钠原子光谱与其实验数据处理

Abstract: Introduce two ways to deal with the dates of Na atom spectrum experiment. One is Rydberg Form method and the other is Excel 'Goal Seek' method.

Key words: Na atom spectrum; Rydberg form; Excel 'Goal Seek';

一、基本原理与概念：

1、碱金属原子结构:

我们知道，碱金属原子的最外面的壳层上只有一个容易电离的电子，把这个电子成为价电子。而内壳层则都是满壳层，满壳层上的电子不易电离而绕原子核运动，这些电子与原子核形成一个比较坚实的集团，成为原子实。因此，可以提出这样的碱金属原子模型，即一个价电子围绕原子实运动，原子实的净电荷 Z 是 1。因此，碱金属是一种类氢原子，但它有别于氢原子，它的原子实并不密实。原子实是由 Z 个带正电荷的质子和 Z-1 个带负电荷的电子所组成，在价电子场的作用下，正、负电荷的中心不再重合，原子实被极化，这样，价电子不仅受到库电场的作用，还将受到偶极距的作用，即价电子的势能成为

$$V=-\frac{e^2}{r}-C\frac{e^2}{r^2}$$

式中 C 是一个与原子实极化程度有关的一个常数。由于价电子的势能增加了极化能这一项，类氢原子的能级将为

$$E_n=-hcR_H\frac{1}{n'^2}$$

式中 n'成为有效量子数。同时，价电子的轨道将能在原子实中贯穿，电子进入原子实内时，所受的作用力比在外面时的大，所以贯穿轨道对应的能量应比同一主量子数 n 的非贯穿轨道的能量要低一些。显然，只有在主量子数 n 不大时，上述两种效应才显著。

因此上式中的 n'=n+Δ ，n 为正整数，Δ 称为量子亏损，对应于 l=0,1,2,3 时的Δ 值分别用Δ s,Δ p,Δ d,Δ f 来表示。

2、钠原子光谱：

我们一般可以观察到钠原子光谱中的四个谱线系：

主线系：相应于 np 向 3s 的跃迁。n=3,4,5,…。在可见光仅一条谱线，波长约为 589.3 nm，其余均在紫外区。特点为谱线光强很大。

锐线系：相应于 ns 向 3p 的跃迁。n =4,5,6,…。第一条谱线波长约为 818.9 nm，其余均在可见光区域。特点为谱线强度较弱，但边缘比较清晰。

漫线系：相应于 nd 向 3p 的跃迁。n =3,4,5,…。第一条谱线波长约为 1139.3 nm，其余均在可见光区域。特点为谱线较粗且边缘模糊。

基线系：相应于 nf 向 3d 的跃迁。n=4,5,6,…。所有谱线均在红外区。特点为谱线强度很弱。

各谱线系的波数公式为：

主线系：$n^2S\rightarrow 3^2P$ 跃迁，$\sigma=\frac{R}{(3-\Delta s)}-\frac{R}{(n-\Delta p)},n\geq 3$

锐线系：$n^2P \to 3^2S$ 跃迁，$\sigma = \dfrac{R}{(3-\Delta p)} - \dfrac{R}{(n-\Delta s)}, n \geq 4$

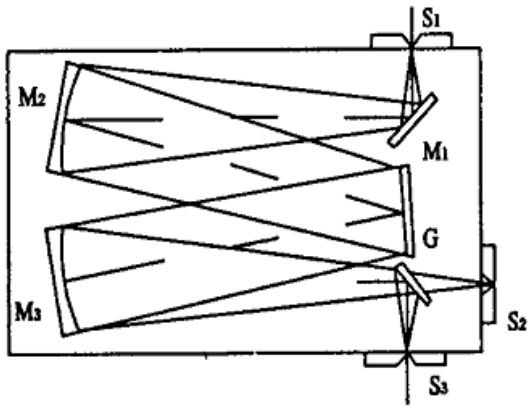
漫线系：$n^2D \to 3^2P$ 跃迁，$\sigma = \dfrac{R}{(3-\Delta p)} - \dfrac{R}{(n-\Delta d)}, n \geq 3$

基线系：$n^2F \to 3^2D$ 跃迁，$\sigma = \dfrac{R}{(3-\Delta d)} - \dfrac{R}{(n-\Delta f)}, n \geq 4$

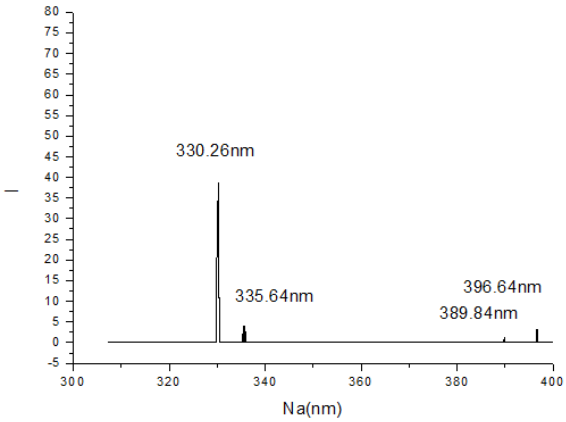
二、实验和数据记录：

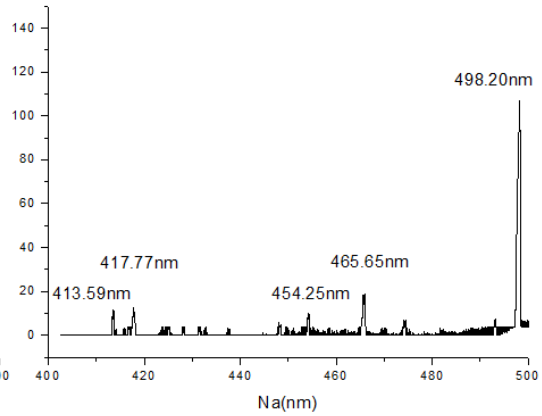
1、实验仪器：

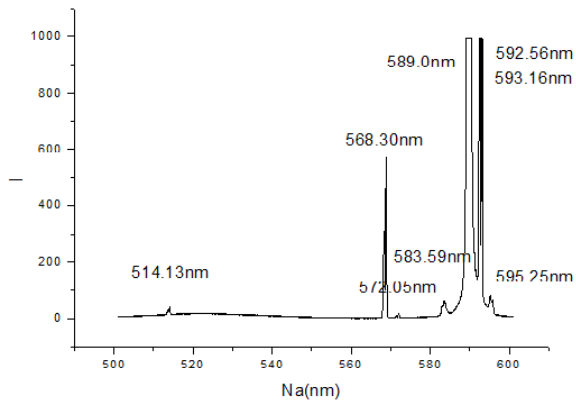
44W 型平面光栅光谱仪采用水平非对称光学系统，光源发出的光束经过透镜 T 聚光后，均匀地照明入射狭缝 S1，由于 S1 位于凹面反射镜 M2 的焦平面上，因此光束经过 M2 反射后成为一束平行光，照射到平面光栅 G。凹面反射镜 M3 将衍射光汇聚到它的焦平面（出射缝 S2/S3）上。

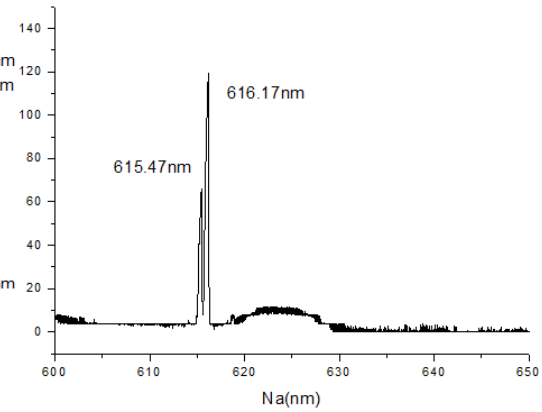


2、数据记录和钠原子光谱图：



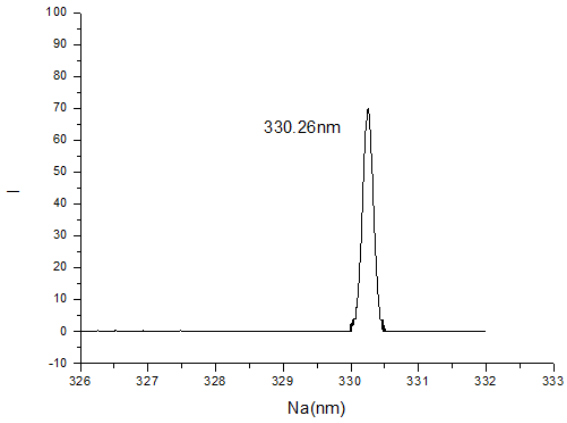


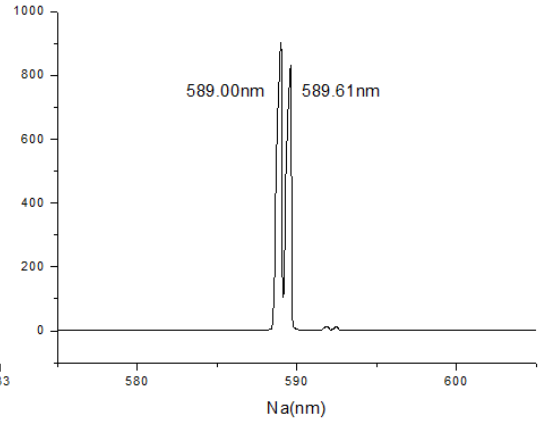




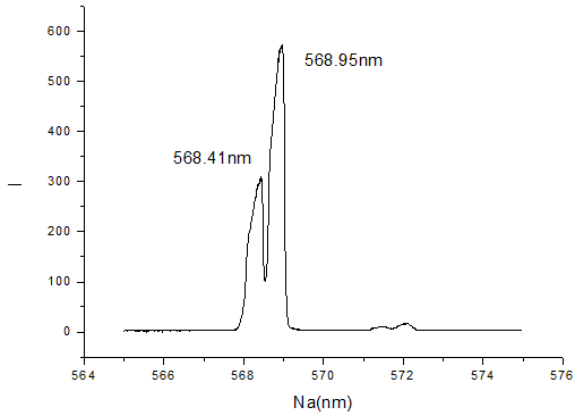
利用在原子与分子数据库中（Http://www.camdb.ac.cn/）的 300-650nm 的钠光谱与实验测得的光谱进行对照，并确定六组主要的谱线系：

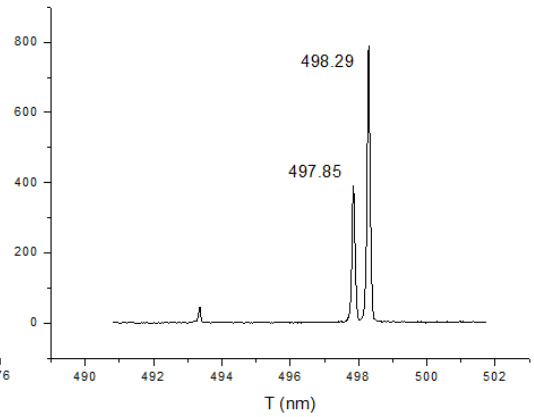
主线系：3p-3s 589.00nm 和 589.61nm；4p-3s 330.26nm；



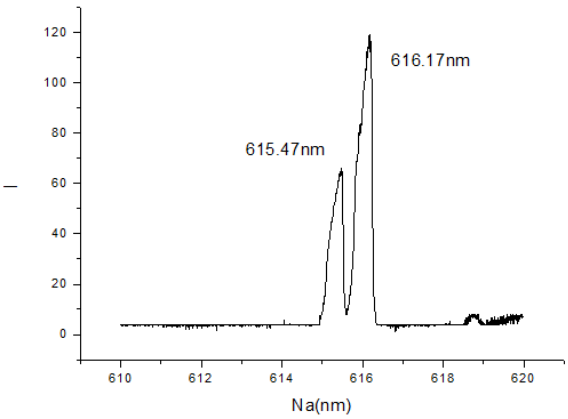


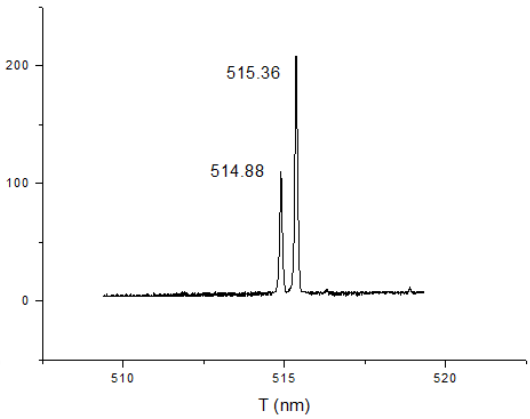
漫线系：4d-3p 568.41nm 和 568.95nm；5d-3p 497.85nm 和 498.29nm；





锐线系：5s-3p 615.47nm 和 616.17nm；6s-3p 514.88nm 和 515.36nm；





三、数据处理：

由于个谱线都有一个固定项，因此，同一谱线系中的谱线的波数差中没有这一固定项。例如，在锐线系中的两条相邻谱线系的波数差为

$$\tilde{v}_1-\tilde{v}_2=R_\infty[\frac{1}{(n+\Delta s)^2}-\frac{1}{(n+1+\Delta s)^2}]$$

$$\tilde{v}_1-\tilde{v}_2=R_\infty[\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{(n'+1)^2}]$$

式中 n'=n+Δ s。根据锐线系中的两根相邻谱线就可以求得Δ s 的值。

为计算方便，令 n'=m+a,其中 m 为整数，a 为正小数，里德伯常数 R=109737.31cm^{-1}。

1、里德伯表插值法：

以锐线系：5s-3p　615.47nm 和 616.17nm（平均 615.82nm）；

6s-3p　514.88nm 和 515.36nm（平均 515.12nm）为例。

$$\tilde{v}_1=\frac{1}{T_1}=\frac{1}{615.82nm}=16238.51/cm$$

$$\tilde{v}_2=\frac{1}{T_1}=\frac{1}{515.12nm}=19412.95/cm$$

$$|\tilde{v}_1-\tilde{v}_2|=3174.44/cm$$

查里德伯表可知，这个值介乎于 3138.65nm 和 3185.27nm，即 n'介乎于 3.64 与 3.66 之间。利用线性插值法可知：

$$a_{12}=0.64-\frac{0.64-0.62}{3185.27-3138.65}*(3185.27-3174.44)=0.635$$

所以(m+a) = n' = 3.635 ;

因此 n_1' = 3.635　n_2' = 4.635　由于 n-Δ $_I$=m+a,令 n=5，得Δ $_I$ = 1.365 即量子缺Δ $_I$ = 1.365。

2、单变量求解法（Excel 软件处理）：

以主线系为例，欲求解（3S-nP）固定项方程：$A_{3s}=\tilde{v}_1+\frac{R}{(3-\Delta p)^2}=\tilde{v}_2+\frac{R}{(4-\Delta p)^2}$ 可以使用 Excel 软件中的单变量求解功能。

“单变量解”是一组命令的组成部分，这些命令有时也称作假设分析工具。如果已知单个公式的预期结果，而用于确定此公式结果的输入值未知，则可使用“单变量求解”功能，通过单击“工具”菜单上的“单变量求解”即可使用“单变量求解”功能。当进行单变量求解时，Microsoft Excel 会不断改变特定单元格中的值，直到依赖于此单元格的公式返回所需的结果为止。

启动并进入 Excel 软件，设计并输入各表头项目，在 C3：D8 区域依次输入实验测得的各谱线（双线）波长（nm）；在 E3：F8 区域分别计算出各谱线的平均波长和波数（1/cm），在 I3：I8 区域输入各谱线对应的主量子数 n；在 H3 单元格输入量子缺Δ p 数“1”（初值），在 H4 单元格输入“=H3”，在 H5 单元格输入量子缺Δ $_D$ 数“1”（初值），在 H6 单元格输入“=H5”，在 H7 单元格输入量子缺Δ $_s$ 数“1”（初值），在 H8 单元格输入“=H7”；在 G3 单元格输入计算式“$=F3+109737.31/(I3-H3)\wedge 2$”，确认后得到固定项 A_{3s} 的值（初值），

复制此式至 G4：G8 区域，得到各固定项 A_{3S}、A_{3P} 的值（初值）；在 J4 单元格输入“=ABS(G3-G4)”，得到主线系两固定项间差的绝对值之和（初值），在 J6 单元格输入“=ABS(G5-G6)”，得到漫线系两固定项间差的绝对值（初值），在 J8 单元格输入“=ABS(G7-G8)”，得到锐线系两固定项间差的绝对值（初值），用科学记数表示。

接下来确定各量子缺和各固定项，选定 J4 单元格，单击工具菜单，在其下拉菜单中单击“单变量求解”，在“单变量求解”对话框中，目标单元格填“J4”，目标值填“0”，可变单元格填“H3”，然后单击“确定”，即得主线系对应的量子缺Δ_P，同理可确定漫线系、锐线系对应的量子缺$\Delta_D$$\Delta_S$，结果见下表：

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	Na原子光谱数据处理 2009-12-9									
2			波长1(nm)	波长2（nm）	平均波长（nm）	波数（1/cm）	固定项(1/cm)	量子缺损△1	n	差值
3	主线系	3p-3s	589.00	589.61	589.31	16969.14	41628.27	0.890	3	
4		4p-3s	330.26	330.26	330.26	30279.17	41628.27	0.890	4	4.41E-05
5	漫线系	4d-3p	568.41	568.95	568.68	17584.58	24491.94	0.014	4	
6		5d-3p	497.85	498.29	498.07	20077.50	24491.94	0.014	5	4.00E-07
7	锐线系	5s-3p	615.47	616.17	615.82	16238.51	24525.48	1.361	5	
8		6s-3p	514.88	515.36	515.12	19412.95	24512.25	1.361	6	1.32E+01

一些说明：单变量求解即是求 J 列 方程 $(\tilde{v}_1+\frac{R}{(3-\Delta p)^2})-(\tilde{v}_2+\frac{R}{(4-\Delta p)^2})=0$ 时自变量 H 列（即Δ p）的值，而通过 excel 选项-数据中设置误差宽容度等调整计算的精度。

四、结论：

从上面的计算过程来看， 用里德堡表插值法进行计算量子缺比较繁琐，用 Excel 软件进行数值计算过程简单。从计算的结果来看，Excel 的运算精度要优于里德堡插值表法 。这是显然的， 因为里德堡表法里列出的波数只保留到小数点后第二位， 而且有效量子数的划分也是以 0.02 为单位，还要用到线性插值法进行计算，这就限制了运算精度的提高。

参考文献：

1、戴道宣，戴乐山，《近代物理实验》，高等教育出版社，2006 年 7 月，第二次印刷；

2、高铁军，朱俊孔，《近代物理实验》，山东大学出版社，2000 年，第一版；

3、黄振广，杨旭，郭玉刚，《钠原子光谱数据处理方法的研究》，《国际物理教育通讯》，第 40 期，2007 年 11 月；

4、郭金水，曹慧珍，《利用 Excel 快捷处理钠原子光谱实验数据》，《赣南师范学院学报》，第 3 期，2003 年；

5、刘小平，赖秀娟，张正贺，徐荣仔，《用 WDMI 型光栅单色仪研究钠原子光谱》，《湛江师范学院学报》，第 28 卷，第 3 期，2007 年；

附：里德伯表

表 1.2.1 里德伯表 $109\,737.31/(m+a)^2$

a	1 m	12	2	23	3	34	4	45	5	56	6	67	7	78	8	89	9	9 10 m	10	a
0.00	109 737.31	82 302.98	27 434.33	15 241.30	12 193.03	5 334.45	6 858.58	2 469.09	4 389.49	1 341.23	3 048.26	808.72	2 239.54	524.89	1 714.65	359.87	1 354.78	257.41	1 097.37	0.00
0.02	105 476.08	78 582.32	26 893.76	14 861.69	12 032.07	5 241.56	6 790.51	2 435.92	4 354.59	1 326.55	3 028.04	801.25	2 226.79	520.69	1 706.10	357.32	1 348.78	255.78	1 093.00	0.20
0.04	101 458.31	75 089.29	26 369.02	14 494.74	11 874.28	150.84	6 723.44	2 403.35	4 320.09	1 312.07	3 008.02	793.86	2 214.16	516.53	1 697.63	354.81	1 342.82	254.17	1 088.65	0.40
0.06	97 665.81	71 806.33	25 859.48	14 139.92	11 719.56	5 062.20	6 657.36	2 371.35	4 286.01	1 297.81	2 988.20	786.57	2 210.63	512.42	1 689.21	352.31	1 336.90	252.58	1 084.32	0.06
0.08	94 082.06	68 717.48	25 364.58	13 796.72	11 567.86	4 975.61	6 592.25	2 339.92	4 252.33	1 283.76	2 968.57	779.36	2 189.21	508.35	1 680.86	349.85	1 331.01	250.99	1 080.2	0.08
0.10	90 691.99	65 808.25	24 883.74	13 464.67	11 419.07	4 890.97	6 528.10	2 309.06	4 219.04	1 269.91	2 949.13	772.23	2 176.90	504.33	1 672.57	347.40	1 325.17	249.42	1 075.75	0.10
0.12	87 481.91	63 065.46	24 416.45	13 143.31	11 273.14	4 808.27	6 464.87	2 278.72	4 186.15	1 256.26	2 929.89	765.21	2 164.68	500.34	1 664.34	344.98	1 319.36	247.86	1 071.50	0.12
0.14	84 439.30	60 477.10	23 962.20	12 832.20	11 130.00	4 727.41	6 402.56	2 248.93	4 153.63	1 242.80	2 910.83	758.26	2 152.57	496.40	1 656.17	342.57	1 313.60	246.32	1 067.28	0.14
0.16	81 552.70	58 032.19	23 520.51	12 530.96	10 989.55	4 648.41	6 341.14	2 219.64	4 121.50	1 229.54	2 891.96	751.40	2 140.56	492.50	1 648.06	340.19	1 307.87	244.79	1 063.08	0.16
0.18	78 811.63	55 720.71	23 090.92	12 239.16	10 851.76	4 571.15	6 280.61	2 190.88	4 089.73	1 216.45	2 873.28	744.62	2 128.66	488.65	1 640.01	337.84	1 302.17	243.26	1 058.91	0.18
0.20	76 206.46	53 533.46	22 673.00	11 956.47	10 716.53	4 495.59	6 220.94	2 162.61	4 058.33	1 203.56	2 854.77	737.92	2 116.85	484.83	1 632.02	335.50	1 296.52	241.76	1 054.76	0.20
0.22	73 728.37	51 462.06	22 266.31	11 682.49	10 583.82	4 421.71	6 162.11	2 134.82	4 027.29	1 190.85	2 836.44	731.31	2 105.13	481.04	1 624.09	333.19	1 290.90	240.26	1 050.64	0.22
0.24	71 369.22	49 498.74	21 870.48	11 416.92	10 453.56	4 349.45	6 104.11	2 107.50	3 996.61	1 178.32	2 818.29	724.77	2 093.52	477.30	1 616.22	330.90	1 285.32	238.78	1 046.54	0.24
0.26	69 121.51	47 636.41	21 485.10	11 159.41	10 325.69	4 278.76	6 046.93	2 080.66	3 966.27	1 165.96	2 800.31	718.31	2 082.00	473.60	1 608.40	328.63	1 279.77	237.31	1 042.46	0.26
0.28	66 978.34	45 868.52	21 109.82	10 909.67	10 200.15	4 209.60	5 990.55	2 054.27	3 936.28	1 153.78	2 782.50	711.92	2 070.58	469.94	1 600.64	326.38	1 274.26	235.85	1 038.41	0.28
0.30	64 933.32	44 189.03	20 744.29	10 667.40	10 076.89	4 141.94	5 934.95	2 028.32	3 906.63	1 141.77	2 764.86	705.61	2 059.25	466.31	1 592.94	324.15	1 268.79	234.41	1 034.38	0.30
0.32	62 980.55	42 592.38	20 388.17	10 432.32	9 955.85	4 075.72	5 880.13	2 002.82	3 877.31	1 129.92	2 747.39	699.38	2 048.01	432.72	1 585.29	321.94	1 263.35	232.98	1 030.37	0.32
0.34	61 114.56	41 073.41	20 041.15	10 204.18	9 836.97	4 010.91	5 826.06	1 977.73	3 848.33	1 118.25	2 730.08	693.22	2 036.86	459.17	1 577.60	319.75	1 257.94	231.55	1 026.39	0.34
0.36	59 330.29	39 627.38	19 702.91	9 982.70	9 720.21	3 947.48	5 772.73	1 953.07	3 819.66	1 106.72	2 712.94	687.13	2 025.81	455.66	1 570.15	317.58	1 252.57	230.14	1 022.43	0.36
0.38	57 623.04	38 249.88	19 373.16	9 767.64	9 605.52	3 885.39	5 720.13	1 928.82	3 791.31	1 095.35	2 695.96	681.12	2 014.84	452.17	1 562.67	315.43	1 247.24	228.74	1 018.50	0.38
0.40	55 988.42	36 936.80	19 051.62	9 558.77	9 492.85	3 824.60	5 668.25	1 904.97	3 763.28	1 084.15	2 679.13	675.16	2 003.97	448.74	1 555.23	313.30	1 241.93	227.35	1 014.58	0.40
0.42	54 422.39	35 684.38	18 738.01	9 355.87	9 382.14	3 765.07	5 617.07	1 881.51	3 735.56	1 073.09	2 662.47	669.29	1 993.18	445.33	1 547.85	311.18	1 236.67	225.98	1 010.69	0.42
0.44	53 921.16	34 489.07	18 432.09	9 158.72	9 273.37	3 706.79	5 566.58	1 858.44	3 708.14	1 062.18	2 645.96	663.48	1 982.48	441.95	1 540.53	309.10	1 231.43	224.61	1 006.82	0.44
0.46	51 481.19	33 347.59	18 133.60	8 967.13	9 166.47	3 649.70	5 516.77	1 835.74	3 681.03	1 051.43	2 629.60	657.74	1971.86	438.61	1 533.25	307.02	1 226.23	223.25	1 002.98	0.46
0.48	50 099.21	32 256.91	17 842.30	8 780.89	9 061.41	3 593.79	5 467.62	1 813.41	3 654.21	1 040.82	2 613.39	652.06	1 961.33	435.30	1 526.03	304.97	1 221.06	221.91	999.15	0.48
0.50	48 772.14	31 214.17	17 557.97	8 599.82	8 958.15	3 539.02	5 419.13	1 791.45	3 627.68	1 030.35	2 579.33	646.44	1 950.89	432.03	1 518.86	302.93	1 215.93	220.58	995.35	0.50
0.52	47 497.10	30 216.72	17 280.38	8 423.74	8 856.64	3 485.36	5 371.28	1 769.84	3 601.44	1 020.02	2 581.42	640.90	1 940.52	428.79	1 511.73	300.91	1 210.82	219.25	991.57	0.52
0.54	46 271.42	29 262.10	17 009.32	8 252.47	8 756.85	3 432.79	5 324.06	1 748.58	3 575.48	1 009.82	2 565.66	635.42	1 930.24	425.58	1 504.66	298.91	1 205.75	217.94	987.81	0.54
0.56	45 092.58	28 348.00	16 744.58	8 085.85	8 658.73	3 381.27	5 277.46	1 727.65	3 549.81	999.77	2 550.04	630.00	1 920.04	422.40	1 497.64	296.93	1 200.71	216.64	984.07	0.56
0.58	43 958.22	27 472.24	16 485.98	7 923.72	8 562.26	3 330.79	5 231.47	1 707.06	3 524.41	989.85	2 534.56	624.64	1 909.92	419.26	1 490.66	294.96	1 195.70	215.35	980.35	0.58
0.60	42 866.14	26 632.81	16 233.33	7 765.94	8 467.39	3 281.32	5 186.07	1 686.79	3 499.28	980.06	2 519.22	619.34	1 899.88	416.14	1 483.74	293.01	1 190.73	214.07	976.66	0.60
0.62	41 814.25	25 827.81	15 986.44	7 612.36	8 374.08	3 232.81	5 141.27	1 666.86	3 474.41	970.39	2 504.02	614.10	1 889.92	413.06	1 476.86	291.08	1 185.78	212.80	972.98	0.62
0.64	40 800.61	25 055.47	15 745.14	7 462.83	8 282.31	3 185.27	5 097.04	1 647.22	3 449.82	960.86	2 488.96	608.92	1 880.04	410.01	1 470.03	289.17	1 180.86	211.53	969.33	0.64
0.66	39 823.38	24 314.12	15 509.26	7 317.21	8 192.05	3 138.66	5 053.39	1 627.91	3 425.48	951.44	2 474.04	603.80	1 870.24	406.99	1 463.25	287.27	1 175.98	210.29	965.69	0.66
0.68	38 880.85	23 602.21	15 278.64	7 175.40	8 103.24	3 092.95	5 010.29	1 608.89	3 401.40	942.16	2 459.24	598.73	1 860.51	404.00	1 456.51	285.38	1 171.13	209.05	962.08	0.68
0.70	37 971.39	22 918.30	15 053.09	7 037.22	8 015.87	3 048.13	4 967.74	1 590.17	3 377.57	932.99	2 444.58	593.72	1 850.86	401.03	1 449.83	283.53	1 166.30	207.81	958.49	0.70
0.72	37 093.47	22 260.90	14 832.57	6 902.66	7 929.91	3 004.18	4 925.73	1 571.74	3 353.99	923.94	2 430.05	588.77	1 841.28	398.10	1 443.18	281.67	1 161.51	206.59	954.92	0.72
0.74	36 245.64	21 628.81	14 616.83	6 771.50	7 845.33	2 961.08	4 884.25	1 553.59	3 330.66	915.01	2 415.65	583.87	1831.78	395.19	1 436.59	279.85	1 156.74	205.38	951.36	0.74
0.76	35 426.56	21 020.80	14 405.76	6 643.67	7 762.09	2 918.80	4 843.29	1 535.72	3 307.57	906.19	2 401.38	579.03	1 822.35	392.32	1 430.03	278.02	1 152.01	204.18	947.83	0.76
0.78	34 634.93	20 435.70	14 199.23	6 519.06	7 680.17	2 877.33	4 802.84	1 518.12	3 284.72	897.49	2 387.23	574.24	1 812.99	389.46	1 423.53	276.23	1 147.30	202.99	944.31	0.78
0.80	33 869.54	19 872.43	13 997.11	6 397.57	7 598.54	2 836.64	4 762.90	1 500.79	3 262.11	888.90	2 373.21	569.51	1 803.70	386.64	1 417.06	274.44	1 142.62	201.80	940.82	0.80
0.82	33 129.24	19 329.97	13 799.27	6 279.10	7 520.17	2 796.71	4 723.46	1 483.73	3 239.73	880.42	2 359.31	564.82	1 794.49	383.85	1 410.64	272.67	1 137.97	200.62	937.35	0.82
0.84	32 412.96	18 807.36	13 605.60	6 163.55	7 442.04	2 757.54	4 684.50	1 446.93	3 217.57	872.03	2 345.54	560.19	1 785.35	381.08	1 404.27	270.92	1 133.35	199.46	933.89	0.84
0.86	31 719.65	18 303.68	13 415.97	6 050.85	7 365.12	2 719.09	4 646.03	1 450.38	3 195.65	863.77	2 331.88	555.61	1 776.27	378.34	1 397.93	269.17	1 128.76	198.31	930.45	0.86
0.88	31 048.36	17 818.07	13 230.29	5 940.91	7 289.38	2 681.36	4 608.02	1 434.07	3 173.95	855.61	2 318.34	551.07	1 767.27	375.63	1 391.64	267.45	1 124.19	197.15	927.04	0.88
0.90	30 398.15	17 349.72	13 048.43	5 833.62	7 214.81	2 644.33	4 570.48	1 418.02	3 152.46	847.54	2 304.92	546.59	1 758.33	372.93	1 385.40	265.75	1 119.65	196.01	923.64	0.90
0.92	29 768.15	16 897.85	12 870.30	5 728.92	7 141.38	2 607.98	4 533.40	1 402.20	3 131.20	839.58	2 291.62	542.16	1 749.46	370.27	1 379.19	264.05	1 115.14	194.88	920.26	0.92
0.94	29 157.54	16 461.75	12 695.79	5 626.73	7 069.06	2 572.29	4 496.77	1 386.62	3 110.15	831.72	2 278.43	537.77	1 740.66	367.63	1 373.03	262.37	1 110.66	193.76	916.90	0.94
0.96	28 565.52	16 040.72	12 524.80	5 526.96	6 997.84	2 537.26	4 460.58	1 371.27	3 089.31	823.96	2 265.35	533.43	1 731.92	365.02	1 366.90	260.69	1 106.21	192.66	913.55	0.96
0.98	27 991.35	15 634.10	12 357.25	5 429.56	6 927.69	2 502.87	4 424.82	1 356.14	3 068.68	816.29	2 252.39	529.14	1 723.25	362.43	1 360.82	259.04	1 101.78	191.55	910.23	0.98