

Supporting Information

Analysis of the Rotational Structure in the High-Resolution Infrared Spectrum of *trans*-Hexatriene-1-¹³C₁; a Semiexperimental Equilibrium Structure for the C₆ Backbone of *trans*-Hexatriene

Norman C. Craig^a, Hengfeng Tian^a, and Thomas A. Blake^b

^aDepartment of Chemistry and Biochemistry, Oberlin College, Oberlin, Ohio 44074

^bPacific Northwest National Laboratory, Richland, Washington 99352

Figure S1. Gas-phase infrared spectrum of *trans*-hexatriene-1-¹³C₁; 20 Torr in a 10 cm cell with 0.1 cm⁻¹ resolution. Observable C-type bands are designated with mode numbers.

Table S2. Lines assigned in the C-type band of *trans*-hexatriene-1-¹³C₁ at 1011 cm⁻¹.

Table S2. Fit of ground state rotational constants to a Hamiltonian for ν_{26} (1011 cm⁻¹) and ν_{30} (894 cm⁻¹) of *trans*-hexatriene-1-¹³C₁.

Table S3. Fit of upper state rotational constants to lines for the C-type band at ν_{30} (894 cm⁻¹) of *trans*-hexatriene-1-¹³C₁, supplemented with lines not used in upper state fit but used for GSCDs.

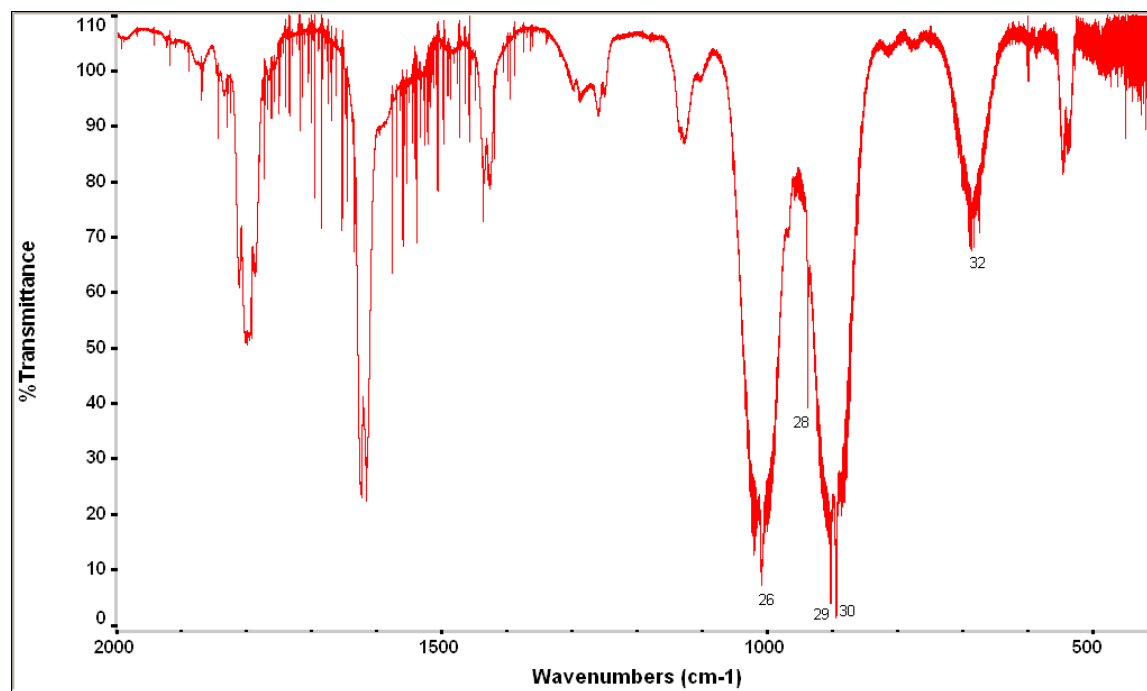


Figure S1

Table S1. Lines in the C-type band at 1011 cm⁻¹ of trans-hexatriene-1-13C.

1015.155606	4	3	1	3	2	1	1017.253511	9	4	6	8	3	6
1015.326777	6	3	3	5	2	3	1017.339110	10	4	7	9	3	7
1015.496161	8	3	5	7	2	5	1017.424646	11	4	8	10	3	8
1015.582139	9	3	6	8	2	6	1017.509900	12	4	9	11	3	9
1015.666763	10	3	7	9	2	7	1017.595048	13	4	10	12	3	10
1015.751592	11	3	8	10	2	8	1017.680395	14	4	11	13	3	11
1015.836343	12	3	9	11	2	9	1017.765768	15	4	12	14	3	12
1015.920813	13	3	10	12	2	10	1017.851321	16	4	13	15	3	13
1016.005575	14	3	11	13	2	11	1017.936915	17	4	14	16	3	14
1016.088675	15	3	12	14	2	12	1018.021914	18	4	15	17	3	15
1016.173300	16	3	13	15	2	13	1018.107447	19	4	16	18	3	16
1016.340991	18	3	15	17	2	15	1018.192899	20	4	17	19	3	17
1016.424733	19	3	16	18	2	16	1018.278290	21	4	18	20	3	18
1016.587966	21	3	18	20	2	18	1018.363282	22	4	19	21	3	19
1016.670233	22	3	19	21	2	19	1018.448476	23	4	20	22	3	20
1016.832443	24	3	21	23	2	21	1018.534674	24	4	21	23	3	21
1016.912377	25	3	22	24	2	22	1018.705463	26	4	23	25	3	23
1016.991439	26	3	23	25	2	23	1018.790276	27	4	24	26	3	24
1017.070628	27	3	24	26	2	24	1018.876044	28	4	25	27	3	25
1017.148007	28	3	25	27	2	25	1018.961507	29	4	26	28	3	26
1017.225199	29	3	26	28	2	26	1019.132175	31	4	28	30	3	28
1017.301644	30	3	27	29	2	27	1019.218048	32	4	29	31	3	29
1017.376851	31	3	28	30	2	28	1019.303091	33	4	30	32	3	30
1017.451333	32	3	29	31	2	29	1019.388175	34	4	31	33	3	31
1017.525580	33	3	30	32	2	30	1019.473733	35	4	32	34	3	32
1017.598076	34	3	31	33	2	31	1019.559417	36	4	33	35	3	33
1017.669436	35	3	32	34	2	32	1019.644707	37	4	34	36	3	34
1015.838972	12	3	10	11	2	10	1019.730230	38	4	35	37	3	35
1016.010566	14	3	12	13	2	12	1019.816070	39	4	36	38	3	36
1016.097111	15	3	13	14	2	13	1019.901306	40	4	37	39	3	37
1016.182991	16	3	14	15	2	14	1019.986873	41	4	38	40	3	38
1016.355253	18	3	16	17	2	16	1020.158137	43	4	40	42	3	40
1016.442685	19	3	17	18	2	17	1020.243712	44	4	41	43	3	41
1016.615863	21	3	19	20	2	19	1020.329652	45	4	42	44	3	42
1016.704221	22	3	20	21	2	20	1020.415296	46	4	43	45	3	43
1016.790055	23	3	21	22	2	21	1020.501867	47	4	44	46	3	44
1017.054950	26	3	24	25	2	24	1020.587785	48	4	45	47	3	45
1017.144790	27	3	25	26	2	25	1020.674155	49	4	46	48	3	46
1017.233390	28	3	26	27	2	26	1020.761065	50	4	47	49	3	47
1017.322944	29	3	27	28	2	27	1020.847470	51	4	48	50	3	48
1017.413514	30	3	28	29	2	28	1021.021049	53	4	50	52	3	50
1017.503039	31	3	29	30	2	29	1021.196520	55	4	52	54	3	52
1017.778072	34	3	32	33	2	32	1021.284421	56	4	53	55	3	53
1017.871033	35	3	33	34	2	33	1021.372578	57	4	54	56	3	54
1016.912377	5	4	1	4	3	1	1021.460835	58	4	55	57	3	55
1016.998175	6	4	2	5	3	2	1021.549157	59	4	56	58	3	56
1017.167805	8	4	4	7	3	4	1021.639285	60	4	57	59	3	57
1017.253511	9	4	5	8	3	5	1018.580392	5	5	0	4	4	0
1017.339110	10	4	6	9	3	6	1018.665955	6	5	1	5	4	1
1017.424646	11	4	7	10	3	7	1018.751347	7	5	2	6	4	2
1017.509900	12	4	8	11	3	8	1018.836208	8	5	3	7	4	3
1017.595048	13	4	9	12	3	9	1018.921976	9	5	4	8	4	4
1017.680395	14	4	10	13	3	10	1019.007561	10	5	5	9	4	5
1017.765768	15	4	11	14	3	11	1019.092814	11	5	6	10	4	6
1017.851321	16	4	12	15	3	12	1019.177764	12	5	7	11	4	7
1017.936915	17	4	13	16	3	13	1019.263408	13	5	8	12	4	8
1018.021914	18	4	14	17	3	14	1019.348827	14	5	9	13	4	9
1018.107447	19	4	15	18	3	15	1019.434365	15	5	10	14	4	10
1018.192899	20	4	16	19	3	16	1019.519640	16	5	11	15	4	11
1018.278290	21	4	17	20	3	17	1019.604975	17	5	12	16	4	12
1018.363282	22	4	18	21	3	18	1019.690667	18	5	13	17	4	13
1018.448476	23	4	19	22	3	19	1019.861716	20	5	15	19	4	15
1018.618172	25	4	21	24	3	21	1019.947275	21	5	16	20	4	16
1018.703429	26	4	22	25	3	22	1020.032954	22	5	17	21	4	17
1018.788355	27	4	23	26	3	23	1020.117977	23	5	18	22	4	18
1018.958163	29	4	25	28	3	25	1020.289288	25	5	20	24	4	20
1019.043367	30	4	26	29	3	26	1020.374825	26	5	21	25	4	21
1019.127996	31	4	27	30	3	27	1020.460354	27	5	22	26	4	22
1019.296218	33	4	29	32	3	29	1020.545796	28	5	23	27	4	23
1019.380560	34	4	30	33	3	30	1020.631158	29	5	24	28	4	24
1019.464076	35	4	31	34	3	31	1020.716501	30	5	25	29	4	25
1019.879543	40	4	36	39	3	36	1020.802199	31	5	26	30	4	26
1020.042583	42	4	38	41	3	38	1020.887671	32	5	27	31	4	27
1020.124374	43	4	39	42	3	39	1020.973062	33	5	28	32	4	28
1020.204585	44	4	40	43	3	40	1021.058488	34	5	29	33	4	29
1020.285521	45	4	41	44	3	41	1021.144035	35	5	30	34	4	30
1020.365282	46	4	42	45	3	42	1021.229215	36	5	31	35	4	31
1020.444572	47	4	43	46	3	43	1021.314399	37	5	32	36	4	32
1020.522888	48	4	44	47	3	44	1021.399575	38	5	33	37	4	33
1020.601307	49	4	45	48	3	45	1021.484774	39	5	34	38	4	34
1020.679054	50	4	46	49	3	46	1021.569800	40	5	35	39	4	35
1020.755558	51	4	47	50	3	47	1021.655349	41	5	36	40	4	36
1020.832424	52	4	48	51	3	48	1021.740522	42	5	37	41	4	37
1020.907568	53	4	49	52	3	49	1021.825008	43	5	38	42	4	38
1020.982223	54	4	50	53	3	50	1021.909606	44	5	39	43	4	39
1021.055736	55	4	51	54	3	51	1021.994367	45	5	40	44	4	40
1021.128499	56	4	52	55	3	52	1022.079279	46	5	41	45	4	41
1021.200728	57	4	53	56	3	53	1022.163739	47	5	42	46	4	42
1021.271274	58	4	54	57	3	54	1022.247991	48	5	43	47	4	43
1021.341116	59	4	55	58	3	55	1022.332597	49	5	44	48	4	44
1021.410940	60	4	56	59	3	56	1022.500919	51	5	46	50	4	46
							1022.668486	53	5	48	52	4	48
							1022.835813	55	5	50	54	4	50

Table S1.	1021.478018	61	4	57	60	3	57	1018.580392	5	5	1	4	4	1
	1021.545645	62	4	58	61	3	58	1018.665955	6	5	2	5	4	2
	1016.912377	5	4	2	4	3	2	1018.751347	7	5	3	6	4	3
	1016.998175	6	4	3	5	3	3	1018.836208	8	5	4	7	4	4
	1017.167805	8	4	5	7	3	5	1018.921976	9	5	5	8	4	5
p. 2														
1019.007561	10	5	6	9	4	6		1024.687045	57	6	51	56	5	51
1019.092814	11	5	7	10	4	7		1024.772235	58	6	52	57	5	52
1019.177764	12	5	8	11	4	8		1024.856917	59	6	53	58	5	53
1019.263408	13	5	9	12	4	9		1024.941904	60	6	54	59	5	54
1019.348827	14	5	10	13	4	10		1025.026803	61	6	55	60	5	55
1019.434365	15	5	11	14	4	11		1025.111343	62	6	56	61	5	56
1019.519640	16	5	12	15	4	12		1025.280838	64	6	58	63	5	58
1019.604975	17	5	13	16	4	13		1025.533336	67	6	61	66	5	61
1019.690667	18	5	14	17	4	14		1025.617744	68	6	62	67	5	62
1019.861716	20	5	16	19	4	16		1025.701431	69	6	63	68	5	63
1019.947275	21	5	17	20	4	17		1025.785786	70	6	64	69	5	64
1020.032954	22	5	18	21	4	18		1025.868732	71	6	65	70	5	65
1020.117977	23	5	19	22	4	19		1025.953039	72	6	66	71	5	66
1020.289288	25	5	21	24	4	21		1026.119523	74	6	68	73	5	68
1020.374825	26	5	22	25	4	22		1026.202335	75	6	69	74	5	69
1020.460354	27	5	23	26	4	23		1026.285609	76	6	70	75	5	70
1020.545796	28	5	24	27	4	24		1026.451236	78	6	72	77	5	72
1020.631158	29	5	25	28	4	25		1026.533620	79	6	73	78	5	73
1020.716501	30	5	26	29	4	26		1026.615896	80	6	74	79	5	74
1020.802199	31	5	27	30	4	27		1020.326792	6	6	1	5	5	1
1020.887671	32	5	28	31	4	28		1020.411841	7	6	2	6	5	2
1020.973062	33	5	29	32	4	29		1020.497453	8	6	3	7	5	3
1021.058488	34	5	30	33	4	30		1020.583061	9	6	4	8	5	4
1021.144035	35	5	31	34	4	31		1020.667742	10	6	5	9	5	5
1021.229215	36	5	32	35	4	32		1020.753454	11	6	6	10	5	6
1021.314399	37	5	33	36	4	33		1020.839113	12	6	7	11	5	7
1021.399575	38	5	34	37	4	34		1020.923935	13	6	8	12	5	8
1021.484774	39	5	35	38	4	35		1021.009673	14	6	9	13	5	9
1021.569800	40	5	36	39	4	36		1021.094866	15	6	10	14	5	10
1021.655349	41	5	37	40	4	37		1021.180887	16	6	11	15	5	11
1021.740522	42	5	38	41	4	38		1021.266552	17	6	12	16	5	12
1022.081025	46	5	42	45	4	42		1021.351843	18	6	13	17	5	13
1022.165934	47	5	43	46	4	43		1021.437374	19	6	14	18	5	14
1022.251055	48	5	44	47	4	44		1021.522697	20	6	15	19	5	15
1022.335509	49	5	45	48	4	45		1021.608131	21	6	16	20	5	16
1022.420448	50	5	46	49	4	46		1021.693502	22	6	17	21	5	17
1022.505250	51	5	47	50	4	47		1021.779779	23	6	18	22	5	18
1022.589625	52	5	48	51	4	48		1021.865289	24	6	19	23	5	19
1022.674350	53	5	49	52	4	49		1021.951257	25	6	20	24	5	20
1022.758475	54	5	50	53	4	50		1022.036478	26	6	21	25	5	21
1022.927733	56	5	52	55	4	52		1022.122083	27	6	22	26	5	22
1023.012302	57	5	53	56	4	53		1022.207468	28	6	23	27	5	23
1023.096235	58	5	54	57	4	54		1022.293124	29	6	24	28	5	24
1023.181108	59	5	55	58	4	55		1022.379150	30	6	25	29	5	25
1023.264825	60	5	56	59	4	56		1022.464706	31	6	26	30	5	26
1023.349053	61	5	57	60	4	57		1022.550350	32	6	27	31	5	27
1023.433294	62	5	58	61	4	58		1022.635696	33	6	28	32	5	28
1023.517249	63	5	59	62	4	59		1022.721694	34	6	29	33	5	29
1020.326792	6	6	0	5	5	0		1022.807554	35	6	30	34	5	30
1020.411841	7	6	1	6	5	1		1022.892886	36	6	31	35	5	31
1020.497453	8	6	2	7	5	2		1022.978663	37	6	32	36	5	32
1020.583061	9	6	3	8	5	3		1023.064353	38	6	33	37	5	33
1020.667742	10	6	4	9	5	4		1023.235545	40	6	35	39	5	35
1020.753454	11	6	5	10	5	5		1023.321255	41	6	36	40	5	36
1020.839113	12	6	6	11	5	6		1023.406830	42	6	37	41	5	37
1020.923935	13	6	7	12	5	7		1023.492281	43	6	38	42	5	38
1021.009673	14	6	8	13	5	8		1023.577443	44	6	39	43	5	39
1021.094866	15	6	9	14	5	9		1023.663639	45	6	40	44	5	40
1021.180887	16	6	10	15	5	10		1023.748846	46	6	41	45	5	41
1021.266552	17	6	11	16	5	11		1023.834440	47	6	42	46	5	42
1021.351843	18	6	12	17	5	12		1023.919920	48	6	43	47	5	43
1021.437374	19	6	13	18	5	13		1024.005174	49	6	44	48	5	44
1021.522697	20	6	14	19	5	14		1024.090136	50	6	45	49	5	45
1021.608131	21	6	15	20	5	15		1024.175953	51	6	46	50	5	46
1021.693502	22	6	16	21	5	16		1024.261148	52	6	47	51	5	47
1021.779779	23	6	17	22	5	17		1024.346461	53	6	48	52	5	48
1021.865289	24	6	18	23	5	18		1024.431638	54	6	49	53	5	49
1021.951257	25	6	19	24	5	19		1024.517054	55	6	50	54	5	50
1022.036478	26	6	20	25	5	20		1024.601901	56	6	51	55	5	51
1022.122083	27	6	21	26	5	21		1024.687045	57	6	52	56	5	52
1022.207468	28	6	22	27	5	22		1024.772235	58	6	53	57	5	53
1022.293124	29	6	23	28	5	23		1024.856917	59	6	54	58	5	54
1022.379150	30	6	24	29	5	24		1024.941904	60	6	55	59	5	55
1022.464706	31	6	25	30	5	25		1025.026803	61	6	56	60	5	56
1022.550350	32	6	26	31	5	26		1025.111343	62	6	57	61	5	57
1022.635696	33	6	27	32	5	27		1025.280838	64	6	59	63	5	59
1022.721694	34	6	28	33	5	28		1025.450558	66	6	61	65	5	61
1022.807554	35	6	29	34	5	29		1025.535078	67	6	62	66	5	62
1022.892886	36	6	30	35	5	30		1025.619835	68	6	63	67	5	63
1022.978663	37	6	31	36	5	31		1025.703511	69	6	64	68	5	64
1023.064353	38	6	32	37	5	32		1025.787591	70	6	65	69	5	65
1023.235545	40	6	34	39	5	34		1025.872018	71	6	66	70	5	66
1023.321255	41	6	35	40	5	35		1025.956490	72	6	67	71	5	67
1023.406830	42	6	36	41	5	36		1026.040503	73	6	68	72	5	68
1023.492281	43	6	37	42	5	37		1026.123676	74	6	69	73	5	69
1023.577443	44	6	38	43	5	38		1026.208199	75	6	70	74	5	70
1023.663639	45	6	39	44	5	39		1026.290996	76	6	71	75	5	71
1023.748846	46	6	40	45	5	40		1026.374973	77	6	72	76	5	72

1023.834440	47	6	41	46	5	41
1023.919920	48	6	42	47	5	42
1024.005174	49	6	43	48	5	43
1024.090136	50	6	44	49	5	44
1024.175953	51	6	45	50	5	45
1024.261148	52	6	46	51	5	46
1024.346461	53	6	47	52	5	47
1024.431638	54	6	48	53	5	48
1024.517054	55	6	49	54	5	49
1024.601901	56	6	50	55	5	50

Table S1. p. 3

1022.829805	16	7	9	15	6	9
1022.915513	17	7	10	16	6	10
1023.001293	18	7	11	17	6	11
1023.086730	19	7	12	18	6	12
1023.172224	20	7	13	19	6	13
1023.257647	21	7	14	20	6	14
1023.343521	22	7	15	21	6	15
1023.428805	23	7	16	22	6	16
1023.514730	24	7	17	23	6	17
1023.600690	25	7	18	24	6	18
1023.686104	26	7	19	25	6	19
1023.771628	27	7	20	26	6	20
1023.857694	28	7	21	27	6	21
1023.943139	29	7	22	28	6	22
1024.028877	30	7	23	29	6	23
1024.115055	31	7	24	30	6	24
1024.200625	32	7	25	31	6	25
1024.286402	33	7	26	32	6	26
1024.372312	34	7	27	33	6	27
1024.458016	35	7	28	34	6	28
1024.543721	36	7	29	35	6	29
1024.629334	37	7	30	36	6	30
1024.715351	38	7	31	37	6	31
1024.887156	40	7	33	39	6	33
1024.973088	41	7	34	40	6	34
1025.058777	42	7	35	41	6	35
1025.144492	43	7	36	42	6	36
1025.230373	44	7	37	43	6	37
1025.316243	45	7	38	44	6	38
1025.402372	46	7	39	45	6	39
1025.488104	47	7	40	46	6	40
1025.573818	48	7	41	47	6	41
1025.659604	49	7	42	48	6	42
1025.745413	50	7	43	49	6	43
1025.831162	51	7	44	50	6	44
1025.916994	52	7	45	51	6	45
1026.002740	53	7	46	52	6	46
1026.088654	54	7	47	53	6	47
1026.174341	55	7	48	54	6	48
1026.260001	56	7	49	55	6	49
1026.345140	57	7	50	56	6	50
1026.431500	58	7	51	57	6	51
1026.516694	59	7	52	58	6	52
1026.602520	60	7	53	59	6	53
1026.688092	61	7	54	60	6	54
1026.773502	62	7	55	61	6	55
1026.859701	63	7	56	62	6	56
1026.944625	64	7	57	63	6	57
1027.029962	65	7	58	64	6	58
1027.115642	66	7	59	65	6	59
1027.200838	67	7	60	66	6	60
1027.286240	68	7	61	67	6	61
1027.371424	69	7	62	68	6	62
1027.456785	70	7	63	69	6	63
1027.541754	71	7	64	70	6	64
1027.627302	72	7	65	71	6	65
1027.712149	73	7	66	72	6	66
1027.796965	74	7	67	73	6	67
1027.881790	75	7	68	74	6	68
1027.967258	76	7	69	75	6	69
1028.052105	77	7	70	76	6	70
1028.306441	80	7	73	79	6	73
1023.778728	8	8	0	7	7	0
1023.863707	9	8	1	8	7	1
1023.949110	10	8	2	9	7	2
1024.034481	11	8	3	10	7	3
1024.119922	12	8	4	11	7	4
1024.205216	13	8	5	12	7	5
1024.290962	14	8	6	13	7	6
1024.376404	15	8	7	14	7	7
1024.462015	16	8	8	15	7	8
1024.547464	17	8	9	16	7	9
1024.633031	18	8	10	17	7	10
1024.718690	19	8	11	18	7	11
1024.804799	20	8	12	19	7	12
1024.889944	21	8	13	20	7	13
1024.975707	22	8	14	21	7	14
1025.061492	23	8	15	22	7	15
1025.146989	24	8	16	23	7	16
1025.232831	25	8	17	24	7	17
1025.318677	26	8	18	25	7	18
1025.404676	27	8	19	26	7	19
1025.490553	28	8	20	27	7	20

1026.458974	78	6	73	77	5	73
1026.541811	79	6	74	78	5	74
1026.625409	80	6	75	79	5	75
1022.147048	8	7	1	7	6	1
1022.231860	9	7	2	8	6	2
1022.317011	10	7	3	9	6	3
1022.402985	11	7	4	10	6	4
1022.573371	13	7	6	12	6	6
1022.658998	14	7	7	13	6	7
1022.744903	15	7	8	14	6	8

1026.865624	44	8	36	43	7	36
1026.951619	45	8	37	44	7	37
1027.037934	46	8	38	45	7	38
1027.123917	47	8	39	46	7	39
1027.210123	48	8	40	47	7	40
1027.296133	49	8	41	48	7	41
1027.382078	50	8	42	49	7	42
1027.468352	51	8	43	50	7	43
1027.554308	52	8	44	51	7	44
1027.640332	53	8	45	52	7	45
1027.726303	54	8	46	53	7	46
1027.812496	55	8	47	54	7	47
1027.898481	56	8	48	55	7	48
1027.984501	57	8	49	56	7	49
1028.070875	58	8	50	57	7	50
1028.156643	59	8	51	58	7	51
1028.242868	60	8	52	59	7	52
1028.328856	61	8	53	60	7	53
1028.415213	62	8	54	61	7	54
1028.500814	63	8	55	62	7	55
1028.587092	64	8	56	63	7	56
1028.673119	65	8	57	64	7	57
1028.758952	66	8	58	65	7	58
1028.844872	67	8	59	66	7	59
1028.930848	68	8	60	67	7	60
1029.016900	69	8	61	68	7	61
1029.102711	70	8	62	69	7	62
1029.188787	71	8	63	70	7	63
1029.274316	72	8	64	71	7	64
1029.360178	73	8	65	72	7	65
1029.446410	74	8	66	73	7	66
1029.531743	75	8	67	74	7	67
1029.617870	76	8	68	75	7	68
1029.703486	77	8	69	76	7	69
1029.789215	78	8	70	77	7	70
1029.960805	80	8	72	79	7	72
1030.046270	81	8	73	80	7	73
1030.131897	82	8	74	81	7	74
1030.216985	83	8	75	82	7	75
1030.302483	84	8	76	83	7	76
1030.387825	85	8	77	84	7	77
1030.473013	86	8	78	85	7	78
1030.558480	87	8	79	86	7	79
1030.643582	88	8	80	87	7	80
1030.729073	89	8	81	88	7	81
1025.465560	9	9	0	8	8	0
1025.551274	10	9	1	9	8	1
1025.722248	12	9	3	11	8	3
1025.807975	13	9	4	12	8	4
1025.893465	14	9	5	13	8	5
1025.978951	15	9	6	14	8	6
1026.064651	16	9	7	15	8	7
1026.150884	17	9	8	16	8	8
1026.236216	18	9	9	17	8	9
1026.321931	19	9	10	18	8	10
1026.407866	20	9	11	19	8	11
1026.493571	21	9	12	20	8	12
1026.579343	22	9	13	21	8	13
1026.665051	23	9	14	22	8	14
1026.751075	24	9	15	23	8	15
1026.837202	25	9	16	24	8	16
1026.923176	26	9	17	25	8	17
1027.009255	27	9	18	26	8	18
1027.095200	28	9	19	27	8	19
1027.181134	29	9	20	28	8	20
1027.267477	30	9	21	29	8	21
1027.353632	31	9	22	30	8	22
1027.439472	32	9	23	31	8	23
1027.525844	33	9	24	32	8	24
1027.611556	34	9	25	33	8	25
1027.697976	35	9	26	34	8	26
1027.870527	37	9	28	36	8	28
1027.956754	38	9	29	37	8	29
1028.043291	39	9	30	38	8	30
1028.129309	40	9	31	39	8	31
1028.215844	41	9	32	40	8	32
1028.302185	42	9	33	41	8	33
1028.388309	43	9	34	42	8	34
1028.475076	44	9	35	43	8	35
1028.561786	45	9	36	44	8	36
1028.647927	46	9	37	45	8	37
1028.734218	47	9	38	46	8	38
1028.820609	48	9	39	47	8	39

1025.576255	29	8	21	28	7	21
1025.662052	30	8	22	29	7	22
1025.747842	31	8	23	30	7	23
1025.833796	32	8	24	31	7	24
1025.919879	33	8	25	32	7	25
1026.005712	34	8	26	33	7	26
1026.091202	35	8	27	34	7	27
1026.177323	36	8	28	35	7	28
1026.263620	37	8	29	36	7	29
1026.349609	38	8	30	37	7	30
1026.435589	39	8	31	38	7	31
1026.521809	40	8	32	39	7	32
1026.607371	41	8	33	40	7	33
1026.693459	42	8	34	41	7	34
1026.779658	43	8	35	42	7	35

Table S1. p. 4

1030.205412	64	9	55	63	8	55
1030.292229	65	9	56	64	8	56
1030.378615	66	9	57	65	8	57
1030.464910	67	9	58	66	8	58
1030.551777	68	9	59	67	8	59
1030.637895	69	9	60	68	8	60
1030.724673	70	9	61	69	8	61
1030.811289	71	9	62	70	8	62
1030.897846	72	9	63	71	8	63
1030.984303	73	9	64	72	8	64
1031.071065	74	9	65	73	8	65
1031.157289	75	9	66	74	8	66
1031.243814	76	9	67	75	8	67
1031.330465	77	9	68	76	8	68
1031.416771	78	9	69	77	8	69
1031.503087	79	9	70	78	8	70
1031.589635	80	9	71	79	8	71
1031.675783	81	9	72	80	8	72
1031.849091	83	9	74	82	8	74
1031.935398	84	9	75	83	8	75
1032.022015	85	9	76	84	8	76
1032.107905	86	9	77	85	8	77
1032.194417	87	9	78	86	8	78
1032.280188	88	9	79	87	8	79
1027.105644	10	10	0	9	9	0
1027.191560	11	10	1	10	9	1
1027.277110	12	10	2	11	9	2
1027.362355	13	10	3	12	9	3
1027.448307	14	10	4	13	9	4
1027.534218	15	10	5	14	9	5
1027.619910	16	10	6	15	9	6
1027.705584	17	10	7	16	9	7
1027.792041	18	10	8	17	9	8
1027.877764	19	10	9	18	9	9
1027.963807	20	10	10	19	9	10
1028.050091	21	10	11	20	9	11
1028.136369	22	10	12	21	9	12
1028.222395	23	10	13	22	9	13
1028.308829	24	10	14	23	9	14
1028.394696	25	10	15	24	9	15
1028.653680	28	10	18	27	9	18
1028.740210	29	10	19	28	9	19
1028.826469	30	10	20	29	9	20
1029.086052	33	10	23	32	9	23
1029.172372	34	10	24	33	9	24
1029.258359	35	10	25	34	9	25
1029.345678	36	10	26	35	9	26
1029.432186	37	10	27	36	9	27
1029.518825	38	10	28	37	9	28
1029.605787	39	10	29	38	9	29
1029.692388	40	10	30	39	9	30
1029.779273	41	10	31	40	9	31
1029.865714	42	10	32	41	9	32
1029.953045	43	10	33	42	9	33
1030.039921	44	10	34	43	9	34
1030.127007	45	10	35	44	9	35
1030.213952	46	10	36	45	9	36
1030.300684	47	10	37	46	9	37
1030.387825	48	10	38	47	9	38
1030.474898	49	10	39	48	9	39
1030.561586	50	10	40	49	9	40
1030.649232	51	10	41	50	9	41
1030.735880	52	10	42	51	9	42
1030.823426	53	10	43	52	9	43
1030.910648	54	10	44	53	9	44
1030.997415	55	10	45	54	9	45
1031.084837	56	10	46	55	9	46
1031.172361	57	10	47	56	9	47
1031.259358	58	10	48	57	9	48
1031.346630	59	10	49	58	9	49
1031.434129	60	10	50	59	9	50
1031.521417	61	10	51	60	9	51
1031.608507	62	10	52	61	9	52
1031.696177	63	10	53	62	9	53
1031.783664	64	10	54	63	9	54
1031.871205	65	10	55	64	9	55
1031.958529	66	10	56	65	9	56
1032.046369	67	10	57	66	9	57

1028.907141	49	9	40	48	8	40
1028.993612	50	9	41	49	8	41
1029.079931	51	9	42	50	8	42
1029.166977	52	9	43	51	8	43
1029.253362	53	9	44	52	8	44
1029.339833	54	9	45	53	8	45
1029.426186	55	9	46	54	8	46
1029.512712	56	9	47	55	8	47
1029.599337	57	9	48	56	8	48
1029.686011	58	9	49	57	8	49
1029.772397	59	9	50	58	8	50
1029.859265	60	9	51	59	8	51
1029.945398	61	9	52	60	8	52
1030.032082	62	9	53	61	8	53
1030.118983	63	9	54	62	8	54

1029.890949	26	11	15	25	10	15
1029.977463	27	11	16	26	10	16
1030.065226	28	11	17	27	10	17
1030.152678	29	11	18	28	10	18
1030.239438	30	11	19	29	10	19
1030.326703	31	11	20	30	10	20
1030.413869	32	11	21	31	10	21
1030.501247	33	11	22	32	10	22
1030.589299	34	11	23	33	10	23
1030.676854	35	11	24	34	10	24
1030.764944	36	11	25	35	10	25
1030.852494	37	11	26	36	10	26
1030.939999	38	11	27	37	10	27
1031.027780	39	11	28	38	10	28
1031.116294	40	11	29	39	10	29
1031.203925	41	11	30	40	10	30
1031.292418	42	11	31	41	10	31
1031.380202	43	11	32	42	10	32
1031.468579	44	11	33	43	10	33
1031.556844	45	11	34	44	10	34
1031.644442	46	11	35	45	10	35
1031.733078	47	11	36	46	10	36
1031.910321	49	11	38	48	10	38
1031.998823	50	11	39	49	10	39
1032.086882	51	11	40	50	10	40
1032.175602	52	11	41	51	10	41
1032.263868	53	11	42	52	10	42
1032.352697	54	11	43	53	10	43
1032.441125	55	11	44	54	10	44
1032.530308	56	11	45	55	10	45
1032.618969	57	11	46	56	10	46
1032.707652	58	11	47	57	10	47
1032.796241	59	11	48	58	10	48
1032.885161	60	11	49	59	10	49
1032.974311	61	11	50	60	10	50
1033.151825	63	11	52	62	10	52
1033.241448	64	11	53	63	10	53
1033.329970	65	11	54	64	10	54
1033.508044	67	11	56	66	10	56
1033.597338	68	11	57	67	10	57
1033.685836	69	11	58	68	10	58
1033.775331	70	11	59	69	10	59
1033.864955	71	11	60	70	10	60
1033.953361	72	11	61	71	10	61
1034.042633	73	11	62	72	10	62
1034.132085	74	11	63	73	10	63
1034.221042	75	11	64	74	10	64
1034.310363	76	11	65	75	10	65
1034.398964	77	11	66	76	10	66
1034.488542	78	11	67	77	10	67
1034.577604	79	11	68	78	10	68
1034.666982	80	11	69	79	10	69
1034.755652	81	11	70	80	10	70
1034.934207	83	11	72	82	10	72
1035.023976	84	11	73	83	10	73
1035.113240	85	11	74	84	10	74
1035.202828	86	11	75	85	10	75
1035.380667	88	11	77	87	10	77
1035.470056	89	11	78	88	10	78
1035.559008	90	11	79	89	10	79
1035.648171	91	11	80	90	10	80
1035.736964	92	11	81	91	10	81
1035.826483	93	11	82	92	10	82
1035.915544	94	11	83	93	10	83
1036.093652	96	11	85	95	10	85
1036.182697	97	11	86	96	10	86
1030.795871	12	12	0	11	11	0
1030.881611	13	12	1	12	11	1
1030.967415	14	12	2	13	11	2
1031.052893	15	12	3	14	11	3
1031.138982	16	12	4	15	11	4
1031.225084	17	12	5	16	11	5
1031.310397	18	12	6	17	11	6
1031.396030	19	12	7	18	11	7
1031.481922	20	12	8	19	11	8
1031.568305	21	12	9	20	11	9
1031.654634	22	12	10	21	11	10
1031.740336	23	12	11	22	11	11

1032.133618	68	10	58	67	9	58
1032.221409	69	10	59	68	9	59
1032.309214	70	10	60	69	9	60
1032.396725	71	10	61	70	9	61
1032.484431	72	10	62	71	9	62
1028.592502	11	11	0	10	10	0
1028.678539	12	11	1	11	10	1
1028.764602	13	11	2	12	10	2
1028.851294	14	11	3	13	10	3
1028.937158	15	11	4	14	10	4
1029.022977	16	11	5	15	10	5
1029.109478	17	11	6	16	10	6
1029.195981	18	11	7	17	10	7
1029.282867	19	11	8	18	10	8
1029.369536	20	11	9	19	10	9
1029.455930	21	11	10	20	10	10
1029.542752	22	11	11	21	10	11
1029.629946	23	11	12	22	10	12
1029.716693	24	11	13	23	10	13
1029.803304	25	11	14	24	10	14

Table S1. p. 5

1033.557636	44	12	32	43	11	32
1033.644545	45	12	33	44	11	33
1033.731412	46	12	34	45	11	34
1033.818686	47	12	35	46	11	35
1033.905557	48	12	36	47	11	36
1033.992814	49	12	37	48	11	37
1034.079859	50	12	38	49	11	38
1034.167152	51	12	39	50	11	39
1034.254418	52	12	40	51	11	40
1034.341223	53	12	41	52	11	41
1034.428892	54	12	42	53	11	42
1034.516216	55	12	43	54	11	43
1034.603953	56	12	44	55	11	44
1034.691593	57	12	45	56	11	45
1034.779037	58	12	46	57	11	46
1034.866055	59	12	47	58	11	47
1034.954020	60	12	48	59	11	48
1035.041651	61	12	49	60	11	49
1035.129299	62	12	50	61	11	50
1035.217088	63	12	51	62	11	51
1035.304550	64	12	52	63	11	52
1035.392500	65	12	53	64	11	53
1035.480419	66	12	54	65	11	54
1035.568153	67	12	55	66	11	55
1035.655909	68	12	56	67	11	56
1035.744161	69	12	57	68	11	57
1035.831863	70	12	58	69	11	58
1035.919593	71	12	59	70	11	59
1036.095761	73	12	61	72	11	61
1036.184802	74	12	62	73	11	62
1036.272638	75	12	63	74	11	63
1036.361092	76	12	64	75	11	64
1036.537194	78	12	66	77	11	66
1036.625929	79	12	67	78	11	67
1036.802850	81	12	69	80	11	69
1036.892041	82	12	70	81	11	70
1036.980517	83	12	71	82	11	71
1037.069103	84	12	72	83	11	72
1037.157513	85	12	73	84	11	73
1037.334734	87	12	75	86	11	75
1037.512753	89	12	77	88	11	77
1037.601875	90	12	78	89	11	78
1037.690857	91	12	79	90	11	79
1032.382590	13	13	0	12	12	0
1032.468023	14	13	1	13	12	1
1032.553995	15	13	2	14	12	2
1032.639726	16	13	3	15	12	3
1032.725554	17	13	4	16	12	4
1032.811295	18	13	5	17	12	5
1032.897357	19	13	6	18	12	6
1032.983341	20	13	7	19	12	7
1033.069708	21	13	8	20	12	8
1033.155392	22	13	9	21	12	9
1033.241448	23	13	10	22	12	10
1033.327687	24	13	11	23	12	11
1033.413548	25	13	12	24	12	12
1033.499731	26	13	13	25	12	13
1033.585666	27	13	14	26	12	14
1033.672106	28	13	15	27	12	15
1033.758368	29	13	16	28	12	16
1033.844776	30	13	17	29	12	17
1033.930915	31	13	18	30	12	18
1034.017219	32	13	19	31	12	19
1034.103560	33	13	20	32	12	20
1034.189744	34	13	21	33	12	21
1034.276351	35	13	22	34	12	22
1034.363050	36	13	23	35	12	23
1034.449017	37	13	24	36	12	24
1034.535619	38	13	25	37	12	25
1034.708582	40	13	27	39	12	27
1034.795305	41	13	28	40	12	28
1034.881542	42	13	29	41	12	29
1034.968335	43	13	30	42	12	30

1031.826655	24	12	12	23	11	12
1031.912900	25	12	13	24	11	13
1031.998823	26	12	14	25	11	14
1032.084854	27	12	15	26	11	15
1032.171561	28	12	16	27	11	16
1032.257995	29	12	17	28	11	17
1032.344119	30	12	18	29	11	18
1032.430673	31	12	19	30	11	19
1032.517209	32	12	20	31	11	20
1032.603256	33	12	21	32	11	21
1032.690127	34	12	22	33	11	22
1032.776608	35	12	23	34	11	23
1032.863448	36	12	24	35	11	24
1032.949888	37	12	25	36	11	25
1033.036694	38	12	26	37	11	26
1033.123419	39	12	27	38	11	27
1033.210228	40	12	28	39	11	28
1033.297008	41	12	29	40	11	29
1033.383725	42	12	30	41	11	30
1033.470448	43	12	31	42	11	31

1034.244442	17	14	3	16	13	3
1034.330724	18	14	4	17	13	4
1034.502272	20	14	6	19	13	6
1034.588241	21	14	7	20	13	7
1034.673853	22	14	8	21	13	8
1034.760253	23	14	9	22	13	9
1034.845974	24	14	10	23	13	10
1034.932418	25	14	11	24	13	11
1035.018547	26	14	12	25	13	12
1035.104497	27	14	13	26	13	13
1035.190612	28	14	14	27	13	14
1035.276884	29	14	15	28	13	15
1035.363179	30	14	16	29	13	16
1035.449609	31	14	17	30	13	17
1035.535959	32	14	18	31	13	18
1035.622100	33	14	19	32	13	19
1035.708655	34	14	20	33	13	20
1035.794993	35	14	21	34	13	21
1035.881919	36	14	22	35	13	22
1035.968336	37	14	23	36	13	23
1036.054830	38	14	24	37	13	24
1036.141074	39	14	25	38	13	25
1036.227509	40	14	26	39	13	26
1036.314495	41	14	27	40	13	27
1036.401408	42	14	28	41	13	28
1036.488134	43	14	29	42	13	29
1036.575043	44	14	30	43	13	30
1036.661545	45	14	31	44	13	31
1036.748472	46	14	32	45	13	32
1036.835524	47	14	33	46	13	33
1036.922508	48	14	34	47	13	34
1037.009099	49	14	35	48	13	35
1037.096405	50	14	36	49	13	36
1037.183353	51	14	37	50	13	37
1037.270719	52	14	38	51	13	38
1037.357575	53	14	39	52	13	39
1037.444857	54	14	40	53	13	40
1037.532119	55	14	41	54	13	41
1037.619181	56	14	42	55	13	42
1037.706641	57	14	43	56	13	43
1037.793820	58	14	44	57	13	44
1037.881178	59	14	45	58	13	45
1037.968603	60	14	46	59	13	46
1038.056106	61	14	47	60	13	47
1038.143488	62	14	48	61	13	48
1038.231188	63	14	49	62	13	49
1038.318970	64	14	50	63	13	50
1035.917209	19	15	4	18	14	4
1036.003355	20	15	5	19	14	5
1036.089052	21	15	6	20	14	6
1036.175419	22	15	7	21	14	7
1036.261361	23	15	8	22	14	8
1036.347716	24	15	9	23	14	9
1036.433736	25	15	10	24	14	10
1036.520140	26	15	11	25	14	11
1036.606446	27	15	12	26	14	12
1036.692889	28	15	13	27	14	13
1036.779189	29	15	14	28	14	14
1036.865641	30	15	15	29	14	15
1036.952241	31	15	16	30	14	16
1037.038858	32	15	17	31	14	17
1037.125173	33	15	18	32	14	18
1037.212014	34	15	19	33	14	19
1037.298735	35	15	20	34	14	20
1037.385307	36	15	21	35	14	21
1037.472274	37	15	22	36	14	22
1037.558740	38	15	23	37	14	23
1037.645404	39	15	24	38	14	24
1037.732457	40	15	25	39	14	25
1037.819450	41	15	26	40	14	26
1037.906194	42	15	27	41	14	27
1037.992971	43	15	28	42	14	28
1038.080385	44	15	29	43	14	29

1035.055098	44	13	31	43	12	31
1035.141624	45	13	32	44	12	32
1035.227967	46	13	33	45	12	33
1035.314792	47	13	34	46	12	34
1035.401426	48	13	35	47	12	35
1035.488281	49	13	36	48	12	36
1035.574790	50	13	37	49	12	37
1035.661600	51	13	38	50	12	38
1035.748833	52	13	39	51	12	39
1035.834782	53	13	40	52	12	40
1035.921931	54	13	41	53	12	41
1036.008636	55	13	42	54	12	42
1036.095761	56	13	43	55	12	43
1036.182697	57	13	44	56	12	44
1036.269220	58	13	45	57	12	45
1036.356245	59	13	46	58	12	46
1036.443121	60	13	47	59	12	47
1036.529727	61	13	48	60	12	48
1036.616343	62	13	49	61	12	49
1036.703168	63	13	50	62	12	50
1036.790355	64	13	51	63	12	51
1036.877170	65	13	52	64	12	52
1033.987266	14	14	0	13	13	0
1034.073647	15	14	1	14	13	1
1034.158742	16	14	2	15	13	2

Table S1. p. 6

1040.357156	70	15	55	69	14	55
1040.445103	71	15	56	70	14	56
1040.533278	72	15	57	71	14	57
1040.621590	73	15	58	72	14	58
1040.709595	74	15	59	73	14	59
1040.798043	75	15	60	74	14	60
1040.886704	76	15	61	75	14	61
1041.239750	80	15	65	79	14	65
1041.328075	81	15	66	80	14	66
1041.416809	82	15	67	81	14	67
1041.505410	83	15	68	82	14	68
1041.594670	84	15	69	83	14	69
1041.683168	85	15	70	84	14	70
1038.665166	17	17	0	16	16	0
1038.751187	18	17	1	17	16	1
1038.837731	19	17	2	18	16	2
1038.924275	20	17	3	19	16	3
1039.010917	21	17	4	20	16	4
1039.097684	22	17	5	21	16	5
1039.184112	23	17	6	22	16	6
1039.271428	24	17	7	23	16	7
1039.358297	25	17	8	24	16	8
1039.445428	26	17	9	25	16	9
1039.532474	27	17	10	26	16	10
1039.619522	28	17	11	27	16	11
1039.707478	29	17	12	28	16	12
1039.794360	30	17	13	29	16	13
1039.881639	31	17	14	30	16	14
1039.968946	32	17	15	31	16	15
1040.056285	33	17	16	32	16	16
1040.144421	34	17	17	33	16	17
1040.231737	35	17	18	34	16	18
1040.319466	36	17	19	35	16	19
1040.407225	37	17	20	36	16	20
1040.495003	38	17	21	37	16	21
1040.583184	39	17	22	38	16	22
1040.670887	40	17	23	39	16	23
1040.759020	41	17	24	40	16	24
1040.847518	42	17	25	41	16	25
1040.935528	43	17	26	42	16	26
1041.023823	44	17	27	43	16	27
1041.112554	45	17	28	44	16	28
1041.200923	46	17	29	45	16	29
1041.289376	47	17	30	46	16	30
1041.377993	48	17	31	47	16	31
1041.466705	49	17	32	48	16	32
1041.555243	50	17	33	49	16	33
1041.644393	51	17	34	50	16	34
1041.733216	52	17	35	51	16	35
1041.821807	53	17	36	52	16	36
1041.911010	54	17	37	53	16	37
1042.000016	55	17	38	54	16	38
1042.089592	56	17	39	55	16	39
1042.179097	57	17	40	56	16	40
1042.446565	60	17	43	59	16	43
1042.536462	61	17	44	60	16	44
1042.625931	62	17	45	61	16	45
1042.716045	63	17	46	62	16	46
1042.805605	64	17	47	63	16	47
1042.895853	65	17	48	64	16	48
1042.985641	66	17	49	65	16	49
1043.076139	67	17	50	66	16	50
1043.165937	68	17	51	67	16	51
1043.256724	69	17	52	68	16	52
1043.346159	70	17	53	69	16	53
1006.253140	2	2	0	3	3	0
1006.167385	3	2	1	4	3	1
1005.995206	5	2	3	6	3	3

1038.167360	45	15	30	44	14	30
1038.254227	46	15	31	45	14	31
1038.341444	47	15	32	46	14	32
1038.428749	48	15	33	47	14	33
1038.515742	49	15	34	48	14	34
1038.603116	50	15	35	49	14	35
1038.690786	51	15	36	50	14	36
1038.777855	52	15	37	51	14	37
1038.865003	53	15	38	52	14	38
1038.952481	54	15	39	53	14	39
1039.040276	55	15	40	54	14	40
1039.127646	56	15	41	55	14	41
1039.215250	57	15	42	56	14	42
1039.302854	58	15	43	57	14	43
1039.390412	59	15	44	58	14	44
1039.478081	60	15	45	59	14	45
1039.565959	61	15	46	60	14	46
1039.653871	62	15	47	61	14	47
1039.741375	63	15	48	62	14	48
1039.829220	64	15	49	63	14	49
1039.916708	65	15	50	64	14	50
1040.005262	66	15	51	65	14	51
1040.092754	67	15	52	66	14	52
1040.180848	68	15	53	67	14	53
1040.268896	69	15	54	68	14	54

1003.662712	13	3	10	14	4	10
1003.578159	14	3	11	15	4	11
1003.493251	15	3	12	16	4	12
1003.408719	16	3	13	17	4	13
1003.323997	17	3	14	18	4	14
1003.239956	18	3	15	19	4	15
1003.155226	19	3	16	20	4	16
1003.070393	20	3	17	21	4	17
1002.986061	21	3	18	22	4	18
1002.901917	22	3	19	23	4	19
1002.734068	24	3	21	25	4	21
1002.649758	25	3	22	26	4	22
1002.566186	26	3	23	27	4	23
1002.482904	27	3	24	28	4	24
1002.398972	28	3	25	29	4	25
1002.315455	29	3	26	30	4	26
1002.233079	30	3	27	31	4	27
1002.149424	31	3	28	32	4	28
1002.066767	32	3	29	33	4	29
1001.984798	33	3	30	34	4	30
1001.902076	34	3	31	35	4	31
1001.819238	35	3	32	36	4	32
1004.512302	3	3	1	4	4	1
1004.427141	4	3	2	5	4	2
1004.257268	6	3	4	7	4	4
1004.087295	8	3	6	9	4	6
1004.002367	9	3	7	10	4	7
1003.917215	10	3	8	11	4	8
1003.832245	11	3	9	12	4	9
1003.747576	12	3	10	13	4	10
1003.662712	13	3	11	14	4	11
1003.578159	14	3	12	15	4	12
1003.493251	15	3	13	16	4	13
1003.408719	16	3	14	17	4	14
1003.323997	17	3	15	18	4	15
1003.239956	18	3	16	19	4	16
1003.155226	19	3	17	20	4	17
1003.070393	20	3	18	21	4	18
1002.986061	21	3	19	22	4	19
1002.901917	22	3	20	23	4	20
1002.817188	23	3	21	24	4	21
1002.564092	26	3	24	27	4	24
1002.480106	27	3	25	28	4	25
1002.396338	28	3	26	29	4	26
1002.312374	29	3	27	30	4	27
1002.227920	30	3	28	31	4	28
1002.143974	31	3	29	32	4	29
1001.976074	33	3	31	34	4	31
1001.892336	34	3	32	35	4	32
1001.808885	35	3	33	36	4	33
1002.778541	4	4	0	5	5	0
1002.608642	6	4	2	7	5	2
1002.523437	7	4	3	8	5	3
1002.438001	8	4	4	9	5	4
1002.353051	9	4	5	10	5	5
1002.268398	10	4	6	11	5	6
1002.184104	11	4	7	12	5	7
1002.098822	12	4	8	13	5	8
1001.929327	14	4	10	15	5	10
1001.844461	15	4	11	16	5	11
1001.759805	16	4	12	17	5	12
1001.675104	17	4	13	18	5	13
1001.591179	18	4	14	19	5	14
1001.505863	19	4	15	20	5	15
1001.421457	20	4	16	21	5	16
1001.336951	21	4	17	22	5	17
1001.252194	22	4	18	23	5	18
1001.168252	23	4	19	24	5	19

1005.823482	7	2	5	8	3	5
1005.483303	11	2	9	12	3	9
1005.399015	12	2	10	13	3	10
1005.314541	13	2	11	14	3	11
1005.230371	14	2	12	15	3	12
1005.146601	15	2	13	16	3	13
1005.062893	16	2	14	17	3	14
1006.253140	2	2	1	3	3	1
1006.167385	3	2	2	4	3	2
1005.995206	5	2	4	6	3	4
1005.823482	7	2	6	8	3	6
1005.651890	9	2	8	10	3	8
1005.566936	10	2	9	11	3	9
1005.480956	11	2	10	12	3	10
1005.309729	13	2	12	14	3	12
1005.224167	14	2	13	15	3	13
1005.139253	15	2	14	16	3	14
1004.968259	17	2	16	18	3	16
1004.882502	18	2	17	19	3	17
1004.712416	20	2	19	21	3	19
1004.542220	22	2	21	23	3	21
1004.456600	23	2	22	24	3	22
1004.512302	3	3	0	4	4	0
1004.427141	4	3	1	5	4	1
1004.257268	6	3	3	7	4	3
1004.087295	8	3	5	9	4	5
1004.002367	9	3	6	10	4	6
1003.917215	10	3	7	11	4	7
1003.832245	11	3	8	12	4	8
1003.747576	12	3	9	13	4	9

Table S1. p. 7

998.190117	59	4	55	60	5	55
998.110775	60	4	56	61	5	56
998.031721	61	4	57	62	5	57
997.952616	62	4	58	63	5	58
1002.778541	4	4	1	5	5	1
1002.608642	6	4	3	7	5	3
1002.523437	7	4	4	8	5	4
1002.438001	8	4	5	9	5	5
1002.353780	9	4	6	10	5	6
1002.268398	10	4	7	11	5	7
1002.184104	11	4	8	12	5	8
1002.098822	12	4	9	13	5	9
1001.929327	14	4	11	15	5	11
1001.844461	15	4	12	16	5	12
1001.759805	16	4	13	17	5	13
1001.675104	17	4	14	18	5	14
1001.591179	18	4	15	19	5	15
1001.505863	19	4	16	20	5	16
1001.421457	20	4	17	21	5	17
1001.336951	21	4	18	22	5	18
1001.252194	22	4	19	23	5	19
1001.168252	23	4	20	24	5	20
1001.083746	24	4	21	25	5	21
1000.999089	25	4	22	26	5	22
1000.915334	26	4	23	27	5	23
1000.831138	27	4	24	28	5	24
1000.662803	29	4	26	30	5	26
1000.578344	30	4	27	31	5	27
1000.494508	31	4	28	32	5	28
1000.410505	32	4	29	33	5	29
1000.326475	33	4	30	34	5	30
1000.242902	34	4	31	35	5	31
1000.159089	35	4	32	36	5	32
1000.075678	36	4	33	37	5	33
999.991632	37	4	34	38	5	34
999.907909	38	4	35	39	5	35
999.824599	39	4	36	40	5	36
999.657818	41	4	38	42	5	38
999.409065	44	4	41	45	5	41
999.325869	45	4	42	46	5	42
999.242984	46	4	43	47	5	43
999.160680	47	4	44	48	5	44
998.995863	49	4	46	50	5	46
998.912561	50	4	47	51	5	47
998.830489	51	4	48	52	5	48
998.748343	52	4	49	53	5	49
998.665485	53	4	50	54	5	50
998.584313	54	4	51	55	5	51
998.502353	55	4	52	56	5	52
998.420369	56	4	53	57	5	53
998.339246	57	4	54	58	5	54
998.257606	58	4	55	59	5	55
998.176013	59	4	56	60	5	56
998.094986	60	4	57	61	5	57
1001.041229	5	5	0	6	6	0
1000.956785	6	5	1	7	6	1
1000.871779	7	5	2	8	6	2
1000.787136	8	5	3	9	6	3
1000.702193	9	5	4	10	6	4
1000.617178	10	5	5	11	6	5
1000.532731	11	5	6	12	6	6
1000.447924	12	5	7	13	6	7
1000.362569	13	5	8	14	6	8
1000.277775	14	5	9	15	6	9
1000.192741	15	5	10	16	6	10
1000.107836	16	5	11	17	6	11
1000.023676	17	5	12	18	6	12
999.938838	18	5	13	19	6	13
999.853955	19	5	14	20	6	14
999.769503	20	5	15	21	6	15
999.684828	21	5	16	22	6	16
999.600416	22	5	17	23	6	17
999.515704	23	5	18	24	6	18
999.431557	24	5	19	25	6	19
999.346590	25	5	20	26	6	20
999.262513	26	5	21	27	6	21
999.177873	27	5	22	28	6	22
999.093540	28	5	23	29	6	23
999.009379	29	5	24	30	6	24
998.925152	30	5	25	31	6	25
998.840796	31	5	26	32	6	26
998.756361	32	5	27	33	6	27
998.672334	33	5	28	34	6	28
998.588237	34	5	29	35	6	29
998.504220	35	5	30	36	6	30
998.420369	36	5	31	37	6	31
998.336606	37	5	32	38	6	32
998.252515	38	5	33	39	6	33
998.168460	39	5	34	40	6	34
998.085044	40	5	35	41	6	35
998.000983	41	5	36	42	6	36
997.917612	42	5	37	43	6	37
997.833905	43	5	38	44	6	38
997.750181	44	5	39	45	6	39
997.666695	45	5	40	46	6	40
997.583449	46	5	41	47	6	41
997.500293	47	5	42	48	6	42
997.417069	48	5	43	49	6	43
997.333224	49	5	44	50	6	44
997.250488	50	5	45	51	6	45
997.167803	51	5	46	52	6	46
997.001782	53	5	47	53	6	47
996.919088	54	5	48	54	6	48
996.836362	55	5	49	55	6	49
996.753910	56	5	50	56	6	50
996.671101	57	5	51	57	6	51
996.506582	58	5	52	58	6	52
996.424544	59	5	53	59	6	53
996.260591	60	5	54	60	6	54
996.178665	62	5	55	61	6	55
1001.041229	63	5	56	62	6	56
1000.956785	5	5	57	63	6	57
1000.871779	6	5	58	64	6	58
1000.787136	7	5	59	65	6	59
1000.702193	8	5	60	66	6	60
1000.617178	9	5	61	67	6	61
1000.532731	10	5	62	68	6	62
1000.447924	11	5	63	69	6	63
1000.362569	12	5	64	70	6	64
1000.277775	13	5	65	71	6	65
1000.192741	14	5	66	72	6	66
1000.107836	15	5	67	73	6	67
1000.023676	16	5	68	74	6	68
999.938838	17	5	69	75	6	69
999.853955	18	5	70	76	6	70
999.769503	19	5	71	77	6	71
999.684828	20	5	72	78	6	72
999.600416	21	5	73	79	6	73
999.515704	22	5	74	80	6	74
999.431557	23	5	75	81	6	75
999.346590	24	5	76	82	6	76
999.262513	25	5	77	83	6	77
999.177873	26	5	78	84	6	78
999.093540	27	5	79	85	6	79
999.009379	28	5	80	86	6	80
998.925152	29	5	81	87	6	81
998.840796	30	5	82	88	6	82
998.756361	31	5	83	89	6	83
998.672334	32	5	84	90	6	84
998.588237	33	5	85	91	6	85
998.504220	34	5	86	92	6	86
998.420369	35	5	87	93	6	87
998.336606	36	5	88	94	6	88
998.252515	37	5	89	95	6	89
998.168460	38	5	90	96	6	90
998.085044	39	5	91	97	6	91
998.000983	40	5	92	98	6	92
997.917612	41	5	93	99	6	93
997.833905	42	5	94	100	6	94
997.750181	43	5	95	101	6	95
997.666695	44	5	96	102	6	96
997.583449	45	5	97	103	6	97
997.500293	46	5	98	104	6	98
997.417069	47	5	99	105	6	99
997.333224	48	5	100	106	6	100
997.250488	49	5	101	107	6	101
997.167803	50	5	102	108	6	102
997.001782	51	5	103	109	6	103
996.919088	53	5	104	110	6	104
996.836362	54	5	105	111	6	105
996.753910	55	5	106	112	6	106
996.671101	56	5	107	113	6	107

1001.083746	24	4	20	25	5	20
1000.999089	25	4	21	26	5	21
1000.915334	26	4	22	27	5	22
1000.831138	27	4	23	28	5	23
1000.746169	28	4	24	29	5	24
1000.662803	29	4	25	30	5	25
1000.578344	30	4	26	31	5	26
1000.494508	31	4	27	32	5	27
1000.410505	32	4	28	33	5	28
1000.326475	33	4	29	34	5	29
1000.242902	34	4	30	35	5	30
1000.159089	35	4	31	36	5	31
1000.075678	36	4	32	37	5	32
999.991632	37	4	33	38	5	33
999.907909	38	4	34	39	5	34
999.824599	39	4	35	40	5	35
999.741910	40	4	36	41	5	36
999.575551	42	4	38	43	5	38
999.493083	43	4	39	44	5	39
999.327728	45	4	41	46	5	41
999.245281	46	4	42	47	5	42
998.998547	49	4	45	50	5	45
998.917020	50	4	46	51	5	46
998.835044	51	4	47	52	5	47
998.753835	52	4	48	53	5	48
998.672334	53	4	49	54	5	49
998.591371	54	4	50	55	5	50
998.510685	55	4	51	56	5	51
998.430234	56	4	52	57	5	52
998.270161	58	4	54	59	5	54

1000.277775	14	5	9	15	6	9
1000.192741	15	5	10	16	6	10
1000.107836	16	5	11	17	6	11
1000.023676	17	5	12	18	6	12
999.938838	18	5	13	19	6	13
999.853955	19	5	14	20	6	14
999.769503	20	5	15	21	6	15
999.684828	21	5	16	22	6	16
999.600416	22	5	17	23	6	17
999.515704	23	5	18	24	6	18
999.431557	24	5	19	25	6	19
999.346590	25	5	20	26	6	20
999.262513	26	5	21	27	6	21
999.177873	27	5	22	28	6	22
999.093540	28	5	23	29	6	23
999.009379	29	5	24	30	6	24
998.925152	30	5	25	31	6	25
998.840796	31	5	26	32	6	26
998.756361	32	5	27	33	6	27
998.672334	33	5	28	34	6	28
998.588237	34	5	29	35	6	29
998.504220	35	5	30	36	6	30
998.420369	36	5	31	37	6	31
998.336606	37	5	32	38	6	32
998.252515	38	5	33	39	6	33
998.168460	39	5	34	40	6	34
998.085044	40	5	35	41	6	35
998.000983	41	5	36	42	6	36
997.917612	42	5	37	43	6	37
997.833905	43	5	38	44	6	38
997.750181	44	5	39	45	6	39
997.666695	45	5	40	46	6	40
997.583449	46	5	41	47	6	41
997.500293	47	5	42	48	6	42
997.417069	48	5	43	49	6	43

Table S1. p. 8

996.760619	36	6	30	37	7	30
996.508605	39	6	33	40	7	33
996.424544	40	6	34	41	7	34
996.341255	41	6	35	42	7	35
996.256778	42	6	36	43	7	36
996.172891	43	6	37	44	7	37
996.089090	44	6	38	45	7	38
996.005523	45	6	39	46	7	39
995.921617	46	6	40	47	7	40
995.837974	47	6	41	48	7	41
995.754609	48	6	42	49	7	42
995.670324	49	6	43	50	7	43
995.587327	50	6	44	51	7	44
995.503949	51	6	45	52	7	45
995.420736	52	6	46	53	7	46
995.337739	53	6	47	54	7	47
995.254071	54	6	48	55	7	48
995.170946	55	6	49	56	7	49
995.087945	56	6	50	57	7	50
995.004546	57	6	51	58	7	51
994.838487	59	6	53	60	7	53
994.755821	60	6	54	61	7	54
994.673641	61	6	55	62	7	55
994.590725	62	6	56	63	7	56
994.507695	63	6	57	64	7	57
994.425265	64	6	58	65	7	58
994.342924	65	6	59	66	7	59
994.260324	66	6	60	67	7	60
994.178056	67	6	61	68	7	61
994.095977	68	6	62	69	7	62
994.013887	69	6	63	70	7	63
993.931885	70	6	64	71	7	64
993.850044	71	6	65	72	7	65
993.768157	72	6	66	73	7	66
993.686257	73	6	67	74	7	67
999.298221	6	6	1	7	7	1
999.213503	7	6	2	8	7	2
999.128304	8	6	3	9	7	3
999.044040	9	6	4	10	7	4
998.958303	10	6	5	11	7	5
998.874072	11	6	6	12	7	6
998.788710	12	6	7	13	7	7
998.704172	13	6	8	14	7	8
998.619292	14	6	9	15	7	9
998.534620	15	6	10	16	7	10
998.449695	16	6	11	17	7	11
998.364795	17	6	12	18	7	12
998.280149	18	6	13	19	7	13
998.195609	19	6	14	20	7	14
998.110775	20	6	15	21	7	15
998.026527	21	6	16	22	7	16
997.942099	22	6	17	23	7	17
997.857284	23	6	18	24	7	18
997.772538	24	6	19	25	7	19
997.688092	25	6	20	26	7	20
997.603494	26	6	21	27	7	21
997.518726	27	6	22	28	7	22
997.434574	28	6	23	29	7	23

996.671101	57	5	53	58	6	53
996.506582	59	5	55	60	6	55
996.424544	60	5	56	61	6	56
996.260591	62	5	58	63	6	58
996.178665	63	5	59	64	6	59
999.298221	6	6	0	7	7	0
999.213503	7	6	1	8	7	1
999.128304	8	6	2	9	7	2
999.044040	9	6	3	10	7	3
998.958303	10	6	4	11	7	4
998.874072	11	6	5	12	7	5
998.788710	12	6	6	13	7	6
998.704172	13	6	7	14	7	7
998.619292	14	6	8	15	7	8
998.534620	15	6	9	16	7	9
998.449695	16	6	10	17	7	10
998.364795	17	6	11	18	7	11
998.280149	18	6	12	19	7	12
998.195609	19	6	13	20	7	13
998.110775	20	6	14	21	7	14
998.026527	21	6	15	22	7	15
997.942099	22	6	16	23	7	16
997.857284	23	6	17	24	7	17
997.772538	24	6	18	25	7	18
997.688092	25	6	19	26	7	19
997.603494	26	6	20	27	7	20
997.518726	27	6	21	28	7	21
997.434574	28	6	22	29	7	22
997.350733	29	6	23	30	7	23
997.265800	30	6	24	31	7	24
997.181807	31	6	25	32	7	25
997.097529	32	6	26	33	7	26
997.013779	33	6	27	34	7	27
996.929076	34	6	28	35	7	28
996.844584	35	6	29	36	7	29

993.768157	72	6	67	73	7	67
993.686257	73	6	68	74	7	68
997.543910	7	7	0	8	8	0
997.459078	8	7	1	9	8	1
997.374027	9	7	2	10	8	2
997.289025	10	7	3	11	8	3
997.204089	11	7	4	12	8	4
997.119470	12	7	5	13	8	5
997.034454	13	7	6	14	8	6
996.949882	14	7	7	15	8	7
996.864955	15	7	8	16	8	8
996.780484	16	7	9	17	8	9
996.695551	17	7	10	18	8	10
996.611031	18	7	11	19	8	11
996.525828	19	7	12	20	8	12
996.441489	20	7	13	21	8	13
996.356623	21	7	14	22	8	14
996.272159	22	7	15	23	8	15
996.187587	23	7	16	24	8	16
996.103227	24	7	17	25	8	17
996.018708	25	7	18	26	8	18
995.934715	26	7	19	27	8	19
995.850053	27	7	20	28	8	20
995.765269	28	7	21	29	8	21
995.680628	29	7	22	30	8	22
995.596078	30	7	23	31	8	23
995.512026	31	7	24	32	8	24
995.428064	32	7	25	33	8	25
995.343537	33	7	26	34	8	26
995.259459	34	7	27	35	8	27
995.175034	35	7	28	36	8	28
995.090752	36	7	29	37	8	29
995.006722	37	7	30	38	8	30
994.922277	38	7	31	39	8	31
994.838487	39	7	32	40	8	32
994.754052	40	7	33	41	8	33
994.670696	41	7	34	42	8	34
994.586660	42	7	35	43	8	35
994.502159	43	7	36	44	8	36
994.418882	44	7	37	45	8	37
994.335038	45	7	38	46	8	38
994.251144	46	7	39	47	8	39
994.167312	47	7	40	48	8	40
994.083467	48	7	41	49	8	41
993.999978	49	7	42	50	8	42
993.916776	50	7	43	51	8	43
993.832924	51	7	44	52	8	44
993.749278	52	7	45	53	8	45
993.665630	53	7	46	54	8	46
993.582514	54	7	47	55	8	47
993.498721	55	7	48	56	8	48
993.415271	56	7	49	57	8	49
993.332155	57	7	50	58	8	50
993.249072	58	7	51	59	8	51
993.165452	59	7	52	60	8	52
993.082596	60	7	53	61	8	53
992.999476	61	7	54	62	8	54
992.916047	62	7	55	63	8	55

997.350733	29	6	24	30	7	24
997.265800	30	6	25	31	7	25
997.181807	31	6	26	32	7	26
997.097529	32	6	27	33	7	27
997.013779	33	6	28	34	7	28
996.929076	34	6	29	35	7	29
996.844584	35	6	30	36	7	30
996.760619	36	6	31	37	7	31
996.508605	39	6	34	40	7	34
996.424544	40	6	35	41	7	35
996.341255	41	6	36	42	7	36
996.256778	42	6	37	43	7	37
996.172891	43	6	38	44	7	38
996.089090	44	6	39	45	7	39
996.005523	45	6	40	46	7	40
995.921617	46	6	41	47	7	41
995.837974	47	6	42	48	7	42
995.754609	48	6	43	49	7	43
995.670324	49	6	44	50	7	44
995.587327	50	6	45	51	7	45
995.503949	51	6	46	52	7	46
995.420736	52	6	47	53	7	47
995.337739	53	6	48	54	7	48
995.254071	54	6	49	55	7	49
995.170946	55	6	50	56	7	50
995.087945	56	6	51	57	7	51
995.004546	57	6	52	58	7	52
994.838487	59	6	54	60	7	54
994.755821	60	6	55	61	7	55
994.673641	61	6	56	62	7	56
994.590725	62	6	57	63	7	57
994.507695	63	6	58	64	7	58
994.425265	64	6	59	65	7	59
994.342924	65	6	60	66	7	60
994.260324	66	6	61	67	7	61
994.178056	67	6	62	68	7	62
994.095977	68	6	63	69	7	63
994.013887	69	6	64	70	7	64
993.931885	70	6	65	71	7	65
993.850044	71	6	66	72	7	66

Table S1. p. 9

994.925008	18	8	10	19	9	10
994.840323	19	8	11	20	9	11
994.755821	20	8	12	21	9	12
994.670696	21	8	13	22	9	13
994.586660	22	8	14	23	9	14
994.502159	23	8	15	24	9	15
994.417067	24	8	16	25	9	16
994.332912	25	8	17	26	9	17
994.248533	26	8	18	27	9	18
994.164441	27	8	19	28	9	19
994.079897	28	8	20	29	9	20
993.995667	29	8	21	30	9	21
993.911367	30	8	22	31	9	22
993.826897	31	8	23	32	9	23
993.742640	32	8	24	33	9	24
993.658383	33	8	25	34	9	25
993.574045	34	8	26	35	9	26
993.490072	35	8	27	36	9	27
993.405810	36	8	28	37	9	28
993.321758	37	8	29	38	9	29
993.237311	38	8	30	39	9	30
993.153558	39	8	31	40	9	31
993.069614	40	8	32	41	9	32
992.985476	41	8	33	42	9	33
992.901693	42	8	34	43	9	34
992.817906	43	8	35	44	9	35
992.733790	44	8	36	45	9	36
992.650240	45	8	37	46	9	37
992.565977	46	8	38	47	9	38
992.482673	47	8	39	48	9	39
992.398219	48	8	40	49	9	40
992.314792	49	8	41	50	9	41
992.231187	50	8	42	51	9	42
992.147261	51	8	43	52	9	43
992.063980	52	8	44	53	9	44
991.980276	53	8	45	54	9	45
991.897093	54	8	46	55	9	46
991.813447	55	8	47	56	9	47
991.730369	56	8	48	57	9	48
991.646703	57	8	49	58	9	49
991.563335	58	8	50	59	9	50
991.480150	59	8	51	60	9	51
991.396515	60	8	52	61	9	52
991.313245	61	8	53	62	9	53
991.230159	62	8	54	63	9	54
991.146878	63	8	55	64	9	55
991.064234	64	8	56	65	9	56
990.980995	65	8	57	66	9	57
990.898054	66	8	58	67	9	58
990.815281	67	8	59	68	9	59
990.732388	68	8	60	69	9	60
990.649293	69	8	61	70	9	61
990.567207	70	8	62	71	9	62

992.833249	63	7	56	64	8	56
992.750242	64	7	57	65	8	57
992.667604	65	7	58	66	8	58
992.584985	66	7	59	67	8	59
992.501723	67	7	60	68	8	60
992.419341	68	7	61	69	8	61
992.336976	69	7	62	70	8	62
992.254019	70	7	63	71	8	63
992.171198	71	7	64	72	8	64
992.089150	72	7	65	73	8	65
992.007045	73	7	66	74	8	66
991.924467	74	7	67	75	8	67
991.842345	75	7	68	76	8	68
991.760445	76	7	69	77	8	69
991.678030	77	7	70	78	8	70
991.596651	78	7	71	79	8	71
991.513874	79	7	72	80	8	72
991.432530	80	7	73	81	8	73
991.350894	81	7	74	82	8	74
991.105936	84	7	77	85	8	77
991.024396	85	7	78	86	8	78
990.942930	86	7	79	87	8	79
990.861889	87	7	80	88	8	80
990.780637	88	7	81	89	8	81
990.618493	90	7	83	91	8	83
990.537415	91	7	84	92	8	84
990.457024	92	7	85	93	8	85
990.376308	93	7	86	94	8	86
990.295512	94	7	87	95	8	87
990.215190	95	7	88	96	8	88
990.134581	96	7	89	97	8	89
995.772684	8	8	0	9	9	0
995.687828	9	8	1	10	9	1
995.603238	10	8	2	11	9	2
995.518236	11	8	3	12	9	3
995.348656	13	8	5	14	9	5
995.264077	14	8	6	15	9	6
995.178920	15	8	7	16	9	7
995.094786	16	8	8	17	9	8
995.009984	17	8	9	18	9	9

991.862989	34	9	25	35	10	25
991.778974	35	9	26	36	10	26
991.694744	36	9	27	37	10	27
991.610994	37	9	28	38	10	28
991.527147	38	9	29	39	10	29
991.443503	39	9	30	40	10	30
991.360061	40	9	31	41	10	31
991.276051	41	9	32	42	10	32
991.191690	42	9	33	43	10	33
991.108092	43	9	34	44	10	34
991.024396	44	9	35	45	10	35
990.941050	45	9	36	46	10	36
990.857456	46	9	37	47	10	37
990.773945	47	9	38	48	10	38
990.690285	48	9	39	49	10	39
990.606881	49	9	40	50	10	40
990.523815	50	9	41	51	10	41
990.440197	51	9	42	52	10	42
990.356812	52	9	43	53	10	43
990.273648	53	9	44	54	10	44
990.190222	54	9	45	55	10	45
990.107049	55	9	46	56	10	46
990.023439	56	9	47	57	10	47
989.940273	57	9	48	58	10	48
989.856699	58	9	49	59	10	49
989.774536	59	9	50	60	10	50
989.690626	60	9	51	61	10	51
989.607946	61	9	52	62	10	52
989.525097	62	9	53	63	10	53
989.442308	63	9	54	64	10	54
989.358745	64	9	55	65	10	55
989.276550	65	9	56	66	10	56
989.193542	66	9	57	67	10	57
989.110677	67	9	58	68	10	58
989.027959	68	9	59	69	10	59
988.945307	69	9	60	70	10	60
988.862807	70	9	61	71	10	61
988.779984	71	9	62	72	10	62
988.697453	72	9	63	73	10	63
988.614750	73	9	64	74	10	64
988.531959	74	9	65	75	10	65
988.449894	75	9	66	76	10	66
988.367798	76	9	67	77	10	67
988.285076	77	9	68	78	10	68
988.202717	78	9	69	79	10	69
988.120850	79	9	70	80	10	70
988.038318	80	9	71	81	10	71
987.956356	81	9	72	82	10	72
987.874394	82	9	73	83	10	73
987.792513	83	9	74	84	10	74
987.710387	84	9	75	85	10	75
987.628176	85	9	76	86	10	76
987.546584	86	9	77	87	10	77

990.401616	72	8	64	73	9	64
990.318727	73	8	65	74	9	65
990.236112	74	8	66	75	9	66
990.154003	75	8	67	76	9	67
990.071151	76	8	68	77	9	68
989.988422	77	8	69	78	9	69
989.906125	78	8	70	79	9	70
989.824186	79	8	71	80	9	71
989.742001	80	8	72	81	9	72
989.659679	81	8	73	82	9	73
989.577594	82	8	74	83	9	74
989.495710	83	8	75	84	9	75
989.413360	84	8	76	85	9	76
989.331722	85	8	77	86	9	77
989.250064	86	8	78	87	9	78
989.167826	87	8	79	88	9	79
989.086044	88	8	80	89	9	80
989.004562	89	8	81	90	9	81
988.922583	90	8	82	91	9	82
988.841458	91	8	83	92	9	83
993.973435	9	9	0	10	10	1
993.888152	10	9	1	11	10	1
0.0009938	0	1	0	0	1	1
993.718641	12	9	3	13	10	3
993.633530	13	9	4	14	10	4
993.549605	14	9	5	15	10	5
993.464821	15	9	6	16	10	6
993.380177	16	9	7	17	10	7
993.295835	17	9	8	18	10	8
993.211713	18	9	9	19	10	9
993.126741	19	9	10	20	10	10
993.042448	20	9	11	21	10	11
992.958148	21	9	12	22	10	12
992.873719	22	9	13	23	10	13
992.788921	23	9	14	24	10	14
992.704701	24	9	15	25	10	15
992.620204	25	9	16	26	10	16
992.535591	26	9	17	27	10	17
992.451723	27	9	18	28	10	18
992.367474	28	9	19	29	10	19
992.283294	29	9	20	30	10	20
992.199270	30	9	21	31	10	21
992.115174	31	9	22	32	10	22
992.031075	32	9	23	33	10	23
991.946800	33	9	24	34	10	24

Table S1. p. 10

988.277449	56	10	46	57	11	46
988.194950	57	10	47	58	11	47
988.111810	58	10	48	59	11	48
988.029700	59	10	49	60	11	49
987.946992	60	10	50	61	11	50
987.864147	61	10	51	62	11	51
987.782183	62	10	52	63	11	52
987.699386	63	10	53	64	11	53
987.617202	64	10	54	65	11	54
987.535238	65	10	55	66	11	55
987.453013	66	10	56	67	11	56
987.370950	67	10	57	68	11	57
987.288755	68	10	58	69	11	58
987.206792	69	10	59	70	11	59
987.124873	70	10	60	71	11	60
990.043944	12	11	1	13	12	1
989.960137	13	11	2	14	12	2
989.876281	14	11	3	15	12	3
989.792392	15	11	4	16	12	4
989.707846	16	11	5	17	12	5
989.623856	17	11	6	18	12	6
989.540614	18	11	7	19	12	7
989.457296	19	11	8	20	12	8
989.372716	20	11	9	21	12	9
989.288925	21	11	10	22	12	10
989.205971	22	11	11	23	12	11
989.123010	23	11	12	24	12	12
989.038610	24	11	13	25	12	13
988.956040	25	11	14	26	12	14
988.872814	26	11	15	27	12	15
988.789560	27	11	16	28	12	16
988.706779	28	11	17	29	12	17
988.622913	29	11	18	30	12	18
988.540212	30	11	19	31	12	19
988.457826	31	11	20	32	12	20
988.374820	32	11	21	33	12	21
988.292382	33	11	22	34	12	22
988.209644	34	11	23	35	12	23
988.126904	35	11	24	36	12	24
988.043863	36	11	25	37	12	25
987.961539	37	11	26	38	12	26
987.879065	38	11	27	39	12	27
987.796423	39	11	28	40	12	28
987.714261	40	11	29	41	12	29
987.632350	41	11	30	42	12	30
987.549601	42	11	31	43	12	31
987.385762	44	11	33	45	12	33
987.303888	45	11	34	46	12	34

987.382686	88	9	79	89	10	79
987.301013	89	9	80	90	10	80
992.127922	10	10	0	11	11	0
992.042719	11	10	1	12	11	1
991.958160	12	10	2	13	11	2
991.873330	13	10	3	14	11	3
991.788985	14	10	4	15	11	4
991.704792	15	10	5	16	11	5
991.620186	16	10	6	17	11	6
991.535657	17	10	7	18	11	7
991.451197	18	10	8	19	11	8
991.366928	19	10	9	20	11	9
991.282079	20	10	10	21	11	10
991.198401	21	10	11	22	11	11
991.114392	22	10	12	23	11	12
991.029718	23	10	13	24	11	13
990.945890	24	10	14	25	11	14
990.861889	25	10	15	26	11	15
990.778199	26	10	16	27	11	16
990.694046	27	10	17	28	11	17
990.610177	28	10	18	29	11	18
990.526678	29	10	19	30	11	19
990.442225	30	10	20	31	11	20
990.359075	31	10	21	32	11	21
990.107049	34	10	24	35	11	24
990.023439	35	10	25	36	11	25
989.940273	36	10	26	37	11	26
989.856699	37	10	27	38	11	27
989.772980	38	10	28	39	11	28
989.605877	40	10	30	41	11	30
989.522630	41	10	31	42	11	31
989.439301	42	10	32	43	11	32
989.355722	43	10	33	44	11	33
989.272704	44	10	34	45	11	34
989.189818	45	10	35	46	11	35
989.106108	46	10	36	47	11	36
989.023913	47	10	37	48	11	37
988.940220	48	10	38	49	11	38
988.857048	49	10	39	50	11	39
988.774161	50	10	40	51	11	40
988.691480	51	10	41	52	11	41
988.608122	52	10	42	53	11	42
988.525442	53	10	43	54	11	43
988.442514	54	10	44	55	11	44
988.359926	55	10	45	56	11	45

987.835788	24	12	12	25	13	12
987.751815	25	12	13	26	13	13
987.667514	26	12	14	27	13	14
987.583443	27	12	15	28	13	15
987.499379	28	12	16	29	13	16
987.415647	29	12	17	30	13	17
987.331983	30	12	18	31	13	18
987.247391	31	12	19	32	13	19
987.163766	32	12	20	33	13	20
987.079985	33	12	21	34	13	21
986.996140	34	12	22	35	13	22
986.912337	35	12	23	36	13	23
986.828841	36	12	24	37	13	24
986.745241	37	12	25	38	13	25
986.661735	38	12	26	39	13	26
986.578477	39	12	27	40	13	27
986.494743	40	12	28	41	13	28
986.411751	41	12	29	42	13	29
986.327718	42	12	30	43	13	30
986.244285	43	12	31	44	13	31
986.160726	44	12	32	45	13	32
986.077764	45	12	33	46	13	33
985.994764	46	12	34	47	13	34
985.911770	47	12	35	48	13	35
985.828223	48	12	36	49	13	36
985.745236	49	12	37	50	13	37
985.662110	50	12	38	51	13	38
985.579383	51	12	39	52	13	39
985.496158	52	12	40	53	13	40
985.413633	53	12	41	54	13	41
985.330281	54	12	42	55	13	42
985.248019	55	12	43	56	13	43
985.165063	56	12	44	57	13	44
985.082446	57	12	45	58	13	45
984.999589	58	12	46	59	13	46
984.917102	59	12	47	60	13	47
984.834720	60	12	48	61	13	48
984.751947	61	12	49	62	13	49
984.669980	62	12	50	63	13	50
984.587183	63	12	51	64	13	51
984.505223	64	12	52	65	13	52
984.423197	65	12	53	66	13	53
984.340802	66	12	54	67	13	54
984.258711	67	12	55	68	13	55
984.176635	68	12	56	69	13	56
984.095042	69	12	57	70	13	57
984.012897	70	12	58	71	13	58
983.931140	71	12	59	72	13	59

987.221934	46	11	35	47	12	35
987.140449	47	11	36	48	12	36
986.976209	49	11	38	50	12	38
986.894921	50	11	39	51	12	39
986.813492	51	11	40	52	12	40
986.732033	52	11	41	53	12	41
986.649959	53	11	42	54	12	42
986.405794	56	11	45	57	12	45
986.324522	57	11	46	58	12	46
986.162533	59	11	48	60	12	48
986.081599	60	11	49	61	12	49
985.999671	61	11	50	62	12	50
985.837648	63	11	52	64	12	52
985.757353	64	11	53	65	12	53
985.675950	65	11	54	66	12	54
985.595656	66	11	55	67	12	55
985.513862	67	11	56	68	12	56
985.433703	68	11	57	69	12	57
985.353571	69	11	58	70	12	58
985.272725	70	11	59	71	12	59
985.191788	71	11	60	72	12	60
985.030824	73	11	62	74	12	62
984.950461	74	11	63	75	12	63
984.789547	76	11	65	77	12	65
984.708627	77	11	66	78	12	66
984.629426	78	11	67	79	12	67
984.548571	79	11	68	80	12	68
984.468340	80	11	69	81	12	69
984.388420	81	11	70	82	12	70
984.308422	82	11	71	83	12	71
984.228145	83	11	72	84	12	72
984.148348	84	11	73	85	12	73
984.067755	85	11	74	86	12	74
983.988430	86	11	75	87	12	75
983.907244	87	11	76	88	12	76
983.828142	88	11	77	89	12	77
983.748065	89	11	78	90	12	78
983.668280	90	11	79	91	12	79
983.588209	91	11	80	92	12	80
988.848821	12	12	0	13	13	0
988.764171	13	12	1	14	13	1
988.679570	14	12	2	15	13	2
988.594932	15	12	3	16	13	3
988.510222	16	12	4	17	13	4
988.426061	17	12	5	18	13	5
988.341006	18	12	6	19	13	6
988.172403	20	12	8	21	13	8
988.088322	21	12	9	22	13	9
988.004001	22	12	10	23	13	10
987.919412	23	12	11	24	13	11

Table S1. p. 11

983.761101	51	13	38	52	14	38
983.677804	52	13	39	53	14	39
983.509866	54	13	41	55	14	41
983.427182	55	13	42	56	14	42
983.344043	56	13	43	57	14	43
983.260225	57	13	44	58	14	44
983.177002	58	13	45	59	14	45
983.093523	59	13	46	60	14	46
983.009921	60	13	47	61	14	47
982.927085	61	13	48	62	14	48
982.843197	62	13	49	63	14	49
982.759425	63	13	50	64	14	50
982.677321	64	13	51	65	14	51
982.593506	65	13	52	66	14	52
985.077154	14	14	0	15	15	0
984.908003	16	14	2	17	15	2
984.823648	17	14	3	18	15	3
984.738841	18	14	4	19	15	4
984.654075	19	14	5	20	15	5
984.570123	20	14	6	21	15	6
984.485497	21	14	7	22	15	7
984.401382	22	14	8	23	15	8
984.316834	23	14	9	24	15	9
984.232069	24	14	10	25	15	10
984.148348	25	14	11	26	15	11
984.064373	26	14	12	27	15	12
983.979983	27	14	13	28	15	13
983.895868	28	14	14	29	15	14
983.811534	29	14	15	30	15	15
983.727784	30	14	16	31	15	16
983.643764	31	14	17	32	15	17
983.559783	32	14	18	33	15	18
983.475815	33	14	19	34	15	19
983.391273	34	14	20	35	15	20
983.308198	35	14	21	36	15	21
983.223857	36	14	22	37	15	22
983.140170	37	14	23	38	15	23
983.056697	38	14	24	39	15	24
982.972891	39	14	25	40	15	25
982.889264	40	14	26	41	15	26
982.805184	41	14	27	42	15	27
982.721949	42	14	28	43	15	28
982.638099	43	14	29	44	15	29

983.849633	72	12	60	73	13	60
983.767223	73	12	61	74	13	61
983.685934	74	12	62	75	13	62
983.604668	75	12	63	76	13	63
983.441296	77	12	65	78	13	65
983.360199	78	12	66	79	13	66
983.278470	79	12	67	80	13	67
983.197299	80	12	68	81	13	68
983.116434	81	12	69	82	13	69
983.035444	82	12	70	83	13	70
982.954312	83	12	71	84	13	71
982.873215	84	12	72	85	13	72
982.792370	85	12	73	86	13	73
986.953177	13	13	0	14	14	0
986.868640	14	13	1	15	14	1
986.784059	15	13	2	16	14	2
986.699352	16	13	3	17	14	3
986.614652	17	13	4	18	14	4
986.530637	18	13	5	19	14	5
986.445976	19	13	6	20	14	6
986.361985	20	13	7	21	14	7
986.277394	21	13	8	22	14	8
986.193205	22	13	9	23	14	9
986.108859	23	13	10	24	14	10
986.024493	24	13	11	25	14	11
985.940358	25	13	12	26	14	12
985.856228	26	13	13	27	14	13
985.771955	27	13	14	28	14	14
985.687792	28	13	15	29	14	15
985.603537	29	13	16	30	14	16
985.519603	30	13	17	31	14	17
985.435790	31	13	18	32	14	18
985.351473	32	13	19	33	14	19
985.267994	33	13	20	34	14	20
985.183779	34	13	21	35	14	21
985.099919	35	13	22	36	14	22
985.015642	36	13	23	37	14	23
984.931779	37	13	24	38	14	24
984.848232	38	13	25	39	14	25
984.680328	40	13	27	41	14	27
984.597091	41	13	28	42	14	28
984.512874	42	13	29	43	14	29
984.428969	43	13	30	44	14	30
984.345274	44	13	31	45	14	31
984.261888	45	13	32	46	14	32
984.179137	46	13	33	47	14	33
984.095042	47	13	34	48	14	34
984.011604	48	13	35	49	14	35
983.927776	49	13	36	50	14	36
983.844396	50	13	37	51	14	37

980.003104	53	15	38	54	16	38
979.920310	54	15	39	55	16	39
979.837423	55	15	40	56	16	40
979.754684	56	15	41	57	16	41
979.671728	57	15	42	58	16	42
979.589054	58	15	43	59	16	43
979.506217	59	15	44	60	16	44
979.423881	60	15	45	61	16	45
979.341192	61	15	46	62	16	46
979.258563	62	15	47	63	16	47
979.176443	63	15	48	64	16	48
979.093749	64	15	49	65	16	49
979.011486	65	15	50	66	16	50
978.928942	66	15	51	67	16	51
978.846979	67	15	52	68	16	52
978.764992	68	15	53	69	16	53
978.682901	69	15	54	70	16	54
978.600237	70	15	55	71	16	55
978.518546	71	15	56	72	16	56
978.436543	72	15	57	73	16	57
978.354546	73	15	58	74	16	58
978.272602	74	15	59	75	16	59
978.190885	75	15	60	76	16	60
978.109500	76	15	61	77	16	61
979.322469	17	17	0	18	18	0
979.238605	18	17	1	19	18	1
979.154898	19	17	2	20	18	2
979.070829	20	17	3	21	18	3
978.987227	21	17	4	22	18	4
978.903451	22	17	5	23	18	5
978.819931	23	17	6	24	18	6
978.736580	24	17	7	25	18	7
978.653170	25	17	8	26	18	8
978.569799	26	17	9	27	18	9
978.486339	27	17	10	28	18	10
978.403238	28	17	11	29	18	11
978.319987	29	17	12	30	18	12
978.236726	30	17	13	31	18	13
978.153910	31	17	14	32	18	14
978.071074	32	17	15	33	18	15
977.988161	33	17	16	34	18	16
977.905310	34	17	17	35	18	17
977.822534	35	17	18	36	18	18

982.554932	44	14	30	45	15	30
982.471208	45	14	31	46	15	31
982.387755	46	14	32	47	15	32
982.304564	47	14	33	48	15	33
982.221484	48	14	34	49	15	34
982.137729	49	14	35	50	15	35
982.054216	50	14	36	51	15	36
981.971296	51	14	37	52	15	37
981.887762	52	14	38	53	15	38
981.805036	53	14	39	54	15	39
981.721822	54	14	40	55	15	40
981.638764	55	14	41	56	15	41
981.555455	56	14	42	57	15	42
981.472975	57	14	43	58	15	43
981.390014	58	14	44	59	15	44
981.307312	59	14	45	60	15	45
981.224005	60	14	46	61	15	46
981.141647	61	14	47	62	15	47
981.059074	62	14	48	63	15	48
980.976682	63	14	49	64	15	49
983.014409	17	15	2	18	16	2
982.930057	18	15	3	19	16	3
982.846033	19	15	4	20	16	4
982.762080	20	15	5	21	16	5
982.677321	21	15	6	22	16	6
982.593506	22	15	7	23	16	7
982.509197	23	15	8	24	16	8
982.341135	25	15	10	26	16	10
982.257163	26	15	11	27	16	11
982.172951	27	15	12	28	16	12
982.088886	28	15	13	29	16	13
982.005069	29	15	14	30	16	14
981.921157	30	15	15	31	16	15
981.837431	31	15	16	32	16	16
981.753544	32	15	17	33	16	17
981.669862	33	15	18	34	16	18
981.585796	34	15	19	35	16	19
981.502265	35	15	20	36	16	20
981.418594	36	15	21	37	16	21
981.334771	37	15	22	38	16	22
981.251497	38	15	23	39	16	23
981.167916	39	15	24	40	16	24
981.084398	40	15	25	41	16	25
981.001113	41	15	26	42	16	26
980.917510	42	15	27	43	16	27
980.833890	43	15	28	44	16	28
980.750967	44	15	29	45	16	29
980.667195	45	15	30	46	16	30
980.584128	46	15	31	47	16	31
980.501313	47	15	32	48	16	32
980.417782	48	15	33	49	16	33
980.334912	49	15	34	50	16	34
980.251843	50	15	35	51	16	35
980.168785	51	15	36	52	16	36
980.085975	52	15	37	53	16	37

977.739885	36	17	19	37	18	19
977.657373	37	17	20	38	18	20
977.574842	38	17	21	39	18	21
977.492617	39	17	22	40	18	22
977.410050	40	17	23	41	18	23
977.327768	41	17	24	42	18	24
977.245342	42	17	25	43	18	25
977.163329	43	17	26	44	18	26
977.081293	44	17	27	45	18	27
976.999312	45	17	28	46	18	28
976.917406	46	17	29	47	18	29
976.835514	47	17	30	48	18	30
976.753621	48	17	31	49	18	31
976.671880	49	17	32	50	18	32
976.590744	50	17	33	51	18	33
976.508923	51	17	34	52	18	34
976.427696	52	17	35	53	18	35
976.346008	53	17	36	54	18	36
976.264786	54	17	37	55	18	37
976.183572	55	17	38	56	18	38
976.102160	56	17	39	57	18	39
976.021407	57	17	40	58	18	40
975.778139	60	17	43	61	18	43
975.697388	61	17	44	62	18	44
975.616952	62	17	45	63	18	45
975.536292	63	17	46	64	18	46
975.455978	64	17	47	65	18	47
975.375853	65	17	48	66	18	48
975.295122	66	17	49	67	18	49
975.215154	67	17	50	68	18	50
975.134994	68	17	51	69	18	51
975.055760	69	17	52	70	18	52

Table S2. Fit of GS rotational constants to GSCDs for two C-type bands of trans-hexatriene-1-13C.

1

Fit GSCDs for C1 and C3 bands of tHTE-1-13C

AFTER 2 ITERATIONS THE UPPER STATE CONSTANTS ARE

A= 0.8728202448D+00 +/-0.92996E-06

B= 0.4358680263D-01 +/-0.37072E-06

C= 0.4153139412D-01 +/-0.23958E-06

DELTAJ= 0.9746650000D-10

DELTAK= 0.9277490000D-08

SH(J)= 0.0000000000D+00

SH(JK)= 0.0000000000D+00

SH(K)= 0.0000000000D+00

DIAGONAL CONST. (02) = 0.2425260294D-05 +/-0.24327E-08

DIAGONAL CONST. (11) = -.3382134779D-07 +/-0.31089E-09

DIAGONAL CONST. (20) = 0.1647491866D-08 +/-0.21543E-10

DIAGONAL CONST. (03) = 0.0000000000D+00

DIAGONAL CONST. (12) = 0.0000000000D+00

DIAGONAL CONST. (21) = 0.0000000000D+00

KAPPA= -0.995054887D+00

STD. DEV.= 0.000318

KMAX= 70

THE CONVERGENCE CRITERION HAS BEEN SATISFIED -- NO MORE ITERATIONS ARE NEEDED.

THE CORRELATION COEFFICIENTS ARE:

	1	2	3	2	11	20
1	1.0000					
2	-0.6670	1.0000				
3	-0.5921	0.2593	1.0000			
2	-0.8431	0.5874	0.3988	1.0000		
11	0.3172	-0.4806	-0.0312	-0.6809	1.0000	
20	0.0607	0.0191	-0.4345	0.3471	-0.7892	1.0000

THE NUMBER OF NON-ZERO DATA POINTS IS: 1458

1

Fit GSCDs for C1 and C3 bands of tHTE-1-13C

J'	KA'	KC'	J''	KA''	KC''	OBSERVED	DEV.	WT.
From band at 1011 cm-1								
5	4	1	-	3	2	1	10.728465	-0.000156 0.100E+01
7	4	3	-	5	2	3	11.069509	0.000477 0.100E+01
9	4	5	-	7	2	5	11.408866	-0.000412 0.100E+01
10	4	6	-	8	2	6	11.579772	0.000477 0.100E+01
11	4	7	-	9	2	7	11.749548	0.000336 0.100E+01
12	4	8	-	10	2	8	11.919347	0.000345 0.100E+01
13	4	9	-	11	2	9	12.088767	0.000130 0.100E+01
14	4	10	-	12	2	10	12.258101	0.000015 0.100E+01
15	4	11	-	13	2	11	12.427416	0.000101 0.100E+01
16	4	12	-	14	2	12	12.595424	-0.000863 0.100E+01
17	4	13	-	15	2	13	12.764581	-0.000382 0.100E+01
19	4	15	-	17	2	15	13.101035	-0.000221 0.100E+01
20	4	16	-	18	2	16	13.269507	0.000723 0.100E+01
22	4	18	-	20	2	18	13.601905	-0.000456 0.100E+01
23	4	19	-	21	2	19	13.768316	0.000006 0.100E+01
25	4	21	-	23	2	21	14.098375	0.000107 0.100E+01
26	4	22	-	24	2	22	14.262619	0.000448 0.100E+01
27	4	23	-	25	2	23	14.425253	-0.000033 0.100E+01
28	4	24	-	26	2	24	14.587724	0.000166 0.100E+01
29	4	25	-	27	2	25	14.749035	0.000098 0.100E+01
30	4	26	-	28	2	26	14.909744	0.000372 0.100E+01
31	4	27	-	29	2	27	15.068565	-0.000249 0.100E+01
32	4	28	-	30	2	28	15.227427	0.000212 0.100E+01
33	4	29	-	31	2	29	15.384566	0.000033 0.100E+01
34	4	30	-	32	2	30	15.540782	0.000057 0.100E+01
35	4	31	-	33	2	31	15.696000	0.000245 0.100E+01
36	4	32	-	34	2	32	15.850198	0.000609 0.100E+01
13	4	10	-	11	2	10	12.091396	0.000033 0.100E+01
15	4	12	-	13	2	12	12.432407	-0.000109 0.100E+01
16	4	13	-	14	2	13	12.603860	0.000642 0.100E+01
17	4	14	-	15	2	14	12.774272	0.000251 0.100E+01
19	4	16	-	17	2	16	13.115297	-0.000688 0.100E+01
20	4	17	-	18	2	17	13.287459	0.000283 0.100E+01
22	4	19	-	20	2	19	13.629802	-0.000256 0.100E+01
23	4	20	-	21	2	20	13.802304	0.000520 0.100E+01
24	4	21	-	22	2	21	13.972867	-0.000859 0.100E+01
27	4	24	-	25	2	24	14.490858	-0.000186 0.100E+01
28	4	25	-	26	2	25	14.664684	0.000631 0.100E+01
29	4	26	-	27	2	26	14.837052	-0.000333 0.100E+01
30	4	27	-	28	2	27	15.010570	-0.000493 0.100E+01
31	4	28	-	29	2	28	15.185594	0.000482 0.100E+01
32	4	29	-	30	2	29	15.359065	-0.000493 0.100E+01
35	4	32	-	33	2	32	15.885736	0.000194 0.100E+01

36	4	33	-	34	2	33	16.062148	0.000304	0.100E+01
7	5	2	-	5	3	2	14.389533	0.000099	0.100E+01
9	5	4	-	7	3	4	14.729804	-0.000109	0.100E+01
10	5	5	-	8	3	5	14.900460	0.000315	0.100E+01
11	5	6	-	9	3	6	15.070712	0.000344	0.100E+01

Table S2. p. 2

12	5	7	-	10	3	7	15.240542	-0.000038	0.100E+01	40	6	34	-	38	4	34	23.316314	0.000194	0.100E+01
13	5	8	-	11	3	8	15.411078	0.000302	0.100E+01	41	6	35	-	39	4	35	23.484756	-0.000270	0.100E+01
15	5	10	-	13	3	10	15.751068	-0.000042	0.100E+01	42	6	36	-	40	4	36	23.654366	0.000554	0.100E+01
16	5	11	-	14	3	11	15.921307	0.000069	0.100E+01	43	6	37	-	41	4	37	23.822910	0.000438	0.100E+01
17	5	12	-	15	3	12	16.091516	0.000183	0.100E+01	44	6	38	-	42	4	38	23.991103	0.000106	0.100E+01
18	5	13	-	16	3	13	16.261811	0.000421	0.100E+01	45	6	39	-	43	4	39	24.159425	0.000045	0.100E+01
19	5	14	-	17	3	14	16.430735	-0.000667	0.100E+01	46	6	40	-	44	4	40	24.327672	0.000062	0.100E+01
20	5	15	-	18	3	15	16.601584	0.000222	0.100E+01	47	6	41	-	45	4	41	24.495830	0.000152	0.100E+01
21	5	16	-	19	3	16	16.771442	0.000179	0.100E+01	48	6	42	-	46	4	42	24.663446	-0.000129	0.100E+01
22	5	17	-	20	3	17	16.941339	0.000244	0.100E+01	49	6	43	-	47	4	43	24.830922	-0.000367	0.100E+01
23	5	18	-	21	3	18	17.111088	0.000237	0.100E+01	50	6	44	-	48	4	44	24.999373	0.000562	0.100E+01
24	5	19	-	22	3	19	17.280224	-0.000296	0.100E+01	52	6	46	-	50	4	46	25.333116	-0.000110	0.100E+01
26	5	21	-	24	3	21	17.619083	-0.000469	0.100E+01	54	6	48	-	52	4	48	25.666704	-0.000015	0.100E+01
27	5	22	-	25	3	22	17.788095	-0.000797	0.100E+01	56	6	50	-	54	4	50	25.999451	0.000276	0.100E+01
28	5	23	-	26	3	23	17.957217	-0.000880	0.100E+01	47	6	42	-	45	4	42	24.497576	0.000001	0.100E+01
30	5	25	-	28	3	25	18.295360	-0.000679	0.100E+01	48	6	43	-	46	4	43	24.665641	-0.000189	0.100E+01
31	5	26	-	29	3	26	18.465023	0.000278	0.100E+01	49	6	44	-	47	4	44	24.833986	0.000025	0.100E+01
32	5	27	-	30	3	27	18.633488	0.000238	0.100E+01	50	6	45	-	48	4	45	25.002285	0.000320	0.100E+01
34	5	29	-	32	3	29	18.969743	0.000163	0.100E+01	51	6	46	-	49	4	46	25.169960	0.000123	0.100E+01
35	5	30	-	33	3	30	19.137658	0.000297	0.100E+01	52	6	47	-	50	4	47	25.337447	-0.000128	0.100E+01
36	5	31	-	34	3	31	19.304987	0.000131	0.100E+01	54	6	49	-	52	4	49	25.672568	-0.000069	0.100E+01
41	5	36	-	39	3	36	20.137633	0.000521	0.100E+01	55	6	50	-	53	4	50	25.839387	-0.000570	0.100E+01
43	5	38	-	41	3	38	20.467032	0.000013	0.100E+01	57	6	52	-	55	4	52	26.173823	-0.000341	0.100E+01
44	5	39	-	42	3	39	20.631291	0.000096	0.100E+01	58	6	53	-	56	4	53	26.341201	0.000152	0.100E+01
46	5	41	-	44	3	41	20.957793	-0.000015	0.100E+01	60	6	55	-	58	4	55	26.674526	0.000150	0.100E+01
47	5	42	-	45	3	42	21.120001	-0.000163	0.100E+01	61	6	56	-	59	4	56	26.840281	-0.000539	0.100E+01
50	5	45	-	48	3	45	21.602760	-0.000164	0.100E+01	63	6	58	-	61	4	58	27.172703	-0.000564	0.100E+01
51	5	46	-	49	3	46	21.762034	-0.000224	0.100E+01	64	6	59	-	62	4	59	27.338584	-0.000691	0.100E+01
52	5	47	-	50	3	47	21.920514	-0.000210	0.100E+01	7	7	0	-	5	5	0	21.028571	0.000009	0.100E+01
53	5	48	-	51	3	48	22.078589	0.000317	0.100E+01	8	7	1	-	6	5	1	21.198338	-0.000477	0.100E+01
54	5	49	-	52	3	49	22.235234	0.000378	0.100E+01	9	7	2	-	7	5	2	21.369149	0.000080	0.100E+01
55	5	50	-	53	3	50	22.390852	0.000424	0.100E+01	10	7	3	-	8	5	3	21.539021	-0.000301	0.100E+01
56	5	51	-	54	3	51	22.545051	0.000013	0.100E+01	11	7	4	-	9	5	4	21.709439	-0.000137	0.100E+01
57	5	52	-	55	3	52	22.698265	-0.000075	0.100E+01	12	7	5	-	10	5	5	21.879382	-0.000446	0.100E+01
59	5	54	-	57	3	54	23.001113	-0.000519	0.100E+01	13	7	6	-	11	5	6	22.050403	0.000325	0.100E+01
60	5	55	-	58	3	55	23.150999	-0.000431	0.100E+01	14	7	7	-	12	5	7	22.219763	-0.000563	0.100E+01
61	5	56	-	59	3	56	23.300165	0.000227	0.100E+01	15	7	8	-	13	5	8	22.390381	-0.000189	0.100E+01
62	5	57	-	60	3	57	23.446297	-0.000818	0.100E+01	16	7	9	-	14	5	9	22.560246	-0.000563	0.100E+01
63	5	58	-	61	3	58	23.593029	0.000107	0.100E+01	17	7	10	-	15	5	10	22.731192	0.000148	0.100E+01
25	5	21	-	23	3	21	17.450928	-0.000179	0.100E+01	18	7	11	-	16	5	11	22.901757	0.000486	0.100E+01
27	5	23	-	25	3	23	17.790129	-0.000425	0.100E+01	19	7	12	-	17	5	12	23.071694	0.000203	0.100E+01
30	5	26	-	28	3	26	18.298704	-0.000577	0.100E+01	20	7	13	-	18	5	13	23.241765	0.000063	0.100E+01
32	5	28	-	30	3	28	18.637667	-0.000452	0.100E+01	21	7	14	-	19	5	14	23.411922	0.000020	0.100E+01
33	5	29	-	31	3	29	18.807543	0.000102	0.100E+01	22	7	15	-	20	5	15	23.581604	-0.000486	0.100E+01
34	5	30	-	32	3	30	18.976616	-0.000083	0.100E+01	23	7	16	-	21	5	16	23.751403	-0.000862	0.100E+01
35	5	31	-	33	3	31	19.145273	-0.000622	0.100E+01	24	7	17	-	22	5	17	23.922495	0.000070	0.100E+01
36	5	32	-	34	3	32	19.314644	-0.000385	0.100E+01	25	7	18	-	23	5	18	24.092751	0.000182	0.100E+01
37	5	33	-	35	3	33	19.483739	-0.000364	0.100E+01	26	7	19	-	24	5	19	24.263165	0.000471	0.100E+01
38	5	34	-	36	3	34	19.653075	-0.000045	0.100E+01	27	7	20	-	25	5	20	24.432984	0.000185	0.100E+01
39	5	35	-	37	3	35	19.822321	0.000236	0.100E+01	28	7	21	-	26	5	21	24.603357	0.000475	0.100E+01
40	5	36	-	38	3	36	19.991471	0.000470	0.100E+01	29	7	22	-	27	5	22	24.772894	-0.000046	0.100E+01
42	5	38	-	40	3	38	20.329055	0.000347	0.100E+01	30	7	23	-	28	5	23	24.942391	-0.000582	0.100E+01
45	5	41	-	43	3	41	20.834647	-0.000413	0.100E+01	31	7	24	-	29	5	24	25.113350	0.000373	0.100E+01
46	5	42	-	44	3	42	21.003783	-0.000040	0.100E+01	32	7	25	-	30	5	25	25.282899	-0.000051	0.100E+01
47	5	43	-	45	3	43	21.172312	-0.000279	0.100E+01	33	7	26	-	31	5	26	25.452821	-0.000070	0.100E+01
48	5	44	-	46	3	44	21.341187	-0.000190	0.100E+01	34	7	27	-	32	5	27	25.621917	-0.000879	0.100E+01
50	5	46	-	48	3	46	21.678292	-0.000761	0.100E+01	35	7	28	-	33	5	28	25.792618	-0.000046	0.100E+01
51	5	47	-	49	3	47	21.848504	0.000533	0.100E+01	36	7	29	-	34	5	29	25.962970	0.000479	0.100E+01
52	5	48	-	50	3	48	22.016981	0.000018	0.100E+01	37	7	30	-	35	5	30	26.132267	-0.000008	0.100E+01
54	5	50	-	52	3	50	22.355564	0.000328	0.100E+01	41	7	34	-	39	5	34	26.811001	0.000077	0.100E+01
56	5	52	-	54	3	52	22.694167	0.000148	0.100E+01	42	7	35	-	40	5	35	26.980000	-0.000450	0.100E+01
57	5	53	-	55	3	535													

30	6	24	-	28	4	24	21.621779	-0.000193	0.100E+01	67	7	61	-	65	5	61	31.190234	0.000302	0.100E+01
31	6	25	-	29	4	25	21.791349	-0.000369	0.100E+01	68	7	62	-	66	5	62	31.357022	0.000310	0.100E+01
32	6	26	-	30	4	26	21.961403	-0.000001	0.100E+01	69	7	63	-	67	5	63	31.523858	0.000525	0.100E+01
33	6	27	-	31	4	27	22.131310	0.000285	0.100E+01	70	7	64	-	68	5	64	31.689624	-0.000166	0.100E+01
34	6	28	-	32	4	28	22.300728	0.000151	0.100E+01	71	7	65	-	69	5	65	31.855706	-0.000375	0.100E+01
35	6	29	-	33	4	29	22.470251	0.000197	0.100E+01	72	7	66	-	70	5	66	32.021974	-0.000227	0.100E+01
36	6	30	-	34	4	30	22.639815	0.000364	0.100E+01	73	7	67	-	71	5	67	32.188333	0.000186	0.100E+01
37	6	31	-	35	4	31	22.808846	0.000084	0.100E+01	74	7	68	-	72	5	68	32.354246	0.000331	0.100E+01
38	6	32	-	36	4	32	22.977793	-0.000189	0.100E+01	9	8	1	-	7	6	1	24.687970	0.000317	0.100E+01
39	6	33	-	37	4	33	23.147060	-0.000043	0.100E+01	10	8	2	-	8	6	2	24.857833	-0.000079	0.100E+01

Table S2. p. 3

11	8	3	-	9	6	3	25.027986	-0.000185	0.100E+01	41	9	32	-	39	7	32	33.452195	0.000228	0.100E+01
12	8	4	-	10	6	4	25.198896	0.000465	0.100E+01	42	9	33	-	40	7	33	33.621895	-0.000082	0.100E+01
14	8	6	-	12	6	6	25.538917	-0.000032	0.100E+01	43	9	34	-	41	7	34	33.791766	-0.000198	0.100E+01
15	8	7	-	13	6	7	25.709116	-0.000091	0.100E+01	44	9	35	-	42	7	35	33.961752	-0.000174	0.100E+01
16	8	8	-	14	6	8	25.879948	0.000486	0.100E+01	45	9	36	-	43	7	36	34.131834	-0.000028	0.100E+01
17	8	9	-	15	6	9	26.049321	-0.000394	0.100E+01	46	9	37	-	44	7	37	34.301379	-0.000392	0.100E+01
18	8	10	-	16	6	10	26.219962	-0.000002	0.100E+01	47	9	38	-	45	7	38	34.471957	0.000306	0.100E+01
19	8	11	-	17	6	11	26.390262	0.000052	0.100E+01	48	9	39	-	46	7	39	34.641244	-0.000258	0.100E+01
20	8	12	-	18	6	12	26.560902	0.000451	0.100E+01	49	9	40	-	47	7	40	34.811904	0.000583	0.100E+01
21	8	13	-	19	6	13	26.730735	0.000049	0.100E+01	50	9	41	-	48	7	41	34.981341	0.000234	0.100E+01
22	8	14	-	20	6	14	26.901024	0.000109	0.100E+01	51	9	42	-	49	7	42	35.150891	0.000032	0.100E+01
23	8	15	-	21	6	15	27.071362	0.000225	0.100E+01	52	9	43	-	50	7	43	35.321091	0.000517	0.100E+01
24	8	16	-	22	6	16	27.241218	-0.000132	0.100E+01	53	9	44	-	51	7	44	35.490328	0.000076	0.100E+01
25	8	17	-	23	6	17	27.411503	-0.000051	0.100E+01	54	9	45	-	52	7	45	35.660056	0.000165	0.100E+01
26	8	18	-	24	6	18	27.581982	0.000235	0.100E+01	55	9	46	-	53	7	46	35.829210	-0.000279	0.100E+01
27	8	19	-	25	6	19	27.751389	-0.000540	0.100E+01	56	9	47	-	54	7	47	35.999049	0.000005	0.100E+01
28	8	20	-	26	6	20	27.921575	-0.000523	0.100E+01	57	9	48	-	55	7	48	36.168112	-0.000443	0.100E+01
29	8	21	-	27	6	21	28.092425	0.000172	0.100E+01	58	9	49	-	56	7	49	36.337798	-0.000223	0.100E+01
30	8	22	-	28	6	22	28.262511	0.000118	0.100E+01	59	9	50	-	57	7	50	36.507540	0.000102	0.100E+01
31	8	23	-	29	6	23	28.432799	0.000283	0.100E+01	60	9	51	-	58	7	51	36.676493	-0.000313	0.100E+01
32	8	24	-	30	6	24	28.603029	0.000408	0.100E+01	61	9	52	-	59	7	52	36.846353	0.000231	0.100E+01
33	8	25	-	31	6	25	28.772561	-0.000146	0.100E+01	62	9	53	-	60	7	53	37.015611	0.000226	0.100E+01
34	8	26	-	32	6	26	28.942865	0.000093	0.100E+01	63	9	54	-	61	7	54	37.185054	0.000461	0.100E+01
35	8	27	-	33	6	27	29.112853	0.000038	0.100E+01	64	9	55	-	62	7	55	37.353936	0.000192	0.100E+01
36	8	28	-	34	6	28	29.282982	0.000148	0.100E+01	65	9	56	-	63	7	56	37.522858	0.000023	0.100E+01
37	8	29	-	35	6	29	29.452969	0.000141	0.100E+01	66	9	57	-	64	7	57	37.692124	0.000259	0.100E+01
38	8	30	-	36	6	30	29.622612	-0.000183	0.100E+01	67	9	58	-	65	7	58	37.860898	0.000066	0.100E+01
39	8	31	-	37	6	31	29.793074	0.000342	0.100E+01	68	9	59	-	66	7	59	38.029591	-0.000143	0.100E+01
41	8	33	-	39	6	33	30.133104	0.000590	0.100E+01	69	9	60	-	67	7	60	38.198460	-0.000108	0.100E+01
42	8	34	-	40	6	34	30.302392	0.000037	0.100E+01	70	9	61	-	68	7	61	38.367607	0.000275	0.100E+01
43	8	35	-	41	6	35	30.472117	-0.000042	0.100E+01	71	9	62	-	69	7	62	38.535504	-0.000521	0.100E+01
44	8	36	-	42	6	36	30.642333	0.000408	0.100E+01	73	9	64	-	71	7	64	38.872700	-0.000486	0.100E+01
45	8	37	-	43	6	37	30.811491	-0.000160	0.100E+01	74	9	65	-	72	7	65	39.041451	-0.000198	0.100E+01
46	8	38	-	44	6	38	30.981205	-0.000130	0.100E+01	75	9	66	-	73	7	66	39.210298	0.000026	0.100E+01
47	8	39	-	45	6	39	31.151228	0.000253	0.100E+01	76	9	67	-	74	7	67	39.377740	-0.000590	0.100E+01
48	8	40	-	46	6	40	31.320792	0.000224	0.100E+01	77	9	68	-	75	7	68	39.546719	0.000176	0.100E+01
49	8	41	-	47	6	41	31.490351	0.000238	0.100E+01	78	9	69	-	76	7	69	39.715064	0.000396	0.100E+01
50	8	42	-	48	6	42	31.659626	0.000020	0.100E+01	79	9	70	-	77	7	70	39.883090	0.000388	0.100E+01
51	8	43	-	49	6	43	31.828637	-0.000410	0.100E+01	81	9	72	-	79	7	72	40.218804	0.000318	0.100E+01
52	8	44	-	50	6	44	31.998238	-0.000194	0.100E+01	82	9	73	-	80	7	73	40.386591	0.000359	0.100E+01
53	8	45	-	51	6	45	32.167716	-0.000042	0.100E+01	83	9	74	-	81	7	74	40.554303	0.000427	0.100E+01
54	8	46	-	52	6	46	32.337110	0.000085	0.100E+01	84	9	75	-	82	7	75	40.721275	-0.000141	0.100E+01
55	8	47	-	53	6	47	32.506140	-0.000088	0.100E+01	85	9	76	-	83	7	76	40.889123	0.000273	0.100E+01
56	8	48	-	54	6	48	32.675620	0.000254	0.100E+01	86	9	77	-	84	7	77	41.056103	-0.000070	0.100E+01
57	8	49	-	55	6	49	32.844730	0.000295	0.100E+01	87	9	78	-	85	7	78	41.222949	-0.000435	0.100E+01
58	8	50	-	56	6	50	33.012985	-0.000449	0.100E+01	88	9	79	-	86	7	79	41.390654	0.000174	0.100E+01
59	8	51	-	57	6	51	33.182428	0.000070	0.100E+01	89	9	80	-	87	7	80	41.557538	0.000081	0.100E+01
60	8	52	-	58	6	52	33.351242	0.000035	0.100E+01	90	9	81	-	88	7	81	41.724511	0.000199	0.100E+01
61	8	53	-	59	6	53	33.519924	-0.000052	0.100E+01	10	10	0	-	8	8	0	31.492125	-0.000409	0.100E+01
62	8	54	-	60	6	54	33.688616	-0.000046	0.100E+01	11	10	1	-	9	8	1	31.663122	0.000317	0.100E+01
63	8	55	-	61	6	55	33.857455	0.000192	0.100E+01	13	10	3	-	11	8	3	32.003607	0.000258	0.100E+01
64	8	56	-	62	6	56	34.026452	0.000676	0.100E+01	14	10	4	-	12	8	4	32.174445	0.000822	0.100E+01
65	8	57	-	63	6	57	34.194383	0.000186	0.100E+01	15	10	5	-	13	8	5	32.343860	-0.000038	0.100E+01
66	8	58	-	64	6	58	34.362358	-0.000166	0.100E+01	16	10	6	-	14	8	6	32.514130	-0.000043	0.100E+01
67	8	59	-	65	6	59	34.530657	-0.000096	0.100E+01	17	10	7	-	15	8	7	32.684474	0.000026	0.100E+01
68	8	60	-	66	6	60	34.699115	0.000235	0.100E+01	18	10	8	-	16	8	8	32.855049	0.000326	0.100E+01
69	8	61	-	67	6	61	34.866899	-0.000004	0.100E+01	19	10	9	-	17	8	9	33.024503	-0.000494	0.100E+01
70	8	62	-	68	6	62	35.034448	-0.000369	0.100E+01	20	10	10	-	18	8	10	33.195190	-0.000080	0.100E+01
71	8	63	-	69	6	63	35.202766	0.000146	0.100E+01	21	10	11	-	19	8	11	33.365418	-0.000124	0.100E+01
72	8	64	-	70	6	64	35.370556	0.000249	0.100E+01	22	10	12	-	20	8	12	33.535423	-0.000389	0.100E+01
73	8	65	-	71	6	65	35.538152	0.000277	0.100E+01	23	10	13	-	21	8	13	33.705624	-0.000456	0.100E+01
74	8	66	-	72	6	66	35.705104	-0.000216	0.100E+01	24	10	14	-	22	8	14	33.876130	-0.000215	0.100E+01
75	8	67	-	73	6	67	35.872498	-0.000141	0.100E+01	25	10	15	-	23	8	15	34.046374	-0.000233	0.100E+01
76	8	68	-	74	6	68	36.039445	-0.000381	0.100E+01	26	10	16	-	24	8	16	34.216998	0.000133	0.100E+01
77	8	69	-	75	6	69	36.206813	-0.000066	0.100E+01	27	10	17	-	25	8	17	34.387585	0.000466	0.100E+01
78	8	70	-	76	6	70	36.374075	0.000283	0.100E+01	28	10	18	-	26	8	18	34.557532	0.000163	0.100E+01
79	8	73	-	79	6	73	36.873911	0.000257	0.100E+01	29	10	19	-	27	8	19	34.727726	0.000113	0.100E+01
81	9	0	-	7	7	0	28.006044	0.000620	0.100E+01	30	10	20	-	28	8	20	34.897840	-0.000011	0.100E+01
10	9	1	-	8	7	1	28.175879	0.000191	0.100E+01	31	10	21	-	29	8	21	35.068207	0.000125	0.100E+01
11	9	2	-	9	7	2	28.345872	-0.000081	0.100E+01	32									

26	9	17	-	24	7	17	30.899919	0.000109	0.100E+01	47	10	37	-	45	8	37	37.790471	0.000169	0.100E+01
27	9	18	-	25	7	18	31.070144	0.000109	0.100E+01	48	10	38	-	46	8	38	37.960273	-0.000033	0.100E+01
28	9	19	-	26	7	19	31.240235	-0.000018	0.100E+01	49	10	39	-	47	8	39	38.130324	0.000035	0.100E+01
29	9	20	-	27	7	20	31.410656	0.000194	0.100E+01	50	10	40	-	48	8	40	38.300260	0.000011	0.100E+01
30	9	21	-	28	7	21	31.580588	-0.000074	0.100E+01	51	10	41	-	49	8	41	38.469797	-0.000388	0.100E+01
31	9	22	-	29	7	22	31.750685	-0.000166	0.100E+01	52	10	42	-	50	8	42	38.639734	-0.000363	0.100E+01
32	9	23	-	30	7	23	31.920945	-0.000085	0.100E+01	53	10	43	-	51	8	43	38.810165	0.000182	0.100E+01
33	9	24	-	31	7	24	32.091156	-0.000040	0.100E+01	54	10	44	-	52	8	44	38.979714	-0.000128	0.100E+01
34	9	25	-	32	7	25	32.261496	0.000147	0.100E+01	55	10	45	-	53	8	45	39.149611	-0.000062	0.100E+01
35	9	26	-	33	7	26	32.431667	0.000179	0.100E+01	56	10	46	-	54	8	46	39.319137	-0.000338	0.100E+01
36	9	27	-	34	7	27	32.601130	-0.000482	0.100E+01	57	10	47	-	55	8	47	39.489273	0.000026	0.100E+01
37	9	28	-	35	7	28	32.771513	-0.000207	0.100E+01	58	10	48	-	56	8	48	39.659064	0.000078	0.100E+01
38	9	29	-	36	7	29	32.941862	0.000051	0.100E+01	59	10	49	-	57	8	49	39.829312	0.000618	0.100E+01
39	9	30	-	37	7	30	33.112298	0.000415	0.100E+01	60	10	50	-	58	8	50	39.997861	-0.000506	0.100E+01
40	9	31	-	38	7	31	33.282031	0.000096	0.100E+01	61	10	51	-	59	8	51	40.168639	0.000635	0.100E+01

Table S2. p. 4

62	10	52	-	60	8	52	40.337452	-0.000153	0.100E+01	30	12	18	-	28	10	18	41.529765	0.000975	0.100E+01
63	10	53	-	61	8	53	40.506985	-0.000183	0.100E+01	31	12	19	-	29	10	19	41.699226	0.000152	0.100E+01
64	10	54	-	62	8	54	40.676675	-0.000016	0.100E+01	32	12	20	-	30	10	20	41.868877	-0.000477	0.100E+01
65	10	55	-	63	8	55	40.846667	0.000493	0.100E+01	33	12	21	-	31	10	21	42.039049	-0.000583	0.100E+01
66	10	56	-	64	8	56	41.015679	0.000064	0.100E+01	35	12	23	-	33	10	23	42.379655	-0.000520	0.100E+01
67	10	57	-	65	8	57	41.185073	0.000061	0.100E+01	36	12	24	-	34	10	24	42.549950	-0.000490	0.100E+01
68	10	58	-	66	8	58	41.354233	-0.000131	0.100E+01	37	12	25	-	35	10	25	42.721081	0.000381	0.100E+01
69	10	59	-	67	8	59	41.523818	0.000149	0.100E+01	38	12	26	-	36	10	26	42.890955	0.000001	0.100E+01
70	10	60	-	68	8	60	41.692588	-0.000339	0.100E+01	39	12	27	-	37	10	27	43.060934	-0.000269	0.100E+01
71	10	61	-	69	8	61	41.861866	-0.000269	0.100E+01	40	12	28	-	38	10	28	43.231357	-0.000088	0.100E+01
72	10	62	-	70	8	62	42.031305	0.000013	0.100E+01	41	12	29	-	39	10	29	43.402033	0.000352	0.100E+01
73	10	63	-	71	8	63	42.200393	-0.000003	0.100E+01	42	12	30	-	40	10	30	43.571575	-0.000334	0.100E+01
74	10	64	-	72	8	64	42.369553	0.000107	0.100E+01	43	12	31	-	41	10	31	43.742817	0.000688	0.100E+01
75	10	65	-	73	8	65	42.539106	0.000665	0.100E+01	45	12	33	-	43	10	33	44.082817	0.000273	0.100E+01
76	10	66	-	74	8	66	42.707395	0.000017	0.100E+01	46	12	34	-	44	10	34	44.252956	0.000218	0.100E+01
77	10	67	-	75	8	67	42.876016	-0.000239	0.100E+01	47	12	35	-	45	10	35	44.422508	-0.000414	0.100E+01
78	10	68	-	76	8	68	43.045389	0.000317	0.100E+01	48	12	36	-	46	10	36	44.592629	-0.000467	0.100E+01
79	10	69	-	77	8	69	43.214054	0.000227	0.100E+01	50	12	38	-	48	10	38	44.934112	0.000703	0.100E+01
80	10	70	-	78	8	70	43.382237	-0.000280	0.100E+01	51	12	39	-	49	10	39	45.103902	0.000355	0.100E+01
81	10	71	-	79	8	71	43.551317	0.000175	0.100E+01	52	12	40	-	50	10	40	45.273390	-0.000283	0.100E+01
82	10	72	-	80	8	72	43.719427	-0.000271	0.100E+01	53	12	41	-	51	10	41	45.443569	-0.000216	0.100E+01
84	10	74	-	82	8	74	44.056578	-0.000023	0.100E+01	54	12	42	-	52	10	42	45.613909	0.000026	0.100E+01
85	10	75	-	83	8	75	44.225011	0.000068	0.100E+01	57	12	45	-	55	10	45	46.124514	0.000427	0.100E+01
86	10	76	-	84	8	76	44.393839	0.000629	0.100E+01	58	12	46	-	56	10	46	46.294447	0.000325	0.100E+01
87	10	77	-	85	8	77	44.561321	-0.000079	0.100E+01	60	12	48	-	58	10	48	46.633708	-0.000432	0.100E+01
89	10	79	-	87	8	79	44.897502	-0.000039	0.100E+01	61	12	49	-	59	10	49	46.803562	-0.000559	0.100E+01
11	11	0	-	9	9	0	34.977722	-0.000889	0.100E+01	62	12	50	-	60	10	50	46.974640	0.000557	0.100E+01
12	11	1	-	10	9	1	35.148841	-0.000048	0.100E+01	64	12	52	-	62	10	52	47.314177	0.000233	0.100E+01
13	11	2	-	11	9	2	35.318950	-0.000218	0.100E+01	65	12	53	-	63	10	53	47.484095	0.000253	0.100E+01
14	11	3	-	12	9	3	35.489025	-0.000424	0.100E+01	66	12	54	-	64	10	54	47.654020	0.000302	0.100E+01
15	11	4	-	13	9	4	35.659322	-0.000408	0.100E+01	68	12	56	-	66	10	56	47.994182	0.000783	0.100E+01
16	11	5	-	14	9	5	35.829426	-0.000587	0.100E+01	69	12	57	-	67	10	57	48.163635	0.000433	0.100E+01
17	11	6	-	15	9	6	35.999724	-0.000573	0.100E+01	70	12	58	-	68	10	58	48.332265	-0.000715	0.100E+01
18	11	7	-	16	9	7	36.169927	-0.000654	0.100E+01	71	12	59	-	69	10	59	48.502606	-0.000125	0.100E+01
19	11	8	-	17	9	8	36.340844	-0.000022	0.100E+01	72	12	60	-	70	10	60	48.673167	0.000712	0.100E+01
20	11	9	-	18	9	9	36.510836	-0.000314	0.100E+01	74	12	62	-	72	10	62	49.011809	-0.000007	0.100E+01
21	11	10	-	19	9	10	36.681728	0.000294	0.100E+01	75	12	63	-	73	10	63	49.181624	0.000172	0.100E+01
22	11	11	-	20	9	11	36.851690	-0.000028	0.100E+01	77	12	65	-	75	10	65	49.520816	0.000185	0.100E+01
23	11	12	-	21	9	12	37.021977	-0.000023	0.100E+01	78	12	66	-	76	10	66	49.690337	0.000166	0.100E+01
24	11	13	-	22	9	13	37.192677	0.000395	0.100E+01	79	12	67	-	77	10	67	49.859116	-0.000562	0.100E+01
25	11	14	-	23	9	14	37.362939	0.000378	0.100E+01	80	12	68	-	78	10	68	50.029033	-0.000117	0.100E+01
26	11	15	-	24	9	15	37.532807	-0.000032	0.100E+01	81	12	69	-	79	10	69	50.198642	0.000055	0.100E+01
29	11	18	-	27	9	18	38.043503	-0.000152	0.100E+01	82	12	70	-	80	10	70	50.367232	-0.000755	0.100E+01
30	11	19	-	28	9	19	38.213532	-0.000388	0.100E+01	84	12	72	-	82	10	72	50.706062	-0.000612	0.100E+01
31	11	20	-	29	9	20	38.384244	0.000063	0.100E+01	85	12	73	-	83	10	73	50.875628	-0.000330	0.100E+01
35	11	24	-	33	9	24	39.065323	0.000150	0.100E+01	86	12	74	-	84	10	74	51.045485	0.000283	0.100E+01
36	11	25	-	34	9	25	39.234920	-0.000485	0.100E+01	87	12	75	-	85	10	75	51.214398	-0.000007	0.100E+01
37	11	26	-	35	9	26	39.405405	-0.000225	0.100E+01	89	12	77	-	87	10	77	51.552525	-0.000156	0.100E+01
38	11	27	-	36	9	27	39.575487	-0.000361	0.100E+01	90	12	78	-	88	10	78	51.721991	0.000239	0.100E+01
39	11	28	-	37	9	28	39.745845	-0.000211	0.100E+01	91	12	79	-	89	10	79	51.890728	-0.000050	0.100E+01
41	11	30	-	39	9	30	40.086511	0.000065	0.100E+01	92	12	80	-	90	10	80	52.059962	0.000205	0.100E+01
42	11	31	-	40	9	31	40.256643	0.000017	0.100E+01	13	13	0	-	11	11	0	41.947050	-0.000156	0.100E+01
43	11	32	-	41	9	32	40.426413	-0.000382	0.100E+01	14	13	1	-	12	11	1	42.117440	-0.000060	0.100E+01
44	11	33	-	42	9	33	40.597323	0.000371	0.100E+01	15	13	2	-	13	11	2	42.287845	0.000049	0.100E+01
45	11	34	-	43	9	34	40.767217	0.000120	0.100E+01	16	13	3	-	14	11	3	42.457961	-0.000133	0.100E+01
46	11	35	-	44	9	35	40.937189	-0.000040	0.100E+01	17	13	4	-	15	11	4	42.628760	0.000366	0.100E+01
47	11	36	-	45	9	36	41.107844	0.000497	0.100E+01	18	13	5	-	16	11	5	42.799023	0.000328	0.100E+01
48	11	37	-	46	9	37	41.276771	-0.000680	0.100E+01	19	13	6	-	17	11	6	42.969391	0.000393	0.100E+01
49	11	38	-	47	9	38	41.447605	0.000066	0.100E+01	21	13	8	-	19	11	8	43.309519	-0.000088	0.100E+01
50	11	39	-	48	9	39	41.617850	0.000238	0.100E+01	22	13	9	-	20	11	9	43.479983	0.000070	0.100E+01
51	11	40	-	49	9	40	41.787425	-0.000242	0.100E+01	23	13	10	-	21	11	10	43.650633	0.000414	0.100E+01
52	11	41	-	50	9	41	41.957752	0.000046	0.100E+01	24	13	11	-	22	11	11	43.820924	0.000398	0.100E+01
53	11	42	-	51	9	42	42.127758	0.000033	0.100E+01	25	13	12	-	23	11	12	43.990867	0.000034	0.100E+01
54	11	43	-	52	9	43	42.297984	0.000258	0.100E+01	26	13	13	-	24	11	13	44.161085	-0.000055	0.100E+01
55	11	44	-	53	9	44	42.468134	0.000427	0.100E+01	27	13	14	-	25	11	14	44.331309	-0.000138	0.100E+01
56	11	45	-	54	9	45	42.637489	-0.000178	0.100E+01	28	13	15	-	26	11	15	44.501411	-0.000342	0.100E+01
57	11	46	-	55	9	46	42.807388	-0.000217	0.100E+01	29	13	16	-	27	11	16	44.672182	0.000124	0.100E+01
58	11	47	-	56	9	47	42.977411	-0.000109	0.100E+01	30	13	17	-	28	11	17	44.842348	-0.000014	0.100E+01
59	11	48	-	57	9	48	43.147548	0.000136	0.100E+01	31	13	18	-	29	11	18	45.012136	-0.000529	0.100E+01
60	11	49	-	58	9	49	43.316930	-0.0003											

69	11	58	-	67	9	58	44.844863	0.000037	0.100E+01	41	13	28	-	39	11	28	46.715485	-0.000057	0.100E+01
70	11	59	-	68	9	59	45.014617	0.000223	0.100E+01	42	13	29	-	40	11	29	46.885257	-0.000551	0.100E+01
71	11	60	-	69	9	60	45.184341	0.0000414	0.100E+01	43	13	30	-	41	11	30	47.056007	-0.000060	0.100E+01
13	12	1	-	11	10	1	38.634595	0.000769	0.100E+01	44	13	31	-	42	11	31	47.226163	-0.000158	0.100E+01
14	12	2	-	12	10	2	38.804465	0.000352	0.100E+01	45	13	32	-	43	11	32	47.396910	0.000342	0.100E+01
15	12	3	-	13	10	3	38.975013	0.000611	0.100E+01	46	13	33	-	44	11	33	47.566781	-0.000028	0.100E+01
16	12	4	-	14	10	4	39.144766	0.000074	0.100E+01	47	13	34	-	45	11	34	47.736648	-0.000394	0.100E+01
17	12	5	-	15	10	5	39.315131	0.000147	0.100E+01	48	13	35	-	46	11	35	47.906916	-0.000351	0.100E+01
18	12	6	-	16	10	6	39.485622	0.000345	0.100E+01	49	13	36	-	47	11	36	48.077334	-0.000151	0.100E+01
19	12	7	-	17	10	7	39.655367	-0.000204	0.100E+01	50	13	37	-	48	11	37	48.247578	-0.000115	0.100E+01
20	12	8	-	18	10	8	39.825571	-0.000294	0.100E+01	51	13	38	-	49	11	38	48.417749	-0.000144	0.100E+01
21	12	9	-	19	10	9	39.996820	0.000660	0.100E+01	52	13	39	-	50	11	39	48.587769	-0.000314	0.100E+01
22	12	10	-	20	10	10	40.167005	0.000550	0.100E+01	53	13	40	-	51	11	40	48.758260	-0.000003	0.100E+01
23	12	11	-	21	10	11	40.336781	0.000030	0.100E+01	54	13	41	-	52	11	41	48.927590	-0.000842	0.100E+01
24	12	12	-	22	10	12	40.506936	-0.000109	0.100E+01	55	13	42	-	53	11	42	49.098611	0.000020	0.100E+01
25	12	13	-	23	10	13	40.678083	0.000744	0.100E+01	56	13	43	-	54	11	43	49.268197	-0.000541	0.100E+01
26	12	14	-	24	10	14	40.847264	-0.000369	0.100E+01	57	13	44	-	55	11	44	49.438890	0.000018	0.100E+01
27	12	15	-	25	10	15	41.018135	0.000210	0.100E+01	58	13	45	-	56	11	45	49.609147	0.000152	0.100E+01
28	12	16	-	26	10	16	41.187903	-0.000312	0.100E+01	59	13	46	-	57	11	46	49.779448	0.000344	0.100E+01
29	12	17	-	27	10	17	41.358447	-0.000057	0.100E+01	60	13	47	-	58	11	47	49.948953	-0.000246	0.100E+01

Table S2. p. 5

61	13	48	-	59	11	48	50.119300	0.000020	0.100E+01	42	15	27	-	40	13	27	53.509311	0.000165	0.100E+01
62	13	49	-	60	11	49	50.289704	0.000358	0.100E+01	43	15	28	-	41	13	28	53.679459	-0.000005	0.100E+01
63	13	50	-	61	11	50	50.459319	-0.000078	0.100E+01	44	15	29	-	42	13	29	53.850035	-0.000255	0.100E+01
64	13	51	-	62	11	51	50.629905	0.000474	0.100E+01	45	15	30	-	43	13	30	54.020111	0.000019	0.100E+01
65	13	52	-	63	11	52	50.799327	-0.000122	0.100E+01	46	15	31	-	44	13	31	54.190337	-0.000064	0.100E+01
66	13	53	-	64	11	53	50.969303	-0.000147	0.100E+01	47	15	32	-	45	13	32	54.360717	0.000012	0.100E+01
67	13	54	-	65	11	54	51.139617	0.000184	0.100E+01	48	15	33	-	46	13	33	54.530960	-0.000046	0.100E+01
68	13	55	-	66	11	55	51.309442	0.000044	0.100E+01	49	15	34	-	47	13	34	54.701024	-0.000278	0.100E+01
69	13	56	-	67	11	56	51.479274	-0.000070	0.100E+01	50	15	35	-	48	13	35	54.871370	-0.000224	0.100E+01
70	13	57	-	68	11	57	51.649119	-0.000151	0.100E+01	51	15	36	-	49	13	36	55.042189	0.000309	0.100E+01
71	13	58	-	69	11	58	51.818966	-0.000209	0.100E+01	52	15	37	-	50	13	37	55.212057	-0.000104	0.100E+01
72	13	59	-	70	11	59	51.988453	-0.000607	0.100E+01	53	15	38	-	51	13	38	55.382957	0.000521	0.100E+01
74	13	61	-	72	11	61	52.328538	-0.000225	0.100E+01	54	15	39	-	52	13	39	55.552539	-0.000166	0.100E+01
75	13	62	-	73	11	62	52.498868	0.000288	0.100E+01	55	15	40	-	53	13	40	55.723035	0.000068	0.100E+01
76	13	63	-	74	11	63	52.667970	-0.000404	0.100E+01	56	15	41	-	54	13	41	55.893355	0.000132	0.100E+01
79	13	66	-	77	11	66	53.176995	-0.000610	0.100E+01	57	15	42	-	55	13	42	56.063726	0.000254	0.100E+01
80	13	67	-	78	11	67	53.347459	0.000162	0.100E+01	58	15	43	-	56	13	43	56.233666	-0.000047	0.100E+01
82	13	69	-	80	11	69	53.686416	-0.000181	0.100E+01	59	15	44	-	57	13	44	56.403806	-0.000140	0.100E+01
83	13	70	-	81	11	70	53.856597	0.000393	0.100E+01	60	15	45	-	58	13	45	56.573866	-0.000305	0.100E+01
84	13	71	-	82	11	71	54.026205	0.000423	0.100E+01	61	15	46	-	59	13	46	56.744598	0.000210	0.100E+01
85	13	72	-	83	11	72	54.195888	0.000559	0.100E+01	62	15	47	-	60	13	47	56.914459	-0.000136	0.100E+01
86	13	73	-	84	11	73	54.365143	0.000298	0.100E+01	63	15	48	-	61	13	48	57.084414	-0.000380	0.100E+01
14	14	0	-	12	12	0	45.429413	-0.000080	0.100E+01	64	15	49	-	62	13	49	57.254506	-0.000047	0.100E+01
15	14	1	-	13	12	1	45.599383	-0.000414	0.100E+01	20	16	4	-	18	14	4	53.071176	0.000389	0.100E+01
16	14	2	-	14	12	2	45.769936	-0.000166	0.100E+01	21	16	5	-	19	14	5	53.241275	0.000153	0.100E+01
17	14	3	-	15	12	3	45.940374	-0.000036	0.100E+01	22	16	6	-	20	14	6	53.411731	0.000273	0.100E+01
18	14	4	-	16	12	4	46.110902	0.000182	0.100E+01	23	16	7	-	21	14	7	53.581913	0.000116	0.100E+01
19	14	5	-	17	12	5	46.280658	-0.000374	0.100E+01	24	16	8	-	22	14	8	53.752164	0.000027	0.100E+01
20	14	6	-	18	12	6	46.451381	0.000036	0.100E+01	26	16	10	-	24	14	10	54.092601	-0.000222	0.100E+01
21	14	7	-	19	12	7	46.621356	-0.000304	0.100E+01	27	16	11	-	25	14	11	54.262977	-0.000191	0.100E+01
22	14	8	-	20	12	8	46.792314	0.000338	0.100E+01	28	16	12	-	26	14	12	54.433495	-0.000019	0.100E+01
23	14	9	-	21	12	9	46.962187	-0.000106	0.100E+01	29	16	13	-	27	14	13	54.604003	0.000141	0.100E+01
24	14	10	-	22	12	10	47.132589	-0.000023	0.100E+01	30	16	14	-	28	14	14	54.774120	-0.000090	0.100E+01
25	14	11	-	23	12	11	47.303194	0.000263	0.100E+01	31	16	15	-	29	14	15	54.944484	-0.000075	0.100E+01
26	14	12	-	24	12	12	47.473190	-0.000060	0.100E+01	32	16	16	-	30	14	16	55.114810	-0.000099	0.100E+01
27	14	13	-	25	12	13	47.643503	-0.000067	0.100E+01	33	16	17	-	31	14	17	55.285314	0.000055	0.100E+01
28	14	14	-	26	12	14	47.813711	-0.000180	0.100E+01	34	16	18	-	32	14	18	55.455311	-0.000298	0.100E+01
29	14	15	-	27	12	15	47.984314	0.000103	0.100E+01	35	16	19	-	33	14	19	55.626218	0.000259	0.100E+01
30	14	16	-	28	12	16	48.154831	0.000300	0.100E+01	36	16	20	-	34	14	20	55.796470	0.000161	0.100E+01
31	14	17	-	29	12	17	48.325173	0.000323	0.100E+01	37	16	21	-	35	14	21	55.966713	0.000054	0.100E+01
32	14	18	-	30	12	18	48.495125	-0.000043	0.100E+01	38	16	22	-	36	14	22	56.137503	0.000495	0.100E+01
33	14	19	-	31	12	19	48.665746	0.000260	0.100E+01	39	16	23	-	37	14	23	56.307243	-0.000113	0.100E+01
34	14	20	-	32	12	20	48.835566	-0.000236	0.100E+01	40	16	24	-	38	14	24	56.477488	-0.000215	0.100E+01
35	14	21	-	33	12	21	49.005965	-0.000151	0.100E+01	41	16	25	-	39	14	25	56.648059	0.000010	0.100E+01
36	14	22	-	34	12	22	49.176432	0.000003	0.100E+01	42	16	26	-	40	14	26	56.818337	-0.000056	0.100E+01
37	14	23	-	35	12	23	49.347408	0.000668	0.100E+01	43	16	27	-	41	14	27	56.988684	-0.000051	0.100E+01
38	14	24	-	36	12	24	49.517238	0.000190	0.100E+01	44	16	28	-	42	14	28	57.159081	0.000005	0.100E+01
39	14	25	-	37	12	25	49.687387	0.000034	0.100E+01	45	16	29	-	43	14	29	57.329418	0.000004	0.100E+01
41	14	27	-	39	12	27	50.028254	0.000299	0.100E+01	46	16	30	-	44	14	30	57.500165	0.000415	0.100E+01
42	14	28	-	40	12	28	50.198214	-0.000036	0.100E+01	47	16	31	-	45	14	31	57.670099	0.000016	0.100E+01
43	14	29	-	41	12	29	50.368668	0.000126	0.100E+01	48	16	32	-	46	14	32	57.840131	-0.000282	0.100E+01
44	14	30	-	42	12	30	50.539366	0.000537	0.100E+01	49	16	33	-	47	14	33	58.010967	-0.000227	0.100E+01
45	14	31	-	43	12	31	50.709824	0.000712	0.100E+01	50	16	34	-	48	14	34	58.180830	-0.000233	0.100E+01
46	14	32	-	44	12	32	50.879736	0.000347	0.100E+01	51	16	35	-	49	14	35	58.351273	-0.000110	0.100E+01
47	14	33	-	45	12	33	51.048830	-0.000831	0.100E+01	52	16	36	-	50	14	36	58.522001	0.000303	0.100E+01
48	14	34	-	46	12	34	51.219750	-0.000178	0.100E+01	53	16	37	-	51	14	37	58.691880	-0.000130	0.100E+01
49	14	35	-	47	12	35	51.389822	-0.000366	0.100E+01	54	16	38	-	52	14	38	58.861899	-0.000417	0.100E+01
50	14	36	-	48	12	36	51.560505	0.000063	0.100E+01	55	16	39	-	53	14	39	59.032171	-0.000447	0.100E+01
51	14	37	-	49	12	37	51.730394	-0.000296	0.100E+01	56	16	40	-	54	14	40	59.202853	-0.000061	0.100E+01
52	14	38	-	50	12	38	51.900499	-0.000431	0.100E+01	57	16	41	-	55	14	41	59.372962	-0.000243	0.100E+01
53	14	39	-	51	12	39	52.071029	-0.000133	0.100E+01	58	16	42	-	56	14	42	59.543522	0.000032	0.100E+01
55	14	41	-	53	12	41	52.412065	0.000462	0.100E+01	59	16	43	-	57	14	43	59.713800	0.000031	0.100E+01
56	14	42	-	54	12	42	52.581454	-0.000356	0.100E+01	60	16	44	-	58	14	44	59.884195	0.000153	0.100E+01
57	14	43	-	55	12	43	52.751718	-0.000290	0.100E+01	61	16	45	-	59	14	45	60.054200	-0.000108	0.100E+01
58	14	44	-	56	12	44	52.922472	0.000276	0.100E+01	62	16	46	-	60	14	46	60.224767	0.000200	0.100E+01
59	14	45	-	57	12	45	53.092218	-0.000156	0.100E+01	63	16	47	-	61	14	47	60.395308	0.000490	0.100E+01
60	14	46	-	58	12	46	53.262722	0.000180	0.100E+01	64	16	48	-	62	14	48	60.564932	-0.000130	0.100E+01
61	14	47	-	59	12	47	53.433200	0.000501	0.100E+01	65	16	49	-	63	14	49	60.735471	-0.000173	0.100E+01
62	14	48	-	60	12	48	53.602642	-0.000202	0.100E+01	66	16	50	-	64	14	50	60.905222	-0.000304	0.100E

15	15	0	-	13	13	0	48.910112	-0.000176	0.100E+01	71	16	55	-	69	14	55	61.756919	0.000394	0.100E+01
17	15	2	-	15	13	2	49.250739	-0.000178	0.100E+01	72	16	56	-	70	14	56	61.926557	-0.000138	0.100E+01
18	15	3	-	16	13	3	49.420794	-0.000442	0.100E+01	73	16	57	-	71	14	57	62.096735	-0.000119	0.100E+01
19	15	4	-	17	13	4	49.591883	0.000327	0.100E+01	74	16	58	-	72	14	58	62.267044	0.000042	0.100E+01
21	15	6	-	19	13	6	49.932149	-0.000054	0.100E+01	75	16	59	-	73	14	59	62.436993	-0.000145	0.100E+01
22	15	7	-	20	13	7	50.102744	0.000214	0.100E+01	76	16	60	-	74	14	60	62.607158	-0.000104	0.100E+01
23	15	8	-	21	13	8	50.272471	-0.000386	0.100E+01	77	16	61	-	75	14	61	62.777204	-0.000170	0.100E+01
24	15	9	-	22	13	9	50.443419	0.000232	0.100E+01	18	18	0	-	16	16	0	59.342697	0.000131	0.100E+01
25	15	10	-	23	13	10	50.613905	0.000387	0.100E+01	19	18	1	-	17	16	1	59.512582	-0.000332	0.100E+01
26	15	11	-	24	13	11	50.784070	0.000221	0.100E+01	20	18	2	-	18	16	2	59.682833	-0.000432	0.100E+01
27	15	12	-	25	13	12	50.954174	-0.000008	0.100E+01	21	18	3	-	19	16	3	59.853446	-0.000173	0.100E+01
28	15	13	-	26	13	13	51.124514	-0.000002	0.100E+01	22	18	4	-	20	16	4	60.023690	-0.000286	0.100E+01
29	15	14	-	27	13	14	51.294744	-0.000106	0.100E+01	23	18	5	-	21	16	5	60.194233	-0.000103	0.100E+01
30	15	15	-	28	13	15	51.465350	0.000166	0.100E+01	24	18	6	-	22	16	6	60.364181	-0.000517	0.100E+01
31	15	16	-	29	13	16	51.635395	-0.000124	0.100E+01	25	18	7	-	23	16	7	60.534848	-0.000215	0.100E+01
32	15	17	-	30	13	17	51.805845	-0.000008	0.100E+01	26	18	8	-	24	16	8	60.705127	-0.000303	0.100E+01
33	15	18	-	31	13	18	51.976176	-0.000012	0.100E+01	27	18	9	-	25	16	9	60.875629	-0.000171	0.100E+01
34	15	19	-	32	13	19	52.146285	-0.000236	0.100E+01	28	18	10	-	26	16	10	61.046135	-0.000036	0.100E+01
35	15	20	-	33	13	20	52.317382	0.000528	0.100E+01	29	18	11	-	27	16	11	61.216284	-0.000261	0.100E+01
36	15	21	-	34	13	21	52.486795	-0.000392	0.100E+01	30	18	12	-	28	16	12	61.387491	0.000571	0.100E+01
37	15	22	-	35	13	22	52.658062	0.000544	0.100E+01	31	18	13	-	29	16	13	61.557634	0.000337	0.100E+01
38	15	23	-	36	13	23	52.828166	0.000319	0.100E+01	32	18	14	-	30	16	14	61.727729	0.000053	0.100E+01
39	15	24	-	37	13	24	52.998133	-0.000042	0.100E+01	33	18	15	-	31	16	15	61.897872	-0.000184	0.100E+01
40	15	25	-	38	13	25	53.168183	-0.000318	0.100E+01	34	18	16	-	32	16	16	62.068124	-0.000313	0.100E+01
41	15	26	-	39	13	26	53.338245	-0.000579	0.100E+01	35	18	17	-	33	16	17	62.239111	0.000292	0.100E+01

Table S2. p. 6

36	18	18	-	34	16	18	62.409203	0.000000	0.100E+01	49	8	41	-	47	6	41	31.490081	-0.000032	0.100E+01
37	18	19	-	35	16	19	62.579581	-0.000006	0.100E+01	50	8	42	-	48	6	42	31.659493	-0.000113	0.100E+01
38	18	20	-	36	16	20	62.749852	-0.000119	0.100E+01	51	8	43	-	49	6	43	31.829145	0.000098	0.100E+01
39	18	21	-	37	16	21	62.920161	-0.000195	0.100E+01	52	8	44	-	50	6	44	31.998412	-0.000020	0.100E+01
40	18	22	-	38	16	22	63.090567	-0.000174	0.100E+01	53	8	45	-	51	6	45	32.167767	0.000009	0.100E+01
41	18	23	-	39	16	23	63.260837	-0.000290	0.100E+01	54	8	46	-	52	6	46	32.336629	-0.000396	0.100E+01
42	18	24	-	40	16	24	63.431252	-0.000260	0.100E+01	55	8	47	-	53	6	47	32.505971	-0.000257	0.100E+01
43	18	25	-	41	16	25	63.602176	0.000279	0.100E+01	56	8	48	-	54	6	48	32.675203	-0.000163	0.100E+01
44	18	26	-	42	16	26	63.772199	-0.000083	0.100E+01	57	8	49	-	55	6	49	32.844483	0.000048	0.100E+01
45	18	27	-	43	16	27	63.942530	-0.000135	0.100E+01	58	8	50	-	56	6	50	33.013612	0.000178	0.100E+01
46	18	28	-	44	16	28	64.113242	0.000194	0.100E+01	59	8	51	-	57	6	51	33.183007	0.000649	0.100E+01
47	18	29	-	45	16	29	64.283517	0.000087	0.100E+01	60	8	52	-	58	6	52	33.351544	0.000337	0.100E+01
48	18	30	-	46	16	30	64.453862	0.000051	0.100E+01	61	8	53	-	59	6	53	33.520113	0.000137	0.100E+01
49	18	31	-	47	16	31	64.624372	0.000181	0.100E+01	68	8	60	-	66	6	60	34.699206	0.000326	0.100E+01
50	18	32	-	48	16	32	64.794825	0.000257	0.100E+01	70	8	62	-	68	6	62	35.034994	0.000177	0.100E+01
51	18	33	-	49	16	33	64.964499	-0.000445	0.100E+01	71	8	63	-	69	6	63	35.202363	-0.000257	0.100E+01
52	18	34	-	50	16	34	65.135470	0.000152	0.100E+01	72	8	64	-	70	6	64	35.370620	0.000313	0.100E+01
53	18	35	-	51	16	35	65.305520	-0.000169	0.100E+01	73	8	65	-	71	6	65	35.537770	-0.000105	0.100E+01
54	18	36	-	52	16	36	65.475799	-0.000259	0.100E+01	74	8	66	-	72	6	66	35.705134	-0.000186	0.100E+01
55	18	37	-	53	16	37	65.646224	-0.000201	0.100E+01	75	8	67	-	73	6	67	35.873390	0.000751	0.100E+01
56	18	38	-	54	16	38	65.816444	-0.000344	0.100E+01	77	8	69	-	75	6	69	36.207352	0.000473	0.100E+01
57	18	39	-	55	16	39	65.987432	0.000283	0.100E+01	79	8	71	-	77	6	71	36.540527	-0.000035	0.100E+01
58	18	40	-	56	16	40	66.157690	0.000185	0.100E+01	10	9	1	-	8	7	1	28.175737	0.000049	0.100E+01
61	18	43	-	59	16	43	66.668426	-0.000128	0.100E+01	12	9	3	-	10	7	3	28.515489	-0.000730	0.100E+01
62	18	44	-	60	16	44	66.839074	0.000179	0.100E+01	13	9	4	-	11	7	4	28.686640	0.000155	0.100E+01
63	18	45	-	61	16	45	67.008979	-0.000252	0.100E+01	14	9	5	-	12	7	5	28.857318	0.000566	0.100E+01
64	18	46	-	62	16	46	67.179753	0.000190	0.100E+01	15	9	6	-	13	7	6	29.026823	-0.000196	0.100E+01
65	18	47	-	63	16	47	67.349627	-0.000263	0.100E+01	16	9	7	-	14	7	7	29.197270	-0.000165	0.100E+01
66	18	48	-	64	16	48	67.520000	-0.000211	0.100E+01	17	9	8	-	15	7	8	29.367775	0.000225	0.100E+01
67	18	49	-	65	16	49	67.690519	-0.000008	0.100E+01	18	9	9	-	16	7	9	29.537767	-0.000047	0.100E+01
68	18	50	-	66	16	50	67.860985	0.000148	0.100E+01	20	9	11	-	18	7	11	29.877328	-0.001008	0.100E+01
69	18	51	-	67	16	51	68.030943	-0.000198	0.100E+01	21	9	12	-	19	7	12	30.047980	-0.000612	0.100E+01
70	18	52	-	68	16	52	68.200964	-0.000474	0.100E+01	22	9	13	-	20	7	13	30.218928	0.000082	0.100E+01
From band at 894 cm-1										23	9	14	-	21	7	14	30.389333	0.000239	0.100E+01
8	7	1	-	6	5	1	21.199296	0.000481	0.100E+01	24	9	15	-	22	7	15	30.559377	0.000038	0.100E+01
11	7	4	-	9	5	4	21.710039	0.000463	0.100E+01	25	9	16	-	23	7	16	30.729246	-0.000331	0.100E+01
19	7	12	-	17	5	12	23.071672	0.000181	0.100E+01	26	9	17	-	24	7	17	30.899721	-0.000089	0.100E+01
24	7	17	-	22	5	17	23.923102	0.000677	0.100E+01	27	9	18	-	25	7	18	31.070328	0.000293	0.100E+01
26	7	19	-	24	5	19	24.263631	0.000937	0.100E+01	28	9	19	-	26	7	19	31.240516	0.000263	0.100E+01
27	7	20	-	25	5	20	24.433306	0.000507	0.100E+01	30	9	21	-	28	7	21	31.580628	-0.000034	0.100E+01
29	7	22	-	27	5	22	24.773370	0.000430	0.100E+01	31	9	22	-	29	7	22	31.750812	-0.000039	0.100E+01
30	7	23	-	28	5	23	24.943122	0.000149	0.100E+01	32	9	23	-	30	7	23	31.921355	0.000325	0.100E+01
31	7	24	-	29	5	24	25.113314	0.000337	0.100E+01	33	9	24	-	31	7	24	32.090953	-0.000243	0.100E+01
32	7	25	-	30	5	25	25.282760	-0.000190	0.100E+01	34	9	25	-	32	7	25	32.261777	0.000428	0.100E+01
33	7	26	-	31	5	26	25.452816	-0.000075	0.100E+01	35	9	26	-	33	7	26	32.431575	0.000087	0.100E+01
34	7	27	-	32	5	27	25.622945	0.000149	0.100E+01	36	9	27	-	34	7	27	32.601068	-0.000544	0.100E+01
35	7	28	-	33	5	28	25.792866	0.000202	0.100E+01	37	9	28	-	35	7	28	32.772111	0.000391	0.100E+01
36	7	29	-	34	5	29	25.962457	-0.000034	0.100E+01	38	9	29	-	36	7	29	32.941396	-0.000415	0.100E+01
37	7	30	-	35	5	30	26.131926	-0.000349	0.100E+01	40	9	31	-	38	7	31	33.282050	0.000115	0.100E+01
38	7	31	-	36	5	31	26.301899	-0.000114	0.100E+01	41	9	32	-	39	7	32	33.451877	-0.000090	0.100E+01
39	7	32	-	37	5	32	26.471865	0.000162	0.100E+01	42	9	33	-	40	7	33	33.622181	0.000204	0.100E+01
40	7	33	-	38	5	33	26.641399	0.000058	0.100E+01	43	9	34	-	41	7	34	33.791902	-0.000062	0.100E+01
41	7	34	-	39	5	34	26.811161	0.000237	0.100E+01	44	9	35	-	42	7	35	33.962283	0.000357	0.100E+01
42	7	35	-	40	5	35	26.980563	0.000113	0.100E+01	45	9	36	-	43	7	36	34.131465	-0.000397	0.100E+01
43	7	36	-	41	5	36	27.149501	-0.000414	0.100E+01	46	9	37	-	44	7	37	34.301699	-0.000072	0.100E+01
44	7	37	-	42	5	37	27.319102	-0.000214	0.100E+01	47	9	38	-	45	7	38	34.471348	-0.000303	0.100E+01
45	7	38	-	43	5	38	27.488456	-0.000194	0.100E+01	48	9	39	-	46	7	39	34.641724	0.000222	0.100E+01
46	7	39	-	44	5	39	27.657946	0.000034	0.100E+01	49	9	40	-	47	7	40	34.811295	-0.000026	0.100E+01
47	7	40	-	45	5	40	27.826835	-0.000265	0.100E+01	50	9	41	-	48	7	41	34.980785	-0.000322	0.100E+01
48	7	41	-	46	5	41	27.995824	-0.000385	0.100E+01	51	9	42	-	49	7	42	35.151032	0.000173	0.100E+01
49	7	42	-	47	5	42	28.165481	0.000245	0.100E+01	52	9	43	-	50	7	43	35.320258	-0.000316	0.100E+01
50	7	43	-	48	5	43	28.334281	0.000104	0.100E+01	53	9	44	-	51	7	44	35.490264	0.000012	0.100E+01
51	7	44	-	49	5	44	28.503021	-0.000007	0.100E+01	54	9	45	-	52	7	45	35.659787	-0.000104	0.100E+01
52	7	45	-	50	5	45	28.671442	-0.000342	0.100E+01	55	9	46	-	53	7	46	35.829702	0.000213	0.100E+01
53	7	46	-	51	5	46	28.839887	-0.000555	0.100E+01	56	9	47	-	54	7	47	35.998842	-0.000202	0.100E+01
8	8	0	-	6	6	0	24.517540	0.000145	0.100E+01	57	9	48	-	55	7	48	36.168575	0.000200	0.100E+01
9	8	1	-	7	6	1	24.687483	-0.000170	0.100E+01	58	9	49	-	56	7	49	36.338350	0.000329	0.100E+01
10	8	2	-	8	6	2	24.857555	-0.000357	0.100E+01	59	9	50	-	57	7	50	36.507225	-0.000213	0.100E+01

11	8	3	-	9	6	3	25.027993	-0.000178	0.100E+01	60	9	51	-	58	7	51	36.676782	-0.000024	0.100E+01
12	8	4	-	10	6	4	25.198084	-0.000347	0.100E+01	61	9	52	-	59	7	52	36.845974	-0.000148	0.100E+01
13	8	5	-	11	6	5	25.368801	0.0000110	0.100E+01	62	9	53	-	60	7	53	37.015461	0.000076	0.100E+01
14	8	6	-	12	6	6	25.539073	0.000124	0.100E+01	63	9	54	-	61	7	54	37.184727	0.000134	0.100E+01
15	8	7	-	13	6	7	25.709561	0.000354	0.100E+01	64	9	55	-	62	7	55	37.353810	0.000066	0.100E+01
16	8	8	-	14	6	8	25.879324	-0.000138	0.100E+01	65	9	56	-	63	7	56	37.522679	-0.000156	0.100E+01
19	8	11	-	17	6	11	26.390464	0.000254	0.100E+01	66	9	57	-	64	7	57	37.691458	-0.000407	0.100E+01
20	8	12	-	18	6	12	26.560382	-0.000069	0.100E+01	67	9	58	-	65	7	58	37.860897	0.000065	0.100E+01
21	8	13	-	19	6	13	26.731191	0.000505	0.100E+01	68	9	59	-	66	7	59	38.029593	-0.000141	0.100E+01
22	8	14	-	20	6	14	26.901007	0.000092	0.100E+01	70	9	61	-	68	7	61	38.367530	0.000198	0.100E+01
24	8	16	-	22	6	16	27.241209	-0.000141	0.100E+01	71	9	62	-	69	7	62	38.535562	-0.000463	0.100E+01
25	8	17	-	23	6	17	27.411488	-0.000066	0.100E+01	72	9	63	-	70	7	63	38.704046	-0.000598	0.100E+01
26	8	18	-	24	6	18	27.582115	0.000368	0.100E+01	73	9	64	-	71	7	64	38.873381	0.000195	0.100E+01
28	8	20	-	26	6	20	27.921793	-0.000305	0.100E+01	74	9	65	-	72	7	65	39.041376	-0.000273	0.100E+01
30	8	22	-	28	6	22	28.262481	0.000088	0.100E+01	75	9	66	-	73	7	66	39.210048	0.000017	0.100E+01
31	8	23	-	29	6	23	28.431821	-0.000695	0.100E+01	76	9	67	-	74	7	67	39.378367	0.000037	0.100E+01
32	8	24	-	30	6	24	28.602447	-0.000174	0.100E+01	78	9	69	-	76	7	69	39.714496	-0.000172	0.100E+01
34	8	26	-	32	6	26	28.942089	-0.000683	0.100E+01	79	9	70	-	77	7	70	39.882671	-0.000031	0.100E+01
35	8	27	-	33	6	27	29.112806	-0.000009	0.100E+01	10	10	0	-	8	8	0	31.491881	-0.000653	0.100E+01
36	8	28	-	34	6	28	29.282584	-0.000250	0.100E+01	11	10	1	-	9	8	1	31.663124	0.000319	0.100E+01
39	8	31	-	37	6	31	29.792480	-0.000252	0.100E+01	12	10	2	-	10	8	2	31.833051	-0.000025	0.100E+01
40	8	32	-	38	6	32	29.962612	-0.000027	0.100E+01	14	10	4	-	12	8	4	32.173186	-0.000437	0.100E+01
41	8	33	-	39	6	33	30.132279	-0.000235	0.100E+01	15	10	5	-	13	8	5	32.343943	0.000045	0.100E+01
42	8	34	-	40	6	34	30.302557	0.000202	0.100E+01	16	10	6	-	14	8	6	32.514243	0.000070	0.100E+01
43	8	35	-	41	6	35	30.472316	0.000157	0.100E+01	17	10	7	-	15	8	7	32.684556	0.000108	0.100E+01
44	8	36	-	42	6	36	30.641918	-0.000007	0.100E+01	18	10	8	-	16	8	8	32.854156	-0.000567	0.100E+01
45	8	37	-	43	6	37	30.811462	-0.000189	0.100E+01	19	10	9	-	17	8	9	33.024433	-0.000564	0.100E+01
46	8	38	-	44	6	38	30.981675	0.000340	0.100E+01	20	10	10	-	18	8	10	33.194778	-0.000492	0.100E+01
47	8	39	-	45	6	39	31.151061	0.000086	0.100E+01	21	10	11	-	19	8	11	33.365263	-0.000279	0.100E+01
48	8	40	-	46	6	40	31.320055	-0.000513	0.100E+01	22	10	12	-	20	8	12	33.535969	0.000157	0.100E+01

Table S2. p. 7

23	10	13	-	21	8	13	33.706095	0.000015	0.100E+01	65	11	54	-	63	9	54	44.166669	0.000452	0.100E+01
24	10	14	-	22	8	14	33.876341	-0.000004	0.100E+01	66	11	55	-	64	9	55	44.335919	0.000002	0.100E+01
26	10	16	-	24	8	16	34.216785	-0.000080	0.100E+01	67	11	56	-	65	9	56	44.505315	-0.000271	0.100E+01
27	10	17	-	25	8	17	34.387337	0.000218	0.100E+01	68	11	57	-	66	9	57	44.675157	-0.000066	0.100E+01
28	10	18	-	26	8	18	34.557578	0.000209	0.100E+01	69	11	58	-	67	9	58	44.844713	-0.000113	0.100E+01
29	10	19	-	27	8	19	34.727871	0.000258	0.100E+01	70	11	59	-	68	9	59	45.014621	0.000227	0.100E+01
32	10	22	-	30	8	22	35.238322	0.000016	0.100E+01	71	11	60	-	69	9	60	45.183928	0.000001	0.100E+01
33	10	23	-	31	8	23	35.408708	0.000185	0.100E+01	72	11	61	-	70	9	61	45.352909	-0.000514	0.100E+01
34	10	24	-	32	8	24	35.578826	0.000096	0.100E+01	73	11	62	-	71	9	62	45.522667	-0.000215	0.100E+01
35	10	25	-	33	8	25	35.748815	-0.000114	0.100E+01	75	11	64	-	73	9	64	45.861945	0.000265	0.100E+01
36	10	26	-	34	8	26	35.918956	-0.000161	0.100E+01	76	11	65	-	74	9	65	46.031118	0.000101	0.100E+01
37	10	27	-	35	8	27	36.089133	-0.000162	0.100E+01	77	11	66	-	75	9	66	46.200399	0.000087	0.100E+01
38	10	28	-	36	8	28	36.259583	0.000121	0.100E+01	78	11	67	-	76	9	67	46.369302	-0.000261	0.100E+01
39	10	29	-	37	8	29	36.429543	-0.000073	0.100E+01	79	11	68	-	77	9	68	46.538769	0.000000	0.100E+01
40	10	30	-	38	8	30	36.599400	-0.000356	0.100E+01	80	11	69	-	78	9	69	46.707230	-0.000699	0.100E+01
41	10	31	-	39	8	31	36.769938	0.000055	0.100E+01	82	11	71	-	80	9	71	47.046747	0.000643	0.100E+01
42	10	32	-	40	8	32	36.939385	-0.000611	0.100E+01	83	11	72	-	81	9	72	47.214806	-0.000311	0.100E+01
43	10	33	-	41	8	33	37.109958	-0.000134	0.100E+01	84	11	73	-	82	9	73	47.383774	-0.000304	0.100E+01
44	10	34	-	42	8	34	37.280392	0.000220	0.100E+01	85	11	74	-	83	9	74	47.552398	-0.000589	0.100E+01
45	10	35	-	43	8	35	37.450737	0.000503	0.100E+01	87	11	76	-	85	9	76	47.890189	-0.000451	0.100E+01
46	10	36	-	44	8	36	37.620599	0.000321	0.100E+01	90	11	79	-	88	9	79	48.396796	0.000107	0.100E+01
47	10	37	-	45	8	37	37.790585	0.000283	0.100E+01	92	11	81	-	90	9	81	48.734152	0.000401	0.100E+01
48	10	38	-	46	8	38	37.960790	0.000484	0.100E+01	95	11	84	-	93	9	84	49.238965	0.000105	0.100E+01
49	10	39	-	47	8	39	38.130449	0.000160	0.100E+01	96	11	85	-	94	9	85	49.406811	-0.000283	0.100E+01
50	10	40	-	48	8	40	38.299983	-0.000266	0.100E+01	97	11	86	-	95	9	86	49.575118	-0.000140	0.100E+01
51	10	41	-	49	8	41	38.470065	-0.000120	0.100E+01	98	11	87	-	96	9	87	49.742604	-0.000746	0.100E+01
52	10	42	-	50	8	42	38.639763	-0.000334	0.100E+01	12	12	0	-	10	10	0	38.463764	0.000224	0.100E+01
53	10	43	-	51	8	43	38.809999	0.000016	0.100E+01	13	12	1	-	11	10	1	38.633729	-0.000097	0.100E+01
54	10	44	-	52	8	44	38.979174	-0.000668	0.100E+01	14	12	2	-	12	10	2	38.804060	-0.000053	0.100E+01
55	10	45	-	53	8	45	39.149022	-0.000651	0.100E+01	15	12	3	-	13	10	3	38.974250	-0.000152	0.100E+01
56	10	46	-	54	8	46	39.318855	-0.000620	0.100E+01	16	12	4	-	14	10	4	39.144206	-0.000486	0.100E+01
57	10	47	-	55	8	47	39.488959	-0.000288	0.100E+01	17	12	5	-	15	10	5	39.314732	-0.000252	0.100E+01
58	10	48	-	56	8	48	39.658783	-0.000203	0.100E+01	18	12	6	-	16	10	6	39.485105	-0.000172	0.100E+01
59	10	49	-	57	8	49	39.828145	-0.000549	0.100E+01	19	12	7	-	17	10	7	39.655589	0.000018	0.100E+01
60	10	50	-	58	8	50	39.998048	-0.000319	0.100E+01	20	12	8	-	18	10	8	39.825917	0.000052	0.100E+01
61	10	51	-	59	8	51	40.167990	-0.000014	0.100E+01	21	12	9	-	19	10	9	39.996200	0.000040	0.100E+01
64	10	54	-	62	8	54	40.676720	0.000029	0.100E+01	22	12	10	-	20	10	10	40.166667	0.000212	0.100E+01
65	10	55	-	63	8	55	40.846256	0.000082	0.100E+01	23	12	11	-	21	10	11	40.336802	0.000051	0.100E+01
66	10	56	-	64	8	56	41.015824	0.000209	0.100E+01	24	12	12	-	22	10	12	40.507041	-0.000004	0.100E+01
67	10	57	-	65	8	57	41.185218	0.000206	0.100E+01	25	12	13	-	23	10	13	40.677084	-0.000255	0.100E+01
69	10	59	-	67	8	59	41.523482	-0.000187	0.100E+01	26	12	14	-	24	10	14	40.848017	0.000384	0.100E+01
72	10	62	-	70	8	62	42.031646	0.000354	0.100E+01	27	12	15	-	25	10	15	41.018182	0.000257	0.100E+01
73	10	63	-	71	8	63	42.199708	0.000688	0.100E+01	28	12	16	-	26	10	16	41.188084	-0.000131	0.100E+01
74	10	64	-	72	8	64	42.369032	-0.000414	0.100E+01	29	12	17	-	27	10	17	41.358523	0.000019	0.100E+01
75	10	65	-	73	8	65	42.538372	-0.000069	0.100E+01	30	12	18	-	28	10	18	41.528771	-0.000019	0.100E+01
76	10	66	-	74	8	66	42.706778	-0.000600	0.100E+01	31	12	19	-	29	10	19	41.698981	-0.000093	0.100E+01
77	10	67	-	75	8	67	42.876440	0.000185	0.100E+01	32	12	20	-	30	10	20	41.869036	-0.000318	0.100E+01
78	10	68	-	76	8	68	43.044781	-0.000291	0.100E+01	33	12	21	-	31	10	21	42.039541	-0.000091	0.100E+01
79	10	69	-	77	8	69	43.213160	-0.000667	0.100E+01	34	12	22	-	32	10	22	42.209841	-0.000064	0.100E+01
80	10	70	-	78	8	70	43.382128	-0.000389	0.100E+01	35	12	23	-	33	10	23	42.380197	0.000022	0.100E+01
81	10	71	-	79	8	71	43.550729	-0.000413	0.100E+01	36	12	24	-	34	10	24	42.549807	-0.000633	0.100E+01
82	10	72	-	80	8	72	43.720009	0.000311	0.100E+01	37	12	25	-	35	10	25	42.720630	-0.000070	0.100E+01
85	10	75	-	83	8	75	44.225530	0.000587	0.100E+01	38	12	26	-	36	10	26	42.891282	0.000328	0.100E+01
88	10	78	-	86	8	78	44.729558	0.000047	0.100E+01	39	12	27	-	37	10	27	43.061175	-0.000028	0.100E+01
89	10	79	-	87	8	79	44.897961	0.000420	0.100E+01	40	12	28	-	38	10	28	43.231487	0.000042	0.100E+01
11	11	0	-	9	9	0	34.978811	0.000200	0.100E+01	41	12	29	-	39	10	29	43.401187	-0.000494	0.100E+01
12	11	1	-	10	9	1	35.148968	0.000079	0.100E+01	42	12	30	-	40	10	30	43.572141	0.000232	0.100E+01
13	11	2	-	11	9	2	35.319087	-0.000081	0.100E+01	43	12	31	-	41	10	31	43.741970	-0.000159	0.100E+01
14	11	3	-	12	9	3	35.489958	0.000509	0.100E+01	44	12	32	-	42	10	32	43.912269	-0.000072	0.100E+01
15	11	4	-	13	9	4	35.660205	0.000475	0.100E+01	45	12	33	-	43	10	33	44.082396	-0.000148	0.100E+01
16	11	5	-	14	9	5	35.830176	0.000163	0.100E+01	46	12	34	-	44	10	34	44.252732	-0.000006	0.100E+01
17	11	6	-	15	9	6	35.999908	-0.000389	0.100E+01	47	12	35	-	45	10	35	44.423187	0.000265	0.100E+01
18	11	7	-	16	9	7	36.170494	-0.000087	0.100E+01	48	12	36	-	46	10	36	44.593045	-0.000051	0.100E+01

19	11	8	-	17	9	8	36.340588	-0.000278	0.100E+01	49	12	37	-	47	10	37	44.763320	0.000062	0.100E+01
20	11	9	-	18	9	9	36.511113	-0.000037	0.100E+01	50	12	38	-	48	10	38	44.932998	-0.000411	0.100E+01
21	11	10	-	19	9	10	36.681136	-0.000029	0.100E+01	51	12	39	-	49	10	39	45.103600	0.000053	0.100E+01
22	11	11	-	20	9	11	36.851716	-0.000002	0.100E+01	52	12	40	-	50	10	40	45.273841	0.000168	0.100E+01
25	11	14	-	23	9	14	37.362319	-0.000242	0.100E+01	53	12	41	-	51	10	41	45.443461	-0.000324	0.100E+01
26	11	15	-	24	9	15	37.532595	-0.000244	0.100E+01	54	12	42	-	52	10	42	45.614433	0.000550	0.100E+01
27	11	16	-	25	9	16	37.702842	-0.000272	0.100E+01	55	12	43	-	53	10	43	45.783944	-0.000023	0.100E+01
28	11	17	-	26	9	17	37.873358	-0.000028	0.100E+01	56	12	44	-	54	10	44	45.953662	-0.000373	0.100E+01
29	11	18	-	27	9	18	38.043617	-0.000038	0.100E+01	57	12	45	-	55	10	45	46.123993	-0.000094	0.100E+01
30	11	19	-	28	9	19	38.214112	0.000192	0.100E+01	58	12	46	-	56	10	46	46.294326	0.000204	0.100E+01
32	11	21	-	30	9	21	38.554635	0.000198	0.100E+01	59	12	47	-	57	10	47	46.464289	0.000149	0.100E+01
33	11	22	-	31	9	22	38.724570	-0.000118	0.100E+01	60	12	48	-	58	10	48	46.634235	0.000095	0.100E+01
34	11	23	-	32	9	23	38.894671	-0.000263	0.100E+01	61	12	49	-	59	10	49	46.804145	0.000024	0.100E+01
35	11	24	-	33	9	24	39.064666	-0.000507	0.100E+01	62	12	50	-	60	10	50	46.974618	0.000535	0.100E+01
36	11	25	-	34	9	25	39.236179	0.000774	0.100E+01	63	12	51	-	61	10	51	47.144122	0.000098	0.100E+01
37	11	26	-	35	9	26	39.406239	0.000609	0.100E+01	64	12	52	-	62	10	52	47.314170	0.000226	0.100E+01
38	11	27	-	36	9	27	39.576123	0.000275	0.100E+01	65	12	53	-	63	10	53	47.484049	0.000207	0.100E+01
43	11	32	-	41	9	32	40.427152	0.000357	0.100E+01	66	12	54	-	64	10	54	47.653448	-0.000270	0.100E+01
46	11	35	-	44	9	35	40.936858	-0.000371	0.100E+01	67	12	55	-	65	10	55	47.823324	-0.000247	0.100E+01
47	11	36	-	45	9	36	41.107458	0.000111	0.100E+01	68	12	56	-	66	10	56	47.993170	-0.000229	0.100E+01
48	11	37	-	46	9	37	41.277260	-0.000191	0.100E+01	69	12	57	-	67	10	57	48.162888	-0.000314	0.100E+01
49	11	38	-	47	9	38	41.447662	0.000123	0.100E+01	70	12	58	-	68	10	58	48.332488	-0.000492	0.100E+01
50	11	39	-	48	9	39	41.617476	-0.000136	0.100E+01	71	12	59	-	69	10	59	48.502505	-0.000226	0.100E+01
51	11	40	-	49	9	40	41.787749	0.000082	0.100E+01	72	12	60	-	70	10	60	48.672070	-0.000385	0.100E+01
52	11	41	-	50	9	41	41.957218	-0.000488	0.100E+01	74	12	62	-	72	10	62	49.011527	-0.000289	0.100E+01
54	11	43	-	52	9	43	42.297638	-0.000088	0.100E+01	75	12	63	-	73	10	63	49.181733	0.000281	0.100E+01
55	11	44	-	53	9	44	42.467977	0.000270	0.100E+01	76	12	64	-	74	10	64	49.351057	0.000000	0.100E+01
56	11	45	-	54	9	45	42.637883	0.000216	0.100E+01	77	12	65	-	75	10	65	49.519823	-0.000808	0.100E+01
58	11	47	-	56	9	47	42.976677	-0.000843	0.100E+01	78	12	66	-	76	10	66	49.690490	0.000319	0.100E+01
59	11	48	-	57	9	48	43.147507	0.000095	0.100E+01	79	12	67	-	77	10	67	49.859523	-0.000155	0.100E+01
60	11	49	-	58	9	49	43.317021	-0.000259	0.100E+01	82	12	70	-	80	10	70	50.368210	0.000223	0.100E+01
61	11	50	-	59	9	50	43.486914	-0.000208	0.100E+01	83	12	71	-	81	10	71	50.537231	-0.000119	0.100E+01
62	11	51	-	60	9	51	43.656304	-0.000633	0.100E+01	85	12	73	-	83	10	73	50.875628	-0.000330	0.100E+01
63	11	52	-	61	9	52	43.826202	-0.000524	0.100E+01	88	12	76	-	86	10	76	51.383457	-0.000108	0.100E+01
64	11	53	-	62	9	53	43.996486	0.000000	0.100E+01	89	12	77	-	87	10	77	51.552027	-0.000654	0.100E+01

Table S2. p. 8

91	12	79	-	89	10	79	51.890342	-0.000436	0.100E+01	40	14	26	-	38	12	26	49.857439	-0.000217	0.100E+01
13	13	0	-	11	11	0	41.947427	0.000221	0.100E+01	41	14	27	-	39	12	27	50.027719	-0.000236	0.100E+01
14	13	1	-	12	11	1	42.117554	0.000054	0.100E+01	42	14	28	-	40	12	28	50.198054	-0.000196	0.100E+01
16	13	3	-	14	11	3	42.458040	-0.000054	0.100E+01	43	14	29	-	41	12	29	50.368625	0.000083	0.100E+01
17	13	4	-	15	11	4	42.628688	0.000294	0.100E+01	44	14	30	-	42	12	30	50.539229	0.000400	0.100E+01
18	13	5	-	16	11	5	42.798591	-0.000104	0.100E+01	45	14	31	-	43	12	31	50.708999	-0.000113	0.100E+01
19	13	6	-	17	11	6	42.968704	-0.000294	0.100E+01	46	14	32	-	44	12	32	50.878977	-0.000412	0.100E+01
20	13	7	-	18	11	7	43.139567	0.000265	0.100E+01	47	14	33	-	45	12	33	51.049382	-0.000279	0.100E+01
21	13	8	-	19	11	8	43.309642	0.000035	0.100E+01	48	14	34	-	46	12	34	51.219886	-0.000042	0.100E+01
22	13	9	-	20	11	9	43.479709	-0.000204	0.100E+01	49	14	35	-	47	12	35	51.390330	0.000142	0.100E+01
23	13	10	-	21	11	10	43.650244	0.000025	0.100E+01	50	14	36	-	48	12	36	51.560448	0.000006	0.100E+01
24	13	11	-	22	11	11	43.819921	-0.000605	0.100E+01	51	14	37	-	49	12	37	51.731379	0.000689	0.100E+01
25	13	12	-	23	11	12	43.990608	-0.000225	0.100E+01	15	15	0	-	13	13	0	48.909879	-0.000409	0.100E+01
26	13	13	-	24	11	13	44.161254	0.000114	0.100E+01	16	15	1	-	14	13	1	49.080885	0.000284	0.100E+01
27	13	14	-	25	11	14	44.331446	-0.000001	0.100E+01	17	15	2	-	15	13	2	49.251214	0.000297	0.100E+01
28	13	15	-	26	11	15	44.501669	-0.000084	0.100E+01	18	15	3	-	16	13	3	49.420838	-0.000398	0.100E+01
29	13	16	-	27	11	16	44.671869	-0.000189	0.100E+01	19	15	4	-	17	13	4	49.591538	-0.000018	0.100E+01
30	13	17	-	28	11	17	44.842673	0.000311	0.100E+01	20	15	5	-	18	13	5	49.762137	0.000258	0.100E+01
31	13	18	-	29	11	18	45.013050	0.000385	0.100E+01	21	15	6	-	19	13	6	49.932451	0.000248	0.100E+01
32	13	19	-	30	11	19	45.183252	0.000286	0.100E+01	22	15	7	-	20	13	7	50.102748	0.000218	0.100E+01
33	13	20	-	31	11	20	45.353216	-0.000049	0.100E+01	23	15	8	-	21	13	8	50.272376	-0.000481	0.100E+01
34	13	21	-	32	11	21	45.523617	0.000056	0.100E+01	24	15	9	-	22	13	9	50.443093	-0.000094	0.100E+01
35	13	22	-	33	11	22	45.694011	0.000156	0.100E+01	25	15	10	-	23	13	10	50.613659	0.000141	0.100E+01
36	13	23	-	34	11	23	45.864777	0.000631	0.100E+01	26	15	11	-	24	13	11	50.782995	-0.000854	0.100E+01
37	13	24	-	35	11	24	46.034600	0.000167	0.100E+01	27	15	12	-	25	13	12	50.954091	-0.000091	0.100E+01
38	13	25	-	36	11	25	46.204173	-0.000544	0.100E+01	28	15	13	-	26	13	13	51.124441	-0.000075	0.100E+01
39	13	26	-	37	11	26	46.374852	-0.000145	0.100E+01	29	15	14	-	27	13	14	51.294917	0.000067	0.100E+01
40	13	27	-	38	11	27	46.545483	0.000211	0.100E+01	30	15	15	-	28	13	15	51.465148	-0.000036	0.100E+01
41	13	28	-	39	11	28	46.715429	-0.000113	0.100E+01	31	15	16	-	29	13	16	51.636166	0.000647	0.100E+01
42	13	29	-	40	11	29	46.886495	0.000687	0.100E+01	32	15	17	-	30	13	17	51.806624	0.000771	0.100E+01
43	13	30	-	41	11	30	47.056012	-0.000055	0.100E+01	33	15	18	-	31	13	18	51.976198	0.000010	0.100E+01
44	13	31	-	42	11	31	47.226483	0.000162	0.100E+01	34	15	19	-	32	13	19	52.146584	0.000063	0.100E+01
47	13	34	-	45	11	34	47.737009	-0.000033	0.100E+01	35	15	20	-	33	13	20	52.317087	0.000233	0.100E+01
48	13	35	-	46	11	35	47.907211	-0.000056	0.100E+01	36	15	21	-	34	13	21	52.486906	-0.000281	0.100E+01
49	13	36	-	47	11	36	48.077421	-0.000064	0.100E+01	37	15	22	-	35	13	22	52.657268	0.000250	0.100E+01
51	13	38	-	49	11	38	48.417330	-0.000563	0.100E+01	38	15	23	-	36	13	23	52.827805	-0.000042	0.100E+01
52	13	39	-	50	11	39	48.588377	0.000294	0.100E+01	39	15	24	-	37	13	24	52.998269	0.000094	0.100E+01
53	13	40	-	51	11	40	48.758535	0.000272	0.100E+01	40	15	25	-	38	13	25	53.168587	0.000086	0.100E+01
54	13	41	-	52	11	41	48.928428	-0.000004	0.100E+01	41	15	26	-	39	13	26	53.338605	-0.000219	0.100E+01
55	13	42	-	53	11	42	49.099036	0.000445	0.100E+01	42	15	27	-	40	13	27	53.509183	0.000037	0.100E+01
56	13	43	-	54	11	43	49.268636	-0.000102	0.100E+01	44	15	29	-	42	13	29	53.849402	-0.000378	0.100E+01
57	13	44	-	55	11	44	49.438938	0.000066	0.100E+01	46	15	31	-	44	13	31	54.190198	-0.000203	0.100E+01
58	13	45	-	56	11	45	49.609027	0.000032	0.100E+01	47	15	32	-	45	13	32	54.360713	0.000008	0.100E+01
59	13	46	-	57	11	46	49.778900	-0.000204	0.100E+01	48	15	33	-	46	13	33	54.530779	-0.000227	0.100E+01
60	13	47	-	58	11	47	49.949144	-0.000055	0.100E+01	49	15	34	-	47	13	34	54.701476	0.000174	0.100E+01
61	13	48	-	59	11	48	50.119425	0.000145	0.100E+01	50	15	35	-	48	13	35	54.871877	0.000283	0.100E+01
62	13	49	-	60	11	49	50.289901	0.000555	0.100E+01	51	15	36	-	49	13	36	55.041778	-0.000102	0.100E+01
64	13	51	-	62	11	51	50.629688	0.000257	0.100E+01	52	15	37	-	50	13	37	55.212116	-0.000045	0.100E+01
65	13	52	-	63	11	52	50.799991	0.000542	0.100E+01	53	15	38	-	51	13	38	55.382423	-0.000013	0.100E+01
66	13	53	-	64	11	53	50.969698	0.000248	0.100E+01	54	15	39	-	52	13	39	55.552626	-0.000079	0.100E+01
67	13	54	-	65	11	54	51.139458	0.000025	0.100E+01	55	15	40	-	53	13	40	55.723266	0.000299	0.100E+01
68	13	55	-	66	11	55	51.309684	0.000286	0.100E+01	59	15	44	-	57	13	44	56.404043	0.000097	0.100E+01
69	13	56	-	67	11	56	51.479631	0.000287	0.100E+01	60	15	45	-	58	13	45	56.574256	0.000085	0.100E+01
70	13	57	-	68	11	57	51.648835	-0.000435	0.100E+01	61	15	46	-	59	13	46	56.744804	0.000416	0.100E+01
71	13	58	-	69	11	58	51.819742	0.000567	0.100E+01	62	15	47	-	60	13	47	56.914289	-0.000306	0.100E+01
72	13	59	-	70	11	59	51.989149	0.000089	0.100E+01	63	15	48	-	61	13	48	57.084659	-0.000135	0.100E+01
73	13	60	-	71	11	60	52.159058	0.000136	0.100E+01	64	15	49	-	62	13	49	57.254385	-0.000597	0.100E+01
74	13	61	-	72	11	61	52.328591	-0.000172	0.100E+01	65	15	50	-	63	13	50	57.425399	0.000239	0.100E+01

75	13	62	-	73	11	62	52.498206	-0.000374	0.100E+01	66	15	51	-	64	13	51	57.595361	0.000033	0.100E+01
76	13	63	-	74	11	63	52.667995	-0.000379	0.100E+01	68	15	53	-	66	13	53	57.935855	0.000224	0.100E+01
78	13	65	-	76	11	65	53.008547	0.000660	0.100E+01	72	15	57	-	70	13	57	58.615811	-0.000280	0.100E+01
79	13	66	-	77	11	66	53.178258	0.000653	0.100E+01	73	15	58	-	71	13	58	58.786260	0.000087	0.100E+01
80	13	67	-	78	11	67	53.347721	0.000424	0.100E+01	74	15	59	-	72	13	59	58.956094	-0.000148	0.100E+01
81	13	68	-	79	11	68	53.517084	0.000123	0.100E+01	75	15	60	-	73	13	60	59.126359	0.000063	0.100E+01
82	13	69	-	80	11	69	53.687344	0.000747	0.100E+01	76	15	61	-	74	13	61	59.296202	-0.000133	0.100E+01
83	13	70	-	81	11	70	53.856906	0.000702	0.100E+01	77	15	62	-	75	13	62	59.466294	-0.000065	0.100E+01
84	13	71	-	82	11	71	54.026195	0.000413	0.100E+01	78	15	63	-	76	13	63	59.636558	0.000191	0.100E+01
85	13	72	-	83	11	72	54.195878	0.000549	0.100E+01	79	15	64	-	77	13	64	59.806053	-0.000306	0.100E+01
88	13	75	-	86	11	75	54.703314	-0.000466	0.100E+01	80	15	65	-	78	13	65	59.976366	0.000032	0.100E+01
89	13	76	-	87	11	76	54.872628	-0.000569	0.100E+01	81	15	66	-	79	13	66	60.146599	0.000307	0.100E+01
90	13	77	-	88	11	77	55.041710	-0.000870	0.100E+01	82	15	67	-	80	13	67	60.316464	0.000232	0.100E+01
91	13	78	-	89	11	78	55.211827	-0.000101	0.100E+01	83	15	68	-	81	13	68	60.486189	0.000035	0.100E+01
92	13	79	-	90	11	79	55.381264	0.000024	0.100E+01	84	15	69	-	82	13	69	60.655464	-0.000593	0.100E+01
93	13	80	-	91	11	80	55.550403	-0.000111	0.100E+01	85	15	70	-	83	13	70	60.826089	0.000148	0.100E+01
95	13	82	-	93	11	82	55.889213	0.000264	0.100E+01	86	15	71	-	84	13	71	60.995375	-0.000431	0.100E+01
96	13	83	-	94	11	83	56.058653	0.000546	0.100E+01	87	15	72	-	85	13	72	61.165123	-0.000527	0.100E+01
15	14	1	-	13	12	1	45.599723	-0.000074	0.100E+01	89	15	74	-	87	13	74	61.505733	0.000458	0.100E+01
17	14	3	-	15	12	3	45.940517	0.000107	0.100E+01	90	15	75	-	88	13	75	61.674720	-0.000335	0.100E+01
19	14	5	-	17	12	5	46.281369	0.000337	0.100E+01	91	15	76	-	89	13	76	61.844888	0.000075	0.100E+01
20	14	6	-	18	12	6	46.451499	0.000154	0.100E+01	92	15	77	-	90	13	77	62.014498	-0.000050	0.100E+01
22	14	8	-	20	12	8	46.792116	0.000140	0.100E+01	94	15	79	-	92	13	79	62.354522	0.000576	0.100E+01
23	14	9	-	21	12	9	46.962837	0.000544	0.100E+01	95	15	80	-	93	13	80	62.524499	0.000890	0.100E+01
24	14	10	-	22	12	10	47.132618	0.000006	0.100E+01	16	16	0	-	14	14	0	52.389788	0.000313	0.100E+01
25	14	11	-	23	12	11	47.303175	0.000244	0.100E+01	17	16	1	-	15	14	1	52.559869	0.000070	0.100E+01
26	14	12	-	24	12	12	47.473437	0.000187	0.100E+01	18	16	2	-	16	14	2	52.729976	-0.000150	0.100E+01
27	14	13	-	25	12	13	47.643761	0.000191	0.100E+01	19	16	3	-	17	14	3	52.900513	0.000058	0.100E+01
28	14	14	-	26	12	14	47.814203	0.000312	0.100E+01	20	16	4	-	18	14	4	53.070647	-0.000140	0.100E+01
29	14	15	-	27	12	15	47.984098	-0.000113	0.100E+01	21	16	5	-	19	14	5	53.240857	-0.000265	0.100E+01
30	14	16	-	28	12	16	48.154707	0.000176	0.100E+01	22	16	6	-	20	14	6	53.411805	0.000347	0.100E+01
31	14	17	-	29	12	17	48.324654	-0.000196	0.100E+01	24	16	8	-	22	14	8	53.751772	-0.000365	0.100E+01
32	14	18	-	30	12	18	48.495127	-0.000041	0.100E+01	25	16	9	-	23	14	9	53.922346	-0.000133	0.100E+01
33	14	19	-	31	12	19	48.665506	0.000020	0.100E+01	26	16	10	-	24	14	10	54.092864	0.000041	0.100E+01
34	14	20	-	32	12	20	48.836271	0.000469	0.100E+01	27	16	11	-	25	14	11	54.263416	0.000248	0.100E+01
35	14	21	-	33	12	21	49.005772	-0.000344	0.100E+01	28	16	12	-	26	14	12	54.433497	-0.000017	0.100E+01
36	14	22	-	34	12	22	49.176198	-0.000231	0.100E+01	29	16	13	-	27	14	13	54.604536	0.000674	0.100E+01
37	14	23	-	35	12	23	49.347004	0.000264	0.100E+01	30	16	14	-	28	14	14	54.774270	0.000060	0.100E+01
38	14	24	-	36	12	24	49.516920	-0.000128	0.100E+01	32	16	16	-	30	14	16	55.115127	0.000218	0.100E+01
39	14	25	-	37	12	25	49.687769	0.000416	0.100E+01	33	16	17	-	31	14	17	55.285381	0.000122	0.100E+01

Table S2. p. 9

34	16	18	-	32	14	18	55.455455	-0.000154	0.100E+01
35	16	19	-	33	14	19	55.626030	0.000071	0.100E+01
37	16	21	-	35	14	21	55.966707	0.000048	0.100E+01
38	16	22	-	36	14	22	56.137236	0.000228	0.100E+01
39	16	23	-	37	14	23	56.307969	0.000613	0.100E+01
40	16	24	-	38	14	24	56.477919	0.000216	0.100E+01
41	16	25	-	39	14	25	56.647949	-0.000100	0.100E+01
42	16	26	-	40	14	26	56.818210	-0.000183	0.100E+01
43	16	27	-	41	14	27	56.989312	0.000577	0.100E+01
44	16	28	-	42	14	28	57.159396	0.000320	0.100E+01
45	16	29	-	43	14	29	57.329772	0.000358	0.100E+01
46	16	30	-	44	14	30	57.499775	0.000025	0.100E+01
47	16	31	-	45	14	31	57.670416	0.000333	0.100E+01
48	16	32	-	46	14	32	57.840690	0.000277	0.100E+01
49	16	33	-	47	14	33	58.011245	0.000505	0.100E+01
50	16	34	-	48	14	34	58.180852	-0.000211	0.100E+01
51	16	35	-	49	14	35	58.350916	-0.000467	0.100E+01
52	16	36	-	50	14	36	58.521886	0.000188	0.100E+01
53	16	37	-	51	14	37	58.692399	0.000389	0.100E+01
55	16	39	-	53	14	39	59.032649	0.000031	0.100E+01
56	16	40	-	54	14	40	59.202883	-0.000031	0.100E+01
57	16	41	-	55	14	41	59.373391	0.000186	0.100E+01
58	16	42	-	56	14	42	59.543455	-0.000035	0.100E+01
60	16	44	-	58	14	44	59.883751	-0.000291	0.100E+01
61	16	45	-	59	14	45	60.054008	-0.000300	0.100E+01
62	16	46	-	60	14	46	60.224124	-0.000443	0.100E+01
64	16	48	-	62	14	48	60.565791	0.000729	0.100E+01
65	16	49	-	63	14	49	60.735440	0.000142	0.100E+01
67	16	51	-	65	14	51	61.075445	-0.000299	0.100E+01
68	16	52	-	66	14	52	61.245938	-0.000016	0.100E+01
70	16	54	-	68	14	54	61.585901	-0.000444	0.100E+01
73	16	57	-	71	14	57	62.097071	0.000217	0.100E+01
74	16	58	-	72	14	58	62.266659	-0.000343	0.100E+01
75	16	59	-	73	14	59	62.437823	0.000685	0.100E+01
76	16	60	-	74	14	60	62.607582	0.000320	0.100E+01
77	16	61	-	75	14	61	62.777740	0.000366	0.100E+01
78	16	62	-	76	14	62	62.947184	-0.000289	0.100E+01
79	16	63	-	77	14	63	63.117734	0.000175	0.100E+01
80	16	64	-	78	14	64	63.287684	0.000053	0.100E+01

Table S3. Fit of US rot. consts. for C-type band at 894 cm-1 of trans-HTE-1-13C; addendum of lines not fit but used for GSCDs.

1

US fit for 894 cm-1 band of tHTE-1-13C

THE LOWER STATE CONSTANTS ARE

A=	0.8728202448D+00	DELTAJ=	0.9277490000D-08
B=	0.4358680263D-01	SH(J)=	0.0000000000D+00
C=	0.4153139412D-01	SH(JK)=	0.0000000000D+00
DELTAJ=	0.9746650000D-10	SH(K)=	0.0000000000D+00

DIAGONAL CONST. (02) = 0.2425260294D-05
 DIAGONAL CONST. (11) = -.3382134779D-07
 DIAGONAL CONST. (20) = 0.1647491866D-08
 DIAGONAL CONST. (03) = 0.0000000000D+00
 DIAGONAL CONST. (12) = 0.0000000000D+00
 DIAGONAL CONST. (21) = 0.0000000000D+00
 DIAGONAL CONST. (00) = 0.0000000000D+00
 KAPPA= -0.995054887D+00

AFTER 2 ITERATIONS THE UPPER STATE CONSTANTS ARE

A=	0.8650843579D+00		
+			+/-0.20198E-05
B=	0.4357114767D-01		
+			+/-0.10612E-05
C=	0.4153516749D-01		
+			+/-0.11256E-05
DELTAJ=	0.9746650000D-10		
DELTAJ=	0.9277490000D-08		
SH(J)=	0.0000000000D+00		
SH(JK)=	0.0000000000D+00		
SH(K)=	0.0000000000D+00		
DIAGONAL CONST. (02) =	0.4684703345D-06		
+			+/-0.11160E-07
DIAGONAL CONST. (11) =	-.2294619973D-07		
+			+/-0.31601E-09
DIAGONAL CONST. (20) =	0.1665386250D-08		
+			+/-0.36835E-11
DIAGONAL CONST. (03) =	0.0000000000D+00		
DIAGONAL CONST. (12) =	0.0000000000D+00		
DIAGONAL CONST. (21) =	0.0000000000D+00		
DIAGONAL CONST. (00) =	0.8937404506D+03		
+			+/-0.88099E-04
KAPPA=	-0.995055595D+00		
STD. DEV.=	0.000251		

KMAX= 70

THE CONVERGENCE CRITERION HAS BEEN SATISFIED -- NO MORE ITERATIONS ARE NEEDED.
 THE CORRELATION COEFFICIENTS ARE:

1	2	3	2	11	20	0
1 1.0000						
2 0.4023	1.0000					
3 -0.4018	-0.9997	1.0000				
2 -0.9706	-0.5151	0.5174	1.0000			
11 0.3733	0.9273	-0.9331	-0.5370	1.0000		
20 -0.3851	-0.9254	0.9199	0.5012	-0.8984	1.0000	
0 -0.9411	-0.2281	0.2218	0.8465	-0.1489	0.2550	1.0000

THE NUMBER OF NON-ZERO DATA POINTS IS: 899

1

US fit for 894 cm-1 band of tHTE-1-13C

J'	KA'	KC'	J''	KA''	KC''	OBSERVED	DEV.	WT.
7	7	0	-	6	6	904.753185	0.000584	0.100E+01
8	7	1	-	7	6	904.837342	-0.000283	0.100E+01
9	7	2	-	8	6	904.922653	0.000016	0.100E+01
10	7	3	-	9	6	905.007576	-0.000059	0.100E+01
11	7	4	-	10	6	905.092584	-0.000037	0.100E+01
12	7	5	-	11	6	905.177847	0.000254	0.100E+01
13	7	6	-	12	6	905.262552	0.000001	0.100E+01
14	7	7	-	13	6	905.347990	0.000494	0.100E+01
15	7	8	-	14	6	905.432376	-0.000050	0.100E+01
18	7	11	-	17	6	905.687102	-0.000024	0.100E+01
19	7	12	-	18	6	905.771951	-0.000044	0.100E+01
20	7	13	-	19	6	905.856967	0.000120	0.100E+01
21	7	14	-	20	6	905.941802	0.000120	0.100E+01
23	7	16	-	22	6	906.111556	0.000258	0.100E+01
24	7	17	-	23	6	906.195926	-0.000152	0.100E+01
25	7	18	-	24	6	906.281082	0.000244	0.100E+01
27	7	20	-	26	6	906.450172	-0.000125	0.100E+01
29	7	22	-	28	6	906.619476	-0.000193	0.100E+01
30	7	23	-	29	6	906.703948	-0.000372	0.100E+01
31	7	24	-	30	6	906.788904	-0.000043	0.100E+01
32	7	25	-	31	6	906.873553	0.000004	0.100E+01
33	7	26	-	32	6	906.957419	-0.000705	0.100E+01
34	7	27	-	33	6	907.042417	-0.000256	0.100E+01
35	7	28	-	34	6	907.126944	-0.000250	0.100E+01
38	7	31	-	37	6	907.380386	-0.000191	0.100E+01

39	7	32	-	38	6	32	907.464974	-0.000002	0.100E+01
40	7	33	-	39	6	33	907.549112	-0.000229	0.100E+01
41	7	34	-	40	6	34	907.633712	0.000041	0.100E+01
42	7	35	-	41	6	35	907.718113	0.000147	0.100E+01
43	7	36	-	42	6	36	907.801956	-0.000267	0.100E+01

Table S3. p. 2

44	7	37	-	43	6	37	907.886159	-0.000284	0.100E+01	78	8	70	-	77	7	70	912.276762	-0.000098	0.100E+01
45	7	38	-	44	6	38	907.970666	0.000043	0.100E+01	79	8	71	-	78	7	71	912.359556	-0.000067	0.100E+01
46	7	39	-	45	6	39	908.054530	-0.000232	0.100E+01	81	8	73	-	80	7	73	912.524290	-0.000237	0.100E+01
47	7	40	-	46	6	40	908.138455	-0.000405	0.100E+01	82	8	74	-	81	7	74	912.606345	-0.000586	0.100E+01
48	7	41	-	47	6	41	908.222998	0.000085	0.100E+01	83	8	75	-	82	7	75	912.688987	-0.000271	0.100E+01
49	7	42	-	48	6	42	908.306769	-0.000153	0.100E+01	84	8	76	-	83	7	76	912.771916	0.000412	0.100E+01
50	7	43	-	49	6	43	908.390987	0.000103	0.100E+01	86	8	78	-	85	7	78	912.935725	-0.000025	0.100E+01
51	7	44	-	50	6	44	908.474465	-0.000333	0.100E+01	87	8	79	-	86	7	79	913.017777	0.000032	0.100E+01
52	7	45	-	51	6	45	908.558690	0.000028	0.100E+01	88	8	80	-	87	7	80	913.099825	0.000172	0.100E+01
53	7	46	-	52	6	46	908.642111	-0.000365	0.100E+01	89	8	81	-	88	7	81	913.181866	0.000394	0.100E+01
54	7	47	-	53	6	47	908.725897	-0.000340	0.100E+01	90	8	82	-	89	7	82	913.263115	-0.000084	0.100E+01
55	7	48	-	54	6	48	908.809789	-0.000155	0.100E+01	92	8	84	-	91	7	84	913.426573	0.000201	0.100E+01
56	7	49	-	55	6	49	908.893533	-0.000061	0.100E+01	9	9	0	-	8	8	0	908.000738	-0.000423	0.100E+01
57	7	50	-	56	6	50	908.977166	-0.000021	0.100E+01	10	9	1	-	9	8	1	908.086298	0.000140	0.100E+01
58	7	51	-	57	6	51	909.061048	0.000327	0.100E+01	11	9	2	-	10	8	2	908.171138	-0.000003	0.100E+01
59	7	52	-	58	6	52	909.144536	0.000343	0.100E+01	13	9	4	-	12	8	4	908.340885	-0.000184	0.100E+01
60	7	53	-	59	6	53	909.227827	0.000224	0.100E+01	14	9	5	-	13	8	5	908.425985	-0.000028	0.100E+01
61	7	54	-	60	6	54	909.311404	0.000457	0.100E+01	15	9	6	-	14	8	6	908.510922	-0.000021	0.100E+01
62	7	55	-	61	6	55	909.394266	0.000041	0.100E+01	16	9	7	-	15	8	7	908.595768	-0.000091	0.100E+01
63	7	56	-	62	6	56	909.477681	0.000247	0.100E+01	17	9	8	-	16	8	8	908.680365	-0.000397	0.100E+01
64	7	57	-	63	6	57	909.560985	0.000413	0.100E+01	18	9	9	-	17	8	9	908.765613	-0.000037	0.100E+01
67	7	60	-	66	6	60	909.809644	0.000103	0.100E+01	19	9	10	-	18	8	10	908.850429	-0.000094	0.100E+01
69	7	62	-	68	6	62	909.974928	-0.000199	0.100E+01	20	9	11	-	19	8	11	908.935073	-0.000309	0.100E+01
70	7	63	-	69	6	63	910.057500	-0.000296	0.100E+01	21	9	12	-	20	8	12	909.020239	0.000013	0.100E+01
71	7	64	-	70	6	64	910.140138	-0.000241	0.100E+01	22	9	13	-	21	8	13	909.105162	0.000107	0.100E+01
72	7	65	-	71	6	65	910.222993	0.000120	0.100E+01	23	9	14	-	22	8	14	909.189966	0.000098	0.100E+01
73	7	66	-	72	6	66	910.304902	-0.000373	0.100E+01	25	9	16	-	24	8	16	909.359355	-0.000091	0.100E+01
74	7	67	-	73	6	67	910.387841	0.000256	0.100E+01	26	9	17	-	25	8	17	909.444307	0.000096	0.100E+01
75	7	68	-	74	6	68	910.469757	-0.000040	0.100E+01	27	9	18	-	26	8	18	909.529028	0.000069	0.100E+01
76	7	69	-	75	6	69	910.552286	0.000375	0.100E+01	28	9	19	-	27	8	19	909.613950	0.000260	0.100E+01
78	7	71	-	77	6	71	910.715871	0.000040	0.100E+01	31	9	22	-	30	8	22	909.867703	-0.000073	0.100E+01
79	7	72	-	78	6	72	910.798001	0.000370	0.100E+01	32	9	23	-	31	8	23	909.952655	0.000220	0.100E+01
80	7	73	-	79	6	73	910.879965	0.000645	0.100E+01	33	9	24	-	32	8	24	910.037107	0.000033	0.100E+01
9	8	1	-	8	7	1	906.469180	0.000086	0.100E+01	34	9	25	-	33	8	25	910.121842	0.000148	0.100E+01
11	8	3	-	10	7	3	906.638375	-0.000702	0.100E+01	35	9	26	-	34	8	26	910.206205	-0.000089	0.100E+01
12	8	4	-	11	7	4	906.724542	0.000493	0.100E+01	36	9	27	-	35	8	27	910.290807	-0.000067	0.100E+01
13	8	5	-	12	7	5	906.809719	0.000712	0.100E+01	37	9	28	-	36	8	28	910.375588	0.000156	0.100E+01
14	8	6	-	13	7	6	906.893716	-0.000236	0.100E+01	38	9	29	-	37	8	29	910.459956	-0.000014	0.100E+01
15	8	7	-	14	7	7	906.979022	0.000138	0.100E+01	39	9	30	-	38	8	30	910.544266	-0.000219	0.100E+01
16	8	8	-	15	7	8	907.064228	0.000427	0.100E+01	40	9	31	-	39	8	31	910.629096	0.000118	0.100E+01
17	8	9	-	16	7	9	907.148802	0.000099	0.100E+01	41	9	32	-	40	8	32	910.713111	-0.000337	0.100E+01
19	8	11	-	18	7	11	907.318224	-0.000241	0.100E+01	42	9	33	-	41	8	33	910.798001	0.000106	0.100E+01
20	8	12	-	19	7	12	907.402906	-0.000417	0.100E+01	43	9	34	-	42	8	34	910.882339	0.000021	0.100E+01
21	8	13	-	20	7	13	907.488417	0.000252	0.100E+01	44	9	35	-	43	8	35	910.966793	0.000077	0.100E+01
22	8	14	-	21	7	14	907.573132	0.000141	0.100E+01	45	9	36	-	44	8	36	911.051037	-0.000052	0.100E+01
23	8	15	-	22	7	15	907.657866	0.000065	0.100E+01	46	9	37	-	45	8	37	911.135431	-0.000005	0.100E+01
24	8	16	-	23	7	16	907.742831	0.000237	0.100E+01	47	9	38	-	46	8	38	911.220026	0.000269	0.100E+01
25	8	17	-	24	7	17	907.827581	0.000212	0.100E+01	48	9	39	-	47	8	39	911.304085	0.000035	0.100E+01
26	8	18	-	25	7	18	907.912440	0.000313	0.100E+01	49	9	40	-	48	8	40	911.387972	-0.000344	0.100E+01
27	8	19	-	26	7	19	907.996969	0.000102	0.100E+01	50	9	41	-	49	8	41	911.472452	-0.000102	0.100E+01
28	8	20	-	27	7	20	908.082052	0.000464	0.100E+01	51	9	42	-	50	8	42	911.556377	-0.000386	0.100E+01
29	8	21	-	28	7	21	908.166500	0.000210	0.100E+01	52	9	43	-	51	8	43	911.641227	0.000285	0.100E+01
30	8	22	-	29	7	22	908.251019	0.000047	0.100E+01	53	9	44	-	52	8	44	911.724714	-0.000377	0.100E+01
31	8	23	-	30	7	23	908.336040	0.000407	0.100E+01	54	9	45	-	53	8	45	911.808984	-0.000225	0.100E+01
32	8	24	-	31	7	24	908.419991	-0.000283	0.100E+01	55	9	46	-	54	8	46	911.893342	0.000047	0.100E+01
33	8	25	-	32	7	25	908.505053	0.000160	0.100E+01	56	9	47	-	55	8	47	911.977944	0.000145	0.100E+01
34	8	26	-	33	7	26	908.589628	0.000138	0.100E+01	57	9	48	-	56	8	48	912.061528	0.000159	0.100E+01
35	8	27	-	34	7	27	908.673580	-0.000484	0.100E+01	58	9	49	-	57	8	49	912.145364	0.000009	0.100E+01
36	8	28	-	35	7	28	908.758868	0.000253	0.100E+01	59	9	50	-	58	8	50	912.229467	0.000161	0.100E+01
37	8	29	-	36	7	29	908.843038	-0.000104	0.100E+01	60	9	51	-	59	8	51	912.313314	0.000092	0.100E+01
39	8	31	-	38	7	31	909.012336	0.000215	0.100E+01	61	9	52	-	60					

67	8	59	-	66	7	59	911.363325	-0.000228	0.100E+01	11	10	1	-	10	9	1	909.689418	0.000263	0.100E+01
69	8	61	-	68	7	61	911.530359	0.000198	0.100E+01	12	10	2	-	11	9	2	909.773991	-0.000133	0.100E+01
70	8	62	-	69	7	62	911.612916	-0.000463	0.100E+01	13	10	3	-	12	9	3	909.859389	0.000310	0.100E+01
71	8	63	-	70	7	63	911.695892	-0.000646	0.100E+01	14	10	4	-	13	9	4	909.944133	0.000112	0.100E+01
72	8	64	-	71	7	64	911.779805	0.000170	0.100E+01	15	10	5	-	14	9	5	910.029173	0.000224	0.100E+01
73	8	65	-	72	7	65	911.862465	-0.000205	0.100E+01	16	10	6	-	15	9	6	910.113515	-0.000348	0.100E+01
74	8	66	-	73	7	66	911.945347	-0.000295	0.100E+01	17	10	7	-	16	9	7	910.198726	-0.000037	0.100E+01
75	8	67	-	74	7	67	912.028308	-0.000240	0.100E+01	18	10	8	-	17	9	8	910.283349	-0.000300	0.100E+01
76	8	68	-	75	7	68	912.111005	-0.000383	0.100E+01	19	10	9	-	18	9	9	910.368361	-0.000159	0.100E+01
77	8	69	-	76	7	69	912.193923	-0.000236	0.100E+01	20	10	10	-	19	9	10	910.452907	-0.000470	0.100E+01

Table S3. p. 3

21	10	11	-	20	9	11	910.538358	0.000138	0.100E+01	40	11	29	-	39	10	29	913.650887	-0.000544	0.100E+01
22	10	12	-	21	9	12	910.623253	0.000206	0.100E+01	41	11	30	-	40	10	30	913.736031	0.000098	0.100E+01
23	10	13	-	22	9	13	910.707284	-0.000575	0.100E+01	42	11	31	-	41	10	31	913.820204	-0.000211	0.100E+01
24	10	14	-	23	9	14	910.792757	0.000101	0.100E+01	43	11	32	-	42	10	32	913.904777	-0.000101	0.100E+01
25	10	15	-	24	9	15	910.877441	0.000003	0.100E+01	44	11	33	-	43	10	33	913.989096	-0.000224	0.100E+01
26	10	16	-	25	9	16	910.962078	-0.000125	0.100E+01	45	11	34	-	44	10	34	914.073638	-0.000104	0.100E+01
27	10	17	-	26	9	17	911.046994	0.000041	0.100E+01	46	11	35	-	45	10	35	914.158370	0.000227	0.100E+01
28	10	18	-	27	9	18	911.131606	-0.000080	0.100E+01	47	11	36	-	46	10	36	914.242230	-0.000293	0.100E+01
29	10	19	-	28	9	19	911.216499	0.000096	0.100E+01	48	11	37	-	47	10	37	914.326753	-0.000128	0.100E+01
31	10	21	-	30	9	21	911.385863	0.000078	0.100E+01	49	11	38	-	48	10	38	914.410671	-0.000547	0.100E+01
32	10	22	-	31	9	22	911.470110	-0.000341	0.100E+01	50	11	39	-	49	10	39	914.495564	0.000032	0.100E+01
33	10	23	-	32	9	23	911.554633	-0.000465	0.100E+01	51	11	40	-	50	10	40	914.579898	0.000075	0.100E+01
34	10	24	-	33	9	24	911.639153	-0.000574	0.100E+01	52	11	41	-	51	10	41	914.663875	-0.000216	0.100E+01
35	10	25	-	34	9	25	911.724714	0.000376	0.100E+01	53	11	42	-	52	10	42	914.748552	0.000216	0.100E+01
36	10	26	-	35	9	26	911.808984	0.000053	0.100E+01	54	11	43	-	53	10	43	914.832453	-0.000104	0.100E+01
37	10	27	-	36	9	27	911.893342	-0.000162	0.100E+01	55	11	44	-	54	10	44	914.916280	-0.000474	0.100E+01
40	10	30	-	39	9	30	912.147214	0.000109	0.100E+01	56	11	45	-	55	10	45	915.000770	-0.000157	0.100E+01
41	10	31	-	40	9	31	912.231481	-0.000117	0.100E+01	57	11	46	-	56	10	46	915.085197	0.000123	0.100E+01
42	10	32	-	41	9	32	912.316426	0.000356	0.100E+01	58	11	47	-	57	10	47	915.169426	0.000230	0.100E+01
43	10	33	-	42	9	33	912.400968	0.000448	0.100E+01	59	11	48	-	58	10	48	915.253209	-0.000083	0.100E+01
44	10	34	-	43	9	34	912.484825	-0.000124	0.100E+01	60	11	49	-	59	10	49	915.337162	-0.000199	0.100E+01
45	10	35	-	44	9	35	912.568946	-0.000410	0.100E+01	61	11	50	-	60	10	50	915.421878	0.000474	0.100E+01
46	10	36	-	45	9	36	912.653718	-0.000022	0.100E+01	62	11	51	-	61	10	51	915.505776	0.000357	0.100E+01
47	10	37	-	46	9	37	912.738138	0.000037	0.100E+01	63	11	52	-	62	10	52	915.589414	0.000007	0.100E+01
48	10	38	-	47	9	38	912.822541	0.000103	0.100E+01	64	11	53	-	63	10	53	915.673561	0.000194	0.100E+01
49	10	39	-	48	9	39	912.906742	-0.000009	0.100E+01	65	11	54	-	64	10	54	915.757228	-0.000070	0.100E+01
50	10	40	-	49	9	40	912.991274	0.000235	0.100E+01	66	11	55	-	65	10	55	915.840869	-0.000330	0.100E+01
51	10	41	-	50	9	41	913.074650	-0.000653	0.100E+01	67	11	56	-	66	10	56	915.924730	-0.000342	0.100E+01
52	10	42	-	51	9	42	913.159307	-0.000234	0.100E+01	68	11	57	-	67	10	57	916.008598	-0.000316	0.100E+01
53	10	43	-	52	9	43	913.243450	-0.000303	0.100E+01	69	11	58	-	68	10	58	916.092388	-0.000337	0.100E+01
54	10	44	-	53	9	44	913.328021	0.000083	0.100E+01	70	11	59	-	69	10	59	916.176171	-0.000334	0.100E+01
55	10	45	-	54	9	45	913.412330	0.000233	0.100E+01	71	11	60	-	70	10	60	916.259775	-0.000479	0.100E+01
57	10	47	-	56	9	47	913.580022	-0.000308	0.100E+01	73	11	62	-	72	10	62	916.427520	-0.000133	0.100E+01
58	10	48	-	57	9	48	913.664575	0.000171	0.100E+01	74	11	63	-	73	10	63	916.511426	0.000122	0.100E+01
59	10	49	-	58	9	49	913.748499	0.000051	0.100E+01	75	11	64	-	74	10	64	916.595067	0.000147	0.100E+01
60	10	50	-	59	9	50	913.832706	0.000243	0.100E+01	76	11	65	-	75	10	65	916.677966	-0.000536	0.100E+01
61	10	51	-	60	9	51	913.916146	-0.000301	0.100E+01	77	11	66	-	76	10	66	916.762406	0.000357	0.100E+01
62	10	52	-	61	9	52	914.000044	-0.000356	0.100E+01	78	11	67	-	77	10	67	916.845459	-0.000101	0.100E+01
63	10	53	-	62	9	53	914.084185	-0.000137	0.100E+01	80	11	69	-	79	10	69	917.012437	-0.000037	0.100E+01
64	10	54	-	63	9	54	914.168727	0.000516	0.100E+01	81	11	70	-	80	10	70	917.095889	0.000014	0.100E+01
65	10	55	-	64	9	55	914.252359	0.000292	0.100E+01	82	11	71	-	81	10	71	917.179249	0.000011	0.100E+01
66	10	56	-	65	9	56	914.335925	0.000035	0.100E+01	84	11	73	-	83	10	73	917.345565	-0.000283	0.100E+01
67	10	57	-	66	9	57	914.419810	0.000131	0.100E+01	85	11	74	-	84	10	74	917.429186	0.000092	0.100E+01
68	10	58	-	67	9	58	914.503374	-0.000058	0.100E+01	87	11	76	-	86	10	76	917.595436	-0.000027	0.100E+01
69	10	59	-	68	9	59	914.587428	0.000278	0.100E+01	88	11	77	-	87	10	77	917.678183	-0.000403	0.100E+01
70	10	60	-	69	9	60	914.670991	0.000159	0.100E+01	90	11	79	-	89	10	79	917.844264	-0.000438	0.100E+01
71	10	61	-	70	9	61	914.754101	-0.000376	0.100E+01	12	12	0	-	11	10	0	912.769763	0.000169	0.100E+01
72	10	62	-	71	9	62	914.838077	-0.000008	0.100E+01	13	12	1	-	12	11	1	912.854856	0.000312	0.100E+01
74	10	64	-	73	9	64	915.005441	0.000257	0.100E+01	14	12	2	-	13	11	2	912.939682	0.000203	0.100E+01
75	10	65	-	74	9	65	915.088665	-0.000009	0.100E+01	15	12	3	-	14	11	3	913.024255	-0.000145	0.100E+01
76	10	66	-	75	9	66	915.172324	0.000200	0.100E+01	16	12	4	-	15	11	4	913.109412	0.000106	0.100E+01
77	10	67	-	76	9	67	915.255315	-0.000218	0.100E+01	17	12	5	-	16	11	5	913.194146	-0.000053	0.100E+01
78	10	68	-	77	9	68	915.339216	0.000317	0.100E+01	18	12	6	-	17	11	6	913.278750	-0.000327	0.100E+01
79	10	69	-	78	9	69	915.421878	-0.000345	0.100E+01	19	12	7	-	18	11	7	913.364223	0.000283	0.100E+01
80	10	70	-	79	9	70	915.505776	0.000273	0.100E+01	20	12	8	-	19	11	8	913.449055	0.000267	0.100E+01
81	10	71	-	80	9	71	915.589414	0.000675	0.100E+01	21	12	9	-	20	11	9	913.533495	-0.000127	0.100E+01
82	10	72	-	81	9	72	915.671640	-0.000289	0.100E+01	22	12	10	-	21	11	10	913.618340	-0.000101	0.100E+01
83	10	73	-	82	9	73	915.755207	0.000133	0.100E+01	23	12	11	-	22	11	11	913.702778	-0.000466	0.100E+01
84	10	74	-	83	9	74	915.838010	-0.000161	0.100E+01	24	12	12	-	23	11	12	913.787908	-0.000125	0.100E+01
86	10	76	-	85	9	76	916.003810	-0.000413	0.100E+01	25	12	13	-	24	11	13	913.873035	0.000229	0.100E+01
87	10	77	-	86	9	77	916.087390	0.000215	0.100E+01	26	12	14	-	25	11	14	913.957753	0.000190	0.100E+01
88	10	78	-	87	9	78	916.170342	0.000265	0.100E+01	27	12	15	-	26	11	15	914.042317	0.000012	0.100E+01
89	10	79	-	88	9	79	916.253289	0.000362	0.100E+01	28	12	16	-	27	11	16	914.126913	-0.000118	0.100E+01
91	10	81	-	90	9	81	916.418968	0.000496	0.100E+01	29	12	17	-	28	11	17	914.212131	0.000390	0.100E+01
94	10	84	-	93	9	84	916.666508	0.000126	0.100E+01	30	12	18	-	29	11	18	914.296819	0.000385	0.100E+01
95	10	85	-	94	9	85	916.748657	-0.000250	0.100E+01	31	12	19	-	30	11	19	914.381324	0.000212	0.100E+01
96	10	86	-	95	9	86	916.831570	0.000196	0.100E+01	32	12	20	-	31	11	20	914.465772	0.000000	0.100E+01
97	10	87	-	96	9	87	916.913376	-0.000406	0.100E+01	33	12	21	-	32	11</				

25	11	14	-	24	10	14	912.381854	0.000110	0.100E+01	52	12	40	-	51	11	40	916.155363	0.000195	0.100E+01
26	11	15	-	25	10	15	912.466610	0.000103	0.100E+01	53	12	41	-	52	11	41	916.239373	-0.000055	0.100E+01
27	11	16	-	26	10	16	912.551005	-0.000249	0.100E+01	54	12	42	-	53	11	42	916.324089	0.000424	0.100E+01
28	11	17	-	27	10	17	912.635698	-0.000287	0.100E+01	55	12	43	-	54	11	43	916.407833	-0.000047	0.100E+01
29	11	18	-	28	10	18	912.720369	-0.000331	0.100E+01	56	12	44	-	55	11	44	916.492333	0.000261	0.100E+01
30	11	19	-	29	10	19	912.805236	-0.000162	0.100E+01	57	12	45	-	56	11	45	916.576374	0.000133	0.100E+01
31	11	20	-	30	10	20	912.889708	-0.000372	0.100E+01	58	12	46	-	57	11	46	916.660363	-0.000023	0.100E+01
32	11	21	-	31	10	21	912.974598	-0.000148	0.100E+01	59	12	47	-	58	11	47	916.744632	0.000124	0.100E+01
33	11	22	-	32	10	22	913.059164	-0.000230	0.100E+01	60	12	48	-	59	11	48	916.828612	0.000007	0.100E+01
34	11	23	-	33	10	23	913.144159	0.000135	0.100E+01	61	12	49	-	60	11	49	916.913337	0.000698	0.100E+01
35	11	24	-	34	10	24	913.227979	-0.000659	0.100E+01	63	12	51	-	62	11	51	917.080937	0.000188	0.100E+01
36	11	25	-	35	10	25	913.313249	0.000016	0.100E+01	64	12	52	-	63	11	52	917.165469	0.000722	0.100E+01
37	11	26	-	36	10	26	913.398074	0.000264	0.100E+01	65	12	53	-	64	11	53	917.248607	-0.000111	0.100E+01
38	11	27	-	37	10	27	913.482132	-0.000237	0.100E+01	66	12	54	-	65	11	54	917.332769	0.000106	0.100E+01
39	11	28	-	38	10	28	913.566822	-0.000087	0.100E+01	67	12	55	-	66	11	55	917.417094	0.000512	0.100E+01

Table S3. p. 4

68	12	56	-	67	11	56	917.500779	0.000306	0.100E+01	17	8	9	-	18	9	9	877.611035	0.000146	0.100E+01
69	12	57	-	68	11	57	917.583916	-0.000421	0.100E+01	18	8	10	-	19	9	10	877.525628	0.000113	0.100E+01
70	12	58	-	69	11	58	917.668592	0.000420	0.100E+01	19	8	11	-	20	9	11	877.440896	0.000767	0.100E+01
71	12	59	-	70	11	59	917.752151	0.000171	0.100E+01	20	8	12	-	21	9	12	877.354926	0.000196	0.100E+01
72	12	60	-	71	11	60	917.836131	0.000372	0.100E+01	21	8	13	-	22	9	13	877.269489	0.000170	0.100E+01
73	12	61	-	72	11	61	917.919354	-0.000154	0.100E+01	22	8	14	-	23	9	14	877.183799	-0.000098	0.100E+01
74	12	62	-	73	11	62	918.003034	-0.000194	0.100E+01	23	8	15	-	24	9	15	877.098489	0.000027	0.100E+01
75	12	63	-	74	11	63	918.086715	-0.000203	0.100E+01	24	8	16	-	25	9	16	877.013585	0.000569	0.100E+01
77	12	65	-	76	11	65	918.254360	0.000155	0.100E+01	25	8	17	-	26	9	17	876.927860	0.000300	0.100E+01
78	12	66	-	77	11	66	918.338036	0.000234	0.100E+01	26	8	18	-	27	9	18	876.842112	0.000020	0.100E+01
79	12	67	-	78	11	67	918.421479	0.000111	0.100E+01	27	8	19	-	28	9	19	876.756453	-0.000161	0.100E+01
80	12	68	-	79	11	68	918.504957	0.000056	0.100E+01	29	8	21	-	30	9	21	876.585872	0.000244	0.100E+01
81	12	69	-	80	11	69	918.588567	0.000166	0.100E+01	30	8	22	-	31	9	22	876.500207	0.000087	0.100E+01
82	12	70	-	81	11	70	918.672255	0.000388	0.100E+01	31	8	23	-	32	9	23	876.414685	0.000082	0.100E+01
83	12	71	-	82	11	71	918.755272	-0.000029	0.100E+01	32	8	24	-	33	9	24	876.329038	-0.000040	0.100E+01
84	12	72	-	83	11	72	918.838999	0.000300	0.100E+01	33	8	25	-	34	9	25	876.243276	-0.000268	0.100E+01
86	12	74	-	85	11	74	919.005536	0.000143	0.100E+01	34	8	26	-	35	9	26	876.158053	0.000051	0.100E+01
87	12	75	-	86	11	75	919.088402	-0.000284	0.100E+01	35	8	27	-	36	9	27	876.072512	0.000060	0.100E+01
88	12	76	-	87	11	76	919.171287	-0.000656	0.100E+01	36	8	28	-	37	9	28	875.986757	-0.000138	0.100E+01
89	12	77	-	88	11	77	919.254462	-0.000701	0.100E+01	37	8	29	-	38	9	29	875.901642	0.000310	0.100E+01
90	12	78	-	89	11	78	919.338181	-0.000165	0.100E+01	38	8	30	-	39	9	30	875.815878	0.000117	0.100E+01
91	12	79	-	90	11	79	919.421849	0.000358	0.100E+01	39	8	31	-	40	9	31	875.730286	0.000101	0.100E+01
92	12	80	-	91	11	80	919.504415	-0.000183	0.100E+01	40	8	32	-	41	9	32	875.644470	-0.000134	0.100E+01
94	12	82	-	93	11	82	919.670641	-0.000054	0.100E+01	41	8	33	-	42	9	33	875.558951	-0.000066	0.100E+01
95	12	83	-	94	11	83	919.753751	0.000068	0.100E+01	42	8	34	-	43	9	34	875.473494	0.000068	0.100E+01
7	7	0	-	8	8	0	880.235645	0.000438	0.100E+01	43	8	35	-	44	9	35	875.387806	-0.000025	0.100E+01
8	7	1	-	9	8	1	880.149859	-0.000113	0.100E+01	44	8	36	-	45	9	36	875.302209	-0.000023	0.100E+01
9	7	2	-	10	8	2	880.065098	0.000373	0.100E+01	45	8	37	-	46	9	37	875.216683	0.000053	0.100E+01
10	7	3	-	11	8	3	879.979583	0.000119	0.100E+01	46	8	38	-	47	9	38	875.131064	0.000038	0.100E+01
11	7	4	-	12	8	4	879.894500	0.000310	0.100E+01	47	8	39	-	48	9	39	875.045562	0.000142	0.100E+01
12	7	5	-	13	8	5	879.809046	0.000144	0.100E+01	48	8	40	-	49	9	40	874.959871	0.000059	0.100E+01
13	7	6	-	14	8	6	879.723479	-0.000123	0.100E+01	49	8	41	-	50	9	41	874.874217	0.000013	0.100E+01
14	7	7	-	15	8	7	879.638429	0.000140	0.100E+01	50	8	42	-	51	9	42	874.788506	-0.000089	0.100E+01
15	7	8	-	16	8	8	879.553052	0.000088	0.100E+01	51	8	43	-	52	9	43	874.703103	0.000117	0.100E+01
16	7	9	-	17	8	9	879.467774	0.000147	0.100E+01	52	8	44	-	53	9	44	874.617438	0.000059	0.100E+01
17	7	10	-	18	8	10	879.382547	0.000270	0.100E+01	53	8	45	-	54	9	45	874.531727	-0.000046	0.100E+01
18	7	11	-	19	8	11	879.296638	-0.000278	0.100E+01	54	8	46	-	55	9	46	874.445957	-0.000212	0.100E+01
19	7	12	-	20	8	12	879.211569	0.000025	0.100E+01	55	8	47	-	56	9	47	874.360441	-0.000127	0.100E+01
20	7	13	-	21	8	13	879.125776	-0.000385	0.100E+01	56	8	48	-	57	9	48	874.274975	0.000005	0.100E+01
21	7	14	-	22	8	14	879.040795	0.000028	0.100E+01	57	8	49	-	58	9	49	874.189540	0.000164	0.100E+01
22	7	15	-	23	8	15	878.955496	0.000133	0.100E+01	58	8	50	-	59	9	50	874.103880	0.000093	0.100E+01
23	7	16	-	24	8	16	878.870347	0.000399	0.100E+01	59	8	51	-	60	9	51	874.018213	0.000009	0.100E+01
24	7	17	-	25	8	17	878.784438	-0.000086	0.100E+01	60	8	52	-	61	9	52	873.932425	-0.000201	0.100E+01
25	7	18	-	26	8	18	878.698967	-0.000125	0.100E+01	61	8	53	-	62	9	53	873.846828	-0.000228	0.100E+01
26	7	19	-	27	8	19	878.613755	0.000105	0.100E+01	62	8	54	-	63	9	54	873.761417	-0.000076	0.100E+01
27	7	20	-	28	8	20	878.528379	0.000179	0.100E+01	63	8	55	-	64	9	55	873.676014	0.000075	0.100E+01
29	7	22	-	30	8	22	878.356995	-0.000282	0.100E+01	64	8	56	-	65	9	56	873.590205	-0.000188	0.100E+01
30	7	23	-	31	8	23	878.272127	0.000323	0.100E+01	65	8	57	-	66	9	57	873.505061	0.000204	0.100E+01
31	7	24	-	32	8	24	878.186457	0.000131	0.100E+01	66	8	58	-	67	9	58	873.419153	-0.000179	0.100E+01
33	7	26	-	34	8	26	878.015330	-0.000022	0.100E+01	67	8	59	-	68	9	59	873.333732	-0.000087	0.100E+01
34	7	27	-	35	8	27	877.929611	-0.000247	0.100E+01	68	8	60	-	69	9	60	873.248510	0.000193	0.100E+01
35	7	28	-	36	8	28	877.844360	0.000001	0.100E+01	69	8	61	-	70	9	61	873.162829	0.000000	0.100E+01
36	7	29	-	37	8	29	877.758437	-0.000420	0.100E+01	70	8	62	-	71	9	62	873.077354	0.000000	0.100E+01
37	7	30	-	38	8	30	877.673668	0.000316	0.100E+01	71	8	63	-	72	9	63	872.991846	-0.000048	0.100E+01
38	7	31	-	39	8	31	877.587906	0.000061	0.100E+01	72	8	64	-	73	9	64	872.906424	-0.000026	0.100E+01
39	7	32	-	40	8	32	877.502362	0.000026	0.100E+01	73	8	65	-	74	9	65	872.821089	0.000068	0.100E+01
40	7	33	-	41	8	33	877.416833	0.000007	0.100E+01	74	8	66	-	75	9	66	872.735299	-0.000312	0.100E+01
41	7	34	-	42	8	34	877.331155	-0.000161	0.100E+01	75	8	67	-	76	9	67	872.649941	-0.000277	0.100E+01
42	7	35	-	43	8	35	877.245797	-0.000010	0.100E+01	77	8	69	-	78	9	69	872.479427	-0.000064	0.100E+01
43	7	36	-	44	8	36	877.160038	0.000260	0.100E+01	78	8	70	-	79	9	70	872.394091	-0.000067	0.100E+01
44	7	37	-	45	8	37	877.074697	-0.000095	0.100E+01	9	9	0	-	10	10	0	876.508857	0.000230	0.100E+01
45	7	38	-	46	8	38	876.988991	-0.000297	0.100E+01	10	9	1	-	11	10	1	876.423174	-0.000179	0.100E+01
46	7	39	-	47	8	39	876.903469	-0.000319	0.100E+01	11	9	2	-	12	10	2	876.338087	0.000022	0.100E+01
47	7	40	-	48	8	40	876.818400	0.000109	0.100E+01	12	9	3	-	13	10	3	876.252831	0.000068	0.100E+01
48	7	41	-	49	8	41	876.732917	0.000117	0.100E+01	13	9	4	-	14	10	4	876.167699	0.000253	0.100E+01
49	7	42	-	50	8	42	876.647276	-0.000039	0.100E+01	14	9	5	-	15	10	5	876.082042	-0.000073	0.100E+01
50	7	43	-	51	8	43	876.561842	0.000005	0.100E+01	15	9	6	-	16	10	6	875.996679	-0.000091	0.100E+01
51	7	44	-	52	8	44	876.476053	-0.000313	0.100E+01	16	9	7	-	17	10	7	875.911212	-0.000200	0.100E+01
52	7	45	-	53	8	45	876.390923	0.000019	0.100E+01	17	9	8	-	18	10	8	875.826209	0.000170	0.100E+01
53	7	46	-	54	8	46	876.305482	0.000031	0.100E+01</										

67	7	60	-	68	8	60	875.110438	-0.000223	0.100E+01	27	9	18	-	28	10	18	874.971450	-0.000140	0.100E+01
68	7	61	-	69	8	61	875.024975	-0.000497	0.100E+01	28	9	19	-	29	10	19	874.886079	0.000002	0.100E+01
69	7	62	-	70	8	62	874.939934	-0.000376	0.100E+01	29	9	20	-	30	10	20	874.800510	-0.000043	0.100E+01
70	7	63	-	71	8	63	874.855137	-0.000039	0.100E+01	30	9	21	-	31	10	21	874.715098	0.000081	0.100E+01
71	7	64	-	72	8	64	874.769518	-0.000554	0.100E+01	31	9	22	-	32	10	22	874.629381	-0.000089	0.100E+01
72	7	65	-	73	8	65	874.685223	0.000225	0.100E+01	32	9	23	-	33	10	23	874.543947	0.000035	0.100E+01
73	7	66	-	74	8	66	874.599768	-0.000187	0.100E+01	33	9	24	-	34	10	24	874.458281	-0.000063	0.100E+01
74	7	67	-	75	8	67	874.514451	-0.000495	0.100E+01	34	9	25	-	35	10	25	874.373027	0.000262	0.100E+01
76	7	69	-	77	8	69	874.344934	-0.000099	0.100E+01	35	9	26	-	36	10	26	874.287249	0.000072	0.100E+01
77	7	70	-	78	8	70	874.260193	0.000062	0.100E+01	36	9	27	-	37	10	27	874.201674	0.000096	0.100E+01
78	7	71	-	79	8	71	874.175344	0.000075	0.100E+01	37	9	28	-	38	10	28	874.116005	0.000034	0.100E+01
8	8	0	-	9	9	0	878.378530	-0.000130	0.100E+01	38	9	29	-	39	10	29	874.030413	0.000059	0.100E+01
9	8	1	-	10	9	1	878.293443	0.000037	0.100E+01	39	9	30	-	40	10	30	873.944866	0.000137	0.100E+01
10	8	2	-	11	9	2	878.208276	0.000137	0.100E+01	40	9	31	-	41	10	31	873.859158	0.000063	0.100E+01
11	8	3	-	12	9	3	878.122886	0.000028	0.100E+01	41	9	32	-	42	10	32	873.773726	0.000273	0.100E+01
12	8	4	-	13	9	4	878.037902	0.000338	0.100E+01	42	9	33	-	43	10	33	873.688043	0.000240	0.100E+01
13	8	5	-	14	9	5	877.952401	0.000146	0.100E+01	43	9	34	-	44	10	34	873.601947	-0.000199	0.100E+01
14	8	6	-	15	9	6	877.866893	-0.000041	0.100E+01	44	9	35	-	45	10	35	873.516056	-0.000426	0.100E+01
15	8	7	-	16	9	7	877.781752	0.000153	0.100E+01	45	9	36	-	46	10	36	873.430438	-0.000373	0.100E+01
16	8	8	-	17	9	8	877.696453	0.000203	0.100E+01	46	9	37	-	47	10	37	873.344846	-0.000288	0.100E+01

Table S3. p. 5

47	9	38	-	48	10	38	873.259236	-0.000214	0.100E+01	78	10	68	-	79	11	68	868.800447	0.000317	0.100E+01
48	9	39	-	49	10	39	873.173636	-0.000126	0.100E+01	79	10	69	-	80	11	69	868.714648	0.000354	0.100E+01
49	9	40	-	50	10	40	873.087989	-0.000079	0.100E+01	81	10	71	-	82	11	71	868.542667	0.000032	0.100E+01
50	9	41	-	51	10	41	873.002387	0.000018	0.100E+01	82	10	72	-	83	11	72	868.456834	0.000021	0.100E+01
51	9	42	-	52	10	42	872.916614	-0.000052	0.100E+01	83	10	73	-	84	11	73	868.371433	0.000437	0.100E+01
52	9	43	-	53	10	43	872.831228	0.000268	0.100E+01	84	10	74	-	85	11	74	868.285612	0.000427	0.100E+01
53	9	44	-	54	10	44	872.745540	0.000291	0.100E+01	85	10	75	-	86	11	75	868.199802	0.000422	0.100E+01
54	9	45	-	55	10	45	872.659962	0.000426	0.100E+01	86	10	76	-	87	11	76	868.113621	0.000038	0.100E+01
55	9	46	-	56	10	46	872.574487	0.000667	0.100E+01	89	10	79	-	90	11	79	867.856493	0.000255	0.100E+01
56	9	47	-	57	10	47	872.488535	0.000433	0.100E+01	90	10	80	-	91	11	80	867.770434	-0.000040	0.100E+01
57	9	48	-	58	10	48	872.402745	0.000363	0.100E+01	91	10	81	-	92	11	81	867.684816	0.000096	0.100E+01
58	9	49	-	59	10	49	872.317219	0.000558	0.100E+01	92	10	82	-	93	11	82	867.599073	0.000097	0.100E+01
59	9	50	-	60	10	50	872.231419	0.000479	0.100E+01	93	10	83	-	94	11	83	867.513412	0.000169	0.100E+01
60	9	51	-	61	10	51	872.145324	0.000106	0.100E+01	94	10	84	-	95	11	84	867.427543	0.000021	0.100E+01
63	9	54	-	64	10	54	871.888014	-0.000043	0.100E+01	95	10	85	-	96	11	85	867.341846	0.000034	0.100E+01
64	9	55	-	65	10	55	871.802450	0.000111	0.100E+01	96	10	86	-	97	11	86	867.256452	0.000337	0.100E+01
65	9	56	-	66	10	56	871.716603	-0.000021	0.100E+01	97	10	87	-	98	11	87	867.170772	0.000340	0.100E+01
66	9	57	-	67	10	57	871.630917	0.000005	0.100E+01	11	11	0	-	12	12	0	872.729790	-0.000177	0.100E+01
68	9	59	-	69	10	59	871.459643	0.000145	0.100E+01	12	11	1	-	13	12	1	872.644460	-0.000187	0.100E+01
71	9	62	-	72	10	62	871.202527	0.000113	0.100E+01	13	11	2	-	14	12	2	872.559265	-0.000048	0.100E+01
72	9	63	-	73	10	63	871.117432	0.000701	0.100E+01	14	11	3	-	15	12	3	872.473909	-0.000053	0.100E+01
73	9	64	-	74	10	64	871.031273	0.000218	0.100E+01	15	11	4	-	16	12	4	872.388589	-0.000008	0.100E+01
74	9	65	-	75	10	65	870.945812	0.000425	0.100E+01	16	11	5	-	17	12	5	872.303073	-0.000143	0.100E+01
75	9	66	-	76	10	66	870.860044	0.000317	0.100E+01	17	11	6	-	18	12	6	872.217788	-0.000031	0.100E+01
76	9	67	-	77	10	67	870.774447	0.000371	0.100E+01	18	11	7	-	19	12	7	872.132262	-0.000146	0.100E+01
77	9	68	-	78	10	68	870.688673	0.000239	0.100E+01	19	11	8	-	20	12	8	872.046860	-0.000121	0.100E+01
78	9	69	-	79	10	69	870.603345	0.000543	0.100E+01	20	11	9	-	21	12	9	871.961494	-0.000046	0.100E+01
79	9	70	-	80	10	70	870.517068	-0.000113	0.100E+01	21	11	10	-	22	12	10	871.875798	-0.000286	0.100E+01
80	9	71	-	81	10	71	870.431478	-0.000094	0.100E+01	22	11	11	-	23	12	11	871.790340	-0.000272	0.100E+01
81	9	72	-	82	10	72	870.345792	-0.000183	0.100E+01	23	11	12	-	24	12	12	871.704802	-0.000324	0.100E+01
82	9	73	-	83	10	73	870.259842	-0.000548	0.100E+01	24	11	13	-	25	12	13	871.619749	0.000123	0.100E+01
84	9	75	-	85	10	75	870.088812	-0.000450	0.100E+01	25	11	14	-	26	12	14	871.533837	-0.000274	0.100E+01
87	9	78	-	88	10	78	869.832507	-0.000177	0.100E+01	26	11	15	-	27	12	15	871.448428	-0.000154	0.100E+01
88	9	79	-	89	10	79	869.746965	-0.000226	0.100E+01	27	11	16	-	28	12	16	871.362921	-0.000118	0.100E+01
89	9	80	-	90	10	80	869.662007	0.000291	0.100E+01	28	11	17	-	29	12	17	871.277175	-0.000306	0.100E+01
90	9	81	-	91	10	81	869.576296	0.000036	0.100E+01	29	11	18	-	30	12	18	871.191598	-0.000312	0.100E+01
91	9	82	-	92	10	82	869.490855	0.000032	0.100E+01	30	11	19	-	31	12	19	871.106255	-0.000070	0.100E+01
10	10	0	-	11	11	0	874.625505	-0.000057	0.100E+01	31	11	20	-	32	12	20	871.020672	-0.000054	0.100E+01
11	10	1	-	12	11	1	874.540450	0.000184	0.100E+01	32	11	21	-	33	12	21	870.935057	-0.000057	0.100E+01
12	10	2	-	13	11	2	874.454904	-0.000052	0.100E+01	33	11	22	-	34	12	22	870.849323	-0.000165	0.100E+01
13	10	3	-	14	11	3	874.369431	-0.000200	0.100E+01	34	11	23	-	35	12	23	870.763962	0.000112	0.100E+01
14	10	4	-	15	11	4	874.283928	-0.000362	0.100E+01	35	11	24	-	36	12	24	870.678172	-0.000026	0.100E+01
15	10	5	-	16	11	5	874.198997	0.000062	0.100E+01	36	11	25	-	37	12	25	870.592619	0.000086	0.100E+01
16	10	6	-	17	11	6	874.113607	0.000041	0.100E+01	37	11	26	-	38	12	26	870.506792	-0.000064	0.100E+01
17	10	7	-	18	11	7	874.028232	0.000051	0.100E+01	38	11	27	-	39	12	27	870.420957	-0.000209	0.100E+01
18	10	8	-	19	11	8	873.942761	-0.000022	0.100E+01	39	11	28	-	40	12	28	870.335335	-0.000129	0.100E+01
19	10	9	-	20	11	9	873.857248	-0.000122	0.100E+01	40	11	29	-	41	12	29	870.249700	-0.000050	0.100E+01
20	10	10	-	21	11	10	873.771771	-0.000172	0.100E+01	41	11	30	-	42	12	30	870.163890	-0.000134	0

53	10	43	-	54	11	43	870.945812	-0.000215	0.100E+01	67	11	56	-	68	12	56	867.931560	-0.000113	0.100E+01
54	10	44	-	55	11	44	870.860044	-0.000187	0.100E+01	68	11	57	-	69	12	57	867.845710	-0.000001	0.100E+01
55	10	45	-	56	11	45	870.774447	0.000017	0.100E+01	69	11	58	-	70	12	58	867.759900	0.000155	0.100E+01
56	10	46	-	57	11	46	870.688673	0.000050	0.100E+01	70	11	59	-	71	12	59	867.673666	-0.000108	0.100E+01
57	10	47	-	58	11	47	870.603345	0.000535	0.100E+01	71	11	60	-	72	12	60	867.587705	-0.000094	0.100E+01
58	10	48	-	59	11	48	870.517068	0.000076	0.100E+01	72	11	61	-	73	12	61	867.502003	0.000183	0.100E+01
59	10	49	-	60	11	49	870.431478	0.000309	0.100E+01	73	11	62	-	74	12	62	867.415993	0.000156	0.100E+01
60	10	50	-	61	11	50	870.345792	0.000451	0.100E+01	74	11	63	-	75	12	63	867.329693	-0.000158	0.100E+01
61	10	51	-	62	11	51	870.259842	0.000332	0.100E+01	75	11	64	-	76	12	64	867.244010	0.000147	0.100E+01
62	10	52	-	63	11	52	870.173842	0.000167	0.100E+01	76	11	65	-	77	12	65	867.158143	0.000272	0.100E+01
63	10	53	-	64	11	53	870.087699	-0.000137	0.100E+01	77	11	66	-	78	12	66	867.071916	0.000038	0.100E+01
64	10	54	-	65	11	54	870.002058	0.000064	0.100E+01	78	11	67	-	79	12	67	866.985936	0.000054	0.100E+01
65	10	55	-	66	11	55	869.916440	0.000290	0.100E+01	79	11	68	-	80	12	68	866.900318	0.000433	0.100E+01
66	10	56	-	67	11	56	869.830610	0.000306	0.100E+01	81	11	70	-	82	12	70	866.727679	-0.000209	0.100E+01
67	10	57	-	68	11	57	869.744653	0.000197	0.100E+01	82	11	71	-	83	12	71	866.642018	0.000129	0.100E+01
68	10	58	-	69	11	58	869.658661	0.000055	0.100E+01	83	11	72	-	84	12	72	866.556325	0.000436	0.100E+01
69	10	59	-	70	11	59	869.572807	0.000051	0.100E+01	84	11	73	-	85	12	73	866.469937	0.000047	0.100E+01
70	10	60	-	71	11	60	869.487063	0.000158	0.100E+01	86	11	75	-	87	12	75	866.297815	-0.000079	0.100E+01
71	10	61	-	72	11	61	869.401192	0.000138	0.100E+01	87	11	76	-	88	12	76	866.211979	0.000080	0.100E+01
72	10	62	-	73	11	62	869.315410	0.000207	0.100E+01	88	11	77	-	89	12	77	866.126156	0.000251	0.100E+01
73	10	63	-	74	11	63	869.229239	-0.000114	0.100E+01	90	11	79	-	91	12	79	865.953922	-0.000002	0.100E+01
74	10	64	-	75	11	64	869.143496	-0.000008	0.100E+01	91	11	80	-	92	12	80	865.868212	0.000273	0.100E+01
75	10	65	-	76	11	65	869.057547	-0.000110	0.100E+01	92	11	81	-	93	12	81	865.781873	-0.000083	0.100E+01
76	10	66	-	77	11	66	868.971925	0.000113	0.100E+01	93	11	82	-	94	12	82	865.695928	-0.000050	0.100E+01
77	10	67	-	78	11	67	868.886013	0.000043	0.100E+01	94	11	83	-	95	12	83	865.610091	0.000087	0.100E+01

Table S3. p. 6

95	11	84	-	96	12	84	865.524513	0.000478	0.100E+01
96	11	85	-	97	12	85	865.438138	0.000067	0.100E+01
97	11	86	-	98	12	86	865.352293	0.000180	0.100E+01
12	12	0	-	13	13	0	870.822336	-0.000053	0.100E+01
13	12	1	-	14	13	1	870.737302	0.000258	0.100E+01
15	12	3	-	16	13	3	870.566215	-0.000091	0.100E+01
16	12	4	-	17	13	4	870.480724	-0.000189	0.100E+01
17	12	5	-	18	13	5	870.395555	0.000051	0.100E+01
18	12	6	-	19	13	6	870.310046	-0.000033	0.100E+01
19	12	7	-	20	13	7	870.224656	0.000018	0.100E+01
20	12	8	-	21	13	8	870.139413	0.000232	0.100E+01
21	12	9	-	22	13	9	870.053786	0.000077	0.100E+01
22	12	10	-	23	13	10	869.968096	-0.000125	0.100E+01
23	12	11	-	24	13	11	869.882857	0.000139	0.100E+01
24	12	12	-	25	13	12	869.797300	0.000101	0.100E+01
25	12	13	-	26	13	13	869.711781	0.000116	0.100E+01
26	12	14	-	27	13	14	869.626307	0.000191	0.100E+01
27	12	15	-	28	13	15	869.540648	0.000096	0.100E+01
28	12	16	-	29	13	16	869.455044	0.000071	0.100E+01
29	12	17	-	30	13	17	869.369458	0.000080	0.100E+01
30	12	18	-	31	13	18	869.283769	-0.000001	0.100E+01
31	12	19	-	32	13	19	869.198072	-0.000074	0.100E+01
32	12	20	-	33	13	20	869.112556	0.000048	0.100E+01
33	12	21	-	34	13	21	869.027118	0.000263	0.100E+01
34	12	22	-	35	13	22	868.941307	0.000119	0.100E+01
35	12	23	-	36	13	23	868.855467	-0.000040	0.100E+01
36	12	24	-	37	13	24	868.770096	0.000284	0.100E+01
37	12	25	-	38	13	25	868.684504	0.000400	0.100E+01
38	12	26	-	39	13	26	868.598650	0.000269	0.100E+01
39	12	27	-	40	13	27	868.512827	0.000182	0.100E+01
40	12	28	-	41	13	28	868.427033	0.000138	0.100E+01
41	12	29	-	42	13	29	868.341161	0.000029	0.100E+01
42	12	30	-	43	13	30	868.255509	0.000153	0.100E+01
43	12	31	-	44	13	31	868.169942	0.000376	0.100E+01
46	12	34	-	47	13	34	867.911851	-0.000271	0.100E+01
47	12	35	-	48	13	35	867.826300	0.000017	0.100E+01
48	12	36	-	49	13	36	867.740263	-0.000168	0.100E+01
49	12	37	-	50	13	37	867.654355	-0.000212	0.100E+01
50	12	38	-	51	13	38	867.568683	-0.000008	0.100E+01
51	12	39	-	52	13	39	867.482440	-0.000364	0.100E+01
52	12	40	-	53	13	40	867.396828	-0.000077	0.100E+01
53	12	41	-	54	13	41	867.310945	-0.000050	0.100E+01
54	12	42	-	55	13	42	867.225053	-0.000021	0.100E+01
55	12	43	-	56	13	43	867.139197	0.000055	0.100E+01
56	12	44	-	57	13	44	867.053395	0.000196	0.100E+01
57	12	45	-	58	13	45	866.967347	0.000101	0.100E+01
58	12	46	-	59	13	46	866.881463	0.000180	0.100E+01
59	12	47	-	60	13	47	866.795488	0.000179	0.100E+01
60	12	48	-	61	13	48	866.709187	-0.000139	0.100E+01
61	12	49	-	62	13	49	866.623475	0.000143	0.100E+01
62	12	50	-	63	13	50	866.537595	0.000265	0.100E+01
63	12	51	-	64	13	51	866.451249	-0.000069	0.100E+01
64	12	52	-	65	13	52	866.365478	0.000181	0.100E+01
65	12	53	-	66	13	53	866.278909	-0.000359	0.100E+01
66	12	54	-	67	13	54	866.193311	0.000081	0.100E+01
67	12	55	-	68	13	55	866.107410	0.000226	0.100E+01
68	12	56	-	69	13	56	866.021148	0.000019	0.100E+01
69	12	57	-	70	13	57	865.935081	0.000014	0.100E+01
70	12	58	-	71	13	58	865.848850	-0.000147	0.100E+01
71	12	59	-	72	13	59	865.763002	0.000082	0.100E+01
72	12	60	-	73	13	60	865.677073	0.000237	0.100E+01
73	12	61	-	74	13	61	865.590763	0.000018	0.100E+01
74	12	62	-	75	13	62	865.504828	0.000180	0.100E+01
75	12	63	-	76	13	63	865.418720	0.000176	0.100E+01
76	12	64	-	77	13	64	865.332567	0.000133	0.100E+01
77	12	65	-	78	13	65	865.245813	-0.000505	0.100E+01
78	12	66	-	79	13	66	865.159778	-0.000419	0.100E+01
79	12	67	-	80	13	67	865.073758	-0.000313	0.100E+01

80	12	68	-	81	13	68	864.987873	-0.000067	0.100E+01
81	12	69	-	82	13	69	864.901223	-0.000581	0.100E+01
82	12	70	-	83	13	70	864.815349	-0.000314	0.100E+01
83	12	71	-	84	13	71	864.729077	-0.000442	0.100E+01
84	12	72	-	85	13	72	864.643121	-0.000250	0.100E+01
85	12	73	-	86	13	73	864.556708	-0.000511	0.100E+01
87	12	75	-	88	13	75	864.385088	0.000182	0.100E+01
88	12	76	-	89	13	76	864.298659	-0.000087	0.100E+01
89	12	77	-	90	13	77	864.212752	0.000169	0.100E+01
90	12	78	-	91	13	78	864.126354	-0.000064	0.100E+01
91	12	79	-	92	13	79	864.040585	0.000333	0.100E+01
92	12	80	-	93	13	80	863.954012	-0.000072	0.100E+01
93	12	81	-	94	13	81	863.867444	-0.000471	0.100E+01
94	12	82	-	95	13	82	863.781428	-0.000318	0.100E+01
95	12	83	-	96	13	83	863.695098	-0.000478	0.100E+01
96	12	84	-	97	13	84	863.608934	-0.000472	0.100E+01
97	12	85	-	98	13	85	863.522776	-0.000460	0.100E+01

Table S3A. Addendum. Lines not fit but used for GSCDs.

914.419810	14	13	1	13	12	1	921.874000	85	14	71	84	13	71
914.589520	16	13	3	15	12	3	921.957808	86	14	72	85	13	72
914.759716	18	13	5	17	12	5	922.041311	87	14	73	86	13	73
914.844235	19	13	6	18	12	6	922.125387	88	14	74	87	13	74
915.014131	21	13	8	20	12	8	922.208298	89	14	75	88	13	75
915.098837	22	13	9	21	12	9	922.291966	90	14	76	89	13	76
915.183477	23	13	10	22	12	10	922.375036	91	14	77	90	13	77
915.268391	24	13	11	23	12	11	922.458652	92	14	78	91	13	78
915.353073	25	13	12	24	12	12	922.541622	93	14	79	92	13	79
915.437725	26	13	13	25	12	13	922.625473	94	14	80	93	13	80
915.522524	27	13	14	26	12	14	917.468915	15	15	0	14	14	0
915.606796	28	13	15	27	12	15	917.553606	16	15	1	15	14	1
915.691683	29	13	16	28	12	16	917.638470	17	15	2	16	14	2
915.775959	30	13	17	29	12	17	917.722988	18	15	3	17	14	3
915.860714	31	13	18	30	12	18	917.807512	19	15	4	18	14	4
915.945324	32	13	19	31	12	19	917.892555	20	15	5	19	14	5
916.030180	33	13	20	32	12	20	917.977254	21	15	6	20	14	6
916.113928	34	13	21	33	12	21	918.146158	23	15	8	22	14	8
916.198581	35	13	22	34	12	22	918.230534	24	15	9	23	14	9
916.283274	36	13	23	35	12	23	918.315516	25	15	10	24	14	10
916.367345	37	13	24	36	12	24	918.400124	26	15	11	25	14	11
916.451770	38	13	25	37	12	25	918.484363	27	15	12	26	14	12
916.535689	39	13	26	38	12	26	918.568979	28	15	13	27	14	13
916.619820	40	13	27	39	12	27	918.653516	29	15	14	28	14	14
916.704084	41	13	28	40	12	28	918.822527	31	15	16	30	14	16
916.788486	42	13	29	41	12	29	918.906770	32	15	17	31	14	17
916.872732	43	13	30	42	12	30	918.991159	33	15	18	32	14	18
916.955969	44	13	31	43	12	31	919.075564	34	15	19	33	14	19
917.039346	45	13	32	44	12	32	919.244117	36	15	21	35	14	21
917.123202	46	13	33	45	12	33	919.328496	37	15	22	36	14	22
917.207130	47	13	34	46	12	34	919.413167	38	15	23	37	14	23
917.290667	48	13	35	47	12	35	919.497222	39	15	24	38	14	24
917.374062	49	13	36	48	12	36	919.581217	40	15	25	39	14	25
917.457570	50	13	37	49	12	37	919.665056	41	15	26	40	14	26
915.893656	14	14	0	13	13	0	919.750315	42	15	27	41	14	27
915.979033	15	14	1	14	13	1	919.834277	43	15	28	42	14	28
916.064084	16	14	2	15	13	2	919.918225	44	15	29	43	14	29
916.148517	17	14	3	16	13	3	920.001862	45	15	30	44	14	30
916.233556	18	14	4	17	13	4	920.086542	46	15	31	45	14	31
916.318462	19	14	5	18	13	5	920.170308	47	15	32	46	14	32
916.403273	20	14	6	19	13	6	920.254348	48	15	33	47	14	33
916.487863	21	14	7	20	13	7	920.338214	49	15	34	48	14	34
916.572451	22	14	8	21	13	8	920.422097	50	15	35	49	14	35
916.657140	23	14	9	22	13	9	920.506780	51	15	36	50	14	36
916.742023	24	14	10	23	13	10	920.590429	52	15	37	51	14	37
916.826176	25	14	11	24	13	11	920.758073	54	15	39	53	14	39
916.911698	26	14	12	25	13	12	920.842037	55	15	40	54	14	40
916.996214	27	14	13	26	13	13	920.926106	56	15	41	55	14	41
917.080937	28	14	14	27	13	14	921.009612	57	15	42	56	14	42
917.165469	29	14	15	28	13	15	921.177304	59	15	44	58	14	44
917.250527	30	14	16	29	13	16	921.261219	60	15	45	59	14	45
917.335234	31	14	17	30	13	17	921.344811	61	15	46	60	14	46
917.419009	32	14	18	31	13	18	921.429368	62	15	47	61	14	47
917.503788	33	14	19	32	13	19	921.513304	63	15	48	62	14	48
917.588548	34	14	20	33	13	20	921.596196	64	15	49	63	14	49
917.672538	35	14	21	34	13	21	921.763598	66	15	51	65	14	51
917.757189	36	14	22	35	13	22	921.847459	67	15	52	66	14	52
917.841883	37	14	23	36	13	23	922.014297	69	15	54	68	14	54
917.926618	38	14	24	37	13	24	922.098135	70	15	55	69	14	55
918.011007	39	14	25	38	13	25	922.265556	72	15	57	71	14	57
918.095259	40	14	26	39	13	26	922.348660	73	15	58	72	14	58
918.179860	41	14	27	40	13	27	922.433116	74	15	59	73	14	59
918.348420	43	14	29	42	13	29	922.516342	75	15	60	74	14	60
918.517048	45	14	31	44	13	31	922.599866	76	15	61	75	14	61
918.601656	46	14	32	45	13	32	922.682863	77	15	62	76	14	62
918.685778	47	14	33	46	13	33	922.766636	78	15	63	77	14	63
918.770389	48	14	34	47	13	34	922.850470	79	15	64	78	14	64
918.854860	49	14	35	48	13	35	922.933599	80	15	65	79	14	65
918.938886	50	14	36	49	13	36	923.017093	81	15	66	80	14	66
919.023107	51	14	37	50	13	37	923.100890	82	15	67	81	14	67
919.107292	52	14	38	51	13	38	868.905177	13	13	0	14	14	0
919.191307	53	14	39	52	13	39	868.820087	14	13	1	15	14	1
919.276174	54	14	40	53	13	40	868.734623	15	13	2	16	14	2
919.612079	58	14	44	57	13	44	868.649003	16	13	3	17	14	3
919.695874	59	14	45	58	13	45	868.563590	17	13	4	18	14	4
919.780539	60	14	46	59	13	46	868.478347	18	13	5	19	14	5
919.863684	61	14	47	60	13	47	868.392736	19	13	6	20	14	6
919.948178	62	14	48	61	13	48	868.307349	20	13	7	21	14	7
920.032172	63	14	49	62	13	49	868.222015	21	13	8	22	14	8
920.116550	64	14	50	63	13	50	868.136000	22	13	9	23	14	9
920.200084	65	14	51	64	13	51	868.050859	23	13	10	24	14	10
920.284387	66	14	52	65	13	52	867.965216	24	13	11	25	14	11
920.368319	67	14	53	66	13	53	867.879636	25	13	12	26	14	12
920.619400	70	14	56	69	13	56	867.793964	26	13	13	27	14	13
920.703315	71	14	57	70	13	57	867.708321	27	13	14	28	14	14
920.787352	72	14	58	71	13	58	867.622698	28	13	15	29	14	15
920.871176	73	14	59	72	13	59	867.536976	29	13	16	30	14	16
920.954891	74	14	60	73	13	60	867.451305	30	13	17	31	14	17
921.038519	75	14	61	74	13	61	867.365587	31	13	18	32	14	18
921.122397	76	14	62	75	13	62	867.279818	32	13	19	33	14	19
921.206404	77	14	63	76	13	63	867.193909	33	13	20	34	14	20
921.289272	78	14	64	77	13	64	867.108156	34	13	21	35	14	21
921.373031	79	14	65	78	13	65	867.022383	35	13	22	36	14	22

921.457301	80	14	66	79	13	66	866.936270	36	13	23	37	14	23
921.540593	81	14	67	80	13	67	866.850425	37	13	24	38	14	24
921.624339	82	14	68	81	13	68	866.764001	38	13	25	39	14	25
921.707324	83	14	69	82	13	69	866.678250	39	13	26	40	14	26
921.791247	84	14	70	83	13	70	866.592101	40	13	27	41	14	27
Table S3A. p. 2													
866.506030	41	13	28	42	14	28	864.222652	25	15	10	26	16	10
866.419861	42	13	29	43	14	29	864.136708	26	15	11	27	16	11
866.333503	43	13	30	44	14	30	864.050866	27	15	12	28	16	12
866.246970	44	13	31	45	14	31	863.964443	28	15	13	29	16	13
866.160369	45	13	32	46	14	32	863.879246	29	15	14	30	16	14
866.073820	46	13	33	47	14	33	863.793483	30	15	15	31	16	15
865.987244	47	13	34	48	14	34	863.707400	31	15	16	32	16	16
865.900337	48	13	35	49	14	35	863.621389	32	15	17	33	16	17
865.813614	49	13	36	50	14	36	863.535704	33	15	18	34	16	18
865.726191	50	13	37	51	14	37	863.449534	34	15	19	35	16	19
866.983777	14	14	0	15	15	0	863.363616	35	15	20	36	16	20
866.898148	15	14	1	16	15	1	863.277410	36	15	21	37	16	21
866.812870	16	14	2	17	15	2	863.191260	37	15	22	38	16	22
866.727679	17	14	3	18	15	3	863.105198	38	15	23	39	16	23
866.642018	18	14	4	19	15	4	863.019303	39	15	24	40	16	24
866.556325	19	14	5	20	15	5	862.933268	40	15	25	41	16	25
866.470822	20	14	6	21	15	6	862.846846	41	15	26	42	16	26
866.385115	21	14	7	22	15	7	862.761003	42	15	27	43	16	27
866.300075	22	14	8	23	15	8	862.674881	43	15	28	44	16	28
866.214047	23	14	9	24	15	9	862.588453	44	15	29	45	16	29
866.128364	24	14	10	25	15	10	862.502087	45	15	30	46	16	30
866.043181	25	14	11	26	15	11	862.416126	46	15	31	47	16	31
865.957607	26	14	12	27	15	12	862.329618	47	15	32	48	16	32
865.871773	27	14	13	28	15	13	862.243103	48	15	33	49	16	33
865.786020	28	14	14	29	15	14	862.157362	49	15	34	50	16	34
865.700321	29	14	15	30	15	15	862.071181	50	15	35	51	16	35
865.614361	30	14	16	31	15	16	861.984894	51	15	36	52	16	36
865.528610	31	14	17	32	15	17	861.898030	52	15	37	53	16	37
865.442811	32	14	18	33	15	18	861.811653	53	15	38	54	16	38
865.357204	33	14	19	34	15	19	861.725424	54	15	39	55	16	39
865.271461	34	14	20	35	15	20	861.639154	55	15	40	56	16	40
865.185632	35	14	21	36	15	21	861.552715	56	15	41	57	16	41
865.099921	36	14	22	37	15	22	861.466157	57	15	42	58	16	42
865.014078	37	14	23	38	15	23	861.380058	58	15	43	59	16	43
864.928349	38	14	24	39	15	24	861.293553	59	15	44	60	16	44
864.842420	39	14	25	40	15	25	861.207211	60	15	45	61	16	45
864.756654	40	14	26	41	15	26	861.120687	61	15	46	62	16	46
864.670677	41	14	27	42	15	27	860.947513	63	15	48	64	16	48
864.584709	42	14	28	43	15	28	860.860756	64	15	49	65	16	49
864.499018	43	14	29	44	15	29	860.688153	66	15	51	67	16	51
864.412753	44	14	30	45	15	30	860.601521	67	15	52	68	16	52
864.326850	45	14	31	46	15	31	860.514944	68	15	53	69	16	53
864.240943	46	14	32	47	15	32	860.428396	69	15	54	70	16	54
864.154999	47	14	33	48	15	33	860.255097	71	15	56	72	16	56
864.068913	48	14	34	49	15	34	860.168485	72	15	57	73	16	57
863.982983	49	14	35	50	15	35	860.082001	73	15	58	74	16	58
863.897108	50	14	36	51	15	36	859.995293	74	15	59	75	16	59
863.810991	51	14	37	52	15	37	859.908760	75	15	60	76	16	60
863.724869	52	14	38	53	15	38	859.822126	76	15	61	77	16	61
863.638681	53	14	39	54	15	39	859.735679	77	15	62	78	16	62
863.552908	54	14	40	55	15	40	859.648902	78	15	63	79	16	63
863.293967	57	14	43	58	15	43	859.562786	79	15	64	80	16	64
863.208036	58	14	44	59	15	44							
863.121618	59	14	45	60	15	45							
863.035735	60	14	46	61	15	46							
862.949395	61	14	47	62	15	47							
862.863519	62	14	48	63	15	48							
862.777787	63	14	49	64	15	49							
862.691151	64	14	50	65	15	50							
862.604723	65	14	51	66	15	51							
862.432464	67	14	53	68	15	53							
862.346483	68	14	54	69	15	54							
862.259931	69	14	55	70	15	55							
862.087504	71	14	57	72	15	57							
862.001092	72	14	58	73	15	58							
861.915082	73	14	59	74	15	59							
861.828532	74	14	60	75	15	60							
861.742317	75	14	61	76	15	61							
861.656103	76	14	62	77	15	62							
861.569846	77	14	63	78	15	63							
861.483219	78	14	64	79	15	64							
861.396665	79	14	65	80	15	65							
861.310702	80	14	66	81	15	66							
861.224129	81	14	67	82	15	67							
861.138150	82	14	68	83	15	68							
861.051860	83	14	69	84	15	69							
860.965158	84	14	70	85	15	70							
860.878625	85	14	71	86	15	71							
860.792685	86	14	72	87	15	72							
860.619654	88	14	74	89	15	74							
860.533578	89	14	75	90	15	75							
860.447078	90	14	76	91	15	76							
860.360538	91	14	77	92	15	77							
860.187100	93	14	79	94	15	79							
860.100974	94	14	80	95	15	80							
860.014371	95	14	81	96	15	81							
859.928307	96	14	82	97	15	82							
859.842033	97	14	83	98	15	83							

865.079127	15	15	0	16	16	0
864.993737	16	15	1	17	16	1
864.908494	17	15	2	18	16	2
864.822475	18	15	3	19	16	3
864.736865	19	15	4	20	16	4
864.651698	20	15	5	21	16	5
864.565449	21	15	6	22	16	6
864.479868	22	15	7	23	16	7
864.394386	23	15	8	24	16	8
864.308188	24	15	9	25	16	9