:

#1 -x+1, y, -z+1 #2 -x+1, y-1, -z+1 #3 -x+1, y+1, -z+1

REIVINDICAÇÕES

1. Solvato de DMSO no estado sólido de um composto caracterizado pelo fato de que apresenta a fórmula (I)



2. Solvato de DMSO no estado sólido de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que a razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO é de 1:1 a 1:3.

3. Solvato de DMSO no estado sólido de acordo com a reivindicação 2, caracterizado pelo fato de que a razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO é de aproximadamente 1:1,75 a aproximadamente 1:2,75.

4. Solvato de DMSO no estado sólido de acordo com a reivindicação 3, caracterizado pelo fato de que a razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO é de aproximadamente 1:2 a aproximadamente 1:2,5.

5. Solvato de DMSO no estado sólido de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 4, caracterizado pelo fato de ser substancialmente cristalino.

6. Solvato de DMSO no estado sólido de acordo com a reivindicação 5, caracterizado pelo fato de que exibe picos no Difratoograma de Raio x em Pó (XRPD) registrados com Radiação Cu K-alfa e fornecidos em [° 2-Teta] em aproximadamente 7,0; 13,7; 18,0; 19,0; 19,9; 20,1; 20,2; 22,1; 22,8; 23,0; 23,3 com intensidade relativa acima de 55%.

7. Solvato de DMSO de acordo com a reivindicação 5 ou 6, ca-

racterizado pelo fato de que exibe essencialmente o seguinte perfil de Difração de Raio x em Pó, registrado com radiação Cu K-alfa

2 Θ [°]	Rel Int		2 Θ [°]	Rel Int
6,7	w		20,2	st
7,0	m		20,6	w
13,7	m		21,1	w
17,5	w		22,1	m
18,0	vst		22,8	m
18,5	w		23,0	m
19,0	vst		23,3	m
19,3	w		26,8	w
19,9	vst		27,3	m
20,1	m		32,2	w

em que

vst representa intensidade relativa de 100% a 90%;

5 st representa intensidade relativa de abaixo de 90% a 75%;

m representa intensidade relativa abaixo de 75% a 55 %; e

w representa intensidade relativa abaixo de 55%.

8. Solvato de DMSO de acordo qualquer uma das reivindicações

5 a 7, caracterizado pelo fato de que exibe essencialmente o seguinte perfil

10 de Difração de Raio x em Pó, registrado com radiação Cu K-alfa

2 Θ [°]	Rel Int [%]**	2 Θ [°]	Rel Int [%]**
6,7	35 $\pm$ 7	20,2	77 $\pm$ 15
7,0	65 $\pm$ 13	20,6	50 $\pm$ 10
13,7	58 $\pm$ 12	21,1	39 $\pm$ 8
17,5	46 $\pm$ 9	22,1	64 $\pm$ 13
18,0	100 $\pm$ 20	22,8	62 $\pm$ 12
18,5	47 $\pm$ 9	23,0	68 $\pm$ 14
19,0	93 $\pm$ 19	23,3	69 $\pm$ 14
19,3	47 $\pm$ 9	26,8	44 $\pm$ 9
19,9	87 $\pm$ 18	27,3	54 $\pm$ 11
20,1	68 $\pm$ 14	32,2	31 $\pm$ 6

** com a variação típica dos valores indicados para a intensidade relativa.

9. Processo para a produção de um solvato de DMSO no estado sólido do composto da fórmula (I) como definido na reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que o composto bruto da fórmula (I) é suspenso em acetato de etila, DMSO é adicionado à referida suspensão em quantidade suficiente para dissolver todo ou pelo menos substancialmente todo o composto da fórmula (I) e em que o solvato de DMSO do composto da fórmula (I) que se precipita da solução é separado da fase líquida.

10. Processo de acordo com a reivindicação 9, caracterizado pelo fato de que a razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO no referido solvato de DMSO é de aproximadamente 1:1,75 a aproximadamente 1:2,75, o mais preferível de aproximadamente 1:2 a aproximadamente 1:2,5.

11. Processo de acordo com a reivindicação 9 ou 10, caracterizado pelo fato de que a razão de composto sólido bruto da fórmula (I) para acetato de etila é de 1 para 10 a 1 para 40 (peso/volume).

12. Processo de acordo com a reivindicação 11, caracterizado pelo fato de que a razão de composto sólido bruto da fórmula (I) para acetato de etila é de 1 para 15 a 1 para 20, em especial de aproximadamente 1 para 17 (peso/volume).

13. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 9 a 12, caracterizado pelo fato de que a razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO é de 1 para 12 a 1 para 45.

14. Processo de acordo com a reivindicação 13, caracterizado pelo fato de que a razão molar do composto da fórmula (I) para DMSO é de 1 para 20 a 1 para 30, mais preferivelmente de 1 para 20 a 1 para 26, em especial de aproximadamente 1 para 23.

15. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 9 a 14, caracterizado pelo fato de que a temperatura é mantida de aproximadamente 15 a 50°C durante a formação do solvato.

16. Processo de acordo com a reivindicação 15, caracterizado pelo fato de que a temperatura é mantida em aproximadamente 20 a 30°C, especialmente em aproximadamente 23 a 27°C, durante a formação do solvato.

17. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 9 a 16, caracterizado pelo fato de que a suspensão de solvato de DMSO precipitado e/ou em precipitação é resfriada até uma temperatura de aproximadamente menos 5 a 10°C, de preferência de 0 a 4°C, e mantida naquela
5 temperatura, opcionalmente com agitação, por aproximadamente 0,25 a 5 horas, de preferência de 1 a 3 horas, antes que o solvato de DMSO seja separado do licor-mãe.

18. Processo para a produção de uma forma purificada do composto da fórmula (I) a partir de uma forma bruta do referido composto, caracterizado pelo fato de que o composto bruto da fórmula (I) é convertido em
10 um solvato de DMSO no estado sólido, preferivelmente cristalino ou substancialmente cristalino, especificamente na maneira como definido em qualquer uma das reivindicações 9 a 17, e mais especificamente para um solvato de DMSO cristalino, em que a razão molar do composto da fórmula (I) para
15 DMSO é de aproximadamente 1:1,75 a aproximadamente 1:2,75, especialmente de aproximadamente 1:2 a aproximadamente 1:2,5, sendo este solvato de DMSO isolado, de preferência em forma úmida, e novamente dissolvido em cloreto de metileno, no qual o composto da fórmula (I) precipita e o referido composto purificado precipitado da fórmula (I) é isolado.

20 19. Processo de acordo com a reivindicação 18, caracterizado pelo fato de que a solução é resfriada até aproximadamente 0 a 4°C durante e/ou após a nova dissolução do solvato de DMSO.

20. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 9 a 19, caracterizado pelo fato de que o solvato de DMSO isolado é ainda processado sem a sua prévia secagem.
25

21. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 9 a 20, caracterizado pelo fato de que o composto bruto da fórmula (I) é produzido reagindo brometo de (1'-terc-butoxicarbonil-2-oxo-[1,3']-(R)-bipirrolidinil-3-(R,S)-il)-trifenil-fosfônio com benzidril éster de ácido 7-[2-(5-amino-[1,2,4]tia-diazol-3-il)-2-tritiloxiimino-acetilamino]-3-formil-8-oxo-5-tia-l-
30 aza-biciclo [4.2.0]oct-2-eno-2-carboxílico, em mistura de cloreto de metileno/tolueno/THF na presença de t-C₄H₉OK.

5

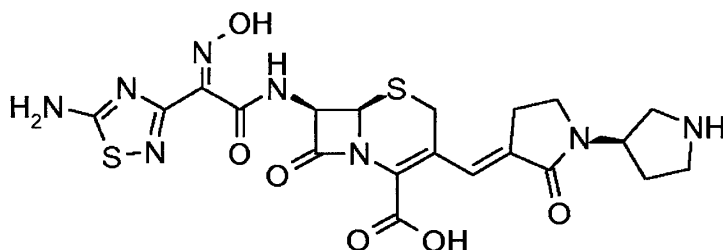
10

10 la (I)

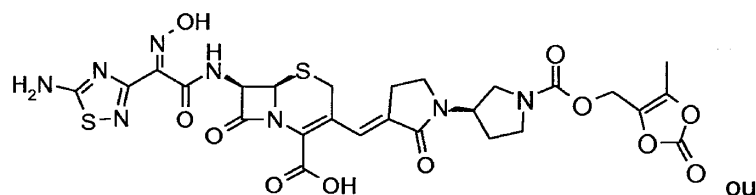


15

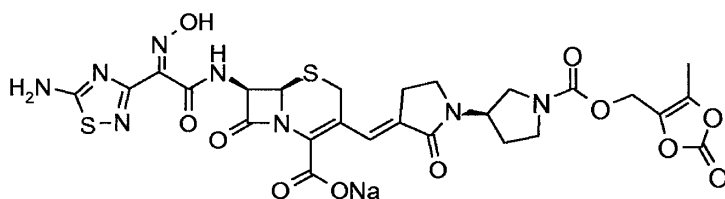
15



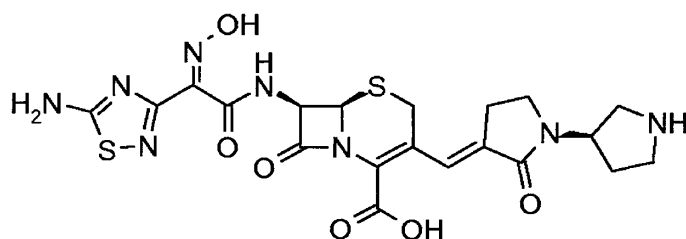
reivindicações 9 a 23, caracterizado pelo fato de ser para a produção de Cef-tobiprol Medocaril, ou seja, o composto da fórmula:



de Cef-tobiprol Medocaril em forma de seu sal de sódio, ou seja, o composto da fórmula:



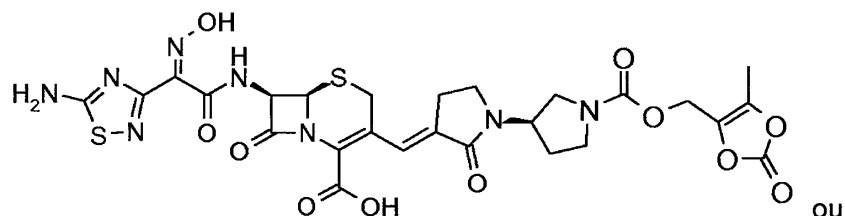
- 5 27. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 9 a 23, caracterizado pelo fato de ser para a produção de Cef-tobiprol, ou seja, o composto da fórmula:



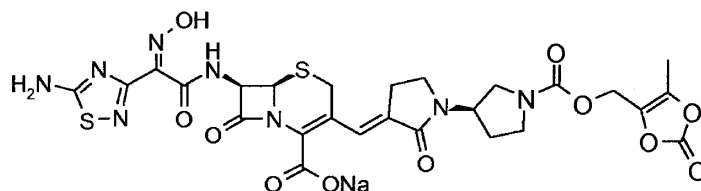
- em que o composto da fórmula (I) é convertido em um solvato de DMSO no estado sólido, em especial um solvato de DMSO, em que a razão molar do
 10 composto da fórmula (I) para DMSO é de aproximadamente 1:1,75 a aproximadamente 1:2,75, especialmente de aproximadamente 1:2 para aproximadamente 1:2,5, sendo este solvato de DMSO isolado e novamente dissolvido em cloreto de metileno, no qual o composto da fórmula (I) se precipita e em que o referido composto precipitado purificado da fórmula (I) é isolado e
 15 convertido para Cef-tobiprol pela remoção dos grupos de proteção por meio de tratamento com ácido trifluoracético e trietil silano por neutralização com

hidrogenocarbonato de sódio.

28. Processo de acordo com a reivindicação 30, caracterizado pelo fato de ser para a produção de Ceftobiprol Medocaril, ou seja, o composto da fórmula:



5 de Ceftobiprol Medocaril em forma de seu sal de sódio, ou seja, o composto da fórmula:



em que o Ceftobiprol é convertido no referido composto por tratamento com 4-nitrofenil éster de 5-metil-2-oxo-[1,3]dioxol-4-ilmetil éster de ácido carbônico em DMSO, opcionalmente seguido por precipitação do seu sal de sódio por tratamento com etilhexanoato de sódio.

29. Invenção, caracterizada por quaisquer de suas concretizações ou categorias de reivindicação englobadas pela matéria inicialmente revelada no pedido de patente ou em seus exemplos aqui apresentados.

Diagrama típico de XRPD de um solvato do composto da fórmula (I) da invenção

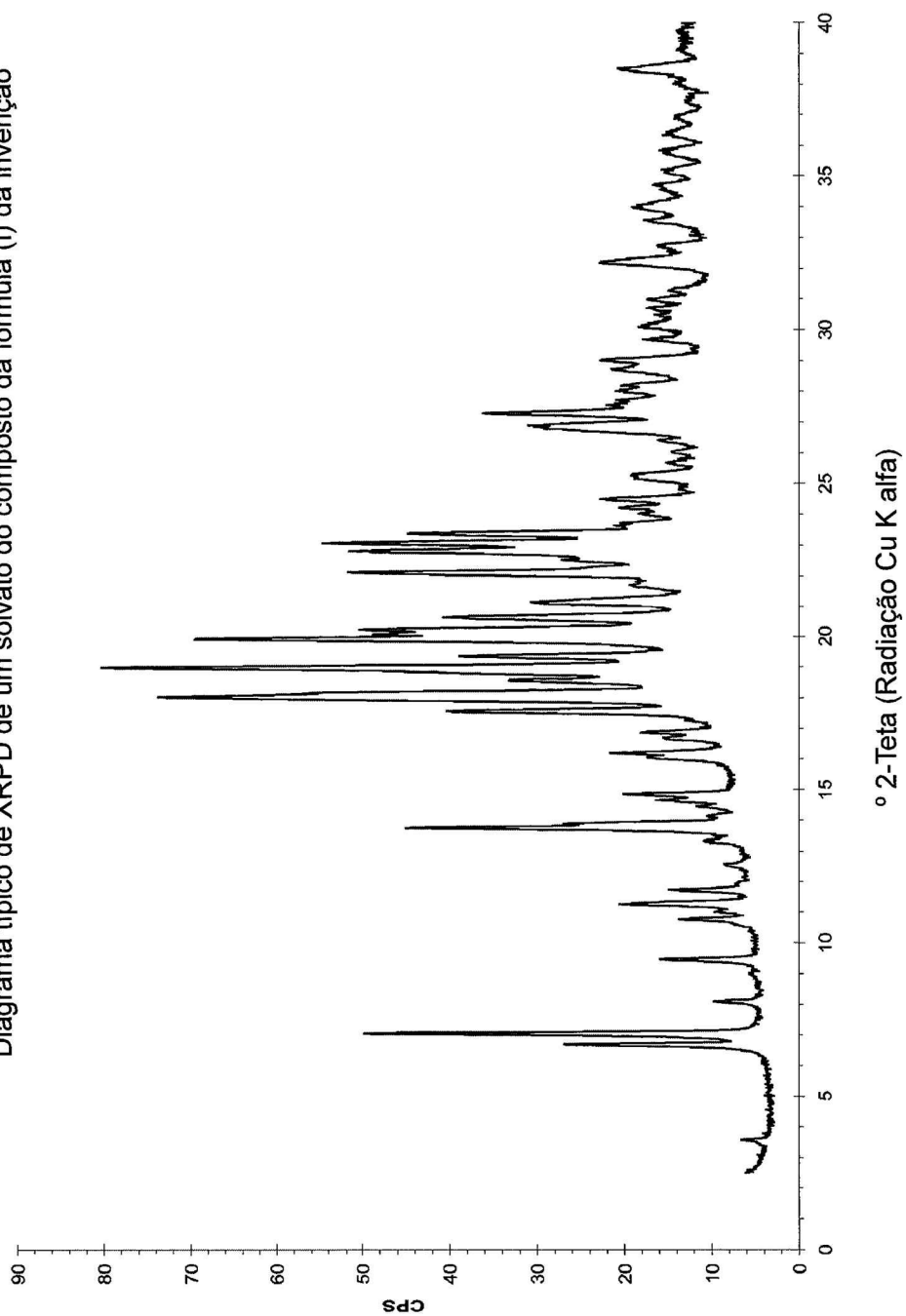


FIG. 1

Diagrama típico de XRPD do composto da fórmula (I) obtido via seu solvato de DMSO de acordo com a invenção

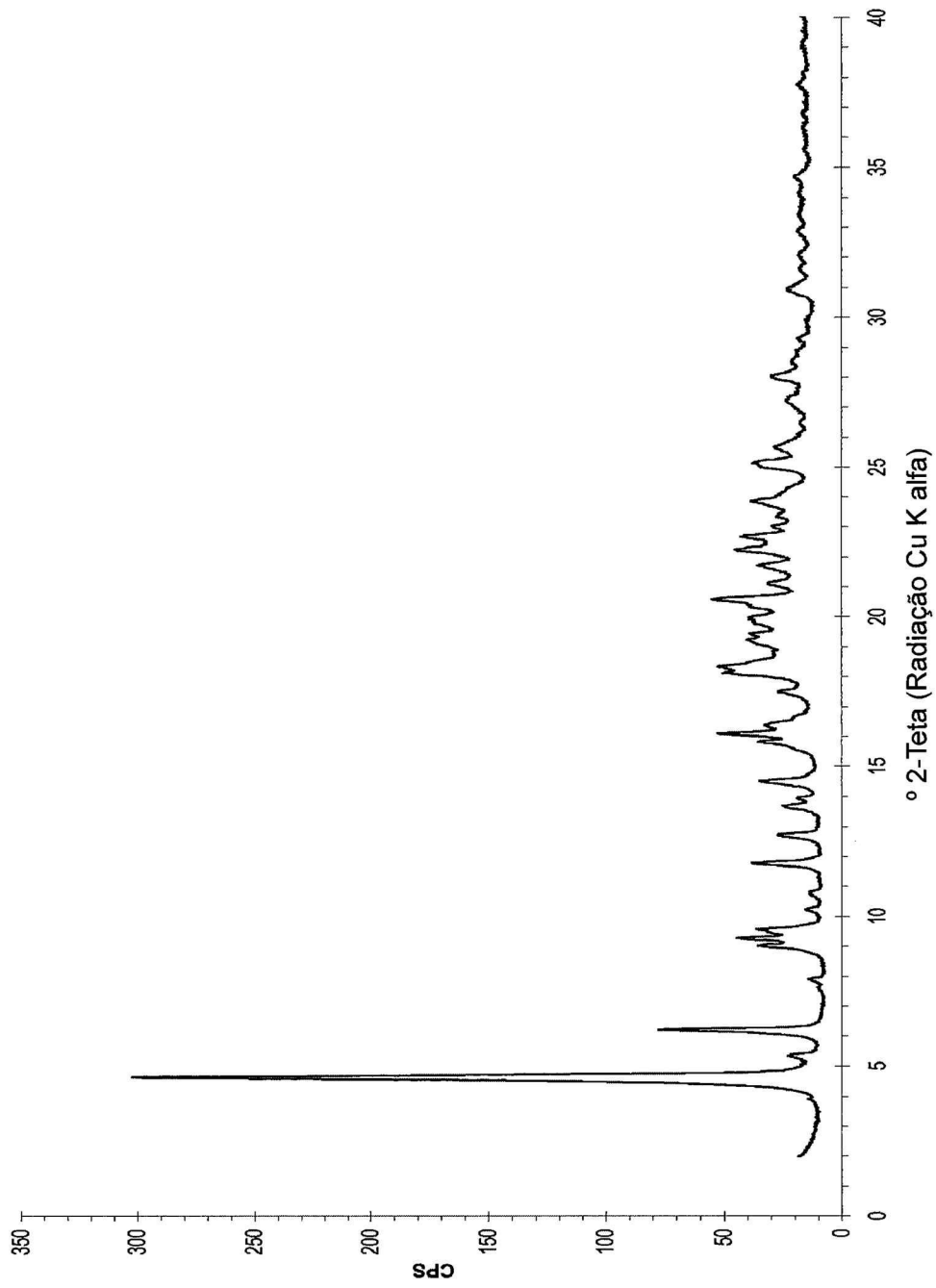


FIG. 2

Molécula do composto da fórmula (I) em três dimensões com esquema de rotulagem (consultar o Exemplo 2)

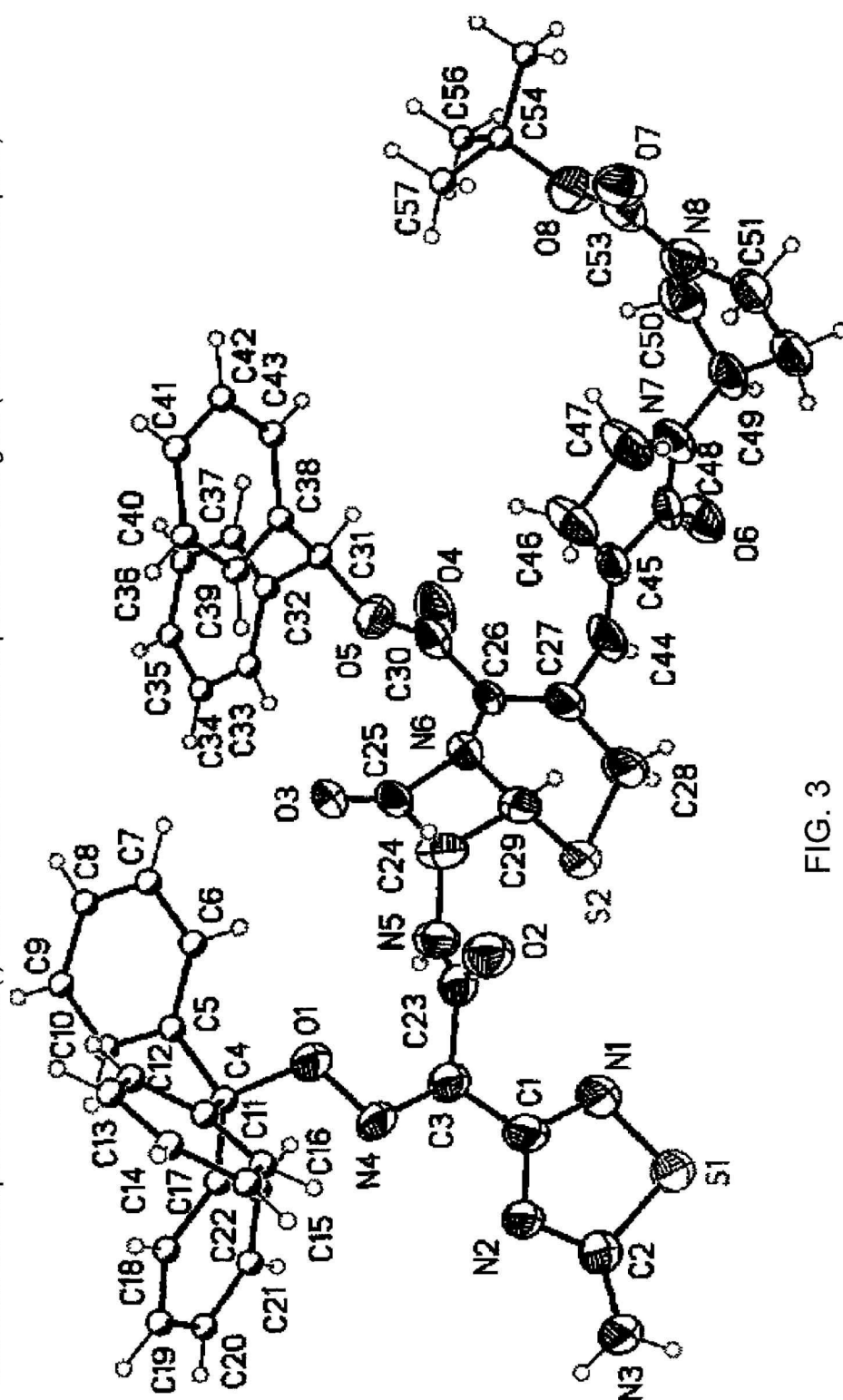
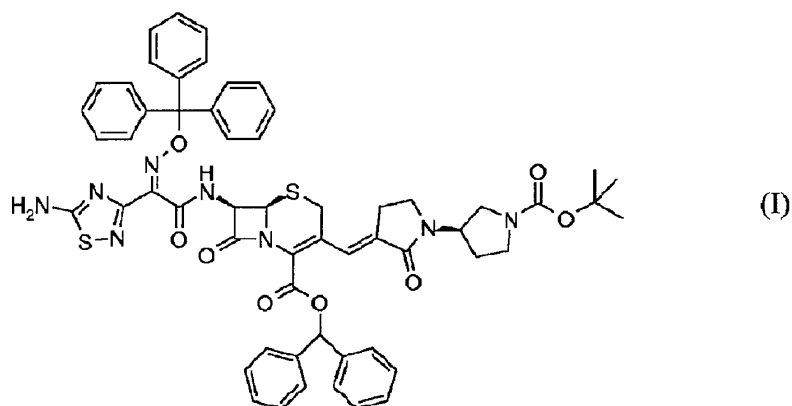


FIG. 3

RESUMO

Patente de Invenção: "SOLVATO DE DMSO NO ESTADO SÓLIDO, COM-
POSTO BENZIDRIL ÉSTER DE ÁCIDO (6R,7R)-7-{2-(5-AMINO-[1,2,4]TIA-
DIAZOL-3-IL)-2-[(Z)-TRITILOXIIMINO]ACETILAMINO}-3-[(R)-1'-TERC-BU-
5 TOXICARBONIL-2-OXO-[1,3]BIPIRROLIDINIL-(3E)-ILI-DENOMETIL]-8-
OXO-5-TIA-1-AZA-BICICLO[4.2.0]OCT-2-ENO-2-CARBOXÍLICO CRISTALI-
NO; SEU PROCESSO DE PRODUÇÃO E USO".

A presente invenção descreve um solvato de DMSO, no estado sólido, de um composto da fórmula (I)



10 o qual é um intermediário útil para preparar os antibióticos de amplo espec-
tro Ceftobiprol e Ceftobiprol Medocaril.