Supporting Information

for

Hypervalency in Organic Crystals: A Case Study of the Oxicam Sulphonamide Group

Christian Tantardini,[a] Elena V. Boldyreva,[b] Enrico Benassi[ac]

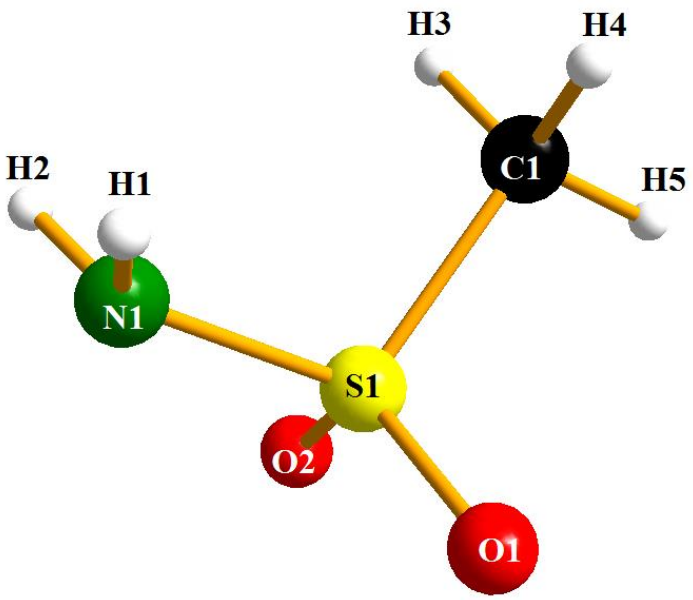
Correspondence to: Enrico Benassi (email: enrico.benassi@sns.it)

[a]*Novosibirsk State University, Pirogova 2, Novosibirsk630090, Russian Federation.*

[b]*Institute of Solid State Chemistry and Mechanochemistry SB RAS, Kutateladze 18, Novosibirsk 630128, Russian Federation.*

[c]*Scuola Superiore Normale, Piazza dei Cavalieri 7, Pisa 56126, Italy.*

E.S.I.1. Picture of test molecule to describe the feasibility of the DFT approach to describe sulfonamide group.



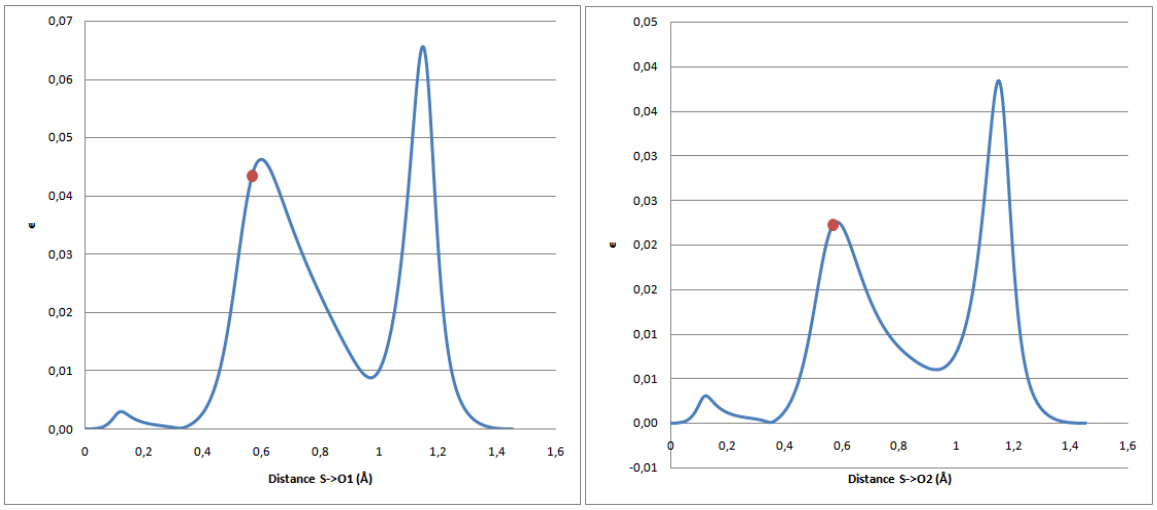
E.S.I.2. Table with the charge density ρ (e/Å^3) and SF% values into BCPs along the bond path between sulfur and its atoms bonded for different theoretical approaches in vacuum with LBS 6-311+G**: B3LYP DFT functional, coupled cluster for single and double excitation (CCSD) and quadratic configuration integration for single and double excitation (QCISD) calculations.

B3LYP	**ρ_b (e/Å^3)**	**SF%(S1)**	**SF%(O1)**	**SF%(O2)**	**SF%(N1)**	**SF%(C1)**
BCP(S1-O1)	0.22805	44.96	65.02	8.68	4.28	1.45
BCP(S1-O2)	0.19728	51.97	10.03	75.16	4.95	1.68
BCP(S1-N1)	0.29376	26.66	6.73	6.73	31.06	1.01
BCP(S1-C1)	0.29376	22.18	4.39	4.39	1.92	25.05
CCSD	**ρ_b (e/Å^3)**	**SF%(S1)**	**SF%(O1)**	**SF%(O2)**	**SF%(N1)**	**SF%(C1)**
BCP(S1-O1)	0.22678	43.82	65.98	8.87	4.53	1.51
BCP(S1-O2)	0.20142	49.33	9.99	74.29	5.10	1.70
BCP(S1-N1)	0.29292	25.48	7.06	7.06	31.41	1.08
BCP(S1-C1)	0.29292	22.71	4.46	4.46	1.99	25.85
QCISD	**ρ_b (e/Å^3)**	**SF%(S1)**	**SF%(O1)**	**SF%(O2)**	**SF%(N1)**	**SF%(C1)**
BCP(S1-O1)	0.22671	43.82	65.81	8.86	4.52	1.51
BCP(S1-O2)	0.20122	49.38	9.98	74.15	5.10	1.70
BCP(S1-N1)	0.2925	25.55	7.05	7.05	31.39	1.08
BCP(S1-C1)	0.29249	22.72	4.46	4.46	1.99	25.84

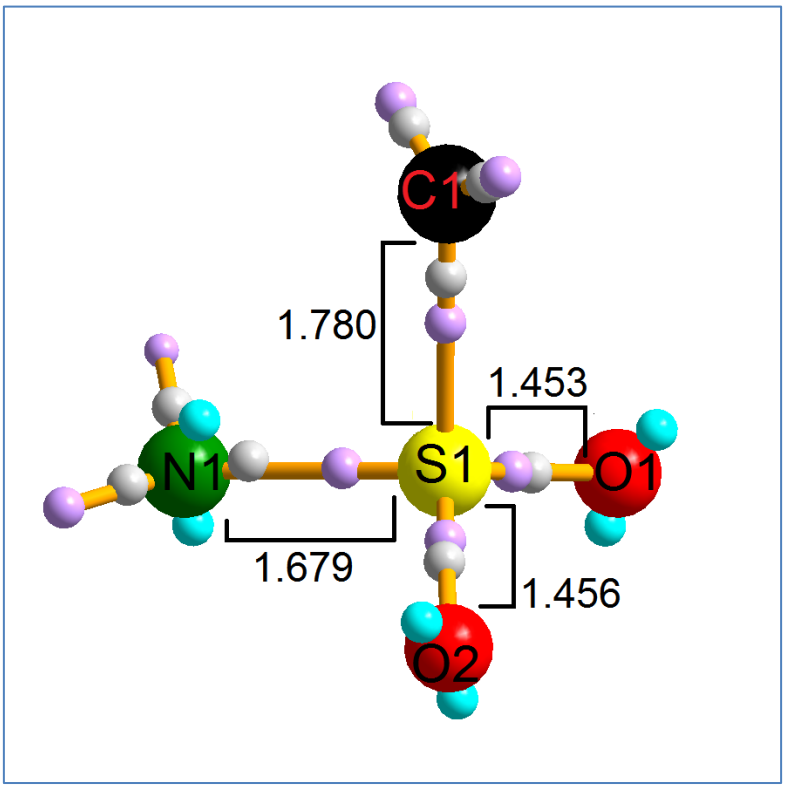
E.S.I.3. Table with the SCF electronic energies performed on piroxicam (PXM) using localised basis set density functional theory (LBS-DFT), with different functionals, and thesecond-order Møller-Plesset perturbation theory (MP2). Basis set: 6-31+G**.

	B3LYP	CAM-B3LYP	M06-2X	PBE	PBE0	LC-ωPBE	ωB97XD	MP2
Energy (Hartree)	-1442.777	-1442.283	-1442.321	-1441.406	-1441.468	-1441.936	-1442.421	-1435.886

E.S.I.4. Profiles of ellipticity along the S-O1 (left) and S-O2 (right) bonds within PXM (blue line). The red dot marks the position of BCP.



E.S.I.5. Picture of bond distances (Angstrom) into sulphonamide group and associated VSCC with critical points (CPs) of atoms bonded to sulphur atom into PXM sulphonamide group: NBM (turquoise) and BM (gray) and in addition the BCP (purple)



E.S.I.6. Natural bond orbital (NBO) analysis

NATURAL POPULATIONS: Natural atomic orbital occupancies

NAO	Atom	No	lang	Type(AO)	Occupancy	Energy
1	S	1	S	Cor(1S)	2.00000	-87.88906
2	S	1	S	Cor(2S)	1.99864	-9.08503
3	S	1	S	Val(3S)	1.02892	-0.54766
4	S	1	S	Ryd(4S)	0.00495	0.96720
5	S	1	S	Ryd(5S)	0.00026	2.06220
6	S	1	S	Ryd(6S)	0.00013	14.44387
7	S	1	S	Ryd(7S)	0.00000	180.93921
8	S	1	px	Cor(2p)	1.99984	-6.09007
9	S	1	px	Val(3p)	0.89877	-0.20750
10	S	1	px	Ryd(5p)	0.00860	1.12481
11	S	1	px	Ryd(6p)	0.00099	1.47141
12	S	1	px	Ryd(4p)	0.00056	0.46871
13	S	1	px	Ryd(7p)	0.00000	16.58112
14	S	1	py	Cor(2p)	1.99986	-6.08853
15	S	1	py	Val(3p)	0.83357	-0.19190
16	S	1	py	Ryd(5p)	0.01170	1.17896
17	S	1	py	Ryd(6p)	0.00100	1.54717
18	S	1	py	Ryd(4p)	0.00083	0.47320
19	S	1	py	Ryd(7p)	0.00001	16.56420
20	S	1	pz	Cor(2p)	1.99986	-6.08795
21	S	1	pz	Val(3p)	0.78526	-0.17925
22	S	1	pz	Ryd(5p)	0.01150	1.03847
23	S	1	pz	Ryd(6p)	0.00101	1.72819

24	S	1	pz	Ryd(4p)	0.00069	0.45930
25	S	1	pz	Ryd(7p)	0.00001	16.59874
26	S	1	dxy	Ryd(3d)	0.03687	0.92373
27	S	1	dxz	Ryd(3d)	0.03540	0.90856
28	S	1	dyz	Ryd(3d)	0.04087	0.86570
29	S	1	dx2y2	Ryd(3d)	0.02127	0.91532
30	S	1	dz2	Ryd(3d)	0.03521	1.00160
31	O	2	S	Cor(1S)	1.99980	-18.89787
32	O	2	S	Val(2S)	1.82133	-1.00812
33	O	2	S	Ryd(3S)	0.00148	1.28600
34	O	2	S	Ryd(4S)	0.00018	1.67089
35	O	2	S	Ryd(5S)	0.00000	49.64339
36	O	2	px	Val(2p)	1.77514	-0.31488
37	O	2	px	Ryd(4p)	0.00118	0.88305
38	O	2	px	Ryd(3p)	0.00026	0.74899
39	O	2	px	Ryd(5p)	0.00001	4.97141
40	O	2	py	Val(2p)	1.54430	-0.34851
41	O	2	py	Ryd(3p)	0.00084	0.80166
42	O	2	py	Ryd(4p)	0.00049	0.85186
43	O	2	py	Ryd(5p)	0.00004	5.01703
44	O	2	pz	Val(2p)	1.75476	-0.31615
45	O	2	pz	Ryd(4p)	0.00097	0.89514
46	O	2	pz	Ryd(3p)	0.00024	0.70810
47	O	2	pz	Ryd(5p)	0.00001	4.92769
48	O	2	dxy	Ryd(3d)	0.00143	3.01884
49	O	2	dxz	Ryd(3d)	0.00029	2.87293
50	O	2	dyz	Ryd(3d)	0.00147	3.09621

51	O	2	dx2y2	Ryd(3d)	0.00147	3.10508
52	O	2	dz2	Ryd(3d)	0.00071	2.94037
53	O	3	S	Cor(1S)	1.99980	-18.89241
54	O	3	S	Val(2S)	1.82550	-1.00163
55	O	3	S	Ryd(3S)	0.00149	1.47052
56	O	3	S	Ryd(4S)	0.00024	1.52007
57	O	3	S	Ryd(5S)	0.00000	49.64872
58	O	3	px	Val(2p)	1.76456	-0.30647
59	O	3	px	Ryd(4p)	0.00105	0.96022
60	O	3	px	Ryd(3p)	0.00018	0.71242
61	O	3	px	Ryd(5p)	0.00001	4.95942
62	O	3	py	Val(2p)	1.78186	-0.30030
63	O	3	py	Ryd(4p)	0.00102	0.95070
64	O	3	py	Ryd(3p)	0.00024	0.69241
65	O	3	py	Ryd(5p)	0.00001	4.93919
66	O	3	pz	Val(2p)	1.50196	-0.34480
67	O	3	pz	Ryd(4p)	0.00092	0.84210
68	O	3	pz	Ryd(3p)	0.00046	0.83662
69	O	3	pz	Ryd(5p)	0.00005	5.00209
70	O	3	dxy	Ryd(3d)	0.00017	2.85592
71	O	3	dxz	Ryd(3d)	0.00146	3.08036
72	O	3	dyz	Ryd(3d)	0.00149	2.98131
73	O	3	dx2y2	Ryd(3d)	0.00017	2.84350
74	O	3	dz2	Ryd(3d)	0.00191	3.31738
75	O	4	S	Cor(1S)	1.99974	-18.88797
76	O	4	S	Val(2S)	1.70889	-0.90714

77	O	4	S	Ryd(3S)	0.00037	1.91401
78	O	4	S	Ryd(4S)	0.00000	49.67340
79	O	4	px	Val(2p)	1.84467	-0.29556
80	O	4	px	Ryd(3p)	0.00182	1.04406
81	O	4	px	Ryd(4p)	0.00094	1.04561
82	O	4	px	Ryd(5p)	0.00002	5.16355
83	O	4	py	Val(2p)	1.53572	-0.31008
84	O	4	py	Ryd(3p)	0.00092	0.59499
85	O	4	py	Ryd(4p)	0.00047	1.12189
86	O	4	py	Ryd(5p)	0.00006	5.35514
87	O	4	pz	Val(2p)	1.58542	-0.28203
88	O	4	pz	Ryd(3p)	0.00250	0.52027
89	O	4	pz	Ryd(4p)	0.00044	0.90934
90	O	4	pz	Ryd(5p)	0.00001	5.00321
91	O	4	dxy	Ryd(3d)	0.00112	3.25301
92	O	4	dxz	Ryd(3d)	0.00019	2.84199
93	O	4	dyz	Ryd(3d)	0.00125	3.06100
94	O	4	dx2y2	Ryd(3d)	0.00157	3.44410
95	O	4	dz2	Ryd(3d)	0.00053	3.12210
96	O	5	S	Cor(1S)	1.99975	-18.94327
97	O	5	S	Val(2S)	1.65883	-0.93382
98	O	5	S	Ryd(3S)	0.00024	1.92421
99	O	5	S	Ryd(4S)	0.00000	49.77849
100	O	5	px	Val(2p)	1.67139	-0.33975
101	O	5	px	Ryd(3p)	0.00214	0.72569
102	O	5	px	Ryd(4p)	0.00066	1.14344
103	O	5	px	Ryd(5p)	0.00003	5.26720

104	O	5	py	Val(2p)	1.53911	-0.34432
105	O	5	py	Ryd(3p)	0.00316	0.43208
106	O	5	py	Ryd(4p)	0.00036	1.07038
107	O	5	py	Ryd(5p)	0.00004	5.23542
108	O	5	pz	Val(2p)	1.78466	-0.33256
109	O	5	pz	Ryd(3p)	0.00352	0.39413
110	O	5	pz	Ryd(4p)	0.00024	1.01482
111	O	5	pz	Ryd(5p)	0.00001	4.95860
112	O	5	dxy	Ryd(3d)	0.00069	3.17533
113	O	5	dxz	Ryd(3d)	0.00028	2.92390
114	O	5	dyz	Ryd(3d)	0.00096	2.99762
115	O	5	dx2y2	Ryd(3d)	0.00161	3.58362
116	O	5	dz2	Ryd(3d)	0.00087	3.21903
117	N	6	S	Cor(1S)	1.99941	-14.22821
118	N	6	S	Val(2S)	1.35770	-0.62917
119	N	6	S	Ryd(3S)	0.00429	0.81070
120	N	6	S	Ryd(4S)	0.00244	1.54596
121	N	6	S	Ryd(5S)	0.00000	35.18355
122	N	6	px	Val(2p)	1.60655	-0.31293
123	N	6	px	Ryd(4p)	0.00518	0.82129
124	N	6	px	Ryd(3p)	0.00213	0.61498
125	N	6	px	Ryd(5p)	0.00008	3.92131
126	N	6	py	Val(2p)	1.41638	-0.28783
127	N	6	py	Ryd(4p)	0.00556	0.73877
128	N	6	py	Ryd(3p)	0.00209	0.67561
129	N	6	py	Ryd(5p)	0.00007	3.99896
130	N	6	pz	Val(2p)	1.34191	-0.29693

131	N	6	pz	Ryd(4p)	0.00462	0.82177
132	N	6	pz	Ryd(3p)	0.00134	0.69087
133	N	6	pz	Ryd(5p)	0.00004	4.05098
134	N	6	dxy	Ryd(3d)	0.00067	2.41444
135	N	6	dxz	Ryd(3d)	0.00094	2.40942
136	N	6	dyz	Ryd(3d)	0.00068	2.33857
137	N	6	dx2y2	Ryd(3d)	0.00104	2.52618
138	N	6	dz2	Ryd(3d)	0.00093	2.62845
139	N	7	S	Cor(1S)	1.99925	-14.20099
140	N	7	S	Val(2S)	1.24844	-0.55910
141	N	7	S	Ryd(4S)	0.00117	1.43337
142	N	7	S	Ryd(3S)	0.00012	1.04181
143	N	7	S	Ryd(5S)	0.00000	35.32915
144	N	7	px	Val(2p)	1.30759	-0.27188
145	N	7	px	Ryd(4p)	0.00273	0.93572
146	N	7	px	Ryd(3p)	0.00145	0.78260
147	N	7	px	Ryd(5p)	0.00007	4.42610
148	N	7	py	Val(2p)	1.39208	-0.27587
149	N	7	py	Ryd(3p)	0.00681	0.81977
150	N	7	py	Ryd(4p)	0.00185	0.89091
151	N	7	py	Ryd(5p)	0.00006	4.32965
152	N	7	pz	Val(2p)	1.62981	-0.28236
153	N	7	pz	Ryd(3p)	0.00257	0.39803
154	N	7	pz	Ryd(4p)	0.00176	0.67367
155	N	7	pz	Ryd(5p)	0.00001	3.82764
156	N	7	dxy	Ryd(3d)	0.00087	2.97088
157	N	7	dxz	Ryd(3d)	0.00041	2.20245

158	N	7	dyz	Ryd(3d)	0.00018	2.17101
159	N	7	dx2y2	Ryd(3d)	0.00069	2.93085
160	N	7	dz2	Ryd(3d)	0.00060	2.60224
161	N	8	S	Cor(1S)	1.99937	-14.13788
162	N	8	S	Val(2S)	1.37181	-0.52813
163	N	8	S	Ryd(4S)	0.00149	1.44955
164	N	8	S	Ryd(3S)	0.00011	1.09893
165	N	8	S	Ryd(5S)	0.00000	35.31470
166	N	8	px	Val(2p)	1.35944	-0.19946
167	N	8	px	Ryd(4p)	0.00452	1.01469
168	N	8	px	Ryd(3p)	0.00034	0.93274
169	N	8	px	Ryd(5p)	0.00004	4.34401
170	N	8	py	Val(2p)	1.51167	-0.21598
171	N	8	py	Ryd(4p)	0.00539	0.79782
172	N	8	py	Ryd(3p)	0.00026	0.69546
173	N	8	py	Ryd(5p)	0.00006	4.14088
174	N	8	pz	Val(2p)	1.22524	-0.19889
175	N	8	pz	Ryd(3p)	0.00102	0.62128
176	N	8	pz	Ryd(4p)	0.00018	0.68140
177	N	8	pz	Ryd(5p)	0.00002	3.75236
178	N	8	dxy	Ryd(3d)	0.00129	2.71979
179	N	8	dxz	Ryd(3d)	0.00072	2.25278
180	N	8	dyz	Ryd(3d)	0.00123	2.22300
181	N	8	dx2y2	Ryd(3d)	0.00145	2.96407
182	N	8	dz2	Ryd(3d)	0.00088	2.58523
183	C	9	S	Cor(1S)	1.99881	-10.10086

184	C	9	S	Val(2S)	0.85046	-0.17920
185	C	9	S	Ryd(4S)	0.00153	1.01376
186	C	9	S	Ryd(3S)	0.00028	0.87880
187	C	9	S	Ryd(5S)	0.00003	23.13915
188	C	9	px	Val(2p)	1.08044	-0.11503
189	C	9	px	Ryd(4p)	0.00446	1.07256
190	C	9	px	Ryd(3p)	0.00023	0.84751
191	C	9	px	Ryd(5p)	0.00023	3.25361
192	C	9	py	Val(2p)	0.89912	-0.08449
193	C	9	py	Ryd(4p)	0.00672	1.16747
194	C	9	py	Ryd(3p)	0.00028	0.71624
195	C	9	py	Ryd(5p)	0.00024	3.20475
196	C	9	pz	Val(2p)	1.19084	-0.15536
197	C	9	pz	Ryd(4p)	0.00515	0.67655
198	C	9	pz	Ryd(3p)	0.00048	0.66294
199	C	9	pz	Ryd(5p)	0.00005	2.69992
200	C	9	dxy	Ryd(3d)	0.00123	2.53305
201	C	9	dxz	Ryd(3d)	0.00049	1.68068
202	C	9	dyz	Ryd(3d)	0.00076	1.77624
203	C	9	dx2y2	Ryd(3d)	0.00122	2.43428
204	C	9	dz2	Ryd(3d)	0.00061	2.03207
205	C	10	S	Cor(1S)	1.99869	-10.14860
206	C	10	S	Val(2S)	0.81777	-0.16411
207	C	10	S	Ryd(4S)	0.00140	1.12926
208	C	10	S	Ryd(3S)	0.00027	0.94038
209	C	10	S	Ryd(5S)	0.00005	22.39485
210	C	10	px	Val(2p)	1.05512	-0.09123

211	C	10	px	Ryd(4p)	0.00330	1.25240
212	C	10	px	Ryd(3p)	0.00038	0.63581
213	C	10	px	Ryd(5p)	0.00020	2.91365
214	C	10	py	Val(2p)	0.80590	-0.08432
215	C	10	py	Ryd(4p)	0.01074	1.02206
216	C	10	py	Ryd(3p)	0.00077	0.47107
217	C	10	py	Ryd(5p)	0.00022	2.96424
218	C	10	pz	Val(2p)	0.89319	-0.14777
219	C	10	pz	Ryd(4p)	0.00153	0.61195
220	C	10	pz	Ryd(3p)	0.00095	0.37739
221	C	10	pz	Ryd(5p)	0.00006	2.67937
222	C	10	dxy	Ryd(3d)	0.00157	2.50276
223	C	10	dxz	Ryd(3d)	0.00091	1.66671
224	C	10	dyz	Ryd(3d)	0.00263	1.67122
225	C	10	dx2y2	Ryd(3d)	0.00166	2.52172
226	C	10	dz2	Ryd(3d)	0.00082	2.01260
227	C	11	S	Cor(1S)	1.99888	-10.07783
228	C	11	S	Val(2S)	0.87443	-0.16249
229	C	11	S	Ryd(3S)	0.00115	0.83432
230	C	11	S	Ryd(4S)	0.00025	0.92962
231	C	11	S	Ryd(5S)	0.00002	22.99123
232	C	11	px	Val(2p)	1.08397	-0.10519
233	C	11	px	Ryd(4p)	0.00623	1.36746
234	C	11	px	Ryd(3p)	0.00023	0.73179
235	C	11	px	Ryd(5p)	0.00012	3.31003
236	C	11	py	Val(2p)	1.10268	-0.11294
237	C	11	py	Ryd(4p)	0.00559	1.17187

238	C	11	py	Ryd(3p)	0.00042	0.59472
239	C	11	py	Ryd(5p)	0.00015	3.30932
240	C	11	pz	Val(2p)	1.02325	-0.14438
241	C	11	pz	Ryd(4p)	0.00126	0.57749
242	C	11	pz	Ryd(3p)	0.00029	0.50998
243	C	11	pz	Ryd(5p)	0.00003	2.66896
244	C	11	dxy	Ryd(3d)	0.00065	2.56100
245	C	11	dxz	Ryd(3d)	0.00058	1.66953
246	C	11	dyz	Ryd(3d)	0.00063	1.69409
247	C	11	dx2y2	Ryd(3d)	0.00081	2.52472
248	C	11	dz2	Ryd(3d)	0.00044	2.04026
249	C	12	S	Cor(1S)	1.99908	-10.06466
250	C	12	S	Val(2S)	0.94590	-0.18885
251	C	12	S	Ryd(4S)	0.00169	0.82901
252	C	12	S	Ryd(3S)	0.00012	0.63617
253	C	12	S	Ryd(5S)	0.00002	23.04876
254	C	12	px	Val(2p)	1.06549	-0.07554
255	C	12	px	Ryd(4p)	0.00402	0.91542
256	C	12	px	Ryd(3p)	0.00068	0.46170
257	C	12	px	Ryd(5p)	0.00017	3.14584
258	C	12	py	Val(2p)	1.16615	-0.08862
259	C	12	py	Ryd(4p)	0.00648	0.99747
260	C	12	py	Ryd(3p)	0.00042	0.30236
261	C	12	py	Ryd(5p)	0.00008	3.18415
262	C	12	pz	Val(2p)	0.96031	-0.13585
263	C	12	pz	Ryd(4p)	0.00114	0.53613
264	C	12	pz	Ryd(3p)	0.00042	0.30235

265	C	12	pz	Ryd(5p)	0.00002	2.68832
266	C	12	dxy	Ryd(3d)	0.00075	2.54454
267	C	12	dxz	Ryd(3d)	0.00050	1.67832
268	C	12	dyz	Ryd(3d)	0.00045	1.64802
269	C	12	dx2y2	Ryd(3d)	0.00068	2.46697
270	C	12	dz2	Ryd(3d)	0.00040	2.00460
271	C	13	S	Cor(1S)	1.99916	-10.06773
272	C	13	S	Val(2S)	0.95744	-0.19856
273	C	13	S	Ryd(3S)	0.00143	0.85398
274	C	13	S	Ryd(4S)	0.00019	1.05819
275	C	13	S	Ryd(5S)	0.00001	22.64062
276	C	13	px	Val(2p)	1.11696	-0.08048
277	C	13	px	Ryd(4p)	0.00554	0.90222
278	C	13	px	Ryd(3p)	0.00040	0.33799
279	C	13	px	Ryd(5p)	0.00011	3.07412
280	C	13	py	Val(2p)	1.11575	-0.08361
281	C	13	py	Ryd(4p)	0.00535	0.89887
282	C	13	py	Ryd(3p)	0.00036	0.35818
283	C	13	py	Ryd(5p)	0.00010	3.06590
284	C	13	pz	Val(2p)	0.97606	-0.13855
285	C	13	pz	Ryd(4p)	0.00094	0.51640
286	C	13	pz	Ryd(3p)	0.00020	0.35561
287	C	13	pz	Ryd(5p)	0.00001	2.59179
288	C	13	dxy	Ryd(3d)	0.00081	2.43742
289	C	13	dxz	Ryd(3d)	0.00048	1.62775
290	C	13	dyz	Ryd(3d)	0.00045	1.64277
291	C	13	dx2y2	Ryd(3d)	0.00067	2.54347

292	C	13	dz2	Ryd(3d)	0.00039	2.01247
293	C	14	S	Cor(1S)	1.99916	-10.06906
294	C	14	S	Val(2S)	0.95721	-0.19937
295	C	14	S	Ryd(3S)	0.00138	0.80829
296	C	14	S	Ryd(4S)	0.00017	0.85036
297	C	14	S	Ryd(5S)	0.00001	22.87482
298	C	14	px	Val(2p)	1.16414	-0.08633
299	C	14	px	Ryd(4p)	0.00694	1.01270
300	C	14	px	Ryd(3p)	0.00028	0.27158
301	C	14	px	Ryd(5p)	0.00007	3.15521
302	C	14	py	Val(2p)	1.06481	-0.07871
303	C	14	py	Ryd(4p)	0.00431	0.77724
304	C	14	py	Ryd(3p)	0.00046	0.42033
305	C	14	py	Ryd(5p)	0.00016	3.01075
306	C	14	pz	Val(2p)	0.97399	-0.13933
307	C	14	pz	Ryd(4p)	0.00095	0.50893
308	C	14	pz	Ryd(3p)	0.00023	0.34265
309	C	14	pz	Ryd(5p)	0.00002	2.60876
310	C	14	dxy	Ryd(3d)	0.00072	2.51705
311	C	14	dxz	Ryd(3d)	0.00045	1.60245
312	C	14	dyz	Ryd(3d)	0.00046	1.67439
313	C	14	dx2y2	Ryd(3d)	0.00076	2.45875
314	C	14	dz2	Ryd(3d)	0.00041	2.00232
315	C	15	S	Cor(1S)	1.99903	-10.06525
316	C	15	S	Val(2S)	0.94606	-0.19110
317	C	15	S	Ryd(4S)	0.00209	0.89691

318	C	15	S	Ryd(3S)	0.00016	0.66007
319	C	15	S	Ryd(5S)	0.00002	23.04247
320	C	15	px	Val(2p)	1.06925	-0.08838
321	C	15	px	Ryd(4p)	0.00448	0.80671
322	C	15	px	Ryd(3p)	0.00042	0.42630
323	C	15	px	Ryd(5p)	0.00016	3.08456
324	C	15	py	Val(2p)	1.18971	-0.09696
325	C	15	py	Ryd(4p)	0.00808	1.09715
326	C	15	py	Ryd(3p)	0.00058	0.35182
327	C	15	py	Ryd(5p)	0.00008	3.14081
328	C	15	pz	Val(2p)	0.96275	-0.13867
329	C	15	pz	Ryd(4p)	0.00130	0.51687
330	C	15	pz	Ryd(3p)	0.00038	0.32074
331	C	15	pz	Ryd(5p)	0.00002	2.68740
332	C	15	dxy	Ryd(3d)	0.00061	2.53854
333	C	15	dxz	Ryd(3d)	0.00055	1.67349
334	C	15	dyz	Ryd(3d)	0.00048	1.62249
335	C	15	dx2y2	Ryd(3d)	0.00082	2.47613
336	C	15	dz2	Ryd(3d)	0.00040	2.00986
337	C	16	S	Cor(1S)	1.99871	-10.10030
338	C	16	S	Val(2S)	0.96248	-0.23680
339	C	16	S	Ryd(4S)	0.00317	0.90977
340	C	16	S	Ryd(3S)	0.00025	0.85438
341	C	16	S	Ryd(5S)	0.00002	23.11569
342	C	16	px	Val(2p)	1.10162	-0.14974
343	C	16	px	Ryd(4p)	0.00791	1.25291
344	C	16	px	Ryd(3p)	0.00021	0.68088

345	C	16	px	Ryd(5p)	0.00019	3.33070
346	C	16	py	Val(2p)	1.07382	-0.13796
347	C	16	py	Ryd(4p)	0.00742	1.03095
348	C	16	py	Ryd(3p)	0.00031	0.62034
349	C	16	py	Ryd(5p)	0.00017	3.26011
350	C	16	pz	Val(2p)	1.08558	-0.17007
351	C	16	pz	Ryd(4p)	0.00314	0.60075
352	C	16	pz	Ryd(3p)	0.00044	0.47638
353	C	16	pz	Ryd(5p)	0.00004	2.77375
354	C	16	dxy	Ryd(3d)	0.00117	2.25262
355	C	16	dxz	Ryd(3d)	0.00077	1.64802
356	C	16	dyz	Ryd(3d)	0.00060	1.66743
357	C	16	dx2y2	Ryd(3d)	0.00066	2.43270
358	C	16	dz2	Ryd(3d)	0.00056	2.01124
359	C	17	S	Cor(1S)	1.99904	-10.18553
360	C	17	S	Val(2S)	0.75548	-0.15518
361	C	17	S	Ryd(3S)	0.00247	0.92262
362	C	17	S	Ryd(4S)	0.00007	22.42360
363	C	17	px	Val(2p)	0.94727	-0.07341
364	C	17	px	Ryd(4p)	0.00749	1.22178
365	C	17	px	Ryd(3p)	0.00037	0.75731
366	C	17	px	Ryd(5p)	0.00017	2.68724
367	C	17	py	Val(2p)	0.78850	-0.05042
368	C	17	py	Ryd(4p)	0.01433	1.02068
369	C	17	py	Ryd(3p)	0.00033	0.53130
370	C	17	py	Ryd(5p)	0.00018	2.67192
371	C	17	pz	Val(2p)	0.80954	-0.14452

372	C	17	pz	Ryd(4p)	0.00123	0.66480
373	C	17	pz	Ryd(3p)	0.00074	0.44443
374	C	17	pz	Ryd(5p)	0.00008	2.53110
375	C	17	dxy	Ryd(3d)	0.00348	2.50908
376	C	17	dxz	Ryd(3d)	0.00137	1.58656
377	C	17	dyz	Ryd(3d)	0.00390	1.63964
378	C	17	dx2y2	Ryd(3d)	0.00162	2.54632
379	C	17	dz2	Ryd(3d)	0.00074	2.02325
380	C	18	S	Cor(1S)	1.99908	-10.13646
381	C	18	S	Val(2S)	0.80059	-0.13778
382	C	18	S	Ryd(4S)	0.00171	0.78363
383	C	18	S	Ryd(3S)	0.00008	0.71325
384	C	18	S	Ryd(5S)	0.00003	22.97755
385	C	18	px	Val(2p)	0.84666	-0.04852
386	C	18	px	Ryd(4p)	0.00532	1.09687
387	C	18	px	Ryd(3p)	0.00016	0.49483
388	C	18	px	Ryd(5p)	0.00012	3.00719
389	C	18	py	Val(2p)	0.98753	-0.06917
390	C	18	py	Ryd(4p)	0.01012	1.13936
391	C	18	py	Ryd(3p)	0.00023	0.55326
392	C	18	py	Ryd(5p)	0.00017	2.83835
393	C	18	pz	Val(2p)	0.95102	-0.13718
394	C	18	pz	Ryd(4p)	0.00147	0.63412
395	C	18	pz	Ryd(3p)	0.00028	0.35567
396	C	18	pz	Ryd(5p)	0.00006	2.65654
397	C	18	dxy	Ryd(3d)	0.00113	2.51915
398	C	18	dxz	Ryd(3d)	0.00164	1.61026

399	C	18	dyz	Ryd(3d)	0.00121	1.68219
400	C	18	dx2y2	Ryd(3d)	0.00228	2.49582
401	C	18	dz2	Ryd(3d)	0.00059	1.98790
402	C	19	S	Cor(1S)	1.99923	-10.08821
403	C	19	S	Val(2S)	0.92373	-0.18031
404	C	19	S	Ryd(4S)	0.00219	0.76571
405	C	19	S	Ryd(3S)	0.00016	0.53998
406	C	19	S	Ryd(5S)	0.00001	23.10852
407	C	19	px	Val(2p)	0.92152	-0.03563
408	C	19	px	Ryd(4p)	0.00979	0.83063
409	C	19	px	Ryd(3p)	0.00041	0.30276
410	C	19	px	Ryd(5p)	0.00010	2.98080
411	C	19	py	Val(2p)	1.13819	-0.07598
412	C	19	py	Ryd(4p)	0.00726	0.95998
413	C	19	py	Ryd(3p)	0.00042	0.29526
414	C	19	py	Ryd(5p)	0.00011	2.98471
415	C	19	pz	Val(2p)	0.92416	-0.12615
416	C	19	pz	Ryd(4p)	0.00148	0.54619
417	C	19	pz	Ryd(3p)	0.00020	0.25558
418	C	19	pz	Ryd(5p)	0.00002	2.65602
419	C	19	dxy	Ryd(3d)	0.00159	2.44220
420	C	19	dxz	Ryd(3d)	0.00132	1.65764
421	C	19	dyz	Ryd(3d)	0.00047	1.64276
422	C	19	dx2y2	Ryd(3d)	0.00118	2.48648
423	C	19	dz2	Ryd(3d)	0.00047	1.96467
424	C	20	S	Cor(1S)	1.99915	-10.04857

425	C	20	S	Val(2S)	0.96651	-0.18857
426	C	20	S	Ryd(3S)	0.00149	0.67201
427	C	20	S	Ryd(4S)	0.00014	1.82637
428	C	20	S	Ryd(5S)	0.00000	22.12719
429	C	20	px	Val(2p)	1.18152	-0.07719
430	C	20	px	Ryd(4p)	0.00539	1.06255
431	C	20	px	Ryd(3p)	0.00034	0.29122
432	C	20	px	Ryd(5p)	0.00005	3.14079
433	C	20	py	Val(2p)	1.06578	-0.07130
434	C	20	py	Ryd(4p)	0.00440	0.74970
435	C	20	py	Ryd(3p)	0.00049	0.41196
436	C	20	py	Ryd(5p)	0.00016	3.02250
437	C	20	pz	Val(2p)	1.03275	-0.12706
438	C	20	pz	Ryd(4p)	0.00169	0.50820
439	C	20	pz	Ryd(3p)	0.00021	0.33154
440	C	20	pz	Ryd(5p)	0.00003	2.64934
441	C	20	dxy	Ryd(3d)	0.00068	2.56400
442	C	20	dxz	Ryd(3d)	0.00045	1.63709
443	C	20	dyz	Ryd(3d)	0.00038	1.70663
444	C	20	dx2y2	Ryd(3d)	0.00072	2.43302
445	C	20	dz2	Ryd(3d)	0.00041	1.99926
446	C	21	S	Cor(1S)	1.99916	-10.05791
447	C	21	S	Val(2S)	0.95701	-0.18566
448	C	21	S	Ryd(3S)	0.00137	0.85285
449	C	21	S	Ryd(4S)	0.00011	1.41957
450	C	21	S	Ryd(5S)	0.00001	22.33138
451	C	21	px	Val(2p)	1.08968	-0.06765

452	C	21	px	Ryd(4p)	0.00492	0.82833
453	C	21	px	Ryd(3p)	0.00037	0.38032
454	C	21	px	Ryd(5p)	0.00013	3.07179
455	C	21	py	Val(2p)	1.13874	-0.07340
456	C	21	py	Ryd(4p)	0.00630	0.96749
457	C	21	py	Ryd(3p)	0.00028	0.31351
458	C	21	py	Ryd(5p)	0.00009	3.12887
459	C	21	pz	Val(2p)	0.94856	-0.12685
460	C	21	pz	Ryd(4p)	0.00068	0.53056
461	C	21	pz	Ryd(3p)	0.00017	0.35057
462	C	21	pz	Ryd(5p)	0.00001	2.61583
463	C	21	dxy	Ryd(3d)	0.00075	2.45674
464	C	21	dxz	Ryd(3d)	0.00058	1.66486
465	C	21	dyz	Ryd(3d)	0.00046	1.66092
466	C	21	dx2y2	Ryd(3d)	0.00067	2.54817
467	C	21	dz2	Ryd(3d)	0.00040	2.00338
468	C	22	S	Cor(1S)	1.99905	-10.04542
469	C	22	S	Val(2S)	0.96224	-0.18150
470	C	22	S	Ryd(4S)	0.00164	0.81869
471	C	22	S	Ryd(3S)	0.00006	0.69025
472	C	22	S	Ryd(5S)	0.00001	23.24114
473	C	22	px	Val(2p)	1.10067	-0.07348
474	C	22	px	Ryd(4p)	0.00356	1.01373
475	C	22	px	Ryd(3p)	0.00040	0.59403
476	C	22	px	Ryd(5p)	0.00016	3.14790
477	C	22	py	Val(2p)	1.16521	-0.07818
478	C	22	py	Ryd(4p)	0.00512	1.03479

479	C	22	py	Ryd(3p)	0.00037	0.38454
480	C	22	py	Ryd(5p)	0.00008	3.13747
481	C	22	pz	Val(2p)	1.01816	-0.12557
482	C	22	pz	Ryd(4p)	0.00124	0.54481
483	C	22	pz	Ryd(3p)	0.00033	0.34574
484	C	22	pz	Ryd(5p)	0.00003	2.69985
485	C	22	dxy	Ryd(3d)	0.00088	2.52747
486	C	22	dxz	Ryd(3d)	0.00044	1.67592
487	C	22	dyz	Ryd(3d)	0.00048	1.69124
488	C	22	dx2y2	Ryd(3d)	0.00056	2.57187
489	C	22	dz2	Ryd(3d)	0.00041	2.05619
490	C	23	S	Cor(1S)	1.99931	-10.09542
491	C	23	S	Val(2S)	1.09168	-0.29347
492	C	23	S	Ryd(4S)	0.00122	0.94354
493	C	23	S	Ryd(3S)	0.00015	0.60440
494	C	23	S	Ryd(5S)	0.00001	23.51045
495	C	23	px	Val(2p)	1.21379	-0.13446
496	C	23	px	Ryd(3p)	0.00204	0.61356
497	C	23	px	Ryd(4p)	0.00028	0.74010
498	C	23	px	Ryd(5p)	0.00006	2.62454
499	C	23	py	Val(2p)	1.21326	-0.13148
500	C	23	py	Ryd(3p)	0.00228	0.63063
501	C	23	py	Ryd(4p)	0.00025	0.73160
502	C	23	py	Ryd(5p)	0.00010	2.60497
503	C	23	pz	Val(2p)	0.83336	-0.10451
504	C	23	pz	Ryd(3p)	0.00273	0.56339
505	C	23	pz	Ryd(4p)	0.00020	0.67028

506	C	23	pz	Ryd(5p)	0.00012	2.55786
507	C	23	dxy	Ryd(3d)	0.00060	2.00103
508	C	23	dxz	Ryd(3d)	0.00100	1.97335
509	C	23	dyz	Ryd(3d)	0.00079	1.95054
510	C	23	dx2y2	Ryd(3d)	0.00078	2.09459
511	C	23	dz2	Ryd(3d)	0.00142	2.15043
512	H	24	S	Val(1S)	0.56585	0.06631
513	H	24	S	Ryd(2S)	0.00223	0.66376
514	H	24	S	Ryd(3S)	0.00059	2.28371
515	H	24	px	Ryd(2p)	0.00018	2.15136
516	H	24	py	Ryd(2p)	0.00047	2.65014
517	H	24	pz	Ryd(2p)	0.00047	1.59698
518	H	25	S	Val(1S)	0.76249	0.03591
519	H	25	S	Ryd(2S)	0.00107	0.86656
520	H	25	S	Ryd(3S)	0.00021	1.81694
521	H	25	px	Ryd(2p)	0.00015	2.04281
522	H	25	py	Ryd(2p)	0.00042	2.62306
523	H	25	pz	Ryd(2p)	0.00017	1.62651
524	H	26	S	Val(1S)	0.78135	0.02132
525	H	26	S	Ryd(2S)	0.00046	0.67820
526	H	26	S	Ryd(3S)	0.00018	2.03342
527	H	26	px	Ryd(2p)	0.00027	2.31554
528	H	26	py	Ryd(2p)	0.00026	2.29640
529	H	26	pz	Ryd(2p)	0.00017	1.58668

530	H	27	S	Val(1S)	0.78096	0.02107
531	H	27	S	Ryd(2S)	0.00045	0.60808
532	H	27	S	Ryd(3S)	0.00017	2.10102
533	H	27	px	Ryd(2p)	0.00040	2.61591
534	H	27	py	Ryd(2p)	0.00013	2.00503
535	H	27	pz	Ryd(2p)	0.00017	1.57632
536	H	28	S	Val(1S)	0.75927	0.03296
537	H	28	S	Ryd(2S)	0.00088	0.90919
538	H	28	S	Ryd(3S)	0.00020	1.81293
539	H	28	px	Ryd(2p)	0.00018	2.00649
540	H	28	py	Ryd(2p)	0.00043	2.65234
541	H	28	pz	Ryd(2p)	0.00017	1.60470
542	H	29	S	Val(1S)	0.80512	0.02120
543	H	29	S	Ryd(2S)	0.00054	0.56231
544	H	29	S	Ryd(3S)	0.00013	2.19904
545	H	29	px	Ryd(2p)	0.00019	2.07183
546	H	29	py	Ryd(2p)	0.00044	2.53895
547	H	29	pz	Ryd(2p)	0.00016	1.59940
548	H	30	S	Val(1S)	0.78229	0.03239
549	H	30	S	Ryd(2S)	0.00060	0.56217
550	H	30	S	Ryd(3S)	0.00018	2.11389
551	H	30	px	Ryd(2p)	0.00042	2.68972
552	H	30	py	Ryd(2p)	0.00010	1.95495
553	H	30	pz	Ryd(2p)	0.00018	1.59578

554	H	31	S	Val(1S)	0.78597	0.03085
555	H	31	S	Ryd(2S)	0.00050	0.62504
556	H	31	S	Ryd(3S)	0.00017	2.10409
557	H	31	px	Ryd(2p)	0.00020	2.16374
558	H	31	py	Ryd(2p)	0.00034	2.45559
559	H	31	pz	Ryd(2p)	0.00017	1.60709
560	H	32	S	Val(1S)	0.74448	0.06226
561	H	32	S	Ryd(2S)	0.00100	1.17716
562	H	32	S	Ryd(3S)	0.00021	1.54916
563	H	32	px	Ryd(2p)	0.00023	2.17526
564	H	32	py	Ryd(2p)	0.00034	2.56618
565	H	32	pz	Ryd(2p)	0.00015	1.63219
566	H	33	S	Val(1S)	0.47655	0.06769
567	H	33	S	Ryd(2S)	0.00213	2.29234
568	H	33	px	Ryd(2p)	0.00130	2.62239
569	H	33	py	Ryd(2p)	0.00077	1.91158
570	H	33	pz	Ryd(2p)	0.00091	1.55741
571	H	34	S	Val(1S)	0.76718	0.02018
572	H	34	S	Ryd(3S)	0.00068	1.38429
573	H	34	S	Ryd(2S)	0.00028	1.30614
574	H	34	px	Ryd(2p)	0.00017	1.88703
575	H	34	py	Ryd(2p)	0.00035	2.56421
576	H	34	pz	Ryd(2p)	0.00012	1.74395
577	H	35	S	Val(1S)	0.79254	0.00301

578	H	35	S	Ryd(2S)	0.00075	0.97725
579	H	35	S	Ryd(3S)	0.00029	1.75935
580	H	35	px	Ryd(2p)	0.00034	2.55900
581	H	35	py	Ryd(2p)	0.00014	1.77738
582	H	35	pz	Ryd(2p)	0.00012	1.85733
583	H	36	S	Val(1S)	0.80755	-0.00123
584	H	36	S	Ryd(2S)	0.00128	0.75443
585	H	36	S	Ryd(3S)	0.00020	1.96344
586	H	36	px	Ryd(2p)	0.00020	2.06467
587	H	36	py	Ryd(2p)	0.00028	2.14847
588	H	36	pz	Ryd(2p)	0.00016	1.96753

WARNING: 1 low occupancy (<1.9990e) core orbital found on S 1

1 low occupancy (<1.9990e) core orbital found on C 9

1 low occupancy (<1.9990e) core orbital found on C 10

1 low occupancy (<1.9990e) core orbital found on C 11

1 low occupancy (<1.9990e) core orbital found on C 16

WARNING: Population inversion found on atom S 1

Population inversion found on atom O 2

Population inversion found on atom O 3

Population inversion found on atom N 6

Population inversion found on atom N 7

Population inversion found on atom N 8

Population inversion found on atom C 9

Population inversion found on atom C 10

Population inversion found on atom C 11

Population inversion found on atom C 12

Population inversion found on atom C 13

Population inversion found on atom C 14

Population inversion found on atom C 15

Population inversion found on atom C 16

Population inversion found on atom C 17

Population inversion found on atom C 18

Population inversion found on atom C 19

Population inversion found on atom C 20

Population inversion found on atom C 21

Population inversion found on atom C 22

Population inversion found on atom C 23

Population inversion found on atom H 34

Summary of Natural Population Analysis:

		Natural	Natural Population			
Atom	No	Charge	Core	Valence	Rydberg	Total
S	1	2.24339	9.99820	3.54652	0.21189	13.75661
O	2	-0.90640	1.99980	6.89553	0.01107	8.90640
O	3	-0.88456	1.99980	6.87387	0.01089	8.88456
O	4	-0.68663	1.99974	6.67470	0.01220	8.68663
O	5	-0.66857	1.99975	6.65399	0.01483	8.66857
N	6	-0.75408	1.99941	5.72255	0.03212	7.75408
N	7	-0.59850	1.99925	5.57792	0.02133	7.59850

N	8	-0.48656	1.99937	5.46816	0.01903	7.48656
C	9	-0.04367	1.99881	4.02087	0.02399	6.04367
C	10	0.40188	1.99869	3.57198	0.02745	5.59812
C	11	-0.10207	1.99888	4.08434	0.01885	6.10207
C	12	-0.15497	1.99908	4.13785	0.01804	6.15497
C	13	-0.18282	1.99916	4.16621	0.01745	6.18282
C	14	-0.17708	1.99916	4.16015	0.01778	6.17708
C	15	-0.18745	1.99903	4.16776	0.02065	6.18745
C	16	-0.24923	1.99871	4.22350	0.02702	6.24923
C	17	0.66160	1.99904	3.30078	0.03858	5.33840
C	18	0.38853	1.99908	3.58580	0.02659	5.61147
C	19	0.06599	1.99923	3.90761	0.02718	5.93401
C	20	-0.26274	1.99915	4.24656	0.01703	6.26274
C	21	-0.15044	1.99916	4.13399	0.01729	6.15044
C	22	-0.26109	1.99905	4.24628	0.01577	6.26109
C	23	-0.36544	1.99931	4.35209	0.01405	6.36544
H	24	0.43022	0.00000	0.56585	0.00393	0.56978
H	25	0.23548	0.00000	0.76249	0.00203	0.76452
H	26	0.21732	0.00000	0.78135	0.00134	0.78268
H	27	0.21770	0.00000	0.78096	0.00133	0.78230
H	28	0.23887	0.00000	0.75927	0.00186	0.76113
H	29	0.19341	0.00000	0.80512	0.00147	0.80659
H	30	0.21623	0.00000	0.78229	0.00148	0.78377
H	31	0.21265	0.00000	0.78597	0.00138	0.78735
H	32	0.25360	0.00000	0.74448	0.00192	0.74640
H	33	0.51832	0.00000	0.47655	0.00512	0.48168
H	34	0.23122	0.00000	0.76718	0.00160	0.76878
H	35	0.20581	0.00000	0.79254	0.00165	0.79419

H 36 0.19033 0.00000 0.80755 0.00212 0.80967

==========

* Total * 0.00024 53.98086 117.33060 0.68829 171.99976

Natural Population

Core 53.98086 (99.9646% of 54)

Valence 117.33060 (99.4327% of 118)

Natural Minimal Basis 171.31147 (99.5997% of 172)

Natural Rydberg Basis 0.68829 (0.4002% of 172)

Atom	No	Natural Electron Configuration
S	1	[core]3S(1.03)3p(2.52)3d(0.17)5p(0.03)
O	2	[core]2S(1.82)2p(5.07)3d(0.01)
O	3	[core]2S(1.83)2p(5.05)3d(0.01)
O	4	[core]2S(1.71)2p(4.97)3p(0.01)
O	5	[core]2S(1.66)2p(5.00)3p(0.01)
N	6	[core]2S(1.36)2p(4.36)3p(0.01)4p(0.02)
N	7	[core]2S(1.25)2p(4.33)3p(0.01)4p(0.01)
N	8	[core]2S(1.37)2p(4.10)3d(0.01)4p(0.01)
C	9	[core]2S(0.85)2p(3.17)4p(0.02)
C	10	[core]2S(0.82)2p(2.75)3d(0.01)4p(0.02)
C	11	[core]2S(0.87)2p(3.21)4p(0.01)
C	12	[core]2S(0.95)2p(3.19)4p(0.01)
C	13	[core]2S(0.96)2p(3.21)4p(0.01)
C	14	[core]2S(0.96)2p(3.20)4p(0.01)

C 15 [core]2S(0.95)2p(3.22)4p(0.01)

C 16 [core]2S(0.96)2p(3.26)4p(0.02)

C 17 [core]2S(0.76)2p(2.55)3d(0.01)4p(0.02)

C 18 [core]2S(0.80)2p(2.79)3d(0.01)4p(0.02)

C 19 [core]2S(0.92)2p(2.98)3d(0.01)4p(0.02)

C 20 [core]2S(0.97)2p(3.28)4p(0.01)

C 21 [core]2S(0.96)2p(3.18)4p(0.01)

C 22 [core]2S(0.96)2p(3.28)4p(0.01)

C 23 [core]2S(1.09)2p(3.26)3p(0.01)

H 24 1S(0.57)

H 25 1S(0.76)

H 26 1S(0.78)

H 27 1S(0.78)

H 28 1S(0.76)

H 29 1S(0.81)

H 30 1S(0.78)

H 31 1S(0.79)

H 32 1S(0.74)

H 33 1S(0.48)

H 34 1S(0.77)

H 35 1S(0.79)

H 36 1S(0.81)

NATURAL BOND ORBITAL ANALYSIS:

	Occupancies	Lewis Structure	Low	High
Occ.	----------	----------	occ	occ

Cycle	Thresh.	Lewis	Non-Lewis	CR	BD	3C	LP	(L)	(NL)	Dev
1(1)	1.90	162.33077	9.66923	27	46	0	13	17	15	0.52
2(2)	1.90	162.33077	9.66923	27	46	0	13	17	15	0.52
3(1)	1.80	163.17115	8.82885	27	43	0	16	10	14	0.46
4(2)	1.80	163.17115	8.82885	27	43	0	16	10	14	0.46
5(1)	1.70	164.18060	7.81940	27	42	0	17	5	12	0.46
6(2)	1.70	164.18060	7.81940	27	42	0	17	5	12	0.46
7(1)	1.60	167.10664	4.89336	27	46	0	13	0	12	0.45
8(2)	1.60	167.09573	4.90427	27	46	0	13	0	12	0.43
9(3)	1.60	167.10664	4.89336	27	46	0	13	0	12	0.45
10(4)	1.60	167.09573	4.90427	27	46	0	13	0	12	0.43
11(5)	1.60	167.10664	4.89336	27	46	0	13	0	12	0.45
12(6)	1.60	167.09573	4.90427	27	46	0	13	0	12	0.43
13(7)	1.60	167.10664	4.89336	27	46	0	13	0	12	0.45
14(8)	1.60	167.09573	4.90427	27	46	0	13	0	12	0.43
15(9)	1.60	167.10664	4.89336	27	46	0	13	0	12	0.45
16(1)	1.50	166.26653	5.73347	27	44	0	15	0	13	0.61
17(2)	1.50	166.26653	5.73347	27	44	0	15	0	13	0.61
18(1)	1.60	167.10664	4.89336	27	46	0	13	0	12	0.45

Structure accepted: RESONANCE keyword permits strongly delocalized structure

WARNING: 1 low occupancy (<1.9990e) core orbital found on S 1

1 low occupancy (<1.9990e) core orbital found on C 9

1 low occupancy (<1.9990e) core orbital found on C 10

1 low occupancy (<1.9990e) core orbital found on C 11

```
      1 low occupancy (<1.9990e) core orbital  found on  C   16


-------------------------------------------------------
 Core                  53.98090 ( 99.965% of  54)
 Valence Lewis         113.12575 ( 95.869% of 118)
 ==================    ============================
 Total Lewis           167.10664 ( 97.155% of 172)
 -----------------------------------------------------
 Valence non-Lewis       4.33159 (  2.518% of 172)
 Rydberg non-Lewis       0.56177 (  0.327% of 172)
 ==================    ============================
 Total non-Lewis         4.89336 (  2.845% of 172)
-------------------------------------------------------



    (Occupancy)   Bond orbital/ Coefficients/ Hybrids
-------------------------------------------------------------------------------
   1. (1.98721) BD ( 1) S   1 - O   2
            ( 35.96%)   0.5996* S   1 s( 27.65%)p 2.56( 70.78%)d 0.06(  1.57%)
                                0.0000  0.0000  0.5245 -0.0377  0.0009
                                0.0017  0.0000  0.0001  0.2087  0.0100
                               -0.0038 -0.0012 -0.0006 -0.0001 -0.7688
                               -0.0559 -0.0004  0.0053  0.0005  0.0000
                                0.2641  0.0121 -0.0047 -0.0037 -0.0005
                               -0.0503  0.0211 -0.0812 -0.0691 -0.0364
            ( 64.04%)   0.8003* O   2 s( 24.58%)p 3.06( 75.27%)d 0.01(  0.15%)
                                0.0000  0.4952  0.0240 -0.0027  0.0000
                               -0.2527  0.0070 -0.0028  0.0004  0.7784
```

-0.0162 0.0079 -0.0009 -0.2872 0.0131

0.0005 -0.0003 -0.0173 0.0057 -0.0196

-0.0243 -0.0130

2. (1.98501) BD (1) S   1 - O   3

(36.18%)   0.6015* S   1 s(27.87%)p 2.53(70.57%)d 0.06(1.55%)

0.0000 0.0000 0.5269 -0.0326 -0.0004

0.0019 0.0000 0.0000 -0.2614 -0.0158

-0.0046 0.0022 0.0002 0.0000 0.0149

-0.0094 -0.0088 -0.0025 0.0001 -0.0001

-0.7959 -0.0576 0.0008 0.0033 0.0010

-0.0053 0.0644 -0.0245 0.0142 0.1027

(63.82%)   0.7989* O   3 s(23.88%)p 3.18(75.98%)d 0.01(0.14%)

0.0000 0.4881 -0.0247 0.0015 0.0001

0.2593 -0.0090 -0.0018 0.0004 -0.0423

0.0076 0.0033 -0.0001 0.8308 -0.0192

0.0074 -0.0005 -0.0012 0.0181 -0.0026

0.0028 0.0326

3. (1.97305) BD (1) S   1 - N   6

(36.27%)   0.6023* S   1 s(20.20%)p 3.86(77.87%)d 0.10(1.93%)

0.0000 0.0001 0.4486 0.0277 0.0018

-0.0013 0.0000 -0.0001 -0.6582 -0.0262

0.0077 -0.0085 0.0005 0.0000 0.2924

-0.0049 -0.0051 -0.0085 0.0002 0.0001

0.5088 0.0114 -0.0027 -0.0020 -0.0005

-0.0637 -0.1000 0.0645 0.0323 0.0054

(63.73%)   0.7983* N   6 s(21.62%)p 3.62(78.30%)d 0.00(0.07%)

-0.0002 0.4647 0.0127 -0.0101 -0.0003

0.6721 0.0134 -0.0065 0.0004 -0.3322

0.0160 -0.0079 -0.0016 -0.4695 0.0059

-0.0029 -0.0004 -0.0087 -0.0193 0.0027

0.0159 -0.0046

4. (1.96567) BD (1) S 1 - C 16

(47.52%) 0.6893* S 1 s(24.51%)p 3.02(73.97%)d 0.06(1.52%)

0.0000 0.0002 0.4937 0.0369 -0.0018

-0.0009 0.0000 0.0002 0.6562 0.0144

-0.0058 0.0048 0.0001 0.0001 0.5441

0.0048 -0.0064 -0.0079 0.0005 0.0000

0.1125 0.0008 -0.0028 -0.0068 0.0006

0.1014 0.0215 0.0315 0.0099 -0.0585

(52.48%) 0.7244* C 16 s(23.01%)p 3.34(76.91%)d 0.00(0.07%)

-0.0003 0.4792 -0.0226 0.0021 -0.0016

-0.6194 -0.0351 0.0036 0.0039 -0.6013

-0.0118 -0.0016 0.0035 -0.1500 0.0000

-0.0005 0.0007 0.0232 0.0054 0.0058

0.0018 -0.0113

5. (1.98947) BD (1) O 4 - C 17

(64.12%) 0.8008* O 4 s(37.03%)p 1.70(62.84%)d 0.00(0.13%)

0.0000 -0.6085 0.0088 0.0001 -0.1678

0.0017 0.0008 0.0004 0.7719 -0.0155

0.0134 -0.0004 -0.0634 0.0025 -0.0007

0.0000 0.0147 -0.0013 0.0059 0.0276

0.0172

(35.88%) 0.5990* C 17 s(30.78%)p 2.24(69.08%)d 0.00(0.15%)

-0.0002 -0.5547 0.0100 -0.0013 0.2089

-0.0305 -0.0004 -0.0029 -0.7928 0.0578

0.0137 0.0071 0.1188 -0.0054 -0.0007

-0.0012 0.0135 -0.0026 0.0092 0.0272

0.0215

6. (1.98199) BD (2) O   4 - C 17

(74.83%)   0.8651* O   4 s(0.01%)p99.99(99.89%)d 6.97(0.09%)

0.0000 0.0115 0.0011 0.0000 -0.0621

0.0003 0.0020 0.0000 0.0772 -0.0004

0.0018 -0.0003 0.9944 -0.0051 0.0121

-0.0025 0.0022 0.0098 -0.0282 0.0014

0.0057

(25.17%)   0.5017* C 17 s(0.01%)p99.99(99.52%)d35.15(0.47%)

0.0000 0.0110 -0.0035 -0.0008 -0.0573

-0.0014 0.0018 -0.0008 0.1251 -0.0005

0.0040 0.0002 0.9870 0.0319 0.0306

0.0068 -0.0060 -0.0145 0.0651 -0.0073

-0.0126

7. (1.99073) BD (1) O   5 - C 10

(65.75%)   0.8108* O   5 s(33.04%)p 2.02(66.87%)d 0.00(0.09%)

0.0000 -0.5748 0.0020 0.0000 -0.1534

0.0050 -0.0034 -0.0022 0.7918 -0.0061

0.0063 -0.0016 -0.1349 0.0003 -0.0009

0.0005 0.0006 0.0002 0.0100 0.0239

0.0153

(34.25%)   0.5853* C 10 s(25.90%)p 2.85(73.92%)d 0.01(0.18%)

0.0002 -0.5084 -0.0235 0.0002 0.0004

0.1673 0.0013 -0.0033 0.0010 -0.8275

0.0525 0.0107 0.0079 0.1525 -0.0127

-0.0012 -0.0010 0.0132 -0.0012 0.0121

0.0318 0.0219

8. (1.98301) BD (1) O 5 - H 33

(79.07%) 0.8892* O 5 s(23.71%)p 3.21(76.21%)d 0.00(0.08%)

0.0002 -0.4869 0.0042 0.0003 0.8496

-0.0209 -0.0138 -0.0011 -0.1930 0.0392

-0.0073 -0.0020 -0.0288 -0.0068 0.0008

0.0007 -0.0070 0.0053 0.0013 -0.0218

0.0147

(20.93%) 0.4575* H 33 s(99.76%)p 0.00(0.24%)

-0.9986 -0.0173 -0.0482 0.0102 0.0017

9. (1.98054) BD (1) N 6 - C 9

(61.58%) 0.7848* N 6 s(34.34%)p 1.91(65.62%)d 0.00(0.05%)

-0.0001 0.5858 -0.0121 0.0017 0.0000

-0.1741 0.0060 -0.0030 -0.0011 0.7626

-0.0104 -0.0012 0.0013 -0.2098 0.0087

0.0010 -0.0003 -0.0004 -0.0038 -0.0077

-0.0183 -0.0077

(38.42%) 0.6198* C 9 s(27.78%)p 2.60(72.12%)d 0.00(0.10%)

-0.0003 0.5270 0.0080 0.0018 -0.0005

0.1793 0.0166 -0.0024 0.0004 -0.8134

0.0375 -0.0013 0.0043 0.1605 -0.0010

-0.0012 -0.0008 -0.0120 0.0001 -0.0106

-0.0219 -0.0169

10. (1.98132) BD (1) N 6 - C 23

(64.22%) 0.8014* N 6 s(32.31%)p 2.09(67.65%)d 0.00(0.04%)

-0.0001 0.5682 -0.0148 0.0051 -0.0002

0.0612 0.0057 -0.0023 -0.0018 -0.2038

0.0194 -0.0063 -0.0005 0.7940 -0.0172

0.0060 -0.0003 -0.0047 0.0090 -0.0009

0.0012 0.0165

(35.78%) 0.5982* C 23 s(23.15%)p 3.31(76.71%)d 0.01(0.14%)

0.0003 0.4801 0.0308 -0.0026 -0.0004

-0.0016 0.0102 -0.0031 0.0012 0.1744

0.0063 -0.0051 0.0013 -0.8571 0.0432

0.0060 0.0006 -0.0003 -0.0005 -0.0126

-0.0011 0.0351

11. (1.98778) BD (1) N   7 - C 17

(62.33%) 0.7895* N   7 s(36.65%)p 1.73(63.30%)d 0.00(0.05%)

0.0000 0.6053 0.0095 0.0004 0.0001

0.5252 -0.0090 0.0045 0.0013 0.5965

-0.0064 -0.0068 0.0019 -0.0352 -0.0004

0.0010 0.0000 0.0177 -0.0013 -0.0018

-0.0025 -0.0116

(37.67%) 0.6138* C 17 s(31.43%)p 2.18(68.46%)d 0.00(0.11%)

0.0001 0.5606 -0.0094 -0.0017 -0.6164

0.0178 0.0007 0.0014 -0.5510 0.0036

-0.0016 -0.0009 0.0278 0.0009 -0.0001

-0.0002 0.0285 -0.0023 -0.0024 0.0002

-0.0155

12. (1.98720) BD (1) N   7 - C 18

(62.31%) 0.7894* N   7 s(36.77%)p 1.72(63.19%)d 0.00(0.04%)

0.0000 0.6064 0.0038 0.0009 0.0002

-0.7896 0.0029 -0.0006 -0.0006 0.0771

0.0125 -0.0001 -0.0008 -0.0479 -0.0016

0.0005 0.0002 -0.0040 0.0028 -0.0005

0.0145 -0.0114

(37.69%) 0.6139* C 18 s(27.44%)p 2.64(72.46%)d 0.00(0.10%)

-0.0002 0.5236 -0.0138 -0.0002 -0.0015

0.8488 -0.0139 -0.0023 -0.0041 -0.0186

0.0167 -0.0023 0.0000 0.0571 -0.0027

0.0003 -0.0004 -0.0022 0.0038 0.0001

0.0275 -0.0154

13. (1.97966) BD (1) N 7 - H 24

(72.15%) 0.8494* N 7 s(26.42%)p 2.78(73.53%)d 0.00(0.05%)

0.0003 -0.5139 0.0100 0.0020 0.0003

-0.3151 0.0056 0.0045 0.0002 0.7969

-0.0058 0.0012 -0.0006 -0.0301 -0.0003

0.0019 -0.0001 0.0117 -0.0007 0.0016

0.0118 0.0131

(27.85%) 0.5277* H 24 s(99.93%)p 0.00(0.07%)

-0.9996 0.0072 -0.0027 0.0083 -0.0255

0.0001

14. (1.98207) BD (1) N 8 - C 18

(58.17%) 0.7627* N 8 s(34.47%)p 1.90(65.44%)d 0.00(0.08%)

-0.0001 0.5870 0.0105 -0.0044 -0.0001

0.3832 -0.0228 -0.0047 0.0028 0.7070

-0.0029 -0.0054 0.0003 -0.0843 -0.0017

0.0005 0.0002 0.0122 -0.0017 -0.0068

-0.0212 -0.0141

(41.83%) 0.6467* C 18 s(31.88%)p 2.13(68.03%)d 0.00(0.09%)

0.0000 0.5645 -0.0125 -0.0001 0.0001

-0.3714 -0.0206 0.0048 -0.0023 -0.7293

0.0381 0.0039 0.0029 0.0924 -0.0081

-0.0001 -0.0005 0.0182 -0.0022 -0.0059

-0.0172 -0.0156

15. (1.71299) BD (2) N 8 - C 18

(60.45%) 0.7775* N 8 s(0.00%)p 1.00(99.86%)d 0.00(0.14%)

0.0000 0.0008 -0.0007 -0.0002 0.0000

-0.0763 0.0010 -0.0008 0.0001 0.1580

-0.0024 0.0012 -0.0006 0.9836 -0.0171

0.0065 -0.0039 -0.0046 -0.0129 0.0321

-0.0041 -0.0113

(39.55%) 0.6289* C 18 s(0.00%)p 1.00(99.87%)d 0.00(0.13%)

0.0000 0.0011 0.0009 -0.0009 0.0000

-0.0635 -0.0012 -0.0026 -0.0005 0.1579

0.0035 0.0022 0.0009 0.9845 0.0169

0.0167 0.0046 -0.0013 -0.0210 -0.0274

0.0060 0.0052

16. (1.98459) BD (1) N 8 - C 19

(59.79%) 0.7733* N 8 s(36.33%)p 1.75(63.59%)d 0.00(0.08%)

0.0002 -0.6025 -0.0183 -0.0026 0.0002

0.7914 -0.0168 -0.0075 0.0010 0.0762

-0.0314 0.0000 0.0030 0.0496 0.0036

-0.0005 -0.0004 0.0100 -0.0054 0.0010

-0.0223 0.0132

(40.21%) 0.6341* C 19 s(31.49%)p 2.17(68.41%)d 0.00(0.10%)

-0.0001 -0.5603 0.0305 -0.0027 0.0003

-0.8203 0.0515 0.0070 0.0017 -0.0346

-0.0520 0.0077 0.0002 -0.0657 0.0128

-0.0006 0.0002 -0.0053 -0.0041 0.0001

-0.0264 0.0171

17. (1.97764) BD (1) C 9 - C 10

(50.04%) 0.7074* C 9 s(38.12%)p 1.62(61.84%)d 0.00(0.05%)

-0.0001 0.6174 0.0005 -0.0020 0.0002

0.5901 0.0030 -0.0030 0.0026 0.5095

-0.0076 -0.0007 0.0036 -0.1024 0.0019

0.0018 0.0003 0.0169 -0.0042 -0.0031

0.0015 -0.0116

(49.96%) 0.7069* C 10 s(39.44%)p 1.53(60.53%)d 0.00(0.03%)

0.0001 0.6280 -0.0040 0.0003 -0.0006

-0.5970 -0.0043 0.0040 -0.0010 -0.4879

-0.0101 0.0074 -0.0039 0.1029 0.0002

-0.0002 0.0013 0.0151 -0.0018 -0.0017

0.0025 -0.0092

18. (1.80574) BD (2) C 9 - C 10

(60.18%) 0.7757* C 9 s(0.00%)p 1.00(99.97%)d 0.00(0.03%)

0.0001 -0.0003 -0.0041 -0.0015 -0.0004

0.0031 -0.0092 0.0007 0.0006 0.1937

0.0017 0.0040 -0.0005 0.9806 0.0225

0.0048 0.0017 0.0038 0.0105 0.0133

-0.0028 -0.0040

(39.82%) 0.6311* C 10 s(0.00%)p 1.00(99.90%)d 0.00(0.09%)

0.0000 0.0059 -0.0014 -0.0021 0.0003

0.0257 -0.0033 0.0026 -0.0006 0.1831

0.0061 0.0016 0.0003 0.9821 0.0010

0.0124 0.0039 -0.0037 -0.0201 -0.0212

0.0044 0.0078

19. (1.97202) BD (1) C 9 - C 17

(51.27%) 0.7160* C 9 s(34.01%)p 1.94(65.94%)d 0.00(0.05%)

0.0000 -0.5832 0.0021 0.0004 0.0000

0.7868 -0.0008 -0.0015 0.0004 -0.1974

-0.0042 0.0022 0.0011 0.0364 -0.0051

-0.0010 -0.0005 0.0105 -0.0013 0.0019

-0.0156 0.0109

(48.73%) 0.6981* C 17 s(37.38%)p 1.67(62.59%)d 0.00(0.04%)

-0.0001 -0.6112 -0.0117 0.0003 -0.7562

-0.0324 0.0089 -0.0025 0.2204 0.0083

-0.0006 0.0008 -0.0651 -0.0019 -0.0003

-0.0005 0.0124 -0.0032 0.0014 -0.0125

0.0072

20. (1.97141) BD (1) C 10 - C 11

(49.14%) 0.7010* C 10 s(34.39%)p 1.91(65.57%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.5864 -0.0086 -0.0006 0.0007

0.7836 0.0191 -0.0074 0.0000 -0.2006

-0.0273 0.0072 -0.0029 0.0136 0.0050

-0.0022 0.0004 -0.0077 -0.0007 0.0000

0.0149 -0.0094

(50.86%) 0.7131* C 11 s(31.30%)p 2.19(68.65%)d 0.00(0.04%)

0.0000 0.5595 -0.0048 0.0000 0.0002

-0.7979 -0.0159 0.0061 0.0007 0.2223

-0.0116 0.0004 0.0019 -0.0083 0.0003

-0.0006 -0.0001 -0.0081 0.0012 0.0006

0.0153 -0.0111

21. (1.96928) BD (1) C 11 - C 12

(52.02%) 0.7213* C 11 s(34.97%)p 1.86(65.00%)d 0.00(0.03%)

-0.0001 0.5914 0.0019 -0.0016 -0.0003

0.5695 0.0113 -0.0034 -0.0001 0.5601

-0.0133 -0.0002 0.0021 0.1076 -0.0028

-0.0004 0.0009 0.0142 0.0025 0.0036

0.0009 -0.0097

(47.98%) 0.6926* C 12 s(34.62%)p 1.89(65.34%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.5883 -0.0051 0.0003 0.0015

-0.5899 0.0207 0.0099 -0.0006 -0.5396

-0.0130 0.0103 -0.0028 -0.1158 -0.0011

0.0024 -0.0005 0.0163 0.0032 0.0045

-0.0007 -0.0116

22. (1.61624) BD (2) C 11 - C 12

(52.62%) 0.7254* C 11 s(0.00%)p 1.00(99.98%)d 0.00(0.02%)

-0.0002 0.0026 -0.0049 0.0002 0.0000

-0.0483 -0.0017 -0.0001 0.0004 -0.1435

-0.0015 -0.0012 0.0007 0.9883 -0.0004

0.0111 -0.0003 -0.0019 0.0111 0.0054

0.0005 0.0031

(47.38%) 0.6883* C 12 s(0.00%)p 1.00(99.95%)d 0.00(0.05%)

0.0000 0.0005 0.0023 0.0010 -0.0001

-0.0424 -0.0023 -0.0020 -0.0016 -0.1645

-0.0003 -0.0030 -0.0001 0.9851 0.0033

0.0161 0.0007 0.0022 -0.0043 -0.0206

-0.0034 -0.0056

23. (1.96940) BD (1) C 11 - C 16

(50.48%) 0.7105* C 11 s(33.67%)p 1.97(66.29%)d 0.00(0.03%)

0.0000 0.5803 0.0066 0.0020 -0.0001

0.1892 0.0055 -0.0001 0.0013 -0.7847

0.0017 0.0049 -0.0008 -0.1062 0.0036

0.0002 -0.0004 -0.0057 0.0000 0.0040

-0.0131 -0.0111

(49.52%) 0.7037* C 16 s(37.44%)p 1.67(62.52%)d 0.00(0.04%)

0.0000 0.6118 0.0103 0.0013 0.0013

-0.2665 0.0035 0.0041 -0.0012 0.7386

-0.0077 -0.0056 0.0063 0.0924 0.0004

-0.0012 0.0010 -0.0098 -0.0012 0.0048

-0.0113 -0.0119

24. (1.97968) BD (1) C 12 - C 13

(50.34%) 0.7095* C 12 s(36.42%)p 1.74(63.54%)d 0.00(0.04%)

0.0000 0.6031 -0.0214 -0.0002 -0.0003

0.7732 -0.0251 -0.0094 0.0002 -0.1882

-0.0363 0.0069 0.0010 0.0016 -0.0065

0.0004 -0.0001 -0.0111 -0.0003 0.0004

0.0126 -0.0112

(49.66%) 0.7047* C 13 s(35.67%)p 1.80(64.29%)d 0.00(0.05%)

0.0000 0.5971 -0.0115 -0.0003 0.0004

-0.7653 0.0055 -0.0130 -0.0002 0.2346

-0.0431 -0.0003 0.0000 0.0032 -0.0053

-0.0002 0.0001 -0.0064 0.0001 0.0002

0.0162 -0.0123

25. (1.97772) BD (1) C 12 - H 25

(61.84%) 0.7864* C 12 s(28.94%)p 2.45(71.02%)d 0.00(0.04%)

-0.0004 0.5375 0.0214 0.0002 -0.0008

-0.2233 -0.0069 0.0020 0.0035 0.8029

0.0098 0.0046 0.0004 0.1241 0.0027

0.0018 0.0010 -0.0111 -0.0021 0.0054

-0.0139 -0.0087

(38.16%) 0.6177* H 25 s(99.95%)p 0.00(0.05%)

0.9998 0.0017 0.0008 0.0066 -0.0209

-0.0023

26. (1.98022) BD (1) C 13 - C 14

(49.98%) 0.7069* C 13 s(35.64%)p 1.80(64.32%)d 0.00(0.04%)

0.0000 0.5968 -0.0153 -0.0012 -0.0004

0.2313 -0.0439 -0.0009 0.0004 -0.7610

0.0078 -0.0126 0.0004 -0.0913 -0.0015

-0.0014 0.0000 -0.0062 -0.0006 0.0041

-0.0158 -0.0115

(50.02%) 0.7073* C 14 s(35.81%)p 1.79(64.14%)d 0.00(0.04%)

0.0000 0.5982 -0.0153 -0.0011 -0.0003

-0.1772 -0.0356 -0.0069 0.0004 0.7761

-0.0276 0.0103 0.0000 0.0746 -0.0051

0.0011 0.0000 -0.0107 -0.0008 0.0032

-0.0134 -0.0116

27. (1.63036) BD (2) C 13 - C 14

(50.01%) 0.7072* C 13 s(0.00%)p 1.00(99.95%)d 0.00(0.05%)

0.0000 0.0005 0.0015 0.0011 0.0002

-0.0351 -0.0007 0.0013 -0.0001 -0.1291

-0.0017 0.0011 0.0003 0.9906 0.0137

-0.0122 0.0000 0.0022 -0.0083 -0.0197

-0.0022 -0.0043

(49.99%) 0.7070* C 14 s(0.00%)p 1.00(99.95%)d 0.00(0.05%)

0.0001 0.0045 0.0012 0.0004 0.0000

-0.0446 -0.0011 0.0006 -0.0001 -0.1090

-0.0022 0.0010 -0.0001 0.9926 0.0138

-0.0122 -0.0004 0.0013 -0.0172 0.0134

0.0025 0.0013

28. (1.97992) BD (1) C 13 - H 26

(60.93%) 0.7806* C 13 s(28.67%)p 2.49(71.29%)d 0.00(0.04%)

-0.0004 0.5350 0.0224 0.0012 0.0001

0.5973 0.0122 -0.0042 0.0007 0.5884

0.0118 -0.0036 0.0006 0.0975 0.0028

-0.0006 0.0002 0.0183 0.0032 0.0029

0.0001 -0.0083

(39.07%) 0.6250* H 26 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

0.9998 0.0007 0.0009 -0.0148 -0.0147

-0.0022

29. (1.97550) BD (1) C 14 - C 15

(49.38%) 0.7027* C 14 s(35.46%)p 1.82(64.49%)d 0.00(0.05%)

0.0001 0.5954 -0.0112 -0.0002 0.0003

-0.5509 -0.0170 -0.0114 -0.0002 -0.5755

0.0403 -0.0062 -0.0007 -0.0906 0.0040

-0.0014 -0.0001 0.0171 0.0030 0.0028

0.0030 -0.0119

(50.62%) 0.7115* C 15 s(36.26%)p 1.76(63.70%)d 0.00(0.04%)

-0.0001 0.6020 0.0145 -0.0034 0.0002

0.5817 -0.0387 -0.0029 0.0010 0.5337

0.0219 -0.0118 -0.0006 0.1083 0.0004

-0.0010 0.0000 0.0159 0.0032 0.0037

-0.0030 -0.0111

30. (1.97956) BD (1) C 14 - H 27

(60.94%) 0.7806* C 14 s(28.69%)p 2.48(71.26%)d 0.00(0.04%)

-0.0004 0.5352 0.0219 0.0012 0.0000

0.8129 0.0157 -0.0056 0.0007 -0.2270

-0.0048 0.0009 0.0000 0.0091 0.0005

-0.0001 0.0002 -0.0100 0.0005 -0.0004

0.0156 -0.0087

(39.06%) 0.6250* H 27 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

0.9998 -0.0006 0.0009 -0.0202 0.0059

-0.0002

31. (1.97720) BD (1) C 15 - C 16

(48.74%) 0.6981* C 15 s(35.04%)p 1.85(64.92%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.5916 0.0175 0.0024 0.0003

-0.7809 0.0222 0.0093 -0.0004 0.1913

0.0294 -0.0043 0.0019 -0.0371 0.0060

0.0001 0.0001 -0.0098 0.0016 0.0000

0.0134 -0.0115

(51.26%) 0.7160* C 16 s(39.54%)p 1.53(60.42%)d 0.00(0.03%)

0.0000 0.6284 0.0223 -0.0024 -0.0001

0.7318 -0.0127 -0.0013 0.0062 -0.2594

0.0266 -0.0005 -0.0012 0.0229 0.0019

-0.0007 0.0003 -0.0077 0.0015 0.0000

0.0132 -0.0101

32. (1.68515) BD (2) C 15 - C 16

(45.19%) 0.6723* C 15 s(0.00%)p 1.00(99.94%)d 0.00(0.06%)

0.0001 0.0047 -0.0020 -0.0002 0.0003

-0.0739 0.0018 -0.0003 0.0001 -0.1255

0.0049 0.0002 0.0007 0.9889 0.0023

0.0150 0.0008 0.0017 -0.0169 0.0158

0.0038 0.0007

(54.81%) 0.7403* C 16 s(0.01%)p 1.00(99.98%)d 0.00(0.01%)

-0.0002 0.0010 -0.0070 -0.0009 -0.0001

-0.0866 -0.0052 -0.0025 -0.0002 -0.1549

0.0063 0.0007 0.0004 0.9838 -0.0164

0.0082 -0.0034 -0.0011 0.0115 -0.0024

-0.0007 0.0018

33. (1.97649) BD (1) C 15 - H 28

(62.02%) 0.7875* C 15 s(28.71%)p 2.48(71.25%)d 0.00(0.04%)

0.0003 -0.5352 0.0249 -0.0009 0.0005

-0.2095 0.0005 -0.0037 -0.0023 0.8125

0.0175 0.0020 -0.0005 0.0899 0.0035

0.0014 0.0003 0.0067 0.0009 -0.0040

0.0163 0.0094

(37.98%) 0.6163* H 28 s(99.95%)p 0.00(0.05%)

-0.9998 -0.0014 -0.0007 0.0046 -0.0213

-0.0010

34. (1.97765) BD (1) C 18 - C 22

(50.96%) 0.7139* C 18 s(40.48%)p 1.47(59.49%)d 0.00(0.03%)

0.0000 0.6360 0.0151 0.0001 0.0008

-0.3690 -0.0200 0.0041 -0.0011 0.6641

0.0021 -0.0061 0.0033 -0.1310 -0.0017

0.0010 -0.0007 -0.0127 0.0022 -0.0040

-0.0090 -0.0069

(49.04%) 0.7003* C 22 s(33.18%)p 2.01(66.76%)d 0.00(0.06%)

0.0000 0.5760 -0.0053 0.0015 0.0010

0.4415 -0.0284 -0.0023 -0.0003 -0.6722

-0.0041 0.0086 -0.0026 0.1411 -0.0016

-0.0016 0.0004 -0.0157 0.0035 -0.0066

-0.0102 -0.0126

35. (1.98502) BD (1) C 19 - C 20

(49.43%) 0.7030* C 19 s(39.19%)p 1.55(60.76%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.6260 -0.0075 -0.0060 -0.0003

-0.4413 0.0410 0.0046 -0.0010 0.6261

0.0120 -0.0129 0.0007 -0.1374 0.0015

0.0024 -0.0002 -0.0148 0.0030 -0.0053

-0.0086 -0.0091

(50.57%) 0.7111* C 20 s(34.73%)p 1.88(65.22%)d 0.00(0.05%)

0.0000 0.5892 -0.0120 -0.0013 -0.0001

0.4319 0.0186 -0.0100 -0.0003 -0.6662

0.0408 0.0061 0.0000 0.1399 -0.0049

-0.0019 0.0000 -0.0174 0.0044 -0.0053

-0.0028 -0.0118

36. (1.64638) BD (2) C 19 - C 20

(45.83%) 0.6770* C 19 s(0.00%)p 1.00(99.95%)d 0.00(0.05%)

0.0000 -0.0003 0.0006 0.0006 0.0001

-0.0851 -0.0016 -0.0008 0.0000 0.1561

0.0036 0.0020 0.0003 0.9834 0.0237

0.0115 0.0013 -0.0018 0.0008 0.0220

-0.0037 -0.0060

(54.17%) 0.7360* C 20 s(0.00%)p 1.00(99.96%)d 0.00(0.04%)

0.0000 -0.0015 0.0006 0.0004 0.0001

-0.0831 -0.0021 -0.0008 -0.0002 0.1514

0.0039 0.0018 0.0002 0.9843 0.0251

0.0122 0.0015 0.0035 0.0192 -0.0056

-0.0005 0.0047

37. (1.98170) BD (1) C 19 - H 29

(60.03%) 0.7748* C 19 s(29.33%)p 2.41(70.62%)d 0.00(0.05%)

0.0005 -0.5409 -0.0266 -0.0037 -0.0004

0.3436 0.0201 -0.0003 0.0017 0.7610

0.0172 0.0028 -0.0006 -0.0912 -0.0013

-0.0006 0.0002 -0.0143 0.0023 0.0033

0.0140 0.0077

(39.97%) 0.6322* H 29 s(99.95%)p 0.00(0.05%)

-0.9998 0.0019 -0.0007 -0.0095 -0.0198

0.0022

38. (1.98012) BD (1) C 20 - C 21

(49.89%) 0.7063* C 20 s(35.67%)p 1.80(64.29%)d 0.00(0.04%)

0.0000 0.5970 -0.0156 0.0007 0.0001

0.3312 0.0257 -0.0101 -0.0003 0.7241

-0.0351 -0.0080 0.0007 -0.0825 0.0075

0.0003 -0.0001 0.0152 -0.0011 -0.0031

-0.0077 -0.0121

(50.11%) 0.7079* C 21 s(35.90%)p 1.78(64.06%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.5989 -0.0165 -0.0017 -0.0008

-0.3962 0.0434 0.0018 -0.0003 -0.6899

-0.0033 0.0118 0.0005 0.0749 0.0042

-0.0017 -0.0001 0.0121 -0.0011 -0.0038

-0.0114 -0.0113

39. (1.97978) BD (1) C 20 - H 30

(60.88%) 0.7803* C 20 s(29.59%)p 2.38(70.37%)d 0.00(0.04%)

0.0004 -0.5435 -0.0225 -0.0010 0.0000

0.8335 0.0137 0.0043 -0.0005 0.0727

0.0016 -0.0004 0.0000 0.0583 0.0007

0.0003 -0.0001 -0.0032 -0.0021 -0.0006

-0.0173 0.0087

(39.12%) 0.6255* H 30 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

-0.9998 0.0007 -0.0009 -0.0205 -0.0023

-0.0014

40. (1.97693) BD (1) C 21 - C 22

(49.70%) 0.7050* C 21 s(35.62%)p 1.81(64.33%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.5967 -0.0111 0.0005 0.0006

0.7959 -0.0151 -0.0120 0.0008 0.0666

-0.0413 0.0022 -0.0001 0.0572 0.0052

-0.0012 0.0000 -0.0008 0.0033 -0.0008

0.0167 -0.0122

(50.30%) 0.7092* C 22 s(35.92%)p 1.78(64.04%)d 0.00(0.04%)

-0.0001 0.5989 -0.0219 0.0000 -0.0003

-0.7972 0.0210 0.0094 0.0003 -0.0216

-0.0358 0.0066 0.0011 -0.0507 0.0076

-0.0003 -0.0001 0.0058 0.0015 -0.0001

0.0155 -0.0109

41. (1.66295) BD (2) C 21 - C 22

(47.27%) 0.6875* C 21 s(0.00%)p 1.00(99.94%)d 0.00(0.06%)

0.0000 -0.0025 0.0005 -0.0004 -0.0001

-0.0816 -0.0007 -0.0009 -0.0001 0.1516

0.0024 0.0019 0.0000 0.9845 0.0161

0.0123 0.0008 0.0044 0.0206 -0.0104

0.0001 0.0058

(52.73%) 0.7261* C 22 s(0.00%)p 1.00(99.94%)d 0.00(0.06%)

0.0001 -0.0018 0.0009 0.0000 0.0000

-0.0683 -0.0011 -0.0021 -0.0003 0.1602

0.0024 0.0023 0.0001 0.9842 0.0129

0.0136 0.0003 -0.0014 -0.0167 -0.0164

0.0041 0.0025

42. (1.97995) BD (1) C 21 - H 31

(60.72%) 0.7792* C 21 s(28.47%)p 2.51(71.49%)d 0.00(0.04%)

-0.0004 0.5330 0.0234 0.0009 0.0003

-0.4471 -0.0089 -0.0038 -0.0010 0.7028

0.0162 0.0048 0.0008 -0.1440 -0.0032

-0.0009 -0.0002 -0.0161 0.0029 -0.0049

-0.0083 -0.0082

(39.28%) 0.6267* H 31 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

0.9998 -0.0008 0.0009 0.0105 -0.0179

0.0036

43. (1.97671) BD (1) C 22 - H 32

(62.79%) 0.7924* C 22 s(30.90%)p 2.23(69.06%)d 0.00(0.04%)

-0.0004 0.5555 0.0209 -0.0014 -0.0006

0.4026 0.0040 -0.0046 -0.0041 0.7215

0.0084 0.0032 0.0006 -0.0885 -0.0012

-0.0011 -0.0005 0.0151 -0.0018 -0.0030

-0.0067 -0.0094

(37.21%) 0.6100* H 32 s(99.95%)p 0.00(0.05%)

0.9998 0.0020 0.0005 -0.0121 -0.0183

0.0020

44. (1.98885) BD (1) C 23 - H 34

(61.61%) 0.7849* C 23 s(25.86%)p 2.86(74.08%)d 0.00(0.06%)

-0.0001 0.5085 -0.0031 0.0013 0.0001

0.3082 0.0053 -0.0014 0.0005 -0.7942

-0.0111 -0.0020 0.0000 0.1216 -0.0101

0.0049 -0.0011 -0.0137 0.0008 -0.0030

-0.0152 -0.0135

(38.39%) 0.6196* H 34 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

0.9998 0.0011 -0.0001 -0.0070 0.0193

-0.0017

45. (1.98616) BD (1) C 23 - H 35

(60.41%) 0.7772* C 23 s(25.22%)p 2.96(74.71%)d 0.00(0.06%)

-0.0001 0.5022 -0.0055 0.0006 0.0001

-0.8117 -0.0129 0.0012 -0.0005 0.0512

0.0082 -0.0034 0.0007 0.2921 -0.0088

0.0037 -0.0011 -0.0036 -0.0124 0.0019

0.0185 -0.0100

(39.59%) 0.6292* H 35 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

0.9998 0.0016 -0.0004 0.0182 -0.0003

-0.0062

46. (1.99531) BD (1) C 23 - H 36

(59.98%) 0.7744* C 23 s(25.85%)p 2.87(74.09%)d 0.00(0.06%)

0.0000 0.5083 -0.0096 -0.0004 -0.0001

0.4952 0.0040 0.0012 0.0010 0.5788

0.0141 0.0013 0.0001 0.4002 -0.0144

0.0049 -0.0002 0.0159 0.0115 0.0142

-0.0029 -0.0068

(40.02%) 0.6326* H 36 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

0.9998 0.0035 -0.0001 -0.0106 -0.0132

-0.0085

47. (2.00000) CR (1) S 1 s(100.00%)

1.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

48. (1.99864) CR (2) S 1 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

0.0000 1.0000 -0.0001 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 -0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 -0.0002

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

-0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

49. (1.99984) CR (3) S 1 s(0.00%)p 1.00(100.00%)

0.0000 0.0000 -0.0001 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 1.0000 -0.0002 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

50. (1.99987) CR (4) S 1 s(0.00%)p 1.00(100.00%)

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 -0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 1.0000 -0.0001

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

51. (1.99986) CR (5) S 1 s(0.00%)p 1.00(100.00%)

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 1.0000

-0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

52. (1.99980) CR (1) O 2 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0002 0.0000 0.0000 0.0000

0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0002 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

53. (1.99980) CR (1) O 3 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0002 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0002

0.0000 0.0000 0.0000 -0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

54. (1.99974) CR (1) O 4 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0001 0.0000 0.0000 -0.0002

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000

55. (1.99975) CR (1) O 5 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0002 0.0000 0.0000 -0.0001

0.0000 0.0000 0.0000 0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000

56. (1.99941) CR (1) N 6 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000

0.0004 0.0000 0.0000 0.0000 0.0002

0.0000 0.0000 0.0000 0.0002 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

57. (1.99925) CR (1) N 7 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0002 0.0000 0.0000 0.0000

0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 -0.0003

0.0000 0.0000 0.0000 -0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

58. (1.99937) CR (1) N 8 s(100.00%)

1.0000 0.0002 0.0000 0.0000 0.0000

-0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

59. (1.99881) CR (1) C 9 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0002 0.0000 0.0000 0.0000

0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 -0.0002

0.0000 0.0000 0.0000 -0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

60. (1.99870) CR (1) C 10 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0002

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

61. (1.99888) CR (1) C 11 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000

0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0002 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

62. (1.99908) CR (1) C 12 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0004

0.0000 0.0000 0.0000 0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

63. (1.99916) CR (1) C 13 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0002 0.0000 0.0000 0.0000

0.0002 0.0000 0.0000 0.0000 0.0002

0.0000 0.0000 0.0000 0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

64. (1.99916) CR (1) C 14 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000

0.0004 0.0000 0.0000 0.0000 -0.0001

0.0000 0.0000 0.0000 -0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

65. (1.99904) CR (1) C 15 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0002 0.0000 0.0000 0.0000

0.0002 0.0000 0.0000 0.0000 -0.0002

0.0000 0.0000 0.0000 -0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

66. (1.99872) CR (1) C 16 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000

-0.0002 0.0000 0.0000 0.0000 -0.0002

0.0000 0.0000 0.0000 0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

67. (1.99904) CR (1) C 17 s(100.00%)

1.0000 -0.0002 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000

68. (1.99908) CR (1) C 18 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000

0.0002 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

69. (1.99923) CR (1) C 19 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0002 0.0000 0.0000 0.0000

-0.0002 0.0000 0.0000 0.0000 -0.0005

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

70. (1.99915) CR (1) C 20 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0002 0.0000 0.0000 0.0000

-0.0003 0.0000 0.0000 0.0000 -0.0001

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

71. (1.99917) CR (1) C 21 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0001 0.0000 0.0000 0.0000

-0.0002 0.0000 0.0000 0.0000 0.0003

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

72. (1.99905) CR (1) C 22 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0002 0.0000 0.0000 0.0000

0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 0.0003

0.0000 0.0000 0.0000 -0.0001 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

73. (1.99930) CR (1) C 23 s(100.00%)p 0.00(0.00%)

1.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

-0.0001 0.0000 0.0000 0.0000 -0.0001

0.0000 0.0000 0.0000 0.0003 0.0000

0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000

0.0000 0.0000

74. (1.98392) LP (1) O 2 s(75.43%)p 0.33(24.56%)d 0.00(0.01%)

-0.0002 0.8685 -0.0076 0.0014 0.0000

0.1252 -0.0013 0.0035 0.0009 -0.4518

0.0041 -0.0084 -0.0032 0.1602 -0.0031

0.0009 0.0016 0.0036 -0.0014 0.0044

0.0066 0.0034

75. (1.81287) LP (2) O 2 s(0.03%)p99.99(99.88%)d 2.82(0.09%)

-0.0002 0.0174 -0.0008 -0.0003 0.0000

0.8172 0.0082 -0.0038 -0.0005 0.4049

0.0009 -0.0007 -0.0010 0.4086 0.0031

0.0003 -0.0004 0.0182 -0.0109 0.0071

-0.0177 -0.0065

76. (1.78507) LP (3) O 2 s(0.00%)p 1.00(99.91%)d 0.00(0.09%)

0.0001 0.0045 0.0006 0.0025 0.0001

0.5015 0.0029 -0.0055 -0.0003 -0.1539

-0.0015 -0.0014 0.0010 -0.8507 -0.0058

0.0049 0.0001 0.0143 0.0013 -0.0214

0.0009 0.0141

77. (1.98370) LP (1) O 3 s(76.16%)p 0.31(23.83%)d 0.00(0.01%)

-0.0002 0.8727 0.0077 -0.0010 0.0000

-0.1452 0.0033 0.0009 -0.0018 0.0188

-0.0021 -0.0018 0.0003 -0.4655 0.0057

-0.0087 -0.0034 0.0001 -0.0041 0.0003

-0.0007 -0.0076

78. (1.79927) LP (2) O 3 s(0.00%)p 1.00(99.92%)d 0.00(0.08%)

-0.0001 0.0020 -0.0016 -0.0008 0.0000

0.8365 0.0071 -0.0045 -0.0009 0.4929

0.0058 0.0028 -0.0010 -0.2373 -0.0018

0.0012 0.0006 0.0028 0.0209 0.0142

0.0080 -0.0112

79. (1.77949) LP (3) O 3 s(0.01%)p 1.00(99.91%)d 0.00(0.09%)

-0.0002 0.0037 -0.0038 0.0054 0.0000

-0.4591 -0.0029 0.0038 0.0005 0.8683

0.0061 -0.0045 -0.0001 0.1851 0.0008

-0.0023 0.0002 0.0086 -0.0102 0.0244

-0.0041 0.0096

80. (1.96784) LP (1) O 4 s(58.45%)p 0.71(41.53%)d 0.00(0.02%)

-0.0002 0.7645 0.0063 0.0001 -0.3839

0.0013 0.0039 -0.0016 0.5124 -0.0057

0.0062 0.0041 -0.0726 0.0011 -0.0002

-0.0005 0.0121 -0.0016 0.0020 0.0056

0.0059

81. (1.84569) LP (2) O 4 s(4.50%)p21.21(95.45%)d 0.01(0.05%)

0.0002 0.2120 -0.0070 -0.0001 0.9052

0.0104 -0.0202 -0.0011 0.3659 -0.0007

-0.0042 0.0016 0.0257 0.0014 0.0013

-0.0002 -0.0157 0.0022 -0.0003 0.0162

-0.0025

82. (1.97282) LP (1) O 5 s(43.20%)p 1.31(56.76%)d 0.00(0.03%)

-0.0001 0.6573 0.0043 0.0002 0.4950

0.0008 -0.0077 0.0020 0.5463 0.0078

0.0052 0.0025 -0.1549 -0.0029 -0.0025

-0.0004 -0.0154 0.0041 0.0047 0.0040

0.0063

83. (1.79123) LP (2) O 5 s(0.01%)p99.99(99.93%)d 5.38(0.06%)

0.0000 0.0105 0.0005 0.0000 0.0822

-0.0014 -0.0011 0.0003 0.1901 0.0042

0.0000 -0.0001 0.9777 0.0214 0.0065

-0.0012 -0.0035 -0.0101 -0.0199 0.0033

0.0085

84. (1.86715) LP (1) N 6 s(11.77%)p 7.50(88.20%)d 0.00(0.03%)

0.0005 0.3425 0.0129 0.0137 0.0005

-0.7159 -0.0068 0.0087 -0.0003 -0.5151

-0.0140 -0.0064 0.0008 -0.3220 -0.0094

0.0001 0.0000 -0.0134 -0.0051 -0.0009

-0.0077 0.0091

85. (1.63200) LP (1) N 7 s(0.12%)p99.99(99.87%)d 0.05(0.01%)

0.0001 0.0350 -0.0013 0.0017 0.0000

-0.0288 -0.0015 -0.0024 -0.0001 0.0489

0.0017 0.0028 0.0001 0.9976 0.0177

0.0031 -0.0005 -0.0006 0.0032 0.0067

-0.0010 -0.0021

86. (1.91135) LP (1) N 8 s(29.23%)p 2.42(70.70%)d 0.00(0.07%)

-0.0001 0.5403 -0.0185 0.0010 0.0002

0.4670 0.0236 -0.0048 -0.0003 -0.6832

-0.0203 -0.0052 -0.0023 0.1455 0.0057

0.0010 0.0004 0.0201 -0.0044 0.0067

0.0093 0.0121

87. (0.06762) RY*(1) S 1 s(0.71%)p22.00(15.73%)d99.99(83.56%)

0.0000 0.0000 0.0294 0.0676 0.0413

0.0030 0.0000 0.0000 0.0239 -0.0600

0.0321 0.0022 0.0013 0.0000 -0.1227

0.2617 -0.0607 -0.0567 -0.0006 0.0000

-0.1013 0.2153 -0.0572 -0.0416 -0.0001

0.1548 -0.4566 0.7345 0.0674 -0.2432

88. (0.05624) RY*(2) S 1 s(0.04%)p99.99(19.10%)d99.99(80.87%)

0.0000 0.0000 -0.0090 0.0098 0.0111

-0.0079 0.0000 0.0000 0.1390 -0.3587

0.0954 -0.0252 0.0015 0.0000 0.0460

-0.1432 0.0324 0.0121 -0.0012 0.0000

-0.0400 0.0850 -0.0222 0.0071 -0.0023

-0.7077 -0.4570 -0.0419 0.0181 0.3114

89. (0.04293) RY*(3) S 1 s(0.02%)p99.99(18.82%)d99.99(81.17%)

0.0000 0.0000 0.0007 -0.0057 0.0107

-0.0027 -0.0002 0.0000 -0.0563 0.1472

0.0473 -0.0092 -0.0044 0.0000 0.0715

-0.1982 -0.0471 0.0352 0.0074 0.0000

-0.1071 0.3142 0.0428 -0.0310 -0.0061

-0.0816 -0.2956 -0.3616 -0.3891 -0.6600

90. (0.03281) RY*(4) S 1 s(0.00%)p 1.00(0.91%)d99.99(99.09%)

0.0000 0.0000 0.0002 0.0012 0.0010

0.0044 0.0002 0.0000 -0.0021 -0.0055

0.0237 -0.0117 -0.0008 0.0000 -0.0111

0.0281 0.0243 0.0326 -0.0047 0.0000

0.0196 -0.0276 -0.0456 -0.0503 0.0035

0.5517 -0.5202 -0.2529 -0.3463 0.4817

91. (0.01445) RY*(5) S 1 s(0.36%)p11.81(4.25%)d99.99(95.39%)

0.0000 0.0000 0.0156 0.0543 -0.0098

0.0178 -0.0005 0.0000 0.0068 0.0500

-0.0155 0.0739 -0.0024 0.0000 -0.0440

0.1129 0.0256 0.1026 -0.0019 0.0000

-0.0186 0.0612 -0.0562 0.0339 0.0018

0.1430 -0.3088 -0.4031 0.8105 -0.1368

92. (0.00835) RY*(6) S 1 s(0.80%)p99.99(82.80%)d20.46(16.40%)

0.0000 0.0000 0.0064 0.0875 0.0175

-0.0028 -0.0002 0.0000 -0.0031 -0.3333

-0.0824 -0.0299 -0.0086 0.0000 -0.0010

0.5817 0.1174 0.0551 0.0176 0.0000

0.0008 -0.5751 -0.1401 -0.0543 -0.0153

-0.0937 -0.0710 -0.1751 -0.1864 -0.2912

93. (0.00395) RY*(7) S 1 s(24.92%)p 2.56(63.90%)d 0.45(11.17%)

0.0000 0.0000 0.0273 0.4832 0.0399

0.1161 0.0003 0.0000 -0.0082 0.0119

0.0680 -0.0421 -0.0011 0.0000 -0.0108

0.5158 0.1495 0.0797 0.0074 0.0000

-0.0047 0.5496 0.1812 0.0501 0.0104

-0.0803 0.2088 -0.1490 -0.1004 0.1714

94. (0.00098) RY*(8) S 1 s(11.27%)p 6.98(78.67%)d 0.89(10.05%)

0.0000 0.0000 0.0028 0.3346 -0.0045

0.0277 -0.0014 0.0000 0.0201 0.7047

0.0844 0.2254 0.0096 0.0000 -0.0116

0.0249 0.1848 -0.2393 0.0076 0.0000

-0.0173 -0.3220 0.0453 -0.1830 -0.0040

-0.2405 -0.1839 0.0555 -0.0181 0.0740

95. (0.00090) RY*(9) S 1 s(31.73%)p 1.99(63.18%)d 0.16(5.08%)

0.0000 0.0000 -0.0106 0.5332 0.0767

-0.1646 -0.0008 0.0000 -0.0135 -0.2931

0.2094 -0.3869 -0.0140 0.0000 -0.0411

-0.3413 0.0531 -0.1418 0.0059 0.0000

-0.0179 -0.1406 0.2172 -0.3787 0.0142

0.1709 0.0420 0.0074 0.1025 -0.0964

96. (0.00055) RY*(10) S 1 s(0.18%)p99.99(99.35%)d 2.61(0.47%)

0.0000 0.0000 -0.0032 0.0331 -0.0191

0.0184 0.0000 0.0000 0.0025 -0.0486

-0.3596 0.3636 -0.0140 0.0000 -0.0004

0.0172 -0.3786 0.4028 -0.0104 0.0000

0.0058 -0.0194 0.3886 -0.5215 -0.0007

-0.0450 -0.0131 0.0257 -0.0082 0.0424

97. (0.00051) RY*(11) S 1 s(17.93%)p 4.52(81.12%)d 0.05(0.95%)

0.0000 0.0000 -0.0085 0.4108 -0.0985

0.0285 -0.0008 0.0000 -0.0149 -0.2460

-0.5607 0.4077 0.0022 0.0000 -0.0194

-0.2417 0.0832 -0.3082 0.0081 0.0000

-0.0145 0.0437 -0.1765 0.2752 0.0051

0.0774 -0.0006 -0.0019 -0.0419 -0.0413

98. (0.00020) RY*(12) S 1 s(40.07%)p 1.47(58.91%)d 0.03(1.03%)

0.0000 0.0000 -0.0071 0.2603 0.5765

-0.0223 -0.0011 0.0000 -0.0051 0.0314

0.2355 0.1755 -0.0404 0.0000 -0.0034

-0.0606 -0.4461 0.1944 0.0142 0.0000

0.0027 -0.0280 -0.5049 0.0503 0.0350

-0.0118 0.0869 -0.0224 -0.0309 0.0332

99. (0.00012) RY*(13) S 1 s(40.26%)p 1.45(58.43%)d 0.03(1.31%)

0.0000 0.0000 0.0020 -0.2842 0.5192

-0.2286 0.0017 0.0000 -0.0028 -0.1647

0.1284 0.3674 -0.0467 0.0000 0.0091

0.1271 0.1076 -0.5037 0.0208 0.0000

0.0137 0.0814 0.3232 -0.0971 -0.0294

0.0478 0.0271 -0.0969 0.0253 -0.0093

100. (0.00007) RY*(14) S 1 s(31.30%)p 2.16(67.47%)d 0.04(1.23%)

101. (0.00006) RY*(15) S 1 s(4.19%)p22.45(93.99%)d 0.44(1.82%)

102. (0.00002) RY*(16) S 1 s(5.44%)p16.76(91.22%)d 0.61(3.34%)

103. (0.00003) RY*(17) S 1 s(90.32%)p 0.10(9.33%)d 0.00(0.34%)

104. (0.00000) RY*(18) S 1 s(100.00%)p 0.00(0.00%)d 0.00(0.00%)

105. (0.00000) RY*(19) S 1 s(0.04%)p99.99(99.91%)d 1.19(0.05%)

106. (0.00000) RY*(20) S 1 s(0.11%)p99.99(99.84%)d 0.49(0.05%)

107. (0.00000) RY*(21) S 1 s(0.06%)p99.99(99.88%)d 0.95(0.06%)

108. (0.00161) RY*(1) O 2 s(41.91%)p 1.23(51.66%)d 0.15(6.44%)

0.0000 -0.0057 0.6254 0.1669 -0.0026

0.0079 -0.2632 -0.0383 -0.0225 -0.0228

-0.5077 0.0083 -0.0036 0.0098 -0.3389

-0.2681 -0.0016 -0.0468 0.0161 -0.0680

-0.2181 -0.0988

109. (0.00104) RY*(2) O 2 s(7.37%)p11.95(88.09%)d 0.62(4.54%)

0.0000 -0.0043 0.2692 0.0351 0.0004

0.0037 0.8997 0.1960 0.0196 -0.0149

0.0117 0.1066 -0.0133 0.0030 -0.1010

-0.1026 0.0098 -0.1988 0.0718 0.0094

-0.0057 -0.0238

110. (0.00065) RY*(3) O 2 s(19.69%)p 3.78(74.53%)d 0.29(5.77%)

0.0000 -0.0042 0.4270 -0.1209 0.0010

0.0085 -0.1035 -0.0882 0.0022 -0.0239

0.2130 0.3923 -0.0411 0.0081 0.7087

-0.1471 0.0363 -0.0545 0.0408 -0.1997

-0.0840 0.0784

111. (0.00029) RY*(4) O 2 s(12.10%)p 6.80(82.24%)d 0.47(5.67%)

0.0000 -0.0065 -0.0272 0.3467 -0.0052

0.0013 0.0967 0.2258 -0.0531 -0.0067

-0.4680 -0.4539 0.0926 0.0083 0.5077

0.2551 -0.0516 0.0322 0.1130 -0.1874

0.0285 0.0832

112. (0.00019) RY*(5) O 2 s(19.72%)p 3.70(72.97%)d 0.37(7.32%)

0.0000 -0.0008 0.3809 -0.2274 -0.0200

0.0026 -0.1434 0.3511 -0.0734 0.0127

0.4745 -0.5758 0.0657 0.0025 -0.1211

-0.0564 -0.0370 -0.0438 0.0526 -0.1367

0.1455 0.1692

113. (0.00009) RY*(6) O   2 s(11.58%)p 7.32(84.73%)d 0.32(3.70%)

114. (0.00007) RY*(7) O   2 s(59.51%)p 0.49(29.44%)d 0.19(11.05%)

115. (0.00004) RY*(8) O   2 s(10.64%)p 6.49(69.04%)d 1.91(20.32%)

116. (0.00002) RY*(9) O   2 s(1.23%)p 9.05(11.14%)d71.15(87.63%)

117. (0.00001) RY*(10) O   2 s(3.57%)p 4.33(15.47%)d22.66(80.96%)

118. (0.00000) RY*(11) O   2 s(0.24%)p99.99(97.18%)d10.80(2.58%)

119. (0.00000) RY*(12) O   2 s(0.52%)p99.99(98.01%)d 2.86(1.48%)

120. (0.00000) RY*(13) O   2 s(99.78%)p 0.00(0.06%)d 0.00(0.16%)

121. (0.00001) RY*(14) O   2 s(5.85%)p 0.96(5.62%)d15.15(88.54%)

122. (0.00001) RY*(15) O   2 s(0.65%)p33.04(21.36%)d99.99(77.99%)

123. (0.00001) RY*(16) O   2 s(2.73%)p 2.36(6.45%)d33.29(90.82%)

124. (0.00000) RY*(17) O   2 s(2.89%)p31.98(92.40%)d 1.63(4.71%)

125. (0.00149) RY*(1) O   3 s(40.25%)p 1.34(53.78%)d 0.15(5.97%)

0.0000 0.0062 0.6008 0.2037 0.0032

0.0054 0.4493 -0.0217 0.0151 -0.0007

0.4892 0.2088 0.0049 0.0265 0.2234

0.0009 -0.0399 -0.0390 -0.1699 -0.0603

-0.0285 -0.1578

126. (0.00089) RY*(2) O   3 s(6.30%)p14.01(88.20%)d 0.87(5.50%)

0.0000 0.0040 0.2350 0.0877 0.0024

0.0046 -0.7414 -0.1709 -0.0218 0.0011

0.0420 0.0478 0.0028 0.0136 0.5440

-0.0290 0.0410 0.0010 0.0677 -0.0021

0.0744 -0.2118

127. (0.00069) RY*(3) O   3 s(29.28%)p 2.22(65.05%)d 0.19(5.67%)

0.0000 0.0054 0.5231 -0.1385 -0.0001

0.0092 0.1541 -0.0871 0.0175 0.0022

-0.7476 -0.0807 -0.0404 0.0282 -0.0034

-0.2241 -0.0265 0.0498 -0.0940 0.1691

-0.0054 -0.1295

128. (0.00029) RY*(4) O 3 s(20.55%)p 3.71(76.26%)d 0.16(3.19%)

0.0000 0.0030 -0.1489 0.4281 -0.0016

0.0054 0.2310 0.1477 -0.0112 -0.0050

-0.2543 -0.3206 -0.0012 0.0007 0.4933

0.5053 -0.1456 0.0282 -0.0230 0.1267

-0.0126 0.1197

129. (0.00019) RY*(5) O 3 s(10.20%)p 7.99(81.54%)d 0.81(8.26%)

0.0000 0.0016 0.3029 -0.0995 0.0195

-0.0045 -0.2458 -0.0167 -0.0263 -0.0044

0.0139 0.2273 0.0055 -0.0103 -0.4102

0.7075 -0.1823 0.0445 -0.0238 0.2785

0.0297 0.0397

130. (0.00010) RY*(6) O 3 s(10.57%)p 7.74(81.82%)d 0.72(7.61%)

0.0000 -0.0010 0.3132 -0.0872 0.0028

0.0037 -0.1687 0.7096 -0.0994 0.0024

0.1333 -0.4849 0.0386 0.0027 -0.1174

-0.0706 -0.0562 -0.2000 0.1684 -0.0862

0.0122 0.0127

131. (0.00007) RY*(7) O 3 s(52.26%)p 0.67(34.87%)d 0.25(12.87%)

132. (0.00005) RY*(8) O 3 s(10.55%)p 7.69(81.19%)d 0.78(8.25%)

133. (0.00002) RY*(9) O 3 s(4.71%)p 3.93(18.54%)d16.29(76.75%)

134. (0.00001) RY*(10) O 3 s(0.12%)p 8.32(1.00%)d99.99(98.88%)

135. (0.00000) RY*(11) O 3 s(0.11%)p99.99(99.17%)d 6.64(0.72%)

136. (0.00000) RY*(12) O 3 s(3.33%)p25.55(85.00%)d 3.51(11.67%)

137. (0.00000) RY*(13) O 3 s(0.71%)p99.99(98.05%)d 1.73(1.23%)

138. (0.00001) RY*(14) O 3 s(0.99%)p 6.56(6.49%)d93.60(92.53%)

139. (0.00001) RY*(15) O 3 s(2.64%)p 6.56(17.33%)d30.28(80.02%)

140. (0.00001) RY*(16) O 3 s(7.71%)p 1.56(11.99%)d10.41(80.30%)

141. (0.00000) RY*(17) O 3 s(99.67%)p 0.00(0.08%)d 0.00(0.25%)

142. (0.00273) RY*(1) O 4 s(0.01%)p 1.00(98.94%)d 0.01(1.06%)

0.0000 0.0003 0.0077 0.0002 0.0011

-0.0005 -0.0114 0.0024 0.0002 -0.1348

-0.0122 -0.0085 -0.0060 -0.9713 -0.1644

-0.0178 -0.0052 -0.0006 -0.0985 0.0151

0.0247

143. (0.00172) RY*(2) O 4 s(0.01%)p99.99(98.10%)d99.99(1.88%)

0.0000 -0.0031 0.0100 0.0052 -0.0043

0.9621 0.0946 0.0039 -0.0013 0.2057

-0.0503 -0.0133 -0.0012 -0.0324 0.0148

0.0015 0.1189 -0.0029 -0.0042 -0.0637

0.0249

144. (0.00050) RY*(3) O 4 s(1.21%)p79.61(96.29%)d 2.07(2.50%)

0.0000 -0.0032 0.1099 0.0000 0.0006

-0.1803 0.1298 0.0327 0.0137 0.9098

0.2544 0.0549 -0.0013 -0.1253 -0.0298

-0.0104 -0.1537 0.0289 0.0121 -0.0116

0.0174

145. (0.00017) RY*(4) O 4 s(11.43%)p 6.74(77.02%)d 1.01(11.55%)

0.0000 0.0044 0.3374 -0.0208 -0.0039

0.0932 -0.6413 0.0583 -0.0205 -0.0364

0.5250 -0.0640 0.0049 0.0496 -0.2501

0.0207 0.2041 -0.0103 0.0111 0.2402

-0.1260

146. (0.00012) RY*(5) O 4 s(37.23%)p 1.58(58.77%)d 0.11(4.01%)

0.0000 0.0052 0.6095 -0.0282 0.0266

-0.0181 0.5765 -0.1280 -0.0118 -0.2388

0.3908 0.0074 -0.0038 -0.0005 0.1669

-0.0088 0.1474 0.0615 -0.0089 -0.0644

0.1018

147. (0.00011) RY*(6) O 4 s(3.26%)p26.09(85.04%)d 3.59(11.70%)

0.0000 -0.0008 0.1805 -0.0025 0.0083

-0.0418 0.2017 -0.0568 0.0068 0.0182

-0.2381 0.0142 0.0167 0.1297 -0.8544

0.0157 0.0848 -0.2670 0.1074 -0.1644

-0.0006

148. (0.00007) RY*(7) O 4 s(27.10%)p 1.94(52.51%)d 0.75(20.39%)

149. (0.00005) RY*(8) O 4 s(11.04%)p 1.39(15.30%)d 6.67(73.66%)

150. (0.00003) RY*(9) O 4 s(8.67%)p 6.44(55.85%)d 4.09(35.48%)

151. (0.00001) RY*(10) O 4 s(0.27%)p26.88(7.35%)d99.99(92.37%)

152. (0.00000) RY*(11) O 4 s(0.02%)p99.99(99.69%)d14.05(0.29%)

153. (0.00000) RY*(12) O 4 s(0.11%)p99.99(96.01%)d33.97(3.87%)

154. (0.00000) RY*(13) O 4 s(99.61%)p 0.00(0.25%)d 0.00(0.14%)

155. (0.00000) RY*(14) O 4 s(0.01%)p 1.00(3.26%)d29.69(96.73%)

156. (0.00001) RY*(15) O 4 s(0.01%)p 1.00(51.64%)d 0.94(48.35%)

157. (0.00001) RY*(16) O 4 s(0.01%)p 1.00(4.28%)d22.35(95.71%)

158. (0.00279) RY*(1) O 5 s(0.02%)p99.99(97.35%)d99.99(2.63%)

0.0000 -0.0002 0.0154 -0.0007 0.0004

0.1082 -0.0080 -0.0017 0.0023 -0.1069

0.0227 -0.0104 0.0173 -0.9651 0.1302

-0.0293 0.0245 0.0346 -0.1491 0.0115

0.0463

159. (0.00168) RY*(2) O 5 s(0.05%)p99.99(92.36%)d99.99(7.59%)

0.0000 0.0009 0.0228 0.0018 -0.0017

-0.8778 0.0471 -0.0081 -0.0006 -0.3788

0.0572 -0.0213 0.0014 -0.0597 -0.0027

0.0017 -0.2390 0.0419 0.0037 0.1292

-0.0178

160. (0.00046) RY*(3) O 5 s(17.40%)p 4.67(81.34%)d 0.07(1.25%)

0.0000 0.0069 0.4168 -0.0161 -0.0312

-0.2036 -0.4558 -0.0699 -0.0017 0.5678

0.4628 -0.0472 0.0025 -0.0849 -0.1095

0.0190 -0.0326 -0.0149 0.0029 0.0462

-0.0955

161. (0.00021) RY*(4) O 5 s(5.22%)p17.38(90.69%)d 0.78(4.09%)

0.0000 -0.0061 0.2282 0.0071 0.0282

0.2675 -0.3942 -0.1188 -0.0180 -0.6343

0.3897 -0.0327 -0.0023 0.1609 0.2844

-0.0515 0.0975 -0.0186 0.0224 0.1542

0.0825

162. (0.00012) RY*(5) O 5 s(20.77%)p 3.23(67.05%)d 0.59(12.18%)

0.0000 -0.0066 0.4554 -0.0153 0.0166

0.1428 0.7309 -0.0753 -0.0064 0.0251

0.2772 -0.1358 -0.0029 0.0374 0.1054

0.0379 -0.1723 -0.0390 -0.0808 0.2407

-0.1616

163. (0.00012) RY*(6) O 5 s(17.68%)p 4.53(80.08%)d 0.13(2.25%)

0.0000 -0.0024 0.4204 0.0013 0.0096

0.1207 -0.0941 -0.0670 -0.0054 -0.2600

-0.3225 -0.0134 0.0096 -0.0713 -0.7477

0.1914 0.0223 0.0395 0.0634 0.1263

-0.0207

164. (0.00006) RY*(7) O 5 s(29.09%)p 2.06(59.87%)d 0.38(11.04%)

165. (0.00003) RY*(8) O 5 s(0.71%)p28.57(20.23%)d99.99(79.07%)

166. (0.00001) RY*(9) O 5 s(1.43%)p 5.48(7.86%)d63.28(90.71%)

167. (0.00001) RY*(10) O 5 s(2.39%)p40.57(96.83%)d 0.33(0.78%)

168. (0.00000) RY*(11) O 5 s(0.53%)p99.99(95.33%)d 7.87(4.15%)

169. (0.00001) RY*(12) O 5 s(0.30%)p99.99(82.52%)d58.02(17.19%)

170. (0.00000) RY*(13) O 5 s(99.70%)p 0.00(0.06%)d 0.00(0.24%)

171. (0.00000) RY*(14) O 5 s(2.05%)p 3.38(6.93%)d44.31(91.01%)

172. (0.00001) RY*(15) O 5 s(2.29%)p 7.70(17.60%)d35.04(80.11%)

173. (0.00001) RY*(16) O 5 s(0.41%)p10.04(4.14%)d99.99(95.45%)

174. (0.00707) RY*(1) N 6 s(26.65%)p 2.70(72.07%)d 0.05(1.28%)

0.0000 0.0111 0.5027 0.1169 -0.0035

0.0223 -0.6035 0.1454 0.0052 0.0132

-0.3177 0.0521 -0.0266 0.0062 -0.4687

-0.0990 -0.0276 0.0539 0.0374 0.0903

-0.0135 -0.0144

175. (0.00561) RY*(2) N 6 s(6.68%)p13.76(91.98%)d 0.20(1.34%)

0.0000 0.0068 0.2478 -0.0734 -0.0004

0.0101 0.3028 0.1967 -0.0287 -0.0092

-0.7626 -0.0785 -0.0057 0.0251 0.4459

-0.0344 -0.0020 -0.0300 0.0012 0.0613

0.0085 -0.0929

176. (0.00351) RY*(3) N 6 s(29.52%)p 2.34(68.97%)d 0.05(1.51%)

0.0000 -0.0044 0.3977 -0.3701 0.0043

-0.0166 0.6028 -0.1658 -0.0293 0.0109

0.0813 0.1010 0.0060 0.0031 -0.4991

-0.1771 0.0182 -0.0129 -0.0161 0.0319

0.0888 -0.0763

177. (0.00228) RY*(4) N 6 s(11.52%)p 6.89(79.33%)d 0.79(9.15%)

0.0000 0.0083 0.3191 0.1152 0.0047

-0.0066 -0.0309 -0.1842 -0.0090 -0.0002

0.1621 0.7607 0.0463 0.0085 0.3222

0.2161 -0.0245 -0.0618 -0.0912 0.2795

-0.0122 -0.0328

178. (0.00217) RY*(5) N 6 s(22.84%)p 3.28(74.83%)d 0.10(2.33%)

0.0000 -0.0046 0.2312 0.4181 -0.0100

-0.0042 -0.0108 -0.6950 0.0734 0.0030

-0.0002 -0.2993 0.0311 0.0105 0.1732

-0.3722 -0.0250 -0.0317 -0.1296 -0.0503

0.0357 -0.0406

179. (0.00138) RY*(6) N 6 s(34.73%)p 1.67(57.99%)d 0.21(7.27%)

0.0000 -0.0006 -0.1575 0.5679 0.0033

0.0127 0.2597 0.3559 0.0477 -0.0007

-0.0139 0.3500 0.0330 -0.0073 -0.1276

-0.4900 -0.0553 -0.0894 0.1826 -0.1746

0.0219 0.0212

180. (0.00098) RY*(7) N 6 s(31.63%)p 1.87(59.10%)d 0.29(9.27%)

0.0000 -0.0100 0.2412 0.5079 -0.0095

0.0012 0.2878 0.2515 0.1109 0.0154

0.1497 -0.3258 -0.0142 -0.0004 -0.1294

0.5235 -0.1136 0.0023 -0.2102 0.1948

0.0921 0.0451

181. (0.00074) RY*(8) N 6 s(27.15%)p 1.99(53.98%)d 0.70(18.87%)

0.0000 0.0032 0.5074 -0.1183 0.0014

-0.0103 -0.0792 0.3454 -0.0529 0.0053

0.4613 -0.1755 0.0799 0.0089 0.3701

-0.1523 0.0320 0.0616 0.1687 -0.3710

-0.0057 -0.1370

182. (0.00043) RY*(9) N 6 s(0.92%)p 8.76(8.07%)d98.73(91.01%)

0.0000 0.0033 0.0887 0.0358 0.0075

0.0014 0.0557 -0.1150 -0.0214 0.0024

-0.1243 0.1442 -0.0358 -0.0090 0.0135

0.1545 0.0473 0.5118 0.0094 -0.4304

0.2523 0.6318

183. (0.00028) RY*(10) N 6 s(2.32%)p15.18(35.20%)d26.94(62.48%)

0.0000 -0.0003 0.0161 0.1511 0.0094

0.0138 0.0658 -0.2614 -0.1190 -0.0123

-0.1425 0.0442 0.1897 -0.0093 -0.1330

0.4327 -0.0399 -0.0904 0.5692 -0.3823

-0.2457 -0.2934

184. (0.00022) RY*(11) N 6 s(0.69%)p 9.25(6.38%)d99.99(92.93%)

0.0000 -0.0005 0.0801 -0.0140 -0.0166

-0.0002 -0.0051 -0.0393 -0.1342 0.0152

0.0735 -0.1455 -0.0755 -0.0142 0.0760

-0.0353 0.0670 -0.3615 0.6098 0.3804

0.2627 0.4616

185. (0.00011) RY*(12) N 6 s(0.87%)p 5.80(5.04%)d99.99(94.09%)

0.0000 -0.0073 0.0911 -0.0131 -0.0126

0.0168 0.0959 0.0257 -0.0537 -0.0057

0.0375 -0.0622 0.1185 -0.0039 0.0059

-0.0929 -0.0968 0.0541 -0.0247 0.1292

-0.8587 0.4281

186. (0.00007) RY*(13) N 6 s(0.24%)p99.99(43.30%)d99.99(56.46%)

187. (0.00005) RY*(14) N 6 s(0.88%)p70.90(62.23%)d42.03(36.89%)

188. (0.00001) RY*(15) N 6 s(1.61%)p58.15(93.89%)d 2.78(4.49%)

189. (0.00001) RY*(16) N 6 s(2.00%)p43.87(87.80%)d 5.09(10.20%)

190. (0.00000) RY*(17) N 6 s(99.71%)p 0.00(0.05%)d 0.00(0.24%)

191. (0.00689) RY*(1) N 7 s(0.41%)p99.99(98.28%)d 3.22(1.31%)

0.0000 0.0046 0.0634 0.0022 -0.0053

-0.0136 -0.1606 -0.1011 -0.0194 -0.0057

-0.9409 -0.1927 0.0130 -0.0010 0.1480

-0.0422 -0.0053 -0.0726 0.0145 -0.0236

-0.0839 0.0053

192. (0.00370) RY*(2) N 7 s(13.28%)p 6.43(85.32%)d 0.11(1.40%)

0.0000 -0.0104 0.3631 -0.0284 -0.0020

-0.0045 -0.7101 -0.2471 -0.0255 -0.0059

0.2640 -0.4579 0.0388 -0.0009 0.0709

0.0360 -0.0075 0.1031 -0.0088 -0.0089

0.0521 -0.0225

193. (0.00334) RY*(3) N 7 s(0.08%)p99.99(96.30%)d46.70(3.62%)

0.0000 -0.0002 0.0247 -0.0128 -0.0004

-0.0011 0.0053 -0.0634 -0.0144 -0.0020

-0.1185 -0.0800 -0.0029 0.0109 -0.7064

0.6619 -0.0333 -0.0191 -0.1749 0.0643

-0.0105 -0.0322

194. (0.00164) RY*(4) N 7 s(3.48%)p26.26(91.52%)d 1.43(4.99%)

0.0000 -0.0015 0.1836 0.0337 -0.0034

-0.0007 -0.4817 0.6747 0.1086 -0.0036

-0.0736 0.4513 0.0208 0.0001 -0.0231

0.0777 0.0016 -0.1953 0.0100 0.0071

0.1023 -0.0345

195. (0.00099) RY*(5) N 7 s(7.16%)p12.40(88.87%)d 0.55(3.97%)

0.0000 -0.0028 0.2578 0.0710 -0.0123

0.0014 0.2964 0.5546 0.0076 -0.0104

-0.0137 -0.5975 0.0128 0.0089 -0.2506

-0.2688 0.0240 0.0717 0.1237 0.0533

0.1216 -0.0399

196. (0.00053) RY*(6) N 7 s(42.34%)p 1.20(50.92%)d 0.16(6.75%)

0.0000 0.0012 0.6505 0.0131 -0.0011

-0.0003 0.3498 0.0346 0.1459 -0.0111

0.0158 0.0712 0.0448 -0.0066 0.4305

0.4130 -0.0300 0.1301 -0.1504 -0.0150

-0.1655 0.0179

197. (0.00033) RY*(7) N 7 s(15.44%)p 1.76(27.17%)d 3.72(57.39%)

0.0000 0.0013 0.3479 -0.1808 0.0252

-0.0029 0.0121 -0.1989 0.0642 0.0016

-0.0116 0.2487 0.1473 0.0016 -0.3143

-0.2115 0.0263 -0.0045 0.5968 0.2712

-0.3750 0.0591

198. (0.00029) RY*(8) N 7 s(11.69%)p 3.01(35.17%)d 4.55(53.14%)

0.0000 0.0007 0.2855 -0.1872 0.0175

-0.0016 0.0400 -0.1266 0.0758 0.0033

-0.0001 0.1275 0.1350 0.0098 -0.2827

-0.4623 -0.0086 -0.2075 -0.6365 -0.2596

-0.1256 0.0008

199. (0.00012) RY*(9) N 7 s(11.79%)p 1.05(12.34%)d 6.43(75.87%)

0.0000 0.0040 -0.0841 0.3327 0.0124

-0.0152 -0.1411 0.1671 -0.1561 -0.0080

-0.0220 0.0722 -0.1648 0.0027 -0.0988

-0.0894 0.0164 0.6163 -0.1602 -0.1022

-0.5396 0.2272

200. (0.00008) RY*(10) N 7 s(78.64%)p 0.13(10.47%)d 0.14(10.88%)

201. (0.00009) RY*(11) N 7 s(7.46%)p 4.89(36.49%)d 7.52(56.06%)

202. (0.00004) RY*(12) N 7 s(1.41%)p 3.18(4.49%)d66.66(94.10%)

203. (0.00003) RY*(13) N 7 s(1.77%)p37.99(67.31%)d17.45(30.92%)

204. (0.00003) RY*(14) N 7 s(4.83%)p 1.55(7.49%)d18.14(87.67%)

205. (0.00001) RY*(15) N 7 s(2.26%)p38.78(87.47%)d 4.56(10.28%)

206. (0.00000) RY*(16) N 7 s(0.09%)p99.99(98.93%)d11.44(0.98%)

207. (0.00000) RY*(17) N 7 s(97.92%)p 0.02(1.55%)d 0.01(0.53%)

208. (0.00529) RY*(1) N 8 s(1.43%)p66.99(95.55%)d 2.12(3.03%)

0.0000 -0.0024 0.1067 0.0534 0.0050

0.0203 -0.5890 -0.0472 0.0032 -0.0277

0.7588 -0.0316 0.0408 0.0057 -0.1633

-0.0027 -0.0071 0.1632 -0.0205 0.0204

0.0523 -0.0087

209. (0.00141) RY*(2) N 8 s(1.63%)p58.97(96.20%)d 1.33(2.17%)

0.0000 0.0104 0.1207 -0.0405 0.0017

-0.0195 -0.7412 0.2574 0.0810 -0.0185

-0.5615 0.1248 0.0679 0.0021 0.0589

0.0091 -0.0042 -0.0373 0.0108 0.0116

0.1417 0.0027

210. (0.00069) RY*(3) N 8 s(0.11%)p99.99(91.87%)d69.92(8.01%)

0.0000 -0.0006 0.0319 0.0112 0.0008

-0.0004 -0.0411 -0.0182 -0.0019 0.0043

0.1623 0.0420 0.0002 0.0218 0.9042

0.2635 0.0326 -0.0013 -0.0931 -0.2559

0.0361 0.0682

211. (0.00040) RY*(4) N   8 s(4.69%)p 2.10(9.84%)d18.23(85.47%)

0.0000 -0.0005 0.2162 -0.0082 0.0097

0.0090 0.0347 0.0550 -0.0420 -0.0005

0.0642 0.0705 0.0305 0.0023 0.2358

-0.1589 0.0382 0.0177 0.8051 0.4459

-0.0828 0.0230

212. (0.00036) RY*(5) N   8 s(57.33%)p 0.40(22.82%)d 0.35(19.86%)

0.0000 -0.0016 0.7559 0.0220 0.0373

0.0326 0.2034 0.2018 -0.1350 -0.0027

0.0999 0.3145 0.0761 0.0023 -0.1023

0.0017 -0.0400 -0.3092 -0.1830 -0.0611

0.1988 0.1620

213. (0.00017) RY*(6) N   8 s(29.85%)p 1.77(52.79%)d 0.58(17.36%)

0.0000 -0.0074 0.5456 0.0264 0.0000

-0.0111 -0.0556 -0.2946 0.0204 -0.0218

-0.1743 -0.6265 0.0473 0.0020 0.0027

0.1094 -0.0018 0.1375 -0.0277 -0.0749

-0.3508 -0.1589

214. (0.00012) RY*(7) N   8 s(0.41%)p99.99(81.00%)d45.61(18.60%)

0.0000 0.0070 0.0578 -0.0255 0.0065

-0.0206 -0.1022 -0.6511 0.0198 -0.0098

-0.1071 0.5872 0.1051 -0.0015 -0.0045

-0.0851 -0.0052 0.1114 -0.0786 0.0090

-0.3778 0.1567

215. (0.00008) RY*(8) N   8 s(70.69%)p 0.17(12.30%)d 0.24(17.02%)

216. (0.00005) RY*(9) N   8 s(10.18%)p 2.15(21.90%)d 6.67(67.92%)

217. (0.00003) RY*(10) N   8 s(0.57%)p99.99(92.87%)d11.44(6.55%)

218. (0.00001) RY*(11) N 8 s(13.10%)p 2.02(26.40%)d 4.62(60.51%)

219. (0.00002) RY*(12) N 8 s(1.15%)p84.41(96.91%)d 1.69(1.95%)

220. (0.00002) RY*(13) N 8 s(9.14%)p 9.12(83.30%)d 0.83(7.56%)

221. (0.00001) RY*(14) N 8 s(0.43%)p27.29(11.65%)d99.99(87.93%)

222. (0.00001) RY*(15) N 8 s(0.18%)p28.47(5.05%)d99.99(94.77%)

223. (0.00000) RY*(16) N 8 s(99.09%)p 0.01(0.57%)d 0.00(0.34%)

224. (0.00000) RY*(17) N 8 s(0.01%)p 1.00(99.40%)d 0.01(0.59%)

225. (0.00582) RY*(1) C 9 s(1.02%)p95.27(97.41%)d 1.54(1.57%)

0.0000 -0.0157 0.0702 0.0709 -0.0053

-0.0026 0.3350 -0.0310 -0.0148 0.0338

0.8118 0.0253 -0.0682 0.0067 -0.4417

0.0046 0.0001 0.0716 -0.0028 -0.0801

0.0395 0.0510

226. (0.00508) RY*(2) C 9 s(1.35%)p69.82(94.48%)d 3.08(4.16%)

0.0000 0.0070 0.1079 -0.0428 -0.0028

-0.0043 0.4616 -0.0230 0.0253 -0.0041

-0.5588 -0.0309 0.0160 0.0240 -0.6448

-0.0200 -0.0183 -0.0713 0.0329 -0.1609

-0.0271 0.0940

227. (0.00381) RY*(3) C 9 s(0.08%)p99.99(95.42%)d58.11(4.50%)

0.0000 -0.0116 0.0225 -0.0006 0.0115

-0.0052 0.8009 -0.0112 0.0539 0.0083

-0.0113 -0.0415 0.0215 -0.0088 0.5535

-0.0302 0.0020 0.0691 -0.0046 0.1116

-0.1531 -0.0660

228. (0.00169) RY*(4) C 9 s(65.71%)p 0.15(10.00%)d 0.37(24.29%)

0.0000 -0.0035 0.8045 -0.0987 0.0125

0.0069 -0.0411 -0.1336 -0.0298 0.0076

0.0309 0.0159 -0.1580 0.0020 0.1953

-0.1186 -0.0331 -0.3279 0.0974 -0.2551

0.2329 0.0812

229. (0.00113) RY*(5) C 9 s(26.21%)p 0.73(19.05%)d 2.09(54.75%)

0.0000 -0.0015 0.4942 0.1324 -0.0162

-0.0185 -0.1324 0.0830 0.0733 0.0039

-0.0180 -0.0664 0.2408 -0.0032 -0.0418

0.3096 0.0018 0.5210 -0.0081 -0.0164

-0.5243 -0.0277

230. (0.00050) RY*(6) C 9 s(1.52%)p37.95(57.77%)d26.74(40.71%)

0.0000 -0.0017 0.1187 0.0319 0.0111

0.0076 0.0673 0.0327 -0.1337 -0.0001

-0.0121 0.1797 -0.0345 -0.0068 -0.0794

0.7061 0.1248 -0.3559 -0.0048 0.4721

0.1170 -0.2092

231. (0.00050) RY*(7) C 9 s(8.10%)p 2.15(17.43%)d 9.19(74.47%)

0.0000 -0.0042 0.1034 0.2632 -0.0330

0.0006 -0.0119 0.1297 -0.0697 0.0123

0.0269 -0.2308 0.2099 0.0090 -0.0426

-0.2025 -0.1065 -0.3435 -0.7699 0.0953

-0.1418 -0.0694

232. (0.00043) RY*(8) C 9 s(22.45%)p 1.54(34.51%)d 1.92(43.05%)

0.0000 0.0047 0.1369 0.4515 0.0429

-0.0003 0.0495 0.1234 -0.0242 -0.0192

-0.1289 0.5257 -0.0509 0.0041 0.0002

-0.1747 0.0168 0.4056 -0.1851 0.1305

0.4609 -0.0468

233. (0.00024) RY*(9) C 9 s(1.17%)p66.42(77.82%)d17.94(21.01%)

0.0000 0.0009 0.0882 -0.0420 -0.0466

0.0018 -0.0300 -0.1056 0.7922 -0.0107

0.0005 -0.3601 -0.0615 0.0009 -0.0666

0.0006 -0.0224 0.1016 -0.0467 0.3347

0.2910 -0.0303

234. (0.00019) RY*(10) C 9 s(7.41%)p 6.10(45.24%)d 6.39(47.35%)

0.0000 0.0017 0.1221 0.1946 -0.1461

0.0051 -0.0110 0.4835 -0.1026 0.0055

0.0301 -0.1426 0.1693 -0.0070 -0.0878

-0.3782 -0.0849 -0.1621 0.5283 0.3903

-0.0639 -0.1084

235. (0.00016) RY*(11) C 9 s(1.09%)p70.28(76.43%)d20.67(22.48%)

0.0000 -0.0011 0.0769 -0.0331 -0.0622

-0.0048 -0.0312 -0.7451 -0.3384 -0.0025

-0.0266 -0.0928 0.0840 -0.0021 -0.0968

-0.2589 -0.0290 0.1506 0.0416 0.4006

-0.0383 -0.1962

236. (0.00013) RY*(12) C 9 s(42.76%)p 0.77(33.00%)d 0.57(24.24%)

0.0000 0.0033 -0.1091 0.6336 0.1196

0.0046 0.0175 -0.2689 -0.0052 -0.0005

-0.0079 -0.2561 0.3690 0.0013 0.0950

0.2155 0.0038 -0.1326 0.2403 -0.1906

0.1814 0.3128

237. (0.00009) RY*(13) C 9 s(6.09%)p11.63(70.82%)d 3.79(23.09%)

238. (0.00006) RY*(14) C 9 s(15.62%)p 1.95(30.54%)d 3.45(53.83%)

239. (0.00004) RY*(15) C 9 s(10.06%)p 5.90(59.36%)d 3.04(30.58%)

240. (0.00002) RY*(16) C 9 s(4.36%)p15.59(67.98%)d 6.34(27.66%)

241. (0.00001) RY*(17) C 9 s(85.08%)p 0.15(12.89%)d 0.02(2.03%)

242. (0.00854) RY*(1) C 10 s(2.79%)p34.09(94.98%)d 0.80(2.24%)

0.0000 -0.0459 0.1598 -0.0056 0.0139

-0.0046 -0.1643 -0.0004 0.0088 -0.0325

-0.9574 -0.0186 0.0630 0.0119 0.0154

-0.0025 -0.0157 -0.0481 0.0514 -0.0273

0.1285 -0.0127

243. (0.00400) RY*(2) C 10 s(0.13%)p99.99(31.08%)d99.99(68.79%)

0.0000 0.0088 -0.0066 0.0331 -0.0095

0.0086 -0.3057 0.1171 -0.0060 0.0009

0.0631 0.0166 -0.0354 -0.0173 -0.3206

-0.3076 -0.0151 0.0873 -0.0313 -0.7775

0.0528 0.2683

244. (0.00316) RY*(3) C 10 s(1.71%)p41.05(70.11%)d16.50(28.18%)

0.0000 0.0084 0.0507 0.1201 -0.0041

0.0239 -0.7788 0.1742 -0.0037 0.0006

0.0751 0.2151 0.0333 0.0037 0.0043

0.1028 0.0045 0.3195 -0.0041 0.2934

-0.2961 -0.0774

245. (0.00187) RY*(4) C 10 s(16.14%)p 2.55(41.14%)d 2.65(42.71%)

0.0000 0.0090 0.3748 -0.1424 0.0252

0.0020 -0.4052 -0.0654 -0.0217 -0.0200

0.1975 -0.3875 0.0655 -0.0030 0.2017

0.0859 0.0237 -0.6392 0.0036 -0.0552

0.1128 -0.0532

246. (0.00144) RY*(5) C 10 s(11.23%)p 5.57(62.62%)d 2.33(26.15%)

0.0000 -0.0101 0.2899 0.1668 0.0198

0.0034 0.1233 0.1167 -0.1159 -0.0129

0.0047 0.1619 0.1077 -0.0093 0.7246

-0.1253 0.0715 0.1751 -0.4106 -0.2295

-0.0842 0.0497

247. (0.00088) RY*(6) C 10 s(13.15%)p 1.07(14.06%)d 5.53(72.78%)

0.0000 -0.0078 0.3615 0.0266 -0.0079

0.0100 0.2142 0.1455 -0.1683 -0.0243

0.0098 -0.0330 0.1688 0.0164 0.0103

0.0966 -0.0718 0.0607 0.6539 -0.2068

-0.4887 -0.1223

248. (0.00056) RY*(7) C 10 s(11.22%)p 3.58(40.18%)d 4.33(48.60%)

0.0000 -0.0051 0.3216 0.0603 -0.0714

0.0056 0.1383 -0.0284 -0.1628 -0.0182

-0.0493 -0.1612 0.0757 0.0060 -0.4578

-0.3267 -0.0673 -0.0826 -0.5087 0.1788

-0.4018 -0.1644

249. (0.00036) RY*(8) C 10 s(34.14%)p 0.89(30.54%)d 1.03(35.32%)

0.0000 0.0066 0.5726 -0.0159 -0.1149

-0.0023 0.0491 0.0055 -0.2754 0.0180

0.1315 0.3678 -0.1116 -0.0027 -0.2307

0.0735 0.0561 0.1510 0.0687 0.1053

0.5592 -0.0438

250. (0.00021) RY*(9) C 10 s(16.43%)p 4.09(67.18%)d 1.00(16.39%)

0.0000 0.0013 -0.2740 0.2942 0.0518

-0.0047 -0.0614 0.2426 -0.5360 0.0105

0.0057 -0.0694 -0.0041 0.0127 0.1241

-0.5399 -0.0988 -0.1638 0.2381 0.2034

0.1853 -0.0681

251. (0.00016) RY*(10) C 10 s(37.83%)p 1.46(55.28%)d 0.18(6.89%)

0.0000 0.0039 0.1372 0.5995 -0.0061

-0.0029 -0.0484 -0.5536 0.3681 0.0063

0.0689 -0.0797 0.1853 0.0091 0.0190

-0.2164 -0.1252 0.1142 0.1640 0.0084

0.1266 -0.1135

252. (0.00013) RY*(11) C 10 s(37.76%)p 1.45(54.95%)d 0.19(7.29%)

0.0000 0.0050 -0.0286 0.6135 0.0191

0.0001 0.0923 0.4181 -0.0267 -0.0013

-0.0082 -0.1518 0.0642 -0.0114 -0.1610

0.5317 -0.1716 -0.1322 -0.1668 -0.0528

0.0966 0.1244

253. (0.00012) RY*(12) C 10 s(5.79%)p 9.75(56.44%)d 6.53(37.77%)

0.0000 -0.0123 -0.1510 0.1590 0.0983

-0.0072 -0.0252 -0.2591 -0.1343 -0.0082

-0.0388 0.6690 -0.1130 -0.0040 -0.0384

0.1205 -0.0248 -0.5016 -0.0526 -0.1805

-0.2057 -0.2200

254. (0.00010) RY*(13) C 10 s(20.67%)p 2.17(44.84%)d 1.67(34.49%)

0.0000 0.0032 0.2344 0.1491 0.3599

0.0015 0.0439 -0.0099 0.1317 -0.0075

-0.0317 0.0066 -0.6410 0.0066 0.0302

-0.1226 0.0335 -0.0884 0.1024 0.1902

-0.1848 0.5062

255. (0.00007) RY*(14) C 10 s(1.06%)p74.11(78.33%)d19.50(20.61%)

256. (0.00003) RY*(15) C 10 s(7.97%)p 7.81(62.23%)d 3.74(29.81%)

257. (0.00003) RY*(16) C 10 s(79.40%)p 0.05(3.61%)d 0.21(16.99%)

258. (0.00001) RY*(17) C 10 s(2.84%)p32.60(92.53%)d 1.63(4.64%)

259. (0.00658) RY*(1) C 11 s(1.83%)p51.74(94.52%)d 2.00(3.65%)

0.0000 0.0054 0.1336 -0.0196 0.0015

0.0197 -0.8899 -0.0264 -0.0391 0.0017

0.3765 0.0105 -0.0244 0.0013 -0.0874

-0.0204 -0.0117 -0.0791 -0.0204 -0.0243

0.1702 -0.0168

260. (0.00538) RY*(2) C 11 s(0.35%)p99.99(97.35%)d 6.50(2.30%)

0.0000 0.0114 0.0145 0.0553 -0.0117

-0.0115 0.3867 -0.0312 0.0106 0.0086

0.9015 0.0138 -0.0449 0.0033 -0.0835

0.0270 0.0048 0.1392 -0.0477 0.0031

0.0325 -0.0165

261. (0.00136) RY*(3) C 11 s(6.03%)p12.43(74.99%)d 3.14(18.97%)

0.0000 -0.0011 0.2276 -0.0923 -0.0060

-0.0042 0.0638 0.0175 0.0467 -0.0034

-0.1109 -0.0127 0.0072 0.0039 -0.8533

0.0048 -0.0511 0.0248 -0.1248 -0.3907

-0.1046 -0.0999

262. (0.00103) RY*(4) C 11 s(73.57%)p 0.05(3.81%)d 0.31(22.63%)

0.0000 -0.0030 0.8543 0.0764 -0.0039

-0.0089 0.0882 -0.1113 0.0046 0.0024

-0.0503 0.0977 0.0447 -0.0014 0.0569

-0.0051 -0.0213 0.1039 0.3903 0.2177

0.0602 0.1103

263. (0.00071) RY*(5) C 11 s(13.64%)p 2.34(31.94%)d 3.99(54.43%)

0.0000 -0.0006 0.2708 -0.2511 0.0010

-0.0014 0.0367 -0.0849 0.0834 -0.0044

-0.0062 -0.2885 0.0511 0.0093 0.4358

-0.1562 0.0597 0.1895 -0.2477 -0.6220

0.1554 -0.1897

264. (0.00060) RY*(6) C 11 s(9.14%)p 6.07(55.43%)d 3.88(35.43%)

0.0000 -0.0006 0.1544 0.2597 -0.0087

-0.0053 -0.0201 -0.1413 -0.1840 0.0080

-0.0174 0.6791 0.0070 0.0103 0.1466

-0.1296 -0.0075 -0.0273 -0.5083 -0.0990

-0.2919 -0.0117

265. (0.00042) RY*(7) C 11 s(12.42%)p 0.74(9.18%)d 6.31(78.40%)

0.0000 0.0009 -0.2228 0.2705 -0.0377

-0.0022 -0.0787 -0.0445 -0.1436 0.0009

0.0405 0.1959 -0.0056 -0.0037 0.0524

-0.1241 0.0688 0.1908 0.6677 -0.4930

-0.2370 -0.0505

266. (0.00021) RY*(8) C 11 s(2.71%)p21.30(57.69%)d14.62(39.60%)

0.0000 -0.0041 -0.0057 0.1624 -0.0257

0.0055 0.0793 -0.5078 0.0508 0.0038

-0.0042 0.0406 0.0675 -0.0054 0.0284

0.5388 0.1135 -0.5009 0.0732 -0.1528

0.2009 -0.2756

267. (0.00017) RY*(9) C 11 s(27.11%)p 1.40(38.06%)d 1.28(34.83%)

0.0000 0.0009 0.0529 0.5074 0.1040

0.0112 0.1012 0.3135 0.1480 0.0009

0.0206 -0.0936 0.1752 0.0055 -0.0239

-0.4573 0.0209 -0.4800 -0.0148 -0.1259

0.3106 0.0730

268. (0.00017) RY*(10) C 11 s(3.43%)p24.22(83.17%)d 3.90(13.39%)

0.0000 -0.0002 0.1452 -0.0899 0.0719

0.0044 0.0247 0.4957 0.1117 0.0089

0.0316 0.1227 -0.6683 -0.0002 0.1450

0.2674 -0.1325 -0.2851 0.0677 -0.1643

-0.1245 -0.0745

269. (0.00014) RY*(11) C 11 s(4.76%)p 9.97(47.43%)d10.05(47.81%)

0.0000 0.0021 0.1485 0.1593 0.0114

-0.0048 -0.0941 0.2405 0.0260 0.0120

0.1034 -0.3602 0.4076 -0.0006 0.0993

0.2675 0.1372 -0.1343 -0.0727 0.0030

-0.6743 -0.0094

270. (0.00009) RY*(12) C 11 s(44.46%)p 0.78(34.65%)d 0.47(20.89%)

271. (0.00009) RY*(13) C 11 s(1.79%)p22.70(40.66%)d32.12(57.54%)

272. (0.00007) RY*(14) C 11 s(9.51%)p 5.19(49.36%)d 4.32(41.13%)

273. (0.00005) RY*(15) C 11 s(1.14%)p69.98(79.65%)d16.88(19.21%)

274. (0.00001) RY*(16) C 11 s(0.36%)p99.99(98.95%)d 1.89(0.69%)

275. (0.00001) RY*(17) C 11 s(87.79%)p 0.04(3.23%)d 0.10(8.98%)

276. (0.00605) RY*(1) C 12 s(0.07%)p99.99(95.28%)d69.73(4.65%)

0.0000 0.0194 -0.0085 -0.0146 -0.0022

0.0101 -0.3626 -0.0252 0.0114 -0.0284

0.8976 -0.0476 0.0439 -0.0053 0.0978

-0.0059 0.0093 -0.1059 -0.0239 0.0288

-0.1830 -0.0203

277. (0.00277) RY*(2) C 12 s(2.68%)p35.82(95.84%)d 0.55(1.48%)

0.0000 -0.0137 0.1575 -0.0360 0.0217

-0.0290 -0.8929 0.0717 0.1250 -0.0053

-0.3309 0.0735 -0.0234 -0.0034 -0.1534

-0.0209 -0.0106 0.1020 0.0105 -0.0114

-0.0378 0.0525

278. (0.00111) RY*(3) C 12 s(6.41%)p13.36(85.73%)d 1.23(7.86%)

0.0000 0.0029 0.2379 0.0867 0.0039

0.0030 0.1189 -0.1779 -0.0419 -0.0039

0.1474 0.0735 -0.0001 -0.0013 -0.8661

-0.1669 -0.0678 -0.0188 -0.1309 -0.2402

0.0086 -0.0580

279. (0.00067) RY*(4) C 12 s(24.58%)p 1.48(36.33%)d 1.59(39.09%)

0.0000 0.0003 0.4884 0.0779 0.0343

0.0024 0.0199 -0.4404 -0.0891 -0.0132

0.0074 0.3001 -0.0407 0.0053 0.1812

-0.1733 -0.0789 -0.1755 0.5740 0.1327

0.0731 0.0879

280. (0.00061) RY*(5) C 12 s(54.58%)p 0.74(40.58%)d 0.09(4.83%)

0.0000 0.0081 0.7346 -0.0781 -0.0098

0.0302 0.1257 0.5636 -0.1073 -0.0139

0.0718 -0.2045 0.0461 -0.0033 0.0713

0.0680 0.0302 0.2132 -0.0294 0.0361

-0.0138 -0.0225

281. (0.00053) RY*(6) C 12 s(9.65%)p 3.36(32.46%)d 6.00(57.89%)

0.0000 -0.0015 0.2979 0.0863 0.0178

-0.0015 -0.0304 -0.3941 -0.1023 -0.0072

-0.0362 0.2294 -0.0228 -0.0091 0.3029

0.0576 0.0908 0.0254 -0.7498 -0.0637

0.0898 -0.0621

282. (0.00025) RY*(7) C 12 s(23.07%)p 2.98(68.80%)d 0.35(8.13%)

0.0000 -0.0094 -0.1737 0.4473 0.0205

0.0036 -0.0568 0.3819 -0.4152 0.0104

0.0844 0.5805 -0.1293 0.0026 -0.0022

0.0283 -0.0687 0.1354 0.0510 -0.0006

0.1652 -0.1818

283. (0.00016) RY*(8) C 12 s(5.09%)p12.16(61.87%)d 6.50(33.05%)

0.0000 -0.0038 -0.0163 0.2087 -0.0838

0.0098 0.0668 -0.0045 0.3557 0.0022

-0.0168 0.1041 0.3624 0.0049 0.1473

-0.5601 0.0983 0.3935 0.0333 -0.0983

-0.2582 -0.3134

284. (0.00013) RY*(9) C 12 s(3.56%)p20.32(72.33%)d 6.77(24.11%)

0.0000 0.0089 -0.0530 -0.0945 0.1542

-0.0029 -0.0246 0.1409 -0.3060 -0.0020

-0.0466 -0.1414 -0.3705 0.0032 0.1595

-0.6494 -0.0522 -0.1720 -0.0966 -0.3326

-0.1281 0.2740

285. (0.00007) RY*(10) C 12 s(5.62%)p 3.78(21.25%)d13.01(73.13%)

286. (0.00006) RY*(11) C 12 s(35.52%)p 1.21(42.92%)d 0.61(21.56%)

287. (0.00004) RY*(12) C 12 s(17.00%)p 0.81(13.79%)d 4.07(69.20%)

288. (0.00003) RY*(13) C 12 s(0.54%)p41.37(22.39%)d99.99(77.07%)

289. (0.00002) RY*(14) C 12 s(17.38%)p 4.18(72.65%)d 0.57(9.96%)

290. (0.00000) RY*(15) C 12 s(87.29%)p 0.07(6.29%)d 0.07(6.43%)

291. (0.00000) RY*(16) C 12 s(0.50%)p99.99(97.24%)d 4.57(2.26%)

292. (0.00000) RY*(17) C 12 s(6.49%)p 5.30(34.38%)d 9.11(59.13%)

293. (0.00581) RY*(1) C 13 s(0.63%)p99.99(94.08%)d 8.38(5.29%)

0.0000 -0.0210 0.0748 -0.0124 0.0112

0.0259 -0.6851 -0.0650 -0.0473 0.0245

-0.6633 -0.0401 -0.0432 0.0044 -0.1414

-0.0111 -0.0095 -0.2255 -0.0298 -0.0164

-0.0014 0.0298

294. (0.00220) RY*(2) C 13 s(0.13%)p99.99(99.06%)d 6.19(0.81%)

0.0000 -0.0005 0.0350 0.0070 -0.0050

-0.0326 -0.6739 -0.0462 0.1676 0.0317

0.6860 0.0516 -0.1601 0.0028 0.0712

0.0010 -0.0170 -0.0045 0.0114 -0.0101

0.0882 0.0050

295. (0.00069) RY*(3) C 13 s(2.59%)p20.12(52.17%)d17.45(45.24%)

0.0000 0.0000 0.1607 -0.0032 0.0101

-0.0014 -0.0231 -0.0444 -0.0174 -0.0056

-0.1023 0.0421 0.0085 -0.0017 0.6906

-0.1261 0.1172 0.0022 -0.2543 0.6023

0.1209 0.1013

296. (0.00049) RY*(4) C 13 s(67.08%)p 0.42(27.92%)d 0.07(5.00%)

0.0000 0.0036 0.8094 -0.1240 -0.0174

-0.0075 0.1051 -0.3433 0.0312 -0.0272

0.0493 0.2755 0.1683 -0.0032 -0.1991

0.0424 -0.0223 -0.0516 -0.0846 -0.0706

0.1789 -0.0562

297. (0.00049) RY*(5) C 13 s(0.21%)p99.99(34.85%)d99.99(64.94%)

0.0000 -0.0002 0.0453 0.0077 -0.0039

0.0034 -0.0064 -0.1644 -0.0334 -0.0040

-0.0880 0.1501 0.0327 -0.0095 0.5361

-0.0057 0.0371 -0.0961 0.7086 -0.3691

0.0068 -0.0424

298. (0.00038) RY*(6) C 13 s(24.78%)p 2.58(63.86%)d 0.46(11.36%)

0.0000 0.0031 0.4879 -0.0867 -0.0474

-0.0211 0.0029 0.5218 0.1851 0.0021

0.0320 -0.5652 -0.0152 -0.0031 0.0864

-0.0597 0.0003 -0.0882 0.1283 -0.0411

-0.2956 0.0153

299. (0.00023) RY*(7) C 13 s(71.93%)p 0.07(5.37%)d 0.32(22.70%)

0.0000 -0.0041 0.0409 0.8467 -0.0279

0.0040 0.0458 0.0138 0.1614 0.0007

0.0279 -0.0312 0.1469 0.0004 -0.0189

0.0204 0.0348 -0.3489 -0.0217 0.0570

0.0654 -0.3120

300. (0.00008) RY*(8) C 13 s(3.09%)p12.36(38.15%)d19.03(58.76%)

301. (0.00005) RY*(9) C 13 s(9.71%)p 6.61(64.20%)d 2.69(26.09%)

302. (0.00003) RY*(10) C 13 s(9.33%)p 2.22(20.66%)d 7.51(70.01%)

303. (0.00001) RY*(11) C 13 s(2.24%)p41.88(93.63%)d 1.85(4.13%)

304. (0.00000) RY*(12) C 13 s(0.65%)p99.99(98.10%)d 1.91(1.25%)

305. (0.00001) RY*(13) C 13 s(1.41%)p61.64(86.63%)d 8.51(11.96%)

306. (0.00000) RY*(14) C 13 s(0.27%)p54.51(14.86%)d99.99(84.87%)

307. (0.00000) RY*(15) C 13 s(4.85%)p17.33(84.12%)d 2.27(11.03%)

308. (0.00000) RY*(16) C 13 s(96.02%)p 0.03(3.15%)d 0.01(0.83%)

309. (0.00000) RY*(17) C 13 s(5.11%)p 3.79(19.34%)d14.80(75.55%)

310. (0.00620) RY*(1) C 14 s(1.12%)p83.99(93.77%)d 4.58(5.11%)

0.0000 -0.0221 0.0968 -0.0351 0.0087

0.0336 -0.9355 -0.0751 -0.0625 -0.0102

0.2262 -0.0057 0.0082 0.0001 -0.0212

-0.0022 -0.0004 0.1176 -0.0020 0.0188

-0.1891 0.0336

311. (0.00211) RY*(2) C 14 s(0.05%)p99.99(99.43%)d10.40(0.52%)

0.0000 0.0005 0.0067 0.0205 0.0055

0.0128 0.2251 0.0068 -0.0600 0.0439

0.9328 0.0613 -0.2383 0.0064 0.0766

0.0081 -0.0359 -0.0589 -0.0136 0.0103

-0.0375 -0.0023

312. (0.00074) RY*(3) C 14 s(0.76%)p97.32(74.29%)d32.69(24.95%)

0.0000 0.0001 0.0700 -0.0523 0.0018

-0.0011 -0.0224 -0.0002 -0.0153 0.0040

-0.0600 -0.0139 -0.0376 -0.0034 0.8390

-0.1202 0.1360 0.0181 0.1910 -0.4487

-0.0559 -0.0907

313. (0.00053) RY*(4) C 14 s(1.29%)p12.01(15.44%)d64.80(83.27%)

0.0000 0.0002 0.0712 0.0875 0.0108

-0.0006 -0.0063 -0.0400 0.0002 0.0065

-0.0213 -0.1586 -0.0063 -0.0089 0.3559

-0.0174 -0.0003 -0.0241 0.3925 0.7961

0.0997 0.1854

314. (0.00043) RY*(5) C 14 s(53.60%)p 0.71(37.92%)d 0.16(8.49%)

0.0000 0.0036 0.7320 0.0114 -0.0056

-0.0174 0.1098 -0.1422 0.0666 0.0204

0.0034 -0.5501 -0.1237 0.0016 -0.1216

-0.0905 -0.0283 0.2532 -0.0555 -0.0734

0.0206 -0.1090

315. (0.00036) RY*(6) C 14 s(40.34%)p 1.26(50.86%)d 0.22(8.80%)

0.0000 0.0043 0.6229 -0.1146 -0.0470

-0.0213 0.0442 0.1734 0.1524 -0.0093

-0.0534 0.6586 0.0617 -0.0032 0.0181

0.1071 0.0236 -0.1945 -0.0043 0.1080

-0.1956 0.0162

316. (0.00022) RY*(7) C 14 s(66.39%)p 0.14(9.41%)d 0.36(24.20%)

0.0000 -0.0073 -0.0526 0.8125 -0.0306

0.0070 0.0178 -0.0849 0.2397 -0.0013

-0.0070 0.1336 0.0229 0.0013 0.0288

0.0956 0.0252 0.2308 0.0192 0.0387

-0.2428 -0.3576

317. (0.00009) RY*(8) C 14 s(3.24%)p12.84(41.56%)d17.06(55.20%)

318. (0.00005) RY*(9) C 14 s(13.36%)p 5.15(68.80%)d 1.33(17.83%)

319. (0.00004) RY*(10) C 14 s(2.03%)p39.69(80.65%)d 8.52(17.32%)

320. (0.00003) RY*(11) C 14 s(14.72%)p 0.87(12.84%)d 4.92(72.44%)

321. (0.00000) RY*(12) C 14 s(0.12%)p99.99(99.29%)d 4.88(0.59%)

322. (0.00001) RY*(13) C 14 s(0.22%)p99.99(80.06%)d90.30(19.72%)

323. (0.00001) RY*(14) C 14 s(0.09%)p99.99(24.29%)d99.99(75.62%)

324. (0.00000) RY*(15) C 14 s(93.75%)p 0.05(4.93%)d 0.01(1.32%)

325. (0.00001) RY*(16) C 14 s(1.17%)p77.74(91.07%)d 6.63(7.76%)

326. (0.00001) RY*(17) C 14 s(7.78%)p 2.00(15.54%)d 9.85(76.67%)

327. (0.00741) RY*(1) C 15 s(0.18%)p99.99(96.22%)d20.21(3.60%)

0.0000 0.0204 0.0240 0.0276 -0.0053

-0.0146 0.0280 -0.0335 0.0066 0.0337

-0.9695 -0.0100 -0.0370 0.0085 -0.1322

0.0046 0.0014 -0.0930 -0.0134 0.0121

-0.1634 -0.0177

328. (0.00289) RY*(2) C 15 s(1.45%)p66.63(96.88%)d 1.15(1.67%)

0.0000 0.0100 0.1200 0.0066 -0.0023

0.0374 0.9473 -0.1361 -0.1213 0.0114

0.0346 0.1301 -0.0528 0.0022 0.1236

-0.0092 -0.0181 0.0441 -0.0152 0.0182

-0.1176 -0.0186

329. (0.00131) RY*(3) C 15 s(8.20%)p 9.24(75.75%)d 1.96(16.06%)

0.0000 -0.0012 0.2804 -0.0532 -0.0229

-0.0008 -0.1521 -0.0451 -0.0308 -0.0122

-0.1094 0.0566 -0.0101 0.0046 0.8431

0.0662 0.0270 -0.0484 0.3873 -0.0643

-0.0342 0.0537

330. (0.00089) RY*(4) C 15 s(77.69%)p 0.18(14.26%)d 0.10(8.05%)

0.0000 -0.0070 0.8794 0.0569 -0.0151

0.0018 -0.0943 -0.1118 -0.1052 -0.0312

0.0494 -0.2288 0.0607 -0.0063 -0.1949

0.1103 0.0219 0.1116 -0.2431 -0.0757

-0.0496 0.0281

331. (0.00058) RY*(5) C 15 s(1.13%)p25.29(28.60%)d62.13(70.26%)

0.0000 -0.0040 0.0575 0.0885 0.0125

-0.0029 0.0602 -0.1323 -0.0330 -0.0054

0.0505 -0.3810 0.0529 0.0090 -0.2921

-0.1385 -0.0932 -0.0051 0.7438 0.3468

-0.0486 0.1634

332. (0.00045) RY*(6) C 15 s(9.46%)p 7.62(72.06%)d 1.95(18.49%)

0.0000 0.0031 0.3056 0.0249 0.0231

0.0116 -0.0369 0.3866 -0.0117 -0.0028

0.0228 0.6888 0.0741 0.0035 -0.1701

-0.2328 -0.0766 -0.2986 0.1330 0.2533

0.0647 0.0981

333. (0.00035) RY*(7) C 15 s(25.02%)p 2.60(65.11%)d 0.39(9.87%)

0.0000 -0.0043 -0.0236 0.4996 -0.0036

0.0141 0.1017 0.6198 -0.3786 0.0000

-0.0641 -0.3044 -0.0707 0.0023 0.1001

-0.0301 0.0171 0.0098 0.0008 -0.0970

0.2846 -0.0907

334. (0.00019) RY*(8) C 15 s(1.03%)p80.09(82.31%)d16.22(16.67%)

0.0000 0.0002 -0.0173 0.0522 0.0852

-0.0090 -0.0436 -0.0489 -0.0211 -0.0004

-0.0240 -0.1268 0.2069 0.0065 0.1892

-0.8497 0.0310 0.2059 -0.2506 0.0756

-0.1755 0.1580

335. (0.00010) RY*(9) C 15 s(7.08%)p 6.35(44.94%)d 6.78(47.98%)

0.0000 0.0009 -0.0355 0.0973 0.2451

0.0092 0.1086 0.1940 0.2590 0.0101

0.0760 -0.1750 0.5084 0.0060 -0.0048

0.1338 0.1412 -0.4552 0.0054 -0.3176

-0.3424 0.2334

336. (0.00008) RY*(10) C 15 s(21.18%)p 2.35(49.85%)d 1.37(28.97%)

337. (0.00006) RY*(11) C 15 s(1.08%)p16.09(17.41%)d75.28(81.50%)

338. (0.00005) RY*(12) C 15 s(51.20%)p 0.71(36.38%)d 0.24(12.41%)

339. (0.00004) RY*(13) C 15 s(3.15%)p 6.57(20.72%)d24.16(76.13%)

340. (0.00004) RY*(14) C 15 s(1.31%)p38.05(49.90%)d37.20(48.79%)

341. (0.00000) RY*(15) C 15 s(89.29%)p 0.07(6.09%)d 0.05(4.62%)

342. (0.00000) RY*(16) C 15 s(0.89%)p99.99(96.02%)d 3.49(3.10%)

343. (0.00001) RY*(17) C 15 s(0.65%)p73.08(47.69%)d79.17(51.66%)

344. (0.00774) RY*(1) C 16 s(1.46%)p65.00(95.14%)d 2.32(3.39%)

0.0000 0.0084 0.0948 0.0746 0.0006

-0.0342 0.6071 0.0141 0.0263 -0.0172

0.7605 -0.0258 0.0265 -0.0067 0.0166

-0.0201 -0.0050 -0.1777 0.0136 0.0005

-0.0146 0.0446

345. (0.00596) RY*(2) C 16 s(2.16%)p45.03(97.19%)d 0.30(0.65%)

0.0000 0.0170 0.1427 -0.0246 -0.0177

0.0021 0.6793 -0.0103 -0.0047 -0.0268

-0.5711 -0.0525 -0.0022 0.0112 0.4205

0.0588 0.0161 -0.0258 -0.0461 -0.0569

-0.0029 -0.0226

346. (0.00270) RY*(3) C 16 s(2.49%)p36.60(91.08%)d 2.59(6.44%)

0.0000 -0.0134 0.1360 -0.0787 0.0033

-0.0104 -0.3549 0.0541 0.0549 0.0074

0.2693 -0.0899 -0.0323 0.0138 0.8329

0.0293 0.0475 0.0338 -0.1951 -0.1279

0.0367 -0.0864

347. (0.00164) RY*(4) C 16 s(85.99%)p 0.08(6.82%)d 0.08(7.18%)

0.0000 -0.0119 0.9258 0.0462 -0.0243

-0.0209 -0.0826 -0.1278 0.0389 -0.0070

-0.0041 -0.1201 0.0007 -0.0002 -0.1622

-0.0416 0.0250 0.2224 0.1248 0.0603

0.0554 -0.0103

348. (0.00089) RY*(5) C 16 s(0.06%)p94.64(5.44%)d99.99(94.50%)

0.0000 0.0000 0.0223 -0.0032 -0.0081

-0.0021 0.0484 0.0212 0.0286 -0.0037

-0.0165 -0.0715 -0.0133 0.0105 -0.1132

-0.1777 0.0275 0.0576 -0.8220 0.4732

0.2029 0.0288

349. (0.00059) RY*(6) C 16 s(2.39%)p27.43(65.66%)d13.35(31.95%)

0.0000 0.0004 0.0068 0.1488 -0.0416

0.0017 -0.0082 0.1753 -0.1854 -0.0080

-0.0486 -0.4237 -0.0482 0.0038 -0.1044

-0.6254 -0.0713 -0.0815 -0.1577 -0.4987

-0.1863 -0.0680

350. (0.00035) RY*(7) C 16 s(2.96%)p 3.16(9.34%)d29.68(87.70%)

0.0000 -0.0007 0.0075 0.1717 0.0048

-0.0121 -0.0880 -0.0088 -0.0894 0.0019

-0.0738 -0.1287 0.0125 -0.0004 0.1002

-0.2097 -0.0360 -0.4753 0.2653 0.1410

0.7100 0.2384

351. (0.00033) RY*(8) C 16 s(9.32%)p 3.03(28.27%)d 6.70(62.41%)

0.0000 -0.0046 -0.0563 0.2996 -0.0157

0.0151 -0.0320 0.3370 -0.1645 -0.0031

-0.0117 -0.3190 0.0699 0.0030 0.1687

-0.0698 0.0269 0.0911 0.2845 0.6137

-0.3896 0.0809

352. (0.00026) RY*(9) C 16 s(4.38%)p 8.38(36.70%)d13.44(58.91%)

0.0000 -0.0032 0.2059 -0.0378 0.0006

-0.0091 -0.1312 0.1180 -0.1775 -0.0192

-0.0712 -0.1431 0.2216 -0.0062 -0.1180

0.4547 0.0924 -0.6791 -0.2264 -0.0674

-0.2687 0.0003

353. (0.00021) RY*(10) C 16 s(46.03%)p 0.69(31.75%)d 0.48(22.22%)

0.0000 -0.0092 0.0538 0.6759 0.0236

0.0021 -0.0098 0.2769 0.0872 0.0008

-0.0351 0.4110 0.2226 0.0036 0.0007

0.0143 0.1150 0.0057 -0.0722 -0.1008

0.1237 -0.4375

354. (0.00015) RY*(11) C 16 s(2.54%)p27.45(69.82%)d10.87(27.64%)

0.0000 0.0042 0.1053 0.1125 0.0408

-0.0061 -0.0579 0.1347 0.6259 -0.0059

-0.0799 0.2504 -0.4245 0.0010 0.0225

-0.1833 -0.0386 -0.3039 -0.0164 0.0300

-0.2815 0.3220

355. (0.00013) RY*(12) C 16 s(4.63%)p12.46(57.63%)d 8.16(37.74%)

0.0000 0.0071 0.0322 -0.1135 0.1797

0.0034 0.0029 0.2656 0.1310 0.0007

-0.0154 0.1302 0.6730 0.0018 0.0198

-0.1071 0.0813 0.1844 -0.0428 -0.1555

0.0070 0.5634

356. (0.00006) RY*(13) C 16 s(14.24%)p 5.45(77.61%)d 0.57(8.15%)

357. (0.00006) RY*(14) C 16 s(2.70%)p33.22(89.57%)d 2.87(7.73%)

358. (0.00003) RY*(15) C 16 s(22.28%)p 1.64(36.43%)d 1.85(41.29%)

359. (0.00001) RY*(16) C 16 s(1.13%)p86.68(98.21%)d 0.58(0.66%)

360. (0.00000) RY*(17) C 16 s(95.24%)p 0.04(3.51%)d 0.01(1.26%)

361. (0.01332) RY*(1) C 17 s(6.53%)p14.23(92.99%)d 0.07(0.48%)

0.0000 0.0443 0.2511 -0.0181 -0.0047

-0.2204 0.0231 -0.0023 0.0452 0.9294

-0.0184 -0.0420 -0.0028 -0.1132 0.0053

0.0033 0.0143 -0.0015 0.0076 -0.0661

0.0107

362. (0.00697) RY*(2) C 17 s(0.20%)p59.71(11.88%)d99.99(87.92%)

0.0000 -0.0009 0.0440 0.0072 -0.0043

-0.0050 -0.0066 0.0032 0.0092 -0.0272

-0.0346 -0.0011 0.0777 -0.2175 -0.2516

-0.0042 0.0676 0.0235 -0.9152 0.0972

0.1642

363. (0.00599) RY*(3) C 17 s(0.54%)p99.99(73.47%)d48.21(25.99%)

0.0000 0.0340 0.0642 -0.0107 -0.0084

-0.8322 0.0008 0.0469 -0.0112 -0.1957

0.0185 0.0268 -0.0018 0.0176 -0.0069

-0.0018 -0.4931 0.0244 -0.0090 0.1258

0.0176

364. (0.00302) RY*(4) C 17 s(0.55%)p50.16(27.73%)d99.99(71.71%)

0.0000 0.0123 0.0725 -0.0113 0.0287

-0.4576 0.1825 -0.0436 0.0038 -0.1613

0.0159 0.0297 -0.0027 0.0688 -0.0041

-0.0003 0.7417 -0.1423 -0.0073 -0.3779

-0.0627

365. (0.00187) RY*(5) C 17 s(38.55%)p 0.50(19.46%)d 1.09(41.99%)

0.0000 -0.0091 0.6197 0.0366 -0.0114

0.1165 -0.1096 0.0760 -0.0025 -0.0854

-0.0862 -0.0195 -0.0121 0.3470 -0.1532

0.0635 -0.0666 -0.6280 -0.0247 0.1272

-0.0658

366. (0.00113) RY*(6) C 17 s(43.37%)p 0.21(9.08%)d 1.10(47.56%)

0.0000 -0.0043 0.6581 0.0236 -0.0128

0.0286 -0.0900 0.1103 0.0057 -0.1750

0.0092 -0.0439 0.0079 -0.1431 0.1232

-0.0341 0.1933 0.6165 0.0938 0.2218

0.0082

367. (0.00050) RY*(7) C 17 s(5.26%)p 4.39(23.07%)d13.64(71.67%)

0.0000 -0.0160 0.2114 0.0874 0.0001

0.1074 -0.1498 0.1205 -0.0311 -0.1004

-0.1959 0.2261 0.0086 -0.2754 0.0486

-0.0581 -0.3107 0.0231 -0.0453 -0.7817

-0.0811

368. (0.00042) RY*(8) C 17 s(0.16%)p99.99(73.15%)d99.99(26.69%)

0.0000 0.0032 -0.0191 0.0355 0.0003

-0.0348 -0.0834 0.1911 0.0086 -0.0850

0.0214 -0.1589 0.0037 -0.7429 0.2562

-0.1902 0.1046 -0.4307 0.1266 0.2317

-0.0268

369. (0.00022) RY*(9) C 17 s(1.61%)p59.48(95.95%)d 1.51(2.44%)

0.0000 -0.0028 0.1122 0.0595 0.0016

0.0627 0.6924 -0.3101 -0.0122 -0.0626

-0.5490 -0.2285 0.0011 -0.0938 0.1123

0.0300 -0.1262 -0.0097 0.0219 0.0226

0.0858

370. (0.00016) RY*(10) C 17 s(11.29%)p 6.70(75.61%)d 1.16(13.10%)

0.0000 0.0035 -0.1860 0.2798 0.0037

-0.0808 -0.2816 0.4712 -0.0004 0.0527

-0.5620 -0.1256 -0.0045 0.2409 0.2331

0.0380 0.1309 0.0380 -0.0306 0.0373

0.3318

371. (0.00015) RY*(11) C 17 s(4.60%)p17.55(80.69%)d 3.20(14.71%)

0.0000 0.0077 -0.0332 0.2117 -0.0012

-0.0036 0.1258 0.2459 0.0049 -0.0196

-0.0515 0.0321 0.0129 -0.2370 -0.7948

0.1962 0.0389 0.0437 0.3199 0.0183

0.2025

372. (0.00010) RY*(12) C 17 s(8.62%)p 7.06(60.82%)d 3.55(30.56%)

373. (0.00006) RY*(13) C 17 s(0.88%)p99.99(97.09%)d 2.29(2.03%)

374. (0.00003) RY*(14) C 17 s(62.77%)p 0.04(2.79%)d 0.55(34.44%)

375. (0.00004) RY*(15) C 17 s(12.32%)p 4.94(60.89%)d 2.17(26.78%)

376. (0.00002) RY*(16) C 17 s(3.14%)p30.46(95.69%)d 0.37(1.17%)

377. (0.00966) RY*(1) C 18 s(2.15%)p42.82(92.03%)d 2.71(5.82%)

0.0000 0.0278 0.1423 -0.0004 -0.0217

0.0096 -0.1186 0.0070 -0.0100 -0.0267

-0.9421 0.0033 0.0596 0.0059 0.1184

0.0016 -0.0098 0.0074 -0.0171 -0.0301

-0.2352 0.0406

378. (0.00509) RY*(2) C 18 s(4.26%)p20.09(85.65%)d 2.37(10.09%)

0.0000 -0.0334 0.2021 -0.0021 0.0259

0.0162 -0.8940 0.0256 -0.0325 0.0045

0.2059 0.0119 -0.0539 -0.0011 -0.0979

0.0138 0.0112 -0.0377 -0.0588 -0.0402

-0.2980 0.0748

379. (0.00246) RY*(3) C 18 s(2.83%)p 3.56(10.09%)d30.72(87.08%)

0.0000 0.0009 0.1655 0.0300 -0.0064

0.0036 0.0702 0.0475 -0.0153 0.0007

0.0360 -0.0868 0.0280 0.0383 -0.1290

-0.2426 -0.0829 -0.0882 0.7359 0.5025

-0.2601 -0.0371

380. (0.00212) RY*(4) C 18 s(28.47%)p 0.71(20.35%)d 1.80(51.18%)

0.0000 0.0088 0.5317 0.0232 -0.0377

0.0203 0.3372 0.0287 -0.0659 -0.0180

0.1729 -0.1550 0.1075 -0.0083 0.0841

0.1060 -0.0052 -0.4912 -0.1852 -0.2213

-0.4135 0.1272

381. (0.00155) RY*(5) C 18 s(0.07%)p99.99(35.77%)d99.99(64.16%)

0.0000 -0.0004 0.0128 0.0227 0.0022

0.0008 0.0436 0.0216 0.0014 -0.0005

-0.0726 -0.0093 -0.0055 -0.0011 -0.5853

0.0209 -0.0837 0.0680 0.3843 -0.6550

0.0822 0.2312

382. (0.00051) RY*(6) C 18 s(42.58%)p 0.60(25.47%)d 0.75(31.95%)

0.0000 0.0052 0.6407 -0.1080 0.0597

-0.0044 -0.0297 -0.2440 -0.0761 -0.0090

0.0521 0.1773 -0.0012 -0.0066 0.3624

-0.1472 0.0338 0.3274 0.1815 -0.1206

0.3960 0.0892

383. (0.00049) RY*(7) C 18 s(13.94%)p 3.86(53.77%)d 2.32(32.30%)

0.0000 0.0034 0.3630 -0.0824 0.0284

-0.0024 0.0750 -0.1758 -0.0544 -0.0022

-0.0905 0.1322 -0.0288 0.0122 -0.6640

0.1533 -0.0843 0.0593 -0.3449 0.3970

0.1577 -0.1341

384. (0.00030) RY*(8) C 18 s(1.17%)p22.91(26.78%)d61.65(72.05%)

0.0000 0.0029 0.0033 0.0789 -0.0738

0.0215 0.2194 -0.1084 0.1483 0.0219

0.1133 0.3293 -0.2348 -0.0010 -0.0194

-0.0801 0.0418 0.5691 -0.0888 -0.0903

-0.6116 -0.0808

385. (0.00012) RY*(9) C 18 s(34.96%)p 1.57(54.71%)d 0.30(10.33%)

0.0000 0.0094 0.1439 0.5556 0.1415

-0.0008 0.0081 0.0154 0.3781 -0.0068

-0.0329 -0.4889 -0.3918 0.0016 0.0008

0.0716 0.0715 0.1386 -0.0612 0.1070

0.1144 0.2362

386. (0.00009) RY*(10) C 18 s(3.10%)p27.11(84.04%)d 4.15(12.86%)

387. (0.00009) RY*(11) C 18 s(8.68%)p 4.92(42.68%)d 5.60(48.64%)

388. (0.00004) RY*(12) C 18 s(58.60%)p 0.57(33.20%)d 0.14(8.20%)

389. (0.00004) RY*(13) C 18 s(8.75%)p 6.60(57.75%)d 3.83(33.50%)

390. (0.00004) RY*(14) C 18 s(12.79%)p 6.62(84.62%)d 0.20(2.59%)

391. (0.00001) RY*(15) C 18 s(0.37%)p99.99(99.41%)d 0.61(0.22%)

392. (0.00001) RY*(16) C 18 s(0.32%)p99.99(91.39%)d26.17(8.29%)

393. (0.00000) RY*(17) C 18 s(77.17%)p 0.03(2.42%)d 0.26(20.41%)

394. (0.00744) RY*(1) C 19 s(2.38%)p35.22(83.76%)d 5.83(13.87%)

0.0000 0.0098 0.1392 -0.0641 -0.0141

0.0444 0.8901 0.0307 -0.0310 -0.0435

0.1520 -0.0562 0.0999 0.0103 0.0509

0.0146 -0.0175 -0.3329 0.0612 0.0072

0.1491 0.0424

395. (0.00553) RY*(2) C 19 s(0.17%)p99.99(97.92%)d11.40(1.91%)

0.0000 0.0303 0.0017 -0.0145 -0.0233

0.0568 0.1994 0.0418 -0.1048 0.0162

-0.9402 0.0978 -0.0039 0.0020 0.1718

-0.0132 -0.0077 0.0834 -0.0167 -0.0179

-0.1042 -0.0263

396. (0.00151) RY*(3) C 19 s(0.02%)p99.99(15.17%)d99.99(84.81%)

0.0000 0.0000 -0.0094 0.0118 0.0003

0.0010 -0.0295 0.0037 -0.0006 -0.0020

0.0623 0.0021 0.0016 -0.0113 0.3831

0.0028 -0.0080 -0.1508 -0.8886 0.0842

0.0620 -0.1572

397. (0.00084) RY*(4) C 19 s(4.69%)p12.18(57.12%)d 8.14(38.19%)

0.0000 -0.0018 0.2120 0.0388 -0.0216

0.0119 -0.2447 0.5766 0.1119 0.0033

-0.1204 -0.3706 -0.0020 0.0009 -0.0460

0.1106 0.0037 -0.5871 0.0556 -0.0423

-0.1744 0.0435

398. (0.00067) RY*(5) C 19 s(0.07%)p99.99(67.11%)d99.99(32.81%)

0.0000 -0.0004 0.0245 0.0104 -0.0006

0.0013 -0.0818 0.0203 -0.0090 -0.0006

0.1230 -0.0050 0.0200 -0.0091 0.7841

0.1177 0.1404 0.0574 0.2679 -0.4706

0.0533 0.1695

399. (0.00033) RY*(6) C 19 s(85.53%)p 0.15(12.65%)d 0.02(1.82%)

0.0000 0.0083 0.9180 -0.1084 -0.0288

0.0177 -0.1238 -0.2507 0.0142 0.0299

-0.0343 0.1259 -0.1653 -0.0037 -0.0094

-0.0437 0.0234 0.0163 -0.0107 0.0399

0.1236 0.0307

400. (0.00022) RY*(7) C 19 s(19.07%)p 1.49(28.40%)d 2.75(52.53%)

0.0000 -0.0045 -0.1724 0.3659 -0.1645

-0.0221 -0.0962 -0.3110 0.2472 -0.0064

-0.1296 0.1100 -0.2847 -0.0008 0.0088

-0.0448 0.0658 -0.4357 0.1612 -0.0622

0.4331 -0.3436

401. (0.00006) RY*(8) C 19 s(0.24%)p99.99(51.07%)d99.99(48.69%)

402. (0.00007) RY*(9) C 19 s(66.14%)p 0.28(18.55%)d 0.23(15.31%)

403. (0.00004) RY*(10) C 19 s(0.07%)p99.99(90.20%)d99.99(9.74%)

404. (0.00000) RY*(11) C 19 s(96.43%)p 0.01(1.21%)d 0.02(2.35%)

405. (0.00001) RY*(12) C 19 s(6.88%)p 9.31(64.00%)d 4.23(29.13%)

406. (0.00000) RY*(13) C 19 s(0.22%)p99.99(99.02%)d 3.54(0.77%)

407. (0.00000) RY*(14) C 19 s(5.85%)p15.50(90.67%)d 0.60(3.48%)

408. (0.00000) RY*(15) C 19 s(0.80%)p34.23(27.53%)d89.10(71.66%)

409. (0.00000) RY*(16) C 19 s(5.74%)p15.78(90.61%)d 0.63(3.64%)

410. (0.00001) RY*(17) C 19 s(5.70%)p 0.92(5.26%)d15.63(89.04%)

411. (0.00495) RY*(1) C 20 s(2.26%)p40.72(92.03%)d 2.53(5.71%)

0.0000 -0.0179 0.1489 -0.0025 0.0096

-0.0268 0.9437 -0.1241 0.0490 -0.0086

-0.0522 0.0357 0.0193 -0.0008 0.0813

-0.0136 0.0007 -0.0730 -0.0097 -0.0349

-0.2238 0.0194

412. (0.00177) RY*(2) C 20 s(0.63%)p99.99(99.19%)d 0.28(0.18%)

0.0000 -0.0032 0.0778 -0.0157 -0.0056

-0.0064 0.0568 -0.0121 -0.0041 0.0494

0.9436 -0.0846 -0.2604 -0.0082 -0.1375

0.0117 0.0403 0.0288 -0.0044 -0.0056

-0.0209 -0.0219

413. (0.00106) RY*(3) C 20 s(0.03%)p99.99(83.56%)d99.99(16.41%)

0.0000 -0.0001 0.0064 0.0152 0.0027

0.0022 -0.0687 -0.0151 -0.0130 -0.0035

0.1304 0.0295 0.0234 -0.0215 0.8695

0.1759 0.1569 -0.0137 -0.2559 -0.3032

0.0686 0.0421

414. (0.00045) RY*(4) C 20 s(17.68%)p 4.36(77.07%)d 0.30(5.25%)

0.0000 0.0056 0.3817 -0.1763 0.0039

0.0131 -0.1037 0.0553 0.0350 0.0164

-0.0007 0.8354 -0.2017 -0.0013 0.0078

-0.1229 0.0379 -0.2233 0.0216 0.0442

-0.0144 0.0075

415. (0.00039) RY*(5) C 20 s(74.23%)p 0.29(21.45%)d 0.06(4.31%)

0.0000 0.0058 0.8610 0.0166 -0.0272

0.0265 -0.1529 0.0104 -0.2194 -0.0045

-0.0708 -0.3480 0.1071 0.0025 -0.0030

0.0549 -0.0396 0.0658 -0.0180 -0.0284

-0.1858 -0.0562

416. (0.00034) RY*(6) C 20 s(0.14%)p52.63(7.50%)d99.99(92.35%)

0.0000 0.0006 0.0321 -0.0199 -0.0015

0.0012 0.0153 0.0131 -0.0010 0.0008

-0.0406 0.0383 -0.0254 -0.0026 -0.2575

-0.0570 -0.0364 0.0909 0.1698 -0.8898

0.1278 0.2798

417. (0.00019) RY*(7) C 20 s(58.83%)p 0.46(27.00%)d 0.24(14.17%)

0.0000 -0.0104 -0.0552 0.7649 -0.0107

-0.0046 -0.0781 -0.4053 -0.2321 0.0009

-0.0092 0.1751 -0.1026 -0.0004 -0.0196

-0.0642 -0.0066 -0.0370 0.0406 -0.1222

-0.1788 -0.3029

418. (0.00006) RY*(8) C 20 s(1.42%)p19.58(27.90%)d49.61(70.68%)

419. (0.00007) RY*(9) C 20 s(4.00%)p11.49(45.91%)d12.53(50.09%)

420. (0.00001) RY*(10) C 20 s(7.11%)p12.40(88.15%)d 0.67(4.74%)

421. (0.00001) RY*(11) C 20 s(18.27%)p 2.17(39.71%)d 2.30(42.02%)

422. (0.00000) RY*(12) C 20 s(0.05%)p99.99(99.85%)d 1.70(0.09%)

423. (0.00000) RY*(13) C 20 s(98.71%)p 0.00(0.47%)d 0.01(0.82%)

424. (0.00000) RY*(14) C 20 s(0.22%)p42.82(9.45%)d99.99(90.33%)

425. (0.00000) RY*(15) C 20 s(0.01%)p99.99(79.17%)d99.99(20.82%)

426. (0.00000) RY*(16) C 20 s(0.12%)p99.99(99.59%)d 2.32(0.29%)

427. (0.00001) RY*(17) C 20 s(16.28%)p 0.13(2.16%)d 5.01(81.56%)

428. (0.00614) RY*(1) C 21 s(0.24%)p99.99(95.02%)d19.73(4.74%)

0.0000 0.0209 -0.0310 0.0315 -0.0027

0.0227 -0.4859 0.0695 -0.0461 -0.0305

0.8203 -0.0307 0.0489 0.0072 -0.1708

0.0100 -0.0112 -0.1898 0.0225 -0.0390

-0.0926 -0.0272

429. (0.00222) RY*(2) C 21 s(0.04%)p99.99(99.24%)d18.90(0.72%)

0.0000 -0.0009 0.0146 -0.0073 -0.0106

0.0383 0.8295 -0.0546 -0.1910 0.0240

0.4979 -0.0409 -0.1151 -0.0012 -0.0039

0.0023 0.0040 -0.0099 0.0129 0.0155

0.0816 0.0035

430. (0.00071) RY*(3) C 21 s(0.07%)p99.99(7.55%)d99.99(92.39%)

0.0000 -0.0002 -0.0006 0.0257 0.0043

-0.0016 0.0269 -0.0216 0.0057 0.0022

-0.0402 -0.0212 -0.0146 0.0160 -0.2453

-0.0510 -0.0944 -0.0906 -0.7981 -0.5061

0.1482 0.0246

431. (0.00039) RY*(4) C 21 s(67.72%)p 0.37(25.36%)d 0.10(6.93%)

0.0000 0.0048 0.8222 -0.0221 -0.0257

0.0004 -0.0664 -0.3662 0.0168 -0.0278

0.0355 -0.2682 0.1936 0.0039 -0.0491

0.0140 -0.0273 0.0765 0.0418 0.0307

0.2443 -0.0325

432. (0.00030) RY*(5) C 21 s(0.35%)p99.99(68.25%)d90.39(31.40%)

0.0000 0.0000 0.0435 0.0397 -0.0007

0.0002 -0.0710 -0.0153 -0.0143 -0.0016

0.1248 0.0358 0.0294 -0.0018 0.7869

0.1870 0.0713 -0.0789 -0.4475 0.2891

0.0133 -0.1542

433. (0.00030) RY*(6) C 21 s(22.67%)p 2.93(66.39%)d 0.48(10.94%)

0.0000 0.0032 0.4448 -0.1543 -0.0714

0.0190 0.0210 0.6259 -0.2154 -0.0003

0.0234 0.4662 0.0709 0.0015 -0.0186

-0.0309 -0.0277 0.2650 -0.0747 -0.0207

-0.1726 0.0578

434. (0.00016) RY*(7) C 21 s(46.63%)p 0.43(20.20%)d 0.71(33.17%)

0.0000 -0.0103 -0.1252 0.6660 -0.0839

-0.0045 -0.0168 -0.1232 -0.1967 0.0090

0.0292 0.2270 0.2959 -0.0018 -0.0339

-0.0531 -0.0621 0.3873 0.0421 -0.0700

0.1253 -0.3991

435. (0.00007) RY*(8) C 21 s(9.74%)p 4.09(39.84%)d 5.18(50.42%)

436. (0.00004) RY*(9) C 21 s(6.77%)p 4.66(31.53%)d 9.11(61.69%)

437. (0.00003) RY*(10) C 21 s(42.29%)p 0.67(28.31%)d 0.70(29.40%)

438. (0.00000) RY*(11) C 21 s(0.80%)p99.99(97.11%)d 2.63(2.09%)

439. (0.00000) RY*(12) C 21 s(0.08%)p99.99(98.71%)d15.68(1.22%)

440. (0.00001) RY*(13) C 21 s(1.94%)p44.79(86.72%)d 5.86(11.35%)

441. (0.00001) RY*(14) C 21 s(1.07%)p79.95(85.29%)d12.78(13.64%)

442. (0.00001) RY*(15) C 21 s(0.15%)p99.99(27.13%)d99.99(72.72%)

443. (0.00000) RY*(16) C 21 s(94.07%)p 0.05(4.75%)d 0.01(1.18%)

444. (0.00000) RY*(17) C 21 s(5.40%)p 3.48(18.77%)d14.05(75.83%)

445. (0.00456) RY*(1) C 22 s(1.32%)p70.28(93.01%)d 4.28(5.66%)

0.0000 -0.0178 0.1089 0.0307 0.0105

0.0187 -0.2273 -0.0845 -0.0155 0.0168

-0.9142 0.1248 -0.0512 -0.0014 0.1257

-0.0258 0.0082 -0.2232 0.0376 0.0011

0.0658 0.0329

446. (0.00247) RY*(2) C 22 s(0.72%)p99.99(99.02%)d 0.36(0.26%)

0.0000 -0.0027 0.0806 0.0246 0.0090

0.0300 0.9510 -0.0164 -0.1553 -0.0198

-0.1853 0.1122 0.0273 0.0053 0.1095

-0.0164 -0.0130 -0.0275 0.0032 0.0051

-0.0172 0.0385

447. (0.00098) RY*(3) C 22 s(0.05%)p99.99(87.96%)d99.99(12.00%)

0.0000 0.0001 0.0192 -0.0098 -0.0003

0.0007 -0.0779 -0.0063 -0.0209 -0.0013

0.1446 0.0381 0.0250 -0.0081 0.8773

0.2459 0.1411 0.0406 0.3323 0.0873

-0.0104 0.0139

448. (0.00055) RY*(4) C 22 s(90.78%)p 0.06(5.53%)d 0.04(3.69%)

0.0000 0.0077 0.9495 0.0783 0.0015

-0.0280 -0.0270 -0.0677 0.1281 -0.0154

0.1692 0.0180 -0.0218 0.0001 -0.0495

-0.0216 0.0131 -0.1555 0.0402 -0.0083

0.1021 -0.0245

449. (0.00041) RY*(5) C 22 s(0.03%)p99.99(17.95%)d99.99(82.02%)

0.0000 0.0000 0.0165 -0.0056 0.0015

0.0022 -0.0110 0.0232 -0.0062 -0.0025

0.0217 0.0658 -0.0014 -0.0131 0.1503

0.3878 -0.0295 -0.1529 -0.7680 0.3980

0.0319 -0.2181

450. (0.00029) RY*(6) C 22 s(2.07%)p39.33(81.59%)d 7.87(16.33%)

0.0000 -0.0016 0.1096 -0.0933 -0.0050

0.0163 -0.0246 0.8730 -0.1702 -0.0045

-0.0973 -0.0362 0.0859 0.0037 -0.0290

0.0645 -0.0280 0.1984 0.0398 0.0592

0.3386 0.0654

451. (0.00022) RY*(7) C 22 s(7.64%)p10.60(81.03%)d 1.48(11.32%)

0.0000 -0.0096 -0.1500 0.2211 -0.0705

0.0064 0.0200 0.1153 0.3478 0.0080

0.1182 0.7610 -0.2598 -0.0008 -0.0301

-0.0917 0.0747 -0.0720 0.0721 -0.0272

0.2631 -0.1814

452. (0.00009) RY*(8) C 22 s(25.02%)p 0.68(16.92%)d 2.32(58.06%)

453. (0.00007) RY*(9) C 22 s(10.19%)p 7.99(81.43%)d 0.82(8.38%)

454. (0.00007) RY*(10) C 22 s(1.40%)p22.26(31.22%)d48.05(67.38%)

455. (0.00003) RY*(11) C 22 s(63.28%)p 0.09(5.57%)d 0.49(31.15%)

456. (0.00003) RY*(12) C 22 s(2.09%)p38.31(80.08%)d 8.53(17.83%)

457. (0.00002) RY*(13) C 22 s(0.37%)p20.99(7.74%)d99.99(91.89%)

458. (0.00003) RY*(14) C 22 s(0.04%)p99.99(88.18%)d99.99(11.78%)

459. (0.00000) RY*(15) C 22 s(85.93%)p 0.16(13.85%)d 0.00(0.22%)

460. (0.00000) RY*(16) C 22 s(0.17%)p99.99(98.75%)d 6.31(1.08%)

461. (0.00000) RY*(17) C 22 s(8.89%)p 1.17(10.37%)d 9.08(80.74%)

462. (0.00245) RY*(1) C 23 s(2.41%)p31.62(76.24%)d 8.85(21.35%)

0.0000 0.0067 0.1450 -0.0543 0.0092

-0.0002 0.0480 -0.1597 -0.0167 0.0233

-0.8398 -0.1263 -0.0147 0.0046 -0.0660

-0.0533 -0.0711 0.0155 -0.2231 -0.3538

-0.1109 -0.1611

463. (0.00199) RY*(2) C 23 s(1.94%)p43.58(84.58%)d 6.94(13.48%)

0.0000 0.0000 0.1387 -0.0079 0.0109

0.0192 -0.8777 -0.1201 -0.0163 -0.0021

0.1599 -0.1011 -0.0481 0.0021 0.1407

-0.0346 -0.0373 0.0604 -0.3366 -0.1140

-0.0018 -0.0692

464. (0.00147) RY*(3) C 23 s(13.57%)p 6.09(82.63%)d 0.28(3.80%)

0.0000 -0.0059 0.3378 0.1446 0.0251

-0.0011 0.2641 -0.0634 0.0777 -0.0046

0.1330 -0.0918 -0.0329 0.0501 0.8225

-0.1555 -0.1268 0.0046 0.0064 -0.1339

-0.0840 -0.1137

465. (0.00073) RY*(4) C 23 s(6.48%)p 5.95(38.57%)d 8.48(54.95%)

0.0000 0.0021 0.2499 0.0351 -0.0337

-0.0085 -0.3267 0.3772 0.1178 0.0027

-0.2132 0.1420 -0.1049 0.0077 0.0605

0.0505 0.1997 -0.0940 0.7137 -0.1358

-0.1126 -0.0136

466. (0.00027) RY*(5) C 23 s(24.20%)p 2.91(70.38%)d 0.22(5.41%)

0.0000 -0.0030 0.0409 0.4901 0.0144

0.0020 0.0272 0.2160 -0.1701 -0.0008

0.0866 -0.6261 0.4112 -0.0038 -0.1421

0.0335 0.1939 0.1301 0.0448 -0.1759

0.0448 -0.0470

467. (0.00019) RY*(6) C 23 s(36.96%)p 0.78(28.76%)d 0.93(34.28%)

0.0000 0.0017 0.6076 0.0008 -0.0207

0.0039 -0.0067 -0.0176 -0.1083 -0.0035

-0.1189 0.1715 0.3279 0.0008 -0.1277

-0.3076 0.1163 -0.0287 -0.0805 0.5292

0.2225 -0.0767

468. (0.00012) RY*(7) C 23 s(25.65%)p 2.55(65.32%)d 0.35(9.03%)

0.0000 -0.0043 0.1270 0.4761 -0.1171

-0.0043 0.0173 -0.4681 0.1265 0.0040

-0.0464 0.1055 -0.1950 0.0071 -0.0054

0.4321 0.4239 -0.1356 -0.0646 0.1641

-0.1796 0.0924

469. (0.00009) RY*(8) C 23 s(5.34%)p 6.56(35.01%)d11.18(59.65%)

470. (0.00007) RY*(9) C 23 s(15.89%)p 3.96(62.96%)d 1.33(21.15%)

471. (0.00003) RY*(10) C 23 s(18.39%)p 3.87(71.10%)d 0.57(10.51%)

472. (0.00002) RY*(11) C 23 s(16.88%)p 3.62(61.11%)d 1.30(22.02%)

473. (0.00003) RY*(12) C 23 s(5.03%)p10.92(54.89%)d 7.97(40.08%)

474. (0.00002) RY*(13) C 23 s(0.77%)p85.29(65.62%)d43.68(33.61%)

475. (0.00000) RY*(14) C 23 s(95.93%)p 0.04(3.64%)d 0.00(0.43%)

476. (0.00001) RY*(15) C 23 s(22.06%)p 2.93(64.65%)d 0.60(13.29%)

477. (0.00001) RY*(16) C 23 s(4.26%)p 4.35(18.54%)d18.11(77.20%)

478. (0.00001) RY*(17) C 23 s(4.15%)p 3.95(16.40%)d19.13(79.45%)

479. (0.00228) RY*(1) H 24 s(99.17%)p 0.01(0.83%)

0.0096 0.9958 -0.0026 0.0272 -0.0870

-0.0011

480. (0.00062) RY*(2) H 24 s(93.17%)p 0.07(6.83%)

0.0010 -0.0105 0.9652 -0.0483 -0.1608

-0.2004

481. (0.00046) RY*(3) H 24 s(3.89%)p24.73(96.11%)

-0.0010 0.0035 0.1971 -0.0898 -0.0065

0.9762

482. (0.00014) RY*(4) H 24 s(0.62%)p99.99(99.38%)

0.0063 -0.0215 0.0755 0.9920 0.0614

0.0765

483. (0.00007) RY*(5) H 24 s(3.23%)p29.98(96.77%)

484. (0.00109) RY*(1) H 25 s(98.23%)p 0.02(1.77%)

-0.0033 0.9911 -0.0026 0.1220 -0.0433

0.0306

485. (0.00024) RY*(2) H 25 s(84.81%)p 0.18(15.19%)

0.0058 0.0112 0.9208 -0.0470 0.2666

0.2804

486. (0.00016) RY*(3) H 25 s(5.68%)p16.60(94.32%)

0.0020 0.0541 0.2321 -0.1378 0.1673

-0.9467

487. (0.00011) RY*(4) H 25 s(1.03%)p96.45(98.97%)

-0.0020 0.0934 0.0392 -0.9140 -0.3846

0.0801

488. (0.00004) RY*(5) H 25 s(10.30%)p 8.71(89.70%)

489. (0.00048) RY*(1) H 26 s(94.23%)p 0.06(5.77%)

-0.0056 0.9702 -0.0308 -0.1511 -0.1744

-0.0666

490. (0.00019) RY*(2) H 26 s(92.04%)p 0.09(7.96%)

0.0042 0.0958 0.9546 0.1769 0.1493

0.1613

491. (0.00017) RY*(3) H 26 s(1.86%)p52.80(98.14%)

0.0008 -0.0259 0.1338 0.0295 0.1784

-0.9740

492. (0.00011) RY*(4) H 26 s(0.04%)p99.99(99.96%)

-0.0009 0.0123 0.0141 -0.7381 0.6668

0.1014

493. (0.00003) RY*(5) H 26 s(11.88%)p 7.42(88.12%)

494. (0.00048) RY*(1) H 27 s(94.59%)p 0.06(5.41%)

0.0054 0.9722 0.0257 0.2142 -0.0845

0.0334

495. (0.00018) RY*(2) H 27 s(94.36%)p 0.06(5.64%)

0.0040 -0.0790 0.9682 0.2371 -0.0136

-0.0021

496. (0.00017) RY*(3) H 27 s(0.10%)p99.99(99.90%)

0.0006 0.0283 -0.0126 0.0565 0.0719

-0.9953

497. (0.00010) RY*(4) H 27 s(0.32%)p99.99(99.68%)

0.0000 -0.0206 0.0523 -0.2761 -0.9556

-0.0860

498. (0.00003) RY*(5) H 27 s(10.68%)p 8.36(89.32%)

499. (0.00089) RY*(1) H 28 s(99.06%)p 0.01(0.94%)

-0.0033 0.9953 -0.0038 0.0223 0.0939

0.0066

500. (0.00022) RY*(2) H 28 s(75.15%)p 0.33(24.85%)

0.0043 0.0124 0.8668 0.3224 -0.1483

-0.3500

501. (0.00017) RY*(3) H 28 s(17.31%)p 4.78(82.69%)

0.0030 0.0406 0.4141 -0.5967 -0.3138

0.6102

502. (0.00015) RY*(4) H 28 s(0.05%)p99.99(99.95%)

-0.0029 0.0196 -0.0100 -0.7206 0.0121

-0.6929

503. (0.00005) RY*(5) H 28 s(8.47%)p10.80(91.53%)

504. (0.00057) RY*(1) H 29 s(93.85%)p 0.07(6.15%)

0.0007 0.9688 -0.0007 0.2394 -0.0543

0.0354

505. (0.00016) RY*(2) H 29 s(0.04%)p99.99(99.96%)

0.0004 0.0041 0.0196 0.0892 -0.1726

-0.9807

506. (0.00015) RY*(3) H 29 s(74.89%)p 0.34(25.11%)

0.0105 0.0159 0.8652 -0.1788 -0.4608

0.0822

507. (0.00010) RY*(4) H 29 s(23.07%)p 3.33(76.93%)

508. (0.00006) RY*(5) H 29 s(8.19%)p11.20(91.81%)

509. (0.00062) RY*(1) H 30 s(96.69%)p 0.03(3.31%)

0.0044 0.9832 0.0174 -0.1797 -0.0274

-0.0049

510. (0.00019) RY*(2) H 30 s(89.40%)p 0.12(10.60%)

0.0052 -0.0704 0.9429 -0.3087 0.0883

0.0541

511. (0.00018) RY*(3) H 30 s(0.78%)p99.99(99.22%)

0.0005 0.0000 0.0882 0.0567 -0.1399

-0.9846

512. (0.00010) RY*(4) H 30 s(0.97%)p99.99(99.03%)

513. (0.00004) RY*(5) H 30 s(12.20%)p 7.19(87.80%)

514. (0.00053) RY*(1) H 31 s(94.34%)p 0.06(5.66%)

0.0057 0.9711 0.0186 -0.1458 0.1840

-0.0391

515. (0.00018) RY*(2) H 31 s(95.02%)p 0.05(4.98%)

0.0035 -0.0680 0.9724 -0.0477 0.2105

-0.0571

516. (0.00016) RY*(3) H 31 s(0.04%)p99.99(99.96%)

0.0001 -0.0032 0.0196 -0.0860 0.1555

0.9839

517. (0.00011) RY*(4) H 31 s(0.50%)p99.99(99.50%)

0.0007 -0.0440 0.0556 -0.8792 -0.4711

-0.0036

518. (0.00003) RY*(5) H 31 s(10.15%)p 8.85(89.85%)

519. (0.00103) RY*(1) H 32 s(97.31%)p 0.03(2.69%)

-0.0041 0.9864 -0.0094 -0.1634 -0.0077

-0.0111

520. (0.00024) RY*(2) H 32 s(82.58%)p 0.21(17.42%)

0.0081 0.0623 0.9066 0.3181 0.2554

-0.0883

521. (0.00015) RY*(3) H 32 s(0.18%)p99.99(99.82%)

0.0017 0.0107 0.0404 -0.0136 0.2086

0.9770

522. (0.00008) RY*(4) H 32 s(4.72%)p20.20(95.28%)

523. (0.00005) RY*(5) H 32 s(15.26%)p 5.55(84.74%)

524. (0.00276) RY*(1) H 33 s(80.89%)p 0.24(19.11%)

-0.0369 0.8986 0.4074 -0.1582 0.0094

525. (0.00094) RY*(2) H 33 s(1.82%)p54.00(98.18%)

0.0189 0.1335 -0.5960 -0.7700 0.1835

526. (0.00092) RY*(3) H 33 s(0.02%)p99.99(99.98%)

-0.0002 0.0123 -0.0728 -0.1755 -0.9817

527. (0.00016) RY*(4) H 33 s(17.52%)p 4.71(82.48%)

0.0319 0.4173 -0.6865 0.5926 -0.0498

528. (0.00069) RY*(1) H 34 s(97.98%)p 0.02(2.02%)

-0.0020 0.9898 0.0141 -0.1148 0.0118

0.0829

529. (0.00029) RY*(2) H 34 s(91.21%)p 0.10(8.79%)

0.0006 -0.0501 0.9537 -0.2607 -0.1084

0.0902

530. (0.00012) RY*(3) H 34 s(9.44%)p 9.59(90.56%)

0.0031 0.1090 0.2873 0.9339 0.1640

-0.0804

531. (0.00013) RY*(4) H 34 s(0.71%)p99.99(99.29%)

0.0071 0.0774 0.0318 -0.0149 -0.4570

-0.8854

532. (0.00003) RY*(5) H 34 s(0.70%)p99.99(99.30%)

533. (0.00076) RY*(1) H 35 s(99.65%)p 0.00(0.35%)

-0.0027 0.9982 0.0049 0.0586 -0.0067

0.0059

534. (0.00032) RY*(2) H 35 s(88.35%)p 0.13(11.65%)

-0.0018 -0.0168 0.9398 0.1623 -0.2615

0.1476

535. (0.00014) RY*(3) H 35 s(2.32%)p42.06(97.68%)

-0.0005 -0.0078 0.1522 0.1816 0.8856

0.3994

536. (0.00009) RY*(4) H 35 s(9.13%)p 9.96(90.87%)

537. (0.00004) RY*(5) H 35 s(0.59%)p99.99(99.41%)

538. (0.00130) RY*(1) H 36 s(98.49%)p 0.02(1.51%)

-0.0030 0.9924 -0.0029 -0.0169 0.0951

-0.0759

539. (0.00021) RY*(2) H 36 s(90.41%)p 0.11(9.59%)

-0.0038 0.0355 0.9502 -0.0097 -0.3060

0.0464

540. (0.00017) RY*(3) H 36 s(0.22%)p99.99(99.78%)

0.0009 0.0100 0.0462 -0.7371 0.2622

0.6211

541. (0.00011) RY*(4) H 36 s(9.86%)p 9.14(90.14%)

0.0066 -0.1149 0.2922 -0.0773 0.8266

-0.4605

542. (0.00004) RY*(5) H 36 s(1.05%)p94.53(98.95%)

543. (0.13354) BD*(1) S 1 - O 2

(64.04%) 0.8003* S 1 s(27.65%)p 2.56(70.78%)d 0.06(1.57%)

0.0000 0.0000 0.5245 -0.0377 0.0009

0.0017 0.0000 0.0001 0.2087 0.0100

-0.0038 -0.0012 -0.0006 -0.0001 -0.7688

-0.0559 -0.0004 0.0053 0.0005 0.0000

0.2641 0.0121 -0.0047 -0.0037 -0.0005

-0.0503 0.0211 -0.0812 -0.0691 -0.0364

(35.96%) -0.5996* O 2 s(24.58%)p 3.06(75.27%)d 0.01(0.15%)

0.0000 0.4952 0.0240 -0.0027 0.0000

-0.2527 0.0070 -0.0028 0.0004 0.7784

-0.0162 0.0079 -0.0009 -0.2872 0.0131

0.0005 -0.0003 -0.0173 0.0057 -0.0196

-0.0243 -0.0130

544. (0.14250) BD*(1) S 1 - O 3

(63.82%) 0.7989* S 1 s(27.87%)p 2.53(70.57%)d 0.06(1.55%)

0.0000 0.0000 0.5269 -0.0326 -0.0004

0.0019 0.0000 0.0000 -0.2614 -0.0158

-0.0046 0.0022 0.0002 0.0000 0.0149

-0.0094 -0.0088 -0.0025 0.0001 -0.0001

-0.7959 -0.0576 0.0008 0.0033 0.0010

-0.0053 0.0644 -0.0245 0.0142 0.1027

(36.18%) -0.6015* O 3 s(23.88%)p 3.18(75.98%)d 0.01(0.14%)

0.0000 0.4881 -0.0247 0.0015 0.0001

0.2593 -0.0090 -0.0018 0.0004 -0.0423

0.0076 0.0033 -0.0001 0.8308 -0.0192

0.0074 -0.0005 -0.0012 0.0181 -0.0026

0.0028 0.0326

545. (0.25751) BD*(1) S 1 - N 6

(63.73%) 0.7983* S 1 s(20.20%)p 3.86(77.87%)d 0.10(1.93%)

0.0000 0.0001 0.4486 0.0277 0.0018

-0.0013 0.0000 -0.0001 -0.6582 -0.0262

0.0077 -0.0085 0.0005 0.0000 0.2924

-0.0049 -0.0051 -0.0085 0.0002 0.0001

0.5088 0.0114 -0.0027 -0.0020 -0.0005

-0.0637 -0.1000 0.0645 0.0323 0.0054

(36.27%) -0.6023* N 6 s(21.62%)p 3.62(78.30%)d 0.00(0.07%)

-0.0002 0.4647 0.0127 -0.0101 -0.0003

0.6721 0.0134 -0.0065 0.0004 -0.3322

0.0160 -0.0079 -0.0016 -0.4695 0.0059

-0.0029 -0.0004 -0.0087 -0.0193 0.0027

0.0159 -0.0046

546. (0.20132) BD*(1) S 1 - C 16

(52.48%) 0.7244* S 1 s(24.51%)p 3.02(73.97%)d 0.06(1.52%)

0.0000 0.0002 0.4937 0.0369 -0.0018

-0.0009 0.0000 0.0002 0.6562 0.0144

-0.0058 0.0048 0.0001 0.0001 0.5441

0.0048 -0.0064 -0.0079 0.0005 0.0000

0.1125 0.0008 -0.0028 -0.0068 0.0006

0.1014 0.0215 0.0315 0.0099 -0.0585

(47.52%) -0.6893* C 16 s(23.01%)p 3.34(76.91%)d 0.00(0.07%)

-0.0003 0.4792 -0.0226 0.0021 -0.0016

-0.6194 -0.0351 0.0036 0.0039 -0.6013

-0.0118 -0.0016 0.0035 -0.1500 0.0000

-0.0005 0.0007 0.0232 0.0054 0.0058

0.0018 -0.0113

547. (0.01400) BD*(1) O 4 - C 17

(35.88%) 0.5990* O 4 s(37.03%)p 1.70(62.84%)d 0.00(0.13%)

0.0000 0.6085 -0.0088 -0.0001 0.1678

-0.0017 -0.0008 -0.0004 -0.7719 0.0155

-0.0134 0.0004 0.0634 -0.0025 0.0007

0.0000 -0.0147 0.0013 -0.0059 -0.0276

-0.0172

(64.12%) -0.8008* C 17 s(30.78%)p 2.24(69.08%)d 0.00(0.15%)

0.0002 0.5547 -0.0100 0.0013 -0.2089

0.0305 0.0004 0.0029 0.7928 -0.0578

-0.0137 -0.0071 -0.1188 0.0054 0.0007

0.0012 -0.0135 0.0026 -0.0092 -0.0272

-0.0215

548. (0.41288) BD*(2) O 4 - C 17

(25.17%) 0.5017* O 4 s(0.01%)p99.99(99.89%)d 6.97(0.09%)

0.0000 -0.0115 -0.0011 0.0000 0.0621

-0.0003 -0.0020 0.0000 -0.0772 0.0004

-0.0018 0.0003 -0.9944 0.0051 -0.0121

0.0025 -0.0022 -0.0098 0.0282 -0.0014

-0.0057

(74.83%) -0.8651* C 17 s(0.01%)p99.99(99.52%)d35.15(0.47%)

0.0000 -0.0110 0.0035 0.0008 0.0573

0.0014 -0.0018 0.0008 -0.1251 0.0005

-0.0040 -0.0002 -0.9870 -0.0319 -0.0306

-0.0068 0.0060 0.0145 -0.0651 0.0073

0.0126

549. (0.01753) BD*(1) O 5 - C 10

(34.25%) 0.5853* O 5 s(33.04%)p 2.02(66.87%)d 0.00(0.09%)

0.0000 0.5748 -0.0020 0.0000 0.1534

-0.0050 0.0034 0.0022 -0.7918 0.0061

-0.0063 0.0016 0.1349 -0.0003 0.0009

-0.0005 -0.0006 -0.0002 -0.0100 -0.0239

-0.0153

(65.75%) -0.8108* C 10 s(25.90%)p 2.85(73.92%)d 0.01(0.18%)

-0.0002 0.5084 0.0235 -0.0002 -0.0004

-0.1673 -0.0013 0.0033 -0.0010 0.8275

-0.0525 -0.0107 -0.0079 -0.1525 0.0127

0.0012 0.0010 -0.0132 0.0012 -0.0121

-0.0318 -0.0219

550. (0.07829) BD*(1) O   5 - H 33

(20.93%)   0.4575* O   5 s(23.71%)p 3.21(76.21%)d 0.00(0.08%)

-0.0002 0.4869 -0.0042 -0.0003 -0.8496

0.0209 0.0138 0.0011 0.1930 -0.0392

0.0073 0.0020 0.0288 0.0068 -0.0008

-0.0007 0.0070 -0.0053 -0.0013 0.0218

-0.0147

(79.07%) -0.8892* H 33 s(99.76%)p 0.00(0.24%)

0.9986 0.0173 0.0482 -0.0102 -0.0017

551. (0.03003) BD*(1) N   6 - C   9

(38.42%)   0.6198* N   6 s(34.34%)p 1.91(65.62%)d 0.00(0.05%)

0.0001 -0.5858 0.0121 -0.0017 0.0000

0.1741 -0.0060 0.0030 0.0011 -0.7626

0.0104 0.0012 -0.0013 0.2098 -0.0087

-0.0010 0.0003 0.0004 0.0038 0.0077

0.0183 0.0077

(61.58%) -0.7848* C   9 s(27.78%)p 2.60(72.12%)d 0.00(0.10%)

0.0003 -0.5270 -0.0080 -0.0018 0.0005

-0.1793 -0.0166 0.0024 -0.0004 0.8134

-0.0375 0.0013 -0.0043 -0.1605 0.0010

0.0012 0.0008 0.0120 -0.0001 0.0106

0.0219 0.0169

552. (0.02303) BD*(1) N 6 - C 23

(35.78%) 0.5982* N 6 s(32.31%)p 2.09(67.65%)d 0.00(0.04%)

0.0001 -0.5682 0.0148 -0.0051 0.0002

-0.0612 -0.0057 0.0023 0.0018 0.2038

-0.0194 0.0063 0.0005 -0.7940 0.0172

-0.0060 0.0003 0.0047 -0.0090 0.0009

-0.0012 -0.0165

(64.22%) -0.8014* C 23 s(23.15%)p 3.31(76.71%)d 0.01(0.14%)

-0.0003 -0.4801 -0.0308 0.0026 0.0004

0.0016 -0.0102 0.0031 -0.0012 -0.1744

-0.0063 0.0051 -0.0013 0.8571 -0.0432

-0.0060 -0.0006 0.0003 0.0005 0.0126

0.0011 -0.0351

553. (0.05832) BD*(1) N 7 - C 17

(37.67%) 0.6138* N 7 s(36.65%)p 1.73(63.30%)d 0.00(0.05%)

0.0000 -0.6053 -0.0095 -0.0004 -0.0001

-0.5252 0.0090 -0.0045 -0.0013 -0.5965

0.0064 0.0068 -0.0019 0.0352 0.0004

-0.0010 0.0000 -0.0177 0.0013 0.0018

0.0025 0.0116

(62.33%) -0.7895* C 17 s(31.43%)p 2.18(68.46%)d 0.00(0.11%)

-0.0001 -0.5606 0.0094 0.0017 0.6164

-0.0178 -0.0007 -0.0014 0.5510 -0.0036

0.0016 0.0009 -0.0278 -0.0009 0.0001

0.0002 -0.0285 0.0023 0.0024 -0.0002

0.0155

554. (0.04199) BD*(1) N   7 - C 18

(37.69%)   0.6139* N   7 s(36.77%)p 1.72(63.19%)d 0.00(0.04%)

0.0000 -0.6064 -0.0038 -0.0009 -0.0002

0.7896 -0.0029 0.0006 0.0006 -0.0771

-0.0125 0.0001 0.0008 0.0479 0.0016

-0.0005 -0.0002 0.0040 -0.0028 0.0005

-0.0145 0.0114

(62.31%) -0.7894* C 18 s(27.44%)p 2.64(72.46%)d 0.00(0.10%)

0.0002 -0.5236 0.0138 0.0002 0.0015

-0.8488 0.0139 0.0023 0.0041 0.0186

-0.0167 0.0023 0.0000 -0.0571 0.0027

-0.0003 0.0004 0.0022 -0.0038 -0.0001

-0.0275 0.0154

555. (0.02067) BD*(1) N   7 - H 24

(27.85%)   0.5277* N   7 s(26.42%)p 2.78(73.53%)d 0.00(0.05%)

-0.0003 0.5139 -0.0100 -0.0020 -0.0003

0.3151 -0.0056 -0.0045 -0.0002 -0.7969

0.0058 -0.0012 0.0006 0.0301 0.0003

-0.0019 0.0001 -0.0117 0.0007 -0.0016

-0.0118 -0.0131

(72.15%) -0.8494* H 24 s(99.93%)p 0.00(0.07%)

0.9996 -0.0072 0.0027 -0.0083 0.0255

-0.0001

556. (0.02118) BD*(1) N   8 - C 18

(41.83%)   0.6467* N   8 s(34.47%)p 1.90(65.44%)d 0.00(0.08%)

0.0001 -0.5870 -0.0105 0.0044 0.0001

-0.3832 0.0228 0.0047 -0.0028 -0.7070

0.0029 0.0054 -0.0003 0.0843 0.0017

-0.0005 -0.0002 -0.0122 0.0017 0.0068

0.0212 0.0141

(58.17%) -0.7627* C 18 s(31.88%)p 2.13(68.03%)d 0.00(0.09%)

0.0000 -0.5645 0.0125 0.0001 -0.0001

0.3714 0.0206 -0.0048 0.0023 0.7293

-0.0381 -0.0039 -0.0029 -0.0924 0.0081

0.0001 0.0005 -0.0182 0.0022 0.0059

0.0172 0.0156

557. (0.45013) BD*(2) N 8 - C 18

(39.55%) 0.6289* N 8 s(0.00%)p 1.00(99.86%)d 0.00(0.14%)

0.0000 -0.0008 0.0007 0.0002 0.0000

0.0763 -0.0010 0.0008 -0.0001 -0.1580

0.0024 -0.0012 0.0006 -0.9836 0.0171

-0.0065 0.0039 0.0046 0.0129 -0.0321

0.0041 0.0113

(60.45%) -0.7775* C 18 s(0.00%)p 1.00(99.87%)d 0.00(0.13%)

0.0000 -0.0011 -0.0009 0.0009 0.0000

0.0635 0.0012 0.0026 0.0005 -0.1579

-0.0035 -0.0022 -0.0009 -0.9845 -0.0169

-0.0167 -0.0046 0.0013 0.0210 0.0274

-0.0060 -0.0052

558. (0.01265) BD*(1) N 8 - C 19

(40.21%) 0.6341* N 8 s(36.33%)p 1.75(63.59%)d 0.00(0.08%)

-0.0002 0.6025 0.0183 0.0026 -0.0002

-0.7914 0.0168 0.0075 -0.0010 -0.0762

0.0314 0.0000 -0.0030 -0.0496 -0.0036

0.0005 0.0004 -0.0100 0.0054 -0.0010

0.0223 -0.0132

(59.79%) -0.7733* C 19 s(31.49%)p 2.17(68.41%)d 0.00(0.10%)

0.0001 0.5603 -0.0305 0.0027 -0.0003

0.8203 -0.0515 -0.0070 -0.0017 0.0346

0.0520 -0.0077 -0.0002 0.0657 -0.0128

0.0006 -0.0002 0.0053 0.0041 -0.0001

0.0264 -0.0171

559. (0.03152) BD*(1) C   9 - C 10

(49.96%)   0.7069* C   9 s(38.12%)p 1.62(61.84%)d 0.00(0.05%)

0.0001 -0.6174 -0.0005 0.0020 -0.0002

-0.5901 -0.0030 0.0030 -0.0026 -0.5095

0.0076 0.0007 -0.0036 0.1024 -0.0019

-0.0018 -0.0003 -0.0169 0.0042 0.0031

-0.0015 0.0116

(50.04%) -0.7074* C 10 s(39.44%)p 1.53(60.53%)d 0.00(0.03%)

-0.0001 -0.6280 0.0040 -0.0003 0.0006

0.5970 0.0043 -0.0040 0.0010 0.4879

0.0101 -0.0074 0.0039 -0.1029 -0.0002

0.0002 -0.0013 -0.0151 0.0018 0.0017

-0.0025 0.0092

560. (0.29001) BD*(2) C   9 - C 10

(39.82%)   0.6311* C   9 s(0.00%)p 1.00(99.97%)d 0.00(0.03%)

-0.0001 0.0003 0.0041 0.0015 0.0004

-0.0031 0.0092 -0.0007 -0.0006 -0.1937

-0.0017 -0.0040 0.0005 -0.9806 -0.0225

-0.0048 -0.0017 -0.0038 -0.0105 -0.0133

0.0028 0.0040

(60.18%) -0.7757* C 10 s(0.00%)p 1.00(99.90%)d 0.00(0.09%)

0.0000 -0.0059 0.0014 0.0021 -0.0003

-0.0257 0.0033 -0.0026 0.0006 -0.1831

-0.0061 -0.0016 -0.0003 -0.9821 -0.0010

-0.0124 -0.0039 0.0037 0.0201 0.0212

-0.0044 -0.0078

561. (0.05583) BD*(1) C   9 - C 17

(48.73%)   0.6981* C   9 s(34.01%)p 1.94(65.94%)d 0.00(0.05%)

0.0000 0.5832 -0.0021 -0.0004 0.0000

-0.7868 0.0008 0.0015 -0.0004 0.1974

0.0042 -0.0022 -0.0011 -0.0364 0.0051

0.0010 0.0005 -0.0105 0.0013 -0.0019

0.0156 -0.0109

(51.27%) -0.7160* C 17 s(37.38%)p 1.67(62.59%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.6112 0.0117 -0.0003 0.7562

0.0324 -0.0089 0.0025 -0.2204 -0.0083

0.0006 -0.0008 0.0651 0.0019 0.0003

0.0005 -0.0124 0.0032 -0.0014 0.0125

-0.0072

562. (0.03537) BD*(1) C 10 - C 11

(50.86%)   0.7131* C 10 s(34.39%)p 1.91(65.57%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.5864 -0.0086 -0.0006 0.0007

0.7836 0.0191 -0.0074 0.0000 -0.2006

-0.0273 0.0072 -0.0029 0.0136 0.0050

-0.0022 0.0004 -0.0077 -0.0007 0.0000

0.0149 -0.0094

(49.14%) -0.7010* C 11 s(31.30%)p 2.19(68.65%)d 0.00(0.04%)

0.0000 0.5595 -0.0048 0.0000 0.0002

-0.7979 -0.0159 0.0061 0.0007 0.2223

-0.0116 0.0004 0.0019 -0.0083 0.0003

-0.0006 -0.0001 -0.0081 0.0012 0.0006

0.0153 -0.0111

563. (0.02372) BD*(1) C 11 - C 12

(47.98%) 0.6926* C 11 s(34.97%)p 1.86(65.00%)d 0.00(0.03%)

0.0001 -0.5914 -0.0019 0.0016 0.0003

-0.5695 -0.0113 0.0034 0.0001 -0.5601

0.0133 0.0002 -0.0021 -0.1076 0.0028

0.0004 -0.0009 -0.0142 -0.0025 -0.0036

-0.0009 0.0097

(52.02%) -0.7213* C 12 s(34.62%)p 1.89(65.34%)d 0.00(0.04%)

-0.0001 -0.5883 0.0051 -0.0003 -0.0015

0.5899 -0.0207 -0.0099 0.0006 0.5396

0.0130 -0.0103 0.0028 0.1158 0.0011

-0.0024 0.0005 -0.0163 -0.0032 -0.0045

0.0007 0.0116

564. (0.35880) BD*(2) C 11 - C 12

(47.38%) 0.6883* C 11 s(0.00%)p 1.00(99.98%)d 0.00(0.02%)

0.0002 -0.0026 0.0049 -0.0002 0.0000

0.0483 0.0017 0.0001 -0.0004 0.1435

0.0015 0.0012 -0.0007 -0.9883 0.0004

-0.0111 0.0003 0.0019 -0.0111 -0.0054

-0.0005 -0.0031

(52.62%) -0.7254* C 12 s(0.00%)p 1.00(99.95%)d 0.00(0.05%)

0.0000 -0.0005 -0.0023 -0.0010 0.0001

0.0424 0.0023 0.0020 0.0016 0.1645

0.0003 0.0030 0.0001 -0.9851 -0.0033

-0.0161 -0.0007 -0.0022 0.0043 0.0206

0.0034 0.0056

565. (0.03137) BD*(1) C 11 - C 16

(49.52%) 0.7037* C 11 s(33.67%)p 1.97(66.29%)d 0.00(0.03%)

0.0000 -0.5803 -0.0066 -0.0020 0.0001

-0.1892 -0.0055 0.0001 -0.0013 0.7847

-0.0017 -0.0049 0.0008 0.1062 -0.0036

-0.0002 0.0004 0.0057 0.0000 -0.0040

0.0131 0.0111

(50.48%) -0.7105* C 16 s(37.44%)p 1.67(62.52%)d 0.00(0.04%)

0.0000 -0.6118 -0.0103 -0.0013 -0.0013

0.2665 -0.0035 -0.0041 0.0012 -0.7386

0.0077 0.0056 -0.0063 -0.0924 -0.0004

0.0012 -0.0010 0.0098 0.0012 -0.0048

0.0113 0.0119

566. (0.01413) BD*(1) C 12 - C 13

(49.66%) 0.7047* C 12 s(36.42%)p 1.74(63.54%)d 0.00(0.04%)

0.0000 -0.6031 0.0214 0.0002 0.0003

-0.7732 0.0251 0.0094 -0.0002 0.1882

0.0363 -0.0069 -0.0010 -0.0016 0.0065

-0.0004 0.0001 0.0111 0.0003 -0.0004

-0.0126 0.0112

(50.34%) -0.7095* C 13 s(35.67%)p 1.80(64.29%)d 0.00(0.05%)

0.0000 -0.5971 0.0115 0.0003 -0.0004

0.7653 -0.0055 0.0130 0.0002 -0.2346

0.0431 0.0003 0.0000 -0.0032 0.0053

0.0002 -0.0001 0.0064 -0.0001 -0.0002

-0.0162 0.0123

567. (0.01334) BD*(1) C 12 - H 25

(38.16%) 0.6177* C 12 s(28.94%)p 2.45(71.02%)d 0.00(0.04%)

0.0004 -0.5375 -0.0214 -0.0002 0.0008

0.2233 0.0069 -0.0020 -0.0035 -0.8029

-0.0098 -0.0046 -0.0004 -0.1241 -0.0027

-0.0018 -0.0010 0.0111 0.0021 -0.0054

0.0139 0.0087

(61.84%) -0.7864* H 25 s(99.95%)p 0.00(0.05%)

-0.9998 -0.0017 -0.0008 -0.0066 0.0209

0.0023

568. (0.01577) BD*(1) C 13 - C 14

(50.02%) 0.7073* C 13 s(35.64%)p 1.80(64.32%)d 0.00(0.04%)

0.0000 0.5968 -0.0153 -0.0012 -0.0004

0.2313 -0.0439 -0.0009 0.0004 -0.7610

0.0078 -0.0126 0.0004 -0.0913 -0.0015

-0.0014 0.0000 -0.0062 -0.0006 0.0041

-0.0158 -0.0115

(49.98%) -0.7069* C 14 s(35.81%)p 1.79(64.14%)d 0.00(0.04%)

0.0000 0.5982 -0.0153 -0.0011 -0.0003

-0.1772 -0.0356 -0.0069 0.0004 0.7761

-0.0276 0.0103 0.0000 0.0746 -0.0051

0.0011 0.0000 -0.0107 -0.0008 0.0032

-0.0134 -0.0116

569. (0.31669) BD*(2) C 13 - C 14

(49.99%) 0.7070* C 13 s(0.00%)p 1.00(99.95%)d 0.00(0.05%)

0.0000 -0.0005 -0.0015 -0.0011 -0.0002

0.0351 0.0007 -0.0013 0.0001 0.1291

0.0017 -0.0011 -0.0003 -0.9906 -0.0137

0.0122 0.0000 -0.0022 0.0083 0.0197

0.0022 0.0043

(50.01%) -0.7072* C 14 s(0.00%)p 1.00(99.95%)d 0.00(0.05%)

-0.0001 -0.0045 -0.0012 -0.0004 0.0000

0.0446 0.0011 -0.0006 0.0001 0.1090

0.0022 -0.0010 0.0001 -0.9926 -0.0138

0.0122 0.0004 -0.0013 0.0172 -0.0134

-0.0025 -0.0013

570. (0.01346) BD*(1) C 13 - H 26

(39.07%) 0.6250* C 13 s(28.67%)p 2.49(71.29%)d 0.00(0.04%)

0.0004 -0.5350 -0.0224 -0.0012 -0.0001

-0.5973 -0.0122 0.0042 -0.0007 -0.5884

-0.0118 0.0036 -0.0006 -0.0975 -0.0028

0.0006 -0.0002 -0.0183 -0.0032 -0.0029

-0.0001 0.0083

(60.93%) -0.7806* H 26 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

-0.9998 -0.0007 -0.0009 0.0148 0.0147

0.0022

571. (0.01626) BD*(1) C 14 - C 15

(50.62%) 0.7115* C 14 s(35.46%)p 1.82(64.49%)d 0.00(0.05%)

0.0001 0.5954 -0.0112 -0.0002 0.0003

-0.5509 -0.0170 -0.0114 -0.0002 -0.5755

0.0403 -0.0062 -0.0007 -0.0906 0.0040

-0.0014 -0.0001 0.0171 0.0030 0.0028

0.0030 -0.0119

(49.38%) -0.7027* C 15 s(36.26%)p 1.76(63.70%)d 0.00(0.04%)

-0.0001 0.6020 0.0145 -0.0034 0.0002

0.5817 -0.0387 -0.0029 0.0010 0.5337

0.0219 -0.0118 -0.0006 0.1083 0.0004

-0.0010 0.0000 0.0159 0.0032 0.0037

-0.0030 -0.0111

572. (0.01332) BD*(1) C 14 - H 27

(39.06%) 0.6250* C 14 s(28.69%)p 2.48(71.26%)d 0.00(0.04%)

0.0004 -0.5352 -0.0219 -0.0012 0.0000

-0.8129 -0.0157 0.0056 -0.0007 0.2270

0.0048 -0.0009 0.0000 -0.0091 -0.0005

0.0001 -0.0002 0.0100 -0.0005 0.0004

-0.0156 0.0087

(60.94%) -0.7806* H 27 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

-0.9998 0.0006 -0.0009 0.0202 -0.0059

0.0002

573. (0.02180) BD*(1) C 15 - C 16

(51.26%) 0.7160* C 15 s(35.04%)p 1.85(64.92%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.5916 0.0175 0.0024 0.0003

-0.7809 0.0222 0.0093 -0.0004 0.1913

0.0294 -0.0043 0.0019 -0.0371 0.0060

0.0001 0.0001 -0.0098 0.0016 0.0000

0.0134 -0.0115

(48.74%) -0.6981* C 16 s(39.54%)p 1.53(60.42%)d 0.00(0.03%)

0.0000 0.6284 0.0223 -0.0024 -0.0001

0.7318 -0.0127 -0.0013 0.0062 -0.2594

0.0266 -0.0005 -0.0012 0.0229 0.0019

-0.0007 0.0003 -0.0077 0.0015 0.0000

0.0132 -0.0101

574. (0.36149) BD*(2) C 15 - C 16

(54.81%) 0.7403* C 15 s(0.00%)p 1.00(99.94%)d 0.00(0.06%)

0.0001 0.0047 -0.0020 -0.0002 0.0003

-0.0739 0.0018 -0.0003 0.0001 -0.1255

0.0049 0.0002 0.0007 0.9889 0.0023

0.0150 0.0008 0.0017 -0.0169 0.0158

0.0038 0.0007

(45.19%) -0.6723* C 16 s(0.01%)p 1.00(99.98%)d 0.00(0.01%)

-0.0002 0.0010 -0.0070 -0.0009 -0.0001

-0.0866 -0.0052 -0.0025 -0.0002 -0.1549

0.0063 0.0007 0.0004 0.9838 -0.0164

0.0082 -0.0034 -0.0011 0.0115 -0.0024

-0.0007 0.0018

575. (0.01452) BD*(1) C 15 - H 28

(37.98%) 0.6163* C 15 s(28.71%)p 2.48(71.25%)d 0.00(0.04%)

-0.0003 0.5352 -0.0249 0.0009 -0.0005

0.2095 -0.0005 0.0037 0.0023 -0.8125

-0.0175 -0.0020 0.0005 -0.0899 -0.0035

-0.0014 -0.0003 -0.0067 -0.0009 0.0040

-0.0163 -0.0094

(62.02%) -0.7875* H 28 s(99.95%)p 0.00(0.05%)

0.9998 0.0014 0.0007 -0.0046 0.0213

0.0010

576. (0.03250) BD*(1) C 18 - C 22

(49.04%) 0.7003* C 18 s(40.48%)p 1.47(59.49%)d 0.00(0.03%)

0.0000 -0.6360 -0.0151 -0.0001 -0.0008

0.3690 0.0200 -0.0041 0.0011 -0.6641

-0.0021 0.0061 -0.0033 0.1310 0.0017

-0.0010 0.0007 0.0127 -0.0022 0.0040

0.0090 0.0069

(50.96%) -0.7139* C 22 s(33.18%)p 2.01(66.76%)d 0.00(0.06%)

0.0000 -0.5760 0.0053 -0.0015 -0.0010

-0.4415 0.0284 0.0023 0.0003 0.6722

0.0041 -0.0086 0.0026 -0.1411 0.0016

0.0016 -0.0004 0.0157 -0.0035 0.0066

0.0102 0.0126

577. (0.02402) BD*(1) C 19 - C 20

(50.57%)   0.7111* C 19 s(39.19%)p 1.55(60.76%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.6260 -0.0075 -0.0060 -0.0003

-0.4413 0.0410 0.0046 -0.0010 0.6261

0.0120 -0.0129 0.0007 -0.1374 0.0015

0.0024 -0.0002 -0.0148 0.0030 -0.0053

-0.0086 -0.0091

(49.43%) -0.7030* C 20 s(34.73%)p 1.88(65.22%)d 0.00(0.05%)

0.0000 0.5892 -0.0120 -0.0013 -0.0001

0.4319 0.0186 -0.0100 -0.0003 -0.6662

0.0408 0.0061 0.0000 0.1399 -0.0049

-0.0019 0.0000 -0.0174 0.0044 -0.0053

-0.0028 -0.0118

578. (0.30631) BD*(2) C 19 - C 20

(54.17%)   0.7360* C 19 s(0.00%)p 1.00(99.95%)d 0.00(0.05%)

0.0000 -0.0003 0.0006 0.0006 0.0001

-0.0851 -0.0016 -0.0008 0.0000 0.1561

0.0036 0.0020 0.0003 0.9834 0.0237

0.0115 0.0013 -0.0018 0.0008 0.0220

-0.0037 -0.0060

(45.83%) -0.6770* C 20 s(0.00%)p 1.00(99.96%)d 0.00(0.04%)

0.0000 -0.0015 0.0006 0.0004 0.0001

-0.0831 -0.0021 -0.0008 -0.0002 0.1514

0.0039 0.0018 0.0002 0.9843 0.0251

0.0122 0.0015 0.0035 0.0192 -0.0056

-0.0005 0.0047

579. (0.02258) BD*(1) C 19 - H 29

(39.97%) 0.6322* C 19 s(29.33%)p 2.41(70.62%)d 0.00(0.05%)

-0.0005 0.5409 0.0266 0.0037 0.0004

-0.3436 -0.0201 0.0003 -0.0017 -0.7610

-0.0172 -0.0028 0.0006 0.0912 0.0013

0.0006 -0.0002 0.0143 -0.0023 -0.0033

-0.0140 -0.0077

(60.03%) -0.7748* H 29 s(99.95%)p 0.00(0.05%)

0.9998 -0.0019 0.0007 0.0095 0.0198

-0.0022

580. (0.01599) BD*(1) C 20 - C 21

(50.11%) 0.7079* C 20 s(35.67%)p 1.80(64.29%)d 0.00(0.04%)

0.0000 0.5970 -0.0156 0.0007 0.0001

0.3312 0.0257 -0.0101 -0.0003 0.7241

-0.0351 -0.0080 0.0007 -0.0825 0.0075

0.0003 -0.0001 0.0152 -0.0011 -0.0031

-0.0077 -0.0121

(49.89%) -0.7063* C 21 s(35.90%)p 1.78(64.06%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.5989 -0.0165 -0.0017 -0.0008

-0.3962 0.0434 0.0018 -0.0003 -0.6899

-0.0033 0.0118 0.0005 0.0749 0.0042

-0.0017 -0.0001 0.0121 -0.0011 -0.0038

-0.0114 -0.0113

581. (0.01338) BD*(1) C 20 - H 30

(39.12%) 0.6255* C 20 s(29.59%)p 2.38(70.37%)d 0.00(0.04%)

-0.0004 0.5435 0.0225 0.0010 0.0000

-0.8335 -0.0137 -0.0043 0.0005 -0.0727

-0.0016 0.0004 0.0000 -0.0583 -0.0007

-0.0003 0.0001 0.0032 0.0021 0.0006

0.0173 -0.0087

(60.88%) -0.7803* H 30 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

0.9998 -0.0007 0.0009 0.0205 0.0023

0.0014

582. (0.01510) BD*(1) C 21 - C 22

(50.30%) 0.7092* C 21 s(35.62%)p 1.81(64.33%)d 0.00(0.04%)

0.0001 0.5967 -0.0111 0.0005 0.0006

0.7959 -0.0151 -0.0120 0.0008 0.0666

-0.0413 0.0022 -0.0001 0.0572 0.0052

-0.0012 0.0000 -0.0008 0.0033 -0.0008

0.0167 -0.0122

(49.70%) -0.7050* C 22 s(35.92%)p 1.78(64.04%)d 0.00(0.04%)

-0.0001 0.5989 -0.0219 0.0000 -0.0003

-0.7972 0.0210 0.0094 0.0003 -0.0216

-0.0358 0.0066 0.0011 -0.0507 0.0076

-0.0003 -0.0001 0.0058 0.0015 -0.0001

0.0155 -0.0109

583. (0.29681) BD*(2) C 21 - C 22

(52.73%) 0.7261* C 21 s(0.00%)p 1.00(99.94%)d 0.00(0.06%)

0.0000 -0.0025 0.0005 -0.0004 -0.0001

-0.0816 -0.0007 -0.0009 -0.0001 0.1516

0.0024 0.0019 0.0000 0.9845 0.0161

0.0123 0.0008 0.0044 0.0206 -0.0104

0.0001 0.0058

(47.27%) -0.6875* C 22 s(0.00%)p 1.00(99.94%)d 0.00(0.06%)

0.0001 -0.0018 0.0009 0.0000 0.0000

-0.0683 -0.0011 -0.0021 -0.0003 0.1602

0.0024 0.0023 0.0001 0.9842 0.0129

0.0136 0.0003 -0.0014 -0.0167 -0.0164

0.0041 0.0025

584. (0.01418) BD*(1) C 21 - H 31

(39.28%)   0.6267* C 21 s(28.47%)p 2.51(71.49%)d 0.00(0.04%)

0.0004 -0.5330 -0.0234 -0.0009 -0.0003

0.4471 0.0089 0.0038 0.0010 -0.7028

-0.0162 -0.0048 -0.0008 0.1440 0.0032

0.0009 0.0002 0.0161 -0.0029 0.0049

0.0083 0.0082

(60.72%) -0.7792* H 31 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

-0.9998 0.0008 -0.0009 -0.0105 0.0179

-0.0036

585. (0.01495) BD*(1) C 22 - H 32

(37.21%)   0.6100* C 22 s(30.90%)p 2.23(69.06%)d 0.00(0.04%)

0.0004 -0.5555 -0.0209 0.0014 0.0006

-0.4026 -0.0040 0.0046 0.0041 -0.7215

-0.0084 -0.0032 -0.0006 0.0885 0.0012

0.0011 0.0005 -0.0151 0.0018 0.0030

0.0067 0.0094

(62.79%) -0.7924* H 32 s(99.95%)p 0.00(0.05%)

-0.9998 -0.0020 -0.0005 0.0121 0.0183

-0.0020

586. (0.00655) BD*(1) C 23 - H 34

(38.39%) 0.6196* C 23 s(25.86%)p 2.86(74.08%)d 0.00(0.06%)

0.0001 -0.5085 0.0031 -0.0013 -0.0001

-0.3082 -0.0053 0.0014 -0.0005 0.7942

0.0111 0.0020 0.0000 -0.1216 0.0101

-0.0049 0.0011 0.0137 -0.0008 0.0030

0.0152 0.0135

(61.61%) -0.7849* H 34 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

-0.9998 -0.0011 0.0001 0.0070 -0.0193

0.0017

587. (0.01083) BD*(1) C 23 - H 35

(39.59%) 0.6292* C 23 s(25.22%)p 2.96(74.71%)d 0.00(0.06%)

0.0001 -0.5022 0.0055 -0.0006 -0.0001

0.8117 0.0129 -0.0012 0.0005 -0.0512

-0.0082 0.0034 -0.0007 -0.2921 0.0088

-0.0037 0.0011 0.0036 0.0124 -0.0019

-0.0185 0.0100

(60.41%) -0.7772* H 35 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

-0.9998 -0.0016 0.0004 -0.0182 0.0003

0.0062

588. (0.01541) BD*(1) C 23 - H 36

(40.02%) 0.6326* C 23 s(25.85%)p 2.87(74.09%)d 0.00(0.06%)

0.0000 -0.5083 0.0096 0.0004 0.0001

-0.4952 -0.0040 -0.0012 -0.0010 -0.5788

-0.0141 -0.0013 -0.0001 -0.4002 0.0144

-0.0049 0.0002 -0.0159 -0.0115 -0.0142

0.0029 0.0068

(59.98%) -0.7744* H 36 s(99.96%)p 0.00(0.04%)

-0.9998 -0.0035 0.0001 0.0106 0.0132

0.0085

NHO Directionality and "Bond Bending" (deviations from line of nuclear centers)

[Thresholds for printing: angular deviation > 1.0 degree]

hybrid p-character > 25.0%

orbital occupancy > 0.10e

NBO	Line of Centers Theta	Phi	Hybrid 1 Theta	Phi	Dev	Hybrid 2 Theta	Phi	Dev
1. BD (1) S 1 - O 2	68.9	287.5	72.5	284.6	4.5	108.7	107.9	2.4
2. BD (1) S 1 - O 3	161.6	166.4	161.8	181.2	4.6	17.0	352.8	2.4
3. BD (1) S 1 - N 6	55.0	152.7	55.1	158.2	4.5	121.8	334.4	3.5
4. BD (1) S 1 - C 16	80.0	42.7	83.1	38.6	5.0	--	--	--
5. BD (1) O 4 - C 17	83.6	283.0	85.5	282.1	2.2	98.6	103.8	2.3
6. BD (2) O 4 - C 17	83.6	283.0	5.6	127.4	88.7	7.6	114.1	89.0
7. BD (1) O 5 - C 10	80.2	279.9	80.5	281.0	1.1	100.1	102.4	2.4
8. BD (1) O 5 - H 33	86.9	173.5	87.7	168.7	4.9	--	--	--
9. BD (1) N 6 - C 9	102.4	102.2	104.6	102.9	2.2	78.8	284.1	2.2
10. BD (1) N 6 - C 23	12.0	280.3	14.4	288.2	3.0	167.6	87.8	2.7
11. BD (1) N 7 - C 17	92.7	46.6	92.5	48.3	1.7	88.0	222.7	4.0
12. BD (1) N 7 - C 18	93.6	177.0	93.5	173.6	3.4	86.3	359.7	2.7
13. BD (1) N 7 - H 24	86.9	290.5	88.1	291.1	1.3	--	--	--

14. BD (1) N 8 - C 18 96.5 63.7 -- -- -- 83.9 240.4 3.3

15. BD (2) N 8 - C 18 96.5 63.7 10.2 115.9 90.2 9.9 112.4 90.1

16. BD (1) N 8 - C 19 94.5 182.0 93.9 183.6 1.7 86.0 5.9 3.9

17. BD (1) C 9 - C 10 97.7 42.1 97.2 40.4 1.7 82.4 219.6 2.5

18. BD (2) C 9 - C 10 97.7 42.1 168.8 271.4 89.6 10.9 82.7 90.6

19. BD (1) C 9 - C 17 93.9 162.7 92.1 165.8 3.6 85.2 343.7 1.3

22. BD (2) C 11 - C 12 82.0 43.5 171.2 71.1 90.2 9.9 253.9 89.5

23. BD (1) C 11 - C 16 97.3 286.0 97.3 284.1 1.9 83.2 109.6 3.6

24. BD (1) C 12 - C 13 90.1 344.7 90.3 343.7 1.0 90.2 166.1 1.5

25. BD (1) C 12 - H 25 81.1 106.8 81.3 105.4 1.4 -- -- --

26. BD (1) C 13 - C 14 95.8 284.9 96.8 283.7 1.5 84.9 106.1 1.4

27. BD (2) C 13 - C 14 95.8 284.9 7.7 255.1 89.2 6.8 247.7 89.6

29. BD (1) C 14 - C 15 97.1 224.4 96.3 223.1 1.5 82.0 45.1 1.1

31. BD (1) C 15 - C 16 92.4 164.0 -- -- -- 88.2 342.1 2.1

32. BD (2) C 15 - C 16 92.4 164.0 7.9 238.9 90.3 169.8 57.3 89.4

33. BD (1) C 15 - H 28 95.5 283.4 96.3 284.5 1.4 -- -- --

34. BD (1) C 18 - C 22 99.8 120.4 -- -- -- 80.0 301.5 1.0

35. BD (1) C 19 - C 20 100.1 125.2 100.2 122.4 2.8 -- -- --

36. BD (2) C 19 - C 20 100.1 125.2 10.2 118.4 89.9 170.1 298.7 90.2

40. BD (1) C 21 - C 22 86.1 3.3 85.5 2.0 1.5 -- -- --

41. BD (2) C 21 - C 22 86.1 3.3 170.1 298.1 89.7 169.9 293.5 89.6

45. BD (1) C 23 - H 35 69.3 176.8 70.9 176.1 1.8 -- -- --

46. BD (1) C 23 - H 36 60.8 49.9 63.3 49.9 2.6 -- -- --

75. LP (2) O 2 -- -- 65.8 26.2 -- -- -- --

76. LP (3) O 2 -- -- 148.5 342.6 -- -- -- --

78. LP (2) O 3 -- -- 103.7 30.8 -- -- -- --

79. LP (3) O 3 -- -- 79.4 117.8 -- -- -- --

80. LP (1) O 4 -- -- 96.4 126.3 -- -- -- --

81.	LP (2) O 4	--	--	88.3	22.1	--	--	--	--
82.	LP (1) O 5	--	--	102.2	48.9	--	--	--	--
83.	LP (2) O 5	--	--	11.8	67.6	--	--	--	--
84.	LP (1) N 6	--	--	110.4	216.8	--	--	--	--
85.	LP (1) N 7	--	--	3.5	121.5	--	--	--	--
86.	LP (1) N 8	--	--	79.9	304.3	--	--	--	--
543.	BD*(1) S 1 - O 2	68.9	287.5	72.5	284.6	4.5	108.7	107.9	2.4
544.	BD*(1) S 1 - O 3	161.6	166.4	161.8	181.2	4.6	17.0	352.8	2.4
545.	BD*(1) S 1 - N 6	55.0	152.7	55.1	158.2	4.5	121.8	334.4	3.5
546.	BD*(1) S 1 - C 16	80.0	42.7	83.1	38.6	5.0	--	--	--
548.	BD*(2) O 4 - C 17	83.6	283.0	5.6	127.4	88.7	7.6	114.1	89.0
557.	BD*(2) N 8 - C 18	96.5	63.7	10.2	115.9	90.2	9.9	112.4	90.1
560.	BD*(2) C 9 - C 10	97.7	42.1	168.8	271.4	89.6	10.9	82.7	90.6
564.	BD*(2) C 11 - C 12	82.0	43.5	171.2	71.1	90.2	9.9	253.9	89.5
569.	BD*(2) C 13 - C 14	95.8	284.9	7.7	255.1	89.2	6.8	247.7	89.6
574.	BD*(2) C 15 - C 16	92.4	164.0	7.9	238.9	90.3	169.8	57.3	89.4
578.	BD*(2) C 19 - C 20	100.1	125.2	10.2	118.4	89.9	170.1	298.7	90.2
583.	BD*(2) C 21 - C 22	86.1	3.3	170.1	298.1	89.7	169.9	293.5	89.6

Second Order Perturbation Theory Analysis of Fock Matrix in NBO Basis

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

Donor NBO (i)	Acceptor NBO (j)	E(2) kcal/mol	E(j)-E(i) a.u.	F(i,j) a.u.

==========

within unit 1

1. BD (1) S 1 - O 2	/ 87. RY*(1) S 1	0.53	1.79	0.028
1. BD (1) S 1 - O 2	/ 89. RY*(3) S 1	0.56	1.89	0.029
1. BD (1) S 1 - O 2	/ 98. RY*(12) S 1	1.75	1.37	0.044
1. BD (1) S 1 - O 2	/ 99. RY*(13) S 1	46.53	0.10	0.060
1. BD (1) S 1 - O 2	/101. RY*(15) S 1	1.28	1.37	0.038
1. BD (1) S 1 - O 2	/112. RY*(5) O 2	0.67	1.73	0.031
1. BD (1) S 1 - O 2	/142. RY*(1) O 4	3.14	0.69	0.042
1. BD (1) S 1 - O 2	/200. RY*(10) N 7	0.77	2.02	0.035
1. BD (1) S 1 - O 2	/231. RY*(7) C 9	1.05	1.95	0.041
1. BD (1) S 1 - O 2	/234. RY*(10) C 9	0.81	2.15	0.037
1. BD (1) S 1 - O 2	/235. RY*(11) C 9	8.40	0.58	0.063
1. BD (1) S 1 - O 2	/237. RY*(13) C 9	2.06	2.59	0.065
1. BD (1) S 1 - O 2	/252. RY*(11) C 10	1.76	1.29	0.043
1. BD (1) S 1 - O 2	/270. RY*(12) C 11	0.82	1.97	0.036
1. BD (1) S 1 - O 2	/345. RY*(2) C 16	0.58	1.97	0.030
1. BD (1) S 1 - O 2	/370. RY*(10) C 17	0.51	4.13	0.041
1. BD (1) S 1 - O 2	/373. RY*(13) C 17	0.61	2.64	0.036
1. BD (1) S 1 - O 2	/392. RY*(16) C 18	0.52	1.39	0.024
1. BD (1) S 1 - O 2	/462. RY*(1) C 23	3.77	0.91	0.052
1. BD (1) S 1 - O 2	/465. RY*(4) C 23	1.24	1.73	0.041
1. BD (1) S 1 - O 2	/466. RY*(5) C 23	6.93	0.43	0.049
1. BD (1) S 1 - O 2	/469. RY*(8) C 23	2.56	1.80	0.061
1. BD (1) S 1 - O 2	/471. RY*(10) C 23	2.76	1.58	0.059
1. BD (1) S 1 - O 2	/476. RY*(15) C 23	0.77	2.03	0.035
1. BD (1) S 1 - O 2	/477. RY*(16) C 23	3.29	2.01	0.073
1. BD (1) S 1 - O 2	/497. RY*(4) H 27	5.36	1.11	0.069
1. BD (1) S 1 - O 2	/529. RY*(2) H 34	3.22	1.20	0.056

1. BD (1) S 1 - O 2	/534. RY*(2) H 35	1.36	1.89	0.045
1. BD (1) S 1 - O 2	/543. BD*(1) S 1 - O 2	0.68	1.29	0.027
1. BD (1) S 1 - O 2	/544. BD*(1) S 1 - O 3	0.97	1.29	0.033
1. BD (1) S 1 - O 2	/545. BD*(1) S 1 - N 6	1.53	1.13	0.040
1. BD (1) S 1 - O 2	/546. BD*(1) S 1 - C 16	0.68	1.16	0.026
1. BD (1) S 1 - O 2	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.70	1.36	0.028
1. BD (1) S 1 - O 2	/565. BD*(1) C 11 - C 16	0.79	1.54	0.031
1. BD (1) S 1 - O 2	/573. BD*(1) C 15 - C 16	16.07	0.29	0.061
1. BD (1) S 1 - O 2	/578. BD*(2) C 19 - C 20	0.90	0.75	0.025
1. BD (1) S 1 - O 2	/579. BD*(1) C 19 - H 29	5.94	0.46	0.047
2. BD (1) S 1 - O 3	/543. BD*(1) S 1 - O 2	0.97	1.28	0.032
2. BD (1) S 1 - O 3	/544. BD*(1) S 1 - O 3	0.69	1.28	0.027
2. BD (1) S 1 - O 3	/545. BD*(1) S 1 - N 6	1.44	1.12	0.038
2. BD (1) S 1 - O 3	/546. BD*(1) S 1 - C 16	0.64	1.15	0.025
2. BD (1) S 1 - O 3	/552. BD*(1) N 6 - C 23	1.03	1.27	0.032
2. BD (1) S 1 - O 3	/573. BD*(1) C 15 - C 16	1.31	0.27	0.017
2. BD (1) S 1 - O 3	/574. BD*(2) C 15 - C 16	0.53	1.01	0.023
3. BD (1) S 1 - N 6	/ 88. RY*(2) S 1	1.28	1.49	0.039
3. BD (1) S 1 - N 6	/ 95. RY*(9) S 1	0.59	1.79	0.029
3. BD (1) S 1 - N 6	/ 98. RY*(12) S 1	12.69	1.14	0.108
3. BD (1) S 1 - N 6	/100. RY*(14) S 1	3.51	1.47	0.065
3. BD (1) S 1 - N 6	/101. RY*(15) S 1	7.81	1.14	0.085
3. BD (1) S 1 - N 6	/112. RY*(5) O 2	5.34	1.49	0.080
3. BD (1) S 1 - N 6	/114. RY*(7) O 2	1.75	2.42	0.058
3. BD (1) S 1 - N 6	/130. RY*(6) O 3	5.40	1.40	0.078
3. BD (1) S 1 - N 6	/131. RY*(7) O 3	0.52	2.64	0.033
3. BD (1) S 1 - N 6	/142. RY*(1) O 4	27.98	0.45	0.101
3. BD (1) S 1 - N 6	/190. RY*(17) N 6	1.73	32.29	0.212

3. BD (1) S 1 - N 6	/191. RY*(1) N 7	1.42	1.36	0.039
3. BD (1) S 1 - N 6	/195. RY*(5) N 7	3.81	1.31	0.063
3. BD (1) S 1 - N 6	/198. RY*(8) N 7	1.35	2.32	0.050
3. BD (1) S 1 - N 6	/199. RY*(9) N 7	1.99	3.09	0.070
3. BD (1) S 1 - N 6	/200. RY*(10) N 7	4.67	1.79	0.082
3. BD (1) S 1 - N 6	/208. RY*(1) N 8	1.41	1.39	0.040
3. BD (1) S 1 - N 6	/212. RY*(5) N 8	0.53	2.29	0.031
3. BD (1) S 1 - N 6	/216. RY*(9) N 8	0.56	3.60	0.040
3. BD (1) S 1 - N 6	/225. RY*(1) C 9	1.95	2.02	0.056
3. BD (1) S 1 - N 6	/229. RY*(5) C 9	0.51	2.64	0.033
3. BD (1) S 1 - N 6	/230. RY*(6) C 9	1.65	1.87	0.050
3. BD (1) S 1 - N 6	/231. RY*(7) C 9	7.93	1.72	0.105
3. BD (1) S 1 - N 6	/232. RY*(8) C 9	3.87	2.04	0.080
3. BD (1) S 1 - N 6	/233. RY*(9) C 9	4.30	2.94	0.101
3. BD (1) S 1 - N 6	/234. RY*(10) C 9	6.97	1.92	0.104
3. BD (1) S 1 - N 6	/235. RY*(11) C 9	76.36	0.35	0.147
3. BD (1) S 1 - N 6	/237. RY*(13) C 9	13.16	2.35	0.158
3. BD (1) S 1 - N 6	/238. RY*(14) C 9	0.80	2.91	0.043
3. BD (1) S 1 - N 6	/242. RY*(1) C 10	2.18	1.63	0.053
3. BD (1) S 1 - N 6	/245. RY*(4) C 10	0.74	2.30	0.037
3. BD (1) S 1 - N 6	/252. RY*(11) C 10	11.41	1.06	0.099
3. BD (1) S 1 - N 6	/253. RY*(12) C 10	0.54	2.28	0.031
3. BD (1) S 1 - N 6	/256. RY*(15) C 10	0.51	3.77	0.039
3. BD (1) S 1 - N 6	/260. RY*(2) C 11	0.84	2.03	0.037
3. BD (1) S 1 - N 6	/265. RY*(7) C 11	0.73	2.37	0.037
3. BD (1) S 1 - N 6	/267. RY*(9) C 11	2.91	1.97	0.068
3. BD (1) S 1 - N 6	/268. RY*(10) C 11	1.64	2.67	0.060
3. BD (1) S 1 - N 6	/270. RY*(12) C 11	6.52	1.73	0.096

3. BD (1) S 1 - N 6	/273. RY*(15) C 11	2.14	2.38	0.064
3. BD (1) S 1 - N 6	/274. RY*(16) C 11	0.68	3.40	0.043
3. BD (1) S 1 - N 6	/279. RY*(4) C 12	1.00	1.73	0.037
3. BD (1) S 1 - N 6	/281. RY*(6) C 12	0.62	1.91	0.031
3. BD (1) S 1 - N 6	/286. RY*(11) C 12	3.11	1.57	0.063
3. BD (1) S 1 - N 6	/287. RY*(12) C 12	0.60	2.66	0.036
3. BD (1) S 1 - N 6	/299. RY*(7) C 13	0.61	2.48	0.035
3. BD (1) S 1 - N 6	/330. RY*(4) C 15	0.95	1.63	0.035
3. BD (1) S 1 - N 6	/348. RY*(5) C 16	1.87	2.09	0.056
3. BD (1) S 1 - N 6	/351. RY*(8) C 16	0.81	2.25	0.038
3. BD (1) S 1 - N 6	/352. RY*(9) C 16	0.54	2.45	0.033
3. BD (1) S 1 - N 6	/357. RY*(14) C 16	1.65	2.48	0.057
3. BD (1) S 1 - N 6	/358. RY*(15) C 16	2.41	2.12	0.064
3. BD (1) S 1 - N 6	/365. RY*(5) C 17	1.35	1.70	0.043
3. BD (1) S 1 - N 6	/370. RY*(10) C 17	1.58	3.90	0.071
3. BD (1) S 1 - N 6	/371. RY*(11) C 17	1.21	2.56	0.050
3. BD (1) S 1 - N 6	/372. RY*(12) C 17	1.10	3.71	0.057
3. BD (1) S 1 - N 6	/373. RY*(13) C 17	4.53	2.41	0.094
3. BD (1) S 1 - N 6	/383. RY*(7) C 18	2.79	1.51	0.058
3. BD (1) S 1 - N 6	/387. RY*(11) C 18	0.89	4.70	0.058
3. BD (1) S 1 - N 6	/388. RY*(12) C 18	0.65	2.98	0.040
3. BD (1) S 1 - N 6	/392. RY*(16) C 18	3.53	1.16	0.057
3. BD (1) S 1 - N 6	/395. RY*(2) C 19	2.33	1.58	0.054
3. BD (1) S 1 - N 6	/462. RY*(1) C 23	31.44	0.68	0.131
3. BD (1) S 1 - N 6	/463. RY*(2) C 23	2.16	1.24	0.047
3. BD (1) S 1 - N 6	/465. RY*(4) C 23	7.59	1.50	0.096
3. BD (1) S 1 - N 6	/466. RY*(5) C 23	124.67	0.20	0.141
3. BD (1) S 1 - N 6	/469. RY*(8) C 23	16.14	1.56	0.143

3. BD (1) S 1 - N 6	/471. RY*(10) C 23	16.99	1.35	0.136
3. BD (1) S 1 - N 6	/473. RY*(12) C 23	0.57	2.63	0.035
3. BD (1) S 1 - N 6	/474. RY*(13) C 23	1.11	3.53	0.056
3. BD (1) S 1 - N 6	/476. RY*(15) C 23	4.25	1.80	0.079
3. BD (1) S 1 - N 6	/477. RY*(16) C 23	24.33	1.78	0.187
3. BD (1) S 1 - N 6	/479. RY*(1) H 24	0.68	1.42	0.028
3. BD (1) S 1 - N 6	/496. RY*(3) H 27	0.58	2.29	0.033
3. BD (1) S 1 - N 6	/497. RY*(4) H 27	41.28	0.88	0.171
3. BD (1) S 1 - N 6	/506. RY*(3) H 29	2.15	3.07	0.073
3. BD (1) S 1 - N 6	/529. RY*(2) H 34	21.81	0.96	0.130
3. BD (1) S 1 - N 6	/530. RY*(3) H 34	0.74	2.51	0.039
3. BD (1) S 1 - N 6	/533. RY*(1) H 35	3.12	1.50	0.061
3. BD (1) S 1 - N 6	/534. RY*(2) H 35	8.24	1.66	0.105
3. BD (1) S 1 - N 6	/542. RY*(5) H 36	1.43	2.53	0.054
3. BD (1) S 1 - N 6	/543. BD*(1) S 1 - O 2	2.77	1.06	0.050
3. BD (1) S 1 - N 6	/544. BD*(1) S 1 - O 3	2.36	1.06	0.046
3. BD (1) S 1 - N 6	/545. BD*(1) S 1 - N 6	1.17	0.90	0.031
3. BD (1) S 1 - N 6	/546. BD*(1) S 1 - C 16	1.07	0.93	0.029
3. BD (1) S 1 - N 6	/560. BD*(2) C 9 - C 10	0.80	0.78	0.024
3. BD (1) S 1 - N 6	/561. BD*(1) C 9 - C 17	1.54	1.21	0.039
3. BD (1) S 1 - N 6	/573. BD*(1) C 15 - C 16	678.63	0.05	0.169
3. BD (1) S 1 - N 6	/578. BD*(2) C 19 - C 20	7.82	0.52	0.061
3. BD (1) S 1 - N 6	/579. BD*(1) C 19 - H 29	71.06	0.23	0.115
3. BD (1) S 1 - N 6	/583. BD*(2) C 21 - C 22	1.28	0.74	0.030
4. BD (1) S 1 - C 16	/ 87. RY*(1) S 1	1.39	1.61	0.043
4. BD (1) S 1 - C 16	/ 88. RY*(2) S 1	0.54	1.53	0.026
4. BD (1) S 1 - C 16	/ 89. RY*(3) S 1	0.62	1.70	0.029
4. BD (1) S 1 - C 16	/ 92. RY*(6) S 1	1.98	2.44	0.063

4. BD (| 1) S	1 - C 16	/ 95. RY*(9) S	1	3.38	1.84	0.071
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/ 96. RY*(10) S	1	3.41	1.72	0.069
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/ 98. RY*(12) S	1	119.85	1.19	0.339
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/100. RY*(14) S	1	23.71	1.52	0.171
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/101. RY*(15) S	1	76.64	1.19	0.272
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/108. RY*(1) O	2	1.62	1.94	0.050
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/110. RY*(3) O	2	2.64	1.78	0.062
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/112. RY*(5) O	2	42.28	1.54	0.230
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/113. RY*(6) O	2	0.63	1.78	0.030
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/114. RY*(7) O	2	13.46	2.47	0.164
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/115. RY*(8) O	2	1.80	2.23	0.057
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/116. RY*(9) O	2	0.68	3.69	0.045
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/117. RY*(10) O	2	0.87	3.66	0.051
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/122. RY*(15) O	2	0.51	3.51	0.038
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/124. RY*(17) O	2	0.79	5.57	0.060
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/125. RY*(1) O	3	0.96	2.00	0.039
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/127. RY*(3) O	3	6.20	1.73	0.093
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/128. RY*(4) O	3	1.45	1.44	0.041
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/129. RY*(5) O	3	3.57	1.90	0.074
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/130. RY*(6) O	3	39.92	1.44	0.216
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/131. RY*(7) O	3	3.85	2.69	0.092
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/133. RY*(9) O	3	1.59	3.76	0.070
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/140. RY*(16) O	3	1.05	3.90	0.058
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/142. RY*(1) O	4	227.55	0.50	0.303
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/147. RY*(6) O	4	1.30	2.13	0.047
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/160. RY*(3) O	5	3.22	1.55	0.064
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/164. RY*(7) O	5	0.84	2.42	0.041
4. BD (| 1) S	1 - C 16	/174. RY*(1) N	6	0.75	1.52	0.030

4. BD (	1) S	1 - C 16	/176. RY*(	3) N	6	1.17	1.81	0.041
4. BD (	1) S	1 - C 16	/177. RY*(	4) N	6	1.63	1.69	0.047
4. BD (	1) S	1 - C 16	/180. RY*(	7) N	6	2.81	1.92	0.066
4. BD (	1) S	1 - C 16	/186. RY*(	13) N	6	0.81	3.95	0.051
4. BD (	1) S	1 - C 16	/188. RY*(	15) N	6	1.50	4.75	0.076
4. BD (	1) S	1 - C 16	/190. RY*(	17) N	6	17.26	32.34	0.673
4. BD (	1) S	1 - C 16	/191. RY*(	1) N	7	14.76	1.41	0.130
4. BD (	1) S	1 - C 16	/192. RY*(	2) N	7	0.52	1.55	0.026
4. BD (	1) S	1 - C 16	/195. RY*(	5) N	7	29.81	1.35	0.181
4. BD (	1) S	1 - C 16	/196. RY*(	6) N	7	0.60	2.04	0.031
4. BD (	1) S	1 - C 16	/197. RY*(	7) N	7	1.27	2.68	0.052
4. BD (	1) S	1 - C 16	/198. RY*(	8) N	7	9.86	2.37	0.138
4. BD (	1) S	1 - C 16	/199. RY*(	9) N	7	16.62	3.14	0.206
4. BD (	1) S	1 - C 16	/200. RY*(	10) N	7	39.73	1.84	0.243
4. BD (	1) S	1 - C 16	/202. RY*(	12) N	7	0.51	3.00	0.035
4. BD (	1) S	1 - C 16	/204. RY*(	14) N	7	1.43	3.57	0.064
4. BD (	1) S	1 - C 16	/208. RY*(	1) N	8	11.48	1.43	0.115
4. BD (	1) S	1 - C 16	/212. RY*(	5) N	8	4.45	2.34	0.092
4. BD (	1) S	1 - C 16	/214. RY*(	7) N	8	0.60	2.06	0.032
4. BD (	1) S	1 - C 16	/216. RY*(	9) N	8	4.25	3.65	0.112
4. BD (	1) S	1 - C 16	/217. RY*(	10) N	8	2.49	1.68	0.058
4. BD (	1) S	1 - C 16	/226. RY*(	2) C	9	1.11	1.73	0.039
4. BD (	1) S	1 - C 16	/227. RY*(	3) C	9	0.91	1.82	0.037
4. BD (	1) S	1 - C 16	/228. RY*(	4) C	9	1.27	2.06	0.046
4. BD (	1) S	1 - C 16	/229. RY*(	5) C	9	2.15	2.69	0.068
4. BD (	1) S	1 - C 16	/230. RY*(	6) C	9	7.11	1.91	0.105
4. BD (	1) S	1 - C 16	/231. RY*(	7) C	9	55.70	1.77	0.282
4. BD (	1) S	1 - C 16	/232. RY*(	8) C	9	27.30	2.08	0.215

4. BD (1) S 1 - C 16	/233. RY*(9) C 9	33.84	2.99	0.286
4. BD (1) S 1 - C 16	/234. RY*(10) C 9	55.62	1.96	0.297
4. BD (1) S 1 - C 16	/235. RY*(11) C 9	617.19	0.40	0.445
4. BD (1) S 1 - C 16	/236. RY*(12) C 9	4.45	2.85	0.101
4. BD (1) S 1 - C 16	/237. RY*(13) C 9	120.48	2.40	0.484
4. BD (1) S 1 - C 16	/238. RY*(14) C 9	3.92	2.96	0.097
4. BD (1) S 1 - C 16	/239. RY*(15) C 9	3.09	3.23	0.090
4. BD (1) S 1 - C 16	/240. RY*(16) C 9	0.84	4.09	0.053
4. BD (1) S 1 - C 16	/241. RY*(17) C 9	2.03	20.25	0.182
4. BD (1) S 1 - C 16	/242. RY*(1) C 10	24.18	1.67	0.181
4. BD (1) S 1 - C 16	/244. RY*(3) C 10	1.14	2.39	0.047
4. BD (1) S 1 - C 16	/245. RY*(4) C 10	5.39	2.35	0.101
4. BD (1) S 1 - C 16	/246. RY*(5) C 10	1.33	1.85	0.045
4. BD (1) S 1 - C 16	/250. RY*(9) C 10	1.49	2.53	0.055
4. BD (1) S 1 - C 16	/251. RY*(10) C 10	3.63	2.11	0.079
4. BD (1) S 1 - C 16	/252. RY*(11) C 10	90.38	1.11	0.285
4. BD (1) S 1 - C 16	/253. RY*(12) C 10	3.91	2.33	0.086
4. BD (1) S 1 - C 16	/255. RY*(14) C 10	1.42	2.45	0.053
4. BD (1) S 1 - C 16	/256. RY*(15) C 10	4.46	3.82	0.118
4. BD (1) S 1 - C 16	/257. RY*(16) C 10	0.52	18.15	0.088
4. BD (1) S 1 - C 16	/259. RY*(1) C 11	2.18	2.25	0.063
4. BD (1) S 1 - C 16	/260. RY*(2) C 11	3.06	2.08	0.072
4. BD (1) S 1 - C 16	/261. RY*(3) C 11	0.66	1.62	0.029
4. BD (1) S 1 - C 16	/263. RY*(5) C 11	2.25	2.11	0.062
4. BD (1) S 1 - C 16	/265. RY*(7) C 11	4.66	2.42	0.096
4. BD (1) S 1 - C 16	/266. RY*(8) C 11	1.41	2.21	0.050
4. BD (1) S 1 - C 16	/267. RY*(9) C 11	25.74	2.02	0.205
4. BD (1) S 1 - C 16	/268. RY*(10) C 11	10.48	2.72	0.152

4. BD (1) S 1 - C 16	/270. RY*(12) C 11	51.28	1.78	0.272
4. BD (1) S 1 - C 16	/271. RY*(13) C 11	0.68	3.69	0.045
4. BD (1) S 1 - C 16	/273. RY*(15) C 11	13.16	2.43	0.161
4. BD (1) S 1 - C 16	/274. RY*(16) C 11	5.98	3.44	0.129
4. BD (1) S 1 - C 16	/279. RY*(4) C 12	8.38	1.78	0.110
4. BD (1) S 1 - C 16	/280. RY*(5) C 12	1.49	1.68	0.045
4. BD (1) S 1 - C 16	/281. RY*(6) C 12	5.00	1.96	0.089
4. BD (1) S 1 - C 16	/284. RY*(9) C 12	1.41	3.14	0.060
4. BD (1) S 1 - C 16	/285. RY*(10) C 12	2.03	3.44	0.075
4. BD (1) S 1 - C 16	/286. RY*(11) C 12	23.71	1.62	0.176
4. BD (1) S 1 - C 16	/287. RY*(12) C 12	5.23	2.71	0.107
4. BD (1) S 1 - C 16	/288. RY*(13) C 12	2.52	2.17	0.067
4. BD (1) S 1 - C 16	/298. RY*(6) C 13	2.33	1.83	0.059
4. BD (1) S 1 - C 16	/299. RY*(7) C 13	4.83	2.53	0.099
4. BD (1) S 1 - C 16	/300. RY*(8) C 13	1.09	3.18	0.053
4. BD (1) S 1 - C 16	/301. RY*(9) C 13	1.01	2.76	0.047
4. BD (1) S 1 - C 16	/302. RY*(10) C 13	0.60	2.92	0.038
4. BD (1) S 1 - C 16	/303. RY*(11) C 13	0.58	1.31	0.025
4. BD (1) S 1 - C 16	/305. RY*(13) C 13	0.57	2.91	0.037
4. BD (1) S 1 - C 16	/309. RY*(17) C 13	0.67	2.43	0.036
4. BD (1) S 1 - C 16	/318. RY*(9) C 14	1.53	2.75	0.058
4. BD (1) S 1 - C 16	/319. RY*(10) C 14	1.80	2.00	0.054
4. BD (1) S 1 - C 16	/323. RY*(14) C 14	0.55	2.16	0.031
4. BD (1) S 1 - C 16	/326. RY*(17) C 14	2.32	2.44	0.068
4. BD (1) S 1 - C 16	/330. RY*(4) C 15	4.38	1.68	0.077
4. BD (1) S 1 - C 16	/331. RY*(5) C 15	0.81	2.12	0.037
4. BD (1) S 1 - C 16	/332. RY*(6) C 15	0.80	1.67	0.033
4. BD (1) S 1 - C 16	/334. RY*(8) C 15	2.29	1.79	0.058

4. BD (1) S 1 - C 16	/335. RY*(9) C 15	0.97	4.65	0.061
4. BD (1) S 1 - C 16	/338. RY*(12) C 15	2.46	1.57	0.056
4. BD (1) S 1 - C 16	/339. RY*(13) C 15	1.59	2.25	0.054
4. BD (1) S 1 - C 16	/340. RY*(14) C 15	2.01	3.33	0.074
4. BD (1) S 1 - C 16	/345. RY*(2) C 16	2.31	1.78	0.058
4. BD (1) S 1 - C 16	/346. RY*(3) C 16	0.50	1.57	0.025
4. BD (1) S 1 - C 16	/348. RY*(5) C 16	20.01	2.13	0.186
4. BD (1) S 1 - C 16	/351. RY*(8) C 16	3.34	2.30	0.079
4. BD (1) S 1 - C 16	/352. RY*(9) C 16	3.28	2.50	0.082
4. BD (1) S 1 - C 16	/354. RY*(11) C 16	2.12	3.72	0.080
4. BD (1) S 1 - C 16	/355. RY*(12) C 16	2.00	4.36	0.084
4. BD (1) S 1 - C 16	/357. RY*(14) C 16	14.88	2.53	0.175
4. BD (1) S 1 - C 16	/358. RY*(15) C 16	20.02	2.17	0.187
4. BD (1) S 1 - C 16	/361. RY*(1) C 17	0.83	1.84	0.035
4. BD (1) S 1 - C 16	/362. RY*(2) C 17	1.03	2.27	0.043
4. BD (1) S 1 - C 16	/365. RY*(5) C 17	14.68	1.75	0.144
4. BD (1) S 1 - C 16	/367. RY*(7) C 17	1.42	2.82	0.057
4. BD (1) S 1 - C 16	/368. RY*(8) C 17	3.01	1.81	0.066
4. BD (1) S 1 - C 16	/370. RY*(10) C 17	18.04	3.95	0.240
4. BD (1) S 1 - C 16	/371. RY*(11) C 17	8.06	2.61	0.131
4. BD (1) S 1 - C 16	/372. RY*(12) C 17	7.22	3.76	0.148
4. BD (1) S 1 - C 16	/373. RY*(13) C 17	37.50	2.45	0.273
4. BD (1) S 1 - C 16	/380. RY*(4) C 18	0.52	2.47	0.032
4. BD (1) S 1 - C 16	/382. RY*(6) C 18	2.54	1.96	0.063
4. BD (1) S 1 - C 16	/383. RY*(7) C 18	24.99	1.56	0.178
4. BD (1) S 1 - C 16	/385. RY*(9) C 18	2.58	2.69	0.075
4. BD (1) S 1 - C 16	/386. RY*(10) C 18	3.71	2.79	0.092
4. BD (1) S 1 - C 16	/387. RY*(11) C 18	7.44	4.75	0.169

4. BD (1) S 1 - C 16	/388. RY*(12) C 18	5.92	3.03	0.121
4. BD (1) S 1 - C 16	/389. RY*(13) C 18	0.62	3.65	0.043
4. BD (1) S 1 - C 16	/392. RY*(16) C 18	30.62	1.20	0.173
4. BD (1) S 1 - C 16	/395. RY*(2) C 19	20.24	1.62	0.163
4. BD (1) S 1 - C 16	/396. RY*(3) C 19	0.81	2.28	0.039
4. BD (1) S 1 - C 16	/405. RY*(12) C 19	1.19	1.75	0.041
4. BD (1) S 1 - C 16	/413. RY*(3) C 20	1.04	1.34	0.034
4. BD (1) S 1 - C 16	/417. RY*(7) C 20	2.21	2.59	0.068
4. BD (1) S 1 - C 16	/427. RY*(17) C 20	0.57	2.80	0.036
4. BD (1) S 1 - C 16	/433. RY*(6) C 21	1.33	1.91	0.045
4. BD (1) S 1 - C 16	/438. RY*(11) C 21	1.20	1.28	0.035
4. BD (1) S 1 - C 16	/447. RY*(3) C 22	0.54	1.32	0.024
4. BD (1) S 1 - C 16	/449. RY*(5) C 22	1.37	2.22	0.050
4. BD (1) S 1 - C 16	/450. RY*(6) C 22	1.23	1.83	0.043
4. BD (1) S 1 - C 16	/451. RY*(7) C 22	3.89	2.13	0.082
4. BD (1) S 1 - C 16	/454. RY*(10) C 22	0.91	3.20	0.049
4. BD (1) S 1 - C 16	/455. RY*(11) C 22	0.59	2.08	0.032
4. BD (1) S 1 - C 16	/457. RY*(13) C 22	0.93	2.35	0.042
4. BD (1) S 1 - C 16	/458. RY*(14) C 22	1.53	1.49	0.043
4. BD (1) S 1 - C 16	/462. RY*(1) C 23	202.89	0.73	0.345
4. BD (1) S 1 - C 16	/463. RY*(2) C 23	34.27	1.29	0.189
4. BD (1) S 1 - C 16	/464. RY*(3) C 23	12.19	1.61	0.126
4. BD (1) S 1 - C 16	/465. RY*(4) C 23	87.15	1.55	0.330
4. BD (1) S 1 - C 16	/466. RY*(5) C 23	810.55	0.24	0.401
4. BD (1) S 1 - C 16	/467. RY*(6) C 23	2.25	2.37	0.066
4. BD (1) S 1 - C 16	/469. RY*(8) C 23	116.87	1.61	0.391
4. BD (1) S 1 - C 16	/471. RY*(10) C 23	164.58	1.40	0.432
4. BD (1) S 1 - C 16	/473. RY*(12) C 23	1.40	2.67	0.055

4. BD (1) S 1 - C 16	/474. RY*(13) C 23	4.68	3.58	0.116
4. BD (1) S 1 - C 16	/475. RY*(14) C 23	0.66	23.12	0.111
4. BD (1) S 1 - C 16	/476. RY*(15) C 23	59.37	1.84	0.298
4. BD (1) S 1 - C 16	/477. RY*(16) C 23	163.04	1.82	0.491
4. BD (1) S 1 - C 16	/478. RY*(17) C 23	1.03	3.18	0.051
4. BD (1) S 1 - C 16	/479. RY*(1) H 24	4.90	1.46	0.076
4. BD (1) S 1 - C 16	/483. RY*(5) H 24	2.11	3.40	0.076
4. BD (1) S 1 - C 16	/492. RY*(4) H 26	2.68	2.74	0.077
4. BD (1) S 1 - C 16	/496. RY*(3) H 27	4.62	2.33	0.093
4. BD (1) S 1 - C 16	/497. RY*(4) H 27	316.08	0.93	0.487
4. BD (1) S 1 - C 16	/498. RY*(5) H 27	1.14	3.27	0.055
4. BD (1) S 1 - C 16	/499. RY*(1) H 28	4.54	1.71	0.079
4. BD (1) S 1 - C 16	/500. RY*(2) H 28	2.56	2.74	0.075
4. BD (1) S 1 - C 16	/502. RY*(4) H 28	8.09	2.57	0.130
4. BD (1) S 1 - C 16	/504. RY*(1) H 29	0.63	1.46	0.027
4. BD (1) S 1 - C 16	/505. RY*(2) H 29	0.51	2.43	0.032
4. BD (1) S 1 - C 16	/506. RY*(3) H 29	13.34	3.12	0.184
4. BD (1) S 1 - C 16	/509. RY*(1) H 30	0.70	1.73	0.031
4. BD (1) S 1 - C 16	/511. RY*(3) H 30	1.08	2.42	0.046
4. BD (1) S 1 - C 16	/528. RY*(1) H 34	1.53	2.22	0.053
4. BD (1) S 1 - C 16	/529. RY*(2) H 34	167.90	1.01	0.371
4. BD (1) S 1 - C 16	/530. RY*(3) H 34	6.99	2.56	0.120
4. BD (1) S 1 - C 16	/531. RY*(4) H 34	1.03	2.63	0.047
4. BD (1) S 1 - C 16	/533. RY*(1) H 35	26.74	1.55	0.183
4. BD (1) S 1 - C 16	/534. RY*(2) H 35	73.07	1.71	0.318
4. BD (1) S 1 - C 16	/535. RY*(3) H 35	4.68	2.56	0.099
4. BD (1) S 1 - C 16	/536. RY*(4) H 35	2.16	2.59	0.067
4. BD (1) S 1 - C 16	/537. RY*(5) H 35	1.01	3.51	0.054

4. BD (1) S 1 - C 16	/542. RY*(5) H 36	9.48	2.58	0.141
4. BD (1) S 1 - C 16	/543. BD*(1) S 1 - O 2	3.28	1.10	0.055
4. BD (1) S 1 - C 16	/544. BD*(1) S 1 - O 3	1.19	1.11	0.033
4. BD (1) S 1 - C 16	/545. BD*(1) S 1 - N 6	3.32	0.95	0.053
4. BD (1) S 1 - C 16	/546. BD*(1) S 1 - C 16	1.23	0.98	0.032
4. BD (1) S 1 - C 16	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.51	1.17	0.022
4. BD (1) S 1 - C 16	/562. BD*(1) C 10 - C 11	1.54	1.27	0.039
4. BD (1) S 1 - C 16	/563. BD*(1) C 11 - C 12	2.77	1.36	0.055
4. BD (1) S 1 - C 16	/571. BD*(1) C 14 - C 15	3.73	1.38	0.064
4. BD (1) S 1 - C 16	/572. BD*(1) C 14 - H 27	3.58	1.21	0.059
4. BD (1) S 1 - C 16	/573. BD*(1) C 15 - C 16	2112.84	0.10	0.411
4. BD (1) S 1 - C 16	/575. BD*(1) C 15 - H 28	1.20	1.27	0.035
4. BD (1) S 1 - C 16	/576. BD*(1) C 18 - C 22	3.25	1.34	0.059
4. BD (1) S 1 - C 16	/578. BD*(2) C 19 - C 20	63.87	0.57	0.183
4. BD (1) S 1 - C 16	/579. BD*(1) C 19 - H 29	523.20	0.28	0.341
4. BD (1) S 1 - C 16	/580. BD*(1) C 20 - C 21	0.86	1.41	0.031
4. BD (1) S 1 - C 16	/581. BD*(1) C 20 - H 30	1.00	1.26	0.032
4. BD (1) S 1 - C 16	/582. BD*(1) C 21 - C 22	1.00	1.40	0.034
4. BD (1) S 1 - C 16	/583. BD*(2) C 21 - C 22	10.43	0.79	0.087
4. BD (1) S 1 - C 16	/586. BD*(1) C 23 - H 34	5.01	3.86	0.125
4. BD (1) S 1 - C 16	/587. BD*(1) C 23 - H 35	6.94	4.14	0.152
4. BD (1) S 1 - C 16	/588. BD*(1) C 23 - H 36	18.56	3.51	0.229
5. BD (1) O 4 - C 17	/ 87. RY*(1) S 1	21.74	5.40	0.310
5. BD (1) O 4 - C 17	/ 88. RY*(2) S 1	21.05	5.33	0.302
5. BD (1) O 4 - C 17	/ 89. RY*(3) S 1	4.64	5.49	0.144
5. BD (1) O 4 - C 17	/ 90. RY*(4) S 1	5.23	5.43	0.151
5. BD (1) O 4 - C 17	/ 92. RY*(6) S 1	24.74	6.24	0.351
5. BD (1) O 4 - C 17	/ 95. RY*(9) S 1	33.98	5.64	0.392

5. BD (1) O 4 - C 17	/ 96. RY*(10) S 1	28.61	5.52	0.356
5. BD (1) O 4 - C 17	/ 97. RY*(11) S 1	3.55	5.94	0.130
5. BD (1) O 4 - C 17	/ 98. RY*(12) S 1	831.09	4.98	1.821
5. BD (1) O 4 - C 17	/ 99. RY*(13) S 1	2051.94	3.71	2.468
5. BD (1) O 4 - C 17	/100. RY*(14) S 1	206.28	5.32	0.937
5. BD (1) O 4 - C 17	/101. RY*(15) S 1	557.92	4.98	1.492
5. BD (1) O 4 - C 17	/102. RY*(16) S 1	6130.55	2.24	3.316
5. BD (1) O 4 - C 17	/103. RY*(17) S 1	4.95	19.28	0.277
5. BD (1) O 4 - C 17	/106. RY*(20) S 1	2.18	21.40	0.193
5. BD (1) O 4 - C 17	/107. RY*(21) S 1	0.72	21.37	0.111
5. BD (1) O 4 - C 17	/108. RY*(1) O 2	9.55	5.73	0.209
5. BD (1) O 4 - C 17	/109. RY*(2) O 2	11.68	5.43	0.225
5. BD (1) O 4 - C 17	/110. RY*(3) O 2	33.90	5.58	0.389
5. BD (1) O 4 - C 17	/111. RY*(4) O 2	0.97	5.24	0.064
5. BD (1) O 4 - C 17	/112. RY*(5) O 2	349.99	5.33	1.223
5. BD (1) O 4 - C 17	/113. RY*(6) O 2	9.14	5.57	0.202
5. BD (1) O 4 - C 17	/114. RY*(7) O 2	165.35	6.26	0.911
5. BD (1) O 4 - C 17	/115. RY*(8) O 2	13.07	6.03	0.251
5. BD (1) O 4 - C 17	/116. RY*(9) O 2	9.22	7.48	0.235
5. BD (1) O 4 - C 17	/117. RY*(10) O 2	10.33	7.45	0.248
5. BD (1) O 4 - C 17	/121. RY*(14) O 2	1.42	7.37	0.092
5. BD (1) O 4 - C 17	/122. RY*(15) O 2	8.86	7.30	0.228
5. BD (1) O 4 - C 17	/123. RY*(16) O 2	3.34	7.76	0.144
5. BD (1) O 4 - C 17	/124. RY*(17) O 2	14.96	9.37	0.335
5. BD (1) O 4 - C 17	/125. RY*(1) O 3	4.24	5.79	0.140
5. BD (1) O 4 - C 17	/127. RY*(3) O 3	77.45	5.52	0.585
5. BD (1) O 4 - C 17	/128. RY*(4) O 3	9.84	5.24	0.203
5. BD (1) O 4 - C 17	/129. RY*(5) O 3	36.16	5.69	0.406

5. BD (1) O 4 - C 17	/130. RY*(6) O 3	327.63	5.24	1.172
5. BD (1) O 4 - C 17	/131. RY*(7) O 3	56.99	6.48	0.544
5. BD (1) O 4 - C 17	/132. RY*(8) O 3	3.60	5.74	0.129
5. BD (1) O 4 - C 17	/133. RY*(9) O 3	26.69	7.55	0.402
5. BD (1) O 4 - C 17	/135. RY*(11) O 3	4.76	9.62	0.191
5. BD (1) O 4 - C 17	/136. RY*(12) O 3	1.31	9.31	0.099
5. BD (1) O 4 - C 17	/137. RY*(13) O 3	1.27	9.56	0.099
5. BD (1) O 4 - C 17	/139. RY*(15) O 3	2.67	7.28	0.125
5. BD (1) O 4 - C 17	/140. RY*(16) O 3	14.88	7.69	0.303
5. BD (1) O 4 - C 17	/141. RY*(17) O 3	2.03	54.11	0.297
5. BD (1) O 4 - C 17	/142. RY*(1) O 4	793.84	4.30	1.652
5. BD (1) O 4 - C 17	/145. RY*(4) O 4	3.70	5.90	0.132
5. BD (1) O 4 - C 17	/146. RY*(5) O 4	0.83	6.34	0.065
5. BD (1) O 4 - C 17	/147. RY*(6) O 4	14.63	5.93	0.264
5. BD (1) O 4 - C 17	/148. RY*(7) O 4	1.59	6.81	0.093
5. BD (1) O 4 - C 17	/155. RY*(14) O 4	0.65	7.66	0.063
5. BD (1) O 4 - C 17	/158. RY*(1) O 5	1.14	5.15	0.069
5. BD (1) O 4 - C 17	/159. RY*(2) O 5	1.98	5.50	0.093
5. BD (1) O 4 - C 17	/160. RY*(3) O 5	28.32	5.34	0.348
5. BD (1) O 4 - C 17	/162. RY*(5) O 5	5.09	6.16	0.158
5. BD (1) O 4 - C 17	/163. RY*(6) O 5	4.08	5.93	0.139
5. BD (1) O 4 - C 17	/164. RY*(7) O 5	10.78	6.22	0.232
5. BD (1) O 4 - C 17	/167. RY*(10) O 5	0.60	9.81	0.069
5. BD (1) O 4 - C 17	/168. RY*(11) O 5	2.98	9.41	0.150
5. BD (1) O 4 - C 17	/171. RY*(14) O 5	1.43	7.54	0.093
5. BD (1) O 4 - C 17	/174. RY*(1) N 6	0.99	5.31	0.065
5. BD (1) O 4 - C 17	/175. RY*(2) N 6	1.62	5.47	0.084
5. BD (1) O 4 - C 17	/176. RY*(3) N 6	7.98	5.61	0.189

5. BD (| 1) O	4 - C	17	/177. RY*(4) N	6	15.41	5.48	0.260
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/178. RY*(5) N	6	1.26	5.42	0.074
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/180. RY*(7) N	6	31.25	5.71	0.378
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/181. RY*(8) N	6	2.38	5.95	0.106
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/182. RY*(9) N	6	0.92	7.04	0.072
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/183. RY*(10) N	6	4.89	6.59	0.161
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/185. RY*(12) N	6	1.18	7.00	0.081
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/186. RY*(13) N	6	13.14	7.75	0.286
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/188. RY*(15) N	6	24.74	8.54	0.411
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/190. RY*(17) N	6	447.04	36.13	3.597
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/191. RY*(1) N	7	131.77	5.20	0.740
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/192. RY*(2) N	7	3.50	5.35	0.122
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/193. RY*(3) N	7	1.58	5.39	0.083
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/194. RY*(4) N	7	6220.56	2.53	3.548
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/195. RY*(5) N	7	231.99	5.15	0.978
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/196. RY*(6) N	7	6.51	5.84	0.174
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/197. RY*(7) N	7	15.78	6.47	0.286
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/198. RY*(8) N	7	114.37	6.16	0.751
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/199. RY*(9) N	7	227.51	6.94	1.124
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/200. RY*(10) N	7	394.03	5.63	1.333
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/201. RY*(11) N	7	2.98	7.62	0.135
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/202. RY*(12) N	7	6.68	6.80	0.191
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/203. RY*(13) N	7	0.85	8.21	0.075
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/204. RY*(14) N	7	21.27	7.37	0.354
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/205. RY*(15) N	7	1.18	9.04	0.092
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/207. RY*(17) N	7	0.88	39.35	0.166
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/208. RY*(1) N	8	93.88	5.23	0.626
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/210. RY*(3) N	8	0.66	5.22	0.052

5. BD (| 1) O	4 - C	17	/211. RY*(4) N	8	2.33	6.72	0.112
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/212. RY*(5) N	8	51.50	6.13	0.503
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/213. RY*(6) N	8	3.10	5.93	0.121
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/214. RY*(7) N	8	6.30	5.85	0.172
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/215. RY*(8) N	8	5.43	6.10	0.163
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/216. RY*(9) N	8	61.39	7.45	0.605
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/217. RY*(10) N	8	23.24	5.47	0.319
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/218. RY*(11) N	8	0.67	6.70	0.060
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/221. RY*(14) N	8	1.72	6.88	0.097
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/225. RY*(1) C	9	1.14	5.86	0.073
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/226. RY*(2) C	9	13.43	5.52	0.243
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/227. RY*(3) C	9	8.79	5.61	0.199
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/228. RY*(4) C	9	17.70	5.85	0.288
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/229. RY*(5) C	9	28.95	6.48	0.388
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/230. RY*(6) C	9	74.16	5.71	0.582
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/231. RY*(7) C	9	523.47	5.56	1.527
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/232. RY*(8) C	9	291.69	5.88	1.172
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/233. RY*(9) C	9	442.45	6.78	1.551
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/234. RY*(10) C	9	558.64	5.76	1.605
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/235. RY*(11) C	9	1751.18	4.19	2.425
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/236. RY*(12) C	9	53.14	6.65	0.532
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/237. RY*(13) C	9	1384.60	6.19	2.621
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/238. RY*(14) C	9	50.94	6.75	0.525
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/239. RY*(15) C	9	44.89	7.03	0.503
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/240. RY*(16) C	9	16.37	7.88	0.322
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/241. RY*(17) C	9	60.79	24.04	1.082
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/242. RY*(1) C	10	210.28	5.47	0.958
5. BD (| 1) O	4 - C	17	/244. RY*(3) C	10	15.38	6.18	0.276

5. BD (1) O 4 - C 17	/245. RY*(4) C 10	51.30	6.14	0.502
5. BD (1) O 4 - C 17	/246. RY*(5) C 10	13.20	5.64	0.244
5. BD (1) O 4 - C 17	/247. RY*(6) C 10	0.98	6.41	0.071
5. BD (1) O 4 - C 17	/249. RY*(8) C 10	2.26	6.33	0.107
5. BD (1) O 4 - C 17	/250. RY*(9) C 10	15.20	6.33	0.278
5. BD (1) O 4 - C 17	/251. RY*(10) C 10	43.30	5.90	0.452
5. BD (1) O 4 - C 17	/252. RY*(11) C 10	614.02	4.90	1.552
5. BD (1) O 4 - C 17	/253. RY*(12) C 10	44.76	6.12	0.468
5. BD (1) O 4 - C 17	/254. RY*(13) C 10	0.97	10.77	0.091
5. BD (1) O 4 - C 17	/255. RY*(14) C 10	16.31	6.25	0.286
5. BD (1) O 4 - C 17	/256. RY*(15) C 10	57.24	7.61	0.591
5. BD (1) O 4 - C 17	/257. RY*(16) C 10	4.13	21.95	0.270
5. BD (1) O 4 - C 17	/258. RY*(17) C 10	6.08	7.29	0.188
5. BD (1) O 4 - C 17	/260. RY*(2) C 11	40.37	5.88	0.435
5. BD (1) O 4 - C 17	/261. RY*(3) C 11	6.54	5.42	0.168
5. BD (1) O 4 - C 17	/262. RY*(4) C 11	3.50	5.69	0.126
5. BD (1) O 4 - C 17	/263. RY*(5) C 11	26.34	5.90	0.353
5. BD (1) O 4 - C 17	/264. RY*(6) C 11	5.64	5.82	0.162
5. BD (1) O 4 - C 17	/265. RY*(7) C 11	63.44	6.22	0.562
5. BD (1) O 4 - C 17	/266. RY*(8) C 11	15.14	6.00	0.270
5. BD (1) O 4 - C 17	/267. RY*(9) C 11	252.44	5.82	1.084
5. BD (1) O 4 - C 17	/268. RY*(10) C 11	169.24	6.51	0.939
5. BD (1) O 4 - C 17	/269. RY*(11) C 11	0.76	6.91	0.065
5. BD (1) O 4 - C 17	/270. RY*(12) C 11	461.87	5.58	1.436
5. BD (1) O 4 - C 17	/271. RY*(13) C 11	3.42	7.49	0.143
5. BD (1) O 4 - C 17	/272. RY*(14) C 11	9.42	8.92	0.260
5. BD (1) O 4 - C 17	/273. RY*(15) C 11	166.04	6.22	0.910
5. BD (1) O 4 - C 17	/274. RY*(16) C 11	86.13	7.24	0.707

5. BD (1) O 4 - C 17	/276. RY*(1) C 12	0.62	5.73	0.053
5. BD (1) O 4 - C 17	/277. RY*(2) C 12	0.52	5.69	0.049
5. BD (1) O 4 - C 17	/278. RY*(3) C 12	3.70	5.15	0.124
5. BD (1) O 4 - C 17	/279. RY*(4) C 12	77.44	5.57	0.588
5. BD (1) O 4 - C 17	/280. RY*(5) C 12	19.29	5.47	0.291
5. BD (1) O 4 - C 17	/281. RY*(6) C 12	49.75	5.76	0.479
5. BD (1) O 4 - C 17	/282. RY*(7) C 12	3.47	5.89	0.128
5. BD (1) O 4 - C 17	/283. RY*(8) C 12	3.20	6.86	0.132
5. BD (1) O 4 - C 17	/284. RY*(9) C 12	15.05	6.93	0.289
5. BD (1) O 4 - C 17	/285. RY*(10) C 12	36.39	7.23	0.459
5. BD (1) O 4 - C 17	/286. RY*(11) C 12	217.08	5.41	0.970
5. BD (1) O 4 - C 17	/287. RY*(12) C 12	56.39	6.50	0.542
5. BD (1) O 4 - C 17	/288. RY*(13) C 12	29.84	5.96	0.378
5. BD (1) O 4 - C 17	/291. RY*(16) C 12	0.75	7.41	0.067
5. BD (1) O 4 - C 17	/292. RY*(17) C 12	3.24	7.15	0.136
5. BD (1) O 4 - C 17	/295. RY*(3) C 13	3.04	5.56	0.116
5. BD (1) O 4 - C 17	/296. RY*(4) C 13	6.59	5.56	0.171
5. BD (1) O 4 - C 17	/298. RY*(6) C 13	30.84	5.63	0.373
5. BD (1) O 4 - C 17	/299. RY*(7) C 13	62.29	6.32	0.562
5. BD (1) O 4 - C 17	/300. RY*(8) C 13	13.06	6.97	0.270
5. BD (1) O 4 - C 17	/301. RY*(9) C 13	10.53	6.56	0.235
5. BD (1) O 4 - C 17	/302. RY*(10) C 13	7.58	6.71	0.202
5. BD (1) O 4 - C 17	/303. RY*(11) C 13	3.80	5.11	0.125
5. BD (1) O 4 - C 17	/304. RY*(12) C 13	2.44	7.26	0.119
5. BD (1) O 4 - C 17	/305. RY*(13) C 13	8.15	6.70	0.209
5. BD (1) O 4 - C 17	/306. RY*(14) C 13	0.54	6.12	0.051
5. BD (1) O 4 - C 17	/308. RY*(16) C 13	0.76	26.25	0.127
5. BD (1) O 4 - C 17	/309. RY*(17) C 13	6.62	6.22	0.182

5. BD (1) O 4 - C 17	/314. RY*(5) C 14	2.49	5.51	0.105
5. BD (1) O 4 - C 17	/316. RY*(7) C 14	3.13	6.20	0.125
5. BD (1) O 4 - C 17	/318. RY*(9) C 14	15.03	6.55	0.281
5. BD (1) O 4 - C 17	/319. RY*(10) C 14	14.31	5.80	0.258
5. BD (1) O 4 - C 17	/320. RY*(11) C 14	2.89	6.56	0.123
5. BD (1) O 4 - C 17	/321. RY*(12) C 14	1.90	7.24	0.105
5. BD (1) O 4 - C 17	/323. RY*(14) C 14	6.03	5.95	0.170
5. BD (1) O 4 - C 17	/325. RY*(16) C 14	1.39	6.91	0.088
5. BD (1) O 4 - C 17	/326. RY*(17) C 14	23.59	6.24	0.343
5. BD (1) O 4 - C 17	/327. RY*(1) C 15	10.46	5.73	0.219
5. BD (1) O 4 - C 17	/328. RY*(2) C 15	0.66	5.71	0.055
5. BD (1) O 4 - C 17	/330. RY*(4) C 15	64.78	5.47	0.533
5. BD (1) O 4 - C 17	/331. RY*(5) C 15	8.42	5.91	0.200
5. BD (1) O 4 - C 17	/332. RY*(6) C 15	1.79	5.47	0.089
5. BD (1) O 4 - C 17	/334. RY*(8) C 15	29.98	5.58	0.366
5. BD (1) O 4 - C 17	/335. RY*(9) C 15	5.53	8.45	0.194
5. BD (1) O 4 - C 17	/336. RY*(10) C 15	1.08	7.74	0.082
5. BD (1) O 4 - C 17	/337. RY*(11) C 15	5.46	6.53	0.169
5. BD (1) O 4 - C 17	/338. RY*(12) C 15	18.02	5.37	0.278
5. BD (1) O 4 - C 17	/339. RY*(13) C 15	18.17	6.04	0.297
5. BD (1) O 4 - C 17	/340. RY*(14) C 15	39.37	7.12	0.474
5. BD (1) O 4 - C 17	/341. RY*(15) C 15	0.56	25.14	0.107
5. BD (1) O 4 - C 17	/345. RY*(2) C 16	18.53	5.58	0.287
5. BD (1) O 4 - C 17	/346. RY*(3) C 16	4.70	5.36	0.142
5. BD (1) O 4 - C 17	/347. RY*(4) C 16	5.18	5.61	0.152
5. BD (1) O 4 - C 17	/348. RY*(5) C 16	216.85	5.93	1.015
5. BD (1) O 4 - C 17	/349. RY*(6) C 16	1.61	5.65	0.085
5. BD (1) O 4 - C 17	/351. RY*(8) C 16	36.15	6.09	0.420

5. BD (1) O 4 - C 17	/352. RY*(9) C 16	39.56	6.30	0.447
5. BD (1) O 4 - C 17	/353. RY*(10) C 16	2.33	5.69	0.103
5. BD (1) O 4 - C 17	/354. RY*(11) C 16	28.93	7.52	0.417
5. BD (1) O 4 - C 17	/355. RY*(12) C 16	19.07	8.15	0.353
5. BD (1) O 4 - C 17	/356. RY*(13) C 16	5.12	5.80	0.154
5. BD (1) O 4 - C 17	/357. RY*(14) C 16	178.03	6.32	0.950
5. BD (1) O 4 - C 17	/358. RY*(15) C 16	214.48	5.96	1.012
5. BD (1) O 4 - C 17	/360. RY*(17) C 16	0.84	26.57	0.133
5. BD (1) O 4 - C 17	/361. RY*(1) C 17	4.42	5.64	0.141
5. BD (1) O 4 - C 17	/362. RY*(2) C 17	11.36	6.07	0.235
5. BD (1) O 4 - C 17	/363. RY*(3) C 17	2.14	6.08	0.102
5. BD (1) O 4 - C 17	/365. RY*(5) C 17	151.49	5.55	0.820
5. BD (1) O 4 - C 17	/367. RY*(7) C 17	16.88	6.61	0.299
5. BD (1) O 4 - C 17	/368. RY*(8) C 17	33.13	5.60	0.385
5. BD (1) O 4 - C 17	/369. RY*(9) C 17	10464.93	1.71	3.789
5. BD (1) O 4 - C 17	/370. RY*(10) C 17	272.61	7.74	1.300
5. BD (1) O 4 - C 17	/371. RY*(11) C 17	98.41	6.40	0.710
5. BD (1) O 4 - C 17	/372. RY*(12) C 17	104.91	7.55	0.797
5. BD (1) O 4 - C 17	/373. RY*(13) C 17	453.45	6.25	1.507
5. BD (1) O 4 - C 17	/374. RY*(14) C 17	0.76	18.46	0.106
5. BD (1) O 4 - C 17	/375. RY*(15) C 17	3.34	10.12	0.164
5. BD (1) O 4 - C 17	/376. RY*(16) C 17	1.38	7.96	0.094
5. BD (1) O 4 - C 17	/377. RY*(1) C 18	0.60	5.89	0.053
5. BD (1) O 4 - C 17	/379. RY*(3) C 18	4.17	6.10	0.143
5. BD (1) O 4 - C 17	/380. RY*(4) C 18	6.51	6.27	0.181
5. BD (1) O 4 - C 17	/382. RY*(6) C 18	25.42	5.76	0.342
5. BD (1) O 4 - C 17	/383. RY*(7) C 18	219.08	5.35	0.969
5. BD (1) O 4 - C 17	/385. RY*(9) C 18	33.73	6.48	0.418

5. BD (1) O 4 - C 17	/386. RY*(10) C 18	49.22	6.58	0.509
5. BD (1) O 4 - C 17	/387. RY*(11) C 18	124.55	8.54	0.923
5. BD (1) O 4 - C 17	/388. RY*(12) C 18	76.48	6.82	0.646
5. BD (1) O 4 - C 17	/389. RY*(13) C 18	9.42	7.44	0.237
5. BD (1) O 4 - C 17	/390. RY*(14) C 18	1.21	7.03	0.082
5. BD (1) O 4 - C 17	/392. RY*(16) C 18	222.31	5.00	0.943
5. BD (1) O 4 - C 17	/394. RY*(1) C 19	0.78	5.66	0.059
5. BD (1) O 4 - C 17	/395. RY*(2) C 19	182.76	5.42	0.889
5. BD (1) O 4 - C 17	/396. RY*(3) C 19	9.04	6.08	0.210
5. BD (1) O 4 - C 17	/397. RY*(4) C 19	1.97	6.10	0.098
5. BD (1) O 4 - C 17	/398. RY*(5) C 19	1.42	5.41	0.079
5. BD (1) O 4 - C 17	/399. RY*(6) C 19	0.52	5.48	0.048
5. BD (1) O 4 - C 17	/400. RY*(7) C 19	1.02	7.46	0.078
5. BD (1) O 4 - C 17	/402. RY*(9) C 19	4.04	5.40	0.132
5. BD (1) O 4 - C 17	/403. RY*(10) C 19	2.01	5.12	0.091
5. BD (1) O 4 - C 17	/405. RY*(12) C 19	11.50	5.55	0.226
5. BD (1) O 4 - C 17	/406. RY*(13) C 19	0.55	7.33	0.057
5. BD (1) O 4 - C 17	/407. RY*(14) C 19	1.24	7.04	0.084
5. BD (1) O 4 - C 17	/408. RY*(15) C 19	1.85	5.84	0.093
5. BD (1) O 4 - C 17	/409. RY*(16) C 19	2.20	7.43	0.115
5. BD (1) O 4 - C 17	/412. RY*(2) C 20	0.54	5.94	0.051
5. BD (1) O 4 - C 17	/413. RY*(3) C 20	8.24	5.14	0.184
5. BD (1) O 4 - C 17	/414. RY*(4) C 20	1.82	5.39	0.089
5. BD (1) O 4 - C 17	/415. RY*(5) C 20	2.80	5.63	0.112
5. BD (1) O 4 - C 17	/417. RY*(7) C 20	26.98	6.39	0.372
5. BD (1) O 4 - C 17	/418. RY*(8) C 20	1.08	7.66	0.081
5. BD (1) O 4 - C 17	/420. RY*(10) C 20	1.56	7.53	0.097
5. BD (1) O 4 - C 17	/421. RY*(11) C 20	3.95	6.20	0.140

5. BD (1) O 4 - C 17	/426. RY*(16) C 20	2.63	5.04	0.103
5. BD (1) O 4 - C 17	/427. RY*(17) C 20	7.19	6.60	0.195
5. BD (1) O 4 - C 17	/428. RY*(1) C 21	0.73	5.66	0.057
5. BD (1) O 4 - C 17	/431. RY*(4) C 21	2.74	5.75	0.112
5. BD (1) O 4 - C 17	/432. RY*(5) C 21	1.28	5.36	0.074
5. BD (1) O 4 - C 17	/433. RY*(6) C 21	13.49	5.71	0.248
5. BD (1) O 4 - C 17	/434. RY*(7) C 21	0.53	7.32	0.056
5. BD (1) O 4 - C 17	/435. RY*(8) C 21	1.80	7.05	0.101
5. BD (1) O 4 - C 17	/437. RY*(10) C 21	5.24	6.12	0.160
5. BD (1) O 4 - C 17	/438. RY*(11) C 21	8.97	5.07	0.191
5. BD (1) O 4 - C 17	/439. RY*(12) C 21	1.67	7.29	0.099
5. BD (1) O 4 - C 17	/440. RY*(13) C 21	3.67	6.69	0.140
5. BD (1) O 4 - C 17	/441. RY*(14) C 21	0.90	6.62	0.069
5. BD (1) O 4 - C 17	/445. RY*(1) C 22	0.55	5.75	0.050
5. BD (1) O 4 - C 17	/446. RY*(2) C 22	1.33	5.87	0.079
5. BD (1) O 4 - C 17	/447. RY*(3) C 22	4.30	5.12	0.133
5. BD (1) O 4 - C 17	/448. RY*(4) C 22	0.90	5.55	0.063
5. BD (1) O 4 - C 17	/449. RY*(5) C 22	15.63	6.02	0.275
5. BD (1) O 4 - C 17	/450. RY*(6) C 22	11.59	5.62	0.228
5. BD (1) O 4 - C 17	/451. RY*(7) C 22	42.65	5.93	0.450
5. BD (1) O 4 - C 17	/452. RY*(8) C 22	2.75	6.79	0.122
5. BD (1) O 4 - C 17	/453. RY*(9) C 22	0.99	9.30	0.086
5. BD (1) O 4 - C 17	/454. RY*(10) C 22	11.90	7.00	0.258
5. BD (1) O 4 - C 17	/455. RY*(11) C 22	6.19	5.87	0.171
5. BD (1) O 4 - C 17	/457. RY*(13) C 22	10.64	6.15	0.229
5. BD (1) O 4 - C 17	/458. RY*(14) C 22	13.56	5.28	0.239
5. BD (1) O 4 - C 17	/461. RY*(17) C 22	2.55	6.82	0.118
5. BD (1) O 4 - C 17	/462. RY*(1) C 23	969.33	4.52	1.872

5. BD (1) O 4 - C 17	/463. RY*(2) C 23	285.73	5.08	1.078
5. BD (1) O 4 - C 17	/464. RY*(3) C 23	96.49	5.41	0.646
5. BD (1) O 4 - C 17	/465. RY*(4) C 23	763.44	5.34	1.807
5. BD (1) O 4 - C 17	/466. RY*(5) C 23	1450.57	4.04	2.166
5. BD (1) O 4 - C 17	/467. RY*(6) C 23	29.78	6.17	0.384
5. BD (1) O 4 - C 17	/468. RY*(7) C 23	5375.31	2.98	3.584
5. BD (1) O 4 - C 17	/469. RY*(8) C 23	1023.15	5.41	2.105
5. BD (1) O 4 - C 17	/471. RY*(10) C 23	1369.55	5.19	2.386
5. BD (1) O 4 - C 17	/472. RY*(11) C 23	********	0.25	4.693
5. BD (1) O 4 - C 17	/473. RY*(12) C 23	14.00	6.47	0.269
5. BD (1) O 4 - C 17	/474. RY*(13) C 23	63.88	7.37	0.614
5. BD (1) O 4 - C 17	/475. RY*(14) C 23	15.57	26.91	0.579
5. BD (1) O 4 - C 17	/476. RY*(15) C 23	611.39	5.64	1.662
5. BD (1) O 4 - C 17	/477. RY*(16) C 23	1520.73	5.62	2.616
5. BD (1) O 4 - C 17	/478. RY*(17) C 23	21.50	6.97	0.347
5. BD (1) O 4 - C 17	/479. RY*(1) H 24	42.26	5.26	0.422
5. BD (1) O 4 - C 17	/480. RY*(2) H 24	1.83	6.91	0.101
5. BD (1) O 4 - C 17	/481. RY*(3) H 24	3.22	6.25	0.127
5. BD (1) O 4 - C 17	/482. RY*(4) H 24	3.61	6.76	0.140
5. BD (1) O 4 - C 17	/483. RY*(5) H 24	30.26	7.20	0.418
5. BD (1) O 4 - C 17	/484. RY*(1) H 25	3.48	5.50	0.124
5. BD (1) O 4 - C 17	/485. RY*(2) H 25	3.00	6.61	0.126
5. BD (1) O 4 - C 17	/488. RY*(5) H 25	1.56	7.13	0.094
5. BD (1) O 4 - C 17	/491. RY*(3) H 26	2.81	6.20	0.118
5. BD (1) O 4 - C 17	/492. RY*(4) H 26	33.90	6.54	0.421
5. BD (1) O 4 - C 17	/494. RY*(1) H 27	1.60	5.33	0.083
5. BD (1) O 4 - C 17	/496. RY*(3) H 27	52.12	6.13	0.506
5. BD (1) O 4 - C 17	/497. RY*(4) H 27	1825.67	4.72	2.627

5. BD (1) O 4 - C 17	/498. RY*(5) H 27	22.47	7.07	0.357
5. BD (1) O 4 - C 17	/499. RY*(1) H 28	23.05	5.51	0.319
5. BD (1) O 4 - C 17	/500. RY*(2) H 28	24.61	6.54	0.359
5. BD (1) O 4 - C 17	/501. RY*(3) H 28	5295.22	2.98	3.553
5. BD (1) O 4 - C 17	/502. RY*(4) H 28	113.26	6.37	0.760
5. BD (1) O 4 - C 17	/503. RY*(5) H 28	1.24	7.13	0.084
5. BD (1) O 4 - C 17	/504. RY*(1) H 29	5.06	5.25	0.146
5. BD (1) O 4 - C 17	/505. RY*(2) H 29	4.66	6.23	0.152
5. BD (1) O 4 - C 17	/506. RY*(3) H 29	168.61	6.91	0.966
5. BD (1) O 4 - C 17	/507. RY*(4) H 29	8.68	7.37	0.226
5. BD (1) O 4 - C 17	/508. RY*(5) H 29	5.21	6.74	0.168
5. BD (1) O 4 - C 17	/509. RY*(1) H 30	12.83	5.52	0.238
5. BD (1) O 4 - C 17	/511. RY*(3) H 30	13.57	6.22	0.260
5. BD (1) O 4 - C 17	/516. RY*(3) H 31	2.08	6.20	0.102
5. BD (1) O 4 - C 17	/517. RY*(4) H 31	2.72	6.60	0.120
5. BD (1) O 4 - C 17	/528. RY*(1) H 34	23.23	6.02	0.335
5. BD (1) O 4 - C 17	/529. RY*(2) H 34	1036.46	4.81	1.997
5. BD (1) O 4 - C 17	/530. RY*(3) H 34	86.31	6.35	0.663
5. BD (1) O 4 - C 17	/531. RY*(4) H 34	14.14	6.43	0.270
5. BD (1) O 4 - C 17	/532. RY*(5) H 34	3.72	7.19	0.146
5. BD (1) O 4 - C 17	/533. RY*(1) H 35	235.37	5.34	1.003
5. BD (1) O 4 - C 17	/534. RY*(2) H 35	679.31	5.50	1.730
5. BD (1) O 4 - C 17	/535. RY*(3) H 35	57.59	6.36	0.542
5. BD (1) O 4 - C 17	/536. RY*(4) H 35	26.07	6.38	0.365
5. BD (1) O 4 - C 17	/537. RY*(5) H 35	14.28	7.30	0.289
5. BD (1) O 4 - C 17	/540. RY*(3) H 36	0.63	4.87	0.050
5. BD (1) O 4 - C 17	/541. RY*(4) H 36	5018.85	2.47	3.148
5. BD (1) O 4 - C 17	/542. RY*(5) H 36	234.47	6.37	1.094

5. BD (1) O 4 - C 17 /543. BD*(1) S 1 - O 2 1.39 4.90 0.076

5. BD (1) O 4 - C 17 /544. BD*(1) S 1 - O 3 0.85 4.90 0.060

5. BD (1) O 4 - C 17 /545. BD*(1) S 1 - N 6 1.50 4.74 0.080

5. BD (1) O 4 - C 17 /551. BD*(1) N 6 - C 9 3.73 4.97 0.122

5. BD (1) O 4 - C 17 /555. BD*(1) N 7 - H 24 0.63 5.00 0.050

5. BD (1) O 4 - C 17 /562. BD*(1) C 10 - C 11 4.02 5.06 0.128

5. BD (1) O 4 - C 17 /564. BD*(2) C 11 - C 12 1.18 4.63 0.073

5. BD (1) O 4 - C 17 /571. BD*(1) C 14 - C 15 1.50 5.17 0.079

5. BD (1) O 4 - C 17 /572. BD*(1) C 14 - H 27 23.42 5.00 0.306

5. BD (1) O 4 - C 17 /573. BD*(1) C 15 - C 16 1476.24 3.89 2.147

5. BD (1) O 4 - C 17 /574. BD*(2) C 15 - C 16 2.63 4.63 0.108

5. BD (1) O 4 - C 17 /575. BD*(1) C 15 - H 28 1.83 5.06 0.086

5. BD (1) O 4 - C 17 /576. BD*(1) C 18 - C 22 25.39 5.14 0.324

5. BD (1) O 4 - C 17 /577. BD*(1) C 19 - C 20 1.09 5.18 0.067

5. BD (1) O 4 - C 17 /578. BD*(2) C 19 - C 20 244.31 4.36 0.998

5. BD (1) O 4 - C 17 /579. BD*(1) C 19 - H 29 1063.17 4.07 1.863

5. BD (1) O 4 - C 17 /580. BD*(1) C 20 - C 21 6.40 5.21 0.163

5. BD (1) O 4 - C 17 /581. BD*(1) C 20 - H 30 8.78 5.06 0.188

5. BD (1) O 4 - C 17 /582. BD*(1) C 21 - C 22 9.08 5.20 0.194

5. BD (1) O 4 - C 17 /583. BD*(2) C 21 - C 22 52.15 4.58 0.471

5. BD (1) O 4 - C 17 /586. BD*(1) C 23 - H 34 120.95 7.66 0.860

5. BD (1) O 4 - C 17 /587. BD*(1) C 23 - H 35 173.67 7.93 1.048

5. BD (1) O 4 - C 17 /588. BD*(1) C 23 - H 36 329.64 7.30 1.387

6. BD (2) O 4 - C 17 / 87. RY*(1) S 1 9.22 1.62 0.111

6. BD (2) O 4 - C 17 / 88. RY*(2) S 1 9.31 1.55 0.108

6. BD (2) O 4 - C 17 / 89. RY*(3) S 1 1.90 1.71 0.051

6. BD (2) O 4 - C 17 / 90. RY*(4) S 1 2.13 1.65 0.053

6. BD (2) O 4 - C 17 / 92. RY*(6) S 1 8.13 2.46 0.126

6. BD (2) O	4 - C 17	/ 95. RY*(9) S	1	13.03	1.86	0.139
6. BD (2) O	4 - C 17	/ 96. RY*(10) S	1	11.71	1.74	0.128
6. BD (2) O	4 - C 17	/ 97. RY*(11) S	1	1.34	2.16	0.048
6. BD (2) O	4 - C 17	/ 98. RY*(12) S	1	438.14	1.20	0.650
6. BD (2) O	4 - C 17	/100. RY*(14) S	1	90.08	1.54	0.334
6. BD (2) O	4 - C 17	/101. RY*(15) S	1	292.19	1.20	0.531
6. BD (2) O	4 - C 17	/103. RY*(17) S	1	0.70	15.50	0.094
6. BD (2) O	4 - C 17	/108. RY*(1) O	2	3.53	1.95	0.074
6. BD (2) O	4 - C 17	/109. RY*(2) O	2	4.94	1.65	0.081
6. BD (2) O	4 - C 17	/110. RY*(3) O	2	13.34	1.80	0.139
6. BD (2) O	4 - C 17	/112. RY*(5) O	2	152.05	1.55	0.436
6. BD (2) O	4 - C 17	/113. RY*(6) O	2	3.59	1.79	0.072
6. BD (2) O	4 - C 17	/114. RY*(7) O	2	52.46	2.48	0.323
6. BD (2) O	4 - C 17	/115. RY*(8) O	2	4.44	2.25	0.090
6. BD (2) O	4 - C 17	/116. RY*(9) O	2	2.37	3.70	0.084
6. BD (2) O	4 - C 17	/117. RY*(10) O	2	2.67	3.67	0.089
6. BD (2) O	4 - C 17	/122. RY*(15) O	2	2.34	3.52	0.081
6. BD (2) O	4 - C 17	/123. RY*(16) O	2	0.83	3.98	0.052
6. BD (2) O	4 - C 17	/124. RY*(17) O	2	3.19	5.59	0.120
6. BD (2) O	4 - C 17	/125. RY*(1) O	3	1.50	2.01	0.049
6. BD (2) O	4 - C 17	/127. RY*(3) O	3	31.33	1.74	0.210
6. BD (2) O	4 - C 17	/128. RY*(4) O	3	4.50	1.45	0.073
6. BD (2) O	4 - C 17	/129. RY*(5) O	3	13.43	1.91	0.144
6. BD (2) O	4 - C 17	/130. RY*(6) O	3	147.67	1.46	0.416
6. BD (2) O	4 - C 17	/131. RY*(7) O	3	17.32	2.70	0.194
6. BD (2) O	4 - C 17	/132. RY*(8) O	3	1.30	1.96	0.045
6. BD (2) O	4 - C 17	/133. RY*(9) O	3	6.85	3.77	0.144
6. BD (2) O	4 - C 17	/135. RY*(11) O	3	0.94	5.84	0.066

6. BD (2) O 4 - C 17	/139. RY*(15) O 3	0.72	3.50	0.045
6. BD (2) O 4 - C 17	/140. RY*(16) O 3	3.68	3.91	0.108
6. BD (2) O 4 - C 17	/142. RY*(1) O 4	854.11	0.51	0.594
6. BD (2) O 4 - C 17	/145. RY*(4) O 4	1.25	2.12	0.046
6. BD (2) O 4 - C 17	/147. RY*(6) O 4	4.92	2.15	0.092
6. BD (2) O 4 - C 17	/148. RY*(7) O 4	0.53	3.03	0.036
6. BD (2) O 4 - C 17	/158. RY*(1) O 5	0.76	1.37	0.029
6. BD (2) O 4 - C 17	/159. RY*(2) O 5	0.83	1.72	0.034
6. BD (2) O 4 - C 17	/160. RY*(3) O 5	11.69	1.56	0.121
6. BD (2) O 4 - C 17	/162. RY*(5) O 5	1.64	2.38	0.056
6. BD (2) O 4 - C 17	/163. RY*(6) O 5	1.69	2.15	0.054
6. BD (2) O 4 - C 17	/164. RY*(7) O 5	3.64	2.44	0.084
6. BD (2) O 4 - C 17	/168. RY*(11) O 5	0.58	5.63	0.051
6. BD (2) O 4 - C 17	/175. RY*(2) N 6	0.96	1.68	0.036
6. BD (2) O 4 - C 17	/176. RY*(3) N 6	3.51	1.83	0.072
6. BD (2) O 4 - C 17	/177. RY*(4) N 6	6.18	1.70	0.092
6. BD (2) O 4 - C 17	/178. RY*(5) N 6	0.54	1.64	0.027
6. BD (2) O 4 - C 17	/180. RY*(7) N 6	11.64	1.93	0.134
6. BD (2) O 4 - C 17	/181. RY*(8) N 6	0.77	2.16	0.037
6. BD (2) O 4 - C 17	/183. RY*(10) N 6	1.35	2.81	0.055
6. BD (2) O 4 - C 17	/186. RY*(13) N 6	3.02	3.97	0.098
6. BD (2) O 4 - C 17	/188. RY*(15) N 6	5.48	4.76	0.145
6. BD (2) O 4 - C 17	/190. RY*(17) N 6	63.87	32.35	1.289
6. BD (2) O 4 - C 17	/191. RY*(1) N 7	54.63	1.42	0.249
6. BD (2) O 4 - C 17	/192. RY*(2) N 7	1.51	1.57	0.044
6. BD (2) O 4 - C 17	/195. RY*(5) N 7	111.25	1.37	0.350
6. BD (2) O 4 - C 17	/196. RY*(6) N 7	2.34	2.06	0.062
6. BD (2) O 4 - C 17	/197. RY*(7) N 7	5.50	2.69	0.109

6. BD (2) O 4 - C 17	/198. RY*(8) N 7	41.11	2.38	0.281
6. BD (2) O 4 - C 17	/199. RY*(9) N 7	64.46	3.16	0.404
6. BD (2) O 4 - C 17	/200. RY*(10) N 7	151.30	1.85	0.475
6. BD (2) O 4 - C 17	/201. RY*(11) N 7	0.74	3.84	0.048
6. BD (2) O 4 - C 17	/202. RY*(12) N 7	1.56	3.02	0.061
6. BD (2) O 4 - C 17	/204. RY*(14) N 7	5.39	3.59	0.125
6. BD (2) O 4 - C 17	/208. RY*(1) N 8	43.13	1.45	0.224
6. BD (2) O 4 - C 17	/211. RY*(4) N 8	0.68	2.94	0.040
6. BD (2) O 4 - C 17	/212. RY*(5) N 8	16.81	2.35	0.178
6. BD (2) O 4 - C 17	/213. RY*(6) N 8	1.07	2.15	0.043
6. BD (2) O 4 - C 17	/214. RY*(7) N 8	2.37	2.07	0.063
6. BD (2) O 4 - C 17	/215. RY*(8) N 8	1.86	2.32	0.059
6. BD (2) O 4 - C 17	/216. RY*(9) N 8	15.83	3.67	0.216
6. BD (2) O 4 - C 17	/217. RY*(10) N 8	9.93	1.69	0.116
6. BD (2) O 4 - C 17	/225. RY*(1) C 9	1.09	2.08	0.043
6. BD (2) O 4 - C 17	/226. RY*(2) C 9	5.10	1.74	0.084
6. BD (2) O 4 - C 17	/227. RY*(3) C 9	4.19	1.83	0.078
6. BD (2) O 4 - C 17	/228. RY*(4) C 9	5.18	2.07	0.093
6. BD (2) O 4 - C 17	/229. RY*(5) C 9	8.56	2.70	0.136
6. BD (2) O 4 - C 17	/230. RY*(6) C 9	25.39	1.93	0.198
6. BD (2) O 4 - C 17	/231. RY*(7) C 9	201.70	1.78	0.537
6. BD (2) O 4 - C 17	/232. RY*(8) C 9	107.45	2.10	0.426
6. BD (2) O 4 - C 17	/233. RY*(9) C 9	128.39	3.00	0.557
6. BD (2) O 4 - C 17	/234. RY*(10) C 9	209.79	1.98	0.577
6. BD (2) O 4 - C 17	/235. RY*(11) C 9	2280.76	0.41	0.868
6. BD (2) O 4 - C 17	/236. RY*(12) C 9	15.10	2.87	0.187
6. BD (2) O 4 - C 17	/237. RY*(13) C 9	452.25	2.41	0.937
6. BD (2) O 4 - C 17	/238. RY*(14) C 9	14.54	2.97	0.186

6. BD (2) O 4 - C 17	/239. RY*(15) C 9	12.31	3.25	0.179
6. BD (2) O 4 - C 17	/240. RY*(16) C 9	3.81	4.10	0.112
6. BD (2) O 4 - C 17	/241. RY*(17) C 9	8.38	20.26	0.370
6. BD (2) O 4 - C 17	/242. RY*(1) C 10	85.56	1.69	0.340
6. BD (2) O 4 - C 17	/244. RY*(3) C 10	4.51	2.40	0.093
6. BD (2) O 4 - C 17	/245. RY*(4) C 10	17.27	2.36	0.181
6. BD (2) O 4 - C 17	/246. RY*(5) C 10	4.67	1.86	0.084
6. BD (2) O 4 - C 17	/249. RY*(8) C 10	0.77	2.54	0.040
6. BD (2) O 4 - C 17	/250. RY*(9) C 10	4.94	2.55	0.101
6. BD (2) O 4 - C 17	/251. RY*(10) C 10	14.77	2.12	0.159
6. BD (2) O 4 - C 17	/252. RY*(11) C 10	338.73	1.12	0.552
6. BD (2) O 4 - C 17	/253. RY*(12) C 10	14.62	2.34	0.166
6. BD (2) O 4 - C 17	/255. RY*(14) C 10	5.16	2.47	0.101
6. BD (2) O 4 - C 17	/256. RY*(15) C 10	15.08	3.83	0.216
6. BD (2) O 4 - C 17	/257. RY*(16) C 10	0.89	18.17	0.114
6. BD (2) O 4 - C 17	/258. RY*(17) C 10	1.67	3.51	0.069
6. BD (2) O 4 - C 17	/260. RY*(2) C 11	13.99	2.09	0.153
6. BD (2) O 4 - C 17	/261. RY*(3) C 11	2.73	1.64	0.060
6. BD (2) O 4 - C 17	/262. RY*(4) C 11	1.39	1.91	0.046
6. BD (2) O 4 - C 17	/263. RY*(5) C 11	9.41	2.12	0.127
6. BD (2) O 4 - C 17	/264. RY*(6) C 11	2.11	2.03	0.059
6. BD (2) O 4 - C 17	/265. RY*(7) C 11	20.65	2.43	0.201
6. BD (2) O 4 - C 17	/266. RY*(8) C 11	5.20	2.22	0.096
6. BD (2) O 4 - C 17	/267. RY*(9) C 11	91.35	2.04	0.387
6. BD (2) O 4 - C 17	/268. RY*(10) C 11	51.16	2.73	0.335
6. BD (2) O 4 - C 17	/270. RY*(12) C 11	182.29	1.79	0.513
6. BD (2) O 4 - C 17	/271. RY*(13) C 11	0.87	3.70	0.051
6. BD (2) O 4 - C 17	/272. RY*(14) C 11	2.10	5.14	0.093

6. BD (2) O 4 - C 17	/273. RY*(15) C 11	53.78	2.44	0.325
6. BD (2) O 4 - C 17	/274. RY*(16) C 11	23.14	3.46	0.254
6. BD (2) O 4 - C 17	/278. RY*(3) C 12	1.65	1.37	0.043
6. BD (2) O 4 - C 17	/279. RY*(4) C 12	30.76	1.79	0.210
6. BD (2) O 4 - C 17	/280. RY*(5) C 12	7.60	1.69	0.102
6. BD (2) O 4 - C 17	/281. RY*(6) C 12	18.45	1.98	0.171
6. BD (2) O 4 - C 17	/282. RY*(7) C 12	1.20	2.11	0.045
6. BD (2) O 4 - C 17	/283. RY*(8) C 12	0.84	3.08	0.046
6. BD (2) O 4 - C 17	/284. RY*(9) C 12	4.21	3.15	0.103
6. BD (2) O 4 - C 17	/285. RY*(10) C 12	9.52	3.45	0.163
6. BD (2) O 4 - C 17	/286. RY*(11) C 12	91.42	1.63	0.346
6. BD (2) O 4 - C 17	/287. RY*(12) C 12	17.04	2.72	0.193
6. BD (2) O 4 - C 17	/288. RY*(13) C 12	10.24	2.18	0.134
6. BD (2) O 4 - C 17	/292. RY*(17) C 12	0.85	3.37	0.048
6. BD (2) O 4 - C 17	/295. RY*(3) C 13	1.21	1.78	0.042
6. BD (2) O 4 - C 17	/296. RY*(4) C 13	2.51	1.78	0.060
6. BD (2) O 4 - C 17	/298. RY*(6) C 13	11.78	1.85	0.132
6. BD (2) O 4 - C 17	/299. RY*(7) C 13	19.54	2.54	0.200
6. BD (2) O 4 - C 17	/300. RY*(8) C 13	3.62	3.19	0.096
6. BD (2) O 4 - C 17	/301. RY*(9) C 13	3.16	2.78	0.084
6. BD (2) O 4 - C 17	/302. RY*(10) C 13	2.19	2.93	0.072
6. BD (2) O 4 - C 17	/303. RY*(11) C 13	1.87	1.33	0.045
6. BD (2) O 4 - C 17	/304. RY*(12) C 13	0.63	3.48	0.042
6. BD (2) O 4 - C 17	/305. RY*(13) C 13	2.34	2.92	0.074
6. BD (2) O 4 - C 17	/309. RY*(17) C 13	2.17	2.44	0.065
6. BD (2) O 4 - C 17	/314. RY*(5) C 14	0.99	1.73	0.037
6. BD (2) O 4 - C 17	/316. RY*(7) C 14	1.04	2.41	0.045
6. BD (2) O 4 - C 17	/318. RY*(9) C 14	4.51	2.77	0.100

6. BD (2) O 4 - C 17	/319. RY*(10) C 14	5.24	2.02	0.092
6. BD (2) O 4 - C 17	/320. RY*(11) C 14	0.87	2.78	0.044
6. BD (2) O 4 - C 17	/321. RY*(12) C 14	0.51	3.46	0.038
6. BD (2) O 4 - C 17	/323. RY*(14) C 14	2.10	2.17	0.060
6. BD (2) O 4 - C 17	/326. RY*(17) C 14	7.60	2.46	0.123
6. BD (2) O 4 - C 17	/327. RY*(1) C 15	3.84	1.95	0.077
6. BD (2) O 4 - C 17	/330. RY*(4) C 15	26.36	1.69	0.189
6. BD (2) O 4 - C 17	/331. RY*(5) C 15	2.96	2.13	0.071
6. BD (2) O 4 - C 17	/332. RY*(6) C 15	0.77	1.68	0.032
6. BD (2) O 4 - C 17	/334. RY*(8) C 15	11.82	1.80	0.131
6. BD (2) O 4 - C 17	/335. RY*(9) C 15	1.28	4.67	0.069
6. BD (2) O 4 - C 17	/337. RY*(11) C 15	1.64	2.75	0.060
6. BD (2) O 4 - C 17	/338. RY*(12) C 15	7.60	1.59	0.098
6. BD (2) O 4 - C 17	/339. RY*(13) C 15	6.14	2.26	0.106
6. BD (2) O 4 - C 17	/340. RY*(14) C 15	10.62	3.34	0.169
6. BD (2) O 4 - C 17	/345. RY*(2) C 16	7.22	1.80	0.102
6. BD (2) O 4 - C 17	/346. RY*(3) C 16	2.07	1.58	0.051
6. BD (2) O 4 - C 17	/347. RY*(4) C 16	2.04	1.82	0.055
6. BD (2) O 4 - C 17	/348. RY*(5) C 16	75.73	2.15	0.362
6. BD (2) O 4 - C 17	/349. RY*(6) C 16	0.65	1.87	0.031
6. BD (2) O 4 - C 17	/351. RY*(8) C 16	12.17	2.31	0.150
6. BD (2) O 4 - C 17	/352. RY*(9) C 16	12.48	2.51	0.159
6. BD (2) O 4 - C 17	/353. RY*(10) C 16	0.87	1.91	0.036
6. BD (2) O 4 - C 17	/354. RY*(11) C 16	7.38	3.74	0.149
6. BD (2) O 4 - C 17	/355. RY*(12) C 16	4.49	4.37	0.126
6. BD (2) O 4 - C 17	/356. RY*(13) C 16	1.80	2.02	0.054
6. BD (2) O 4 - C 17	/357. RY*(14) C 16	56.11	2.54	0.339
6. BD (2) O 4 - C 17	/358. RY*(15) C 16	74.60	2.18	0.362

6. BD (2) O 4 - C 17	/361. RY*(1) C 17	3.01	1.86	0.067
6. BD (2) O 4 - C 17	/362. RY*(2) C 17	3.73	2.29	0.083
6. BD (2) O 4 - C 17	/363. RY*(3) C 17	0.77	2.30	0.038
6. BD (2) O 4 - C 17	/365. RY*(5) C 17	58.27	1.77	0.287
6. BD (2) O 4 - C 17	/367. RY*(7) C 17	5.12	2.83	0.108
6. BD (2) O 4 - C 17	/368. RY*(8) C 17	12.66	1.82	0.136
6. BD (2) O 4 - C 17	/370. RY*(10) C 17	67.33	3.96	0.463
6. BD (2) O 4 - C 17	/371. RY*(11) C 17	29.37	2.62	0.249
6. BD (2) O 4 - C 17	/372. RY*(12) C 17	26.73	3.77	0.285
6. BD (2) O 4 - C 17	/373. RY*(13) C 17	144.79	2.47	0.536
6. BD (2) O 4 - C 17	/375. RY*(15) C 17	0.58	6.34	0.054
6. BD (2) O 4 - C 17	/379. RY*(3) C 18	1.51	2.32	0.053
6. BD (2) O 4 - C 17	/380. RY*(4) C 18	2.10	2.49	0.065
6. BD (2) O 4 - C 17	/382. RY*(6) C 18	9.36	1.97	0.122
6. BD (2) O 4 - C 17	/383. RY*(7) C 18	95.67	1.57	0.348
6. BD (2) O 4 - C 17	/385. RY*(9) C 18	9.83	2.70	0.146
6. BD (2) O 4 - C 17	/386. RY*(10) C 18	13.95	2.80	0.177
6. BD (2) O 4 - C 17	/387. RY*(11) C 18	28.76	4.76	0.332
6. BD (2) O 4 - C 17	/388. RY*(12) C 18	22.09	3.04	0.232
6. BD (2) O 4 - C 17	/389. RY*(13) C 18	2.28	3.66	0.082
6. BD (2) O 4 - C 17	/392. RY*(16) C 18	117.67	1.22	0.339
6. BD (2) O 4 - C 17	/395. RY*(2) C 19	76.60	1.64	0.317
6. BD (2) O 4 - C 17	/396. RY*(3) C 19	2.97	2.30	0.074
6. BD (2) O 4 - C 17	/397. RY*(4) C 19	0.65	2.32	0.035
6. BD (2) O 4 - C 17	/398. RY*(5) C 19	0.62	1.63	0.028
6. BD (2) O 4 - C 17	/402. RY*(9) C 19	1.79	1.62	0.048
6. BD (2) O 4 - C 17	/403. RY*(10) C 19	0.88	1.34	0.031
6. BD (2) O 4 - C 17	/405. RY*(12) C 19	4.47	1.77	0.080

6. BD (2) O 4 - C 17	/408. RY*(15) C 19	0.66	2.06	0.033
6. BD (2) O 4 - C 17	/409. RY*(16) C 19	0.59	3.65	0.042
6. BD (2) O 4 - C 17	/413. RY*(3) C 20	3.98	1.36	0.066
6. BD (2) O 4 - C 17	/414. RY*(4) C 20	0.77	1.61	0.032
6. BD (2) O 4 - C 17	/415. RY*(5) C 20	1.03	1.85	0.039
6. BD (2) O 4 - C 17	/417. RY*(7) C 20	8.31	2.61	0.132
6. BD (2) O 4 - C 17	/421. RY*(11) C 20	1.24	2.42	0.049
6. BD (2) O 4 - C 17	/426. RY*(16) C 20	1.30	1.26	0.036
6. BD (2) O 4 - C 17	/427. RY*(17) C 20	2.17	2.82	0.070
6. BD (2) O 4 - C 17	/431. RY*(4) C 21	1.02	1.97	0.040
6. BD (2) O 4 - C 17	/432. RY*(5) C 21	0.55	1.58	0.027
6. BD (2) O 4 - C 17	/433. RY*(6) C 21	4.99	1.93	0.088
6. BD (2) O 4 - C 17	/437. RY*(10) C 21	1.74	2.34	0.057
6. BD (2) O 4 - C 17	/438. RY*(11) C 21	4.49	1.29	0.068
6. BD (2) O 4 - C 17	/440. RY*(13) C 21	1.04	2.91	0.049
6. BD (2) O 4 - C 17	/446. RY*(2) C 22	0.70	2.09	0.034
6. BD (2) O 4 - C 17	/447. RY*(3) C 22	1.73	1.33	0.043
6. BD (2) O 4 - C 17	/449. RY*(5) C 22	5.31	2.24	0.098
6. BD (2) O 4 - C 17	/450. RY*(6) C 22	4.55	1.84	0.082
6. BD (2) O 4 - C 17	/451. RY*(7) C 22	14.61	2.15	0.159
6. BD (2) O 4 - C 17	/452. RY*(8) C 22	0.83	3.01	0.045
6. BD (2) O 4 - C 17	/454. RY*(10) C 22	3.42	3.22	0.094
6. BD (2) O 4 - C 17	/455. RY*(11) C 22	2.20	2.09	0.061
6. BD (2) O 4 - C 17	/457. RY*(13) C 22	3.45	2.36	0.081
6. BD (2) O 4 - C 17	/458. RY*(14) C 22	5.78	1.50	0.084
6. BD (2) O 4 - C 17	/461. RY*(17) C 22	0.77	3.04	0.043
6. BD (2) O 4 - C 17	/462. RY*(1) C 23	749.57	0.74	0.667
6. BD (2) O 4 - C 17	/463. RY*(2) C 23	140.31	1.30	0.383

6. BD (2) O 4 - C 17	/464. RY*(3) C 23	40.92	1.63	0.231
6. BD (2) O 4 - C 17	/465. RY*(4) C 23	332.80	1.56	0.646
6. BD (2) O 4 - C 17	/466. RY*(5) C 23	2874.11	0.26	0.773
6. BD (2) O 4 - C 17	/467. RY*(6) C 23	10.24	2.39	0.140
6. BD (2) O 4 - C 17	/469. RY*(8) C 23	433.12	1.63	0.752
6. BD (2) O 4 - C 17	/471. RY*(10) C 23	630.68	1.41	0.846
6. BD (2) O 4 - C 17	/473. RY*(12) C 23	4.40	2.69	0.097
6. BD (2) O 4 - C 17	/474. RY*(13) C 23	17.35	3.59	0.224
6. BD (2) O 4 - C 17	/475. RY*(14) C 23	2.21	23.13	0.203
6. BD (2) O 4 - C 17	/476. RY*(15) C 23	234.02	1.86	0.591
6. BD (2) O 4 - C 17	/477. RY*(16) C 23	596.14	1.84	0.939
6. BD (2) O 4 - C 17	/478. RY*(17) C 23	5.50	3.19	0.119
6. BD (2) O 4 - C 17	/479. RY*(1) H 24	18.14	1.48	0.147
6. BD (2) O 4 - C 17	/481. RY*(3) H 24	0.99	2.46	0.044
6. BD (2) O 4 - C 17	/482. RY*(4) H 24	1.07	2.98	0.051
6. BD (2) O 4 - C 17	/483. RY*(5) H 24	8.09	3.42	0.149
6. BD (2) O 4 - C 17	/484. RY*(1) H 25	1.43	1.72	0.045
6. BD (2) O 4 - C 17	/485. RY*(2) H 25	0.90	2.83	0.045
6. BD (2) O 4 - C 17	/491. RY*(3) H 26	0.92	2.42	0.042
6. BD (2) O 4 - C 17	/492. RY*(4) H 26	10.11	2.76	0.150
6. BD (2) O 4 - C 17	/494. RY*(1) H 27	0.72	1.55	0.030
6. BD (2) O 4 - C 17	/496. RY*(3) H 27	17.29	2.35	0.181
6. BD (2) O 4 - C 17	/497. RY*(4) H 27	1165.20	0.94	0.938
6. BD (2) O 4 - C 17	/498. RY*(5) H 27	5.96	3.29	0.125
6. BD (2) O 4 - C 17	/499. RY*(1) H 28	9.33	1.73	0.114
6. BD (2) O 4 - C 17	/500. RY*(2) H 28	7.41	2.76	0.128
6. BD (2) O 4 - C 17	/502. RY*(4) H 28	34.92	2.58	0.269
6. BD (2) O 4 - C 17	/504. RY*(1) H 29	2.31	1.47	0.052

6. BD (2) O 4 - C 17	/505. RY*(2) H 29	1.56	2.45	0.055
6. BD (2) O 4 - C 17	/506. RY*(3) H 29	47.53	3.13	0.346
6. BD (2) O 4 - C 17	/507. RY*(4) H 29	1.98	3.59	0.076
6. BD (2) O 4 - C 17	/508. RY*(5) H 29	1.44	2.96	0.059
6. BD (2) O 4 - C 17	/509. RY*(1) H 30	4.98	1.74	0.083
6. BD (2) O 4 - C 17	/511. RY*(3) H 30	4.22	2.44	0.091
6. BD (2) O 4 - C 17	/516. RY*(3) H 31	0.64	2.42	0.035
6. BD (2) O 4 - C 17	/517. RY*(4) H 31	0.81	2.82	0.043
6. BD (2) O 4 - C 17	/528. RY*(1) H 34	7.90	2.24	0.119
6. BD (2) O 4 - C 17	/529. RY*(2) H 34	616.22	1.03	0.713
6. BD (2) O 4 - C 17	/530. RY*(3) H 34	26.97	2.57	0.236
6. BD (2) O 4 - C 17	/531. RY*(4) H 34	4.33	2.65	0.096
6. BD (2) O 4 - C 17	/532. RY*(5) H 34	1.02	3.41	0.053
6. BD (2) O 4 - C 17	/533. RY*(1) H 35	101.11	1.56	0.356
6. BD (2) O 4 - C 17	/534. RY*(2) H 35	276.01	1.72	0.618
6. BD (2) O 4 - C 17	/535. RY*(3) H 35	18.05	2.58	0.193
6. BD (2) O 4 - C 17	/536. RY*(4) H 35	8.12	2.60	0.130
6. BD (2) O 4 - C 17	/537. RY*(5) H 35	3.82	3.52	0.104
6. BD (2) O 4 - C 17	/542. RY*(5) H 36	72.01	2.59	0.387
6. BD (2) O 4 - C 17	/543. BD*(1) S 1 - O 2	0.81	1.12	0.028
6. BD (2) O 4 - C 17	/545. BD*(1) S 1 - N 6	0.95	0.96	0.029
6. BD (2) O 4 - C 17	/548. BD*(2) O 4 - C 17	0.93	0.82	0.027
6. BD (2) O 4 - C 17	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.63	1.19	0.024
6. BD (2) O 4 - C 17	/560. BD*(2) C 9 - C 10	1.24	0.84	0.031
6. BD (2) O 4 - C 17	/562. BD*(1) C 10 - C 11	2.29	1.28	0.049
6. BD (2) O 4 - C 17	/564. BD*(2) C 11 - C 12	0.94	0.85	0.028
6. BD (2) O 4 - C 17	/571. BD*(1) C 14 - C 15	0.72	1.39	0.028
6. BD (2) O 4 - C 17	/572. BD*(1) C 14 - H 27	12.17	1.22	0.109

6. BD (2) O 4 - C 17	/573. BD*(1) C 15 - C 16	6448.04	0.11	0.766
6. BD (2) O 4 - C 17	/574. BD*(2) C 15 - C 16	1.72	0.85	0.038
6. BD (2) O 4 - C 17	/575. BD*(1) C 15 - H 28	0.96	1.28	0.031
6. BD (2) O 4 - C 17	/576. BD*(1) C 18 - C 22	13.00	1.35	0.119
6. BD (2) O 4 - C 17	/577. BD*(1) C 19 - C 20	0.51	1.40	0.024
6. BD (2) O 4 - C 17	/578. BD*(2) C 19 - C 20	234.42	0.58	0.357
6. BD (2) O 4 - C 17	/579. BD*(1) C 19 - H 29	1892.10	0.29	0.665
6. BD (2) O 4 - C 17	/580. BD*(1) C 20 - C 21	3.13	1.43	0.060
6. BD (2) O 4 - C 17	/581. BD*(1) C 20 - H 30	4.30	1.28	0.066
6. BD (2) O 4 - C 17	/582. BD*(1) C 21 - C 22	4.29	1.42	0.070
6. BD (2) O 4 - C 17	/583. BD*(2) C 21 - C 22	40.80	0.80	0.174
6. BD (2) O 4 - C 17	/586. BD*(1) C 23 - H 34	28.86	3.88	0.299
6. BD (2) O 4 - C 17	/587. BD*(1) C 23 - H 35	41.57	4.15	0.372
6. BD (2) O 4 - C 17	/588. BD*(1) C 23 - H 36	80.16	3.52	0.475
7. BD (1) O 5 - C 10	/ 99. RY*(13) S 1	2.69	0.03	0.008
7. BD (1) O 5 - C 10	/237. RY*(13) C 9	0.59	2.52	0.035
7. BD (1) O 5 - C 10	/242. RY*(1) C 10	1.00	1.79	0.038
7. BD (1) O 5 - C 10	/260. RY*(2) C 11	0.76	2.20	0.037
7. BD (1) O 5 - C 10	/551. BD*(1) N 6 - C 9	2.21	1.29	0.048
7. BD (1) O 5 - C 10	/559. BD*(1) C 9 - C 10	1.58	1.51	0.044
7. BD (1) O 5 - C 10	/562. BD*(1) C 10 - C 11	0.79	1.39	0.030
7. BD (1) O 5 - C 10	/565. BD*(1) C 11 - C 16	1.61	1.47	0.044
8. BD (1) O 5 - H 33	/242. RY*(1) C 10	2.46	1.57	0.056
8. BD (1) O 5 - H 33	/244. RY*(3) C 10	1.00	2.28	0.043
8. BD (1) O 5 - H 33	/246. RY*(5) C 10	0.52	1.74	0.027
8. BD (1) O 5 - H 33	/562. BD*(1) C 10 - C 11	5.57	1.17	0.072
9. BD (1) N 6 - C 9	/ 88. RY*(2) S 1	1.37	1.50	0.041
9. BD (1) N 6 - C 9	/ 95. RY*(9) S 1	1.90	1.81	0.053

9. BD (1) N 6 - C 9	/ 96. RY*(10) S 1	0.59	1.69	0.028
9. BD (1) N 6 - C 9	/ 98. RY*(12) S 1	37.87	1.16	0.188
9. BD (1) N 6 - C 9	/100. RY*(14) S 1	8.21	1.49	0.099
9. BD (1) N 6 - C 9	/101. RY*(15) S 1	27.14	1.16	0.159
9. BD (1) N 6 - C 9	/110. RY*(3) O 2	1.53	1.75	0.046
9. BD (1) N 6 - C 9	/112. RY*(5) O 2	14.44	1.51	0.133
9. BD (1) N 6 - C 9	/114. RY*(7) O 2	4.66	2.44	0.096
9. BD (1) N 6 - C 9	/127. RY*(3) O 3	3.08	1.70	0.065
9. BD (1) N 6 - C 9	/129. RY*(5) O 3	0.95	1.87	0.038
9. BD (1) N 6 - C 9	/130. RY*(6) O 3	13.15	1.41	0.122
9. BD (1) N 6 - C 9	/131. RY*(7) O 3	1.39	2.66	0.055
9. BD (1) N 6 - C 9	/133. RY*(9) O 3	0.51	3.73	0.039
9. BD (1) N 6 - C 9	/142. RY*(1) O 4	78.92	0.47	0.173
9. BD (1) N 6 - C 9	/160. RY*(3) O 5	1.20	1.52	0.038
9. BD (1) N 6 - C 9	/188. RY*(15) N 6	0.54	4.72	0.045
9. BD (1) N 6 - C 9	/190. RY*(17) N 6	4.73	32.31	0.351
9. BD (1) N 6 - C 9	/191. RY*(1) N 7	5.35	1.38	0.077
9. BD (1) N 6 - C 9	/195. RY*(5) N 7	10.32	1.33	0.105
9. BD (1) N 6 - C 9	/198. RY*(8) N 7	3.32	2.34	0.079
9. BD (1) N 6 - C 9	/199. RY*(9) N 7	5.54	3.11	0.118
9. BD (1) N 6 - C 9	/200. RY*(10) N 7	13.10	1.81	0.138
9. BD (1) N 6 - C 9	/208. RY*(1) N 8	3.88	1.40	0.066
9. BD (1) N 6 - C 9	/212. RY*(5) N 8	1.66	2.31	0.056
9. BD (1) N 6 - C 9	/216. RY*(9) N 8	1.60	3.62	0.068
9. BD (1) N 6 - C 9	/217. RY*(10) N 8	0.90	1.65	0.035
9. BD (1) N 6 - C 9	/225. RY*(1) C 9	0.75	2.04	0.035
9. BD (1) N 6 - C 9	/226. RY*(2) C 9	0.92	1.70	0.035
9. BD (1) N 6 - C 9	/228. RY*(4) C 9	0.58	2.03	0.031

9. BD (1) N 6 - C 9	/229. RY*(5) C 9	0.71	2.66	0.039
9. BD (1) N 6 - C 9	/230. RY*(6) C 9	2.82	1.89	0.065
9. BD (1) N 6 - C 9	/231. RY*(7) C 9	19.10	1.74	0.163
9. BD (1) N 6 - C 9	/232. RY*(8) C 9	10.97	2.06	0.135
9. BD (1) N 6 - C 9	/233. RY*(9) C 9	10.39	2.96	0.157
9. BD (1) N 6 - C 9	/234. RY*(10) C 9	16.36	1.93	0.160
9. BD (1) N 6 - C 9	/235. RY*(11) C 9	233.92	0.37	0.263
9. BD (1) N 6 - C 9	/236. RY*(12) C 9	0.99	2.82	0.047
9. BD (1) N 6 - C 9	/237. RY*(13) C 9	36.66	2.37	0.264
9. BD (1) N 6 - C 9	/238. RY*(14) C 9	2.00	2.93	0.069
9. BD (1) N 6 - C 9	/239. RY*(15) C 9	1.13	3.21	0.054
9. BD (1) N 6 - C 9	/241. RY*(17) C 9	1.43	20.22	0.153
9. BD (1) N 6 - C 9	/242. RY*(1) C 10	6.50	1.65	0.093
9. BD (1) N 6 - C 9	/244. RY*(3) C 10	2.19	2.36	0.064
9. BD (1) N 6 - C 9	/245. RY*(4) C 10	1.53	2.32	0.053
9. BD (1) N 6 - C 9	/251. RY*(10) C 10	1.90	2.08	0.056
9. BD (1) N 6 - C 9	/252. RY*(11) C 10	29.95	1.08	0.161
9. BD (1) N 6 - C 9	/253. RY*(12) C 10	0.86	2.30	0.040
9. BD (1) N 6 - C 9	/255. RY*(14) C 10	1.19	2.43	0.048
9. BD (1) N 6 - C 9	/256. RY*(15) C 10	1.70	3.79	0.072
9. BD (1) N 6 - C 9	/260. RY*(2) C 11	0.61	2.05	0.032
9. BD (1) N 6 - C 9	/263. RY*(5) C 11	0.85	2.08	0.038
9. BD (1) N 6 - C 9	/265. RY*(7) C 11	1.78	2.39	0.059
9. BD (1) N 6 - C 9	/266. RY*(8) C 11	0.61	2.18	0.033
9. BD (1) N 6 - C 9	/267. RY*(9) C 11	8.40	1.99	0.116
9. BD (1) N 6 - C 9	/268. RY*(10) C 11	4.88	2.69	0.103
9. BD (1) N 6 - C 9	/270. RY*(12) C 11	18.21	1.75	0.160
9. BD (1) N 6 - C 9	/273. RY*(15) C 11	5.03	2.40	0.099

9. BD (1) N 6 - C 9	/274. RY*(16) C 11	2.08	3.42	0.076
9. BD (1) N 6 - C 9	/279. RY*(4) C 12	3.11	1.75	0.066
9. BD (1) N 6 - C 9	/280. RY*(5) C 12	0.50	1.65	0.026
9. BD (1) N 6 - C 9	/281. RY*(6) C 12	1.81	1.93	0.053
9. BD (1) N 6 - C 9	/285. RY*(10) C 12	0.87	3.41	0.049
9. BD (1) N 6 - C 9	/286. RY*(11) C 12	8.65	1.59	0.105
9. BD (1) N 6 - C 9	/287. RY*(12) C 12	1.55	2.68	0.058
9. BD (1) N 6 - C 9	/288. RY*(13) C 12	0.94	2.14	0.040
9. BD (1) N 6 - C 9	/298. RY*(6) C 13	1.12	1.81	0.040
9. BD (1) N 6 - C 9	/299. RY*(7) C 13	1.85	2.50	0.061
9. BD (1) N 6 - C 9	/326. RY*(17) C 14	0.72	2.41	0.038
9. BD (1) N 6 - C 9	/330. RY*(4) C 15	2.56	1.65	0.058
9. BD (1) N 6 - C 9	/334. RY*(8) C 15	1.14	1.76	0.040
9. BD (1) N 6 - C 9	/338. RY*(12) C 15	0.64	1.54	0.028
9. BD (1) N 6 - C 9	/339. RY*(13) C 15	0.52	2.22	0.030
9. BD (1) N 6 - C 9	/340. RY*(14) C 15	1.15	3.30	0.055
9. BD (1) N 6 - C 9	/345. RY*(2) C 16	0.64	1.76	0.030
9. BD (1) N 6 - C 9	/348. RY*(5) C 16	6.62	2.11	0.106
9. BD (1) N 6 - C 9	/351. RY*(8) C 16	1.07	2.27	0.044
9. BD (1) N 6 - C 9	/352. RY*(9) C 16	1.42	2.47	0.053
9. BD (1) N 6 - C 9	/354. RY*(11) C 16	0.67	3.69	0.045
9. BD (1) N 6 - C 9	/357. RY*(14) C 16	5.08	2.50	0.101
9. BD (1) N 6 - C 9	/358. RY*(15) C 16	7.06	2.14	0.110
9. BD (1) N 6 - C 9	/361. RY*(1) C 17	0.65	1.82	0.031
9. BD (1) N 6 - C 9	/365. RY*(5) C 17	6.30	1.72	0.093
9. BD (1) N 6 - C 9	/368. RY*(8) C 17	1.51	1.78	0.046
9. BD (1) N 6 - C 9	/370. RY*(10) C 17	8.22	3.92	0.161
9. BD (1) N 6 - C 9	/371. RY*(11) C 17	1.64	2.58	0.058

9. BD (1) N 6 - C 9	/372. RY*(12) C 17	1.81	3.73	0.074
9. BD (1) N 6 - C 9	/373. RY*(13) C 17	15.19	2.43	0.172
9. BD (1) N 6 - C 9	/382. RY*(6) C 18	0.77	1.93	0.035
9. BD (1) N 6 - C 9	/383. RY*(7) C 18	8.07	1.53	0.100
9. BD (1) N 6 - C 9	/385. RY*(9) C 18	0.88	2.66	0.043
9. BD (1) N 6 - C 9	/386. RY*(10) C 18	1.33	2.76	0.054
9. BD (1) N 6 - C 9	/387. RY*(11) C 18	2.17	4.72	0.091
9. BD (1) N 6 - C 9	/388. RY*(12) C 18	1.79	3.00	0.066
9. BD (1) N 6 - C 9	/392. RY*(16) C 18	10.26	1.18	0.099
9. BD (1) N 6 - C 9	/395. RY*(2) C 19	6.91	1.59	0.094
9. BD (1) N 6 - C 9	/417. RY*(7) C 20	0.75	2.57	0.039
9. BD (1) N 6 - C 9	/451. RY*(7) C 22	1.32	2.10	0.047
9. BD (1) N 6 - C 9	/458. RY*(14) C 22	0.52	1.46	0.025
9. BD (1) N 6 - C 9	/462. RY*(1) C 23	54.77	0.70	0.175
9. BD (1) N 6 - C 9	/463. RY*(2) C 23	15.20	1.26	0.124
9. BD (1) N 6 - C 9	/464. RY*(3) C 23	1.70	1.59	0.047
9. BD (1) N 6 - C 9	/465. RY*(4) C 23	28.37	1.52	0.186
9. BD (1) N 6 - C 9	/466. RY*(5) C 23	328.32	0.22	0.239
9. BD (1) N 6 - C 9	/469. RY*(8) C 23	42.56	1.58	0.233
9. BD (1) N 6 - C 9	/471. RY*(10) C 23	48.82	1.37	0.232
9. BD (1) N 6 - C 9	/473. RY*(12) C 23	1.25	2.64	0.051
9. BD (1) N 6 - C 9	/474. RY*(13) C 23	2.47	3.55	0.084
9. BD (1) N 6 - C 9	/476. RY*(15) C 23	13.82	1.82	0.142
9. BD (1) N 6 - C 9	/477. RY*(16) C 23	66.89	1.80	0.311
9. BD (1) N 6 - C 9	/479. RY*(1) H 24	1.26	1.44	0.038
9. BD (1) N 6 - C 9	/483. RY*(5) H 24	0.65	3.37	0.042
9. BD (1) N 6 - C 9	/492. RY*(4) H 26	0.91	2.71	0.045
9. BD (1) N 6 - C 9	/496. RY*(3) H 27	1.67	2.31	0.056

9. BD (1) N 6 - C 9	/497. RY*(4) H 27	116.48	0.90	0.290
9. BD (1) N 6 - C 9	/499. RY*(1) H 28	0.84	1.69	0.034
9. BD (1) N 6 - C 9	/500. RY*(2) H 28	0.67	2.71	0.038
9. BD (1) N 6 - C 9	/502. RY*(4) H 28	1.93	2.54	0.063
9. BD (1) N 6 - C 9	/506. RY*(3) H 29	5.79	3.09	0.120
9. BD (1) N 6 - C 9	/528. RY*(1) H 34	0.57	2.20	0.032
9. BD (1) N 6 - C 9	/529. RY*(2) H 34	58.58	0.98	0.215
9. BD (1) N 6 - C 9	/530. RY*(3) H 34	2.09	2.53	0.065
9. BD (1) N 6 - C 9	/533. RY*(1) H 35	7.35	1.52	0.095
9. BD (1) N 6 - C 9	/534. RY*(2) H 35	27.02	1.68	0.191
9. BD (1) N 6 - C 9	/535. RY*(3) H 35	1.30	2.53	0.052
9. BD (1) N 6 - C 9	/536. RY*(4) H 35	1.04	2.56	0.046
9. BD (1) N 6 - C 9	/542. RY*(5) H 36	0.64	2.55	0.036
9. BD (1) N 6 - C 9	/543. BD*(1) S 1 - O 2	0.50	1.08	0.021
9. BD (1) N 6 - C 9	/547. BD*(1) O 4 - C 17	1.66	1.29	0.041
9. BD (1) N 6 - C 9	/549. BD*(1) O 5 - C 10	2.74	1.15	0.050
9. BD (1) N 6 - C 9	/559. BD*(1) C 9 - C 10	1.82	1.36	0.045
9. BD (1) N 6 - C 9	/572. BD*(1) C 14 - H 27	1.11	1.18	0.032
9. BD (1) N 6 - C 9	/573. BD*(1) C 15 - C 16	947.13	0.07	0.233
9. BD (1) N 6 - C 9	/576. BD*(1) C 18 - C 22	0.96	1.31	0.032
9. BD (1) N 6 - C 9	/578. BD*(2) C 19 - C 20	21.94	0.54	0.105
9. BD (1) N 6 - C 9	/579. BD*(1) C 19 - H 29	192.19	0.25	0.196
9. BD (1) N 6 - C 9	/583. BD*(2) C 21 - C 22	3.64	0.76	0.051
9. BD (1) N 6 - C 9	/588. BD*(1) C 23 - H 36	3.97	3.48	0.105
10. BD (1) N 6 - C 23	/ 88. RY*(2) S 1	1.45	1.28	0.039
10. BD (1) N 6 - C 23	/ 90. RY*(4) S 1	0.77	1.38	0.029
10. BD (1) N 6 - C 23	/ 92. RY*(6) S 1	2.68	2.19	0.069
10. BD (1) N 6 - C 23	/ 95. RY*(9) S 1	0.89	1.59	0.034

10. BD (1) N 6 - C 23	/ 96. RY*(10) S 1	1.03	1.47	0.035
10. BD (1) N 6 - C 23	/ 98. RY*(12) S 1	38.85	0.94	0.171
10. BD (1) N 6 - C 23	/100. RY*(14) S 1	9.11	1.27	0.097
10. BD (1) N 6 - C 23	/101. RY*(15) S 1	22.86	0.94	0.131
10. BD (1) N 6 - C 23	/110. RY*(3) O 2	0.95	1.53	0.034
10. BD (1) N 6 - C 23	/112. RY*(5) O 2	13.53	1.29	0.118
10. BD (1) N 6 - C 23	/114. RY*(7) O 2	4.34	2.22	0.088
10. BD (1) N 6 - C 23	/127. RY*(3) O 3	3.01	1.48	0.060
10. BD (1) N 6 - C 23	/128. RY*(4) O 3	0.67	1.19	0.025
10. BD (1) N 6 - C 23	/129. RY*(5) O 3	1.30	1.65	0.041
10. BD (1) N 6 - C 23	/130. RY*(6) O 3	12.46	1.19	0.109
10. BD (1) N 6 - C 23	/131. RY*(7) O 3	1.44	2.44	0.053
10. BD (1) N 6 - C 23	/142. RY*(1) O 4	113.11	0.25	0.151
10. BD (1) N 6 - C 23	/160. RY*(3) O 5	0.97	1.30	0.032
10. BD (1) N 6 - C 23	/188. RY*(15) N 6	0.54	4.50	0.044
10. BD (1) N 6 - C 23	/190. RY*(17) N 6	3.18	32.09	0.286
10. BD (1) N 6 - C 23	/191. RY*(1) N 7	4.68	1.16	0.066
10. BD (1) N 6 - C 23	/195. RY*(5) N 7	8.22	1.10	0.085
10. BD (1) N 6 - C 23	/198. RY*(8) N 7	3.12	2.12	0.073
10. BD (1) N 6 - C 23	/199. RY*(9) N 7	4.77	2.89	0.105
10. BD (1) N 6 - C 23	/200. RY*(10) N 7	11.44	1.59	0.121
10. BD (1) N 6 - C 23	/208. RY*(1) N 8	3.64	1.18	0.059
10. BD (1) N 6 - C 23	/212. RY*(5) N 8	1.35	2.09	0.048
10. BD (1) N 6 - C 23	/216. RY*(9) N 8	1.21	3.40	0.057
10. BD (1) N 6 - C 23	/217. RY*(10) N 8	0.85	1.43	0.031
10. BD (1) N 6 - C 23	/226. RY*(2) C 9	2.96	1.48	0.059
10. BD (1) N 6 - C 23	/228. RY*(4) C 9	0.57	1.81	0.029
10. BD (1) N 6 - C 23	/230. RY*(6) C 9	2.11	1.66	0.053

10. BD (1) N 6 - C 23	/231. RY*(7) C 9	17.27	1.52	0.145
10. BD (1) N 6 - C 23	/232. RY*(8) C 9	9.49	1.83	0.118
10. BD (1) N 6 - C 23	/233. RY*(9) C 9	8.85	2.74	0.140
10. BD (1) N 6 - C 23	/234. RY*(10) C 9	16.60	1.71	0.151
10. BD (1) N 6 - C 23	/235. RY*(11) C 9	445.02	0.15	0.229
10. BD (1) N 6 - C 23	/236. RY*(12) C 9	1.02	2.60	0.046
10. BD (1) N 6 - C 23	/237. RY*(13) C 9	36.01	2.15	0.249
10. BD (1) N 6 - C 23	/238. RY*(14) C 9	1.26	2.71	0.052
10. BD (1) N 6 - C 23	/242. RY*(1) C 10	7.69	1.42	0.094
10. BD (1) N 6 - C 23	/245. RY*(4) C 10	1.40	2.10	0.049
10. BD (1) N 6 - C 23	/246. RY*(5) C 10	0.73	1.60	0.031
10. BD (1) N 6 - C 23	/250. RY*(9) C 10	0.54	2.28	0.031
10. BD (1) N 6 - C 23	/251. RY*(10) C 10	1.47	1.86	0.047
10. BD (1) N 6 - C 23	/252. RY*(11) C 10	31.17	0.86	0.146
10. BD (1) N 6 - C 23	/253. RY*(12) C 10	1.05	2.08	0.042
10. BD (1) N 6 - C 23	/256. RY*(15) C 10	1.07	3.57	0.055
10. BD (1) N 6 - C 23	/260. RY*(2) C 11	1.19	1.83	0.042
10. BD (1) N 6 - C 23	/263. RY*(5) C 11	0.70	1.86	0.032
10. BD (1) N 6 - C 23	/265. RY*(7) C 11	1.70	2.17	0.054
10. BD (1) N 6 - C 23	/267. RY*(9) C 11	7.30	1.77	0.102
10. BD (1) N 6 - C 23	/268. RY*(10) C 11	3.97	2.47	0.089
10. BD (1) N 6 - C 23	/270. RY*(12) C 11	15.73	1.53	0.139
10. BD (1) N 6 - C 23	/273. RY*(15) C 11	4.18	2.18	0.086
10. BD (1) N 6 - C 23	/274. RY*(16) C 11	1.79	3.19	0.068
10. BD (1) N 6 - C 23	/279. RY*(4) C 12	2.61	1.53	0.057
10. BD (1) N 6 - C 23	/280. RY*(5) C 12	0.62	1.43	0.027
10. BD (1) N 6 - C 23	/281. RY*(6) C 12	1.57	1.71	0.046
10. BD (1) N 6 - C 23	/285. RY*(10) C 12	0.75	3.19	0.044

10. BD (1) N 6 - C 23	/286. RY*(11) C 12	7.49	1.37	0.091
10. BD (1) N 6 - C 23	/287. RY*(12) C 12	1.31	2.46	0.051
10. BD (1) N 6 - C 23	/288. RY*(13) C 12	0.82	1.92	0.036
10. BD (1) N 6 - C 23	/298. RY*(6) C 13	1.05	1.58	0.036
10. BD (1) N 6 - C 23	/299. RY*(7) C 13	1.52	2.28	0.053
10. BD (1) N 6 - C 23	/326. RY*(17) C 14	0.67	2.19	0.034
10. BD (1) N 6 - C 23	/327. RY*(1) C 15	0.59	1.68	0.028
10. BD (1) N 6 - C 23	/330. RY*(4) C 15	2.93	1.43	0.058
10. BD (1) N 6 - C 23	/334. RY*(8) C 15	1.05	1.54	0.036
10. BD (1) N 6 - C 23	/338. RY*(12) C 15	0.60	1.32	0.025
10. BD (1) N 6 - C 23	/339. RY*(13) C 15	0.51	2.00	0.029
10. BD (1) N 6 - C 23	/340. RY*(14) C 15	0.99	3.08	0.049
10. BD (1) N 6 - C 23	/348. RY*(5) C 16	6.38	1.88	0.098
10. BD (1) N 6 - C 23	/351. RY*(8) C 16	0.98	2.05	0.040
10. BD (1) N 6 - C 23	/352. RY*(9) C 16	1.04	2.25	0.043
10. BD (1) N 6 - C 23	/354. RY*(11) C 16	0.61	3.47	0.041
10. BD (1) N 6 - C 23	/357. RY*(14) C 16	4.52	2.28	0.091
10. BD (1) N 6 - C 23	/358. RY*(15) C 16	6.23	1.92	0.098
10. BD (1) N 6 - C 23	/365. RY*(5) C 17	5.87	1.50	0.084
10. BD (1) N 6 - C 23	/367. RY*(7) C 17	0.54	2.57	0.033
10. BD (1) N 6 - C 23	/368. RY*(8) C 17	1.19	1.56	0.039
10. BD (1) N 6 - C 23	/370. RY*(10) C 17	5.38	3.69	0.126
10. BD (1) N 6 - C 23	/371. RY*(11) C 17	2.18	2.36	0.064
10. BD (1) N 6 - C 23	/372. RY*(12) C 17	2.01	3.51	0.075
10. BD (1) N 6 - C 23	/373. RY*(13) C 17	11.20	2.20	0.141
10. BD (1) N 6 - C 23	/382. RY*(6) C 18	0.69	1.71	0.031
10. BD (1) N 6 - C 23	/383. RY*(7) C 18	7.29	1.31	0.088
10. BD (1) N 6 - C 23	/385. RY*(9) C 18	0.67	2.44	0.036

10. BD (1) N 6 - C 23	/386. RY*(10) C 18	1.05	2.54	0.046
10. BD (1) N 6 - C 23	/387. RY*(11) C 18	2.05	4.49	0.086
10. BD (1) N 6 - C 23	/388. RY*(12) C 18	1.54	2.78	0.059
10. BD (1) N 6 - C 23	/392. RY*(16) C 18	9.54	0.95	0.086
10. BD (1) N 6 - C 23	/395. RY*(2) C 19	6.59	1.37	0.085
10. BD (1) N 6 - C 23	/417. RY*(7) C 20	0.63	2.34	0.034
10. BD (1) N 6 - C 23	/451. RY*(7) C 22	1.16	1.88	0.042
10. BD (1) N 6 - C 23	/458. RY*(14) C 22	0.51	1.24	0.022
10. BD (1) N 6 - C 23	/462. RY*(1) C 23	94.34	0.48	0.190
10. BD (1) N 6 - C 23	/463. RY*(2) C 23	14.58	1.04	0.110
10. BD (1) N 6 - C 23	/464. RY*(3) C 23	3.52	1.36	0.062
10. BD (1) N 6 - C 23	/465. RY*(4) C 23	15.47	1.30	0.127
10. BD (1) N 6 - C 23	/469. RY*(8) C 23	35.90	1.36	0.198
10. BD (1) N 6 - C 23	/471. RY*(10) C 23	64.51	1.15	0.244
10. BD (1) N 6 - C 23	/473. RY*(12) C 23	0.51	2.42	0.031
10. BD (1) N 6 - C 23	/474. RY*(13) C 23	1.08	3.33	0.054
10. BD (1) N 6 - C 23	/475. RY*(14) C 23	1.14	22.87	0.145
10. BD (1) N 6 - C 23	/476. RY*(15) C 23	12.12	1.59	0.125
10. BD (1) N 6 - C 23	/477. RY*(16) C 23	49.28	1.57	0.250
10. BD (1) N 6 - C 23	/479. RY*(1) H 24	0.87	1.21	0.029
10. BD (1) N 6 - C 23	/483. RY*(5) H 24	0.67	3.15	0.041
10. BD (1) N 6 - C 23	/492. RY*(4) H 26	0.76	2.49	0.039
10. BD (1) N 6 - C 23	/496. RY*(3) H 27	1.38	2.08	0.048
10. BD (1) N 6 - C 23	/497. RY*(4) H 27	114.49	0.68	0.249
10. BD (1) N 6 - C 23	/499. RY*(1) H 28	0.65	1.46	0.028
10. BD (1) N 6 - C 23	/502. RY*(4) H 28	2.17	2.32	0.064
10. BD (1) N 6 - C 23	/506. RY*(3) H 29	4.54	2.87	0.102
10. BD (1) N 6 - C 23	/511. RY*(3) H 30	0.65	2.17	0.034

10. BD (1) N 6 - C 23	/529. RY*(2) H 34	66.84	0.76	0.202
10. BD (1) N 6 - C 23	/530. RY*(3) H 34	2.98	2.31	0.074
10. BD (1) N 6 - C 23	/533. RY*(1) H 35	5.18	1.30	0.074
10. BD (1) N 6 - C 23	/534. RY*(2) H 35	28.16	1.46	0.182
10. BD (1) N 6 - C 23	/535. RY*(3) H 35	1.71	2.31	0.056
10. BD (1) N 6 - C 23	/536. RY*(4) H 35	1.01	2.34	0.044
10. BD (1) N 6 - C 23	/540. RY*(3) H 36	1.39	0.82	0.030
10. BD (1) N 6 - C 23	/544. BD*(1) S 1 - O 3	1.04	0.86	0.028
10. BD (1) N 6 - C 23	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.64	0.92	0.022
10. BD (1) N 6 - C 23	/559. BD*(1) C 9 - C 10	0.51	1.14	0.022
10. BD (1) N 6 - C 23	/560. BD*(2) C 9 - C 10	2.14	0.58	0.034
10. BD (1) N 6 - C 23	/572. BD*(1) C 14 - H 27	1.11	0.96	0.029
10. BD (1) N 6 - C 23	/576. BD*(1) C 18 - C 22	0.58	1.09	0.023
10. BD (1) N 6 - C 23	/578. BD*(2) C 19 - C 20	28.42	0.32	0.092
10. BD (1) N 6 - C 23	/579. BD*(1) C 19 - H 29	1310.83	0.03	0.171
10. BD (1) N 6 - C 23	/583. BD*(2) C 21 - C 22	4.01	0.54	0.045
10. BD (1) N 6 - C 23	/588. BD*(1) C 23 - H 36	20.36	3.26	0.230
11. BD (1) N 7 - C 17	/ 87. RY*(1) S 1	2.98	1.80	0.066
11. BD (1) N 7 - C 17	/ 88. RY*(2) S 1	2.95	1.73	0.064
11. BD (1) N 7 - C 17	/ 89. RY*(3) S 1	0.61	1.89	0.030
11. BD (1) N 7 - C 17	/ 90. RY*(4) S 1	0.75	1.83	0.033
11. BD (1) N 7 - C 17	/ 92. RY*(6) S 1	2.92	2.63	0.078
11. BD (1) N 7 - C 17	/ 95. RY*(9) S 1	4.39	2.03	0.085
11. BD (1) N 7 - C 17	/ 96. RY*(10) S 1	3.66	1.91	0.075
11. BD (1) N 7 - C 17	/ 98. RY*(12) S 1	138.62	1.38	0.391
11. BD (1) N 7 - C 17	/ 99. RY*(13) S 1	3399.55	0.10	0.530
11. BD (1) N 7 - C 17	/100. RY*(14) S 1	29.73	1.71	0.202
11. BD (1) N 7 - C 17	/101. RY*(15) S 1	93.78	1.38	0.322

11. BD (1) N 7 - C 17	/108. RY*(1) O 2	1.18	2.13	0.045
11. BD (1) N 7 - C 17	/109. RY*(2) O 2	1.66	1.83	0.049
11. BD (1) N 7 - C 17	/110. RY*(3) O 2	4.39	1.97	0.083
11. BD (1) N 7 - C 17	/112. RY*(5) O 2	49.53	1.73	0.262
11. BD (1) N 7 - C 17	/113. RY*(6) O 2	1.07	1.97	0.041
11. BD (1) N 7 - C 17	/114. RY*(7) O 2	18.03	2.66	0.196
11. BD (1) N 7 - C 17	/115. RY*(8) O 2	1.50	2.42	0.054
11. BD (1) N 7 - C 17	/116. RY*(9) O 2	0.80	3.88	0.050
11. BD (1) N 7 - C 17	/117. RY*(10) O 2	0.91	3.85	0.053
11. BD (1) N 7 - C 17	/122. RY*(15) O 2	0.79	3.70	0.048
11. BD (1) N 7 - C 17	/124. RY*(17) O 2	1.13	5.77	0.072
11. BD (1) N 7 - C 17	/125. RY*(1) O 3	0.54	2.19	0.031
11. BD (1) N 7 - C 17	/127. RY*(3) O 3	10.40	1.92	0.127
11. BD (1) N 7 - C 17	/128. RY*(4) O 3	1.53	1.63	0.045
11. BD (1) N 7 - C 17	/129. RY*(5) O 3	4.44	2.09	0.086
11. BD (1) N 7 - C 17	/130. RY*(6) O 3	47.78	1.64	0.250
11. BD (1) N 7 - C 17	/131. RY*(7) O 3	5.88	2.88	0.117
11. BD (1) N 7 - C 17	/133. RY*(9) O 3	2.43	3.95	0.088
11. BD (1) N 7 - C 17	/140. RY*(16) O 3	1.28	4.09	0.065
11. BD (1) N 7 - C 17	/142. RY*(1) O 4	229.16	0.69	0.357
11. BD (1) N 7 - C 17	/147. RY*(6) O 4	1.67	2.32	0.056
11. BD (1) N 7 - C 17	/160. RY*(3) O 5	3.41	1.74	0.069
11. BD (1) N 7 - C 17	/164. RY*(7) O 5	1.36	2.62	0.053
11. BD (1) N 7 - C 17	/176. RY*(3) N 6	0.89	2.01	0.038
11. BD (1) N 7 - C 17	/177. RY*(4) N 6	1.43	1.88	0.046
11. BD (1) N 7 - C 17	/180. RY*(7) N 6	4.16	2.11	0.084
11. BD (1) N 7 - C 17	/186. RY*(13) N 6	1.30	4.15	0.066
11. BD (1) N 7 - C 17	/188. RY*(15) N 6	2.16	4.94	0.093

11. BD (1) N 7 - C 17	/190. RY*(17) N 6	22.96	32.53	0.774
11. BD (1) N 7 - C 17	/191. RY*(1) N 7	19.71	1.60	0.159
11. BD (1) N 7 - C 17	/192. RY*(2) N 7	0.63	1.74	0.030
11. BD (1) N 7 - C 17	/195. RY*(5) N 7	34.05	1.55	0.205
11. BD (1) N 7 - C 17	/196. RY*(6) N 7	0.92	2.24	0.041
11. BD (1) N 7 - C 17	/197. RY*(7) N 7	1.67	2.87	0.062
11. BD (1) N 7 - C 17	/198. RY*(8) N 7	12.40	2.56	0.159
11. BD (1) N 7 - C 17	/199. RY*(9) N 7	22.64	3.33	0.246
11. BD (1) N 7 - C 17	/200. RY*(10) N 7	52.25	2.03	0.292
11. BD (1) N 7 - C 17	/202. RY*(12) N 7	0.70	3.20	0.042
11. BD (1) N 7 - C 17	/204. RY*(14) N 7	1.66	3.77	0.071
11. BD (1) N 7 - C 17	/208. RY*(1) N 8	16.45	1.62	0.146
11. BD (1) N 7 - C 17	/212. RY*(5) N 8	4.84	2.53	0.099
11. BD (1) N 7 - C 17	/214. RY*(7) N 8	0.96	2.25	0.042
11. BD (1) N 7 - C 17	/216. RY*(9) N 8	5.48	3.84	0.130
11. BD (1) N 7 - C 17	/217. RY*(10) N 8	3.07	1.87	0.068
11. BD (1) N 7 - C 17	/225. RY*(1) C 9	0.53	2.26	0.031
11. BD (1) N 7 - C 17	/226. RY*(2) C 9	1.08	1.92	0.041
11. BD (1) N 7 - C 17	/227. RY*(3) C 9	1.76	2.01	0.053
11. BD (1) N 7 - C 17	/228. RY*(4) C 9	2.07	2.25	0.061
11. BD (1) N 7 - C 17	/229. RY*(5) C 9	3.26	2.88	0.087
11. BD (1) N 7 - C 17	/230. RY*(6) C 9	8.84	2.11	0.122
11. BD (1) N 7 - C 17	/231. RY*(7) C 9	66.18	1.96	0.322
11. BD (1) N 7 - C 17	/232. RY*(8) C 9	35.74	2.28	0.255
11. BD (1) N 7 - C 17	/233. RY*(9) C 9	47.60	3.18	0.348
11. BD (1) N 7 - C 17	/234. RY*(10) C 9	69.81	2.16	0.347
11. BD (1) N 7 - C 17	/235. RY*(11) C 9	572.32	0.59	0.520
11. BD (1) N 7 - C 17	/236. RY*(12) C 9	7.25	3.05	0.133

11. BD (1) N 7 - C 17	/237. RY*(13) C 9	163.08	2.59	0.582
11. BD (1) N 7 - C 17	/238. RY*(14) C 9	4.22	3.15	0.103
11. BD (1) N 7 - C 17	/239. RY*(15) C 9	4.57	3.43	0.112
11. BD (1) N 7 - C 17	/240. RY*(16) C 9	1.04	4.28	0.060
11. BD (1) N 7 - C 17	/241. RY*(17) C 9	2.06	20.44	0.184
11. BD (1) N 7 - C 17	/242. RY*(1) C 10	29.76	1.87	0.211
11. BD (1) N 7 - C 17	/244. RY*(3) C 10	2.11	2.58	0.066
11. BD (1) N 7 - C 17	/245. RY*(4) C 10	4.85	2.54	0.099
11. BD (1) N 7 - C 17	/246. RY*(5) C 10	1.84	2.04	0.055
11. BD (1) N 7 - C 17	/250. RY*(9) C 10	1.44	2.73	0.056
11. BD (1) N 7 - C 17	/251. RY*(10) C 10	5.10	2.30	0.097
11. BD (1) N 7 - C 17	/252. RY*(11) C 10	109.77	1.30	0.338
11. BD (1) N 7 - C 17	/253. RY*(12) C 10	5.10	2.52	0.101
11. BD (1) N 7 - C 17	/255. RY*(14) C 10	1.80	2.65	0.062
11. BD (1) N 7 - C 17	/256. RY*(15) C 10	4.40	4.01	0.119
11. BD (1) N 7 - C 17	/258. RY*(17) C 10	0.67	3.68	0.045
11. BD (1) N 7 - C 17	/260. RY*(2) C 11	4.70	2.27	0.092
11. BD (1) N 7 - C 17	/261. RY*(3) C 11	0.87	1.81	0.036
11. BD (1) N 7 - C 17	/263. RY*(5) C 11	3.04	2.30	0.075
11. BD (1) N 7 - C 17	/264. RY*(6) C 11	0.64	2.21	0.034
11. BD (1) N 7 - C 17	/265. RY*(7) C 11	6.89	2.61	0.120
11. BD (1) N 7 - C 17	/266. RY*(8) C 11	1.70	2.40	0.057
11. BD (1) N 7 - C 17	/267. RY*(9) C 11	30.65	2.21	0.233
11. BD (1) N 7 - C 17	/268. RY*(10) C 11	17.63	2.91	0.203
11. BD (1) N 7 - C 17	/270. RY*(12) C 11	59.25	1.97	0.306
11. BD (1) N 7 - C 17	/272. RY*(14) C 11	0.68	5.32	0.054
11. BD (1) N 7 - C 17	/273. RY*(15) C 11	17.82	2.62	0.194
11. BD (1) N 7 - C 17	/274. RY*(16) C 11	8.01	3.64	0.153

11. BD (1) N 7 - C 17	/278. RY*(3) C 12	0.53	1.55	0.026
11. BD (1) N 7 - C 17	/279. RY*(4) C 12	10.08	1.97	0.126
11. BD (1) N 7 - C 17	/280. RY*(5) C 12	2.60	1.87	0.062
11. BD (1) N 7 - C 17	/281. RY*(6) C 12	6.12	2.15	0.103
11. BD (1) N 7 - C 17	/284. RY*(9) C 12	1.43	3.33	0.062
11. BD (1) N 7 - C 17	/285. RY*(10) C 12	3.32	3.63	0.098
11. BD (1) N 7 - C 17	/286. RY*(11) C 12	29.79	1.81	0.208
11. BD (1) N 7 - C 17	/287. RY*(12) C 12	5.86	2.90	0.117
11. BD (1) N 7 - C 17	/288. RY*(13) C 12	3.49	2.36	0.081
11. BD (1) N 7 - C 17	/296. RY*(4) C 13	0.90	1.96	0.038
11. BD (1) N 7 - C 17	/298. RY*(6) C 13	3.96	2.03	0.080
11. BD (1) N 7 - C 17	/299. RY*(7) C 13	6.64	2.72	0.120
11. BD (1) N 7 - C 17	/300. RY*(8) C 13	1.24	3.37	0.058
11. BD (1) N 7 - C 17	/301. RY*(9) C 13	1.07	2.96	0.050
11. BD (1) N 7 - C 17	/302. RY*(10) C 13	0.76	3.11	0.043
11. BD (1) N 7 - C 17	/303. RY*(11) C 13	0.58	1.51	0.027
11. BD (1) N 7 - C 17	/305. RY*(13) C 13	0.81	3.10	0.045
11. BD (1) N 7 - C 17	/309. RY*(17) C 13	0.71	2.62	0.039
11. BD (1) N 7 - C 17	/318. RY*(9) C 14	1.56	2.95	0.061
11. BD (1) N 7 - C 17	/319. RY*(10) C 14	1.75	2.19	0.056
11. BD (1) N 7 - C 17	/323. RY*(14) C 14	0.68	2.35	0.036
11. BD (1) N 7 - C 17	/326. RY*(17) C 14	2.53	2.63	0.073
11. BD (1) N 7 - C 17	/327. RY*(1) C 15	1.27	2.12	0.046
11. BD (1) N 7 - C 17	/330. RY*(4) C 15	8.86	1.87	0.115
11. BD (1) N 7 - C 17	/331. RY*(5) C 15	0.98	2.31	0.043
11. BD (1) N 7 - C 17	/334. RY*(8) C 15	3.87	1.98	0.078
11. BD (1) N 7 - C 17	/337. RY*(11) C 15	0.56	2.93	0.036
11. BD (1) N 7 - C 17	/338. RY*(12) C 15	2.50	1.76	0.060

11. BD (1) N 7 - C 17	/339. RY*(13) C 15	2.09	2.44	0.064
11. BD (1) N 7 - C 17	/340. RY*(14) C 15	3.66	3.52	0.102
11. BD (1) N 7 - C 17	/345. RY*(2) C 16	2.13	1.98	0.058
11. BD (1) N 7 - C 17	/346. RY*(3) C 16	0.68	1.76	0.031
11. BD (1) N 7 - C 17	/347. RY*(4) C 16	0.62	2.00	0.032
11. BD (1) N 7 - C 17	/348. RY*(5) C 16	25.46	2.33	0.218
11. BD (1) N 7 - C 17	/351. RY*(8) C 16	4.17	2.49	0.091
11. BD (1) N 7 - C 17	/352. RY*(9) C 16	4.23	2.69	0.096
11. BD (1) N 7 - C 17	/354. RY*(11) C 16	2.55	3.91	0.090
11. BD (1) N 7 - C 17	/355. RY*(12) C 16	1.60	4.55	0.076
11. BD (1) N 7 - C 17	/356. RY*(13) C 16	0.60	2.20	0.033
11. BD (1) N 7 - C 17	/357. RY*(14) C 16	19.08	2.72	0.204
11. BD (1) N 7 - C 17	/358. RY*(15) C 16	24.56	2.36	0.216
11. BD (1) N 7 - C 17	/361. RY*(1) C 17	0.52	2.04	0.029
11. BD (1) N 7 - C 17	/362. RY*(2) C 17	1.36	2.47	0.052
11. BD (1) N 7 - C 17	/363. RY*(3) C 17	1.04	2.47	0.045
11. BD (1) N 7 - C 17	/365. RY*(5) C 17	20.16	1.94	0.177
11. BD (1) N 7 - C 17	/367. RY*(7) C 17	1.54	3.01	0.061
11. BD (1) N 7 - C 17	/368. RY*(8) C 17	4.01	2.00	0.080
11. BD (1) N 7 - C 17	/370. RY*(10) C 17	21.66	4.14	0.268
11. BD (1) N 7 - C 17	/371. RY*(11) C 17	11.48	2.80	0.161
11. BD (1) N 7 - C 17	/372. RY*(12) C 17	9.74	3.95	0.176
11. BD (1) N 7 - C 17	/373. RY*(13) C 17	47.57	2.65	0.318
11. BD (1) N 7 - C 17	/377. RY*(1) C 18	1.16	2.29	0.046
11. BD (1) N 7 - C 17	/378. RY*(2) C 18	0.56	2.36	0.032
11. BD (1) N 7 - C 17	/379. RY*(3) C 18	0.67	2.50	0.036
11. BD (1) N 7 - C 17	/382. RY*(6) C 18	2.20	2.15	0.062
11. BD (1) N 7 - C 17	/383. RY*(7) C 18	29.08	1.75	0.202

11. BD (1) N 7 - C 17	/385. RY*(9) C 18	2.17	2.88	0.071
11. BD (1) N 7 - C 17	/386. RY*(10) C 18	5.46	2.98	0.114
11. BD (1) N 7 - C 17	/387. RY*(11) C 18	9.98	4.94	0.199
11. BD (1) N 7 - C 17	/388. RY*(12) C 18	9.64	3.22	0.158
11. BD (1) N 7 - C 17	/392. RY*(16) C 18	37.06	1.40	0.204
11. BD (1) N 7 - C 17	/395. RY*(2) C 19	23.89	1.82	0.186
11. BD (1) N 7 - C 17	/396. RY*(3) C 19	1.00	2.47	0.045
11. BD (1) N 7 - C 17	/402. RY*(9) C 19	0.52	1.80	0.027
11. BD (1) N 7 - C 17	/405. RY*(12) C 19	1.56	1.95	0.049
11. BD (1) N 7 - C 17	/413. RY*(3) C 20	1.28	1.54	0.040
11. BD (1) N 7 - C 17	/417. RY*(7) C 20	2.96	2.79	0.081
11. BD (1) N 7 - C 17	/427. RY*(17) C 20	0.72	3.00	0.042
11. BD (1) N 7 - C 17	/433. RY*(6) C 21	1.51	2.11	0.051
11. BD (1) N 7 - C 17	/437. RY*(10) C 21	0.52	2.52	0.032
11. BD (1) N 7 - C 17	/438. RY*(11) C 21	1.43	1.47	0.041
11. BD (1) N 7 - C 17	/447. RY*(3) C 22	0.68	1.51	0.029
11. BD (1) N 7 - C 17	/449. RY*(5) C 22	1.75	2.42	0.058
11. BD (1) N 7 - C 17	/450. RY*(6) C 22	1.54	2.02	0.050
11. BD (1) N 7 - C 17	/451. RY*(7) C 22	5.09	2.32	0.097
11. BD (1) N 7 - C 17	/454. RY*(10) C 22	1.20	3.40	0.057
11. BD (1) N 7 - C 17	/455. RY*(11) C 22	0.66	2.27	0.035
11. BD (1) N 7 - C 17	/457. RY*(13) C 22	1.15	2.54	0.048
11. BD (1) N 7 - C 17	/458. RY*(14) C 22	1.97	1.68	0.052
11. BD (1) N 7 - C 17	/462. RY*(1) C 23	232.47	0.92	0.413
11. BD (1) N 7 - C 17	/463. RY*(2) C 23	45.13	1.48	0.231
11. BD (1) N 7 - C 17	/464. RY*(3) C 23	13.41	1.81	0.139
11. BD (1) N 7 - C 17	/465. RY*(4) C 23	107.84	1.74	0.388
11. BD (1) N 7 - C 17	/466. RY*(5) C 23	606.31	0.44	0.461

11. BD (1) N 7 - C 17	/467. RY*(6) C 23	3.17	2.56	0.081
11. BD (1) N 7 - C 17	/469. RY*(8) C 23	136.82	1.80	0.445
11. BD (1) N 7 - C 17	/471. RY*(10) C 23	217.06	1.59	0.526
11. BD (1) N 7 - C 17	/473. RY*(12) C 23	1.16	2.87	0.052
11. BD (1) N 7 - C 17	/474. RY*(13) C 23	5.28	3.77	0.126
11. BD (1) N 7 - C 17	/475. RY*(14) C 23	0.80	23.31	0.122
11. BD (1) N 7 - C 17	/476. RY*(15) C 23	81.41	2.04	0.365
11. BD (1) N 7 - C 17	/477. RY*(16) C 23	185.28	2.02	0.547
11. BD (1) N 7 - C 17	/478. RY*(17) C 23	2.33	3.37	0.079
11. BD (1) N 7 - C 17	/479. RY*(1) H 24	4.54	1.66	0.078
11. BD (1) N 7 - C 17	/481. RY*(3) H 24	0.57	2.64	0.035
11. BD (1) N 7 - C 17	/483. RY*(5) H 24	2.09	3.59	0.078
11. BD (1) N 7 - C 17	/492. RY*(4) H 26	3.50	2.94	0.091
11. BD (1) N 7 - C 17	/496. RY*(3) H 27	5.78	2.53	0.108
11. BD (1) N 7 - C 17	/497. RY*(4) H 27	351.43	1.12	0.561
11. BD (1) N 7 - C 17	/498. RY*(5) H 27	2.28	3.47	0.080
11. BD (1) N 7 - C 17	/499. RY*(1) H 28	2.99	1.91	0.068
11. BD (1) N 7 - C 17	/500. RY*(2) H 28	2.53	2.93	0.077
11. BD (1) N 7 - C 17	/502. RY*(4) H 28	12.68	2.76	0.168
11. BD (1) N 7 - C 17	/504. RY*(1) H 29	0.68	1.65	0.030
11. BD (1) N 7 - C 17	/506. RY*(3) H 29	15.36	3.31	0.202
11. BD (1) N 7 - C 17	/507. RY*(4) H 29	0.94	3.77	0.053
11. BD (1) N 7 - C 17	/508. RY*(5) H 29	0.73	3.14	0.043
11. BD (1) N 7 - C 17	/509. RY*(1) H 30	2.72	1.92	0.065
11. BD (1) N 7 - C 17	/511. RY*(3) H 30	1.34	2.61	0.053
11. BD (1) N 7 - C 17	/528. RY*(1) H 34	2.68	2.42	0.072
11. BD (1) N 7 - C 17	/529. RY*(2) H 34	191.84	1.20	0.430
11. BD (1) N 7 - C 17	/530. RY*(3) H 34	9.45	2.75	0.144

11. BD (1) N 7 - C 17	/531. RY*(4) H 34	1.53	2.83	0.059
11. BD (1) N 7 - C 17	/533. RY*(1) H 35	33.30	1.74	0.215
11. BD (1) N 7 - C 17	/534. RY*(2) H 35	92.30	1.90	0.375
11. BD (1) N 7 - C 17	/535. RY*(3) H 35	7.01	2.76	0.124
11. BD (1) N 7 - C 17	/536. RY*(4) H 35	2.52	2.78	0.075
11. BD (1) N 7 - C 17	/537. RY*(5) H 35	1.34	3.70	0.063
11. BD (1) N 7 - C 17	/542. RY*(5) H 36	27.19	2.77	0.246
11. BD (1) N 7 - C 17	/547. BD*(1) O 4 - C 17	1.44	1.51	0.042
11. BD (1) N 7 - C 17	/554. BD*(1) N 7 - C 18	1.66	1.43	0.044
11. BD (1) N 7 - C 17	/556. BD*(1) N 8 - C 18	0.83	1.53	0.032
11. BD (1) N 7 - C 17	/559. BD*(1) C 9 - C 10	1.33	1.58	0.041
11. BD (1) N 7 - C 17	/561. BD*(1) C 9 - C 17	1.25	1.45	0.038
11. BD (1) N 7 - C 17	/562. BD*(1) C 10 - C 11	0.83	1.46	0.031
11. BD (1) N 7 - C 17	/572. BD*(1) C 14 - H 27	3.85	1.40	0.066
11. BD (1) N 7 - C 17	/573. BD*(1) C 15 - C 16	917.34	0.29	0.464
11. BD (1) N 7 - C 17	/574. BD*(2) C 15 - C 16	0.53	1.03	0.023
11. BD (1) N 7 - C 17	/576. BD*(1) C 18 - C 22	5.38	1.53	0.081
11. BD (1) N 7 - C 17	/578. BD*(2) C 19 - C 20	64.87	0.76	0.215
11. BD (1) N 7 - C 17	/579. BD*(1) C 19 - H 29	419.05	0.47	0.398
11. BD (1) N 7 - C 17	/580. BD*(1) C 20 - C 21	1.30	1.61	0.041
11. BD (1) N 7 - C 17	/581. BD*(1) C 20 - H 30	1.55	1.45	0.042
11. BD (1) N 7 - C 17	/582. BD*(1) C 21 - C 22	1.44	1.60	0.043
11. BD (1) N 7 - C 17	/583. BD*(2) C 21 - C 22	11.27	0.98	0.101
11. BD (1) N 7 - C 17	/586. BD*(1) C 23 - H 34	17.31	4.06	0.237
11. BD (1) N 7 - C 17	/587. BD*(1) C 23 - H 35	17.51	4.33	0.246
11. BD (1) N 7 - C 17	/588. BD*(1) C 23 - H 36	26.48	3.70	0.280
12. BD (1) N 7 - C 18	/ 87. RY*(1) S 1	5.11	1.91	0.089
12. BD (1) N 7 - C 18	/ 88. RY*(2) S 1	5.42	1.83	0.090

12. BD (	1) N	7 - C 18	/ 89. RY*(	3) S	1	1.06	2.00	0.041
12. BD (	1) N	7 - C 18	/ 90. RY*(	4) S	1	1.21	1.93	0.043
12. BD (	1) N	7 - C 18	/ 92. RY*(	6) S	1	4.87	2.74	0.103
12. BD (	1) N	7 - C 18	/ 95. RY*(	9) S	1	7.82	2.14	0.116
12. BD (	1) N	7 - C 18	/ 96. RY*(	10) S	1	6.80	2.02	0.105
12. BD (	1) N	7 - C 18	/ 97. RY*(	11) S	1	0.89	2.44	0.042
12. BD (	1) N	7 - C 18	/ 98. RY*(	12) S	1	239.32	1.49	0.534
12. BD (	1) N	7 - C 18	/ 99. RY*(	13) S	1	3111.57	0.21	0.723
12. BD (	1) N	7 - C 18	/100. RY*(	14) S	1	51.83	1.82	0.275
12. BD (	1) N	7 - C 18	/101. RY*(	15) S	1	161.46	1.49	0.439
12. BD (	1) N	7 - C 18	/103. RY*(	17) S	1	0.50	15.79	0.080
12. BD (	1) N	7 - C 18	/108. RY*(	1) O	2	2.03	2.24	0.060
12. BD (	1) N	7 - C 18	/109. RY*(	2) O	2	2.67	1.93	0.064
12. BD (	1) N	7 - C 18	/110. RY*(	3) O	2	7.91	2.08	0.115
12. BD (	1) N	7 - C 18	/112. RY*(	5) O	2	86.98	1.84	0.358
12. BD (	1) N	7 - C 18	/113. RY*(	6) O	2	2.14	2.08	0.060
12. BD (	1) N	7 - C 18	/114. RY*(	7) O	2	32.00	2.77	0.266
12. BD (	1) N	7 - C 18	/115. RY*(	8) O	2	2.67	2.53	0.074
12. BD (	1) N	7 - C 18	/116. RY*(	9) O	2	1.50	3.99	0.069
12. BD (	1) N	7 - C 18	/117. RY*(	10) O	2	1.64	3.96	0.072
12. BD (	1) N	7 - C 18	/122. RY*(	15) O	2	1.48	3.81	0.067
12. BD (	1) N	7 - C 18	/123. RY*(	16) O	2	0.53	4.27	0.043
12. BD (	1) N	7 - C 18	/124. RY*(	17) O	2	2.07	5.87	0.099
12. BD (	1) N	7 - C 18	/125. RY*(	1) O	3	0.90	2.30	0.041
12. BD (	1) N	7 - C 18	/127. RY*(	3) O	3	18.39	2.03	0.173
12. BD (	1) N	7 - C 18	/128. RY*(	4) O	3	2.53	1.74	0.059
12. BD (	1) N	7 - C 18	/129. RY*(	5) O	3	8.01	2.20	0.119
12. BD (	1) N	7 - C 18	/130. RY*(	6) O	3	85.27	1.74	0.345

12. BD (1) N 7 - C 18	/131. RY*(7) O 3	10.69	2.99	0.160
12. BD (1) N 7 - C 18	/132. RY*(8) O 3	0.81	2.25	0.038
12. BD (1) N 7 - C 18	/133. RY*(9) O 3	4.44	4.06	0.120
12. BD (1) N 7 - C 18	/135. RY*(11) O 3	0.62	6.13	0.055
12. BD (1) N 7 - C 18	/140. RY*(16) O 3	2.37	4.20	0.089
12. BD (1) N 7 - C 18	/142. RY*(1) O 4	369.84	0.80	0.487
12. BD (1) N 7 - C 18	/145. RY*(4) O 4	0.95	2.41	0.043
12. BD (1) N 7 - C 18	/147. RY*(6) O 4	3.05	2.43	0.077
12. BD (1) N 7 - C 18	/160. RY*(3) O 5	6.96	1.85	0.102
12. BD (1) N 7 - C 18	/162. RY*(5) O 5	1.02	2.67	0.047
12. BD (1) N 7 - C 18	/163. RY*(6) O 5	0.91	2.43	0.042
12. BD (1) N 7 - C 18	/164. RY*(7) O 5	2.07	2.72	0.067
12. BD (1) N 7 - C 18	/175. RY*(2) N 6	0.58	1.97	0.030
12. BD (1) N 7 - C 18	/176. RY*(3) N 6	2.20	2.11	0.061
12. BD (1) N 7 - C 18	/177. RY*(4) N 6	3.84	1.98	0.078
12. BD (1) N 7 - C 18	/180. RY*(7) N 6	7.38	2.22	0.115
12. BD (1) N 7 - C 18	/181. RY*(8) N 6	0.54	2.45	0.033
12. BD (1) N 7 - C 18	/183. RY*(10) N 6	0.86	3.09	0.046
12. BD (1) N 7 - C 18	/186. RY*(13) N 6	2.21	4.25	0.087
12. BD (1) N 7 - C 18	/188. RY*(15) N 6	3.52	5.05	0.119
12. BD (1) N 7 - C 18	/190. RY*(17) N 6	43.44	32.64	1.066
12. BD (1) N 7 - C 18	/191. RY*(1) N 7	32.26	1.71	0.210
12. BD (1) N 7 - C 18	/192. RY*(2) N 7	0.91	1.85	0.037
12. BD (1) N 7 - C 18	/195. RY*(5) N 7	62.56	1.65	0.288
12. BD (1) N 7 - C 18	/196. RY*(6) N 7	1.71	2.34	0.057
12. BD (1) N 7 - C 18	/197. RY*(7) N 7	3.37	2.98	0.090
12. BD (1) N 7 - C 18	/198. RY*(8) N 7	21.61	2.67	0.215
12. BD (1) N 7 - C 18	/199. RY*(9) N 7	39.27	3.44	0.329

12. BD (1) N 7 - C 18	/200. RY*(10) N 7	89.56	2.14	0.392
12. BD (1) N 7 - C 18	/201. RY*(11) N 7	0.62	4.13	0.045
12. BD (1) N 7 - C 18	/202. RY*(12) N 7	1.29	3.30	0.059
12. BD (1) N 7 - C 18	/204. RY*(14) N 7	3.04	3.87	0.097
12. BD (1) N 7 - C 18	/208. RY*(1) N 8	17.51	1.73	0.156
12. BD (1) N 7 - C 18	/212. RY*(5) N 8	11.04	2.64	0.153
12. BD (1) N 7 - C 18	/213. RY*(6) N 8	0.90	2.43	0.042
12. BD (1) N 7 - C 18	/214. RY*(7) N 8	0.74	2.36	0.037
12. BD (1) N 7 - C 18	/215. RY*(8) N 8	1.32	2.60	0.052
12. BD (1) N 7 - C 18	/216. RY*(9) N 8	9.25	3.95	0.171
12. BD (1) N 7 - C 18	/217. RY*(10) N 8	5.39	1.98	0.092
12. BD (1) N 7 - C 18	/225. RY*(1) C 9	1.60	2.37	0.055
12. BD (1) N 7 - C 18	/226. RY*(2) C 9	3.93	2.03	0.080
12. BD (1) N 7 - C 18	/227. RY*(3) C 9	1.28	2.12	0.047
12. BD (1) N 7 - C 18	/228. RY*(4) C 9	3.58	2.36	0.082
12. BD (1) N 7 - C 18	/229. RY*(5) C 9	5.04	2.99	0.110
12. BD (1) N 7 - C 18	/230. RY*(6) C 9	16.20	2.21	0.170
12. BD (1) N 7 - C 18	/231. RY*(7) C 9	123.72	2.06	0.453
12. BD (1) N 7 - C 18	/232. RY*(8) C 9	63.02	2.38	0.347
12. BD (1) N 7 - C 18	/233. RY*(9) C 9	80.51	3.29	0.461
12. BD (1) N 7 - C 18	/234. RY*(10) C 9	123.15	2.26	0.473
12. BD (1) N 7 - C 18	/235. RY*(11) C 9	916.42	0.70	0.715
12. BD (1) N 7 - C 18	/236. RY*(12) C 9	8.59	3.15	0.147
12. BD (1) N 7 - C 18	/237. RY*(13) C 9	262.31	2.70	0.753
12. BD (1) N 7 - C 18	/238. RY*(14) C 9	8.96	3.25	0.153
12. BD (1) N 7 - C 18	/239. RY*(15) C 9	7.72	3.53	0.148
12. BD (1) N 7 - C 18	/240. RY*(16) C 9	2.66	4.39	0.097
12. BD (1) N 7 - C 18	/241. RY*(17) C 9	6.58	20.55	0.329

12. BD (1) N 7 - C 18	/242. RY*(1) C 10	49.13	1.97	0.278
12. BD (1) N 7 - C 18	/244. RY*(3) C 10	2.80	2.68	0.078
12. BD (1) N 7 - C 18	/245. RY*(4) C 10	10.84	2.65	0.152
12. BD (1) N 7 - C 18	/246. RY*(5) C 10	2.84	2.15	0.070
12. BD (1) N 7 - C 18	/250. RY*(9) C 10	2.83	2.83	0.080
12. BD (1) N 7 - C 18	/251. RY*(10) C 10	8.64	2.41	0.129
12. BD (1) N 7 - C 18	/252. RY*(11) C 10	179.86	1.40	0.450
12. BD (1) N 7 - C 18	/253. RY*(12) C 10	8.57	2.63	0.134
12. BD (1) N 7 - C 18	/255. RY*(14) C 10	3.14	2.75	0.083
12. BD (1) N 7 - C 18	/256. RY*(15) C 10	10.01	4.12	0.182
12. BD (1) N 7 - C 18	/257. RY*(16) C 10	0.95	18.45	0.119
12. BD (1) N 7 - C 18	/258. RY*(17) C 10	0.91	3.79	0.053
12. BD (1) N 7 - C 18	/260. RY*(2) C 11	8.61	2.38	0.128
12. BD (1) N 7 - C 18	/261. RY*(3) C 11	1.55	1.92	0.049
12. BD (1) N 7 - C 18	/262. RY*(4) C 11	0.84	2.19	0.038
12. BD (1) N 7 - C 18	/263. RY*(5) C 11	5.57	2.41	0.104
12. BD (1) N 7 - C 18	/264. RY*(6) C 11	1.21	2.32	0.047
12. BD (1) N 7 - C 18	/265. RY*(7) C 11	12.32	2.72	0.164
12. BD (1) N 7 - C 18	/266. RY*(8) C 11	3.02	2.50	0.078
12. BD (1) N 7 - C 18	/267. RY*(9) C 11	54.59	2.32	0.319
12. BD (1) N 7 - C 18	/268. RY*(10) C 11	31.23	3.02	0.275
12. BD (1) N 7 - C 18	/270. RY*(12) C 11	106.01	2.08	0.420
12. BD (1) N 7 - C 18	/271. RY*(13) C 11	0.52	3.99	0.041
12. BD (1) N 7 - C 18	/272. RY*(14) C 11	1.33	5.43	0.076
12. BD (1) N 7 - C 18	/273. RY*(15) C 11	32.08	2.73	0.265
12. BD (1) N 7 - C 18	/274. RY*(16) C 11	14.34	3.74	0.207
12. BD (1) N 7 - C 18	/278. RY*(3) C 12	1.00	1.66	0.036
12. BD (1) N 7 - C 18	/279. RY*(4) C 12	17.86	2.08	0.172

12. BD (1) N 7 - C 18	/280. RY*(5) C 12	4.48	1.98	0.084
12. BD (1) N 7 - C 18	/281. RY*(6) C 12	10.86	2.26	0.140
12. BD (1) N 7 - C 18	/282. RY*(7) C 12	0.71	2.39	0.037
12. BD (1) N 7 - C 18	/283. RY*(8) C 12	0.56	3.36	0.039
12. BD (1) N 7 - C 18	/284. RY*(9) C 12	2.66	3.44	0.086
12. BD (1) N 7 - C 18	/285. RY*(10) C 12	6.04	3.74	0.135
12. BD (1) N 7 - C 18	/286. RY*(11) C 12	52.32	1.92	0.283
12. BD (1) N 7 - C 18	/287. RY*(12) C 12	10.33	3.01	0.158
12. BD (1) N 7 - C 18	/288. RY*(13) C 12	6.17	2.47	0.111
12. BD (1) N 7 - C 18	/292. RY*(17) C 12	0.53	3.66	0.039
12. BD (1) N 7 - C 18	/295. RY*(3) C 13	0.70	2.06	0.034
12. BD (1) N 7 - C 18	/296. RY*(4) C 13	1.47	2.07	0.049
12. BD (1) N 7 - C 18	/298. RY*(6) C 13	6.98	2.13	0.109
12. BD (1) N 7 - C 18	/299. RY*(7) C 13	12.01	2.83	0.165
12. BD (1) N 7 - C 18	/300. RY*(8) C 13	2.26	3.48	0.079
12. BD (1) N 7 - C 18	/301. RY*(9) C 13	1.96	3.06	0.069
12. BD (1) N 7 - C 18	/302. RY*(10) C 13	1.37	3.22	0.059
12. BD (1) N 7 - C 18	/303. RY*(11) C 13	1.04	1.61	0.037
12. BD (1) N 7 - C 18	/305. RY*(13) C 13	1.46	3.21	0.061
12. BD (1) N 7 - C 18	/309. RY*(17) C 13	1.32	2.73	0.054
12. BD (1) N 7 - C 18	/314. RY*(5) C 14	0.58	2.02	0.031
12. BD (1) N 7 - C 18	/316. RY*(7) C 14	0.62	2.70	0.037
12. BD (1) N 7 - C 18	/318. RY*(9) C 14	2.80	3.05	0.083
12. BD (1) N 7 - C 18	/319. RY*(10) C 14	3.08	2.30	0.075
12. BD (1) N 7 - C 18	/320. RY*(11) C 14	0.53	3.07	0.036
12. BD (1) N 7 - C 18	/323. RY*(14) C 14	1.23	2.46	0.049
12. BD (1) N 7 - C 18	/326. RY*(17) C 14	4.52	2.74	0.100
12. BD (1) N 7 - C 18	/327. RY*(1) C 15	2.21	2.23	0.063

12. BD (1) N 7 - C 18	/330. RY*(4) C 15	15.17	1.98	0.155
12. BD (1) N 7 - C 18	/331. RY*(5) C 15	1.78	2.42	0.059
12. BD (1) N 7 - C 18	/334. RY*(8) C 15	6.90	2.09	0.108
12. BD (1) N 7 - C 18	/335. RY*(9) C 15	0.80	4.95	0.056
12. BD (1) N 7 - C 18	/337. RY*(11) C 15	0.98	3.03	0.049
12. BD (1) N 7 - C 18	/338. RY*(12) C 15	4.54	1.87	0.083
12. BD (1) N 7 - C 18	/339. RY*(13) C 15	3.68	2.55	0.087
12. BD (1) N 7 - C 18	/340. RY*(14) C 15	6.57	3.62	0.138
12. BD (1) N 7 - C 18	/345. RY*(2) C 16	4.37	2.08	0.085
12. BD (1) N 7 - C 18	/346. RY*(3) C 16	1.06	1.87	0.040
12. BD (1) N 7 - C 18	/347. RY*(4) C 16	1.22	2.11	0.045
12. BD (1) N 7 - C 18	/348. RY*(5) C 16	45.56	2.43	0.298
12. BD (1) N 7 - C 18	/351. RY*(8) C 16	7.29	2.60	0.123
12. BD (1) N 7 - C 18	/352. RY*(9) C 16	7.53	2.80	0.130
12. BD (1) N 7 - C 18	/353. RY*(10) C 16	0.50	2.19	0.030
12. BD (1) N 7 - C 18	/354. RY*(11) C 16	4.61	4.02	0.122
12. BD (1) N 7 - C 18	/355. RY*(12) C 16	2.84	4.66	0.103
12. BD (1) N 7 - C 18	/356. RY*(13) C 16	1.08	2.31	0.045
12. BD (1) N 7 - C 18	/357. RY*(14) C 16	34.31	2.83	0.279
12. BD (1) N 7 - C 18	/358. RY*(15) C 16	44.65	2.47	0.297
12. BD (1) N 7 - C 18	/362. RY*(2) C 17	2.36	2.57	0.070
12. BD (1) N 7 - C 18	/365. RY*(5) C 17	39.75	2.05	0.256
12. BD (1) N 7 - C 18	/367. RY*(7) C 17	3.69	3.12	0.096
12. BD (1) N 7 - C 18	/368. RY*(8) C 17	7.52	2.10	0.113
12. BD (1) N 7 - C 18	/370. RY*(10) C 17	47.89	4.24	0.404
12. BD (1) N 7 - C 18	/371. RY*(11) C 17	17.16	2.91	0.200
12. BD (1) N 7 - C 18	/372. RY*(12) C 17	13.97	4.06	0.213
12. BD (1) N 7 - C 18	/373. RY*(13) C 17	83.10	2.75	0.428

12. BD (1) N 7 - C 18	/379. RY*(3) C 18	0.87	2.60	0.043
12. BD (1) N 7 - C 18	/380. RY*(4) C 18	1.39	2.77	0.055
12. BD (1) N 7 - C 18	/382. RY*(6) C 18	4.71	2.26	0.092
12. BD (1) N 7 - C 18	/383. RY*(7) C 18	53.14	1.86	0.281
12. BD (1) N 7 - C 18	/385. RY*(9) C 18	6.21	2.99	0.122
12. BD (1) N 7 - C 18	/386. RY*(10) C 18	10.45	3.09	0.161
12. BD (1) N 7 - C 18	/387. RY*(11) C 18	17.07	5.04	0.263
12. BD (1) N 7 - C 18	/388. RY*(12) C 18	12.78	3.32	0.185
12. BD (1) N 7 - C 18	/389. RY*(13) C 18	1.70	3.95	0.073
12. BD (1) N 7 - C 18	/392. RY*(16) C 18	63.28	1.50	0.276
12. BD (1) N 7 - C 18	/395. RY*(2) C 19	45.41	1.92	0.264
12. BD (1) N 7 - C 18	/396. RY*(3) C 19	1.82	2.58	0.061
12. BD (1) N 7 - C 18	/402. RY*(9) C 19	1.19	1.90	0.043
12. BD (1) N 7 - C 18	/403. RY*(10) C 19	0.55	1.63	0.027
12. BD (1) N 7 - C 18	/405. RY*(12) C 19	2.53	2.05	0.065
12. BD (1) N 7 - C 18	/413. RY*(3) C 20	2.22	1.64	0.054
12. BD (1) N 7 - C 18	/414. RY*(4) C 20	0.54	1.89	0.029
12. BD (1) N 7 - C 18	/415. RY*(5) C 20	0.79	2.13	0.037
12. BD (1) N 7 - C 18	/417. RY*(7) C 20	4.87	2.89	0.106
12. BD (1) N 7 - C 18	/421. RY*(11) C 20	0.61	2.70	0.036
12. BD (1) N 7 - C 18	/426. RY*(16) C 20	0.77	1.54	0.031
12. BD (1) N 7 - C 18	/427. RY*(17) C 20	1.53	3.10	0.062
12. BD (1) N 7 - C 18	/431. RY*(4) C 21	0.65	2.25	0.034
12. BD (1) N 7 - C 18	/433. RY*(6) C 21	2.97	2.21	0.073
12. BD (1) N 7 - C 18	/437. RY*(10) C 21	1.13	2.62	0.049
12. BD (1) N 7 - C 18	/438. RY*(11) C 21	2.52	1.58	0.056
12. BD (1) N 7 - C 18	/440. RY*(13) C 21	0.53	3.20	0.037
12. BD (1) N 7 - C 18	/445. RY*(1) C 22	0.89	2.25	0.040

12. BD (1) N 7 - C 18	/446. RY*(2) C 22	0.60	2.37	0.034
12. BD (1) N 7 - C 18	/447. RY*(3) C 22	1.19	1.62	0.039
12. BD (1) N 7 - C 18	/449. RY*(5) C 22	3.16	2.52	0.080
12. BD (1) N 7 - C 18	/450. RY*(6) C 22	2.03	2.13	0.059
12. BD (1) N 7 - C 18	/451. RY*(7) C 22	8.87	2.43	0.131
12. BD (1) N 7 - C 18	/453. RY*(9) C 22	0.55	5.80	0.050
12. BD (1) N 7 - C 18	/454. RY*(10) C 22	2.57	3.50	0.085
12. BD (1) N 7 - C 18	/455. RY*(11) C 22	1.65	2.37	0.056
12. BD (1) N 7 - C 18	/457. RY*(13) C 22	2.07	2.65	0.066
12. BD (1) N 7 - C 18	/458. RY*(14) C 22	3.34	1.79	0.069
12. BD (1) N 7 - C 18	/462. RY*(1) C 23	379.15	1.02	0.558
12. BD (1) N 7 - C 18	/463. RY*(2) C 23	78.29	1.59	0.315
12. BD (1) N 7 - C 18	/464. RY*(3) C 23	24.20	1.91	0.193
12. BD (1) N 7 - C 18	/465. RY*(4) C 23	193.35	1.85	0.535
12. BD (1) N 7 - C 18	/466. RY*(5) C 23	904.51	0.54	0.628
12. BD (1) N 7 - C 18	/467. RY*(6) C 23	6.77	2.67	0.120
12. BD (1) N 7 - C 18	/469. RY*(8) C 23	237.95	1.91	0.604
12. BD (1) N 7 - C 18	/471. RY*(10) C 23	380.70	1.70	0.719
12. BD (1) N 7 - C 18	/473. RY*(12) C 23	1.90	2.97	0.067
12. BD (1) N 7 - C 18	/474. RY*(13) C 23	9.34	3.87	0.170
12. BD (1) N 7 - C 18	/475. RY*(14) C 23	1.45	23.42	0.165
12. BD (1) N 7 - C 18	/476. RY*(15) C 23	148.23	2.14	0.505
12. BD (1) N 7 - C 18	/477. RY*(16) C 23	323.42	2.12	0.742
12. BD (1) N 7 - C 18	/478. RY*(17) C 23	4.56	3.48	0.113
12. BD (1) N 7 - C 18	/479. RY*(1) H 24	11.11	1.76	0.125
12. BD (1) N 7 - C 18	/481. RY*(3) H 24	0.70	2.75	0.039
12. BD (1) N 7 - C 18	/482. RY*(4) H 24	1.20	3.26	0.056
12. BD (1) N 7 - C 18	/483. RY*(5) H 24	4.35	3.70	0.114

12. BD (1) N 7 - C 18	/484. RY*(1) H 25	0.80	2.00	0.036
12. BD (1) N 7 - C 18	/485. RY*(2) H 25	0.51	3.12	0.036
12. BD (1) N 7 - C 18	/491. RY*(3) H 26	0.56	2.71	0.035
12. BD (1) N 7 - C 18	/492. RY*(4) H 26	6.25	3.04	0.124
12. BD (1) N 7 - C 18	/496. RY*(3) H 27	10.31	2.63	0.148
12. BD (1) N 7 - C 18	/497. RY*(4) H 27	597.89	1.22	0.766
12. BD (1) N 7 - C 18	/498. RY*(5) H 27	4.24	3.57	0.110
12. BD (1) N 7 - C 18	/499. RY*(1) H 28	5.43	2.01	0.094
12. BD (1) N 7 - C 18	/500. RY*(2) H 28	4.55	3.04	0.105
12. BD (1) N 7 - C 18	/502. RY*(4) H 28	23.14	2.87	0.231
12. BD (1) N 7 - C 18	/504. RY*(1) H 29	1.40	1.76	0.044
12. BD (1) N 7 - C 18	/505. RY*(2) H 29	0.73	2.73	0.040
12. BD (1) N 7 - C 18	/506. RY*(3) H 29	27.79	3.42	0.276
12. BD (1) N 7 - C 18	/507. RY*(4) H 29	2.07	3.87	0.080
12. BD (1) N 7 - C 18	/508. RY*(5) H 29	1.49	3.24	0.062
12. BD (1) N 7 - C 18	/509. RY*(1) H 30	5.34	2.02	0.093
12. BD (1) N 7 - C 18	/511. RY*(3) H 30	2.38	2.72	0.072
12. BD (1) N 7 - C 18	/517. RY*(4) H 31	0.54	3.10	0.037
12. BD (1) N 7 - C 18	/528. RY*(1) H 34	4.81	2.52	0.099
12. BD (1) N 7 - C 18	/529. RY*(2) H 34	329.27	1.31	0.588
12. BD (1) N 7 - C 18	/530. RY*(3) H 34	16.88	2.86	0.197
12. BD (1) N 7 - C 18	/531. RY*(4) H 34	2.79	2.93	0.081
12. BD (1) N 7 - C 18	/533. RY*(1) H 35	59.43	1.85	0.297
12. BD (1) N 7 - C 18	/534. RY*(2) H 35	159.70	2.01	0.507
12. BD (1) N 7 - C 18	/535. RY*(3) H 35	12.45	2.86	0.169
12. BD (1) N 7 - C 18	/536. RY*(4) H 35	4.62	2.89	0.103
12. BD (1) N 7 - C 18	/537. RY*(5) H 35	2.50	3.80	0.087
12. BD (1) N 7 - C 18	/542. RY*(5) H 36	52.07	2.88	0.347

12. BD (1) N 7 - C 18	/553. BD*(1) N 7 - C 17	1.00	1.56	0.036
12. BD (1) N 7 - C 18	/558. BD*(1) N 8 - C 19	2.10	1.65	0.053
12. BD (1) N 7 - C 18	/561. BD*(1) C 9 - C 17	1.65	1.55	0.046
12. BD (1) N 7 - C 18	/562. BD*(1) C 10 - C 11	1.38	1.57	0.042
12. BD (1) N 7 - C 18	/572. BD*(1) C 14 - H 27	6.71	1.51	0.090
12. BD (1) N 7 - C 18	/573. BD*(1) C 15 - C 16	1248.51	0.40	0.631
12. BD (1) N 7 - C 18	/574. BD*(2) C 15 - C 16	0.95	1.14	0.032
12. BD (1) N 7 - C 18	/576. BD*(1) C 18 - C 22	14.16	1.64	0.137
12. BD (1) N 7 - C 18	/578. BD*(2) C 19 - C 20	106.33	0.87	0.293
12. BD (1) N 7 - C 18	/579. BD*(1) C 19 - H 29	649.92	0.58	0.548
12. BD (1) N 7 - C 18	/580. BD*(1) C 20 - C 21	2.62	1.71	0.060
12. BD (1) N 7 - C 18	/581. BD*(1) C 20 - H 30	2.79	1.56	0.059
12. BD (1) N 7 - C 18	/582. BD*(1) C 21 - C 22	6.87	1.70	0.097
12. BD (1) N 7 - C 18	/583. BD*(2) C 21 - C 22	18.96	1.09	0.138
12. BD (1) N 7 - C 18	/586. BD*(1) C 23 - H 34	34.13	4.16	0.337
12. BD (1) N 7 - C 18	/587. BD*(1) C 23 - H 35	34.60	4.44	0.350
12. BD (1) N 7 - C 18	/588. BD*(1) C 23 - H 36	48.63	3.81	0.384
13. BD (1) N 7 - H 24	/ 98. RY*(12) S 1	3.73	1.03	0.055
13. BD (1) N 7 - H 24	/100. RY*(14) S 1	0.73	1.36	0.028
13. BD (1) N 7 - H 24	/101. RY*(15) S 1	2.33	1.03	0.044
13. BD (1) N 7 - H 24	/112. RY*(5) O 2	1.21	1.38	0.037
13. BD (1) N 7 - H 24	/130. RY*(6) O 3	1.05	1.28	0.033
13. BD (1) N 7 - H 24	/142. RY*(1) O 4	8.26	0.34	0.047
13. BD (1) N 7 - H 24	/195. RY*(5) N 7	0.53	1.19	0.022
13. BD (1) N 7 - H 24	/199. RY*(9) N 7	0.57	2.98	0.037
13. BD (1) N 7 - H 24	/200. RY*(10) N 7	1.21	1.68	0.040
13. BD (1) N 7 - H 24	/208. RY*(1) N 8	0.56	1.27	0.024
13. BD (1) N 7 - H 24	/231. RY*(7) C 9	1.58	1.60	0.045

13. BD (1) N 7 - H 24	/232. RY*(8) C 9	1.02	1.92	0.040
13. BD (1) N 7 - H 24	/233. RY*(9) C 9	0.88	2.83	0.045
13. BD (1) N 7 - H 24	/234. RY*(10) C 9	1.68	1.80	0.049
13. BD (1) N 7 - H 24	/235. RY*(11) C 9	24.69	0.24	0.068
13. BD (1) N 7 - H 24	/237. RY*(13) C 9	3.67	2.24	0.081
13. BD (1) N 7 - H 24	/242. RY*(1) C 10	0.88	1.51	0.033
13. BD (1) N 7 - H 24	/252. RY*(11) C 10	2.87	0.94	0.047
13. BD (1) N 7 - H 24	/267. RY*(9) C 11	0.68	1.86	0.032
13. BD (1) N 7 - H 24	/270. RY*(12) C 11	1.34	1.62	0.042
13. BD (1) N 7 - H 24	/286. RY*(11) C 12	0.73	1.46	0.029
13. BD (1) N 7 - H 24	/348. RY*(5) C 16	0.57	1.97	0.030
13. BD (1) N 7 - H 24	/358. RY*(15) C 16	0.52	2.01	0.029
13. BD (1) N 7 - H 24	/363. RY*(3) C 17	1.22	2.12	0.046
13. BD (1) N 7 - H 24	/364. RY*(4) C 17	0.80	2.94	0.043
13. BD (1) N 7 - H 24	/370. RY*(10) C 17	0.53	3.78	0.040
13. BD (1) N 7 - H 24	/377. RY*(1) C 18	0.87	1.94	0.037
13. BD (1) N 7 - H 24	/380. RY*(4) C 18	0.84	2.31	0.039
13. BD (1) N 7 - H 24	/387. RY*(11) C 18	0.69	4.58	0.050
13. BD (1) N 7 - H 24	/392. RY*(16) C 18	0.72	1.04	0.025
13. BD (1) N 7 - H 24	/395. RY*(2) C 19	0.80	1.46	0.031
13. BD (1) N 7 - H 24	/462. RY*(1) C 23	7.30	0.56	0.058
13. BD (1) N 7 - H 24	/463. RY*(2) C 23	1.08	1.13	0.031
13. BD (1) N 7 - H 24	/465. RY*(4) C 23	2.51	1.38	0.053
13. BD (1) N 7 - H 24	/466. RY*(5) C 23	58.27	0.08	0.062
13. BD (1) N 7 - H 24	/469. RY*(8) C 23	3.41	1.45	0.063
13. BD (1) N 7 - H 24	/471. RY*(10) C 23	5.22	1.24	0.072
13. BD (1) N 7 - H 24	/476. RY*(15) C 23	1.68	1.68	0.048
13. BD (1) N 7 - H 24	/477. RY*(16) C 23	4.61	1.66	0.079

13. BD (1) N 7 - H 24	/497. RY*(4) H 27	9.78	0.76	0.078
13. BD (1) N 7 - H 24	/529. RY*(2) H 34	4.83	0.85	0.057
13. BD (1) N 7 - H 24	/533. RY*(1) H 35	0.68	1.39	0.028
13. BD (1) N 7 - H 24	/534. RY*(2) H 35	2.60	1.55	0.057
13. BD (1) N 7 - H 24	/547. BD*(1) O 4 - C 17	5.52	1.16	0.071
13. BD (1) N 7 - H 24	/556. BD*(1) N 8 - C 18	0.76	1.18	0.027
13. BD (1) N 7 - H 24	/576. BD*(1) C 18 - C 22	5.05	1.18	0.069
13. BD (1) N 7 - H 24	/578. BD*(2) C 19 - C 20	2.24	0.41	0.029
13. BD (1) N 7 - H 24	/579. BD*(1) C 19 - H 29	28.55	0.12	0.052
14. BD (1) N 8 - C 18	/191. RY*(1) N 7	0.89	1.41	0.032
14. BD (1) N 8 - C 18	/395. RY*(2) C 19	4.35	1.63	0.075
14. BD (1) N 8 - C 18	/446. RY*(2) C 22	0.52	2.08	0.030
14. BD (1) N 8 - C 18	/553. BD*(1) N 7 - C 17	2.51	1.27	0.051
14. BD (1) N 8 - C 18	/558. BD*(1) N 8 - C 19	0.95	1.36	0.032
14. BD (1) N 8 - C 18	/576. BD*(1) C 18 - C 22	2.92	1.35	0.056
14. BD (1) N 8 - C 18	/579. BD*(1) C 19 - H 29	8.54	0.29	0.044
15. BD (2) N 8 - C 18	/193. RY*(3) N 7	1.35	1.08	0.037
15. BD (2) N 8 - C 18	/396. RY*(3) C 19	1.84	1.77	0.055
15. BD (2) N 8 - C 18	/578. BD*(2) C 19 - C 20	148.05	0.05	0.080
15. BD (2) N 8 - C 18	/583. BD*(2) C 21 - C 22	12.98	0.27	0.053
16. BD (1) N 8 - C 19	/ 87. RY*(1) S 1	0.62	1.64	0.029
16. BD (1) N 8 - C 19	/ 88. RY*(2) S 1	0.62	1.57	0.028
16. BD (1) N 8 - C 19	/ 92. RY*(6) S 1	0.56	2.48	0.033
16. BD (1) N 8 - C 19	/ 95. RY*(9) S 1	0.91	1.88	0.037
16. BD (1) N 8 - C 19	/ 96. RY*(10) S 1	0.81	1.75	0.034
16. BD (1) N 8 - C 19	/ 98. RY*(12) S 1	29.93	1.22	0.171
16. BD (1) N 8 - C 19	/100. RY*(14) S 1	6.06	1.56	0.087
16. BD (1) N 8 - C 19	/101. RY*(15) S 1	20.20	1.22	0.141

16. BD (1) N 8 - C 19	/110. RY*(3) O 2	0.94	1.81	0.037
16. BD (1) N 8 - C 19	/112. RY*(5) O 2	10.47	1.57	0.115
16. BD (1) N 8 - C 19	/114. RY*(7) O 2	3.66	2.50	0.086
16. BD (1) N 8 - C 19	/127. RY*(3) O 3	2.13	1.76	0.055
16. BD (1) N 8 - C 19	/129. RY*(5) O 3	0.92	1.93	0.038
16. BD (1) N 8 - C 19	/130. RY*(6) O 3	10.12	1.48	0.110
16. BD (1) N 8 - C 19	/131. RY*(7) O 3	1.20	2.72	0.051
16. BD (1) N 8 - C 19	/142. RY*(1) O 4	55.97	0.53	0.155
16. BD (1) N 8 - C 19	/160. RY*(3) O 5	0.81	1.58	0.032
16. BD (1) N 8 - C 19	/180. RY*(7) N 6	0.89	1.95	0.037
16. BD (1) N 8 - C 19	/190. RY*(17) N 6	4.41	32.37	0.339
16. BD (1) N 8 - C 19	/191. RY*(1) N 7	2.54	1.44	0.054
16. BD (1) N 8 - C 19	/195. RY*(5) N 7	7.68	1.39	0.093
16. BD (1) N 8 - C 19	/198. RY*(8) N 7	3.07	2.40	0.077
16. BD (1) N 8 - C 19	/199. RY*(9) N 7	3.70	3.18	0.097
16. BD (1) N 8 - C 19	/200. RY*(10) N 7	10.96	1.87	0.128
16. BD (1) N 8 - C 19	/208. RY*(1) N 8	2.64	1.47	0.056
16. BD (1) N 8 - C 19	/212. RY*(5) N 8	1.59	2.37	0.055
16. BD (1) N 8 - C 19	/216. RY*(9) N 8	1.25	3.69	0.061
16. BD (1) N 8 - C 19	/217. RY*(10) N 8	0.69	1.71	0.031
16. BD (1) N 8 - C 19	/226. RY*(2) C 9	0.51	1.76	0.027
16. BD (1) N 8 - C 19	/229. RY*(5) C 9	0.53	2.72	0.034
16. BD (1) N 8 - C 19	/230. RY*(6) C 9	1.90	1.95	0.055
16. BD (1) N 8 - C 19	/231. RY*(7) C 9	14.25	1.80	0.143
16. BD (1) N 8 - C 19	/232. RY*(8) C 9	7.09	2.12	0.110
16. BD (1) N 8 - C 19	/233. RY*(9) C 9	8.84	3.02	0.146
16. BD (1) N 8 - C 19	/234. RY*(10) C 9	14.18	2.00	0.151
16. BD (1) N 8 - C 19	/235. RY*(11) C 9	147.80	0.43	0.226

16. BD (	1) N	8 - C 19	/236. RY*(12) C 9	1.08	2.89	0.050
16. BD (	1) N	8 - C 19	/237. RY*(13) C 9	31.13	2.43	0.247
16. BD (	1) N	8 - C 19	/238. RY*(14) C 9	0.99	2.99	0.049
16. BD (	1) N	8 - C 19	/239. RY*(15) C 9	0.88	3.27	0.048
16. BD (	1) N	8 - C 19	/241. RY*(17) C 9	0.54	20.28	0.094
16. BD (	1) N	8 - C 19	/242. RY*(1) C 10	5.91	1.71	0.090
16. BD (	1) N	8 - C 19	/245. RY*(4) C 10	1.15	2.38	0.047
16. BD (	1) N	8 - C 19	/251. RY*(10) C 10	0.95	2.14	0.040
16. BD (	1) N	8 - C 19	/252. RY*(11) C 10	23.28	1.14	0.146
16. BD (	1) N	8 - C 19	/253. RY*(12) C 10	1.00	2.36	0.044
16. BD (	1) N	8 - C 19	/256. RY*(15) C 10	1.02	3.85	0.056
16. BD (	1) N	8 - C 19	/260. RY*(2) C 11	0.96	2.11	0.040
16. BD (	1) N	8 - C 19	/263. RY*(5) C 11	0.63	2.14	0.033
16. BD (	1) N	8 - C 19	/265. RY*(7) C 11	1.42	2.45	0.053
16. BD (	1) N	8 - C 19	/267. RY*(9) C 11	6.24	2.06	0.102
16. BD (	1) N	8 - C 19	/268. RY*(10) C 11	3.52	2.75	0.088
16. BD (	1) N	8 - C 19	/270. RY*(12) C 11	12.45	1.81	0.135
16. BD (	1) N	8 - C 19	/273. RY*(15) C 11	3.67	2.46	0.085
16. BD (	1) N	8 - C 19	/274. RY*(16) C 11	1.58	3.48	0.066
16. BD (	1) N	8 - C 19	/279. RY*(4) C 12	2.10	1.81	0.055
16. BD (	1) N	8 - C 19	/280. RY*(5) C 12	0.54	1.71	0.027
16. BD (	1) N	8 - C 19	/281. RY*(6) C 12	1.26	2.00	0.045
16. BD (	1) N	8 - C 19	/285. RY*(10) C 12	0.67	3.47	0.043
16. BD (	1) N	8 - C 19	/286. RY*(11) C 12	6.21	1.65	0.091
16. BD (	1) N	8 - C 19	/287. RY*(12) C 12	1.16	2.74	0.050
16. BD (	1) N	8 - C 19	/288. RY*(13) C 12	0.71	2.20	0.035
16. BD (	1) N	8 - C 19	/298. RY*(6) C 13	0.82	1.87	0.035
16. BD (	1) N	8 - C 19	/299. RY*(7) C 13	1.35	2.56	0.053

16. BD (1) N 8 - C 19	/326. RY*(17) C 14	0.52	2.48	0.032
16. BD (1) N 8 - C 19	/330. RY*(4) C 15	1.81	1.71	0.050
16. BD (1) N 8 - C 19	/334. RY*(8) C 15	0.80	1.82	0.034
16. BD (1) N 8 - C 19	/338. RY*(12) C 15	0.52	1.61	0.026
16. BD (1) N 8 - C 19	/340. RY*(14) C 15	0.76	3.36	0.045
16. BD (1) N 8 - C 19	/348. RY*(5) C 16	5.20	2.17	0.095
16. BD (1) N 8 - C 19	/351. RY*(8) C 16	0.83	2.33	0.039
16. BD (1) N 8 - C 19	/352. RY*(9) C 16	0.86	2.53	0.042
16. BD (1) N 8 - C 19	/354. RY*(11) C 16	0.50	3.76	0.039
16. BD (1) N 8 - C 19	/357. RY*(14) C 16	3.86	2.56	0.089
16. BD (1) N 8 - C 19	/358. RY*(15) C 16	5.08	2.20	0.095
16. BD (1) N 8 - C 19	/365. RY*(5) C 17	4.10	1.78	0.077
16. BD (1) N 8 - C 19	/368. RY*(8) C 17	0.94	1.84	0.037
16. BD (1) N 8 - C 19	/370. RY*(10) C 17	5.15	3.98	0.128
16. BD (1) N 8 - C 19	/371. RY*(11) C 17	1.77	2.64	0.061
16. BD (1) N 8 - C 19	/372. RY*(12) C 17	1.69	3.79	0.072
16. BD (1) N 8 - C 19	/373. RY*(13) C 17	9.92	2.49	0.141
16. BD (1) N 8 - C 19	/377. RY*(1) C 18	0.68	2.13	0.034
16. BD (1) N 8 - C 19	/378. RY*(2) C 18	2.20	2.20	0.062
16. BD (1) N 8 - C 19	/383. RY*(7) C 18	5.46	1.59	0.084
16. BD (1) N 8 - C 19	/386. RY*(10) C 18	1.02	2.82	0.048
16. BD (1) N 8 - C 19	/387. RY*(11) C 18	1.78	4.78	0.083
16. BD (1) N 8 - C 19	/388. RY*(12) C 18	2.68	3.06	0.081
16. BD (1) N 8 - C 19	/392. RY*(16) C 18	8.18	1.24	0.090
16. BD (1) N 8 - C 19	/395. RY*(2) C 19	4.08	1.66	0.074
16. BD (1) N 8 - C 19	/412. RY*(2) C 20	0.87	2.18	0.039
16. BD (1) N 8 - C 19	/417. RY*(7) C 20	0.66	2.63	0.037
16. BD (1) N 8 - C 19	/451. RY*(7) C 22	0.85	2.17	0.038

16. BD (1) N 8 - C 19	/462. RY*(1) C 23	51.34	0.76	0.177
16. BD (1) N 8 - C 19	/463. RY*(2) C 23	9.27	1.32	0.099
16. BD (1) N 8 - C 19	/464. RY*(3) C 23	2.85	1.65	0.061
16. BD (1) N 8 - C 19	/465. RY*(4) C 23	22.46	1.58	0.169
16. BD (1) N 8 - C 19	/466. RY*(5) C 23	181.72	0.28	0.201
16. BD (1) N 8 - C 19	/467. RY*(6) C 23	0.65	2.40	0.036
16. BD (1) N 8 - C 19	/469. RY*(8) C 23	29.58	1.64	0.198
16. BD (1) N 8 - C 19	/471. RY*(10) C 23	44.04	1.43	0.225
16. BD (1) N 8 - C 19	/474. RY*(13) C 23	1.18	3.61	0.059
16. BD (1) N 8 - C 19	/476. RY*(15) C 23	16.28	1.88	0.157
16. BD (1) N 8 - C 19	/477. RY*(16) C 23	39.71	1.86	0.243
16. BD (1) N 8 - C 19	/479. RY*(1) H 24	0.90	1.50	0.033
16. BD (1) N 8 - C 19	/483. RY*(5) H 24	0.52	3.44	0.038
16. BD (1) N 8 - C 19	/492. RY*(4) H 26	0.70	2.78	0.040
16. BD (1) N 8 - C 19	/496. RY*(3) H 27	1.17	2.37	0.047
16. BD (1) N 8 - C 19	/497. RY*(4) H 27	78.14	0.96	0.245
16. BD (1) N 8 - C 19	/499. RY*(1) H 28	0.62	1.75	0.029
16. BD (1) N 8 - C 19	/500. RY*(2) H 28	0.51	2.78	0.034
16. BD (1) N 8 - C 19	/502. RY*(4) H 28	2.45	2.60	0.072
16. BD (1) N 8 - C 19	/506. RY*(3) H 29	4.37	3.15	0.105
16. BD (1) N 8 - C 19	/509. RY*(1) H 30	0.68	1.76	0.031
16. BD (1) N 8 - C 19	/528. RY*(1) H 34	0.54	2.26	0.031
16. BD (1) N 8 - C 19	/529. RY*(2) H 34	42.16	1.04	0.188
16. BD (1) N 8 - C 19	/530. RY*(3) H 34	1.81	2.59	0.061
16. BD (1) N 8 - C 19	/533. RY*(1) H 35	7.01	1.58	0.094
16. BD (1) N 8 - C 19	/534. RY*(2) H 35	18.62	1.74	0.161
16. BD (1) N 8 - C 19	/535. RY*(3) H 35	1.34	2.60	0.053
16. BD (1) N 8 - C 19	/536. RY*(4) H 35	0.54	2.62	0.034

16. BD (1) N 8 - C 19	/542. RY*(5) H 36	5.09	2.61	0.103
16. BD (1) N 8 - C 19	/554. BD*(1) N 7 - C 18	3.33	1.27	0.058
16. BD (1) N 8 - C 19	/556. BD*(1) N 8 - C 18	1.23	1.37	0.037
16. BD (1) N 8 - C 19	/572. BD*(1) C 14 - H 27	0.83	1.24	0.029
16. BD (1) N 8 - C 19	/573. BD*(1) C 15 - C 16	378.86	0.13	0.201
16. BD (1) N 8 - C 19	/576. BD*(1) C 18 - C 22	1.53	1.37	0.041
16. BD (1) N 8 - C 19	/577. BD*(1) C 19 - C 20	1.09	1.42	0.035
16. BD (1) N 8 - C 19	/578. BD*(2) C 19 - C 20	15.70	0.60	0.094
16. BD (1) N 8 - C 19	/579. BD*(1) C 19 - H 29	100.47	0.31	0.158
16. BD (1) N 8 - C 19	/583. BD*(2) C 21 - C 22	2.56	0.82	0.044
16. BD (1) N 8 - C 19	/586. BD*(1) C 23 - H 34	2.90	3.90	0.095
16. BD (1) N 8 - C 19	/587. BD*(1) C 23 - H 35	2.35	4.17	0.089
16. BD (1) N 8 - C 19	/588. BD*(1) C 23 - H 36	5.85	3.54	0.128
17. BD (1) C 9 - C 10	/ 87. RY*(1) S 1	2.52	1.67	0.059
17. BD (1) C 9 - C 10	/ 88. RY*(2) S 1	2.90	1.60	0.061
17. BD (1) C 9 - C 10	/ 89. RY*(3) S 1	0.53	1.76	0.027
17. BD (1) C 9 - C 10	/ 90. RY*(4) S 1	0.86	1.70	0.034
17. BD (1) C 9 - C 10	/ 92. RY*(6) S 1	1.54	2.50	0.056
17. BD (1) C 9 - C 10	/ 95. RY*(9) S 1	4.10	1.90	0.079
17. BD (1) C 9 - C 10	/ 96. RY*(10) S 1	3.41	1.78	0.070
17. BD (1) C 9 - C 10	/ 97. RY*(11) S 1	0.64	2.21	0.034
17. BD (1) C 9 - C 10	/ 98. RY*(12) S 1	126.96	1.25	0.357
17. BD (1) C 9 - C 10	/100. RY*(14) S 1	25.34	1.58	0.180
17. BD (1) C 9 - C 10	/101. RY*(15) S 1	85.18	1.25	0.293
17. BD (1) C 9 - C 10	/108. RY*(1) O 2	1.17	2.00	0.043
17. BD (1) C 9 - C 10	/109. RY*(2) O 2	1.45	1.70	0.044
17. BD (1) C 9 - C 10	/110. RY*(3) O 2	4.34	1.84	0.080
17. BD (1) C 9 - C 10	/112. RY*(5) O 2	44.78	1.60	0.240

17. BD (1) C 9 - C 10	/113. RY*(6) O 2	1.05	1.84	0.039
17. BD (1) C 9 - C 10	/114. RY*(7) O 2	15.50	2.53	0.178
17. BD (1) C 9 - C 10	/115. RY*(8) O 2	1.32	2.29	0.049
17. BD (1) C 9 - C 10	/116. RY*(9) O 2	0.73	3.75	0.047
17. BD (1) C 9 - C 10	/117. RY*(10) O 2	0.79	3.72	0.049
17. BD (1) C 9 - C 10	/122. RY*(15) O 2	0.70	3.57	0.045
17. BD (1) C 9 - C 10	/124. RY*(17) O 2	0.96	5.63	0.066
17. BD (1) C 9 - C 10	/127. RY*(3) O 3	8.90	1.79	0.113
17. BD (1) C 9 - C 10	/128. RY*(4) O 3	1.10	1.50	0.036
17. BD (1) C 9 - C 10	/129. RY*(5) O 3	3.47	1.96	0.074
17. BD (1) C 9 - C 10	/130. RY*(6) O 3	41.93	1.51	0.226
17. BD (1) C 9 - C 10	/131. RY*(7) O 3	4.85	2.75	0.104
17. BD (1) C 9 - C 10	/133. RY*(9) O 3	1.88	3.82	0.076
17. BD (1) C 9 - C 10	/140. RY*(16) O 3	1.10	3.96	0.059
17. BD (1) C 9 - C 10	/142. RY*(1) O 4	226.73	0.56	0.320
17. BD (1) C 9 - C 10	/147. RY*(6) O 4	1.44	2.19	0.051
17. BD (1) C 9 - C 10	/160. RY*(3) O 5	4.35	1.61	0.075
17. BD (1) C 9 - C 10	/162. RY*(5) O 5	0.60	2.43	0.034
17. BD (1) C 9 - C 10	/164. RY*(7) O 5	0.85	2.49	0.041
17. BD (1) C 9 - C 10	/174. RY*(1) N 6	0.67	1.58	0.029
17. BD (1) C 9 - C 10	/176. RY*(3) N 6	1.55	1.88	0.048
17. BD (1) C 9 - C 10	/177. RY*(4) N 6	0.86	1.75	0.035
17. BD (1) C 9 - C 10	/180. RY*(7) N 6	2.71	1.98	0.066
17. BD (1) C 9 - C 10	/181. RY*(8) N 6	0.52	2.21	0.031
17. BD (1) C 9 - C 10	/186. RY*(13) N 6	0.73	4.02	0.049
17. BD (1) C 9 - C 10	/188. RY*(15) N 6	1.71	4.81	0.081
17. BD (1) C 9 - C 10	/190. RY*(17) N 6	18.73	32.40	0.699
17. BD (1) C 9 - C 10	/191. RY*(1) N 7	16.04	1.47	0.138

17. BD (1) C 9 - C 10	/195. RY*(5) N 7	29.01	1.42	0.182
17. BD (1) C 9 - C 10	/196. RY*(6) N 7	0.57	2.11	0.031
17. BD (1) C 9 - C 10	/197. RY*(7) N 7	1.08	2.74	0.049
17. BD (1) C 9 - C 10	/198. RY*(8) N 7	11.41	2.43	0.149
17. BD (1) C 9 - C 10	/199. RY*(9) N 7	19.93	3.20	0.227
17. BD (1) C 9 - C 10	/200. RY*(10) N 7	44.42	1.90	0.261
17. BD (1) C 9 - C 10	/202. RY*(12) N 7	0.54	3.07	0.036
17. BD (1) C 9 - C 10	/204. RY*(14) N 7	1.63	3.64	0.069
17. BD (1) C 9 - C 10	/208. RY*(1) N 8	12.55	1.49	0.123
17. BD (1) C 9 - C 10	/212. RY*(5) N 8	4.91	2.40	0.097
17. BD (1) C 9 - C 10	/214. RY*(7) N 8	0.63	2.12	0.033
17. BD (1) C 9 - C 10	/216. RY*(9) N 8	4.76	3.71	0.119
17. BD (1) C 9 - C 10	/217. RY*(10) N 8	2.81	1.74	0.063
17. BD (1) C 9 - C 10	/226. RY*(2) C 9	1.65	1.79	0.049
17. BD (1) C 9 - C 10	/227. RY*(3) C 9	1.59	1.88	0.049
17. BD (1) C 9 - C 10	/228. RY*(4) C 9	2.63	2.12	0.067
17. BD (1) C 9 - C 10	/229. RY*(5) C 9	2.98	2.75	0.081
17. BD (1) C 9 - C 10	/230. RY*(6) C 9	8.08	1.98	0.113
17. BD (1) C 9 - C 10	/231. RY*(7) C 9	57.73	1.83	0.292
17. BD (1) C 9 - C 10	/232. RY*(8) C 9	29.69	2.15	0.227
17. BD (1) C 9 - C 10	/233. RY*(9) C 9	35.38	3.05	0.295
17. BD (1) C 9 - C 10	/234. RY*(10) C 9	53.09	2.02	0.294
17. BD (1) C 9 - C 10	/235. RY*(11) C 9	608.65	0.46	0.474
17. BD (1) C 9 - C 10	/236. RY*(12) C 9	4.11	2.91	0.098
17. BD (1) C 9 - C 10	/237. RY*(13) C 9	126.14	2.46	0.500
17. BD (1) C 9 - C 10	/238. RY*(14) C 9	5.11	3.02	0.111
17. BD (1) C 9 - C 10	/239. RY*(15) C 9	3.88	3.30	0.102
17. BD (1) C 9 - C 10	/240. RY*(16) C 9	1.41	4.15	0.069

17. BD (1) C 9 - C 10	/241. RY*(17) C 9	4.16	20.31	0.261
17. BD (1) C 9 - C 10	/242. RY*(1) C 10	20.37	1.74	0.168
17. BD (1) C 9 - C 10	/244. RY*(3) C 10	2.42	2.45	0.069
17. BD (1) C 9 - C 10	/245. RY*(4) C 10	5.76	2.41	0.106
17. BD (1) C 9 - C 10	/246. RY*(5) C 10	1.47	1.91	0.048
17. BD (1) C 9 - C 10	/250. RY*(9) C 10	1.38	2.60	0.054
17. BD (1) C 9 - C 10	/251. RY*(10) C 10	4.85	2.17	0.092
17. BD (1) C 9 - C 10	/252. RY*(11) C 10	97.80	1.17	0.303
17. BD (1) C 9 - C 10	/253. RY*(12) C 10	3.97	2.39	0.087
17. BD (1) C 9 - C 10	/255. RY*(14) C 10	1.19	2.52	0.049
17. BD (1) C 9 - C 10	/256. RY*(15) C 10	3.35	3.88	0.102
17. BD (1) C 9 - C 10	/258. RY*(17) C 10	0.51	3.55	0.038
17. BD (1) C 9 - C 10	/261. RY*(3) C 11	0.74	1.68	0.032
17. BD (1) C 9 - C 10	/263. RY*(5) C 11	2.82	2.17	0.070
17. BD (1) C 9 - C 10	/264. RY*(6) C 11	1.00	2.08	0.041
17. BD (1) C 9 - C 10	/265. RY*(7) C 11	6.11	2.48	0.111
17. BD (1) C 9 - C 10	/266. RY*(8) C 11	1.31	2.27	0.049
17. BD (1) C 9 - C 10	/267. RY*(9) C 11	26.48	2.08	0.211
17. BD (1) C 9 - C 10	/268. RY*(10) C 11	16.42	2.78	0.192
17. BD (1) C 9 - C 10	/270. RY*(12) C 11	51.10	1.84	0.275
17. BD (1) C 9 - C 10	/273. RY*(15) C 11	17.01	2.49	0.185
17. BD (1) C 9 - C 10	/274. RY*(16) C 11	7.16	3.51	0.142
17. BD (1) C 9 - C 10	/279. RY*(4) C 12	9.32	1.84	0.118
17. BD (1) C 9 - C 10	/280. RY*(5) C 12	2.15	1.74	0.055
17. BD (1) C 9 - C 10	/281. RY*(6) C 12	5.60	2.02	0.096
17. BD (1) C 9 - C 10	/284. RY*(9) C 12	1.60	3.20	0.064
17. BD (1) C 9 - C 10	/285. RY*(10) C 12	2.12	3.50	0.077
17. BD (1) C 9 - C 10	/286. RY*(11) C 12	28.12	1.68	0.195

17. BD (1) C 9 - C 10	/287. RY*(12) C 12	5.11	2.77	0.107
17. BD (1) C 9 - C 10	/288. RY*(13) C 12	2.79	2.23	0.071
17. BD (1) C 9 - C 10	/296. RY*(4) C 13	0.75	1.83	0.033
17. BD (1) C 9 - C 10	/298. RY*(6) C 13	3.46	1.90	0.073
17. BD (1) C 9 - C 10	/299. RY*(7) C 13	5.49	2.59	0.107
17. BD (1) C 9 - C 10	/300. RY*(8) C 13	1.14	3.24	0.054
17. BD (1) C 9 - C 10	/301. RY*(9) C 13	0.94	2.83	0.046
17. BD (1) C 9 - C 10	/302. RY*(10) C 13	0.65	2.98	0.040
17. BD (1) C 9 - C 10	/303. RY*(11) C 13	0.59	1.37	0.026
17. BD (1) C 9 - C 10	/305. RY*(13) C 13	0.62	2.97	0.039
17. BD (1) C 9 - C 10	/309. RY*(17) C 13	0.61	2.49	0.035
17. BD (1) C 9 - C 10	/318. RY*(9) C 14	1.37	2.81	0.056
17. BD (1) C 9 - C 10	/319. RY*(10) C 14	1.50	2.06	0.050
17. BD (1) C 9 - C 10	/323. RY*(14) C 14	0.60	2.22	0.033
17. BD (1) C 9 - C 10	/326. RY*(17) C 14	2.31	2.50	0.068
17. BD (1) C 9 - C 10	/327. RY*(1) C 15	0.94	1.99	0.039
17. BD (1) C 9 - C 10	/330. RY*(4) C 15	7.60	1.74	0.103
17. BD (1) C 9 - C 10	/331. RY*(5) C 15	0.91	2.18	0.040
17. BD (1) C 9 - C 10	/334. RY*(8) C 15	3.39	1.85	0.071
17. BD (1) C 9 - C 10	/338. RY*(12) C 15	2.06	1.63	0.052
17. BD (1) C 9 - C 10	/339. RY*(13) C 15	1.70	2.31	0.056
17. BD (1) C 9 - C 10	/340. RY*(14) C 15	3.35	3.39	0.096
17. BD (1) C 9 - C 10	/345. RY*(2) C 16	1.86	1.85	0.052
17. BD (1) C 9 - C 10	/346. RY*(3) C 16	0.70	1.63	0.030
17. BD (1) C 9 - C 10	/347. RY*(4) C 16	0.77	1.87	0.034
17. BD (1) C 9 - C 10	/348. RY*(5) C 16	21.97	2.20	0.197
17. BD (1) C 9 - C 10	/351. RY*(8) C 16	3.23	2.36	0.078
17. BD (1) C 9 - C 10	/352. RY*(9) C 16	3.34	2.56	0.083

17. BD (1) C 9 - C 10	/354. RY*(11) C 16	1.92	3.78	0.077
17. BD (1) C 9 - C 10	/355. RY*(12) C 16	1.17	4.42	0.065
17. BD (1) C 9 - C 10	/356. RY*(13) C 16	0.59	2.07	0.031
17. BD (1) C 9 - C 10	/357. RY*(14) C 16	16.78	2.59	0.187
17. BD (1) C 9 - C 10	/358. RY*(15) C 16	21.75	2.23	0.198
17. BD (1) C 9 - C 10	/362. RY*(2) C 17	1.01	2.34	0.043
17. BD (1) C 9 - C 10	/365. RY*(5) C 17	20.31	1.81	0.172
17. BD (1) C 9 - C 10	/367. RY*(7) C 17	2.20	2.88	0.071
17. BD (1) C 9 - C 10	/368. RY*(8) C 17	4.25	1.87	0.080
17. BD (1) C 9 - C 10	/370. RY*(10) C 17	25.37	4.01	0.286
17. BD (1) C 9 - C 10	/371. RY*(11) C 17	6.94	2.67	0.122
17. BD (1) C 9 - C 10	/372. RY*(12) C 17	5.32	3.82	0.128
17. BD (1) C 9 - C 10	/373. RY*(13) C 17	38.11	2.52	0.278
17. BD (1) C 9 - C 10	/380. RY*(4) C 18	0.55	2.54	0.033
17. BD (1) C 9 - C 10	/382. RY*(6) C 18	3.13	2.02	0.071
17. BD (1) C 9 - C 10	/383. RY*(7) C 18	27.88	1.62	0.191
17. BD (1) C 9 - C 10	/385. RY*(9) C 18	2.90	2.75	0.080
17. BD (1) C 9 - C 10	/386. RY*(10) C 18	3.90	2.85	0.095
17. BD (1) C 9 - C 10	/387. RY*(11) C 18	8.43	4.81	0.181
17. BD (1) C 9 - C 10	/388. RY*(12) C 18	6.65	3.09	0.129
17. BD (1) C 9 - C 10	/389. RY*(13) C 18	0.66	3.71	0.044
17. BD (1) C 9 - C 10	/392. RY*(16) C 18	32.96	1.27	0.183
17. BD (1) C 9 - C 10	/395. RY*(2) C 19	21.84	1.68	0.172
17. BD (1) C 9 - C 10	/396. RY*(3) C 19	0.88	2.34	0.041
17. BD (1) C 9 - C 10	/402. RY*(9) C 19	0.53	1.66	0.027
17. BD (1) C 9 - C 10	/405. RY*(12) C 19	1.32	1.82	0.044
17. BD (1) C 9 - C 10	/413. RY*(3) C 20	1.13	1.41	0.036
17. BD (1) C 9 - C 10	/417. RY*(7) C 20	2.46	2.66	0.073

17. BD (1) C 9 - C 10	/427. RY*(17) C 20	0.63	2.86	0.038
17. BD (1) C 9 - C 10	/433. RY*(6) C 21	1.44	1.98	0.048
17. BD (1) C 9 - C 10	/437. RY*(10) C 21	0.52	2.39	0.032
17. BD (1) C 9 - C 10	/438. RY*(11) C 21	1.30	1.34	0.037
17. BD (1) C 9 - C 10	/447. RY*(3) C 22	0.58	1.38	0.026
17. BD (1) C 9 - C 10	/449. RY*(5) C 22	1.55	2.29	0.053
17. BD (1) C 9 - C 10	/450. RY*(6) C 22	1.22	1.89	0.043
17. BD (1) C 9 - C 10	/451. RY*(7) C 22	4.35	2.19	0.088
17. BD (1) C 9 - C 10	/454. RY*(10) C 22	1.03	3.27	0.052
17. BD (1) C 9 - C 10	/455. RY*(11) C 22	0.61	2.14	0.033
17. BD (1) C 9 - C 10	/457. RY*(13) C 22	1.03	2.41	0.045
17. BD (1) C 9 - C 10	/458. RY*(14) C 22	1.74	1.55	0.047
17. BD (1) C 9 - C 10	/462. RY*(1) C 23	209.24	0.79	0.364
17. BD (1) C 9 - C 10	/463. RY*(2) C 23	40.00	1.35	0.208
17. BD (1) C 9 - C 10	/464. RY*(3) C 23	11.86	1.68	0.127
17. BD (1) C 9 - C 10	/465. RY*(4) C 23	89.30	1.61	0.340
17. BD (1) C 9 - C 10	/466. RY*(5) C 23	703.04	0.31	0.417
17. BD (1) C 9 - C 10	/467. RY*(6) C 23	2.26	2.43	0.067
17. BD (1) C 9 - C 10	/469. RY*(8) C 23	127.00	1.67	0.414
17. BD (1) C 9 - C 10	/471. RY*(10) C 23	176.94	1.46	0.456
17. BD (1) C 9 - C 10	/473. RY*(12) C 23	1.79	2.73	0.063
17. BD (1) C 9 - C 10	/474. RY*(13) C 23	5.84	3.64	0.131
17. BD (1) C 9 - C 10	/475. RY*(14) C 23	0.81	23.18	0.123
17. BD (1) C 9 - C 10	/476. RY*(15) C 23	63.23	1.91	0.312
17. BD (1) C 9 - C 10	/477. RY*(16) C 23	178.30	1.89	0.520
17. BD (1) C 9 - C 10	/478. RY*(17) C 23	1.00	3.24	0.051
17. BD (1) C 9 - C 10	/479. RY*(1) H 24	5.60	1.53	0.083
17. BD (1) C 9 - C 10	/483. RY*(5) H 24	2.25	3.46	0.079

17. BD (1) C 9 - C 10	/492. RY*(4) H 26	3.05	2.80	0.083
17. BD (1) C 9 - C 10	/496. RY*(3) H 27	5.07	2.40	0.099
17. BD (1) C 9 - C 10	/497. RY*(4) H 27	336.12	0.99	0.517
17. BD (1) C 9 - C 10	/498. RY*(5) H 27	1.34	3.34	0.060
17. BD (1) C 9 - C 10	/499. RY*(1) H 28	2.86	1.78	0.064
17. BD (1) C 9 - C 10	/500. RY*(2) H 28	2.22	2.80	0.071
17. BD (1) C 9 - C 10	/502. RY*(4) H 28	8.92	2.63	0.138
17. BD (1) C 9 - C 10	/504. RY*(1) H 29	0.73	1.52	0.030
17. BD (1) C 9 - C 10	/505. RY*(2) H 29	0.64	2.50	0.036
17. BD (1) C 9 - C 10	/506. RY*(3) H 29	15.21	3.18	0.197
17. BD (1) C 9 - C 10	/509. RY*(1) H 30	0.62	1.79	0.030
17. BD (1) C 9 - C 10	/511. RY*(3) H 30	1.13	2.48	0.047
17. BD (1) C 9 - C 10	/528. RY*(1) H 34	2.08	2.29	0.062
17. BD (1) C 9 - C 10	/529. RY*(2) H 34	179.36	1.07	0.394
17. BD (1) C 9 - C 10	/530. RY*(3) H 34	7.46	2.62	0.125
17. BD (1) C 9 - C 10	/531. RY*(4) H 34	1.15	2.70	0.050
17. BD (1) C 9 - C 10	/533. RY*(1) H 35	27.23	1.61	0.188
17. BD (1) C 9 - C 10	/534. RY*(2) H 35	81.40	1.77	0.341
17. BD (1) C 9 - C 10	/535. RY*(3) H 35	4.94	2.62	0.102
17. BD (1) C 9 - C 10	/536. RY*(4) H 35	2.55	2.65	0.074
17. BD (1) C 9 - C 10	/537. RY*(5) H 35	1.23	3.57	0.059
17. BD (1) C 9 - C 10	/542. RY*(5) H 36	7.13	2.64	0.123
17. BD (1) C 9 - C 10	/549. BD*(1) O 5 - C 10	0.91	1.24	0.030
17. BD (1) C 9 - C 10	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.65	1.24	0.025
17. BD (1) C 9 - C 10	/552. BD*(1) N 6 - C 23	0.54	1.16	0.022
17. BD (1) C 9 - C 10	/553. BD*(1) N 7 - C 17	1.97	1.33	0.046
17. BD (1) C 9 - C 10	/561. BD*(1) C 9 - C 17	1.97	1.32	0.046
17. BD (1) C 9 - C 10	/562. BD*(1) C 10 - C 11	6.40	1.33	0.083

17. BD (1) C 9 - C 10	/563. BD*(1) C 11 - C 12	1.79	1.43	0.045
17. BD (1) C 9 - C 10	/572. BD*(1) C 14 - H 27	3.28	1.27	0.058
17. BD (1) C 9 - C 10	/573. BD*(1) C 15 - C 16	1362.46	0.16	0.419
17. BD (1) C 9 - C 10	/576. BD*(1) C 18 - C 22	3.40	1.40	0.062
17. BD (1) C 9 - C 10	/578. BD*(2) C 19 - C 20	63.99	0.63	0.194
17. BD (1) C 9 - C 10	/579. BD*(1) C 19 - H 29	480.94	0.34	0.361
17. BD (1) C 9 - C 10	/580. BD*(1) C 20 - C 21	1.11	1.47	0.036
17. BD (1) C 9 - C 10	/581. BD*(1) C 20 - H 30	1.14	1.32	0.035
17. BD (1) C 9 - C 10	/582. BD*(1) C 21 - C 22	1.09	1.47	0.036
17. BD (1) C 9 - C 10	/583. BD*(2) C 21 - C 22	10.81	0.85	0.092
17. BD (1) C 9 - C 10	/586. BD*(1) C 23 - H 34	6.52	3.93	0.143
17. BD (1) C 9 - C 10	/587. BD*(1) C 23 - H 35	4.97	4.20	0.129
17. BD (1) C 9 - C 10	/588. BD*(1) C 23 - H 36	18.88	3.57	0.232
18. BD (2) C 9 - C 10	/ 87. RY*(1) S 1	5.68	1.27	0.078
18. BD (2) C 9 - C 10	/ 88. RY*(2) S 1	4.91	1.19	0.071
18. BD (2) C 9 - C 10	/ 89. RY*(3) S 1	1.22	1.36	0.038
18. BD (2) C 9 - C 10	/ 90. RY*(4) S 1	1.27	1.29	0.038
18. BD (2) C 9 - C 10	/ 92. RY*(6) S 1	3.69	2.10	0.082
18. BD (2) C 9 - C 10	/ 95. RY*(9) S 1	6.30	1.50	0.091
18. BD (2) C 9 - C 10	/ 96. RY*(10) S 1	5.57	1.38	0.082
18. BD (2) C 9 - C 10	/ 98. RY*(12) S 1	240.41	0.84	0.423
18. BD (2) C 9 - C 10	/100. RY*(14) S 1	44.10	1.18	0.214
18. BD (2) C 9 - C 10	/101. RY*(15) S 1	155.92	0.84	0.341
18. BD (2) C 9 - C 10	/108. RY*(1) O 2	1.73	1.59	0.049
18. BD (2) C 9 - C 10	/109. RY*(2) O 2	2.41	1.29	0.052
18. BD (2) C 9 - C 10	/110. RY*(3) O 2	6.48	1.44	0.091
18. BD (2) C 9 - C 10	/112. RY*(5) O 2	75.16	1.20	0.282
18. BD (2) C 9 - C 10	/113. RY*(6) O 2	1.67	1.43	0.046

18. BD (2) C 9 - C 10	/114. RY*(7) O 2	23.87	2.12	0.211
18. BD (2) C 9 - C 10	/115. RY*(8) O 2	2.02	1.89	0.058
18. BD (2) C 9 - C 10	/116. RY*(9) O 2	0.98	3.35	0.054
18. BD (2) C 9 - C 10	/117. RY*(10) O 2	1.18	3.31	0.059
18. BD (2) C 9 - C 10	/122. RY*(15) O 2	0.99	3.16	0.053
18. BD (2) C 9 - C 10	/124. RY*(17) O 2	1.23	5.23	0.075
18. BD (2) C 9 - C 10	/125. RY*(1) O 3	0.66	1.66	0.031
18. BD (2) C 9 - C 10	/127. RY*(3) O 3	14.96	1.39	0.135
18. BD (2) C 9 - C 10	/128. RY*(4) O 3	2.59	1.10	0.050
18. BD (2) C 9 - C 10	/129. RY*(5) O 3	6.30	1.56	0.093
18. BD (2) C 9 - C 10	/130. RY*(6) O 3	73.75	1.10	0.268
18. BD (2) C 9 - C 10	/131. RY*(7) O 3	7.72	2.34	0.126
18. BD (2) C 9 - C 10	/132. RY*(8) O 3	0.64	1.60	0.030
18. BD (2) C 9 - C 10	/133. RY*(9) O 3	3.07	3.41	0.096
18. BD (2) C 9 - C 10	/140. RY*(16) O 3	1.46	3.56	0.068
18. BD (2) C 9 - C 10	/142. RY*(1) O 4	1079.71	0.16	0.386
18. BD (2) C 9 - C 10	/145. RY*(4) O 4	0.56	1.77	0.030
18. BD (2) C 9 - C 10	/147. RY*(6) O 4	2.28	1.79	0.060
18. BD (2) C 9 - C 10	/158. RY*(1) O 5	2.39	1.02	0.046
18. BD (2) C 9 - C 10	/159. RY*(2) O 5	0.55	1.37	0.026
18. BD (2) C 9 - C 10	/160. RY*(3) O 5	5.62	1.21	0.077
18. BD (2) C 9 - C 10	/162. RY*(5) O 5	0.56	2.02	0.032
18. BD (2) C 9 - C 10	/164. RY*(7) O 5	1.01	2.08	0.043
18. BD (2) C 9 - C 10	/174. RY*(1) N 6	0.59	1.17	0.025
18. BD (2) C 9 - C 10	/175. RY*(2) N 6	0.54	1.33	0.025
18. BD (2) C 9 - C 10	/176. RY*(3) N 6	1.18	1.47	0.039
18. BD (2) C 9 - C 10	/177. RY*(4) N 6	4.23	1.34	0.071
18. BD (2) C 9 - C 10	/180. RY*(7) N 6	6.22	1.57	0.093

18. BD (2) C 9 - C 10	/186. RY*(13) N 6	1.23	3.61	0.063
18. BD (2) C 9 - C 10	/188. RY*(15) N 6	1.86	4.40	0.085
18. BD (2) C 9 - C 10	/190. RY*(17) N 6	24.30	32.00	0.828
18. BD (2) C 9 - C 10	/191. RY*(1) N 7	28.10	1.06	0.162
18. BD (2) C 9 - C 10	/192. RY*(2) N 7	0.84	1.21	0.030
18. BD (2) C 9 - C 10	/195. RY*(5) N 7	55.77	1.01	0.223
18. BD (2) C 9 - C 10	/196. RY*(6) N 7	0.92	1.70	0.037
18. BD (2) C 9 - C 10	/197. RY*(7) N 7	2.10	2.34	0.066
18. BD (2) C 9 - C 10	/198. RY*(8) N 7	17.35	2.02	0.176
18. BD (2) C 9 - C 10	/199. RY*(9) N 7	27.28	2.80	0.260
18. BD (2) C 9 - C 10	/200. RY*(10) N 7	70.03	1.49	0.304
18. BD (2) C 9 - C 10	/202. RY*(12) N 7	0.67	2.66	0.040
18. BD (2) C 9 - C 10	/204. RY*(14) N 7	2.27	3.23	0.081
18. BD (2) C 9 - C 10	/208. RY*(1) N 8	21.84	1.09	0.145
18. BD (2) C 9 - C 10	/212. RY*(5) N 8	7.45	2.00	0.115
18. BD (2) C 9 - C 10	/214. RY*(7) N 8	1.03	1.71	0.040
18. BD (2) C 9 - C 10	/215. RY*(8) N 8	0.85	1.96	0.038
18. BD (2) C 9 - C 10	/216. RY*(9) N 8	6.76	3.31	0.140
18. BD (2) C 9 - C 10	/217. RY*(10) N 8	4.57	1.33	0.073
18. BD (2) C 9 - C 10	/226. RY*(2) C 9	3.09	1.38	0.061
18. BD (2) C 9 - C 10	/227. RY*(3) C 9	2.15	1.47	0.053
18. BD (2) C 9 - C 10	/228. RY*(4) C 9	2.60	1.71	0.063
18. BD (2) C 9 - C 10	/229. RY*(5) C 9	3.67	2.34	0.087
18. BD (2) C 9 - C 10	/230. RY*(6) C 9	13.64	1.57	0.137
18. BD (2) C 9 - C 10	/231. RY*(7) C 9	92.89	1.42	0.341
18. BD (2) C 9 - C 10	/232. RY*(8) C 9	49.64	1.74	0.276
18. BD (2) C 9 - C 10	/233. RY*(9) C 9	55.58	2.65	0.360
18. BD (2) C 9 - C 10	/234. RY*(10) C 9	100.04	1.62	0.378

18. BD (2) C 9 - C 10	/235. RY*(11) C 9	6521.11	0.05	0.553
18. BD (2) C 9 - C 10	/236. RY*(12) C 9	6.53	2.51	0.120
18. BD (2) C 9 - C 10	/237. RY*(13) C 9	201.67	2.06	0.605
18. BD (2) C 9 - C 10	/238. RY*(14) C 9	6.38	2.61	0.121
18. BD (2) C 9 - C 10	/239. RY*(15) C 9	4.72	2.89	0.110
18. BD (2) C 9 - C 10	/240. RY*(16) C 9	1.44	3.74	0.069
18. BD (2) C 9 - C 10	/241. RY*(17) C 9	3.24	19.91	0.238
18. BD (2) C 9 - C 10	/242. RY*(1) C 10	41.94	1.33	0.221
18. BD (2) C 9 - C 10	/244. RY*(3) C 10	1.91	2.04	0.059
18. BD (2) C 9 - C 10	/245. RY*(4) C 10	7.29	2.00	0.113
18. BD (2) C 9 - C 10	/246. RY*(5) C 10	3.56	1.50	0.069
18. BD (2) C 9 - C 10	/250. RY*(9) C 10	1.98	2.19	0.062
18. BD (2) C 9 - C 10	/251. RY*(10) C 10	6.82	1.76	0.103
18. BD (2) C 9 - C 10	/252. RY*(11) C 10	190.32	0.76	0.358
18. BD (2) C 9 - C 10	/253. RY*(12) C 10	6.71	1.98	0.108
18. BD (2) C 9 - C 10	/255. RY*(14) C 10	2.25	2.11	0.065
18. BD (2) C 9 - C 10	/256. RY*(15) C 10	6.27	3.48	0.139
18. BD (2) C 9 - C 10	/258. RY*(17) C 10	0.68	3.15	0.043
18. BD (2) C 9 - C 10	/260. RY*(2) C 11	6.51	1.74	0.100
18. BD (2) C 9 - C 10	/261. RY*(3) C 11	2.90	1.28	0.057
18. BD (2) C 9 - C 10	/263. RY*(5) C 11	3.61	1.76	0.075
18. BD (2) C 9 - C 10	/264. RY*(6) C 11	0.60	1.68	0.030
18. BD (2) C 9 - C 10	/265. RY*(7) C 11	11.95	2.08	0.148
18. BD (2) C 9 - C 10	/266. RY*(8) C 11	2.28	1.86	0.061
18. BD (2) C 9 - C 10	/267. RY*(9) C 11	42.57	1.68	0.251
18. BD (2) C 9 - C 10	/268. RY*(10) C 11	22.54	2.37	0.217
18. BD (2) C 9 - C 10	/270. RY*(12) C 11	85.57	1.44	0.329
18. BD (2) C 9 - C 10	/272. RY*(14) C 11	0.91	4.79	0.062

18. BD (2) C 9 - C 10	/273. RY*(15) C 11	24.14	2.09	0.211
18. BD (2) C 9 - C 10	/274. RY*(16) C 11	10.05	3.10	0.166
18. BD (2) C 9 - C 10	/278. RY*(3) C 12	0.75	1.02	0.026
18. BD (2) C 9 - C 10	/279. RY*(4) C 12	14.01	1.43	0.133
18. BD (2) C 9 - C 10	/280. RY*(5) C 12	3.68	1.33	0.066
18. BD (2) C 9 - C 10	/281. RY*(6) C 12	8.55	1.62	0.110
18. BD (2) C 9 - C 10	/282. RY*(7) C 12	0.62	1.75	0.031
18. BD (2) C 9 - C 10	/284. RY*(9) C 12	1.63	2.79	0.063
18. BD (2) C 9 - C 10	/285. RY*(10) C 12	4.17	3.09	0.107
18. BD (2) C 9 - C 10	/286. RY*(11) C 12	45.15	1.27	0.225
18. BD (2) C 9 - C 10	/287. RY*(12) C 12	7.31	2.36	0.124
18. BD (2) C 9 - C 10	/288. RY*(13) C 12	4.87	1.83	0.089
18. BD (2) C 9 - C 10	/295. RY*(3) C 13	0.57	1.42	0.027
18. BD (2) C 9 - C 10	/296. RY*(4) C 13	1.33	1.42	0.041
18. BD (2) C 9 - C 10	/298. RY*(6) C 13	5.62	1.49	0.086
18. BD (2) C 9 - C 10	/299. RY*(7) C 13	8.70	2.18	0.129
18. BD (2) C 9 - C 10	/300. RY*(8) C 13	1.53	2.83	0.062
18. BD (2) C 9 - C 10	/301. RY*(9) C 13	1.43	2.42	0.055
18. BD (2) C 9 - C 10	/302. RY*(10) C 13	0.95	2.57	0.046
18. BD (2) C 9 - C 10	/303. RY*(11) C 13	1.01	0.97	0.029
18. BD (2) C 9 - C 10	/305. RY*(13) C 13	1.00	2.57	0.048
18. BD (2) C 9 - C 10	/309. RY*(17) C 13	0.96	2.09	0.042
18. BD (2) C 9 - C 10	/318. RY*(9) C 14	1.93	2.41	0.064
18. BD (2) C 9 - C 10	/319. RY*(10) C 14	2.39	1.66	0.059
18. BD (2) C 9 - C 10	/323. RY*(14) C 14	0.92	1.81	0.038
18. BD (2) C 9 - C 10	/326. RY*(17) C 14	3.36	2.10	0.079
18. BD (2) C 9 - C 10	/327. RY*(1) C 15	1.84	1.59	0.051
18. BD (2) C 9 - C 10	/330. RY*(4) C 15	13.02	1.34	0.124

18. BD (2) C 9 - C 10	/331. RY*(5) C 15	1.35	1.78	0.046
18. BD (2) C 9 - C 10	/334. RY*(8) C 15	5.58	1.45	0.084
18. BD (2) C 9 - C 10	/335. RY*(9) C 15	0.50	4.31	0.044
18. BD (2) C 9 - C 10	/337. RY*(11) C 15	0.72	2.39	0.039
18. BD (2) C 9 - C 10	/338. RY*(12) C 15	3.78	1.23	0.064
18. BD (2) C 9 - C 10	/339. RY*(13) C 15	2.80	1.90	0.069
18. BD (2) C 9 - C 10	/340. RY*(14) C 15	4.89	2.98	0.113
18. BD (2) C 9 - C 10	/345. RY*(2) C 16	2.56	1.44	0.057
18. BD (2) C 9 - C 10	/346. RY*(3) C 16	0.90	1.23	0.031
18. BD (2) C 9 - C 10	/347. RY*(4) C 16	0.92	1.47	0.035
18. BD (2) C 9 - C 10	/348. RY*(5) C 16	35.04	1.79	0.235
18. BD (2) C 9 - C 10	/351. RY*(8) C 16	5.72	1.96	0.099
18. BD (2) C 9 - C 10	/352. RY*(9) C 16	5.46	2.16	0.102
18. BD (2) C 9 - C 10	/354. RY*(11) C 16	3.14	3.38	0.097
18. BD (2) C 9 - C 10	/355. RY*(12) C 16	1.86	4.01	0.081
18. BD (2) C 9 - C 10	/356. RY*(13) C 16	0.95	1.66	0.037
18. BD (2) C 9 - C 10	/357. RY*(14) C 16	24.71	2.18	0.218
18. BD (2) C 9 - C 10	/358. RY*(15) C 16	34.75	1.82	0.236
18. BD (2) C 9 - C 10	/361. RY*(1) C 17	1.49	1.50	0.044
18. BD (2) C 9 - C 10	/362. RY*(2) C 17	3.06	1.93	0.072
18. BD (2) C 9 - C 10	/365. RY*(5) C 17	20.11	1.41	0.158
18. BD (2) C 9 - C 10	/367. RY*(7) C 17	1.89	2.47	0.064
18. BD (2) C 9 - C 10	/368. RY*(8) C 17	5.67	1.46	0.086
18. BD (2) C 9 - C 10	/370. RY*(10) C 17	28.78	3.60	0.302
18. BD (2) C 9 - C 10	/371. RY*(11) C 17	13.19	2.26	0.162
18. BD (2) C 9 - C 10	/372. RY*(12) C 17	11.07	3.42	0.183
18. BD (2) C 9 - C 10	/373. RY*(13) C 17	64.83	2.11	0.348
18. BD (2) C 9 - C 10	/379. RY*(3) C 18	0.61	1.96	0.033

18. BD (2) C 9 - C 10	/380. RY*(4) C 18	0.91	2.13	0.041
18. BD (2) C 9 - C 10	/382. RY*(6) C 18	4.35	1.62	0.079
18. BD (2) C 9 - C 10	/383. RY*(7) C 18	46.85	1.22	0.224
18. BD (2) C 9 - C 10	/385. RY*(9) C 18	4.22	2.34	0.093
18. BD (2) C 9 - C 10	/386. RY*(10) C 18	6.02	2.45	0.114
18. BD (2) C 9 - C 10	/387. RY*(11) C 18	11.93	4.40	0.215
18. BD (2) C 9 - C 10	/388. RY*(12) C 18	9.53	2.68	0.150
18. BD (2) C 9 - C 10	/389. RY*(13) C 18	0.92	3.30	0.052
18. BD (2) C 9 - C 10	/392. RY*(16) C 18	61.03	0.86	0.215
18. BD (2) C 9 - C 10	/395. RY*(2) C 19	37.30	1.28	0.205
18. BD (2) C 9 - C 10	/396. RY*(3) C 19	1.36	1.94	0.048
18. BD (2) C 9 - C 10	/402. RY*(9) C 19	0.87	1.26	0.031
18. BD (2) C 9 - C 10	/405. RY*(12) C 19	2.15	1.41	0.052
18. BD (2) C 9 - C 10	/413. RY*(3) C 20	2.02	1.00	0.042
18. BD (2) C 9 - C 10	/417. RY*(7) C 20	3.68	2.25	0.086
18. BD (2) C 9 - C 10	/421. RY*(11) C 20	0.56	2.06	0.032
18. BD (2) C 9 - C 10	/426. RY*(16) C 20	0.71	0.90	0.024
18. BD (2) C 9 - C 10	/427. RY*(17) C 20	0.95	2.46	0.045
18. BD (2) C 9 - C 10	/433. RY*(6) C 21	2.35	1.57	0.057
18. BD (2) C 9 - C 10	/437. RY*(10) C 21	0.77	1.98	0.037
18. BD (2) C 9 - C 10	/438. RY*(11) C 21	2.33	0.93	0.044
18. BD (2) C 9 - C 10	/447. RY*(3) C 22	0.95	0.98	0.029
18. BD (2) C 9 - C 10	/449. RY*(5) C 22	2.36	1.88	0.063
18. BD (2) C 9 - C 10	/450. RY*(6) C 22	2.13	1.48	0.053
18. BD (2) C 9 - C 10	/451. RY*(7) C 22	6.67	1.79	0.103
18. BD (2) C 9 - C 10	/454. RY*(10) C 22	1.47	2.86	0.061
18. BD (2) C 9 - C 10	/455. RY*(11) C 22	0.98	1.73	0.039
18. BD (2) C 9 - C 10	/457. RY*(13) C 22	1.60	2.01	0.053

18. BD (2) C 9 - C 10	/458. RY*(14) C 22	2.84	1.14	0.053
18. BD (2) C 9 - C 10	/462. RY*(1) C 23	547.51	0.38	0.429
18. BD (2) C 9 - C 10	/463. RY*(2) C 23	71.75	0.94	0.244
18. BD (2) C 9 - C 10	/464. RY*(3) C 23	20.80	1.27	0.153
18. BD (2) C 9 - C 10	/465. RY*(4) C 23	156.52	1.20	0.407
18. BD (2) C 9 - C 10	/467. RY*(6) C 23	3.40	2.03	0.078
18. BD (2) C 9 - C 10	/469. RY*(8) C 23	222.75	1.27	0.499
18. BD (2) C 9 - C 10	/471. RY*(10) C 23	321.90	1.05	0.547
18. BD (2) C 9 - C 10	/473. RY*(12) C 23	2.30	2.33	0.069
18. BD (2) C 9 - C 10	/474. RY*(13) C 23	7.81	3.23	0.149
18. BD (2) C 9 - C 10	/475. RY*(14) C 23	1.06	22.78	0.146
18. BD (2) C 9 - C 10	/476. RY*(15) C 23	104.72	1.50	0.372
18. BD (2) C 9 - C 10	/477. RY*(16) C 23	280.35	1.48	0.605
18. BD (2) C 9 - C 10	/478. RY*(17) C 23	1.84	2.84	0.068
18. BD (2) C 9 - C 10	/479. RY*(1) H 24	9.06	1.12	0.095
18. BD (2) C 9 - C 10	/483. RY*(5) H 24	3.43	3.06	0.096
18. BD (2) C 9 - C 10	/484. RY*(1) H 25	0.72	1.36	0.029
18. BD (2) C 9 - C 10	/492. RY*(4) H 26	4.44	2.40	0.097
18. BD (2) C 9 - C 10	/496. RY*(3) H 27	7.74	1.99	0.117
18. BD (2) C 9 - C 10	/497. RY*(4) H 27	715.31	0.58	0.606
18. BD (2) C 9 - C 10	/498. RY*(5) H 27	2.20	2.93	0.075
18. BD (2) C 9 - C 10	/499. RY*(1) H 28	4.43	1.37	0.073
18. BD (2) C 9 - C 10	/500. RY*(2) H 28	3.38	2.40	0.085
18. BD (2) C 9 - C 10	/502. RY*(4) H 28	14.52	2.23	0.169
18. BD (2) C 9 - C 10	/504. RY*(1) H 29	1.20	1.11	0.034
18. BD (2) C 9 - C 10	/505. RY*(2) H 29	0.82	2.09	0.039
18. BD (2) C 9 - C 10	/506. RY*(3) H 29	21.38	2.77	0.229
18. BD (2) C 9 - C 10	/507. RY*(4) H 29	0.51	3.23	0.038

18. BD (2) C 9 - C 10	/509. RY*(1) H 30	1.71	1.38	0.046
18. BD (2) C 9 - C 10	/511. RY*(3) H 30	1.81	2.08	0.058
18. BD (2) C 9 - C 10	/528. RY*(1) H 34	3.51	1.88	0.076
18. BD (2) C 9 - C 10	/529. RY*(2) H 34	362.87	0.67	0.462
18. BD (2) C 9 - C 10	/530. RY*(3) H 34	11.47	2.22	0.150
18. BD (2) C 9 - C 10	/531. RY*(4) H 34	1.62	2.29	0.057
18. BD (2) C 9 - C 10	/533. RY*(1) H 35	48.46	1.20	0.227
18. BD (2) C 9 - C 10	/534. RY*(2) H 35	134.28	1.36	0.402
18. BD (2) C 9 - C 10	/535. RY*(3) H 35	8.49	2.22	0.129
18. BD (2) C 9 - C 10	/536. RY*(4) H 35	3.64	2.24	0.085
18. BD (2) C 9 - C 10	/537. RY*(5) H 35	1.76	3.16	0.070
18. BD (2) C 9 - C 10	/540. RY*(3) H 36	0.68	0.73	0.021
18. BD (2) C 9 - C 10	/542. RY*(5) H 36	19.64	2.24	0.197
18. BD (2) C 9 - C 10	/543. BD*(1) S 1 - O 2	1.65	0.76	0.032
18. BD (2) C 9 - C 10	/545. BD*(1) S 1 - N 6	3.26	0.60	0.040
18. BD (2) C 9 - C 10	/548. BD*(2) O 4 - C 17	13.60	0.46	0.075
18. BD (2) C 9 - C 10	/552. BD*(1) N 6 - C 23	3.11	0.76	0.045
18. BD (2) C 9 - C 10	/560. BD*(2) C 9 - C 10	1.60	0.49	0.026
18. BD (2) C 9 - C 10	/562. BD*(1) C 10 - C 11	1.23	0.93	0.031
18. BD (2) C 9 - C 10	/564. BD*(2) C 11 - C 12	10.30	0.49	0.066
18. BD (2) C 9 - C 10	/572. BD*(1) C 14 - H 27	6.55	0.87	0.071
18. BD (2) C 9 - C 10	/574. BD*(2) C 15 - C 16	1.30	0.49	0.024
18. BD (2) C 9 - C 10	/576. BD*(1) C 18 - C 22	6.27	1.00	0.074
18. BD (2) C 9 - C 10	/578. BD*(2) C 19 - C 20	274.83	0.22	0.228
18. BD (2) C 9 - C 10	/580. BD*(1) C 20 - C 21	2.02	1.07	0.043
18. BD (2) C 9 - C 10	/581. BD*(1) C 20 - H 30	2.44	0.92	0.044
18. BD (2) C 9 - C 10	/582. BD*(1) C 21 - C 22	1.87	1.06	0.042
18. BD (2) C 9 - C 10	/583. BD*(2) C 21 - C 22	31.98	0.44	0.109

18. BD (2) C 9 - C 10	/586. BD*(1) C 23 - H 34	11.39	3.52	0.188
18. BD (2) C 9 - C 10	/587. BD*(1) C 23 - H 35	8.62	3.80	0.169
18. BD (2) C 9 - C 10	/588. BD*(1) C 23 - H 36	32.65	3.17	0.301
19. BD (1) C 9 - C 17	/ 98. RY*(12) S 1	7.83	1.07	0.082
19. BD (1) C 9 - C 17	/100. RY*(14) S 1	1.61	1.40	0.043
19. BD (1) C 9 - C 17	/101. RY*(15) S 1	4.76	1.07	0.064
19. BD (1) C 9 - C 17	/112. RY*(5) O 2	2.66	1.42	0.055
19. BD (1) C 9 - C 17	/114. RY*(7) O 2	0.82	2.35	0.039
19. BD (1) C 9 - C 17	/130. RY*(6) O 3	2.14	1.32	0.048
19. BD (1) C 9 - C 17	/142. RY*(1) O 4	16.12	0.38	0.070
19. BD (1) C 9 - C 17	/143. RY*(2) O 4	0.53	1.73	0.027
19. BD (1) C 9 - C 17	/174. RY*(1) N 6	0.60	1.40	0.026
19. BD (1) C 9 - C 17	/190. RY*(17) N 6	0.79	32.22	0.143
19. BD (1) C 9 - C 17	/191. RY*(1) N 7	2.09	1.29	0.047
19. BD (1) C 9 - C 17	/192. RY*(2) N 7	0.83	1.43	0.031
19. BD (1) C 9 - C 17	/195. RY*(5) N 7	4.20	1.23	0.065
19. BD (1) C 9 - C 17	/199. RY*(9) N 7	0.99	3.02	0.049
19. BD (1) C 9 - C 17	/200. RY*(10) N 7	2.00	1.72	0.053
19. BD (1) C 9 - C 17	/208. RY*(1) N 8	0.77	1.31	0.028
19. BD (1) C 9 - C 17	/230. RY*(6) C 9	0.60	1.79	0.030
19. BD (1) C 9 - C 17	/231. RY*(7) C 9	3.05	1.65	0.064
19. BD (1) C 9 - C 17	/232. RY*(8) C 9	1.79	1.96	0.053
19. BD (1) C 9 - C 17	/233. RY*(9) C 9	2.42	2.87	0.075
19. BD (1) C 9 - C 17	/234. RY*(10) C 9	2.55	1.84	0.062
19. BD (1) C 9 - C 17	/235. RY*(11) C 9	59.91	0.28	0.116
19. BD (1) C 9 - C 17	/237. RY*(13) C 9	4.73	2.28	0.093
19. BD (1) C 9 - C 17	/245. RY*(4) C 10	1.42	2.23	0.051
19. BD (1) C 9 - C 17	/252. RY*(11) C 10	5.22	0.99	0.064

19. BD (1) C 9 - C 17	/267. RY*(9) C 11	1.06	1.90	0.040
19. BD (1) C 9 - C 17	/268. RY*(10) C 11	0.97	2.60	0.045
19. BD (1) C 9 - C 17	/270. RY*(12) C 11	3.38	1.66	0.067
19. BD (1) C 9 - C 17	/273. RY*(15) C 11	0.95	2.31	0.042
19. BD (1) C 9 - C 17	/279. RY*(4) C 12	0.52	1.66	0.027
19. BD (1) C 9 - C 17	/286. RY*(11) C 12	1.41	1.50	0.041
19. BD (1) C 9 - C 17	/348. RY*(5) C 16	1.27	2.01	0.045
19. BD (1) C 9 - C 17	/357. RY*(14) C 16	0.87	2.41	0.041
19. BD (1) C 9 - C 17	/358. RY*(15) C 16	1.34	2.05	0.047
19. BD (1) C 9 - C 17	/365. RY*(5) C 17	1.26	1.63	0.041
19. BD (1) C 9 - C 17	/370. RY*(10) C 17	0.70	3.83	0.046
19. BD (1) C 9 - C 17	/371. RY*(11) C 17	0.88	2.49	0.042
19. BD (1) C 9 - C 17	/372. RY*(12) C 17	0.74	3.64	0.047
19. BD (1) C 9 - C 17	/373. RY*(13) C 17	2.69	2.34	0.071
19. BD (1) C 9 - C 17	/383. RY*(7) C 18	1.16	1.44	0.037
19. BD (1) C 9 - C 17	/392. RY*(16) C 18	1.71	1.08	0.039
19. BD (1) C 9 - C 17	/395. RY*(2) C 19	1.33	1.50	0.040
19. BD (1) C 9 - C 17	/462. RY*(1) C 23	12.73	0.61	0.079
19. BD (1) C 9 - C 17	/463. RY*(2) C 23	2.77	1.17	0.051
19. BD (1) C 9 - C 17	/464. RY*(3) C 23	0.61	1.49	0.027
19. BD (1) C 9 - C 17	/465. RY*(4) C 23	4.96	1.43	0.076
19. BD (1) C 9 - C 17	/466. RY*(5) C 23	83.47	0.12	0.092
19. BD (1) C 9 - C 17	/469. RY*(8) C 23	7.66	1.49	0.096
19. BD (1) C 9 - C 17	/471. RY*(10) C 23	9.17	1.28	0.097
19. BD (1) C 9 - C 17	/476. RY*(15) C 23	2.96	1.72	0.064
19. BD (1) C 9 - C 17	/477. RY*(16) C 23	11.60	1.70	0.126
19. BD (1) C 9 - C 17	/497. RY*(4) H 27	21.96	0.81	0.120
19. BD (1) C 9 - C 17	/506. RY*(3) H 29	0.97	3.00	0.048

19. BD (1) C 9 - C 17	/529. RY*(2) H 34	11.30	0.89	0.090
19. BD (1) C 9 - C 17	/533. RY*(1) H 35	1.28	1.43	0.038
19. BD (1) C 9 - C 17	/534. RY*(2) H 35	5.54	1.59	0.084
19. BD (1) C 9 - C 17	/545. BD*(1) S 1 - N 6	1.44	0.83	0.033
19. BD (1) C 9 - C 17	/547. BD*(1) O 4 - C 17	1.43	1.20	0.037
19. BD (1) C 9 - C 17	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.83	1.05	0.026
19. BD (1) C 9 - C 17	/552. BD*(1) N 6 - C 23	0.53	0.98	0.020
19. BD (1) C 9 - C 17	/553. BD*(1) N 7 - C 17	1.14	1.15	0.032
19. BD (1) C 9 - C 17	/554. BD*(1) N 7 - C 18	4.04	1.11	0.060
19. BD (1) C 9 - C 17	/559. BD*(1) C 9 - C 10	2.64	1.27	0.052
19. BD (1) C 9 - C 17	/562. BD*(1) C 10 - C 11	3.84	1.15	0.059
19. BD (1) C 9 - C 17	/576. BD*(1) C 18 - C 22	0.54	1.22	0.023
19. BD (1) C 9 - C 17	/578. BD*(2) C 19 - C 20	4.57	0.45	0.044
19. BD (1) C 9 - C 17	/579. BD*(1) C 19 - H 29	51.35	0.16	0.081
19. BD (1) C 9 - C 17	/583. BD*(2) C 21 - C 22	0.70	0.67	0.021
20. BD (1) C 10 - C 11	/ 98. RY*(12) S 1	2.98	1.06	0.050
20. BD (1) C 10 - C 11	/100. RY*(14) S 1	0.90	1.39	0.032
20. BD (1) C 10 - C 11	/101. RY*(15) S 1	1.99	1.06	0.041
20. BD (1) C 10 - C 11	/112. RY*(5) O 2	1.34	1.41	0.039
20. BD (1) C 10 - C 11	/130. RY*(6) O 3	1.04	1.31	0.033
20. BD (1) C 10 - C 11	/142. RY*(1) O 4	8.25	0.37	0.050
20. BD (1) C 10 - C 11	/195. RY*(5) N 7	0.97	1.23	0.031
20. BD (1) C 10 - C 11	/200. RY*(10) N 7	1.39	1.71	0.044
20. BD (1) C 10 - C 11	/225. RY*(1) C 9	0.78	1.94	0.035
20. BD (1) C 10 - C 11	/226. RY*(2) C 9	0.54	1.60	0.026
20. BD (1) C 10 - C 11	/231. RY*(7) C 9	1.22	1.64	0.040
20. BD (1) C 10 - C 11	/232. RY*(8) C 9	0.67	1.96	0.033
20. BD (1) C 10 - C 11	/233. RY*(9) C 9	1.18	2.86	0.052

20. BD (1) C 10 - C 11	/234. RY*(10) C 9	1.57	1.83	0.048
20. BD (1) C 10 - C 11	/235. RY*(11) C 9	21.89	0.27	0.069
20. BD (1) C 10 - C 11	/236. RY*(12) C 9	0.73	2.72	0.040
20. BD (1) C 10 - C 11	/237. RY*(13) C 9	6.70	2.27	0.111
20. BD (1) C 10 - C 11	/242. RY*(1) C 10	0.91	1.54	0.034
20. BD (1) C 10 - C 11	/252. RY*(11) C 10	4.12	0.98	0.057
20. BD (1) C 10 - C 11	/268. RY*(10) C 11	0.80	2.59	0.041
20. BD (1) C 10 - C 11	/270. RY*(12) C 11	1.89	1.65	0.050
20. BD (1) C 10 - C 11	/273. RY*(15) C 11	0.73	2.30	0.037
20. BD (1) C 10 - C 11	/276. RY*(1) C 12	1.58	1.81	0.048
20. BD (1) C 10 - C 11	/286. RY*(11) C 12	0.66	1.49	0.028
20. BD (1) C 10 - C 11	/330. RY*(4) C 15	0.54	1.55	0.026
20. BD (1) C 10 - C 11	/344. RY*(1) C 16	1.58	1.98	0.050
20. BD (1) C 10 - C 11	/348. RY*(5) C 16	0.54	2.00	0.029
20. BD (1) C 10 - C 11	/357. RY*(14) C 16	0.58	2.40	0.034
20. BD (1) C 10 - C 11	/358. RY*(15) C 16	0.61	2.04	0.032
20. BD (1) C 10 - C 11	/372. RY*(12) C 17	0.53	3.63	0.039
20. BD (1) C 10 - C 11	/373. RY*(13) C 17	1.59	2.33	0.055
20. BD (1) C 10 - C 11	/383. RY*(7) C 18	0.71	1.43	0.029
20. BD (1) C 10 - C 11	/392. RY*(16) C 18	0.93	1.07	0.028
20. BD (1) C 10 - C 11	/395. RY*(2) C 19	0.64	1.49	0.028
20. BD (1) C 10 - C 11	/462. RY*(1) C 23	7.85	0.60	0.061
20. BD (1) C 10 - C 11	/463. RY*(2) C 23	1.31	1.16	0.035
20. BD (1) C 10 - C 11	/465. RY*(4) C 23	2.02	1.42	0.048
20. BD (1) C 10 - C 11	/466. RY*(5) C 23	51.33	0.12	0.069
20. BD (1) C 10 - C 11	/469. RY*(8) C 23	4.07	1.48	0.070
20. BD (1) C 10 - C 11	/471. RY*(10) C 23	4.80	1.27	0.070
20. BD (1) C 10 - C 11	/476. RY*(15) C 23	1.28	1.72	0.042

20. BD (1) C 10 - C 11	/477. RY*(16) C 23	6.13	1.69	0.092
20. BD (1) C 10 - C 11	/497. RY*(4) H 27	11.57	0.80	0.086
20. BD (1) C 10 - C 11	/506. RY*(3) H 29	0.54	2.99	0.036
20. BD (1) C 10 - C 11	/529. RY*(2) H 34	5.54	0.88	0.063
20. BD (1) C 10 - C 11	/533. RY*(1) H 35	0.72	1.42	0.029
20. BD (1) C 10 - C 11	/534. RY*(2) H 35	2.28	1.58	0.054
20. BD (1) C 10 - C 11	/550. BD*(1) O 5 - H 33	1.86	1.02	0.039
20. BD (1) C 10 - C 11	/559. BD*(1) C 9 - C 10	3.35	1.26	0.058
20. BD (1) C 10 - C 11	/561. BD*(1) C 9 - C 17	2.45	1.13	0.047
20. BD (1) C 10 - C 11	/563. BD*(1) C 11 - C 12	2.63	1.23	0.051
20. BD (1) C 10 - C 11	/565. BD*(1) C 11 - C 16	2.70	1.22	0.051
20. BD (1) C 10 - C 11	/566. BD*(1) C 12 - C 13	1.82	1.26	0.043
20. BD (1) C 10 - C 11	/578. BD*(2) C 19 - C 20	2.37	0.44	0.031
20. BD (1) C 10 - C 11	/579. BD*(1) C 19 - H 29	28.08	0.15	0.058
21. BD (1) C 11 - C 12	/235. RY*(11) C 9	1.77	0.29	0.020
21. BD (1) C 11 - C 12	/242. RY*(1) C 10	1.14	1.57	0.038
21. BD (1) C 11 - C 12	/293. RY*(1) C 13	0.97	1.79	0.038
21. BD (1) C 11 - C 12	/294. RY*(2) C 13	1.52	1.97	0.049
21. BD (1) C 11 - C 12	/344. RY*(1) C 16	0.58	2.00	0.031
21. BD (1) C 11 - C 12	/345. RY*(2) C 16	0.56	1.68	0.028
21. BD (1) C 11 - C 12	/466. RY*(5) C 23	2.05	0.14	0.015
21. BD (1) C 11 - C 12	/546. BD*(1) S 1 - C 16	3.59	0.87	0.052
21. BD (1) C 11 - C 12	/559. BD*(1) C 9 - C 10	1.71	1.28	0.042
21. BD (1) C 11 - C 12	/562. BD*(1) C 10 - C 11	2.59	1.16	0.049
21. BD (1) C 11 - C 12	/565. BD*(1) C 11 - C 16	5.00	1.24	0.070
21. BD (1) C 11 - C 12	/566. BD*(1) C 12 - C 13	2.53	1.28	0.051
21. BD (1) C 11 - C 12	/567. BD*(1) C 12 - H 25	0.86	1.14	0.028
21. BD (1) C 11 - C 12	/570. BD*(1) C 13 - H 26	2.15	1.13	0.044

21. BD (1) C 11 - C 12	/579. BD*(1) C 19 - H 29	1.12	0.17	0.012
22. BD (2) C 11 - C 12	/ 87. RY*(1) S 1	5.22	1.31	0.080
22. BD (2) C 11 - C 12	/ 88. RY*(2) S 1	5.69	1.23	0.082
22. BD (2) C 11 - C 12	/ 89. RY*(3) S 1	1.22	1.40	0.040
22. BD (2) C 11 - C 12	/ 90. RY*(4) S 1	1.10	1.34	0.038
22. BD (2) C 11 - C 12	/ 92. RY*(6) S 1	4.35	2.14	0.096
22. BD (2) C 11 - C 12	/ 95. RY*(9) S 1	7.06	1.54	0.104
22. BD (2) C 11 - C 12	/ 96. RY*(10) S 1	6.61	1.42	0.096
22. BD (2) C 11 - C 12	/ 97. RY*(11) S 1	0.75	1.84	0.037
22. BD (2) C 11 - C 12	/ 98. RY*(12) S 1	269.74	0.89	0.486
22. BD (2) C 11 - C 12	/100. RY*(14) S 1	51.62	1.22	0.250
22. BD (2) C 11 - C 12	/101. RY*(15) S 1	181.04	0.89	0.399
22. BD (2) C 11 - C 12	/108. RY*(1) O 2	1.92	1.64	0.056
22. BD (2) C 11 - C 12	/109. RY*(2) O 2	2.74	1.34	0.060
22. BD (2) C 11 - C 12	/110. RY*(3) O 2	7.34	1.48	0.104
22. BD (2) C 11 - C 12	/112. RY*(5) O 2	86.35	1.24	0.325
22. BD (2) C 11 - C 12	/113. RY*(6) O 2	1.91	1.48	0.053
22. BD (2) C 11 - C 12	/114. RY*(7) O 2	27.22	2.17	0.241
22. BD (2) C 11 - C 12	/115. RY*(8) O 2	2.43	1.93	0.068
22. BD (2) C 11 - C 12	/116. RY*(9) O 2	1.15	3.39	0.062
22. BD (2) C 11 - C 12	/117. RY*(10) O 2	1.31	3.36	0.066
22. BD (2) C 11 - C 12	/122. RY*(15) O 2	1.17	3.21	0.061
22. BD (2) C 11 - C 12	/124. RY*(17) O 2	1.52	5.27	0.089
22. BD (2) C 11 - C 12	/125. RY*(1) O 3	0.75	1.70	0.035
22. BD (2) C 11 - C 12	/127. RY*(3) O 3	17.47	1.43	0.157
22. BD (2) C 11 - C 12	/128. RY*(4) O 3	2.58	1.14	0.054
22. BD (2) C 11 - C 12	/129. RY*(5) O 3	7.30	1.60	0.107
22. BD (2) C 11 - C 12	/130. RY*(6) O 3	86.16	1.14	0.312

22. BD (2) C 11 - C 12	/131. RY*(7) O 3	8.84	2.39	0.144
22. BD (2) C 11 - C 12	/132. RY*(8) O 3	0.74	1.65	0.035
22. BD (2) C 11 - C 12	/133. RY*(9) O 3	3.41	3.46	0.108
22. BD (2) C 11 - C 12	/140. RY*(16) O 3	1.81	3.60	0.080
22. BD (2) C 11 - C 12	/142. RY*(1) O 4	974.68	0.20	0.440
22. BD (2) C 11 - C 12	/145. RY*(4) O 4	0.70	1.81	0.035
22. BD (2) C 11 - C 12	/147. RY*(6) O 4	2.71	1.83	0.070
22. BD (2) C 11 - C 12	/158. RY*(1) O 5	0.54	1.06	0.024
22. BD (2) C 11 - C 12	/160. RY*(3) O 5	6.58	1.25	0.090
22. BD (2) C 11 - C 12	/162. RY*(5) O 5	0.77	2.07	0.040
22. BD (2) C 11 - C 12	/163. RY*(6) O 5	0.79	1.83	0.038
22. BD (2) C 11 - C 12	/164. RY*(7) O 5	1.86	2.13	0.062
22. BD (2) C 11 - C 12	/176. RY*(3) N 6	1.90	1.52	0.053
22. BD (2) C 11 - C 12	/177. RY*(4) N 6	3.10	1.39	0.065
22. BD (2) C 11 - C 12	/180. RY*(7) N 6	6.32	1.62	0.100
22. BD (2) C 11 - C 12	/183. RY*(10) N 6	0.71	2.50	0.042
22. BD (2) C 11 - C 12	/186. RY*(13) N 6	1.55	3.66	0.075
22. BD (2) C 11 - C 12	/188. RY*(15) N 6	2.61	4.45	0.107
22. BD (2) C 11 - C 12	/190. RY*(17) N 6	29.67	32.04	0.968
22. BD (2) C 11 - C 12	/191. RY*(1) N 7	32.74	1.11	0.189
22. BD (2) C 11 - C 12	/192. RY*(2) N 7	0.95	1.25	0.034
22. BD (2) C 11 - C 12	/195. RY*(5) N 7	64.10	1.06	0.258
22. BD (2) C 11 - C 12	/196. RY*(6) N 7	1.12	1.75	0.044
22. BD (2) C 11 - C 12	/197. RY*(7) N 7	2.44	2.38	0.076
22. BD (2) C 11 - C 12	/198. RY*(8) N 7	19.49	2.07	0.199
22. BD (2) C 11 - C 12	/199. RY*(9) N 7	32.27	2.84	0.301
22. BD (2) C 11 - C 12	/200. RY*(10) N 7	83.23	1.54	0.355
22. BD (2) C 11 - C 12	/202. RY*(12) N 7	0.96	2.71	0.051

22. BD (2) C 11 - C 12	/204. RY*(14) N 7	2.72	3.28	0.094
22. BD (2) C 11 - C 12	/208. RY*(1) N 8	25.04	1.13	0.167
22. BD (2) C 11 - C 12	/212. RY*(5) N 8	8.75	2.04	0.133
22. BD (2) C 11 - C 12	/213. RY*(6) N 8	0.58	1.84	0.033
22. BD (2) C 11 - C 12	/214. RY*(7) N 8	1.27	1.76	0.047
22. BD (2) C 11 - C 12	/215. RY*(8) N 8	0.95	2.01	0.043
22. BD (2) C 11 - C 12	/216. RY*(9) N 8	7.85	3.35	0.161
22. BD (2) C 11 - C 12	/217. RY*(10) N 8	5.28	1.38	0.085
22. BD (2) C 11 - C 12	/226. RY*(2) C 9	3.71	1.43	0.072
22. BD (2) C 11 - C 12	/227. RY*(3) C 9	1.78	1.52	0.052
22. BD (2) C 11 - C 12	/228. RY*(4) C 9	3.28	1.76	0.075
22. BD (2) C 11 - C 12	/229. RY*(5) C 9	4.16	2.39	0.099
22. BD (2) C 11 - C 12	/230. RY*(6) C 9	15.08	1.62	0.155
22. BD (2) C 11 - C 12	/231. RY*(7) C 9	114.31	1.47	0.407
22. BD (2) C 11 - C 12	/232. RY*(8) C 9	55.49	1.79	0.313
22. BD (2) C 11 - C 12	/233. RY*(9) C 9	66.49	2.69	0.420
22. BD (2) C 11 - C 12	/234. RY*(10) C 9	113.57	1.66	0.432
22. BD (2) C 11 - C 12	/235. RY*(11) C 9	4258.17	0.10	0.643
22. BD (2) C 11 - C 12	/236. RY*(12) C 9	8.11	2.55	0.143
22. BD (2) C 11 - C 12	/237. RY*(13) C 9	234.38	2.10	0.697
22. BD (2) C 11 - C 12	/238. RY*(14) C 9	7.54	2.66	0.141
22. BD (2) C 11 - C 12	/239. RY*(15) C 9	6.04	2.94	0.132
22. BD (2) C 11 - C 12	/240. RY*(16) C 9	1.83	3.79	0.083
22. BD (2) C 11 - C 12	/241. RY*(17) C 9	3.96	19.95	0.279
22. BD (2) C 11 - C 12	/242. RY*(1) C 10	48.60	1.38	0.256
22. BD (2) C 11 - C 12	/244. RY*(3) C 10	2.70	2.09	0.074
22. BD (2) C 11 - C 12	/245. RY*(4) C 10	8.63	2.05	0.132
22. BD (2) C 11 - C 12	/246. RY*(5) C 10	5.57	1.55	0.092

22. BD (2) C 11 - C 12	/250. RY*(9) C 10	2.49	2.24	0.074
22. BD (2) C 11 - C 12	/251. RY*(10) C 10	7.46	1.81	0.115
22. BD (2) C 11 - C 12	/252. RY*(11) C 10	210.89	0.81	0.410
22. BD (2) C 11 - C 12	/253. RY*(12) C 10	7.34	2.03	0.121
22. BD (2) C 11 - C 12	/255. RY*(14) C 10	2.81	2.16	0.077
22. BD (2) C 11 - C 12	/256. RY*(15) C 10	7.62	3.52	0.163
22. BD (2) C 11 - C 12	/258. RY*(17) C 10	0.77	3.19	0.049
22. BD (2) C 11 - C 12	/260. RY*(2) C 11	7.27	1.78	0.113
22. BD (2) C 11 - C 12	/261. RY*(3) C 11	3.62	1.32	0.069
22. BD (2) C 11 - C 12	/263. RY*(5) C 11	5.71	1.81	0.101
22. BD (2) C 11 - C 12	/264. RY*(6) C 11	0.97	1.72	0.041
22. BD (2) C 11 - C 12	/265. RY*(7) C 11	10.79	2.12	0.150
22. BD (2) C 11 - C 12	/266. RY*(8) C 11	2.59	1.91	0.070
22. BD (2) C 11 - C 12	/267. RY*(9) C 11	49.41	1.72	0.290
22. BD (2) C 11 - C 12	/268. RY*(10) C 11	26.27	2.42	0.250
22. BD (2) C 11 - C 12	/270. RY*(12) C 11	98.18	1.48	0.379
22. BD (2) C 11 - C 12	/272. RY*(14) C 11	1.05	4.83	0.071
22. BD (2) C 11 - C 12	/273. RY*(15) C 11	28.40	2.13	0.244
22. BD (2) C 11 - C 12	/274. RY*(16) C 11	11.14	3.15	0.186
22. BD (2) C 11 - C 12	/278. RY*(3) C 12	1.43	1.06	0.039
22. BD (2) C 11 - C 12	/279. RY*(4) C 12	14.45	1.48	0.145
22. BD (2) C 11 - C 12	/280. RY*(5) C 12	4.22	1.38	0.076
22. BD (2) C 11 - C 12	/281. RY*(6) C 12	13.51	1.66	0.149
22. BD (2) C 11 - C 12	/282. RY*(7) C 12	0.63	1.79	0.033
22. BD (2) C 11 - C 12	/284. RY*(9) C 12	1.81	2.84	0.071
22. BD (2) C 11 - C 12	/285. RY*(10) C 12	4.80	3.14	0.122
22. BD (2) C 11 - C 12	/286. RY*(11) C 12	51.24	1.32	0.258
22. BD (2) C 11 - C 12	/287. RY*(12) C 12	8.48	2.41	0.142

22. BD (2) C 11 - C 12	/288. RY*(13) C 12	5.04	1.87	0.096
22. BD (2) C 11 - C 12	/296. RY*(4) C 13	1.99	1.47	0.054
22. BD (2) C 11 - C 12	/297. RY*(5) C 13	0.96	1.77	0.041
22. BD (2) C 11 - C 12	/298. RY*(6) C 13	5.60	1.54	0.092
22. BD (2) C 11 - C 12	/299. RY*(7) C 13	10.21	2.23	0.150
22. BD (2) C 11 - C 12	/300. RY*(8) C 13	1.81	2.88	0.072
22. BD (2) C 11 - C 12	/301. RY*(9) C 13	1.54	2.46	0.061
22. BD (2) C 11 - C 12	/302. RY*(10) C 13	1.08	2.62	0.053
22. BD (2) C 11 - C 12	/303. RY*(11) C 13	1.78	1.01	0.042
22. BD (2) C 11 - C 12	/305. RY*(13) C 13	1.19	2.61	0.055
22. BD (2) C 11 - C 12	/309. RY*(17) C 13	1.09	2.13	0.048
22. BD (2) C 11 - C 12	/314. RY*(5) C 14	0.52	1.42	0.027
22. BD (2) C 11 - C 12	/316. RY*(7) C 14	0.51	2.10	0.033
22. BD (2) C 11 - C 12	/318. RY*(9) C 14	2.27	2.45	0.074
22. BD (2) C 11 - C 12	/319. RY*(10) C 14	2.92	1.70	0.070
22. BD (2) C 11 - C 12	/323. RY*(14) C 14	1.06	1.86	0.044
22. BD (2) C 11 - C 12	/326. RY*(17) C 14	3.90	2.14	0.091
22. BD (2) C 11 - C 12	/327. RY*(1) C 15	2.02	1.63	0.057
22. BD (2) C 11 - C 12	/330. RY*(4) C 15	15.20	1.38	0.144
22. BD (2) C 11 - C 12	/331. RY*(5) C 15	1.39	1.82	0.050
22. BD (2) C 11 - C 12	/334. RY*(8) C 15	6.34	1.49	0.097
22. BD (2) C 11 - C 12	/335. RY*(9) C 15	0.59	4.36	0.050
22. BD (2) C 11 - C 12	/337. RY*(11) C 15	0.83	2.44	0.045
22. BD (2) C 11 - C 12	/338. RY*(12) C 15	4.26	1.27	0.073
22. BD (2) C 11 - C 12	/339. RY*(13) C 15	3.32	1.95	0.080
22. BD (2) C 11 - C 12	/340. RY*(14) C 15	5.48	3.03	0.128
22. BD (2) C 11 - C 12	/345. RY*(2) C 16	2.47	1.49	0.060
22. BD (2) C 11 - C 12	/347. RY*(4) C 16	1.43	1.51	0.046

22. BD (2) C 11 - C 12	/348. RY*(5) C 16	47.61	1.84	0.293
22. BD (2) C 11 - C 12	/349. RY*(6) C 16	1.01	1.56	0.039
22. BD (2) C 11 - C 12	/351. RY*(8) C 16	7.55	2.00	0.122
22. BD (2) C 11 - C 12	/352. RY*(9) C 16	6.13	2.20	0.115
22. BD (2) C 11 - C 12	/353. RY*(10) C 16	0.68	1.60	0.033
22. BD (2) C 11 - C 12	/354. RY*(11) C 16	3.64	3.42	0.111
22. BD (2) C 11 - C 12	/355. RY*(12) C 16	2.21	4.06	0.094
22. BD (2) C 11 - C 12	/356. RY*(13) C 16	0.87	1.71	0.038
22. BD (2) C 11 - C 12	/357. RY*(14) C 16	29.65	2.23	0.255
22. BD (2) C 11 - C 12	/358. RY*(15) C 16	39.59	1.87	0.270
22. BD (2) C 11 - C 12	/361. RY*(1) C 17	1.64	1.55	0.050
22. BD (2) C 11 - C 12	/362. RY*(2) C 17	2.00	1.98	0.062
22. BD (2) C 11 - C 12	/365. RY*(5) C 17	32.95	1.45	0.217
22. BD (2) C 11 - C 12	/367. RY*(7) C 17	2.58	2.52	0.080
22. BD (2) C 11 - C 12	/368. RY*(8) C 17	7.03	1.51	0.102
22. BD (2) C 11 - C 12	/370. RY*(10) C 17	33.46	3.65	0.347
22. BD (2) C 11 - C 12	/371. RY*(11) C 17	15.26	2.31	0.186
22. BD (2) C 11 - C 12	/372. RY*(12) C 17	13.18	3.46	0.212
22. BD (2) C 11 - C 12	/373. RY*(13) C 17	75.48	2.16	0.401
22. BD (2) C 11 - C 12	/379. RY*(3) C 18	0.73	2.01	0.038
22. BD (2) C 11 - C 12	/380. RY*(4) C 18	1.08	2.18	0.048
22. BD (2) C 11 - C 12	/382. RY*(6) C 18	5.17	1.66	0.092
22. BD (2) C 11 - C 12	/383. RY*(7) C 18	53.95	1.26	0.259
22. BD (2) C 11 - C 12	/385. RY*(9) C 18	5.14	2.39	0.110
22. BD (2) C 11 - C 12	/386. RY*(10) C 18	7.25	2.49	0.133
22. BD (2) C 11 - C 12	/387. RY*(11) C 18	14.07	4.45	0.248
22. BD (2) C 11 - C 12	/388. RY*(12) C 18	11.39	2.73	0.175
22. BD (2) C 11 - C 12	/389. RY*(13) C 18	1.15	3.35	0.062

22. BD (2) C 11 - C 12	/392. RY*(16) C 18	70.59	0.91	0.251
22. BD (2) C 11 - C 12	/395. RY*(2) C 19	43.12	1.32	0.237
22. BD (2) C 11 - C 12	/396. RY*(3) C 19	1.59	1.98	0.056
22. BD (2) C 11 - C 12	/402. RY*(9) C 19	0.98	1.30	0.036
22. BD (2) C 11 - C 12	/403. RY*(10) C 19	0.58	1.03	0.024
22. BD (2) C 11 - C 12	/405. RY*(12) C 19	2.49	1.46	0.060
22. BD (2) C 11 - C 12	/413. RY*(3) C 20	2.33	1.05	0.049
22. BD (2) C 11 - C 12	/415. RY*(5) C 20	0.57	1.54	0.029
22. BD (2) C 11 - C 12	/417. RY*(7) C 20	4.33	2.30	0.099
22. BD (2) C 11 - C 12	/421. RY*(11) C 20	0.67	2.10	0.037
22. BD (2) C 11 - C 12	/426. RY*(16) C 20	0.82	0.95	0.028
22. BD (2) C 11 - C 12	/427. RY*(17) C 20	1.10	2.50	0.052
22. BD (2) C 11 - C 12	/431. RY*(4) C 21	0.56	1.66	0.030
22. BD (2) C 11 - C 12	/433. RY*(6) C 21	2.71	1.62	0.066
22. BD (2) C 11 - C 12	/437. RY*(10) C 21	0.88	2.03	0.042
22. BD (2) C 11 - C 12	/438. RY*(11) C 21	2.69	0.98	0.051
22. BD (2) C 11 - C 12	/440. RY*(13) C 21	0.53	2.60	0.037
22. BD (2) C 11 - C 12	/447. RY*(3) C 22	1.20	1.02	0.035
22. BD (2) C 11 - C 12	/449. RY*(5) C 22	2.77	1.93	0.072
22. BD (2) C 11 - C 12	/450. RY*(6) C 22	2.45	1.53	0.061
22. BD (2) C 11 - C 12	/451. RY*(7) C 22	7.87	1.83	0.119
22. BD (2) C 11 - C 12	/454. RY*(10) C 22	1.72	2.91	0.070
22. BD (2) C 11 - C 12	/455. RY*(11) C 22	1.14	1.78	0.045
22. BD (2) C 11 - C 12	/457. RY*(13) C 22	1.84	2.05	0.061
22. BD (2) C 11 - C 12	/458. RY*(14) C 22	3.40	1.19	0.063
22. BD (2) C 11 - C 12	/462. RY*(1) C 23	589.62	0.43	0.498
22. BD (2) C 11 - C 12	/463. RY*(2) C 23	81.52	0.99	0.282
22. BD (2) C 11 - C 12	/464. RY*(3) C 23	22.86	1.32	0.172

22. BD (2) C 11 - C 12	/465. RY*(4) C 23	191.82	1.25	0.486
22. BD (2) C 11 - C 12	/467. RY*(6) C 23	5.45	2.07	0.105
22. BD (2) C 11 - C 12	/469. RY*(8) C 23	245.30	1.31	0.563
22. BD (2) C 11 - C 12	/471. RY*(10) C 23	368.17	1.10	0.631
22. BD (2) C 11 - C 12	/473. RY*(12) C 23	2.40	2.37	0.075
22. BD (2) C 11 - C 12	/474. RY*(13) C 23	9.27	3.28	0.173
22. BD (2) C 11 - C 12	/475. RY*(14) C 23	1.03	22.82	0.152
22. BD (2) C 11 - C 12	/476. RY*(15) C 23	127.71	1.55	0.441
22. BD (2) C 11 - C 12	/477. RY*(16) C 23	326.82	1.53	0.701
22. BD (2) C 11 - C 12	/478. RY*(17) C 23	2.71	2.88	0.088
22. BD (2) C 11 - C 12	/479. RY*(1) H 24	10.58	1.17	0.110
22. BD (2) C 11 - C 12	/481. RY*(3) H 24	0.52	2.15	0.033
22. BD (2) C 11 - C 12	/482. RY*(4) H 24	0.55	2.67	0.038
22. BD (2) C 11 - C 12	/483. RY*(5) H 24	3.99	3.10	0.110
22. BD (2) C 11 - C 12	/484. RY*(1) H 25	0.76	1.41	0.032
22. BD (2) C 11 - C 12	/491. RY*(3) H 26	0.63	2.11	0.036
22. BD (2) C 11 - C 12	/492. RY*(4) H 26	5.23	2.44	0.112
22. BD (2) C 11 - C 12	/496. RY*(3) H 27	9.06	2.04	0.135
22. BD (2) C 11 - C 12	/497. RY*(4) H 27	790.08	0.63	0.699
22. BD (2) C 11 - C 12	/498. RY*(5) H 27	3.00	2.98	0.094
22. BD (2) C 11 - C 12	/499. RY*(1) H 28	5.19	1.42	0.085
22. BD (2) C 11 - C 12	/500. RY*(2) H 28	3.86	2.44	0.096
22. BD (2) C 11 - C 12	/502. RY*(4) H 28	18.09	2.27	0.201
22. BD (2) C 11 - C 12	/504. RY*(1) H 29	1.32	1.16	0.039
22. BD (2) C 11 - C 12	/505. RY*(2) H 29	0.79	2.14	0.041
22. BD (2) C 11 - C 12	/506. RY*(3) H 29	23.76	2.82	0.257
22. BD (2) C 11 - C 12	/507. RY*(4) H 29	1.01	3.28	0.057
22. BD (2) C 11 - C 12	/508. RY*(5) H 29	0.66	2.64	0.041

22. BD (2) C 11 - C 12	/509. RY*(1) H 30	3.20	1.43	0.067
22. BD (2) C 11 - C 12	/511. RY*(3) H 30	2.13	2.12	0.067
22. BD (2) C 11 - C 12	/528. RY*(1) H 34	4.12	1.93	0.088
22. BD (2) C 11 - C 12	/529. RY*(2) H 34	402.90	0.71	0.532
22. BD (2) C 11 - C 12	/530. RY*(3) H 34	13.42	2.26	0.173
22. BD (2) C 11 - C 12	/531. RY*(4) H 34	2.11	2.34	0.070
22. BD (2) C 11 - C 12	/533. RY*(1) H 35	58.26	1.25	0.268
22. BD (2) C 11 - C 12	/534. RY*(2) H 35	151.70	1.41	0.459
22. BD (2) C 11 - C 12	/535. RY*(3) H 35	9.59	2.26	0.146
22. BD (2) C 11 - C 12	/536. RY*(4) H 35	4.06	2.29	0.096
22. BD (2) C 11 - C 12	/537. RY*(5) H 35	2.06	3.21	0.081
22. BD (2) C 11 - C 12	/542. RY*(5) H 36	42.98	2.28	0.311
22. BD (2) C 11 - C 12	/543. BD*(1) S 1 - O 2	0.61	0.81	0.021
22. BD (2) C 11 - C 12	/544. BD*(1) S 1 - O 3	0.60	0.81	0.021
22. BD (2) C 11 - C 12	/545. BD*(1) S 1 - N 6	1.17	0.65	0.025
22. BD (2) C 11 - C 12	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.53	0.88	0.021
22. BD (2) C 11 - C 12	/560. BD*(2) C 9 - C 10	9.74	0.53	0.066
22. BD (2) C 11 - C 12	/562. BD*(1) C 10 - C 11	1.35	0.97	0.036
22. BD (2) C 11 - C 12	/564. BD*(2) C 11 - C 12	1.29	0.53	0.024
22. BD (2) C 11 - C 12	/569. BD*(2) C 13 - C 14	10.01	0.53	0.066
22. BD (2) C 11 - C 12	/572. BD*(1) C 14 - H 27	7.55	0.91	0.082
22. BD (2) C 11 - C 12	/574. BD*(2) C 15 - C 16	19.96	0.54	0.093
22. BD (2) C 11 - C 12	/576. BD*(1) C 18 - C 22	7.82	1.04	0.089
22. BD (2) C 11 - C 12	/578. BD*(2) C 19 - C 20	314.99	0.27	0.266
22. BD (2) C 11 - C 12	/580. BD*(1) C 20 - C 21	2.14	1.11	0.048
22. BD (2) C 11 - C 12	/581. BD*(1) C 20 - H 30	2.88	0.96	0.052
22. BD (2) C 11 - C 12	/582. BD*(1) C 21 - C 22	2.51	1.11	0.052
22. BD (2) C 11 - C 12	/583. BD*(2) C 21 - C 22	38.73	0.49	0.126

22. BD (2) C 11 - C 12	/586. BD*(1) C 23 - H 34	18.71	3.57	0.256
22. BD (2) C 11 - C 12	/587. BD*(1) C 23 - H 35	18.37	3.84	0.263
22. BD (2) C 11 - C 12	/588. BD*(1) C 23 - H 36	38.82	3.21	0.349
23. BD (1) C 11 - C 16	/ 87. RY*(1) S 1	11.14	2.30	0.144
23. BD (1) C 11 - C 16	/ 88. RY*(2) S 1	11.64	2.22	0.145
23. BD (1) C 11 - C 16	/ 89. RY*(3) S 1	2.26	2.39	0.066
23. BD (1) C 11 - C 16	/ 90. RY*(4) S 1	2.92	2.32	0.074
23. BD (1) C 11 - C 16	/ 92. RY*(6) S 1	7.72	3.13	0.140
23. BD (1) C 11 - C 16	/ 95. RY*(9) S 1	16.24	2.53	0.182
23. BD (1) C 11 - C 16	/ 96. RY*(10) S 1	16.15	2.41	0.177
23. BD (1) C 11 - C 16	/ 97. RY*(11) S 1	0.62	2.83	0.038
23. BD (1) C 11 - C 16	/ 98. RY*(12) S 1	476.84	1.88	0.851
23. BD (1) C 11 - C 16	/ 99. RY*(13) S 1	2718.93	0.60	1.149
23. BD (1) C 11 - C 16	/100. RY*(14) S 1	105.08	2.21	0.434
23. BD (1) C 11 - C 16	/101. RY*(15) S 1	315.87	1.88	0.693
23. BD (1) C 11 - C 16	/103. RY*(17) S 1	1.82	16.18	0.154
23. BD (1) C 11 - C 16	/107. RY*(21) S 1	0.50	18.27	0.086
23. BD (1) C 11 - C 16	/108. RY*(1) O 2	4.95	2.63	0.102
23. BD (1) C 11 - C 16	/109. RY*(2) O 2	6.37	2.32	0.109
23. BD (1) C 11 - C 16	/110. RY*(3) O 2	17.47	2.47	0.187
23. BD (1) C 11 - C 16	/112. RY*(5) O 2	180.85	2.23	0.571
23. BD (1) C 11 - C 16	/113. RY*(6) O 2	4.36	2.47	0.093
23. BD (1) C 11 - C 16	/114. RY*(7) O 2	71.77	3.16	0.428
23. BD (1) C 11 - C 16	/115. RY*(8) O 2	5.79	2.92	0.117
23. BD (1) C 11 - C 16	/116. RY*(9) O 2	3.33	4.38	0.109
23. BD (1) C 11 - C 16	/117. RY*(10) O 2	3.69	4.35	0.114
23. BD (1) C 11 - C 16	/121. RY*(14) O 2	0.58	4.26	0.045
23. BD (1) C 11 - C 16	/122. RY*(15) O 2	3.41	4.20	0.108

23. BD (1) C 11 - C 16	/123. RY*(16) O 2	1.13	4.66	0.065
23. BD (1) C 11 - C 16	/124. RY*(17) O 2	4.72	6.26	0.155
23. BD (1) C 11 - C 16	/125. RY*(1) O 3	2.03	2.69	0.066
23. BD (1) C 11 - C 16	/127. RY*(3) O 3	37.49	2.42	0.271
23. BD (1) C 11 - C 16	/128. RY*(4) O 3	4.65	2.13	0.090
23. BD (1) C 11 - C 16	/129. RY*(5) O 3	16.32	2.59	0.185
23. BD (1) C 11 - C 16	/130. RY*(6) O 3	170.02	2.13	0.542
23. BD (1) C 11 - C 16	/131. RY*(7) O 3	22.86	3.38	0.250
23. BD (1) C 11 - C 16	/132. RY*(8) O 3	1.55	2.64	0.058
23. BD (1) C 11 - C 16	/133. RY*(9) O 3	9.63	4.45	0.186
23. BD (1) C 11 - C 16	/135. RY*(11) O 3	1.40	6.52	0.086
23. BD (1) C 11 - C 16	/139. RY*(15) O 3	0.90	4.17	0.055
23. BD (1) C 11 - C 16	/140. RY*(16) O 3	5.30	4.59	0.140
23. BD (1) C 11 - C 16	/142. RY*(1) O 4	617.39	1.19	0.771
23. BD (1) C 11 - C 16	/145. RY*(4) O 4	1.62	2.80	0.061
23. BD (1) C 11 - C 16	/147. RY*(6) O 4	6.51	2.82	0.122
23. BD (1) C 11 - C 16	/148. RY*(7) O 4	0.74	3.71	0.047
23. BD (1) C 11 - C 16	/158. RY*(1) O 5	0.69	2.05	0.034
23. BD (1) C 11 - C 16	/159. RY*(2) O 5	0.90	2.40	0.042
23. BD (1) C 11 - C 16	/160. RY*(3) O 5	13.65	2.24	0.157
23. BD (1) C 11 - C 16	/162. RY*(5) O 5	2.26	3.06	0.075
23. BD (1) C 11 - C 16	/163. RY*(6) O 5	1.67	2.82	0.062
23. BD (1) C 11 - C 16	/164. RY*(7) O 5	4.33	3.11	0.104
23. BD (1) C 11 - C 16	/168. RY*(11) O 5	0.96	6.30	0.070
23. BD (1) C 11 - C 16	/171. RY*(14) O 5	0.55	4.44	0.045
23. BD (1) C 11 - C 16	/174. RY*(1) N 6	0.72	2.21	0.036
23. BD (1) C 11 - C 16	/175. RY*(2) N 6	0.95	2.36	0.043
23. BD (1) C 11 - C 16	/176. RY*(3) N 6	4.50	2.50	0.095

23. BD (1) C 11 - C 16	/177. RY*(4) N 6	6.29	2.38	0.110
23. BD (1) C 11 - C 16	/178. RY*(5) N 6	0.87	2.32	0.040
23. BD (1) C 11 - C 16	/180. RY*(7) N 6	13.42	2.61	0.168
23. BD (1) C 11 - C 16	/181. RY*(8) N 6	0.60	2.84	0.037
23. BD (1) C 11 - C 16	/183. RY*(10) N 6	1.86	3.49	0.072
23. BD (1) C 11 - C 16	/186. RY*(13) N 6	4.08	4.64	0.124
23. BD (1) C 11 - C 16	/188. RY*(15) N 6	8.29	5.44	0.191
23. BD (1) C 11 - C 16	/190. RY*(17) N 6	106.82	33.03	1.690
23. BD (1) C 11 - C 16	/191. RY*(1) N 7	63.80	2.10	0.328
23. BD (1) C 11 - C 16	/192. RY*(2) N 7	1.90	2.24	0.059
23. BD (1) C 11 - C 16	/193. RY*(3) N 7	0.82	2.28	0.039
23. BD (1) C 11 - C 16	/195. RY*(5) N 7	125.71	2.04	0.456
23. BD (1) C 11 - C 16	/196. RY*(6) N 7	2.74	2.73	0.078
23. BD (1) C 11 - C 16	/197. RY*(7) N 7	6.33	3.37	0.131
23. BD (1) C 11 - C 16	/198. RY*(8) N 7	49.88	3.06	0.351
23. BD (1) C 11 - C 16	/199. RY*(9) N 7	89.15	3.83	0.526
23. BD (1) C 11 - C 16	/200. RY*(10) N 7	188.88	2.53	0.622
23. BD (1) C 11 - C 16	/201. RY*(11) N 7	1.04	4.52	0.062
23. BD (1) C 11 - C 16	/202. RY*(12) N 7	2.64	3.69	0.089
23. BD (1) C 11 - C 16	/204. RY*(14) N 7	7.81	4.26	0.164
23. BD (1) C 11 - C 16	/208. RY*(1) N 8	50.24	2.12	0.293
23. BD (1) C 11 - C 16	/211. RY*(4) N 8	0.92	3.62	0.052
23. BD (1) C 11 - C 16	/212. RY*(5) N 8	22.35	3.03	0.234
23. BD (1) C 11 - C 16	/213. RY*(6) N 8	1.40	2.82	0.057
23. BD (1) C 11 - C 16	/214. RY*(7) N 8	2.92	2.75	0.081
23. BD (1) C 11 - C 16	/215. RY*(8) N 8	2.32	3.00	0.075
23. BD (1) C 11 - C 16	/216. RY*(9) N 8	23.18	4.34	0.285
23. BD (1) C 11 - C 16	/217. RY*(10) N 8	11.57	2.37	0.149

23. BD (1) C 11 - C 16	/221. RY*(14) N 8	0.68	3.77	0.045
23. BD (1) C 11 - C 16	/225. RY*(1) C 9	1.04	2.76	0.048
23. BD (1) C 11 - C 16	/226. RY*(2) C 9	6.69	2.42	0.114
23. BD (1) C 11 - C 16	/227. RY*(3) C 9	3.17	2.51	0.080
23. BD (1) C 11 - C 16	/228. RY*(4) C 9	8.03	2.75	0.134
23. BD (1) C 11 - C 16	/229. RY*(5) C 9	11.60	3.38	0.178
23. BD (1) C 11 - C 16	/230. RY*(6) C 9	34.67	2.60	0.270
23. BD (1) C 11 - C 16	/231. RY*(7) C 9	259.14	2.46	0.718
23. BD (1) C 11 - C 16	/232. RY*(8) C 9	140.47	2.77	0.562
23. BD (1) C 11 - C 16	/233. RY*(9) C 9	181.70	3.68	0.735
23. BD (1) C 11 - C 16	/234. RY*(10) C 9	264.40	2.65	0.753
23. BD (1) C 11 - C 16	/235. RY*(11) C 9	1453.94	1.09	1.131
23. BD (1) C 11 - C 16	/236. RY*(12) C 9	22.35	3.54	0.253
23. BD (1) C 11 - C 16	/237. RY*(13) C 9	606.14	3.09	1.231
23. BD (1) C 11 - C 16	/238. RY*(14) C 9	20.13	3.65	0.244
23. BD (1) C 11 - C 16	/239. RY*(15) C 9	17.01	3.92	0.232
23. BD (1) C 11 - C 16	/240. RY*(16) C 9	4.98	4.78	0.139
23. BD (1) C 11 - C 16	/241. RY*(17) C 9	12.18	20.94	0.454
23. BD (1) C 11 - C 16	/242. RY*(1) C 10	122.11	2.36	0.482
23. BD (1) C 11 - C 16	/244. RY*(3) C 10	3.36	3.08	0.091
23. BD (1) C 11 - C 16	/245. RY*(4) C 10	20.64	3.04	0.225
23. BD (1) C 11 - C 16	/246. RY*(5) C 10	6.74	2.54	0.118
23. BD (1) C 11 - C 16	/247. RY*(6) C 10	0.72	3.30	0.044
23. BD (1) C 11 - C 16	/249. RY*(8) C 10	1.50	3.22	0.063
23. BD (1) C 11 - C 16	/250. RY*(9) C 10	8.13	3.22	0.146
23. BD (1) C 11 - C 16	/251. RY*(10) C 10	17.27	2.80	0.198
23. BD (1) C 11 - C 16	/252. RY*(11) C 10	363.77	1.80	0.727
23. BD (1) C 11 - C 16	/253. RY*(12) C 10	21.15	3.02	0.227

23. BD (1) C 11 - C 16	/254. RY*(13) C 10	0.74	7.66	0.068
23. BD (1) C 11 - C 16	/255. RY*(14) C 10	6.57	3.14	0.129
23. BD (1) C 11 - C 16	/256. RY*(15) C 10	23.44	4.51	0.292
23. BD (1) C 11 - C 16	/257. RY*(16) C 10	1.95	18.84	0.173
23. BD (1) C 11 - C 16	/258. RY*(17) C 10	1.98	4.18	0.082
23. BD (1) C 11 - C 16	/260. RY*(2) C 11	21.20	2.77	0.218
23. BD (1) C 11 - C 16	/261. RY*(3) C 11	3.56	2.31	0.082
23. BD (1) C 11 - C 16	/262. RY*(4) C 11	1.07	2.58	0.047
23. BD (1) C 11 - C 16	/263. RY*(5) C 11	11.29	2.80	0.160
23. BD (1) C 11 - C 16	/264. RY*(6) C 11	2.60	2.71	0.075
23. BD (1) C 11 - C 16	/265. RY*(7) C 11	28.86	3.11	0.269
23. BD (1) C 11 - C 16	/266. RY*(8) C 11	7.50	2.90	0.133
23. BD (1) C 11 - C 16	/267. RY*(9) C 11	113.51	2.71	0.499
23. BD (1) C 11 - C 16	/268. RY*(10) C 11	71.61	3.41	0.444
23. BD (1) C 11 - C 16	/269. RY*(11) C 11	0.57	3.80	0.042
23. BD (1) C 11 - C 16	/270. RY*(12) C 11	233.73	2.47	0.683
23. BD (1) C 11 - C 16	/271. RY*(13) C 11	0.79	4.38	0.053
23. BD (1) C 11 - C 16	/272. RY*(14) C 11	4.53	5.82	0.146
23. BD (1) C 11 - C 16	/273. RY*(15) C 11	70.83	3.12	0.423
23. BD (1) C 11 - C 16	/274. RY*(16) C 11	32.97	4.13	0.332
23. BD (1) C 11 - C 16	/278. RY*(3) C 12	1.68	2.05	0.053
23. BD (1) C 11 - C 16	/279. RY*(4) C 12	40.10	2.47	0.283
23. BD (1) C 11 - C 16	/280. RY*(5) C 12	10.09	2.37	0.139
23. BD (1) C 11 - C 16	/281. RY*(6) C 12	24.95	2.65	0.231
23. BD (1) C 11 - C 16	/282. RY*(7) C 12	1.96	2.78	0.066
23. BD (1) C 11 - C 16	/283. RY*(8) C 12	2.58	3.75	0.089
23. BD (1) C 11 - C 16	/284. RY*(9) C 12	3.96	3.83	0.111
23. BD (1) C 11 - C 16	/285. RY*(10) C 12	13.33	4.13	0.211

23. BD (1) C 11 - C 16	/286. RY*(11) C 12	110.47	2.31	0.454
23. BD (1) C 11 - C 16	/287. RY*(12) C 12	24.42	3.40	0.259
23. BD (1) C 11 - C 16	/288. RY*(13) C 12	13.25	2.86	0.175
23. BD (1) C 11 - C 16	/292. RY*(17) C 12	1.48	4.05	0.070
23. BD (1) C 11 - C 16	/295. RY*(3) C 13	1.50	2.46	0.055
23. BD (1) C 11 - C 16	/296. RY*(4) C 13	3.24	2.46	0.080
23. BD (1) C 11 - C 16	/298. RY*(6) C 13	14.45	2.52	0.172
23. BD (1) C 11 - C 16	/299. RY*(7) C 13	25.65	3.22	0.258
23. BD (1) C 11 - C 16	/300. RY*(8) C 13	5.71	3.87	0.134
23. BD (1) C 11 - C 16	/301. RY*(9) C 13	4.01	3.45	0.106
23. BD (1) C 11 - C 16	/302. RY*(10) C 13	3.01	3.61	0.094
23. BD (1) C 11 - C 16	/303. RY*(11) C 13	2.14	2.00	0.059
23. BD (1) C 11 - C 16	/304. RY*(12) C 13	0.90	4.15	0.055
23. BD (1) C 11 - C 16	/305. RY*(13) C 13	3.08	3.60	0.095
23. BD (1) C 11 - C 16	/309. RY*(17) C 13	2.73	3.12	0.083
23. BD (1) C 11 - C 16	/314. RY*(5) C 14	1.49	2.41	0.054
23. BD (1) C 11 - C 16	/316. RY*(7) C 14	1.58	3.09	0.063
23. BD (1) C 11 - C 16	/318. RY*(9) C 14	6.20	3.44	0.131
23. BD (1) C 11 - C 16	/319. RY*(10) C 14	6.46	2.69	0.119
23. BD (1) C 11 - C 16	/320. RY*(11) C 14	1.14	3.46	0.057
23. BD (1) C 11 - C 16	/321. RY*(12) C 14	0.69	4.13	0.048
23. BD (1) C 11 - C 16	/323. RY*(14) C 14	2.61	2.85	0.078
23. BD (1) C 11 - C 16	/325. RY*(16) C 14	0.56	3.81	0.042
23. BD (1) C 11 - C 16	/326. RY*(17) C 14	10.42	3.13	0.163
23. BD (1) C 11 - C 16	/327. RY*(1) C 15	9.85	2.62	0.144
23. BD (1) C 11 - C 16	/328. RY*(2) C 15	1.86	2.61	0.063
23. BD (1) C 11 - C 16	/330. RY*(4) C 15	28.98	2.37	0.236
23. BD (1) C 11 - C 16	/331. RY*(5) C 15	3.30	2.81	0.087

23. BD (1) C 11 - C 16	/332. RY*(6) C 15	0.63	2.36	0.035
23. BD (1) C 11 - C 16	/334. RY*(8) C 15	12.70	2.48	0.160
23. BD (1) C 11 - C 16	/335. RY*(9) C 15	1.78	5.34	0.088
23. BD (1) C 11 - C 16	/336. RY*(10) C 15	1.20	4.63	0.067
23. BD (1) C 11 - C 16	/337. RY*(11) C 15	2.68	3.42	0.086
23. BD (1) C 11 - C 16	/338. RY*(12) C 15	10.59	2.26	0.139
23. BD (1) C 11 - C 16	/339. RY*(13) C 15	8.71	2.94	0.144
23. BD (1) C 11 - C 16	/340. RY*(14) C 15	16.74	4.02	0.233
23. BD (1) C 11 - C 16	/345. RY*(2) C 16	10.49	2.47	0.145
23. BD (1) C 11 - C 16	/346. RY*(3) C 16	1.99	2.26	0.060
23. BD (1) C 11 - C 16	/347. RY*(4) C 16	3.47	2.50	0.084
23. BD (1) C 11 - C 16	/348. RY*(5) C 16	98.52	2.82	0.474
23. BD (1) C 11 - C 16	/349. RY*(6) C 16	0.77	2.55	0.040
23. BD (1) C 11 - C 16	/351. RY*(8) C 16	15.40	2.99	0.193
23. BD (1) C 11 - C 16	/352. RY*(9) C 16	16.90	3.19	0.209
23. BD (1) C 11 - C 16	/353. RY*(10) C 16	0.62	2.59	0.036
23. BD (1) C 11 - C 16	/354. RY*(11) C 16	11.63	4.41	0.204
23. BD (1) C 11 - C 16	/355. RY*(12) C 16	7.15	5.05	0.171
23. BD (1) C 11 - C 16	/356. RY*(13) C 16	2.05	2.70	0.067
23. BD (1) C 11 - C 16	/357. RY*(14) C 16	76.12	3.22	0.445
23. BD (1) C 11 - C 16	/358. RY*(15) C 16	97.54	2.86	0.475
23. BD (1) C 11 - C 16	/361. RY*(1) C 17	4.10	2.53	0.091
23. BD (1) C 11 - C 16	/362. RY*(2) C 17	5.05	2.96	0.110
23. BD (1) C 11 - C 16	/363. RY*(3) C 17	1.10	2.97	0.051
23. BD (1) C 11 - C 16	/365. RY*(5) C 17	71.57	2.44	0.376
23. BD (1) C 11 - C 16	/367. RY*(7) C 17	6.78	3.51	0.139
23. BD (1) C 11 - C 16	/368. RY*(8) C 17	15.67	2.50	0.178
23. BD (1) C 11 - C 16	/370. RY*(10) C 17	96.76	4.64	0.602

23. BD (1) C 11 - C 16	/371. RY*(11) C 17	41.82	3.30	0.334
23. BD (1) C 11 - C 16	/372. RY*(12) C 17	39.07	4.45	0.375
23. BD (1) C 11 - C 16	/373. RY*(13) C 17	192.84	3.15	0.701
23. BD (1) C 11 - C 16	/375. RY*(15) C 17	0.96	7.02	0.074
23. BD (1) C 11 - C 16	/376. RY*(16) C 17	0.51	4.85	0.045
23. BD (1) C 11 - C 16	/379. RY*(3) C 18	1.84	2.99	0.067
23. BD (1) C 11 - C 16	/380. RY*(4) C 18	2.73	3.16	0.084
23. BD (1) C 11 - C 16	/382. RY*(6) C 18	12.09	2.65	0.161
23. BD (1) C 11 - C 16	/383. RY*(7) C 18	112.59	2.25	0.453
23. BD (1) C 11 - C 16	/385. RY*(9) C 18	13.54	3.38	0.192
23. BD (1) C 11 - C 16	/386. RY*(10) C 18	19.41	3.48	0.234
23. BD (1) C 11 - C 16	/387. RY*(11) C 18	42.86	5.44	0.434
23. BD (1) C 11 - C 16	/388. RY*(12) C 18	31.20	3.72	0.306
23. BD (1) C 11 - C 16	/389. RY*(13) C 18	3.27	4.34	0.107
23. BD (1) C 11 - C 16	/392. RY*(16) C 18	126.37	1.89	0.440
23. BD (1) C 11 - C 16	/395. RY*(2) C 19	92.24	2.31	0.415
23. BD (1) C 11 - C 16	/396. RY*(3) C 19	3.98	2.97	0.098
23. BD (1) C 11 - C 16	/397. RY*(4) C 19	0.89	3.00	0.046
23. BD (1) C 11 - C 16	/398. RY*(5) C 19	0.72	2.31	0.037
23. BD (1) C 11 - C 16	/402. RY*(9) C 19	2.06	2.29	0.062
23. BD (1) C 11 - C 16	/403. RY*(10) C 19	1.10	2.02	0.042
23. BD (1) C 11 - C 16	/405. RY*(12) C 19	5.57	2.44	0.105
23. BD (1) C 11 - C 16	/408. RY*(15) C 19	0.86	2.73	0.044
23. BD (1) C 11 - C 16	/409. RY*(16) C 19	0.85	4.32	0.054
23. BD (1) C 11 - C 16	/413. RY*(3) C 20	4.50	2.03	0.086
23. BD (1) C 11 - C 16	/414. RY*(4) C 20	0.93	2.28	0.041
23. BD (1) C 11 - C 16	/415. RY*(5) C 20	1.32	2.52	0.052
23. BD (1) C 11 - C 16	/417. RY*(7) C 20	11.36	3.29	0.174

23. BD (1) C 11 - C 16	/420. RY*(10) C 20	0.57	4.43	0.045
23. BD (1) C 11 - C 16	/421. RY*(11) C 20	1.71	3.09	0.065
23. BD (1) C 11 - C 16	/426. RY*(16) C 20	1.49	1.94	0.048
23. BD (1) C 11 - C 16	/427. RY*(17) C 20	2.96	3.49	0.091
23. BD (1) C 11 - C 16	/431. RY*(4) C 21	1.33	2.65	0.053
23. BD (1) C 11 - C 16	/432. RY*(5) C 21	0.66	2.26	0.035
23. BD (1) C 11 - C 16	/433. RY*(6) C 21	6.30	2.60	0.115
23. BD (1) C 11 - C 16	/435. RY*(8) C 21	0.68	3.95	0.046
23. BD (1) C 11 - C 16	/437. RY*(10) C 21	2.24	3.01	0.074
23. BD (1) C 11 - C 16	/438. RY*(11) C 21	5.03	1.97	0.089
23. BD (1) C 11 - C 16	/439. RY*(12) C 21	0.63	4.18	0.046
23. BD (1) C 11 - C 16	/440. RY*(13) C 21	1.45	3.59	0.065
23. BD (1) C 11 - C 16	/446. RY*(2) C 22	0.96	2.76	0.046
23. BD (1) C 11 - C 16	/447. RY*(3) C 22	2.36	2.01	0.062
23. BD (1) C 11 - C 16	/449. RY*(5) C 22	6.92	2.91	0.128
23. BD (1) C 11 - C 16	/450. RY*(6) C 22	5.65	2.52	0.107
23. BD (1) C 11 - C 16	/451. RY*(7) C 22	19.15	2.82	0.209
23. BD (1) C 11 - C 16	/452. RY*(8) C 22	1.13	3.68	0.058
23. BD (1) C 11 - C 16	/454. RY*(10) C 22	4.85	3.89	0.124
23. BD (1) C 11 - C 16	/455. RY*(11) C 22	2.71	2.77	0.078
23. BD (1) C 11 - C 16	/457. RY*(13) C 22	4.64	3.04	0.107
23. BD (1) C 11 - C 16	/458. RY*(14) C 22	7.08	2.18	0.112
23. BD (1) C 11 - C 16	/461. RY*(17) C 22	1.06	3.72	0.057
23. BD (1) C 11 - C 16	/462. RY*(1) C 23	668.00	1.42	0.874
23. BD (1) C 11 - C 16	/463. RY*(2) C 23	151.87	1.98	0.493
23. BD (1) C 11 - C 16	/464. RY*(3) C 23	50.56	2.30	0.307
23. BD (1) C 11 - C 16	/465. RY*(4) C 23	388.11	2.24	0.838
23. BD (1) C 11 - C 16	/466. RY*(5) C 23	1365.22	0.93	1.016

23. BD (1) C 11 - C 16	/467. RY*(6) C 23	11.37	3.06	0.168
23. BD (1) C 11 - C 16	/469. RY*(8) C 23	531.88	2.30	0.995
23. BD (1) C 11 - C 16	/471. RY*(10) C 23	715.32	2.09	1.099
23. BD (1) C 11 - C 16	/473. RY*(12) C 23	7.48	3.36	0.143
23. BD (1) C 11 - C 16	/474. RY*(13) C 23	28.10	4.27	0.311
23. BD (1) C 11 - C 16	/475. RY*(14) C 23	4.23	23.81	0.285
23. BD (1) C 11 - C 16	/476. RY*(15) C 23	280.58	2.53	0.759
23. BD (1) C 11 - C 16	/477. RY*(16) C 23	766.82	2.51	1.249
23. BD (1) C 11 - C 16	/478. RY*(17) C 23	5.52	3.87	0.131
23. BD (1) C 11 - C 16	/479. RY*(1) H 24	20.95	2.15	0.191
23. BD (1) C 11 - C 16	/480. RY*(2) H 24	0.78	3.81	0.049
23. BD (1) C 11 - C 16	/481. RY*(3) H 24	1.34	3.14	0.058
23. BD (1) C 11 - C 16	/482. RY*(4) H 24	1.54	3.65	0.068
23. BD (1) C 11 - C 16	/483. RY*(5) H 24	11.42	4.09	0.194
23. BD (1) C 11 - C 16	/484. RY*(1) H 25	1.38	2.39	0.052
23. BD (1) C 11 - C 16	/485. RY*(2) H 25	1.49	3.51	0.065
23. BD (1) C 11 - C 16	/488. RY*(5) H 25	0.64	4.02	0.045
23. BD (1) C 11 - C 16	/491. RY*(3) H 26	1.21	3.10	0.055
23. BD (1) C 11 - C 16	/492. RY*(4) H 26	13.93	3.43	0.197
23. BD (1) C 11 - C 16	/494. RY*(1) H 27	0.81	2.23	0.038
23. BD (1) C 11 - C 16	/496. RY*(3) H 27	23.02	3.02	0.237
23. BD (1) C 11 - C 16	/497. RY*(4) H 27	1171.07	1.62	1.237
23. BD (1) C 11 - C 16	/498. RY*(5) H 27	7.16	3.96	0.152
23. BD (1) C 11 - C 16	/499. RY*(1) H 28	10.22	2.40	0.141
23. BD (1) C 11 - C 16	/500. RY*(2) H 28	9.46	3.43	0.162
23. BD (1) C 11 - C 16	/502. RY*(4) H 28	41.80	3.26	0.332
23. BD (1) C 11 - C 16	/504. RY*(1) H 29	2.78	2.15	0.070
23. BD (1) C 11 - C 16	/505. RY*(2) H 29	2.48	3.12	0.079

23. BD (1) C 11 - C 16	/506. RY*(3) H 29	69.58	3.81	0.463
23. BD (1) C 11 - C 16	/507. RY*(4) H 29	1.65	4.27	0.075
23. BD (1) C 11 - C 16	/508. RY*(5) H 29	0.95	3.63	0.053
23. BD (1) C 11 - C 16	/509. RY*(1) H 30	4.31	2.42	0.092
23. BD (1) C 11 - C 16	/511. RY*(3) H 30	5.29	3.11	0.115
23. BD (1) C 11 - C 16	/516. RY*(3) H 31	0.89	3.10	0.047
23. BD (1) C 11 - C 16	/517. RY*(4) H 31	1.11	3.49	0.056
23. BD (1) C 11 - C 16	/528. RY*(1) H 34	9.43	2.91	0.149
23. BD (1) C 11 - C 16	/529. RY*(2) H 34	637.51	1.70	0.937
23. BD (1) C 11 - C 16	/530. RY*(3) H 34	35.01	3.25	0.303
23. BD (1) C 11 - C 16	/531. RY*(4) H 34	5.31	3.32	0.119
23. BD (1) C 11 - C 16	/532. RY*(5) H 34	1.45	4.09	0.069
23. BD (1) C 11 - C 16	/533. RY*(1) H 35	120.33	2.24	0.467
23. BD (1) C 11 - C 16	/534. RY*(2) H 35	337.22	2.40	0.809
23. BD (1) C 11 - C 16	/535. RY*(3) H 35	24.12	3.25	0.252
23. BD (1) C 11 - C 16	/536. RY*(4) H 35	10.93	3.28	0.170
23. BD (1) C 11 - C 16	/537. RY*(5) H 35	5.86	4.20	0.141
23. BD (1) C 11 - C 16	/540. RY*(3) H 36	0.73	1.76	0.032
23. BD (1) C 11 - C 16	/542. RY*(5) H 36	70.44	3.27	0.432
23. BD (1) C 11 - C 16	/544. BD*(1) S 1 - O 3	0.68	1.80	0.032
23. BD (1) C 11 - C 16	/545. BD*(1) S 1 - N 6	1.30	1.64	0.044
23. BD (1) C 11 - C 16	/549. BD*(1) O 5 - C 10	1.45	1.87	0.047
23. BD (1) C 11 - C 16	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.68	1.86	0.032
23. BD (1) C 11 - C 16	/563. BD*(1) C 11 - C 12	2.33	2.05	0.062
23. BD (1) C 11 - C 16	/564. BD*(2) C 11 - C 12	0.72	1.52	0.032
23. BD (1) C 11 - C 16	/567. BD*(1) C 12 - H 25	1.51	1.94	0.049
23. BD (1) C 11 - C 16	/571. BD*(1) C 14 - C 15	0.90	2.07	0.039
23. BD (1) C 11 - C 16	/572. BD*(1) C 14 - H 27	13.09	1.90	0.141

23. BD (1) C 11 - C 16	/573. BD*(1) C 15 - C 16	1808.01	0.79	1.069
23. BD (1) C 11 - C 16	/574. BD*(2) C 15 - C 16	1.25	1.53	0.043
23. BD (1) C 11 - C 16	/576. BD*(1) C 18 - C 22	14.31	2.03	0.152
23. BD (1) C 11 - C 16	/577. BD*(1) C 19 - C 20	0.58	2.07	0.031
23. BD (1) C 11 - C 16	/578. BD*(2) C 19 - C 20	186.30	1.26	0.465
23. BD (1) C 11 - C 16	/579. BD*(1) C 19 - H 29	973.77	0.97	0.869
23. BD (1) C 11 - C 16	/580. BD*(1) C 20 - C 21	4.22	2.10	0.084
23. BD (1) C 11 - C 16	/581. BD*(1) C 20 - H 30	4.70	1.95	0.086
23. BD (1) C 11 - C 16	/582. BD*(1) C 21 - C 22	4.50	2.10	0.087
23. BD (1) C 11 - C 16	/583. BD*(2) C 21 - C 22	35.82	1.48	0.220
23. BD (1) C 11 - C 16	/586. BD*(1) C 23 - H 34	39.09	4.55	0.379
23. BD (1) C 11 - C 16	/587. BD*(1) C 23 - H 35	39.60	4.83	0.392
23. BD (1) C 11 - C 16	/588. BD*(1) C 23 - H 36	99.47	4.20	0.579
24. BD (1) C 12 - C 13	/ 87. RY*(1) S 1	15.17	2.86	0.188
24. BD (1) C 12 - C 13	/ 88. RY*(2) S 1	15.38	2.78	0.186
24. BD (1) C 12 - C 13	/ 89. RY*(3) S 1	3.17	2.95	0.087
24. BD (1) C 12 - C 13	/ 90. RY*(4) S 1	3.59	2.88	0.091
24. BD (1) C 12 - C 13	/ 92. RY*(6) S 1	15.99	3.69	0.217
24. BD (1) C 12 - C 13	/ 95. RY*(9) S 1	23.46	3.09	0.241
24. BD (1) C 12 - C 13	/ 96. RY*(10) S 1	19.68	2.97	0.217
24. BD (1) C 12 - C 13	/ 97. RY*(11) S 1	2.39	3.39	0.081
24. BD (1) C 12 - C 13	/ 98. RY*(12) S 1	640.56	2.43	1.120
24. BD (1) C 12 - C 13	/ 99. RY*(13) S 1	2444.29	1.16	1.509
24. BD (1) C 12 - C 13	/100. RY*(14) S 1	148.46	2.77	0.575
24. BD (1) C 12 - C 13	/101. RY*(15) S 1	426.97	2.44	0.915
24. BD (1) C 12 - C 13	/103. RY*(17) S 1	2.21	16.74	0.172
24. BD (1) C 12 - C 13	/106. RY*(20) S 1	0.93	18.86	0.119
24. BD (1) C 12 - C 13	/108. RY*(1) O 2	6.68	3.18	0.131

24. BD (1) C 12 - C 13	/109. RY*(2) O 2	8.55	2.88	0.141
24. BD (1) C 12 - C 13	/110. RY*(3) O 2	23.73	3.03	0.240
24. BD (1) C 12 - C 13	/111. RY*(4) O 2	0.78	2.70	0.041
24. BD (1) C 12 - C 13	/112. RY*(5) O 2	250.02	2.79	0.749
24. BD (1) C 12 - C 13	/113. RY*(6) O 2	6.22	3.02	0.123
24. BD (1) C 12 - C 13	/114. RY*(7) O 2	104.08	3.71	0.558
24. BD (1) C 12 - C 13	/115. RY*(8) O 2	8.53	3.48	0.155
24. BD (1) C 12 - C 13	/116. RY*(9) O 2	5.19	4.94	0.144
24. BD (1) C 12 - C 13	/117. RY*(10) O 2	5.95	4.91	0.153
24. BD (1) C 12 - C 13	/121. RY*(14) O 2	0.82	4.82	0.056
24. BD (1) C 12 - C 13	/122. RY*(15) O 2	5.12	4.76	0.140
24. BD (1) C 12 - C 13	/123. RY*(16) O 2	1.80	5.22	0.087
24. BD (1) C 12 - C 13	/124. RY*(17) O 2	7.70	6.82	0.206
24. BD (1) C 12 - C 13	/125. RY*(1) O 3	2.77	3.25	0.085
24. BD (1) C 12 - C 13	/127. RY*(3) O 3	53.37	2.98	0.358
24. BD (1) C 12 - C 13	/128. RY*(4) O 3	7.12	2.69	0.124
24. BD (1) C 12 - C 13	/129. RY*(5) O 3	23.66	3.15	0.245
24. BD (1) C 12 - C 13	/130. RY*(6) O 3	236.77	2.69	0.716
24. BD (1) C 12 - C 13	/131. RY*(7) O 3	34.52	3.93	0.331
24. BD (1) C 12 - C 13	/132. RY*(8) O 3	2.45	3.19	0.079
24. BD (1) C 12 - C 13	/133. RY*(9) O 3	15.06	5.01	0.246
24. BD (1) C 12 - C 13	/135. RY*(11) O 3	2.32	7.07	0.115
24. BD (1) C 12 - C 13	/136. RY*(12) O 3	0.63	6.77	0.059
24. BD (1) C 12 - C 13	/137. RY*(13) O 3	0.62	7.01	0.059
24. BD (1) C 12 - C 13	/139. RY*(15) O 3	1.46	4.73	0.075
24. BD (1) C 12 - C 13	/140. RY*(16) O 3	8.28	5.15	0.185
24. BD (1) C 12 - C 13	/141. RY*(17) O 3	0.80	51.56	0.182
24. BD (1) C 12 - C 13	/142. RY*(1) O 4	729.32	1.75	1.012

24. BD (1) C 12 - C 13	/145. RY*(4) O 4	2.36	3.36	0.080
24. BD (1) C 12 - C 13	/146. RY*(5) O 4	0.61	3.80	0.043
24. BD (1) C 12 - C 13	/147. RY*(6) O 4	9.45	3.38	0.160
24. BD (1) C 12 - C 13	/148. RY*(7) O 4	1.06	4.27	0.060
24. BD (1) C 12 - C 13	/158. RY*(1) O 5	0.78	2.61	0.040
24. BD (1) C 12 - C 13	/159. RY*(2) O 5	1.37	2.96	0.057
24. BD (1) C 12 - C 13	/160. RY*(3) O 5	19.25	2.80	0.208
24. BD (1) C 12 - C 13	/162. RY*(5) O 5	3.21	3.61	0.097
24. BD (1) C 12 - C 13	/163. RY*(6) O 5	2.65	3.38	0.085
24. BD (1) C 12 - C 13	/164. RY*(7) O 5	6.76	3.67	0.141
24. BD (1) C 12 - C 13	/168. RY*(11) O 5	1.53	6.86	0.092
24. BD (1) C 12 - C 13	/171. RY*(14) O 5	0.84	5.00	0.058
24. BD (1) C 12 - C 13	/174. RY*(1) N 6	0.60	2.76	0.037
24. BD (1) C 12 - C 13	/175. RY*(2) N 6	1.59	2.92	0.061
24. BD (1) C 12 - C 13	/176. RY*(3) N 6	5.84	3.06	0.120
24. BD (1) C 12 - C 13	/177. RY*(4) N 6	9.53	2.93	0.150
24. BD (1) C 12 - C 13	/178. RY*(5) N 6	0.92	2.88	0.046
24. BD (1) C 12 - C 13	/180. RY*(7) N 6	20.79	3.16	0.230
24. BD (1) C 12 - C 13	/181. RY*(8) N 6	1.21	3.40	0.058
24. BD (1) C 12 - C 13	/182. RY*(9) N 6	0.52	4.50	0.043
24. BD (1) C 12 - C 13	/183. RY*(10) N 6	2.73	4.04	0.094
24. BD (1) C 12 - C 13	/185. RY*(12) N 6	0.68	4.45	0.049
24. BD (1) C 12 - C 13	/186. RY*(13) N 6	6.60	5.20	0.166
24. BD (1) C 12 - C 13	/188. RY*(15) N 6	12.73	6.00	0.248
24. BD (1) C 12 - C 13	/190. RY*(17) N 6	182.25	33.59	2.220
24. BD (1) C 12 - C 13	/191. RY*(1) N 7	88.14	2.65	0.433
24. BD (1) C 12 - C 13	/192. RY*(2) N 7	2.72	2.80	0.078
24. BD (1) C 12 - C 13	/193. RY*(3) N 7	1.16	2.84	0.052

24. BD (1) C 12 - C 13	/195. RY*(5) N 7	169.72	2.60	0.596
24. BD (1) C 12 - C 13	/196. RY*(6) N 7	3.89	3.29	0.101
24. BD (1) C 12 - C 13	/197. RY*(7) N 7	9.35	3.93	0.172
24. BD (1) C 12 - C 13	/198. RY*(8) N 7	73.17	3.61	0.461
24. BD (1) C 12 - C 13	/199. RY*(9) N 7	135.39	4.39	0.692
24. BD (1) C 12 - C 13	/200. RY*(10) N 7	269.40	3.09	0.818
24. BD (1) C 12 - C 13	/201. RY*(11) N 7	1.61	5.07	0.081
24. BD (1) C 12 - C 13	/202. RY*(12) N 7	3.96	4.25	0.116
24. BD (1) C 12 - C 13	/204. RY*(14) N 7	11.96	4.82	0.215
24. BD (1) C 12 - C 13	/205. RY*(15) N 7	0.68	6.49	0.059
24. BD (1) C 12 - C 13	/208. RY*(1) N 8	68.81	2.68	0.385
24. BD (1) C 12 - C 13	/211. RY*(4) N 8	1.38	4.18	0.068
24. BD (1) C 12 - C 13	/212. RY*(5) N 8	32.71	3.59	0.307
24. BD (1) C 12 - C 13	/213. RY*(6) N 8	2.07	3.38	0.075
24. BD (1) C 12 - C 13	/214. RY*(7) N 8	4.30	3.31	0.107
24. BD (1) C 12 - C 13	/215. RY*(8) N 8	3.46	3.55	0.099
24. BD (1) C 12 - C 13	/216. RY*(9) N 8	35.38	4.90	0.373
24. BD (1) C 12 - C 13	/217. RY*(10) N 8	16.25	2.92	0.196
24. BD (1) C 12 - C 13	/221. RY*(14) N 8	1.01	4.33	0.059
24. BD (1) C 12 - C 13	/225. RY*(1) C 9	1.55	3.32	0.064
24. BD (1) C 12 - C 13	/226. RY*(2) C 9	11.06	2.97	0.162
24. BD (1) C 12 - C 13	/227. RY*(3) C 9	6.08	3.06	0.122
24. BD (1) C 12 - C 13	/228. RY*(4) C 9	11.38	3.31	0.174
24. BD (1) C 12 - C 13	/229. RY*(5) C 9	17.18	3.93	0.233
24. BD (1) C 12 - C 13	/230. RY*(6) C 9	50.21	3.16	0.357
24. BD (1) C 12 - C 13	/231. RY*(7) C 9	363.52	3.01	0.939
24. BD (1) C 12 - C 13	/232. RY*(8) C 9	198.17	3.33	0.729
24. BD (1) C 12 - C 13	/233. RY*(9) C 9	272.51	4.24	0.964

24. BD (1) C 12 - C 13	/234. RY*(10) C 9	375.16	3.21	0.985
24. BD (1) C 12 - C 13	/235. RY*(11) C 9	1669.08	1.64	1.486
24. BD (1) C 12 - C 13	/236. RY*(12) C 9	33.17	4.10	0.331
24. BD (1) C 12 - C 13	/237. RY*(13) C 9	887.97	3.65	1.615
24. BD (1) C 12 - C 13	/238. RY*(14) C 9	31.04	4.20	0.324
24. BD (1) C 12 - C 13	/239. RY*(15) C 9	25.85	4.48	0.305
24. BD (1) C 12 - C 13	/240. RY*(16) C 9	8.13	5.34	0.187
24. BD (1) C 12 - C 13	/241. RY*(17) C 9	22.46	21.50	0.623
24. BD (1) C 12 - C 13	/242. RY*(1) C 10	153.11	2.92	0.599
24. BD (1) C 12 - C 13	/244. RY*(3) C 10	8.14	3.63	0.154
24. BD (1) C 12 - C 13	/245. RY*(4) C 10	30.76	3.59	0.298
24. BD (1) C 12 - C 13	/246. RY*(5) C 10	9.38	3.09	0.153
24. BD (1) C 12 - C 13	/247. RY*(6) C 10	0.82	3.86	0.050
24. BD (1) C 12 - C 13	/249. RY*(8) C 10	1.36	3.78	0.064
24. BD (1) C 12 - C 13	/250. RY*(9) C 10	9.84	3.78	0.173
24. BD (1) C 12 - C 13	/251. RY*(10) C 10	27.54	3.36	0.273
24. BD (1) C 12 - C 13	/252. RY*(11) C 10	482.16	2.35	0.956
24. BD (1) C 12 - C 13	/253. RY*(12) C 10	29.59	3.57	0.292
24. BD (1) C 12 - C 13	/255. RY*(14) C 10	9.98	3.70	0.172
24. BD (1) C 12 - C 13	/256. RY*(15) C 10	31.56	5.07	0.359
24. BD (1) C 12 - C 13	/257. RY*(16) C 10	1.42	19.40	0.149
24. BD (1) C 12 - C 13	/258. RY*(17) C 10	3.56	4.74	0.117
24. BD (1) C 12 - C 13	/260. RY*(2) C 11	20.32	3.33	0.233
24. BD (1) C 12 - C 13	/261. RY*(3) C 11	3.46	2.87	0.089
24. BD (1) C 12 - C 13	/262. RY*(4) C 11	2.08	3.14	0.072
24. BD (1) C 12 - C 13	/263. RY*(5) C 11	18.37	3.35	0.223
24. BD (1) C 12 - C 13	/264. RY*(6) C 11	4.73	3.27	0.112
24. BD (1) C 12 - C 13	/265. RY*(7) C 11	39.09	3.67	0.340

24. BD (1) C 12 - C 13	/266. RY*(8) C 11	10.81	3.45	0.173
24. BD (1) C 12 - C 13	/267. RY*(9) C 11	173.50	3.27	0.676
24. BD (1) C 12 - C 13	/268. RY*(10) C 11	108.89	3.96	0.589
24. BD (1) C 12 - C 13	/270. RY*(12) C 11	312.30	3.03	0.872
24. BD (1) C 12 - C 13	/271. RY*(13) C 11	2.52	4.94	0.100
24. BD (1) C 12 - C 13	/272. RY*(14) C 11	4.26	6.38	0.148
24. BD (1) C 12 - C 13	/273. RY*(15) C 11	105.51	3.68	0.559
24. BD (1) C 12 - C 13	/274. RY*(16) C 11	50.29	4.69	0.436
24. BD (1) C 12 - C 13	/276. RY*(1) C 12	0.69	3.18	0.042
24. BD (1) C 12 - C 13	/277. RY*(2) C 12	0.78	3.14	0.044
24. BD (1) C 12 - C 13	/278. RY*(3) C 12	3.00	2.61	0.079
24. BD (1) C 12 - C 13	/279. RY*(4) C 12	51.88	3.03	0.355
24. BD (1) C 12 - C 13	/280. RY*(5) C 12	15.10	2.92	0.188
24. BD (1) C 12 - C 13	/281. RY*(6) C 12	32.77	3.21	0.291
24. BD (1) C 12 - C 13	/282. RY*(7) C 12	2.45	3.34	0.081
24. BD (1) C 12 - C 13	/283. RY*(8) C 12	1.30	4.31	0.067
24. BD (1) C 12 - C 13	/284. RY*(9) C 12	10.31	4.39	0.191
24. BD (1) C 12 - C 13	/285. RY*(10) C 12	21.60	4.69	0.285
24. BD (1) C 12 - C 13	/286. RY*(11) C 12	156.98	2.86	0.602
24. BD (1) C 12 - C 13	/287. RY*(12) C 12	35.23	3.96	0.335
24. BD (1) C 12 - C 13	/288. RY*(13) C 12	19.65	3.42	0.232
24. BD (1) C 12 - C 13	/292. RY*(17) C 12	1.48	4.60	0.074
24. BD (1) C 12 - C 13	/295. RY*(3) C 13	1.99	3.01	0.069
24. BD (1) C 12 - C 13	/296. RY*(4) C 13	3.90	3.02	0.097
24. BD (1) C 12 - C 13	/298. RY*(6) C 13	20.65	3.08	0.226
24. BD (1) C 12 - C 13	/299. RY*(7) C 13	42.04	3.77	0.357
24. BD (1) C 12 - C 13	/300. RY*(8) C 13	6.45	4.42	0.152
24. BD (1) C 12 - C 13	/301. RY*(9) C 13	6.75	4.01	0.148

24. BD (1) C 12 - C 13	/302. RY*(10) C 13	4.92	4.17	0.128
24. BD (1) C 12 - C 13	/303. RY*(11) C 13	2.88	2.56	0.077
24. BD (1) C 12 - C 13	/304. RY*(12) C 13	1.42	4.71	0.073
24. BD (1) C 12 - C 13	/305. RY*(13) C 13	5.62	4.16	0.137
24. BD (1) C 12 - C 13	/308. RY*(16) C 13	0.85	23.71	0.128
24. BD (1) C 12 - C 13	/309. RY*(17) C 13	4.19	3.68	0.111
24. BD (1) C 12 - C 13	/311. RY*(2) C 14	0.95	3.34	0.051
24. BD (1) C 12 - C 13	/314. RY*(5) C 14	1.91	2.97	0.067
24. BD (1) C 12 - C 13	/316. RY*(7) C 14	2.05	3.65	0.077
24. BD (1) C 12 - C 13	/317. RY*(8) C 14	0.57	4.81	0.047
24. BD (1) C 12 - C 13	/318. RY*(9) C 14	10.24	4.00	0.182
24. BD (1) C 12 - C 13	/319. RY*(10) C 14	9.55	3.25	0.158
24. BD (1) C 12 - C 13	/320. RY*(11) C 14	1.58	4.01	0.071
24. BD (1) C 12 - C 13	/321. RY*(12) C 14	1.02	4.69	0.062
24. BD (1) C 12 - C 13	/323. RY*(14) C 14	3.62	3.40	0.100
24. BD (1) C 12 - C 13	/325. RY*(16) C 14	1.14	4.37	0.063
24. BD (1) C 12 - C 13	/326. RY*(17) C 14	14.78	3.69	0.209
24. BD (1) C 12 - C 13	/327. RY*(1) C 15	7.65	3.18	0.140
24. BD (1) C 12 - C 13	/330. RY*(4) C 15	44.31	2.93	0.323
24. BD (1) C 12 - C 13	/331. RY*(5) C 15	5.59	3.37	0.123
24. BD (1) C 12 - C 13	/332. RY*(6) C 15	1.35	2.92	0.056
24. BD (1) C 12 - C 13	/334. RY*(8) C 15	20.04	3.04	0.221
24. BD (1) C 12 - C 13	/335. RY*(9) C 15	3.07	5.90	0.121
24. BD (1) C 12 - C 13	/336. RY*(10) C 15	0.79	5.19	0.058
24. BD (1) C 12 - C 13	/337. RY*(11) C 15	3.55	3.98	0.107
24. BD (1) C 12 - C 13	/338. RY*(12) C 15	12.89	2.82	0.171
24. BD (1) C 12 - C 13	/339. RY*(13) C 15	11.83	3.49	0.182
24. BD (1) C 12 - C 13	/340. RY*(14) C 15	23.35	4.57	0.293

24. BD (1) C 12 - C 13	/345. RY*(2) C 16	12.91	3.03	0.177
24. BD (1) C 12 - C 13	/346. RY*(3) C 16	3.34	2.82	0.087
24. BD (1) C 12 - C 13	/347. RY*(4) C 16	3.67	3.06	0.095
24. BD (1) C 12 - C 13	/348. RY*(5) C 16	141.46	3.38	0.620
24. BD (1) C 12 - C 13	/349. RY*(6) C 16	1.33	3.11	0.058
24. BD (1) C 12 - C 13	/351. RY*(8) C 16	22.87	3.55	0.256
24. BD (1) C 12 - C 13	/352. RY*(9) C 16	25.56	3.75	0.278
24. BD (1) C 12 - C 13	/353. RY*(10) C 16	1.62	3.14	0.064
24. BD (1) C 12 - C 13	/354. RY*(11) C 16	15.88	4.97	0.252
24. BD (1) C 12 - C 13	/355. RY*(12) C 16	9.84	5.60	0.211
24. BD (1) C 12 - C 13	/356. RY*(13) C 16	3.72	3.25	0.099
24. BD (1) C 12 - C 13	/357. RY*(14) C 16	111.81	3.78	0.583
24. BD (1) C 12 - C 13	/358. RY*(15) C 16	139.94	3.41	0.620
24. BD (1) C 12 - C 13	/360. RY*(17) C 16	0.62	24.02	0.110
24. BD (1) C 12 - C 13	/361. RY*(1) C 17	5.55	3.09	0.117
24. BD (1) C 12 - C 13	/362. RY*(2) C 17	7.29	3.52	0.144
24. BD (1) C 12 - C 13	/363. RY*(3) C 17	1.51	3.53	0.065
24. BD (1) C 12 - C 13	/365. RY*(5) C 17	104.07	3.00	0.501
24. BD (1) C 12 - C 13	/367. RY*(7) C 17	10.48	4.07	0.185
24. BD (1) C 12 - C 13	/368. RY*(8) C 17	22.62	3.05	0.236
24. BD (1) C 12 - C 13	/370. RY*(10) C 17	152.29	5.19	0.798
24. BD (1) C 12 - C 13	/371. RY*(11) C 17	60.40	3.85	0.433
24. BD (1) C 12 - C 13	/372. RY*(12) C 17	59.16	5.01	0.488
24. BD (1) C 12 - C 13	/373. RY*(13) C 17	286.04	3.70	0.923
24. BD (1) C 12 - C 13	/375. RY*(15) C 17	1.40	7.57	0.092
24. BD (1) C 12 - C 13	/376. RY*(16) C 17	0.88	5.41	0.062
24. BD (1) C 12 - C 13	/379. RY*(3) C 18	2.66	3.55	0.087
24. BD (1) C 12 - C 13	/380. RY*(4) C 18	4.09	3.72	0.111

24. BD (1) C 12 - C 13	/382. RY*(6) C 18	17.28	3.21	0.211
24. BD (1) C 12 - C 13	/383. RY*(7) C 18	156.83	2.81	0.595
24. BD (1) C 12 - C 13	/385. RY*(9) C 18	20.16	3.93	0.253
24. BD (1) C 12 - C 13	/386. RY*(10) C 18	29.00	4.04	0.307
24. BD (1) C 12 - C 13	/387. RY*(11) C 18	67.65	5.99	0.571
24. BD (1) C 12 - C 13	/388. RY*(12) C 18	47.05	4.27	0.402
24. BD (1) C 12 - C 13	/389. RY*(13) C 18	5.03	4.89	0.141
24. BD (1) C 12 - C 13	/390. RY*(14) C 18	0.61	4.48	0.047
24. BD (1) C 12 - C 13	/392. RY*(16) C 18	169.42	2.45	0.578
24. BD (1) C 12 - C 13	/394. RY*(1) C 19	0.57	3.12	0.038
24. BD (1) C 12 - C 13	/395. RY*(2) C 19	129.02	2.87	0.545
24. BD (1) C 12 - C 13	/396. RY*(3) C 19	5.80	3.53	0.128
24. BD (1) C 12 - C 13	/397. RY*(4) C 19	1.29	3.55	0.061
24. BD (1) C 12 - C 13	/398. RY*(5) C 19	1.00	2.86	0.048
24. BD (1) C 12 - C 13	/400. RY*(7) C 19	0.58	4.91	0.048
24. BD (1) C 12 - C 13	/402. RY*(9) C 19	2.90	2.85	0.082
24. BD (1) C 12 - C 13	/403. RY*(10) C 19	1.49	2.58	0.056
24. BD (1) C 12 - C 13	/405. RY*(12) C 19	7.83	3.00	0.138
24. BD (1) C 12 - C 13	/407. RY*(14) C 19	0.72	4.49	0.051
24. BD (1) C 12 - C 13	/408. RY*(15) C 19	1.24	3.29	0.057
24. BD (1) C 12 - C 13	/409. RY*(16) C 19	1.31	4.88	0.072
24. BD (1) C 12 - C 13	/413. RY*(3) C 20	6.12	2.59	0.113
24. BD (1) C 12 - C 13	/414. RY*(4) C 20	1.29	2.84	0.054
24. BD (1) C 12 - C 13	/415. RY*(5) C 20	1.86	3.08	0.068
24. BD (1) C 12 - C 13	/417. RY*(7) C 20	16.82	3.84	0.228
24. BD (1) C 12 - C 13	/418. RY*(8) C 20	0.60	5.11	0.050
24. BD (1) C 12 - C 13	/420. RY*(10) C 20	0.88	4.99	0.059
24. BD (1) C 12 - C 13	/421. RY*(11) C 20	2.51	3.65	0.086

24. BD (1) C 12 - C 13	/426. RY*(16) C 20	2.02	2.49	0.064
24. BD (1) C 12 - C 13	/427. RY*(17) C 20	4.43	4.05	0.120
24. BD (1) C 12 - C 13	/428. RY*(1) C 21	0.51	3.11	0.035
24. BD (1) C 12 - C 13	/431. RY*(4) C 21	1.88	3.20	0.070
24. BD (1) C 12 - C 13	/432. RY*(5) C 21	0.92	2.82	0.046
24. BD (1) C 12 - C 13	/433. RY*(6) C 21	9.01	3.16	0.151
24. BD (1) C 12 - C 13	/435. RY*(8) C 21	1.03	4.51	0.061
24. BD (1) C 12 - C 13	/437. RY*(10) C 21	3.27	3.57	0.097
24. BD (1) C 12 - C 13	/438. RY*(11) C 21	6.80	2.52	0.118
24. BD (1) C 12 - C 13	/439. RY*(12) C 21	0.96	4.74	0.060
24. BD (1) C 12 - C 13	/440. RY*(13) C 21	2.18	4.15	0.085
24. BD (1) C 12 - C 13	/441. RY*(14) C 21	0.56	4.08	0.043
24. BD (1) C 12 - C 13	/446. RY*(2) C 22	1.35	3.32	0.060
24. BD (1) C 12 - C 13	/447. RY*(3) C 22	3.17	2.57	0.081
24. BD (1) C 12 - C 13	/448. RY*(4) C 22	0.69	3.00	0.041
24. BD (1) C 12 - C 13	/449. RY*(5) C 22	10.04	3.47	0.168
24. BD (1) C 12 - C 13	/450. RY*(6) C 22	7.91	3.07	0.140
24. BD (1) C 12 - C 13	/451. RY*(7) C 22	27.76	3.38	0.275
24. BD (1) C 12 - C 13	/452. RY*(8) C 22	1.72	4.24	0.077
24. BD (1) C 12 - C 13	/453. RY*(9) C 22	0.52	6.75	0.053
24. BD (1) C 12 - C 13	/454. RY*(10) C 22	7.33	4.45	0.162
24. BD (1) C 12 - C 13	/455. RY*(11) C 22	3.94	3.32	0.103
24. BD (1) C 12 - C 13	/457. RY*(13) C 22	6.82	3.60	0.140
24. BD (1) C 12 - C 13	/458. RY*(14) C 22	9.72	2.73	0.146
24. BD (1) C 12 - C 13	/461. RY*(17) C 22	1.60	4.27	0.074
24. BD (1) C 12 - C 13	/462. RY*(1) C 23	828.31	1.97	1.146
24. BD (1) C 12 - C 13	/463. RY*(2) C 23	207.89	2.53	0.651
24. BD (1) C 12 - C 13	/464. RY*(3) C 23	69.27	2.86	0.399

24. BD (1) C 12 - C 13	/465. RY*(4) C 23	544.23	2.79	1.106
24. BD (1) C 12 - C 13	/466. RY*(5) C 23	1473.37	1.49	1.330
24. BD (1) C 12 - C 13	/467. RY*(6) C 23	18.31	3.62	0.231
24. BD (1) C 12 - C 13	/468. RY*(7) C 23	13878.46	0.44	2.207
24. BD (1) C 12 - C 13	/469. RY*(8) C 23	739.58	2.86	1.304
24. BD (1) C 12 - C 13	/471. RY*(10) C 23	979.80	2.64	1.444
24. BD (1) C 12 - C 13	/473. RY*(12) C 23	10.58	3.92	0.183
24. BD (1) C 12 - C 13	/474. RY*(13) C 23	42.56	4.82	0.406
24. BD (1) C 12 - C 13	/475. RY*(14) C 23	6.72	24.37	0.363
24. BD (1) C 12 - C 13	/476. RY*(15) C 23	405.02	3.09	1.004
24. BD (1) C 12 - C 13	/477. RY*(16) C 23	1077.08	3.07	1.632
24. BD (1) C 12 - C 13	/478. RY*(17) C 23	9.43	4.43	0.183
24. BD (1) C 12 - C 13	/479. RY*(1) H 24	29.73	2.71	0.255
24. BD (1) C 12 - C 13	/480. RY*(2) H 24	1.12	4.37	0.063
24. BD (1) C 12 - C 13	/481. RY*(3) H 24	1.99	3.70	0.077
24. BD (1) C 12 - C 13	/482. RY*(4) H 24	2.24	4.21	0.087
24. BD (1) C 12 - C 13	/483. RY*(5) H 24	17.15	4.65	0.253
24. BD (1) C 12 - C 13	/484. RY*(1) H 25	1.95	2.95	0.068
24. BD (1) C 12 - C 13	/485. RY*(2) H 25	1.13	4.06	0.061
24. BD (1) C 12 - C 13	/488. RY*(5) H 25	1.34	4.58	0.070
24. BD (1) C 12 - C 13	/491. RY*(3) H 26	1.91	3.66	0.075
24. BD (1) C 12 - C 13	/492. RY*(4) H 26	22.41	3.99	0.268
24. BD (1) C 12 - C 13	/494. RY*(1) H 27	1.63	2.79	0.060
24. BD (1) C 12 - C 13	/496. RY*(3) H 27	33.57	3.58	0.311
24. BD (1) C 12 - C 13	/497. RY*(4) H 27	1478.52	2.17	1.608
24. BD (1) C 12 - C 13	/498. RY*(5) H 27	11.87	4.52	0.208
24. BD (1) C 12 - C 13	/499. RY*(1) H 28	16.30	2.96	0.197
24. BD (1) C 12 - C 13	/500. RY*(2) H 28	15.28	3.99	0.221

24. BD (1) C 12 - C 13	/501. RY*(3) H 28	13867.58	0.43	2.187
24. BD (1) C 12 - C 13	/502. RY*(4) H 28	67.65	3.82	0.456
24. BD (1) C 12 - C 13	/503. RY*(5) H 28	0.66	4.59	0.050
24. BD (1) C 12 - C 13	/504. RY*(1) H 29	3.78	2.70	0.091
24. BD (1) C 12 - C 13	/505. RY*(2) H 29	3.40	3.68	0.100
24. BD (1) C 12 - C 13	/506. RY*(3) H 29	103.19	4.36	0.602
24. BD (1) C 12 - C 13	/507. RY*(4) H 29	3.15	4.82	0.111
24. BD (1) C 12 - C 13	/508. RY*(5) H 29	1.85	4.19	0.079
24. BD (1) C 12 - C 13	/509. RY*(1) H 30	7.46	2.97	0.134
24. BD (1) C 12 - C 13	/511. RY*(3) H 30	7.82	3.67	0.152
24. BD (1) C 12 - C 13	/516. RY*(3) H 31	1.31	3.65	0.062
24. BD (1) C 12 - C 13	/517. RY*(4) H 31	1.66	4.05	0.073
24. BD (1) C 12 - C 13	/528. RY*(1) H 34	14.55	3.47	0.202
24. BD (1) C 12 - C 13	/529. RY*(2) H 34	830.60	2.26	1.229
24. BD (1) C 12 - C 13	/530. RY*(3) H 34	51.71	3.81	0.398
24. BD (1) C 12 - C 13	/531. RY*(4) H 34	8.09	3.88	0.159
24. BD (1) C 12 - C 13	/532. RY*(5) H 34	2.18	4.64	0.090
24. BD (1) C 12 - C 13	/533. RY*(1) H 35	167.41	2.80	0.614
24. BD (1) C 12 - C 13	/534. RY*(2) H 35	473.27	2.95	1.061
24. BD (1) C 12 - C 13	/535. RY*(3) H 35	36.01	3.81	0.332
24. BD (1) C 12 - C 13	/536. RY*(4) H 35	15.96	3.83	0.222
24. BD (1) C 12 - C 13	/537. RY*(5) H 35	9.05	4.75	0.186
24. BD (1) C 12 - C 13	/540. RY*(3) H 36	0.86	2.32	0.040
24. BD (1) C 12 - C 13	/542. RY*(5) H 36	128.17	3.83	0.628
24. BD (1) C 12 - C 13	/543. BD*(1) S 1 - O 2	0.95	2.35	0.043
24. BD (1) C 12 - C 13	/544. BD*(1) S 1 - O 3	0.66	2.35	0.036
24. BD (1) C 12 - C 13	/545. BD*(1) S 1 - N 6	1.07	2.19	0.046
24. BD (1) C 12 - C 13	/551. BD*(1) N 6 - C 9	1.20	2.42	0.048

24. BD (1) C 12 - C 13	/563. BD*(1) C 11 - C 12	1.63	2.61	0.058
24. BD (1) C 12 - C 13	/564. BD*(2) C 11 - C 12	0.98	2.08	0.044
24. BD (1) C 12 - C 13	/567. BD*(1) C 12 - H 25	0.81	2.49	0.040
24. BD (1) C 12 - C 13	/568. BD*(1) C 13 - C 14	1.83	2.62	0.062
24. BD (1) C 12 - C 13	/571. BD*(1) C 14 - C 15	1.00	2.63	0.046
24. BD (1) C 12 - C 13	/572. BD*(1) C 14 - H 27	10.13	2.46	0.141
24. BD (1) C 12 - C 13	/573. BD*(1) C 15 - C 16	1620.90	1.35	1.320
24. BD (1) C 12 - C 13	/574. BD*(2) C 15 - C 16	1.66	2.09	0.058
24. BD (1) C 12 - C 13	/575. BD*(1) C 15 - H 28	0.99	2.51	0.044
24. BD (1) C 12 - C 13	/576. BD*(1) C 18 - C 22	19.60	2.59	0.202
24. BD (1) C 12 - C 13	/577. BD*(1) C 19 - C 20	0.79	2.63	0.041
24. BD (1) C 12 - C 13	/578. BD*(2) C 19 - C 20	221.52	1.82	0.612
24. BD (1) C 12 - C 13	/579. BD*(1) C 19 - H 29	1069.79	1.53	1.141
24. BD (1) C 12 - C 13	/580. BD*(1) C 20 - C 21	5.83	2.66	0.111
24. BD (1) C 12 - C 13	/581. BD*(1) C 20 - H 30	6.67	2.51	0.116
24. BD (1) C 12 - C 13	/582. BD*(1) C 21 - C 22	6.40	2.65	0.116
24. BD (1) C 12 - C 13	/583. BD*(2) C 21 - C 22	44.53	2.03	0.289
24. BD (1) C 12 - C 13	/586. BD*(1) C 23 - H 34	69.53	5.11	0.534
24. BD (1) C 12 - C 13	/587. BD*(1) C 23 - H 35	69.64	5.39	0.548
24. BD (1) C 12 - C 13	/588. BD*(1) C 23 - H 36	156.03	4.76	0.770
25. BD (1) C 12 - H 25	/ 98. RY*(12) S 1	6.56	0.90	0.069
25. BD (1) C 12 - H 25	/100. RY*(14) S 1	1.32	1.23	0.036
25. BD (1) C 12 - H 25	/101. RY*(15) S 1	4.74	0.90	0.059
25. BD (1) C 12 - H 25	/112. RY*(5) O 2	2.13	1.25	0.046
25. BD (1) C 12 - H 25	/114. RY*(7) O 2	0.66	2.18	0.034
25. BD (1) C 12 - H 25	/130. RY*(6) O 3	2.08	1.16	0.044
25. BD (1) C 12 - H 25	/142. RY*(1) O 4	23.29	0.21	0.063
25. BD (1) C 12 - H 25	/190. RY*(17) N 6	0.77	32.05	0.141

25. BD (1) C 12 - H 25	/191. RY*(1) N 7	0.75	1.12	0.026
25. BD (1) C 12 - H 25	/195. RY*(5) N 7	1.44	1.07	0.035
25. BD (1) C 12 - H 25	/198. RY*(8) N 7	0.52	2.08	0.029
25. BD (1) C 12 - H 25	/199. RY*(9) N 7	0.80	2.85	0.043
25. BD (1) C 12 - H 25	/200. RY*(10) N 7	2.23	1.55	0.053
25. BD (1) C 12 - H 25	/208. RY*(1) N 8	0.62	1.14	0.024
25. BD (1) C 12 - H 25	/231. RY*(7) C 9	2.83	1.48	0.058
25. BD (1) C 12 - H 25	/232. RY*(8) C 9	1.58	1.80	0.048
25. BD (1) C 12 - H 25	/233. RY*(9) C 9	1.58	2.70	0.059
25. BD (1) C 12 - H 25	/234. RY*(10) C 9	2.56	1.67	0.059
25. BD (1) C 12 - H 25	/235. RY*(11) C 9	91.45	0.11	0.090
25. BD (1) C 12 - H 25	/237. RY*(13) C 9	6.56	2.11	0.106
25. BD (1) C 12 - H 25	/242. RY*(1) C 10	1.48	1.39	0.041
25. BD (1) C 12 - H 25	/252. RY*(11) C 10	5.37	0.82	0.059
25. BD (1) C 12 - H 25	/259. RY*(1) C 11	1.34	1.96	0.046
25. BD (1) C 12 - H 25	/260. RY*(2) C 11	0.90	1.79	0.036
25. BD (1) C 12 - H 25	/265. RY*(7) C 11	0.66	2.13	0.034
25. BD (1) C 12 - H 25	/268. RY*(10) C 11	0.68	2.43	0.036
25. BD (1) C 12 - H 25	/270. RY*(12) C 11	2.77	1.49	0.058
25. BD (1) C 12 - H 25	/273. RY*(15) C 11	1.30	2.14	0.047
25. BD (1) C 12 - H 25	/286. RY*(11) C 12	0.70	1.33	0.027
25. BD (1) C 12 - H 25	/293. RY*(1) C 13	1.12	1.61	0.038
25. BD (1) C 12 - H 25	/298. RY*(6) C 13	0.96	1.55	0.035
25. BD (1) C 12 - H 25	/299. RY*(7) C 13	0.89	2.24	0.040
25. BD (1) C 12 - H 25	/330. RY*(4) C 15	0.77	1.39	0.029
25. BD (1) C 12 - H 25	/348. RY*(5) C 16	1.02	1.85	0.039
25. BD (1) C 12 - H 25	/357. RY*(14) C 16	0.66	2.24	0.035
25. BD (1) C 12 - H 25	/358. RY*(15) C 16	0.82	1.88	0.035

25. BD (1) C 12 - H 25	/365. RY*(5) C 17	0.89	1.46	0.032
25. BD (1) C 12 - H 25	/370. RY*(10) C 17	0.86	3.66	0.050
25. BD (1) C 12 - H 25	/373. RY*(13) C 17	2.04	2.17	0.060
25. BD (1) C 12 - H 25	/383. RY*(7) C 18	1.35	1.27	0.037
25. BD (1) C 12 - H 25	/392. RY*(16) C 18	1.76	0.92	0.036
25. BD (1) C 12 - H 25	/395. RY*(2) C 19	1.07	1.33	0.034
25. BD (1) C 12 - H 25	/462. RY*(1) C 23	14.83	0.44	0.072
25. BD (1) C 12 - H 25	/463. RY*(2) C 23	2.01	1.00	0.040
25. BD (1) C 12 - H 25	/464. RY*(3) C 23	0.59	1.33	0.025
25. BD (1) C 12 - H 25	/465. RY*(4) C 23	4.62	1.26	0.068
25. BD (1) C 12 - H 25	/469. RY*(8) C 23	6.26	1.32	0.082
25. BD (1) C 12 - H 25	/471. RY*(10) C 23	8.80	1.11	0.089
25. BD (1) C 12 - H 25	/476. RY*(15) C 23	3.05	1.56	0.062
25. BD (1) C 12 - H 25	/477. RY*(16) C 23	8.51	1.54	0.103
25. BD (1) C 12 - H 25	/497. RY*(4) H 27	20.62	0.64	0.103
25. BD (1) C 12 - H 25	/506. RY*(3) H 29	0.61	2.83	0.037
25. BD (1) C 12 - H 25	/529. RY*(2) H 34	9.94	0.72	0.076
25. BD (1) C 12 - H 25	/533. RY*(1) H 35	1.37	1.26	0.037
25. BD (1) C 12 - H 25	/534. RY*(2) H 35	3.77	1.42	0.066
25. BD (1) C 12 - H 25	/542. RY*(5) H 36	0.94	2.29	0.042
25. BD (1) C 12 - H 25	/563. BD*(1) C 11 - C 12	0.65	1.08	0.024
25. BD (1) C 12 - H 25	/565. BD*(1) C 11 - C 16	4.78	1.06	0.064
25. BD (1) C 12 - H 25	/566. BD*(1) C 12 - C 13	0.72	1.10	0.025
25. BD (1) C 12 - H 25	/568. BD*(1) C 13 - C 14	3.41	1.09	0.054
25. BD (1) C 12 - H 25	/570. BD*(1) C 13 - H 26	0.56	0.95	0.021
25. BD (1) C 12 - H 25	/578. BD*(2) C 19 - C 20	5.57	0.28	0.038
25. BD (1) C 12 - H 25	/583. BD*(2) C 21 - C 22	0.71	0.50	0.018
25. BD (1) C 12 - H 25	/588. BD*(1) C 23 - H 36	0.75	3.22	0.044

26. BD (1) C 13 - C 14	/276. RY*(1) C 12	0.70	1.83	0.032
26. BD (1) C 13 - C 14	/277. RY*(2) C 12	1.56	1.79	0.047
26. BD (1) C 13 - C 14	/327. RY*(1) C 15	0.54	1.83	0.028
26. BD (1) C 13 - C 14	/328. RY*(2) C 15	1.78	1.81	0.051
26. BD (1) C 13 - C 14	/566. BD*(1) C 12 - C 13	2.54	1.28	0.051
26. BD (1) C 13 - C 14	/567. BD*(1) C 12 - H 25	2.54	1.14	0.048
26. BD (1) C 13 - C 14	/570. BD*(1) C 13 - H 26	0.84	1.13	0.028
26. BD (1) C 13 - C 14	/571. BD*(1) C 14 - C 15	2.49	1.27	0.050
26. BD (1) C 13 - C 14	/572. BD*(1) C 14 - H 27	0.88	1.11	0.028
26. BD (1) C 13 - C 14	/575. BD*(1) C 15 - H 28	2.45	1.16	0.048
27. BD (2) C 13 - C 14	/278. RY*(3) C 12	0.78	0.81	0.025
27. BD (2) C 13 - C 14	/281. RY*(6) C 12	0.77	1.41	0.033
27. BD (2) C 13 - C 14	/331. RY*(5) C 15	0.72	1.57	0.033
27. BD (2) C 13 - C 14	/564. BD*(2) C 11 - C 12	21.51	0.28	0.069
27. BD (2) C 13 - C 14	/574. BD*(2) C 15 - C 16	22.06	0.29	0.071
27. BD (2) C 13 - C 14	/578. BD*(2) C 19 - C 20	0.84	0.02	0.003
28. BD (1) C 13 - H 26	/235. RY*(11) C 9	2.08	0.11	0.013
28. BD (1) C 13 - H 26	/276. RY*(1) C 12	1.30	1.65	0.041
28. BD (1) C 13 - H 26	/310. RY*(1) C 14	1.27	1.61	0.041
28. BD (1) C 13 - H 26	/497. RY*(4) H 27	0.54	0.64	0.017
28. BD (1) C 13 - H 26	/563. BD*(1) C 11 - C 12	3.84	1.07	0.057
28. BD (1) C 13 - H 26	/566. BD*(1) C 12 - C 13	0.58	1.10	0.023
28. BD (1) C 13 - H 26	/568. BD*(1) C 13 - C 14	0.51	1.09	0.021
28. BD (1) C 13 - H 26	/571. BD*(1) C 14 - C 15	3.70	1.09	0.057
29. BD (1) C 14 - C 15	/293. RY*(1) C 13	0.94	1.80	0.037
29. BD (1) C 14 - C 15	/294. RY*(2) C 13	1.39	1.98	0.047
29. BD (1) C 14 - C 15	/344. RY*(1) C 16	1.49	2.01	0.049
29. BD (1) C 14 - C 15	/546. BD*(1) S 1 - C 16	3.95	0.88	0.055

29. BD (1) C 14 - C 15	/568. BD*(1) C 13 - C 14	2.37	1.27	0.049
29. BD (1) C 14 - C 15	/570. BD*(1) C 13 - H 26	2.34	1.13	0.046
29. BD (1) C 14 - C 15	/572. BD*(1) C 14 - H 27	0.79	1.11	0.026
29. BD (1) C 14 - C 15	/575. BD*(1) C 15 - H 28	1.07	1.16	0.032
30. BD (1) C 14 - H 27	/293. RY*(1) C 13	1.26	1.61	0.040
30. BD (1) C 14 - H 27	/327. RY*(1) C 15	1.31	1.64	0.042
30. BD (1) C 14 - H 27	/566. BD*(1) C 12 - C 13	3.60	1.10	0.056
30. BD (1) C 14 - H 27	/568. BD*(1) C 13 - C 14	0.54	1.09	0.022
30. BD (1) C 14 - H 27	/570. BD*(1) C 13 - H 26	0.51	0.95	0.020
30. BD (1) C 14 - H 27	/571. BD*(1) C 14 - C 15	0.53	1.09	0.021
31. BD (1) C 15 - C 16	/142. RY*(1) O 4	0.89	0.42	0.017
31. BD (1) C 15 - C 16	/235. RY*(11) C 9	2.37	0.32	0.025
31. BD (1) C 15 - C 16	/252. RY*(11) C 10	0.57	1.03	0.022
31. BD (1) C 15 - C 16	/259. RY*(1) C 11	0.61	2.17	0.033
31. BD (1) C 15 - C 16	/260. RY*(2) C 11	1.26	2.00	0.045
31. BD (1) C 15 - C 16	/310. RY*(1) C 14	0.86	1.82	0.035
31. BD (1) C 15 - C 16	/311. RY*(2) C 14	1.43	2.02	0.048
31. BD (1) C 15 - C 16	/462. RY*(1) C 23	0.73	0.65	0.020
31. BD (1) C 15 - C 16	/466. RY*(5) C 23	5.66	0.17	0.028
31. BD (1) C 15 - C 16	/471. RY*(10) C 23	0.52	1.32	0.023
31. BD (1) C 15 - C 16	/477. RY*(16) C 23	0.69	1.75	0.031
31. BD (1) C 15 - C 16	/497. RY*(4) H 27	2.03	0.85	0.037
31. BD (1) C 15 - C 16	/529. RY*(2) H 34	0.62	0.93	0.022
31. BD (1) C 15 - C 16	/562. BD*(1) C 10 - C 11	2.85	1.19	0.052
31. BD (1) C 15 - C 16	/565. BD*(1) C 11 - C 16	4.92	1.27	0.071
31. BD (1) C 15 - C 16	/571. BD*(1) C 14 - C 15	2.94	1.30	0.055
31. BD (1) C 15 - C 16	/572. BD*(1) C 14 - H 27	1.79	1.13	0.040
31. BD (1) C 15 - C 16	/573. BD*(1) C 15 - C 16	28.74	0.02	0.023

31. BD (1) C 15 - C 16 /575. BD*(1) C 15 - H 28 1.11 1.19 0.032

31. BD (1) C 15 - C 16 /579. BD*(1) C 19 - H 29 2.51 0.20 0.020

32. BD (2) C 15 - C 16 / 89. RY*(3) S 1 0.67 1.16 0.027

32. BD (2) C 15 - C 16 / 98. RY*(12) S 1 1.24 0.65 0.028

32. BD (2) C 15 - C 16 /101. RY*(15) S 1 1.14 0.65 0.026

32. BD (2) C 15 - C 16 /130. RY*(6) O 3 0.56 0.91 0.022

32. BD (2) C 15 - C 16 /237. RY*(13) C 9 1.14 1.86 0.045

32. BD (2) C 15 - C 16 /252. RY*(11) C 10 1.38 0.57 0.027

32. BD (2) C 15 - C 16 /261. RY*(3) C 11 1.70 1.09 0.042

32. BD (2) C 15 - C 16 /270. RY*(12) C 11 0.62 1.24 0.027

32. BD (2) C 15 - C 16 /313. RY*(4) C 14 0.65 1.75 0.033

32. BD (2) C 15 - C 16 /348. RY*(5) C 16 0.93 1.60 0.037

32. BD (2) C 15 - C 16 /462. RY*(1) C 23 5.25 0.19 0.031

32. BD (2) C 15 - C 16 /465. RY*(4) C 23 0.72 1.01 0.026

32. BD (2) C 15 - C 16 /469. RY*(8) C 23 1.37 1.07 0.037

32. BD (2) C 15 - C 16 /471. RY*(10) C 23 1.61 0.86 0.036

32. BD (2) C 15 - C 16 /477. RY*(16) C 23 2.23 1.29 0.052

32. BD (2) C 15 - C 16 /497. RY*(4) H 27 6.14 0.39 0.048

32. BD (2) C 15 - C 16 /529. RY*(2) H 34 2.89 0.47 0.036

32. BD (2) C 15 - C 16 /534. RY*(2) H 35 0.75 1.17 0.029

32. BD (2) C 15 - C 16 /543. BD*(1) S 1 - O 2 0.69 0.57 0.019

32. BD (2) C 15 - C 16 /544. BD*(1) S 1 - O 3 3.63 0.57 0.042

32. BD (2) C 15 - C 16 /545. BD*(1) S 1 - N 6 1.68 0.41 0.024

32. BD (2) C 15 - C 16 /564. BD*(2) C 11 - C 12 19.93 0.30 0.069

32. BD (2) C 15 - C 16 /569. BD*(2) C 13 - C 14 17.43 0.30 0.064

32. BD (2) C 15 - C 16 /578. BD*(2) C 19 - C 20 10.85 0.03 0.017

33. BD (1) C 15 - H 28 / 87. RY*(1) S 1 3.15 1.44 0.061

33. BD (1) C 15 - H 28 / 88. RY*(2) S 1 2.59 1.37 0.054

33. BD (1) C 15 - H 28	/ 89. RY*(3) S 1	0.53	1.53	0.026
33. BD (1) C 15 - H 28	/ 90. RY*(4) S 1	0.68	1.47	0.028
33. BD (1) C 15 - H 28	/ 92. RY*(6) S 1	2.52	2.28	0.068
33. BD (1) C 15 - H 28	/ 95. RY*(9) S 1	4.04	1.67	0.074
33. BD (1) C 15 - H 28	/ 96. RY*(10) S 1	4.21	1.55	0.073
33. BD (1) C 15 - H 28	/ 98. RY*(12) S 1	136.53	1.02	0.335
33. BD (1) C 15 - H 28	/100. RY*(14) S 1	29.85	1.36	0.181
33. BD (1) C 15 - H 28	/101. RY*(15) S 1	97.65	1.02	0.284
33. BD (1) C 15 - H 28	/108. RY*(1) O 2	0.96	1.77	0.037
33. BD (1) C 15 - H 28	/109. RY*(2) O 2	1.65	1.47	0.044
33. BD (1) C 15 - H 28	/110. RY*(3) O 2	3.53	1.61	0.068
33. BD (1) C 15 - H 28	/112. RY*(5) O 2	48.76	1.37	0.232
33. BD (1) C 15 - H 28	/113. RY*(6) O 2	0.90	1.61	0.034
33. BD (1) C 15 - H 28	/114. RY*(7) O 2	15.95	2.30	0.172
33. BD (1) C 15 - H 28	/115. RY*(8) O 2	1.26	2.07	0.046
33. BD (1) C 15 - H 28	/116. RY*(9) O 2	0.73	3.52	0.046
33. BD (1) C 15 - H 28	/117. RY*(10) O 2	0.83	3.49	0.048
33. BD (1) C 15 - H 28	/122. RY*(15) O 2	0.69	3.34	0.043
33. BD (1) C 15 - H 28	/124. RY*(17) O 2	0.96	5.41	0.065
33. BD (1) C 15 - H 28	/125. RY*(1) O 3	0.62	1.83	0.030
33. BD (1) C 15 - H 28	/127. RY*(3) O 3	10.13	1.56	0.113
33. BD (1) C 15 - H 28	/128. RY*(4) O 3	1.33	1.27	0.037
33. BD (1) C 15 - H 28	/129. RY*(5) O 3	4.99	1.73	0.084
33. BD (1) C 15 - H 28	/130. RY*(6) O 3	49.49	1.28	0.226
33. BD (1) C 15 - H 28	/131. RY*(7) O 3	5.22	2.52	0.103
33. BD (1) C 15 - H 28	/133. RY*(9) O 3	2.20	3.59	0.080
33. BD (1) C 15 - H 28	/140. RY*(16) O 3	1.13	3.73	0.058
33. BD (1) C 15 - H 28	/142. RY*(1) O 4	372.24	0.33	0.316

33. BD (1) C 15 - H 28	/147. RY*(6) O 4	1.54	1.97	0.049
33. BD (1) C 15 - H 28	/160. RY*(3) O 5	3.59	1.38	0.063
33. BD (1) C 15 - H 28	/162. RY*(5) O 5	0.53	2.20	0.031
33. BD (1) C 15 - H 28	/163. RY*(6) O 5	0.51	1.96	0.028
33. BD (1) C 15 - H 28	/164. RY*(7) O 5	1.13	2.26	0.045
33. BD (1) C 15 - H 28	/175. RY*(2) N 6	0.55	1.50	0.026
33. BD (1) C 15 - H 28	/176. RY*(3) N 6	1.23	1.65	0.040
33. BD (1) C 15 - H 28	/177. RY*(4) N 6	1.78	1.52	0.047
33. BD (1) C 15 - H 28	/180. RY*(7) N 6	4.65	1.75	0.081
33. BD (1) C 15 - H 28	/186. RY*(13) N 6	1.19	3.79	0.060
33. BD (1) C 15 - H 28	/188. RY*(15) N 6	1.70	4.58	0.079
33. BD (1) C 15 - H 28	/190. RY*(17) N 6	18.30	32.17	0.689
33. BD (1) C 15 - H 28	/191. RY*(1) N 7	18.57	1.24	0.136
33. BD (1) C 15 - H 28	/192. RY*(2) N 7	0.64	1.39	0.027
33. BD (1) C 15 - H 28	/195. RY*(5) N 7	35.41	1.19	0.184
33. BD (1) C 15 - H 28	/196. RY*(6) N 7	0.64	1.88	0.031
33. BD (1) C 15 - H 28	/197. RY*(7) N 7	1.43	2.51	0.054
33. BD (1) C 15 - H 28	/198. RY*(8) N 7	11.68	2.20	0.144
33. BD (1) C 15 - H 28	/199. RY*(9) N 7	19.24	2.97	0.215
33. BD (1) C 15 - H 28	/200. RY*(10) N 7	48.26	1.67	0.255
33. BD (1) C 15 - H 28	/202. RY*(12) N 7	0.58	2.84	0.037
33. BD (1) C 15 - H 28	/204. RY*(14) N 7	1.72	3.41	0.069
33. BD (1) C 15 - H 28	/208. RY*(1) N 8	13.74	1.27	0.118
33. BD (1) C 15 - H 28	/212. RY*(5) N 8	5.08	2.17	0.094
33. BD (1) C 15 - H 28	/214. RY*(7) N 8	0.76	1.89	0.034
33. BD (1) C 15 - H 28	/215. RY*(8) N 8	0.58	2.14	0.032
33. BD (1) C 15 - H 28	/216. RY*(9) N 8	4.46	3.48	0.112
33. BD (1) C 15 - H 28	/217. RY*(10) N 8	2.90	1.51	0.059

33. BD (1) C 15 - H 28	/226. RY*(2) C 9	1.86	1.56	0.048
33. BD (1) C 15 - H 28	/227. RY*(3) C 9	1.17	1.65	0.039
33. BD (1) C 15 - H 28	/228. RY*(4) C 9	2.01	1.89	0.055
33. BD (1) C 15 - H 28	/229. RY*(5) C 9	2.56	2.52	0.072
33. BD (1) C 15 - H 28	/230. RY*(6) C 9	7.87	1.75	0.105
33. BD (1) C 15 - H 28	/231. RY*(7) C 9	66.14	1.60	0.292
33. BD (1) C 15 - H 28	/232. RY*(8) C 9	32.20	1.92	0.223
33. BD (1) C 15 - H 28	/233. RY*(9) C 9	39.35	2.82	0.299
33. BD (1) C 15 - H 28	/234. RY*(10) C 9	67.29	1.80	0.312
33. BD (1) C 15 - H 28	/235. RY*(11) C 9	1124.90	0.23	0.457
33. BD (1) C 15 - H 28	/236. RY*(12) C 9	4.46	2.69	0.098
33. BD (1) C 15 - H 28	/237. RY*(13) C 9	137.23	2.23	0.497
33. BD (1) C 15 - H 28	/238. RY*(14) C 9	3.89	2.79	0.094
33. BD (1) C 15 - H 28	/239. RY*(15) C 9	3.73	3.07	0.096
33. BD (1) C 15 - H 28	/240. RY*(16) C 9	1.14	3.92	0.060
33. BD (1) C 15 - H 28	/241. RY*(17) C 9	2.45	20.08	0.199
33. BD (1) C 15 - H 28	/242. RY*(1) C 10	27.08	1.51	0.181
33. BD (1) C 15 - H 28	/244. RY*(3) C 10	1.46	2.22	0.051
33. BD (1) C 15 - H 28	/245. RY*(4) C 10	5.09	2.18	0.095
33. BD (1) C 15 - H 28	/246. RY*(5) C 10	1.61	1.68	0.047
33. BD (1) C 15 - H 28	/250. RY*(9) C 10	1.24	2.37	0.049
33. BD (1) C 15 - H 28	/251. RY*(10) C 10	4.62	1.94	0.085
33. BD (1) C 15 - H 28	/252. RY*(11) C 10	111.10	0.94	0.290
33. BD (1) C 15 - H 28	/253. RY*(12) C 10	3.81	2.16	0.081
33. BD (1) C 15 - H 28	/255. RY*(14) C 10	1.48	2.29	0.052
33. BD (1) C 15 - H 28	/256. RY*(15) C 10	4.32	3.65	0.113
33. BD (1) C 15 - H 28	/260. RY*(2) C 11	4.56	1.91	0.084
33. BD (1) C 15 - H 28	/261. RY*(3) C 11	0.83	1.45	0.031

33. BD (1) C 15 - H 28	/262. RY*(4) C 11	0.56	1.72	0.028
33. BD (1) C 15 - H 28	/263. RY*(5) C 11	2.90	1.94	0.067
33. BD (1) C 15 - H 28	/264. RY*(6) C 11	0.54	1.85	0.029
33. BD (1) C 15 - H 28	/265. RY*(7) C 11	6.19	2.25	0.106
33. BD (1) C 15 - H 28	/266. RY*(8) C 11	1.78	2.04	0.054
33. BD (1) C 15 - H 28	/267. RY*(9) C 11	29.60	1.86	0.210
33. BD (1) C 15 - H 28	/268. RY*(10) C 11	16.15	2.55	0.182
33. BD (1) C 15 - H 28	/270. RY*(12) C 11	54.39	1.61	0.266
33. BD (1) C 15 - H 28	/272. RY*(14) C 11	0.66	4.96	0.051
33. BD (1) C 15 - H 28	/273. RY*(15) C 11	15.06	2.26	0.166
33. BD (1) C 15 - H 28	/274. RY*(16) C 11	6.80	3.28	0.134
33. BD (1) C 15 - H 28	/278. RY*(3) C 12	0.67	1.19	0.025
33. BD (1) C 15 - H 28	/279. RY*(4) C 12	8.91	1.61	0.108
33. BD (1) C 15 - H 28	/280. RY*(5) C 12	3.25	1.51	0.063
33. BD (1) C 15 - H 28	/281. RY*(6) C 12	5.40	1.79	0.088
33. BD (1) C 15 - H 28	/284. RY*(9) C 12	1.10	2.97	0.051
33. BD (1) C 15 - H 28	/285. RY*(10) C 12	3.18	3.27	0.092
33. BD (1) C 15 - H 28	/286. RY*(11) C 12	27.83	1.45	0.180
33. BD (1) C 15 - H 28	/287. RY*(12) C 12	5.24	2.54	0.104
33. BD (1) C 15 - H 28	/288. RY*(13) C 12	3.21	2.00	0.072
33. BD (1) C 15 - H 28	/296. RY*(4) C 13	1.01	1.60	0.036
33. BD (1) C 15 - H 28	/298. RY*(6) C 13	4.27	1.67	0.076
33. BD (1) C 15 - H 28	/299. RY*(7) C 13	5.84	2.36	0.105
33. BD (1) C 15 - H 28	/300. RY*(8) C 13	1.03	3.01	0.050
33. BD (1) C 15 - H 28	/301. RY*(9) C 13	0.87	2.60	0.043
33. BD (1) C 15 - H 28	/302. RY*(10) C 13	1.01	2.75	0.047
33. BD (1) C 15 - H 28	/303. RY*(11) C 13	0.64	1.15	0.024
33. BD (1) C 15 - H 28	/305. RY*(13) C 13	0.83	2.74	0.043

33. BD (1) C 15 - H 28	/310. RY*(1) C 14	1.25	1.73	0.042
33. BD (1) C 15 - H 28	/314. RY*(5) C 14	0.64	1.55	0.028
33. BD (1) C 15 - H 28	/315. RY*(6) C 14	0.55	1.68	0.027
33. BD (1) C 15 - H 28	/316. RY*(7) C 14	0.93	2.23	0.041
33. BD (1) C 15 - H 28	/319. RY*(10) C 14	1.08	1.84	0.040
33. BD (1) C 15 - H 28	/323. RY*(14) C 14	0.73	1.99	0.034
33. BD (1) C 15 - H 28	/326. RY*(17) C 14	1.71	2.28	0.056
33. BD (1) C 15 - H 28	/327. RY*(1) C 15	1.77	1.76	0.050
33. BD (1) C 15 - H 28	/330. RY*(4) C 15	9.51	1.51	0.108
33. BD (1) C 15 - H 28	/331. RY*(5) C 15	0.93	1.95	0.038
33. BD (1) C 15 - H 28	/334. RY*(8) C 15	4.68	1.62	0.078
33. BD (1) C 15 - H 28	/337. RY*(11) C 15	0.58	2.57	0.034
33. BD (1) C 15 - H 28	/338. RY*(12) C 15	2.50	1.41	0.053
33. BD (1) C 15 - H 28	/339. RY*(13) C 15	1.70	2.08	0.053
33. BD (1) C 15 - H 28	/340. RY*(14) C 15	2.79	3.16	0.084
33. BD (1) C 15 - H 28	/344. RY*(1) C 16	1.61	1.95	0.050
33. BD (1) C 15 - H 28	/345. RY*(2) C 16	1.11	1.62	0.038
33. BD (1) C 15 - H 28	/346. RY*(3) C 16	0.94	1.40	0.033
33. BD (1) C 15 - H 28	/347. RY*(4) C 16	1.90	1.64	0.050
33. BD (1) C 15 - H 28	/348. RY*(5) C 16	23.28	1.97	0.192
33. BD (1) C 15 - H 28	/349. RY*(6) C 16	0.51	1.69	0.026
33. BD (1) C 15 - H 28	/351. RY*(8) C 16	3.31	2.13	0.075
33. BD (1) C 15 - H 28	/352. RY*(9) C 16	4.04	2.33	0.087
33. BD (1) C 15 - H 28	/354. RY*(11) C 16	1.08	3.55	0.056
33. BD (1) C 15 - H 28	/355. RY*(12) C 16	0.67	4.19	0.048
33. BD (1) C 15 - H 28	/356. RY*(13) C 16	0.72	1.84	0.033
33. BD (1) C 15 - H 28	/357. RY*(14) C 16	18.71	2.36	0.189
33. BD (1) C 15 - H 28	/358. RY*(15) C 16	22.64	2.00	0.191

33. BD (1) C 15 - H 28	/361. RY*(1) C 17	0.92	1.68	0.035
33. BD (1) C 15 - H 28	/362. RY*(2) C 17	1.18	2.11	0.045
33. BD (1) C 15 - H 28	/365. RY*(5) C 17	18.40	1.58	0.153
33. BD (1) C 15 - H 28	/367. RY*(7) C 17	1.51	2.65	0.057
33. BD (1) C 15 - H 28	/368. RY*(8) C 17	4.02	1.64	0.073
33. BD (1) C 15 - H 28	/370. RY*(10) C 17	19.71	3.78	0.245
33. BD (1) C 15 - H 28	/371. RY*(11) C 17	9.32	2.44	0.135
33. BD (1) C 15 - H 28	/372. RY*(12) C 17	7.83	3.59	0.151
33. BD (1) C 15 - H 28	/373. RY*(13) C 17	45.22	2.29	0.289
33. BD (1) C 15 - H 28	/380. RY*(4) C 18	0.62	2.31	0.034
33. BD (1) C 15 - H 28	/382. RY*(6) C 18	3.01	1.79	0.066
33. BD (1) C 15 - H 28	/383. RY*(7) C 18	31.01	1.39	0.187
33. BD (1) C 15 - H 28	/385. RY*(9) C 18	3.01	2.52	0.078
33. BD (1) C 15 - H 28	/386. RY*(10) C 18	4.41	2.62	0.097
33. BD (1) C 15 - H 28	/387. RY*(11) C 18	8.58	4.58	0.178
33. BD (1) C 15 - H 28	/388. RY*(12) C 18	6.80	2.86	0.125
33. BD (1) C 15 - H 28	/389. RY*(13) C 18	0.69	3.48	0.044
33. BD (1) C 15 - H 28	/392. RY*(16) C 18	38.97	1.04	0.180
33. BD (1) C 15 - H 28	/395. RY*(2) C 19	24.31	1.46	0.169
33. BD (1) C 15 - H 28	/396. RY*(3) C 19	0.93	2.11	0.040
33. BD (1) C 15 - H 28	/402. RY*(9) C 19	0.57	1.44	0.026
33. BD (1) C 15 - H 28	/405. RY*(12) C 19	1.38	1.59	0.042
33. BD (1) C 15 - H 28	/413. RY*(3) C 20	1.30	1.18	0.035
33. BD (1) C 15 - H 28	/417. RY*(7) C 20	2.51	2.43	0.070
33. BD (1) C 15 - H 28	/427. RY*(17) C 20	0.65	2.64	0.037
33. BD (1) C 15 - H 28	/433. RY*(6) C 21	1.53	1.75	0.046
33. BD (1) C 15 - H 28	/437. RY*(10) C 21	0.54	2.16	0.031
33. BD (1) C 15 - H 28	/438. RY*(11) C 21	1.46	1.11	0.036

33. BD (1) C 15 - H 28	/447. RY*(3) C 22	0.69	1.15	0.025
33. BD (1) C 15 - H 28	/449. RY*(5) C 22	1.60	2.06	0.051
33. BD (1) C 15 - H 28	/450. RY*(6) C 22	1.43	1.66	0.044
33. BD (1) C 15 - H 28	/451. RY*(7) C 22	4.58	1.96	0.085
33. BD (1) C 15 - H 28	/454. RY*(10) C 22	1.04	3.04	0.050
33. BD (1) C 15 - H 28	/455. RY*(11) C 22	0.68	1.91	0.032
33. BD (1) C 15 - H 28	/457. RY*(13) C 22	1.07	2.18	0.043
33. BD (1) C 15 - H 28	/458. RY*(14) C 22	1.95	1.32	0.046
33. BD (1) C 15 - H 28	/462. RY*(1) C 23	301.30	0.56	0.368
33. BD (1) C 15 - H 28	/463. RY*(2) C 23	53.21	1.12	0.219
33. BD (1) C 15 - H 28	/464. RY*(3) C 23	13.53	1.45	0.126
33. BD (1) C 15 - H 28	/465. RY*(4) C 23	109.22	1.38	0.348
33. BD (1) C 15 - H 28	/466. RY*(5) C 23	2602.99	0.08	0.404
33. BD (1) C 15 - H 28	/467. RY*(6) C 23	3.79	2.20	0.082
33. BD (1) C 15 - H 28	/469. RY*(8) C 23	119.19	1.44	0.373
33. BD (1) C 15 - H 28	/471. RY*(10) C 23	242.97	1.23	0.491
33. BD (1) C 15 - H 28	/474. RY*(13) C 23	1.94	3.41	0.073
33. BD (1) C 15 - H 28	/475. RY*(14) C 23	0.54	22.95	0.100
33. BD (1) C 15 - H 28	/476. RY*(15) C 23	89.19	1.68	0.347
33. BD (1) C 15 - H 28	/477. RY*(16) C 23	151.19	1.66	0.449
33. BD (1) C 15 - H 28	/478. RY*(17) C 23	4.52	3.01	0.105
33. BD (1) C 15 - H 28	/479. RY*(1) H 24	5.96	1.30	0.079
33. BD (1) C 15 - H 28	/483. RY*(5) H 24	2.39	3.23	0.079
33. BD (1) C 15 - H 28	/484. RY*(1) H 25	0.56	1.54	0.026
33. BD (1) C 15 - H 28	/492. RY*(4) H 26	3.23	2.58	0.082
33. BD (1) C 15 - H 28	/496. RY*(3) H 27	5.03	2.17	0.094
33. BD (1) C 15 - H 28	/497. RY*(4) H 27	402.36	0.76	0.496
33. BD (1) C 15 - H 28	/498. RY*(5) H 27	2.80	3.11	0.084

33. BD (1) C 15 - H 28	/499. RY*(1) H 28	2.04	1.55	0.050
33. BD (1) C 15 - H 28	/500. RY*(2) H 28	2.25	2.57	0.068
33. BD (1) C 15 - H 28	/502. RY*(4) H 28	13.81	2.40	0.164
33. BD (1) C 15 - H 28	/504. RY*(1) H 29	0.65	1.29	0.026
33. BD (1) C 15 - H 28	/506. RY*(3) H 29	11.54	2.95	0.166
33. BD (1) C 15 - H 28	/507. RY*(4) H 29	2.22	3.41	0.078
33. BD (1) C 15 - H 28	/508. RY*(5) H 29	2.19	2.78	0.070
33. BD (1) C 15 - H 28	/509. RY*(1) H 30	4.90	1.56	0.079
33. BD (1) C 15 - H 28	/511. RY*(3) H 30	1.51	2.26	0.052
33. BD (1) C 15 - H 28	/528. RY*(1) H 34	2.80	2.06	0.068
33. BD (1) C 15 - H 28	/529. RY*(2) H 34	207.80	0.84	0.376
33. BD (1) C 15 - H 28	/530. RY*(3) H 34	10.06	2.39	0.139
33. BD (1) C 15 - H 28	/531. RY*(4) H 34	1.86	2.47	0.061
33. BD (1) C 15 - H 28	/533. RY*(1) H 35	33.71	1.38	0.194
33. BD (1) C 15 - H 28	/534. RY*(2) H 35	88.04	1.54	0.331
33. BD (1) C 15 - H 28	/535. RY*(3) H 35	6.52	2.40	0.112
33. BD (1) C 15 - H 28	/536. RY*(4) H 35	2.39	2.42	0.068
33. BD (1) C 15 - H 28	/537. RY*(5) H 35	0.82	3.34	0.047
33. BD (1) C 15 - H 28	/542. RY*(5) H 36	37.30	2.41	0.269
33. BD (1) C 15 - H 28	/562. BD*(1) C 10 - C 11	1.21	1.10	0.033
33. BD (1) C 15 - H 28	/565. BD*(1) C 11 - C 16	4.78	1.18	0.067
33. BD (1) C 15 - H 28	/568. BD*(1) C 13 - C 14	2.70	1.21	0.051
33. BD (1) C 15 - H 28	/571. BD*(1) C 14 - C 15	1.67	1.21	0.040
33. BD (1) C 15 - H 28	/572. BD*(1) C 14 - H 27	7.39	1.04	0.079
33. BD (1) C 15 - H 28	/574. BD*(2) C 15 - C 16	1.58	0.67	0.032
33. BD (1) C 15 - H 28	/576. BD*(1) C 18 - C 22	5.17	1.17	0.070
33. BD (1) C 15 - H 28	/578. BD*(2) C 19 - C 20	98.21	0.40	0.191
33. BD (1) C 15 - H 28	/579. BD*(1) C 19 - H 29	1434.93	0.11	0.357

33. BD (1) C 15 - H 28	/580. BD*(1) C 20 - C 21	0.65	1.25	0.025
33. BD (1) C 15 - H 28	/581. BD*(1) C 20 - H 30	1.70	1.09	0.039
33. BD (1) C 15 - H 28	/582. BD*(1) C 21 - C 22	2.03	1.24	0.045
33. BD (1) C 15 - H 28	/583. BD*(2) C 21 - C 22	13.83	0.62	0.089
33. BD (1) C 15 - H 28	/586. BD*(1) C 23 - H 34	15.33	3.70	0.213
33. BD (1) C 15 - H 28	/587. BD*(1) C 23 - H 35	39.06	3.97	0.353
33. BD (1) C 15 - H 28	/588. BD*(1) C 23 - H 36	36.25	3.34	0.311
34. BD (1) C 18 - C 22	/ 87. RY*(1) S 1	6.62	1.88	0.101
34. BD (1) C 18 - C 22	/ 88. RY*(2) S 1	6.55	1.80	0.098
34. BD (1) C 18 - C 22	/ 89. RY*(3) S 1	1.37	1.97	0.047
34. BD (1) C 18 - C 22	/ 90. RY*(4) S 1	1.55	1.90	0.049
34. BD (1) C 18 - C 22	/ 92. RY*(6) S 1	5.97	2.71	0.114
34. BD (1) C 18 - C 22	/ 95. RY*(9) S 1	9.68	2.11	0.128
34. BD (1) C 18 - C 22	/ 96. RY*(10) S 1	8.28	1.99	0.115
34. BD (1) C 18 - C 22	/ 97. RY*(11) S 1	1.00	2.41	0.044
34. BD (1) C 18 - C 22	/ 98. RY*(12) S 1	298.16	1.46	0.591
34. BD (1) C 18 - C 22	/ 99. RY*(13) S 1	4426.88	0.18	0.800
34. BD (1) C 18 - C 22	/100. RY*(14) S 1	64.77	1.79	0.306
34. BD (1) C 18 - C 22	/101. RY*(15) S 1	201.02	1.46	0.486
34. BD (1) C 18 - C 22	/103. RY*(17) S 1	0.61	15.76	0.088
34. BD (1) C 18 - C 22	/108. RY*(1) O 2	2.50	2.21	0.067
34. BD (1) C 18 - C 22	/109. RY*(2) O 2	3.42	1.90	0.072
34. BD (1) C 18 - C 22	/110. RY*(3) O 2	9.61	2.05	0.126
34. BD (1) C 18 - C 22	/112. RY*(5) O 2	107.95	1.81	0.397
34. BD (1) C 18 - C 22	/113. RY*(6) O 2	2.59	2.05	0.065
34. BD (1) C 18 - C 22	/114. RY*(7) O 2	39.47	2.74	0.295
34. BD (1) C 18 - C 22	/115. RY*(8) O 2	3.33	2.50	0.082
34. BD (1) C 18 - C 22	/116. RY*(9) O 2	1.84	3.96	0.077

34. BD (1) C 18 - C 22	/117. RY*(10) O 2	2.02	3.93	0.080
34. BD (1) C 18 - C 22	/122. RY*(15) O 2	1.79	3.78	0.074
34. BD (1) C 18 - C 22	/123. RY*(16) O 2	0.66	4.24	0.047
34. BD (1) C 18 - C 22	/124. RY*(17) O 2	2.51	5.84	0.109
34. BD (1) C 18 - C 22	/125. RY*(1) O 3	1.13	2.27	0.045
34. BD (1) C 18 - C 22	/127. RY*(3) O 3	22.81	2.00	0.192
34. BD (1) C 18 - C 22	/128. RY*(4) O 3	3.22	1.71	0.067
34. BD (1) C 18 - C 22	/129. RY*(5) O 3	10.03	2.17	0.132
34. BD (1) C 18 - C 22	/130. RY*(6) O 3	104.77	1.71	0.380
34. BD (1) C 18 - C 22	/131. RY*(7) O 3	13.14	2.96	0.177
34. BD (1) C 18 - C 22	/132. RY*(8) O 3	0.93	2.22	0.041
34. BD (1) C 18 - C 22	/133. RY*(9) O 3	5.50	4.03	0.134
34. BD (1) C 18 - C 22	/135. RY*(11) O 3	0.76	6.10	0.061
34. BD (1) C 18 - C 22	/139. RY*(15) O 3	0.55	3.75	0.041
34. BD (1) C 18 - C 22	/140. RY*(16) O 3	2.91	4.17	0.099
34. BD (1) C 18 - C 22	/142. RY*(1) O 4	470.44	0.77	0.540
34. BD (1) C 18 - C 22	/145. RY*(4) O 4	0.83	2.38	0.040
34. BD (1) C 18 - C 22	/147. RY*(6) O 4	3.67	2.40	0.084
34. BD (1) C 18 - C 22	/159. RY*(2) O 5	0.55	1.98	0.029
34. BD (1) C 18 - C 22	/160. RY*(3) O 5	8.51	1.82	0.112
34. BD (1) C 18 - C 22	/162. RY*(5) O 5	1.16	2.64	0.050
34. BD (1) C 18 - C 22	/163. RY*(6) O 5	1.18	2.40	0.048
34. BD (1) C 18 - C 22	/164. RY*(7) O 5	2.64	2.69	0.076
34. BD (1) C 18 - C 22	/175. RY*(2) N 6	0.62	1.94	0.031
34. BD (1) C 18 - C 22	/176. RY*(3) N 6	2.47	2.08	0.064
34. BD (1) C 18 - C 22	/177. RY*(4) N 6	5.07	1.95	0.089
34. BD (1) C 18 - C 22	/180. RY*(7) N 6	8.97	2.19	0.126
34. BD (1) C 18 - C 22	/181. RY*(8) N 6	0.61	2.42	0.034

34. BD (1) C 18 - C 22	/183. RY*(10) N 6	1.14	3.07	0.053
34. BD (1) C 18 - C 22	/186. RY*(13) N 6	2.63	4.22	0.095
34. BD (1) C 18 - C 22	/188. RY*(15) N 6	4.44	5.02	0.134
34. BD (1) C 18 - C 22	/190. RY*(17) N 6	52.80	32.61	1.178
34. BD (1) C 18 - C 22	/191. RY*(1) N 7	30.73	1.68	0.203
34. BD (1) C 18 - C 22	/192. RY*(2) N 7	2.73	1.82	0.063
34. BD (1) C 18 - C 22	/195. RY*(5) N 7	72.08	1.62	0.307
34. BD (1) C 18 - C 22	/196. RY*(6) N 7	2.12	2.31	0.063
34. BD (1) C 18 - C 22	/197. RY*(7) N 7	3.73	2.95	0.094
34. BD (1) C 18 - C 22	/198. RY*(8) N 7	28.07	2.64	0.244
34. BD (1) C 18 - C 22	/199. RY*(9) N 7	45.00	3.41	0.352
34. BD (1) C 18 - C 22	/200. RY*(10) N 7	110.53	2.11	0.433
34. BD (1) C 18 - C 22	/201. RY*(11) N 7	0.55	4.10	0.043
34. BD (1) C 18 - C 22	/202. RY*(12) N 7	1.42	3.27	0.061
34. BD (1) C 18 - C 22	/204. RY*(14) N 7	4.63	3.84	0.120
34. BD (1) C 18 - C 22	/208. RY*(1) N 8	37.54	1.70	0.227
34. BD (1) C 18 - C 22	/211. RY*(4) N 8	0.58	3.20	0.039
34. BD (1) C 18 - C 22	/212. RY*(5) N 8	13.78	2.61	0.170
34. BD (1) C 18 - C 22	/213. RY*(6) N 8	0.75	2.40	0.038
34. BD (1) C 18 - C 22	/214. RY*(7) N 8	1.94	2.33	0.060
34. BD (1) C 18 - C 22	/215. RY*(8) N 8	0.93	2.57	0.044
34. BD (1) C 18 - C 22	/216. RY*(9) N 8	11.86	3.92	0.194
34. BD (1) C 18 - C 22	/217. RY*(10) N 8	6.70	1.95	0.102
34. BD (1) C 18 - C 22	/225. RY*(1) C 9	0.68	2.34	0.036
34. BD (1) C 18 - C 22	/226. RY*(2) C 9	4.95	2.00	0.089
34. BD (1) C 18 - C 22	/227. RY*(3) C 9	2.82	2.09	0.069
34. BD (1) C 18 - C 22	/228. RY*(4) C 9	4.15	2.33	0.088
34. BD (1) C 18 - C 22	/229. RY*(5) C 9	5.97	2.96	0.119

34. BD (1) C 18 - C 22	/230. RY*(6) C 9	20.02	2.18	0.188
34. BD (1) C 18 - C 22	/231. RY*(7) C 9	151.74	2.03	0.499
34. BD (1) C 18 - C 22	/232. RY*(8) C 9	77.10	2.35	0.382
34. BD (1) C 18 - C 22	/233. RY*(9) C 9	97.75	3.26	0.507
34. BD (1) C 18 - C 22	/234. RY*(10) C 9	154.21	2.23	0.527
34. BD (1) C 18 - C 22	/235. RY*(11) C 9	1164.43	0.67	0.790
34. BD (1) C 18 - C 22	/236. RY*(12) C 9	12.39	3.12	0.177
34. BD (1) C 18 - C 22	/237. RY*(13) C 9	337.77	2.67	0.852
34. BD (1) C 18 - C 22	/238. RY*(14) C 9	10.89	3.22	0.168
34. BD (1) C 18 - C 22	/239. RY*(15) C 9	9.80	3.50	0.166
34. BD (1) C 18 - C 22	/240. RY*(16) C 9	2.79	4.36	0.099
34. BD (1) C 18 - C 22	/241. RY*(17) C 9	7.06	20.52	0.342
34. BD (1) C 18 - C 22	/242. RY*(1) C 10	61.65	1.94	0.310
34. BD (1) C 18 - C 22	/244. RY*(3) C 10	3.41	2.65	0.085
34. BD (1) C 18 - C 22	/245. RY*(4) C 10	12.58	2.62	0.163
34. BD (1) C 18 - C 22	/246. RY*(5) C 10	3.70	2.12	0.079
34. BD (1) C 18 - C 22	/249. RY*(8) C 10	0.62	2.80	0.037
34. BD (1) C 18 - C 22	/250. RY*(9) C 10	3.71	2.80	0.091
34. BD (1) C 18 - C 22	/251. RY*(10) C 10	10.63	2.38	0.143
34. BD (1) C 18 - C 22	/252. RY*(11) C 10	227.48	1.37	0.502
34. BD (1) C 18 - C 22	/253. RY*(12) C 10	10.86	2.60	0.151
34. BD (1) C 18 - C 22	/255. RY*(14) C 10	3.77	2.72	0.091
34. BD (1) C 18 - C 22	/256. RY*(15) C 10	11.61	4.09	0.196
34. BD (1) C 18 - C 22	/257. RY*(16) C 10	0.68	18.42	0.101
34. BD (1) C 18 - C 22	/258. RY*(17) C 10	1.19	3.76	0.060
34. BD (1) C 18 - C 22	/260. RY*(2) C 11	10.30	2.35	0.139
34. BD (1) C 18 - C 22	/261. RY*(3) C 11	1.92	1.89	0.054
34. BD (1) C 18 - C 22	/262. RY*(4) C 11	1.01	2.16	0.042

34. BD (1) C 18 - C 22	/263. RY*(5) C 11	6.91	2.38	0.115
34. BD (1) C 18 - C 22	/264. RY*(6) C 11	1.58	2.29	0.054
34. BD (1) C 18 - C 22	/265. RY*(7) C 11	15.36	2.69	0.182
34. BD (1) C 18 - C 22	/266. RY*(8) C 11	3.79	2.47	0.087
34. BD (1) C 18 - C 22	/267. RY*(9) C 11	67.08	2.29	0.352
34. BD (1) C 18 - C 22	/268. RY*(10) C 11	38.79	2.99	0.305
34. BD (1) C 18 - C 22	/270. RY*(12) C 11	131.58	2.05	0.466
34. BD (1) C 18 - C 22	/271. RY*(13) C 11	0.69	3.96	0.047
34. BD (1) C 18 - C 22	/272. RY*(14) C 11	1.63	5.40	0.084
34. BD (1) C 18 - C 22	/273. RY*(15) C 11	39.80	2.70	0.294
34. BD (1) C 18 - C 22	/274. RY*(16) C 11	17.71	3.71	0.230
34. BD (1) C 18 - C 22	/278. RY*(3) C 12	1.19	1.63	0.040
34. BD (1) C 18 - C 22	/279. RY*(4) C 12	22.36	2.05	0.192
34. BD (1) C 18 - C 22	/280. RY*(5) C 12	5.62	1.95	0.094
34. BD (1) C 18 - C 22	/281. RY*(6) C 12	13.54	2.23	0.156
34. BD (1) C 18 - C 22	/282. RY*(7) C 12	0.88	2.36	0.041
34. BD (1) C 18 - C 22	/283. RY*(8) C 12	0.68	3.33	0.043
34. BD (1) C 18 - C 22	/284. RY*(9) C 12	3.26	3.41	0.095
34. BD (1) C 18 - C 22	/285. RY*(10) C 12	7.44	3.71	0.149
34. BD (1) C 18 - C 22	/286. RY*(11) C 12	65.18	1.89	0.315
34. BD (1) C 18 - C 22	/287. RY*(12) C 12	12.78	2.98	0.175
34. BD (1) C 18 - C 22	/288. RY*(13) C 12	7.64	2.44	0.123
34. BD (1) C 18 - C 22	/292. RY*(17) C 12	0.65	3.63	0.044
34. BD (1) C 18 - C 22	/295. RY*(3) C 13	0.87	2.03	0.038
34. BD (1) C 18 - C 22	/296. RY*(4) C 13	1.86	2.04	0.055
34. BD (1) C 18 - C 22	/298. RY*(6) C 13	8.69	2.10	0.121
34. BD (1) C 18 - C 22	/299. RY*(7) C 13	14.80	2.80	0.183
34. BD (1) C 18 - C 22	/300. RY*(8) C 13	2.78	3.45	0.088

34. BD (1) C 18 - C 22	/301. RY*(9) C 13	2.39	3.03	0.076
34. BD (1) C 18 - C 22	/302. RY*(10) C 13	1.68	3.19	0.066
34. BD (1) C 18 - C 22	/303. RY*(11) C 13	1.29	1.58	0.040
34. BD (1) C 18 - C 22	/305. RY*(13) C 13	1.80	3.18	0.068
34. BD (1) C 18 - C 22	/309. RY*(17) C 13	1.62	2.70	0.059
34. BD (1) C 18 - C 22	/314. RY*(5) C 14	0.71	1.99	0.034
34. BD (1) C 18 - C 22	/316. RY*(7) C 14	0.77	2.67	0.041
34. BD (1) C 18 - C 22	/318. RY*(9) C 14	3.42	3.02	0.091
34. BD (1) C 18 - C 22	/319. RY*(10) C 14	3.85	2.27	0.084
34. BD (1) C 18 - C 22	/320. RY*(11) C 14	0.66	3.04	0.040
34. BD (1) C 18 - C 22	/323. RY*(14) C 14	1.55	2.43	0.055
34. BD (1) C 18 - C 22	/326. RY*(17) C 14	5.60	2.71	0.111
34. BD (1) C 18 - C 22	/327. RY*(1) C 15	2.79	2.20	0.070
34. BD (1) C 18 - C 22	/330. RY*(4) C 15	18.96	1.95	0.172
34. BD (1) C 18 - C 22	/331. RY*(5) C 15	2.19	2.39	0.065
34. BD (1) C 18 - C 22	/332. RY*(6) C 15	0.53	1.94	0.029
34. BD (1) C 18 - C 22	/334. RY*(8) C 15	8.53	2.06	0.119
34. BD (1) C 18 - C 22	/335. RY*(9) C 15	0.98	4.92	0.062
34. BD (1) C 18 - C 22	/337. RY*(11) C 15	1.22	3.00	0.054
34. BD (1) C 18 - C 22	/338. RY*(12) C 15	5.49	1.84	0.090
34. BD (1) C 18 - C 22	/339. RY*(13) C 15	4.51	2.52	0.096
34. BD (1) C 18 - C 22	/340. RY*(14) C 15	7.94	3.59	0.152
34. BD (1) C 18 - C 22	/345. RY*(2) C 16	5.18	2.05	0.092
34. BD (1) C 18 - C 22	/346. RY*(3) C 16	1.41	1.84	0.046
34. BD (1) C 18 - C 22	/347. RY*(4) C 16	1.48	2.08	0.050
34. BD (1) C 18 - C 22	/348. RY*(5) C 16	56.12	2.40	0.330
34. BD (1) C 18 - C 22	/351. RY*(8) C 16	8.95	2.57	0.136
34. BD (1) C 18 - C 22	/352. RY*(9) C 16	9.34	2.77	0.144

34. BD (1) C 18 - C 22	/353. RY*(10) C 16	0.63	2.16	0.033
34. BD (1) C 18 - C 22	/354. RY*(11) C 16	5.64	3.99	0.135
34. BD (1) C 18 - C 22	/355. RY*(12) C 16	3.52	4.63	0.115
34. BD (1) C 18 - C 22	/356. RY*(13) C 16	1.37	2.28	0.050
34. BD (1) C 18 - C 22	/357. RY*(14) C 16	42.30	2.80	0.309
34. BD (1) C 18 - C 22	/358. RY*(15) C 16	54.97	2.44	0.328
34. BD (1) C 18 - C 22	/361. RY*(1) C 17	1.18	2.11	0.045
34. BD (1) C 18 - C 22	/362. RY*(2) C 17	2.83	2.54	0.076
34. BD (1) C 18 - C 22	/365. RY*(5) C 17	44.79	2.02	0.270
34. BD (1) C 18 - C 22	/367. RY*(7) C 17	3.39	3.09	0.092
34. BD (1) C 18 - C 22	/368. RY*(8) C 17	10.27	2.07	0.131
34. BD (1) C 18 - C 22	/370. RY*(10) C 17	57.31	4.21	0.441
34. BD (1) C 18 - C 22	/371. RY*(11) C 17	20.37	2.88	0.217
34. BD (1) C 18 - C 22	/372. RY*(12) C 17	18.68	4.03	0.246
34. BD (1) C 18 - C 22	/373. RY*(13) C 17	108.90	2.72	0.489
34. BD (1) C 18 - C 22	/377. RY*(1) C 18	0.63	2.37	0.035
34. BD (1) C 18 - C 22	/379. RY*(3) C 18	0.88	2.57	0.043
34. BD (1) C 18 - C 22	/380. RY*(4) C 18	2.06	2.74	0.068
34. BD (1) C 18 - C 22	/382. RY*(6) C 18	6.43	2.23	0.107
34. BD (1) C 18 - C 22	/383. RY*(7) C 18	67.19	1.83	0.315
34. BD (1) C 18 - C 22	/385. RY*(9) C 18	9.53	2.96	0.151
34. BD (1) C 18 - C 22	/386. RY*(10) C 18	11.49	3.06	0.168
34. BD (1) C 18 - C 22	/387. RY*(11) C 18	21.19	5.01	0.293
34. BD (1) C 18 - C 22	/388. RY*(12) C 18	13.77	3.30	0.191
34. BD (1) C 18 - C 22	/389. RY*(13) C 18	3.18	3.92	0.100
34. BD (1) C 18 - C 22	/392. RY*(16) C 18	79.38	1.47	0.307
34. BD (1) C 18 - C 22	/395. RY*(2) C 19	48.05	1.89	0.270
34. BD (1) C 18 - C 22	/396. RY*(3) C 19	2.25	2.55	0.068

34. BD (1) C 18 - C 22	/402. RY*(9) C 19	1.14	1.87	0.041
34. BD (1) C 18 - C 22	/403. RY*(10) C 19	0.66	1.60	0.029
34. BD (1) C 18 - C 22	/405. RY*(12) C 19	2.97	2.02	0.070
34. BD (1) C 18 - C 22	/413. RY*(3) C 20	2.78	1.61	0.060
34. BD (1) C 18 - C 22	/414. RY*(4) C 20	0.65	1.86	0.031
34. BD (1) C 18 - C 22	/415. RY*(5) C 20	1.10	2.10	0.043
34. BD (1) C 18 - C 22	/417. RY*(7) C 20	7.53	2.86	0.132
34. BD (1) C 18 - C 22	/421. RY*(11) C 20	1.25	2.67	0.052
34. BD (1) C 18 - C 22	/426. RY*(16) C 20	0.89	1.51	0.033
34. BD (1) C 18 - C 22	/427. RY*(17) C 20	1.40	3.07	0.059
34. BD (1) C 18 - C 22	/429. RY*(2) C 21	1.61	2.33	0.055
34. BD (1) C 18 - C 22	/431. RY*(4) C 21	0.52	2.22	0.031
34. BD (1) C 18 - C 22	/433. RY*(6) C 21	3.58	2.18	0.079
34. BD (1) C 18 - C 22	/437. RY*(10) C 21	1.98	2.59	0.064
34. BD (1) C 18 - C 22	/438. RY*(11) C 21	2.94	1.55	0.061
34. BD (1) C 18 - C 22	/440. RY*(13) C 21	0.73	3.17	0.043
34. BD (1) C 18 - C 22	/445. RY*(1) C 22	0.51	2.22	0.030
34. BD (1) C 18 - C 22	/447. RY*(3) C 22	1.46	1.59	0.043
34. BD (1) C 18 - C 22	/449. RY*(5) C 22	3.89	2.49	0.088
34. BD (1) C 18 - C 22	/450. RY*(6) C 22	3.05	2.10	0.072
34. BD (1) C 18 - C 22	/451. RY*(7) C 22	13.71	2.40	0.163
34. BD (1) C 18 - C 22	/452. RY*(8) C 22	0.78	3.26	0.045
34. BD (1) C 18 - C 22	/454. RY*(10) C 22	1.85	3.47	0.072
34. BD (1) C 18 - C 22	/455. RY*(11) C 22	1.62	2.34	0.055
34. BD (1) C 18 - C 22	/457. RY*(13) C 22	2.65	2.62	0.075
34. BD (1) C 18 - C 22	/458. RY*(14) C 22	4.15	1.76	0.077
34. BD (1) C 18 - C 22	/462. RY*(1) C 23	471.04	0.99	0.614
34. BD (1) C 18 - C 22	/463. RY*(2) C 23	100.54	1.56	0.355

34. BD (1) C 18 - C 22	/464. RY*(3) C 23	30.27	1.88	0.214
34. BD (1) C 18 - C 22	/465. RY*(4) C 23	239.38	1.82	0.592
34. BD (1) C 18 - C 22	/466. RY*(5) C 23	1177.88	0.51	0.698
34. BD (1) C 18 - C 22	/467. RY*(6) C 23	8.05	2.64	0.131
34. BD (1) C 18 - C 22	/469. RY*(8) C 23	297.92	1.88	0.672
34. BD (1) C 18 - C 22	/471. RY*(10) C 23	460.39	1.67	0.786
34. BD (1) C 18 - C 22	/473. RY*(12) C 23	2.69	2.94	0.080
34. BD (1) C 18 - C 22	/474. RY*(13) C 23	11.71	3.84	0.190
34. BD (1) C 18 - C 22	/475. RY*(14) C 23	1.77	23.39	0.183
34. BD (1) C 18 - C 22	/476. RY*(15) C 23	178.85	2.11	0.552
34. BD (1) C 18 - C 22	/477. RY*(16) C 23	415.37	2.09	0.837
34. BD (1) C 18 - C 22	/478. RY*(17) C 23	5.02	3.45	0.118
34. BD (1) C 18 - C 22	/479. RY*(1) H 24	12.23	1.73	0.131
34. BD (1) C 18 - C 22	/481. RY*(3) H 24	0.83	2.72	0.043
34. BD (1) C 18 - C 22	/483. RY*(5) H 24	5.67	3.67	0.129
34. BD (1) C 18 - C 22	/484. RY*(1) H 25	1.01	1.97	0.040
34. BD (1) C 18 - C 22	/485. RY*(2) H 25	0.65	3.09	0.040
34. BD (1) C 18 - C 22	/491. RY*(3) H 26	0.69	2.68	0.039
34. BD (1) C 18 - C 22	/492. RY*(4) H 26	7.72	3.01	0.137
34. BD (1) C 18 - C 22	/496. RY*(3) H 27	12.85	2.60	0.164
34. BD (1) C 18 - C 22	/497. RY*(4) H 27	755.59	1.19	0.853
34. BD (1) C 18 - C 22	/498. RY*(5) H 27	5.03	3.54	0.120
34. BD (1) C 18 - C 22	/499. RY*(1) H 28	6.75	1.98	0.104
34. BD (1) C 18 - C 22	/500. RY*(2) H 28	5.57	3.01	0.116
34. BD (1) C 18 - C 22	/502. RY*(4) H 28	27.58	2.84	0.251
34. BD (1) C 18 - C 22	/504. RY*(1) H 29	1.79	1.73	0.050
34. BD (1) C 18 - C 22	/505. RY*(2) H 29	0.99	2.70	0.046
34. BD (1) C 18 - C 22	/506. RY*(3) H 29	33.81	3.39	0.304

34. BD (1) C 18 - C 22	/507. RY*(4) H 29	1.94	3.85	0.078
34. BD (1) C 18 - C 22	/508. RY*(5) H 29	1.70	3.21	0.066
34. BD (1) C 18 - C 22	/509. RY*(1) H 30	4.90	1.99	0.089
34. BD (1) C 18 - C 22	/511. RY*(3) H 30	2.99	2.69	0.081
34. BD (1) C 18 - C 22	/516. RY*(3) H 31	0.52	2.68	0.033
34. BD (1) C 18 - C 22	/517. RY*(4) H 31	0.99	3.07	0.050
34. BD (1) C 18 - C 22	/520. RY*(2) H 32	0.57	3.02	0.037
34. BD (1) C 18 - C 22	/528. RY*(1) H 34	6.12	2.49	0.111
34. BD (1) C 18 - C 22	/529. RY*(2) H 34	408.45	1.28	0.649
34. BD (1) C 18 - C 22	/530. RY*(3) H 34	21.06	2.83	0.219
34. BD (1) C 18 - C 22	/531. RY*(4) H 34	3.71	2.90	0.093
34. BD (1) C 18 - C 22	/532. RY*(5) H 34	0.77	3.67	0.048
34. BD (1) C 18 - C 22	/533. RY*(1) H 35	73.92	1.82	0.329
34. BD (1) C 18 - C 22	/534. RY*(2) H 35	200.51	1.98	0.565
34. BD (1) C 18 - C 22	/535. RY*(3) H 35	14.36	2.83	0.181
34. BD (1) C 18 - C 22	/536. RY*(4) H 35	5.96	2.86	0.117
34. BD (1) C 18 - C 22	/537. RY*(5) H 35	2.85	3.77	0.093
34. BD (1) C 18 - C 22	/542. RY*(5) H 36	59.92	2.85	0.371
34. BD (1) C 18 - C 22	/545. BD*(1) S 1 - N 6	0.61	1.22	0.026
34. BD (1) C 18 - C 22	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.53	1.44	0.025
34. BD (1) C 18 - C 22	/554. BD*(1) N 7 - C 18	1.04	1.50	0.036
34. BD (1) C 18 - C 22	/555. BD*(1) N 7 - H 24	1.18	1.47	0.037
34. BD (1) C 18 - C 22	/556. BD*(1) N 8 - C 18	1.51	1.61	0.044
34. BD (1) C 18 - C 22	/562. BD*(1) C 10 - C 11	1.58	1.54	0.044
34. BD (1) C 18 - C 22	/564. BD*(2) C 11 - C 12	0.56	1.10	0.024
34. BD (1) C 18 - C 22	/571. BD*(1) C 14 - C 15	0.50	1.65	0.026
34. BD (1) C 18 - C 22	/572. BD*(1) C 14 - H 27	8.36	1.48	0.099
34. BD (1) C 18 - C 22	/573. BD*(1) C 15 - C 16	1662.80	0.37	0.699

34. BD (1) C 18 - C 22	/574. BD*(2) C 15 - C 16	1.26	1.11	0.037
34. BD (1) C 18 - C 22	/575. BD*(1) C 15 - H 28	0.76	1.53	0.031
34. BD (1) C 18 - C 22	/576. BD*(1) C 18 - C 22	8.95	1.61	0.107
34. BD (1) C 18 - C 22	/578. BD*(2) C 19 - C 20	136.53	0.84	0.326
34. BD (1) C 18 - C 22	/579. BD*(1) C 19 - H 29	830.25	0.55	0.602
34. BD (1) C 18 - C 22	/580. BD*(1) C 20 - C 21	2.60	1.68	0.059
34. BD (1) C 18 - C 22	/581. BD*(1) C 20 - H 30	2.76	1.53	0.058
34. BD (1) C 18 - C 22	/582. BD*(1) C 21 - C 22	10.31	1.67	0.118
34. BD (1) C 18 - C 22	/583. BD*(2) C 21 - C 22	24.05	1.06	0.153
34. BD (1) C 18 - C 22	/586. BD*(1) C 23 - H 34	28.89	4.13	0.310
34. BD (1) C 18 - C 22	/587. BD*(1) C 23 - H 35	45.61	4.41	0.401
34. BD (1) C 18 - C 22	/588. BD*(1) C 23 - H 36	57.18	3.78	0.416
35. BD (1) C 19 - C 20	/208. RY*(1) N 8	0.61	1.32	0.025
35. BD (1) C 19 - C 20	/209. RY*(2) N 8	1.10	2.01	0.042
35. BD (1) C 19 - C 20	/428. RY*(1) C 21	1.02	1.75	0.038
35. BD (1) C 19 - C 20	/429. RY*(2) C 21	1.43	1.95	0.047
35. BD (1) C 19 - C 20	/558. BD*(1) N 8 - C 19	1.39	1.24	0.037
35. BD (1) C 19 - C 20	/579. BD*(1) C 19 - H 29	5.80	0.17	0.028
35. BD (1) C 19 - C 20	/580. BD*(1) C 20 - C 21	2.38	1.30	0.050
35. BD (1) C 19 - C 20	/581. BD*(1) C 20 - H 30	0.90	1.15	0.029
36. BD (2) C 19 - C 20	/210. RY*(3) N 8	0.59	0.86	0.022
36. BD (2) C 19 - C 20	/430. RY*(3) C 21	0.62	1.83	0.033
36. BD (2) C 19 - C 20	/432. RY*(5) C 21	0.66	1.01	0.025
36. BD (2) C 19 - C 20	/462. RY*(1) C 23	0.93	0.16	0.012
36. BD (2) C 19 - C 20	/497. RY*(4) H 27	0.81	0.36	0.017
36. BD (2) C 19 - C 20	/557. BD*(2) N 8 - C 18	15.58	0.25	0.058
36. BD (2) C 19 - C 20	/583. BD*(2) C 21 - C 22	27.23	0.22	0.071
37. BD (1) C 19 - H 29	/ 98. RY*(12) S 1	1.95	0.89	0.037

37. BD (1) C 19 - H 29	/101. RY*(15) S 1	1.29	0.89	0.030
37. BD (1) C 19 - H 29	/112. RY*(5) O 2	0.62	1.24	0.025
37. BD (1) C 19 - H 29	/130. RY*(6) O 3	0.59	1.14	0.023
37. BD (1) C 19 - H 29	/142. RY*(1) O 4	7.01	0.20	0.034
37. BD (1) C 19 - H 29	/200. RY*(10) N 7	0.66	1.54	0.029
37. BD (1) C 19 - H 29	/208. RY*(1) N 8	2.24	1.13	0.045
37. BD (1) C 19 - H 29	/231. RY*(7) C 9	0.83	1.47	0.031
37. BD (1) C 19 - H 29	/233. RY*(9) C 9	0.50	2.69	0.033
37. BD (1) C 19 - H 29	/234. RY*(10) C 9	0.81	1.66	0.033
37. BD (1) C 19 - H 29	/235. RY*(11) C 9	31.09	0.10	0.049
37. BD (1) C 19 - H 29	/237. RY*(13) C 9	1.69	2.10	0.053
37. BD (1) C 19 - H 29	/252. RY*(11) C 10	1.55	0.81	0.032
37. BD (1) C 19 - H 29	/270. RY*(12) C 11	0.70	1.48	0.029
37. BD (1) C 19 - H 29	/373. RY*(13) C 17	0.65	2.16	0.034
37. BD (1) C 19 - H 29	/411. RY*(1) C 20	1.01	1.68	0.037
37. BD (1) C 19 - H 29	/462. RY*(1) C 23	4.25	0.43	0.038
37. BD (1) C 19 - H 29	/463. RY*(2) C 23	0.62	0.99	0.022
37. BD (1) C 19 - H 29	/465. RY*(4) C 23	1.36	1.25	0.037
37. BD (1) C 19 - H 29	/469. RY*(8) C 23	1.70	1.31	0.042
37. BD (1) C 19 - H 29	/471. RY*(10) C 23	2.73	1.10	0.049
37. BD (1) C 19 - H 29	/476. RY*(15) C 23	0.95	1.55	0.034
37. BD (1) C 19 - H 29	/477. RY*(16) C 23	2.27	1.52	0.053
37. BD (1) C 19 - H 29	/497. RY*(4) H 27	5.64	0.63	0.053
37. BD (1) C 19 - H 29	/529. RY*(2) H 34	2.86	0.71	0.040
37. BD (1) C 19 - H 29	/534. RY*(2) H 35	1.12	1.41	0.036
37. BD (1) C 19 - H 29	/556. BD*(1) N 8 - C 18	4.49	1.04	0.061
37. BD (1) C 19 - H 29	/578. BD*(2) C 19 - C 20	1.66	0.27	0.020
37. BD (1) C 19 - H 29	/580. BD*(1) C 20 - C 21	3.85	1.11	0.058

38. BD (1) C 20 - C 21	/ 87. RY*(1) S 1	1.85	1.58	0.049
38. BD (1) C 20 - C 21	/ 88. RY*(2) S 1	1.86	1.51	0.048
38. BD (1) C 20 - C 21	/ 92. RY*(6) S 1	1.60	2.42	0.056
38. BD (1) C 20 - C 21	/ 95. RY*(9) S 1	2.70	1.82	0.063
38. BD (1) C 20 - C 21	/ 96. RY*(10) S 1	2.31	1.70	0.056
38. BD (1) C 20 - C 21	/ 98. RY*(12) S 1	88.06	1.16	0.287
38. BD (1) C 20 - C 21	/100. RY*(14) S 1	17.95	1.50	0.147
38. BD (1) C 20 - C 21	/101. RY*(15) S 1	59.39	1.16	0.236
38. BD (1) C 20 - C 21	/108. RY*(1) O 2	0.68	1.91	0.032
38. BD (1) C 20 - C 21	/109. RY*(2) O 2	0.96	1.61	0.035
38. BD (1) C 20 - C 21	/110. RY*(3) O 2	2.64	1.76	0.061
38. BD (1) C 20 - C 21	/112. RY*(5) O 2	30.34	1.52	0.192
38. BD (1) C 20 - C 21	/113. RY*(6) O 2	0.72	1.75	0.032
38. BD (1) C 20 - C 21	/114. RY*(7) O 2	10.44	2.44	0.143
38. BD (1) C 20 - C 21	/115. RY*(8) O 2	0.87	2.21	0.039
38. BD (1) C 20 - C 21	/117. RY*(10) O 2	0.52	3.63	0.039
38. BD (1) C 20 - C 21	/124. RY*(17) O 2	0.63	5.55	0.053
38. BD (1) C 20 - C 21	/127. RY*(3) O 3	6.28	1.70	0.093
38. BD (1) C 20 - C 21	/128. RY*(4) O 3	0.90	1.42	0.032
38. BD (1) C 20 - C 21	/129. RY*(5) O 3	2.74	1.87	0.064
38. BD (1) C 20 - C 21	/130. RY*(6) O 3	29.94	1.42	0.185
38. BD (1) C 20 - C 21	/131. RY*(7) O 3	3.45	2.66	0.086
38. BD (1) C 20 - C 21	/133. RY*(9) O 3	1.37	3.73	0.064
38. BD (1) C 20 - C 21	/140. RY*(16) O 3	0.74	3.87	0.048
38. BD (1) C 20 - C 21	/142. RY*(1) O 4	178.90	0.48	0.261
38. BD (1) C 20 - C 21	/147. RY*(6) O 4	1.01	2.11	0.041
38. BD (1) C 20 - C 21	/160. RY*(3) O 5	2.38	1.52	0.054
38. BD (1) C 20 - C 21	/164. RY*(7) O 5	0.69	2.40	0.037

38. BD (1) C 20 - C 21	/176. RY*(3) N 6	0.72	1.79	0.032
38. BD (1) C 20 - C 21	/177. RY*(4) N 6	1.20	1.66	0.040
38. BD (1) C 20 - C 21	/180. RY*(7) N 6	2.42	1.89	0.061
38. BD (1) C 20 - C 21	/186. RY*(13) N 6	0.64	3.93	0.045
38. BD (1) C 20 - C 21	/188. RY*(15) N 6	1.10	4.72	0.065
38. BD (1) C 20 - C 21	/190. RY*(17) N 6	12.52	32.31	0.571
38. BD (1) C 20 - C 21	/191. RY*(1) N 7	10.21	1.38	0.106
38. BD (1) C 20 - C 21	/195. RY*(5) N 7	22.09	1.33	0.154
38. BD (1) C 20 - C 21	/196. RY*(6) N 7	0.64	2.02	0.032
38. BD (1) C 20 - C 21	/197. RY*(7) N 7	1.10	2.65	0.048
38. BD (1) C 20 - C 21	/198. RY*(8) N 7	7.09	2.34	0.116
38. BD (1) C 20 - C 21	/199. RY*(9) N 7	12.81	3.12	0.179
38. BD (1) C 20 - C 21	/200. RY*(10) N 7	29.73	1.81	0.208
38. BD (1) C 20 - C 21	/204. RY*(14) N 7	1.10	3.55	0.056
38. BD (1) C 20 - C 21	/208. RY*(1) N 8	7.74	1.41	0.094
38. BD (1) C 20 - C 21	/212. RY*(5) N 8	3.35	2.31	0.079
38. BD (1) C 20 - C 21	/215. RY*(8) N 8	0.54	2.28	0.031
38. BD (1) C 20 - C 21	/216. RY*(9) N 8	3.02	3.63	0.094
38. BD (1) C 20 - C 21	/217. RY*(10) N 8	1.80	1.65	0.049
38. BD (1) C 20 - C 21	/226. RY*(2) C 9	1.26	1.70	0.041
38. BD (1) C 20 - C 21	/227. RY*(3) C 9	0.72	1.79	0.032
38. BD (1) C 20 - C 21	/228. RY*(4) C 9	1.22	2.03	0.045
38. BD (1) C 20 - C 21	/229. RY*(5) C 9	1.67	2.66	0.060
38. BD (1) C 20 - C 21	/230. RY*(6) C 9	5.40	1.89	0.091
38. BD (1) C 20 - C 21	/231. RY*(7) C 9	41.70	1.74	0.242
38. BD (1) C 20 - C 21	/232. RY*(8) C 9	20.95	2.06	0.186
38. BD (1) C 20 - C 21	/233. RY*(9) C 9	25.72	2.96	0.248
38. BD (1) C 20 - C 21	/234. RY*(10) C 9	41.80	1.94	0.255

38. BD (1) C 20 - C 21	/235. RY*(11) C 9	492.38	0.37	0.384
38. BD (1) C 20 - C 21	/236. RY*(12) C 9	3.13	2.83	0.084
38. BD (1) C 20 - C 21	/237. RY*(13) C 9	89.18	2.37	0.413
38. BD (1) C 20 - C 21	/238. RY*(14) C 9	2.81	2.93	0.081
38. BD (1) C 20 - C 21	/239. RY*(15) C 9	2.40	3.21	0.079
38. BD (1) C 20 - C 21	/240. RY*(16) C 9	0.74	4.06	0.049
38. BD (1) C 20 - C 21	/241. RY*(17) C 9	1.67	20.22	0.165
38. BD (1) C 20 - C 21	/242. RY*(1) C 10	17.17	1.65	0.151
38. BD (1) C 20 - C 21	/244. RY*(3) C 10	0.93	2.36	0.042
38. BD (1) C 20 - C 21	/245. RY*(4) C 10	3.37	2.32	0.079
38. BD (1) C 20 - C 21	/246. RY*(5) C 10	0.98	1.82	0.038
38. BD (1) C 20 - C 21	/250. RY*(9) C 10	0.94	2.51	0.044
38. BD (1) C 20 - C 21	/251. RY*(10) C 10	2.82	2.08	0.069
38. BD (1) C 20 - C 21	/252. RY*(11) C 10	68.26	1.08	0.244
38. BD (1) C 20 - C 21	/253. RY*(12) C 10	2.83	2.30	0.072
38. BD (1) C 20 - C 21	/255. RY*(14) C 10	1.06	2.43	0.046
38. BD (1) C 20 - C 21	/256. RY*(15) C 10	2.94	3.79	0.095
38. BD (1) C 20 - C 21	/260. RY*(2) C 11	2.79	2.06	0.068
38. BD (1) C 20 - C 21	/261. RY*(3) C 11	0.54	1.60	0.026
38. BD (1) C 20 - C 21	/263. RY*(5) C 11	1.85	2.08	0.056
38. BD (1) C 20 - C 21	/265. RY*(7) C 11	4.06	2.40	0.088
38. BD (1) C 20 - C 21	/266. RY*(8) C 11	1.01	2.18	0.042
38. BD (1) C 20 - C 21	/267. RY*(9) C 11	18.18	2.00	0.171
38. BD (1) C 20 - C 21	/268. RY*(10) C 11	10.08	2.69	0.148
38. BD (1) C 20 - C 21	/270. RY*(12) C 11	36.13	1.76	0.226
38. BD (1) C 20 - C 21	/273. RY*(15) C 11	10.50	2.40	0.143
38. BD (1) C 20 - C 21	/274. RY*(16) C 11	4.51	3.42	0.111
38. BD (1) C 20 - C 21	/279. RY*(4) C 12	6.12	1.75	0.093

38. BD (1) C 20 - C 21	/280. RY*(5) C 12	1.55	1.65	0.045
38. BD (1) C 20 - C 21	/281. RY*(6) C 12	3.67	1.94	0.076
38. BD (1) C 20 - C 21	/284. RY*(9) C 12	0.84	3.11	0.046
38. BD (1) C 20 - C 21	/285. RY*(10) C 12	1.90	3.41	0.072
38. BD (1) C 20 - C 21	/286. RY*(11) C 12	18.21	1.59	0.153
38. BD (1) C 20 - C 21	/287. RY*(12) C 12	3.37	2.68	0.085
38. BD (1) C 20 - C 21	/288. RY*(13) C 12	2.05	2.14	0.060
38. BD (1) C 20 - C 21	/296. RY*(4) C 13	0.51	1.74	0.027
38. BD (1) C 20 - C 21	/298. RY*(6) C 13	2.37	1.81	0.059
38. BD (1) C 20 - C 21	/299. RY*(7) C 13	3.89	2.50	0.089
38. BD (1) C 20 - C 21	/300. RY*(8) C 13	0.72	3.15	0.043
38. BD (1) C 20 - C 21	/301. RY*(9) C 13	0.63	2.74	0.037
38. BD (1) C 20 - C 21	/318. RY*(9) C 14	0.90	2.73	0.044
38. BD (1) C 20 - C 21	/319. RY*(10) C 14	1.04	1.98	0.041
38. BD (1) C 20 - C 21	/326. RY*(17) C 14	1.49	2.42	0.054
38. BD (1) C 20 - C 21	/327. RY*(1) C 15	0.77	1.91	0.034
38. BD (1) C 20 - C 21	/330. RY*(4) C 15	5.27	1.65	0.084
38. BD (1) C 20 - C 21	/331. RY*(5) C 15	0.58	2.09	0.031
38. BD (1) C 20 - C 21	/334. RY*(8) C 15	2.36	1.76	0.058
38. BD (1) C 20 - C 21	/338. RY*(12) C 15	1.57	1.55	0.044
38. BD (1) C 20 - C 21	/339. RY*(13) C 15	1.22	2.22	0.047
38. BD (1) C 20 - C 21	/340. RY*(14) C 15	2.02	3.30	0.073
38. BD (1) C 20 - C 21	/345. RY*(2) C 16	1.46	1.76	0.045
38. BD (1) C 20 - C 21	/348. RY*(5) C 16	15.07	2.11	0.160
38. BD (1) C 20 - C 21	/351. RY*(8) C 16	2.40	2.27	0.066
38. BD (1) C 20 - C 21	/352. RY*(9) C 16	2.45	2.48	0.070
38. BD (1) C 20 - C 21	/354. RY*(11) C 16	1.44	3.70	0.066
38. BD (1) C 20 - C 21	/355. RY*(12) C 16	0.90	4.33	0.056

38. BD (1) C 20 - C 21	/357. RY*(14) C 16	11.14	2.50	0.150
38. BD (1) C 20 - C 21	/358. RY*(15) C 16	14.74	2.14	0.159
38. BD (1) C 20 - C 21	/361. RY*(1) C 17	0.57	1.82	0.029
38. BD (1) C 20 - C 21	/362. RY*(2) C 17	0.76	2.25	0.037
38. BD (1) C 20 - C 21	/365. RY*(5) C 17	12.06	1.73	0.129
38. BD (1) C 20 - C 21	/367. RY*(7) C 17	0.97	2.79	0.047
38. BD (1) C 20 - C 21	/368. RY*(8) C 17	2.54	1.78	0.060
38. BD (1) C 20 - C 21	/370. RY*(10) C 17	13.19	3.92	0.204
38. BD (1) C 20 - C 21	/371. RY*(11) C 17	6.08	2.58	0.112
38. BD (1) C 20 - C 21	/372. RY*(12) C 17	5.31	3.73	0.126
38. BD (1) C 20 - C 21	/373. RY*(13) C 17	28.72	2.43	0.237
38. BD (1) C 20 - C 21	/382. RY*(6) C 18	2.09	1.94	0.057
38. BD (1) C 20 - C 21	/383. RY*(7) C 18	19.51	1.53	0.155
38. BD (1) C 20 - C 21	/385. RY*(9) C 18	2.06	2.66	0.066
38. BD (1) C 20 - C 21	/386. RY*(10) C 18	3.32	2.76	0.086
38. BD (1) C 20 - C 21	/387. RY*(11) C 18	4.90	4.72	0.136
38. BD (1) C 20 - C 21	/388. RY*(12) C 18	3.42	3.00	0.091
38. BD (1) C 20 - C 21	/389. RY*(13) C 18	0.91	3.62	0.052
38. BD (1) C 20 - C 21	/392. RY*(16) C 18	22.74	1.18	0.147
38. BD (1) C 20 - C 21	/394. RY*(1) C 19	1.11	1.84	0.040
38. BD (1) C 20 - C 21	/395. RY*(2) C 19	16.08	1.60	0.144
38. BD (1) C 20 - C 21	/396. RY*(3) C 19	0.59	2.26	0.033
38. BD (1) C 20 - C 21	/405. RY*(12) C 19	1.22	1.73	0.041
38. BD (1) C 20 - C 21	/413. RY*(3) C 20	0.80	1.32	0.029
38. BD (1) C 20 - C 21	/417. RY*(7) C 20	2.52	2.57	0.072
38. BD (1) C 20 - C 21	/421. RY*(11) C 20	0.53	2.38	0.032
38. BD (1) C 20 - C 21	/427. RY*(17) C 20	0.52	2.78	0.034
38. BD (1) C 20 - C 21	/433. RY*(6) C 21	0.67	1.89	0.032

38. BD (1) C 20 - C 21	/437. RY*(10) C 21	0.60	2.30	0.033
38. BD (1) C 20 - C 21	/438. RY*(11) C 21	0.80	1.25	0.028
38. BD (1) C 20 - C 21	/445. RY*(1) C 22	2.22	1.93	0.059
38. BD (1) C 20 - C 21	/449. RY*(5) C 22	1.02	2.20	0.043
38. BD (1) C 20 - C 21	/450. RY*(6) C 22	0.95	1.80	0.037
38. BD (1) C 20 - C 21	/451. RY*(7) C 22	4.85	2.11	0.091
38. BD (1) C 20 - C 21	/457. RY*(13) C 22	0.67	2.33	0.035
38. BD (1) C 20 - C 21	/458. RY*(14) C 22	1.13	1.46	0.036
38. BD (1) C 20 - C 21	/462. RY*(1) C 23	155.98	0.70	0.296
38. BD (1) C 20 - C 21	/463. RY*(2) C 23	29.10	1.26	0.172
38. BD (1) C 20 - C 21	/464. RY*(3) C 23	8.31	1.59	0.103
38. BD (1) C 20 - C 21	/465. RY*(4) C 23	67.07	1.52	0.287
38. BD (1) C 20 - C 21	/466. RY*(5) C 23	653.80	0.22	0.340
38. BD (1) C 20 - C 21	/467. RY*(6) C 23	2.06	2.35	0.062
38. BD (1) C 20 - C 21	/469. RY*(8) C 23	83.92	1.59	0.327
38. BD (1) C 20 - C 21	/471. RY*(10) C 23	131.13	1.37	0.380
38. BD (1) C 20 - C 21	/473. RY*(12) C 23	0.71	2.65	0.039
38. BD (1) C 20 - C 21	/474. RY*(13) C 23	2.95	3.55	0.092
38. BD (1) C 20 - C 21	/476. RY*(15) C 23	48.29	1.82	0.266
38. BD (1) C 20 - C 21	/477. RY*(16) C 23	114.97	1.80	0.408
38. BD (1) C 20 - C 21	/478. RY*(17) C 23	1.32	3.15	0.058
38. BD (1) C 20 - C 21	/479. RY*(1) H 24	3.56	1.44	0.064
38. BD (1) C 20 - C 21	/483. RY*(5) H 24	1.58	3.38	0.066
38. BD (1) C 20 - C 21	/492. RY*(4) H 26	2.02	2.72	0.066
38. BD (1) C 20 - C 21	/496. RY*(3) H 27	3.41	2.31	0.080
38. BD (1) C 20 - C 21	/497. RY*(4) H 27	236.04	0.90	0.414
38. BD (1) C 20 - C 21	/498. RY*(5) H 27	1.29	3.25	0.058
38. BD (1) C 20 - C 21	/499. RY*(1) H 28	1.86	1.69	0.050

38. BD (1) C 20 - C 21	/500. RY*(2) H 28	1.45	2.72	0.056
38. BD (1) C 20 - C 21	/502. RY*(4) H 28	7.20	2.55	0.121
38. BD (1) C 20 - C 21	/506. RY*(3) H 29	10.13	3.09	0.159
38. BD (1) C 20 - C 21	/507. RY*(4) H 29	0.77	3.55	0.047
38. BD (1) C 20 - C 21	/509. RY*(1) H 30	0.62	1.70	0.029
38. BD (1) C 20 - C 21	/511. RY*(3) H 30	0.92	2.40	0.042
38. BD (1) C 20 - C 21	/528. RY*(1) H 34	1.64	2.20	0.054
38. BD (1) C 20 - C 21	/529. RY*(2) H 34	124.63	0.99	0.315
38. BD (1) C 20 - C 21	/530. RY*(3) H 34	5.54	2.53	0.106
38. BD (1) C 20 - C 21	/531. RY*(4) H 34	0.95	2.61	0.045
38. BD (1) C 20 - C 21	/533. RY*(1) H 35	20.66	1.52	0.159
38. BD (1) C 20 - C 21	/534. RY*(2) H 35	55.38	1.68	0.274
38. BD (1) C 20 - C 21	/535. RY*(3) H 35	3.65	2.54	0.086
38. BD (1) C 20 - C 21	/536. RY*(4) H 35	1.61	2.56	0.058
38. BD (1) C 20 - C 21	/537. RY*(5) H 35	0.71	3.48	0.044
38. BD (1) C 20 - C 21	/542. RY*(5) H 36	15.48	2.55	0.178
38. BD (1) C 20 - C 21	/572. BD*(1) C 14 - H 27	2.45	1.18	0.048
38. BD (1) C 20 - C 21	/573. BD*(1) C 15 - C 16	1912.52	0.08	0.339
38. BD (1) C 20 - C 21	/576. BD*(1) C 18 - C 22	2.53	1.32	0.052
38. BD (1) C 20 - C 21	/577. BD*(1) C 19 - C 20	1.31	1.36	0.038
38. BD (1) C 20 - C 21	/578. BD*(2) C 19 - C 20	49.61	0.54	0.158
38. BD (1) C 20 - C 21	/579. BD*(1) C 19 - H 29	574.60	0.25	0.341
38. BD (1) C 20 - C 21	/580. BD*(1) C 20 - C 21	0.63	1.39	0.026
38. BD (1) C 20 - C 21	/581. BD*(1) C 20 - H 30	3.67	1.24	0.060
38. BD (1) C 20 - C 21	/582. BD*(1) C 21 - C 22	6.37	1.38	0.084
38. BD (1) C 20 - C 21	/583. BD*(2) C 21 - C 22	7.73	0.76	0.074
38. BD (1) C 20 - C 21	/586. BD*(1) C 23 - H 34	6.18	3.84	0.138
38. BD (1) C 20 - C 21	/587. BD*(1) C 23 - H 35	11.09	4.12	0.191

38. BD (1) C 20 - C 21	/588. BD*(1) C 23 - H 36	16.51	3.48	0.214
39. BD (1) C 20 - H 30	/ 98. RY*(12) S 1	3.69	0.89	0.051
39. BD (1) C 20 - H 30	/100. RY*(14) S 1	0.68	1.23	0.026
39. BD (1) C 20 - H 30	/101. RY*(15) S 1	2.53	0.89	0.043
39. BD (1) C 20 - H 30	/112. RY*(5) O 2	1.17	1.25	0.034
39. BD (1) C 20 - H 30	/130. RY*(6) O 3	1.20	1.15	0.033
39. BD (1) C 20 - H 30	/142. RY*(1) O 4	13.26	0.21	0.047
39. BD (1) C 20 - H 30	/191. RY*(1) N 7	0.55	1.11	0.022
39. BD (1) C 20 - H 30	/195. RY*(5) N 7	1.28	1.06	0.033
39. BD (1) C 20 - H 30	/200. RY*(10) N 7	1.10	1.54	0.037
39. BD (1) C 20 - H 30	/231. RY*(7) C 9	1.57	1.47	0.043
39. BD (1) C 20 - H 30	/232. RY*(8) C 9	0.75	1.79	0.033
39. BD (1) C 20 - H 30	/233. RY*(9) C 9	0.91	2.69	0.044
39. BD (1) C 20 - H 30	/234. RY*(10) C 9	1.55	1.67	0.046
39. BD (1) C 20 - H 30	/235. RY*(11) C 9	58.58	0.10	0.069
39. BD (1) C 20 - H 30	/237. RY*(13) C 9	3.21	2.10	0.074
39. BD (1) C 20 - H 30	/242. RY*(1) C 10	0.65	1.38	0.027
39. BD (1) C 20 - H 30	/252. RY*(11) C 10	2.90	0.81	0.044
39. BD (1) C 20 - H 30	/267. RY*(9) C 11	0.68	1.73	0.031
39. BD (1) C 20 - H 30	/270. RY*(12) C 11	1.37	1.49	0.040
39. BD (1) C 20 - H 30	/286. RY*(11) C 12	0.70	1.32	0.027
39. BD (1) C 20 - H 30	/348. RY*(5) C 16	0.55	1.84	0.029
39. BD (1) C 20 - H 30	/358. RY*(15) C 16	0.56	1.87	0.029
39. BD (1) C 20 - H 30	/373. RY*(13) C 17	1.05	2.16	0.043
39. BD (1) C 20 - H 30	/383. RY*(7) C 18	0.74	1.26	0.027
39. BD (1) C 20 - H 30	/392. RY*(16) C 18	0.97	0.91	0.027
39. BD (1) C 20 - H 30	/428. RY*(1) C 21	1.16	1.57	0.038
39. BD (1) C 20 - H 30	/462. RY*(1) C 23	8.13	0.43	0.053

39. BD (1) C 20 - H 30	/463. RY*(2) C 23	1.17	0.99	0.031
39. BD (1) C 20 - H 30	/465. RY*(4) C 23	2.62	1.25	0.051
39. BD (1) C 20 - H 30	/469. RY*(8) C 23	3.17	1.32	0.058
39. BD (1) C 20 - H 30	/471. RY*(10) C 23	5.27	1.10	0.068
39. BD (1) C 20 - H 30	/476. RY*(15) C 23	1.81	1.55	0.048
39. BD (1) C 20 - H 30	/477. RY*(16) C 23	4.30	1.53	0.073
39. BD (1) C 20 - H 30	/497. RY*(4) H 27	10.83	0.63	0.074
39. BD (1) C 20 - H 30	/529. RY*(2) H 34	5.56	0.72	0.057
39. BD (1) C 20 - H 30	/533. RY*(1) H 35	0.84	1.25	0.029
39. BD (1) C 20 - H 30	/534. RY*(2) H 35	2.12	1.41	0.049
39. BD (1) C 20 - H 30	/542. RY*(5) H 36	0.57	2.28	0.032
39. BD (1) C 20 - H 30	/558. BD*(1) N 8 - C 19	4.44	1.06	0.061
39. BD (1) C 20 - H 30	/578. BD*(2) C 19 - C 20	3.23	0.27	0.029
39. BD (1) C 20 - H 30	/580. BD*(1) C 20 - C 21	0.95	1.12	0.029
39. BD (1) C 20 - H 30	/582. BD*(1) C 21 - C 22	4.15	1.11	0.061
39. BD (1) C 20 - H 30	/588. BD*(1) C 23 - H 36	0.56	3.21	0.038
40. BD (1) C 21 - C 22	/235. RY*(11) C 9	1.01	0.28	0.015
40. BD (1) C 21 - C 22	/377. RY*(1) C 18	1.76	1.98	0.053
40. BD (1) C 21 - C 22	/411. RY*(1) C 20	1.40	1.86	0.046
40. BD (1) C 21 - C 22	/412. RY*(2) C 20	0.94	2.03	0.039
40. BD (1) C 21 - C 22	/466. RY*(5) C 23	1.76	0.13	0.014
40. BD (1) C 21 - C 22	/554. BD*(1) N 7 - C 18	4.45	1.12	0.063
40. BD (1) C 21 - C 22	/576. BD*(1) C 18 - C 22	2.51	1.23	0.050
40. BD (1) C 21 - C 22	/579. BD*(1) C 19 - H 29	0.55	0.17	0.009
40. BD (1) C 21 - C 22	/580. BD*(1) C 20 - C 21	2.81	1.30	0.054
40. BD (1) C 21 - C 22	/581. BD*(1) C 20 - H 30	2.48	1.15	0.048
41. BD (2) C 21 - C 22	/ 98. RY*(12) S 1	2.69	0.63	0.040
41. BD (2) C 21 - C 22	/101. RY*(15) S 1	1.83	0.63	0.033

41. BD (2) C 21 - C 22 /112. RY*(5) O 2 0.78 0.98 0.027

41. BD (2) C 21 - C 22 /130. RY*(6) O 3 0.78 0.88 0.026

41. BD (2) C 21 - C 22 /195. RY*(5) N 7 0.65 0.79 0.022

41. BD (2) C 21 - C 22 /200. RY*(10) N 7 0.75 1.28 0.030

41. BD (2) C 21 - C 22 /231. RY*(7) C 9 1.02 1.21 0.034

41. BD (2) C 21 - C 22 /233. RY*(9) C 9 0.52 2.43 0.035

41. BD (2) C 21 - C 22 /234. RY*(10) C 9 0.95 1.40 0.036

41. BD (2) C 21 - C 22 /237. RY*(13) C 9 1.95 1.84 0.059

41. BD (2) C 21 - C 22 /252. RY*(11) C 10 2.29 0.55 0.035

41. BD (2) C 21 - C 22 /270. RY*(12) C 11 0.88 1.22 0.032

41. BD (2) C 21 - C 22 /373. RY*(13) C 17 0.64 1.90 0.034

41. BD (2) C 21 - C 22 /383. RY*(7) C 18 3.21 1.00 0.055

41. BD (2) C 21 - C 22 /392. RY*(16) C 18 0.98 0.64 0.025

41. BD (2) C 21 - C 22 /413. RY*(3) C 20 2.26 0.78 0.041

41. BD (2) C 21 - C 22 /462. RY*(1) C 23 11.05 0.17 0.042

41. BD (2) C 21 - C 22 /463. RY*(2) C 23 0.81 0.73 0.024

41. BD (2) C 21 - C 22 /465. RY*(4) C 23 1.74 0.99 0.040

41. BD (2) C 21 - C 22 /469. RY*(8) C 23 2.28 1.05 0.048

41. BD (2) C 21 - C 22 /471. RY*(10) C 23 3.50 0.84 0.053

41. BD (2) C 21 - C 22 /476. RY*(15) C 23 1.09 1.28 0.037

41. BD (2) C 21 - C 22 /477. RY*(16) C 23 3.00 1.26 0.060

41. BD (2) C 21 - C 22 /497. RY*(4) H 27 10.01 0.37 0.059

41. BD (2) C 21 - C 22 /529. RY*(2) H 34 4.69 0.45 0.045

41. BD (2) C 21 - C 22 /534. RY*(2) H 35 1.39 1.15 0.039

41. BD (2) C 21 - C 22 /557. BD*(2) N 8 - C 18 28.93 0.26 0.079

42. BD (1) C 21 - H 31 / 87. RY*(1) S 1 3.30 1.46 0.063

42. BD (1) C 21 - H 31 / 88. RY*(2) S 1 3.51 1.39 0.063

42. BD (1) C 21 - H 31 / 89. RY*(3) S 1 0.69 1.55 0.029

42. BD (1) C 21 - H 31	/ 90. RY*(4) S 1	0.79	1.49	0.031
42. BD (1) C 21 - H 31	/ 92. RY*(6) S 1	2.87	2.30	0.073
42. BD (1) C 21 - H 31	/ 95. RY*(9) S 1	4.78	1.70	0.081
42. BD (1) C 21 - H 31	/ 96. RY*(10) S 1	4.32	1.58	0.074
42. BD (1) C 21 - H 31	/ 98. RY*(12) S 1	171.58	1.04	0.379
42. BD (1) C 21 - H 31	/100. RY*(14) S 1	34.15	1.38	0.195
42. BD (1) C 21 - H 31	/101. RY*(15) S 1	113.46	1.04	0.309
42. BD (1) C 21 - H 31	/108. RY*(1) O 2	1.35	1.79	0.044
42. BD (1) C 21 - H 31	/109. RY*(2) O 2	1.87	1.49	0.047
42. BD (1) C 21 - H 31	/110. RY*(3) O 2	5.09	1.64	0.082
42. BD (1) C 21 - H 31	/112. RY*(5) O 2	57.02	1.39	0.253
42. BD (1) C 21 - H 31	/113. RY*(6) O 2	1.30	1.63	0.041
42. BD (1) C 21 - H 31	/114. RY*(7) O 2	19.00	2.32	0.188
42. BD (1) C 21 - H 31	/115. RY*(8) O 2	1.64	2.09	0.052
42. BD (1) C 21 - H 31	/116. RY*(9) O 2	0.83	3.54	0.049
42. BD (1) C 21 - H 31	/117. RY*(10) O 2	0.93	3.51	0.051
42. BD (1) C 21 - H 31	/122. RY*(15) O 2	0.82	3.36	0.047
42. BD (1) C 21 - H 31	/124. RY*(17) O 2	1.10	5.43	0.069
42. BD (1) C 21 - H 31	/125. RY*(1) O 3	0.52	1.85	0.028
42. BD (1) C 21 - H 31	/127. RY*(3) O 3	11.47	1.58	0.121
42. BD (1) C 21 - H 31	/128. RY*(4) O 3	1.71	1.30	0.042
42. BD (1) C 21 - H 31	/129. RY*(5) O 3	4.70	1.75	0.081
42. BD (1) C 21 - H 31	/130. RY*(6) O 3	55.61	1.30	0.241
42. BD (1) C 21 - H 31	/131. RY*(7) O 3	6.05	2.54	0.111
42. BD (1) C 21 - H 31	/133. RY*(9) O 3	2.40	3.61	0.084
42. BD (1) C 21 - H 31	/140. RY*(16) O 3	1.29	3.75	0.062
42. BD (1) C 21 - H 31	/142. RY*(1) O 4	409.95	0.36	0.342
42. BD (1) C 21 - H 31	/147. RY*(6) O 4	1.83	1.99	0.054

42. BD (1) C 21 - H 31	/160. RY*(3) O 5	4.38	1.40	0.070
42. BD (1) C 21 - H 31	/162. RY*(5) O 5	0.55	2.22	0.031
42. BD (1) C 21 - H 31	/163. RY*(6) O 5	0.53	1.99	0.029
42. BD (1) C 21 - H 31	/164. RY*(7) O 5	1.23	2.28	0.048
42. BD (1) C 21 - H 31	/176. RY*(3) N 6	1.07	1.67	0.038
42. BD (1) C 21 - H 31	/177. RY*(4) N 6	2.06	1.54	0.050
42. BD (1) C 21 - H 31	/180. RY*(7) N 6	4.20	1.77	0.077
42. BD (1) C 21 - H 31	/186. RY*(13) N 6	1.02	3.81	0.056
42. BD (1) C 21 - H 31	/188. RY*(15) N 6	1.90	4.60	0.084
42. BD (1) C 21 - H 31	/190. RY*(17) N 6	21.69	32.19	0.750
42. BD (1) C 21 - H 31	/191. RY*(1) N 7	20.28	1.26	0.143
42. BD (1) C 21 - H 31	/192. RY*(2) N 7	0.53	1.41	0.025
42. BD (1) C 21 - H 31	/195. RY*(5) N 7	41.88	1.21	0.202
42. BD (1) C 21 - H 31	/196. RY*(6) N 7	0.80	1.90	0.035
42. BD (1) C 21 - H 31	/197. RY*(7) N 7	1.69	2.53	0.059
42. BD (1) C 21 - H 31	/198. RY*(8) N 7	13.26	2.22	0.154
42. BD (1) C 21 - H 31	/199. RY*(9) N 7	23.02	3.00	0.236
42. BD (1) C 21 - H 31	/200. RY*(10) N 7	55.35	1.69	0.275
42. BD (1) C 21 - H 31	/202. RY*(12) N 7	0.69	2.86	0.040
42. BD (1) C 21 - H 31	/204. RY*(14) N 7	1.80	3.43	0.071
42. BD (1) C 21 - H 31	/208. RY*(1) N 8	16.24	1.29	0.130
42. BD (1) C 21 - H 31	/212. RY*(5) N 8	7.12	2.19	0.112
42. BD (1) C 21 - H 31	/213. RY*(6) N 8	0.56	1.99	0.030
42. BD (1) C 21 - H 31	/214. RY*(7) N 8	0.74	1.91	0.034
42. BD (1) C 21 - H 31	/215. RY*(8) N 8	0.72	2.16	0.035
42. BD (1) C 21 - H 31	/216. RY*(9) N 8	5.62	3.51	0.126
42. BD (1) C 21 - H 31	/217. RY*(10) N 8	3.49	1.53	0.066
42. BD (1) C 21 - H 31	/226. RY*(2) C 9	2.30	1.58	0.054

42. BD (1) C 21 - H 31	/227. RY*(3) C 9	1.19	1.67	0.040
42. BD (1) C 21 - H 31	/228. RY*(4) C 9	2.18	1.91	0.058
42. BD (1) C 21 - H 31	/229. RY*(5) C 9	3.11	2.54	0.080
42. BD (1) C 21 - H 31	/230. RY*(6) C 9	10.37	1.77	0.121
42. BD (1) C 21 - H 31	/231. RY*(7) C 9	76.93	1.62	0.317
42. BD (1) C 21 - H 31	/232. RY*(8) C 9	38.38	1.94	0.245
42. BD (1) C 21 - H 31	/233. RY*(9) C 9	45.83	2.84	0.324
42. BD (1) C 21 - H 31	/234. RY*(10) C 9	75.10	1.82	0.331
42. BD (1) C 21 - H 31	/235. RY*(11) C 9	1251.43	0.25	0.503
42. BD (1) C 21 - H 31	/236. RY*(12) C 9	5.74	2.71	0.112
42. BD (1) C 21 - H 31	/237. RY*(13) C 9	162.94	2.25	0.544
42. BD (1) C 21 - H 31	/238. RY*(14) C 9	5.42	2.81	0.111
42. BD (1) C 21 - H 31	/239. RY*(15) C 9	4.19	3.09	0.102
42. BD (1) C 21 - H 31	/240. RY*(16) C 9	1.29	3.94	0.064
42. BD (1) C 21 - H 31	/241. RY*(17) C 9	2.84	20.10	0.214
42. BD (1) C 21 - H 31	/242. RY*(1) C 10	31.85	1.53	0.198
42. BD (1) C 21 - H 31	/244. RY*(3) C 10	1.66	2.24	0.055
42. BD (1) C 21 - H 31	/245. RY*(4) C 10	6.21	2.20	0.105
42. BD (1) C 21 - H 31	/246. RY*(5) C 10	1.85	1.70	0.050
42. BD (1) C 21 - H 31	/250. RY*(9) C 10	1.71	2.39	0.057
42. BD (1) C 21 - H 31	/251. RY*(10) C 10	5.25	1.96	0.091
42. BD (1) C 21 - H 31	/252. RY*(11) C 10	133.31	0.96	0.321
42. BD (1) C 21 - H 31	/253. RY*(12) C 10	5.31	2.18	0.097
42. BD (1) C 21 - H 31	/255. RY*(14) C 10	1.89	2.31	0.059
42. BD (1) C 21 - H 31	/256. RY*(15) C 10	5.24	3.67	0.124
42. BD (1) C 21 - H 31	/258. RY*(17) C 10	0.54	3.35	0.038
42. BD (1) C 21 - H 31	/260. RY*(2) C 11	5.14	1.94	0.089
42. BD (1) C 21 - H 31	/261. RY*(3) C 11	1.04	1.48	0.035

42. BD (1) C 21 - H 31	/262. RY*(4) C 11	0.50	1.75	0.027
42. BD (1) C 21 - H 31	/263. RY*(5) C 11	3.37	1.96	0.073
42. BD (1) C 21 - H 31	/264. RY*(6) C 11	0.77	1.88	0.034
42. BD (1) C 21 - H 31	/265. RY*(7) C 11	7.47	2.28	0.117
42. BD (1) C 21 - H 31	/266. RY*(8) C 11	1.96	2.06	0.057
42. BD (1) C 21 - H 31	/267. RY*(9) C 11	33.37	1.88	0.224
42. BD (1) C 21 - H 31	/268. RY*(10) C 11	18.56	2.57	0.196
42. BD (1) C 21 - H 31	/270. RY*(12) C 11	67.79	1.63	0.299
42. BD (1) C 21 - H 31	/272. RY*(14) C 11	0.73	4.98	0.054
42. BD (1) C 21 - H 31	/273. RY*(15) C 11	19.58	2.28	0.190
42. BD (1) C 21 - H 31	/274. RY*(16) C 11	8.20	3.30	0.148
42. BD (1) C 21 - H 31	/278. RY*(3) C 12	0.63	1.21	0.025
42. BD (1) C 21 - H 31	/279. RY*(4) C 12	11.44	1.63	0.123
42. BD (1) C 21 - H 31	/280. RY*(5) C 12	2.89	1.53	0.060
42. BD (1) C 21 - H 31	/281. RY*(6) C 12	6.82	1.82	0.100
42. BD (1) C 21 - H 31	/284. RY*(9) C 12	1.50	2.99	0.060
42. BD (1) C 21 - H 31	/285. RY*(10) C 12	3.43	3.29	0.095
42. BD (1) C 21 - H 31	/286. RY*(11) C 12	34.50	1.47	0.202
42. BD (1) C 21 - H 31	/287. RY*(12) C 12	6.16	2.56	0.113
42. BD (1) C 21 - H 31	/288. RY*(13) C 12	3.76	2.02	0.078
42. BD (1) C 21 - H 31	/296. RY*(4) C 13	0.97	1.62	0.036
42. BD (1) C 21 - H 31	/298. RY*(6) C 13	4.39	1.69	0.077
42. BD (1) C 21 - H 31	/299. RY*(7) C 13	7.16	2.38	0.117
42. BD (1) C 21 - H 31	/300. RY*(8) C 13	1.30	3.03	0.056
42. BD (1) C 21 - H 31	/301. RY*(9) C 13	1.16	2.62	0.049
42. BD (1) C 21 - H 31	/302. RY*(10) C 13	0.79	2.77	0.042
42. BD (1) C 21 - H 31	/303. RY*(11) C 13	0.73	1.17	0.026
42. BD (1) C 21 - H 31	/305. RY*(13) C 13	0.83	2.76	0.043

42. BD (1) C 21 - H 31	/309. RY*(17) C 13	0.79	2.28	0.038
42. BD (1) C 21 - H 31	/318. RY*(9) C 14	1.58	2.61	0.058
42. BD (1) C 21 - H 31	/319. RY*(10) C 14	1.89	1.86	0.053
42. BD (1) C 21 - H 31	/323. RY*(14) C 14	0.73	2.01	0.034
42. BD (1) C 21 - H 31	/326. RY*(17) C 14	2.70	2.30	0.071
42. BD (1) C 21 - H 31	/327. RY*(1) C 15	1.34	1.79	0.044
42. BD (1) C 21 - H 31	/330. RY*(4) C 15	9.72	1.53	0.109
42. BD (1) C 21 - H 31	/331. RY*(5) C 15	1.09	1.97	0.042
42. BD (1) C 21 - H 31	/334. RY*(8) C 15	4.29	1.64	0.075
42. BD (1) C 21 - H 31	/337. RY*(11) C 15	0.57	2.59	0.035
42. BD (1) C 21 - H 31	/338. RY*(12) C 15	2.93	1.43	0.058
42. BD (1) C 21 - H 31	/339. RY*(13) C 15	2.23	2.10	0.061
42. BD (1) C 21 - H 31	/340. RY*(14) C 15	3.99	3.18	0.101
42. BD (1) C 21 - H 31	/345. RY*(2) C 16	2.62	1.64	0.059
42. BD (1) C 21 - H 31	/346. RY*(3) C 16	0.71	1.42	0.029
42. BD (1) C 21 - H 31	/347. RY*(4) C 16	0.73	1.67	0.031
42. BD (1) C 21 - H 31	/348. RY*(5) C 16	27.34	1.99	0.209
42. BD (1) C 21 - H 31	/351. RY*(8) C 16	4.39	2.15	0.087
42. BD (1) C 21 - H 31	/352. RY*(9) C 16	4.61	2.36	0.093
42. BD (1) C 21 - H 31	/354. RY*(11) C 16	2.56	3.58	0.086
42. BD (1) C 21 - H 31	/355. RY*(12) C 16	1.55	4.21	0.073
42. BD (1) C 21 - H 31	/356. RY*(13) C 16	0.68	1.86	0.032
42. BD (1) C 21 - H 31	/357. RY*(14) C 16	20.31	2.38	0.197
42. BD (1) C 21 - H 31	/358. RY*(15) C 16	27.44	2.02	0.211
42. BD (1) C 21 - H 31	/361. RY*(1) C 17	1.22	1.70	0.041
42. BD (1) C 21 - H 31	/362. RY*(2) C 17	1.40	2.13	0.049
42. BD (1) C 21 - H 31	/365. RY*(5) C 17	21.54	1.61	0.167
42. BD (1) C 21 - H 31	/367. RY*(7) C 17	1.79	2.67	0.062

42. BD (1) C 21 - H 31	/368. RY*(8) C 17	4.75	1.66	0.080
42. BD (1) C 21 - H 31	/370. RY*(10) C 17	23.67	3.80	0.269
42. BD (1) C 21 - H 31	/371. RY*(11) C 17	10.88	2.46	0.147
42. BD (1) C 21 - H 31	/372. RY*(12) C 17	9.28	3.61	0.164
42. BD (1) C 21 - H 31	/373. RY*(13) C 17	52.06	2.31	0.311
42. BD (1) C 21 - H 31	/380. RY*(4) C 18	0.79	2.33	0.038
42. BD (1) C 21 - H 31	/382. RY*(6) C 18	3.83	1.82	0.075
42. BD (1) C 21 - H 31	/383. RY*(7) C 18	36.24	1.41	0.203
42. BD (1) C 21 - H 31	/385. RY*(9) C 18	3.61	2.54	0.086
42. BD (1) C 21 - H 31	/386. RY*(10) C 18	5.60	2.64	0.109
42. BD (1) C 21 - H 31	/387. RY*(11) C 18	9.28	4.60	0.185
42. BD (1) C 21 - H 31	/388. RY*(12) C 18	7.13	2.88	0.129
42. BD (1) C 21 - H 31	/389. RY*(13) C 18	0.96	3.50	0.052
42. BD (1) C 21 - H 31	/392. RY*(16) C 18	44.27	1.06	0.194
42. BD (1) C 21 - H 31	/395. RY*(2) C 19	29.21	1.48	0.186
42. BD (1) C 21 - H 31	/396. RY*(3) C 19	1.08	2.14	0.043
42. BD (1) C 21 - H 31	/402. RY*(9) C 19	0.87	1.46	0.032
42. BD (1) C 21 - H 31	/405. RY*(12) C 19	1.49	1.61	0.044
42. BD (1) C 21 - H 31	/411. RY*(1) C 20	1.30	1.83	0.044
42. BD (1) C 21 - H 31	/412. RY*(2) C 20	0.63	2.00	0.032
42. BD (1) C 21 - H 31	/413. RY*(3) C 20	1.52	1.20	0.038
42. BD (1) C 21 - H 31	/414. RY*(4) C 20	0.55	1.45	0.025
42. BD (1) C 21 - H 31	/415. RY*(5) C 20	0.92	1.69	0.035
42. BD (1) C 21 - H 31	/417. RY*(7) C 20	4.34	2.45	0.093
42. BD (1) C 21 - H 31	/426. RY*(16) C 20	0.51	1.10	0.021
42. BD (1) C 21 - H 31	/427. RY*(17) C 20	1.02	2.66	0.047
42. BD (1) C 21 - H 31	/431. RY*(4) C 21	0.92	1.81	0.037
42. BD (1) C 21 - H 31	/433. RY*(6) C 21	1.25	1.77	0.042

42. BD (1) C 21 - H 31	/437. RY*(10) C 21	0.51	2.18	0.030
42. BD (1) C 21 - H 31	/438. RY*(11) C 21	1.83	1.13	0.041
42. BD (1) C 21 - H 31	/445. RY*(1) C 22	1.74	1.81	0.050
42. BD (1) C 21 - H 31	/446. RY*(2) C 22	0.96	1.93	0.038
42. BD (1) C 21 - H 31	/447. RY*(3) C 22	0.83	1.18	0.028
42. BD (1) C 21 - H 31	/449. RY*(5) C 22	1.89	2.08	0.056
42. BD (1) C 21 - H 31	/450. RY*(6) C 22	1.52	1.68	0.045
42. BD (1) C 21 - H 31	/451. RY*(7) C 22	3.95	1.99	0.080
42. BD (1) C 21 - H 31	/454. RY*(10) C 22	1.88	3.06	0.068
42. BD (1) C 21 - H 31	/455. RY*(11) C 22	1.07	1.93	0.041
42. BD (1) C 21 - H 31	/457. RY*(13) C 22	1.19	2.20	0.046
42. BD (1) C 21 - H 31	/458. RY*(14) C 22	2.32	1.34	0.050
42. BD (1) C 21 - H 31	/462. RY*(1) C 23	322.10	0.58	0.388
42. BD (1) C 21 - H 31	/463. RY*(2) C 23	51.51	1.14	0.217
42. BD (1) C 21 - H 31	/464. RY*(3) C 23	15.49	1.47	0.135
42. BD (1) C 21 - H 31	/465. RY*(4) C 23	124.28	1.40	0.374
42. BD (1) C 21 - H 31	/466. RY*(5) C 23	2502.93	0.10	0.447
42. BD (1) C 21 - H 31	/467. RY*(6) C 23	3.53	2.23	0.080
42. BD (1) C 21 - H 31	/469. RY*(8) C 23	163.62	1.47	0.439
42. BD (1) C 21 - H 31	/471. RY*(10) C 23	234.45	1.25	0.486
42. BD (1) C 21 - H 31	/473. RY*(12) C 23	1.97	2.53	0.063
42. BD (1) C 21 - H 31	/474. RY*(13) C 23	7.38	3.43	0.143
42. BD (1) C 21 - H 31	/475. RY*(14) C 23	0.80	22.97	0.121
42. BD (1) C 21 - H 31	/476. RY*(15) C 23	83.54	1.70	0.338
42. BD (1) C 21 - H 31	/477. RY*(16) C 23	225.88	1.68	0.552
42. BD (1) C 21 - H 31	/478. RY*(17) C 23	1.29	3.03	0.056
42. BD (1) C 21 - H 31	/479. RY*(1) H 24	6.95	1.32	0.086
42. BD (1) C 21 - H 31	/483. RY*(5) H 24	2.73	3.26	0.085

42. BD (1) C 21 - H 31	/492. RY*(4) H 26	3.64	2.60	0.087
42. BD (1) C 21 - H 31	/496. RY*(3) H 27	6.26	2.19	0.105
42. BD (1) C 21 - H 31	/497. RY*(4) H 27	475.44	0.78	0.547
42. BD (1) C 21 - H 31	/498. RY*(5) H 27	1.85	3.13	0.068
42. BD (1) C 21 - H 31	/499. RY*(1) H 28	3.45	1.57	0.066
42. BD (1) C 21 - H 31	/500. RY*(2) H 28	2.75	2.60	0.076
42. BD (1) C 21 - H 31	/502. RY*(4) H 28	11.91	2.43	0.152
42. BD (1) C 21 - H 31	/504. RY*(1) H 29	0.91	1.31	0.031
42. BD (1) C 21 - H 31	/505. RY*(2) H 29	0.65	2.29	0.035
42. BD (1) C 21 - H 31	/506. RY*(3) H 29	17.30	2.97	0.203
42. BD (1) C 21 - H 31	/509. RY*(1) H 30	0.90	1.58	0.034
42. BD (1) C 21 - H 31	/511. RY*(3) H 30	1.21	2.28	0.047
42. BD (1) C 21 - H 31	/528. RY*(1) H 34	2.75	2.08	0.068
42. BD (1) C 21 - H 31	/529. RY*(2) H 34	248.13	0.87	0.416
42. BD (1) C 21 - H 31	/530. RY*(3) H 34	9.02	2.41	0.132
42. BD (1) C 21 - H 31	/531. RY*(4) H 34	1.42	2.49	0.053
42. BD (1) C 21 - H 31	/533. RY*(1) H 35	38.26	1.40	0.208
42. BD (1) C 21 - H 31	/534. RY*(2) H 35	102.33	1.56	0.359
42. BD (1) C 21 - H 31	/535. RY*(3) H 35	6.66	2.42	0.114
42. BD (1) C 21 - H 31	/536. RY*(4) H 35	2.70	2.44	0.073
42. BD (1) C 21 - H 31	/537. RY*(5) H 35	1.56	3.36	0.065
42. BD (1) C 21 - H 31	/542. RY*(5) H 36	22.11	2.43	0.208
42. BD (1) C 21 - H 31	/562. BD*(1) C 10 - C 11	0.85	1.12	0.028
42. BD (1) C 21 - H 31	/572. BD*(1) C 14 - H 27	4.72	1.06	0.063
42. BD (1) C 21 - H 31	/577. BD*(1) C 19 - C 20	4.52	1.24	0.067
42. BD (1) C 21 - H 31	/578. BD*(2) C 19 - C 20	108.35	0.42	0.207
42. BD (1) C 21 - H 31	/579. BD*(1) C 19 - H 29	1442.48	0.13	0.391
42. BD (1) C 21 - H 31	/580. BD*(1) C 20 - C 21	3.91	1.27	0.063

42. BD (1) C 21 - H 31	/581. BD*(1) C 20 - H 30	3.84	1.12	0.059
42. BD (1) C 21 - H 31	/583. BD*(2) C 21 - C 22	16.29	0.64	0.098
42. BD (1) C 21 - H 31	/586. BD*(1) C 23 - H 34	13.22	3.72	0.199
42. BD (1) C 21 - H 31	/587. BD*(1) C 23 - H 35	9.78	3.99	0.177
42. BD (1) C 21 - H 31	/588. BD*(1) C 23 - H 36	19.74	3.36	0.230
43. BD (1) C 22 - H 32	/ 98. RY*(12) S 1	7.35	0.89	0.073
43. BD (1) C 22 - H 32	/100. RY*(14) S 1	1.40	1.22	0.037
43. BD (1) C 22 - H 32	/101. RY*(15) S 1	4.94	0.89	0.060
43. BD (1) C 22 - H 32	/112. RY*(5) O 2	2.33	1.24	0.048
43. BD (1) C 22 - H 32	/114. RY*(7) O 2	0.76	2.17	0.036
43. BD (1) C 22 - H 32	/130. RY*(6) O 3	2.36	1.15	0.047
43. BD (1) C 22 - H 32	/142. RY*(1) O 4	26.08	0.20	0.065
43. BD (1) C 22 - H 32	/190. RY*(17) N 6	0.79	32.04	0.143
43. BD (1) C 22 - H 32	/191. RY*(1) N 7	0.96	1.11	0.029
43. BD (1) C 22 - H 32	/195. RY*(5) N 7	3.24	1.06	0.053
43. BD (1) C 22 - H 32	/198. RY*(8) N 7	0.56	2.07	0.031
43. BD (1) C 22 - H 32	/199. RY*(9) N 7	0.61	2.84	0.038
43. BD (1) C 22 - H 32	/200. RY*(10) N 7	2.59	1.54	0.057
43. BD (1) C 22 - H 32	/208. RY*(1) N 8	0.76	1.13	0.026
43. BD (1) C 22 - H 32	/231. RY*(7) C 9	3.09	1.47	0.060
43. BD (1) C 22 - H 32	/232. RY*(8) C 9	1.62	1.79	0.048
43. BD (1) C 22 - H 32	/233. RY*(9) C 9	1.89	2.69	0.064
43. BD (1) C 22 - H 32	/234. RY*(10) C 9	3.02	1.67	0.064
43. BD (1) C 22 - H 32	/235. RY*(11) C 9	120.05	0.10	0.098
43. BD (1) C 22 - H 32	/237. RY*(13) C 9	6.44	2.10	0.104
43. BD (1) C 22 - H 32	/242. RY*(1) C 10	1.33	1.38	0.038
43. BD (1) C 22 - H 32	/252. RY*(11) C 10	5.84	0.81	0.062
43. BD (1) C 22 - H 32	/267. RY*(9) C 11	1.34	1.72	0.043

43. BD (1) C 22 - H 32	/268. RY*(10) C 11	0.70	2.42	0.037
43. BD (1) C 22 - H 32	/270. RY*(12) C 11	2.73	1.48	0.057
43. BD (1) C 22 - H 32	/273. RY*(15) C 11	0.78	2.13	0.037
43. BD (1) C 22 - H 32	/286. RY*(11) C 12	1.40	1.32	0.039
43. BD (1) C 22 - H 32	/348. RY*(5) C 16	1.09	1.84	0.040
43. BD (1) C 22 - H 32	/357. RY*(14) C 16	0.79	2.23	0.038
43. BD (1) C 22 - H 32	/358. RY*(15) C 16	1.09	1.87	0.041
43. BD (1) C 22 - H 32	/365. RY*(5) C 17	0.67	1.45	0.028
43. BD (1) C 22 - H 32	/370. RY*(10) C 17	0.75	3.65	0.047
43. BD (1) C 22 - H 32	/373. RY*(13) C 17	2.21	2.16	0.062
43. BD (1) C 22 - H 32	/378. RY*(2) C 18	1.77	1.87	0.052
43. BD (1) C 22 - H 32	/383. RY*(7) C 18	1.17	1.26	0.035
43. BD (1) C 22 - H 32	/386. RY*(10) C 18	0.66	2.49	0.037
43. BD (1) C 22 - H 32	/392. RY*(16) C 18	1.59	0.91	0.034
43. BD (1) C 22 - H 32	/395. RY*(2) C 19	1.22	1.33	0.036
43. BD (1) C 22 - H 32	/428. RY*(1) C 21	0.78	1.56	0.031
43. BD (1) C 22 - H 32	/462. RY*(1) C 23	16.22	0.43	0.075
43. BD (1) C 22 - H 32	/463. RY*(2) C 23	2.23	0.99	0.042
43. BD (1) C 22 - H 32	/464. RY*(3) C 23	0.63	1.32	0.026
43. BD (1) C 22 - H 32	/465. RY*(4) C 23	5.28	1.25	0.073
43. BD (1) C 22 - H 32	/469. RY*(8) C 23	6.48	1.31	0.083
43. BD (1) C 22 - H 32	/471. RY*(10) C 23	10.16	1.10	0.095
43. BD (1) C 22 - H 32	/476. RY*(15) C 23	3.47	1.55	0.066
43. BD (1) C 22 - H 32	/477. RY*(16) C 23	8.81	1.53	0.104
43. BD (1) C 22 - H 32	/497. RY*(4) H 27	21.54	0.63	0.104
43. BD (1) C 22 - H 32	/506. RY*(3) H 29	0.74	2.82	0.041
43. BD (1) C 22 - H 32	/529. RY*(2) H 34	11.07	0.71	0.080
43. BD (1) C 22 - H 32	/533. RY*(1) H 35	1.68	1.25	0.041

43. BD (1) C 22 - H 32 /534. RY*(2) H 35 4.12 1.41 0.068

43. BD (1) C 22 - H 32 /542. RY*(5) H 36 1.04 2.28 0.044

43. BD (1) C 22 - H 32 /554. BD*(1) N 7 - C 18 0.53 0.94 0.020

43. BD (1) C 22 - H 32 /556. BD*(1) N 8 - C 18 5.19 1.04 0.066

43. BD (1) C 22 - H 32 /576. BD*(1) C 18 - C 22 1.78 1.04 0.039

43. BD (1) C 22 - H 32 /578. BD*(2) C 19 - C 20 6.22 0.27 0.040

43. BD (1) C 22 - H 32 /580. BD*(1) C 20 - C 21 2.66 1.12 0.049

43. BD (1) C 22 - H 32 /582. BD*(1) C 21 - C 22 0.66 1.11 0.024

43. BD (1) C 22 - H 32 /583. BD*(2) C 21 - C 22 0.84 0.49 0.019

43. BD (1) C 22 - H 32 /586. BD*(1) C 23 - H 34 0.54 3.57 0.039

43. BD (1) C 22 - H 32 /587. BD*(1) C 23 - H 35 0.56 3.84 0.041

43. BD (1) C 22 - H 32 /588. BD*(1) C 23 - H 36 0.89 3.21 0.048

44. BD (1) C 23 - H 34 / 87. RY*(1) S 1 3.01 1.31 0.057

44. BD (1) C 23 - H 34 / 88. RY*(2) S 1 3.19 1.23 0.057

44. BD (1) C 23 - H 34 / 90. RY*(4) S 1 0.71 1.33 0.028

44. BD (1) C 23 - H 34 / 92. RY*(6) S 1 2.20 2.14 0.061

44. BD (1) C 23 - H 34 / 95. RY*(9) S 1 4.14 1.54 0.071

44. BD (1) C 23 - H 34 / 96. RY*(10) S 1 2.96 1.42 0.058

44. BD (1) C 23 - H 34 / 98. RY*(12) S 1 155.68 0.89 0.332

44. BD (1) C 23 - H 34 /100. RY*(14) S 1 31.06 1.22 0.174

44. BD (1) C 23 - H 34 /101. RY*(15) S 1 107.72 0.89 0.277

44. BD (1) C 23 - H 34 /108. RY*(1) O 2 0.94 1.64 0.035

44. BD (1) C 23 - H 34 /109. RY*(2) O 2 1.41 1.33 0.039

44. BD (1) C 23 - H 34 /110. RY*(3) O 2 3.65 1.48 0.066

44. BD (1) C 23 - H 34 /112. RY*(5) O 2 49.74 1.24 0.222

44. BD (1) C 23 - H 34 /113. RY*(6) O 2 1.16 1.48 0.037

44. BD (1) C 23 - H 34 /114. RY*(7) O 2 16.16 2.16 0.167

44. BD (1) C 23 - H 34 /115. RY*(8) O 2 1.49 1.93 0.048

44. BD (1) C 23 - H 34	/116. RY*(9) O 2	0.56	3.39	0.039
44. BD (1) C 23 - H 34	/117. RY*(10) O 2	0.75	3.36	0.045
44. BD (1) C 23 - H 34	/122. RY*(15) O 2	0.61	3.21	0.040
44. BD (1) C 23 - H 34	/124. RY*(17) O 2	0.86	5.27	0.060
44. BD (1) C 23 - H 34	/125. RY*(1) O 3	0.55	1.70	0.027
44. BD (1) C 23 - H 34	/127. RY*(3) O 3	10.46	1.43	0.109
44. BD (1) C 23 - H 34	/128. RY*(4) O 3	1.43	1.14	0.036
44. BD (1) C 23 - H 34	/129. RY*(5) O 3	4.42	1.60	0.075
44. BD (1) C 23 - H 34	/130. RY*(6) O 3	50.73	1.14	0.215
44. BD (1) C 23 - H 34	/131. RY*(7) O 3	5.17	2.38	0.099
44. BD (1) C 23 - H 34	/133. RY*(9) O 3	2.03	3.46	0.075
44. BD (1) C 23 - H 34	/140. RY*(16) O 3	1.06	3.60	0.055
44. BD (1) C 23 - H 34	/142. RY*(1) O 4	586.60	0.20	0.306
44. BD (1) C 23 - H 34	/147. RY*(6) O 4	1.50	1.83	0.047
44. BD (1) C 23 - H 34	/160. RY*(3) O 5	3.69	1.25	0.061
44. BD (1) C 23 - H 34	/162. RY*(5) O 5	0.51	2.07	0.029
44. BD (1) C 23 - H 34	/164. RY*(7) O 5	1.07	2.12	0.043
44. BD (1) C 23 - H 34	/176. RY*(3) N 6	1.32	1.51	0.040
44. BD (1) C 23 - H 34	/180. RY*(7) N 6	1.44	1.62	0.043
44. BD (1) C 23 - H 34	/181. RY*(8) N 6	0.80	1.85	0.034
44. BD (1) C 23 - H 34	/186. RY*(13) N 6	0.83	3.65	0.049
44. BD (1) C 23 - H 34	/188. RY*(15) N 6	2.23	4.45	0.089
44. BD (1) C 23 - H 34	/190. RY*(17) N 6	16.33	32.04	0.647
44. BD (1) C 23 - H 34	/191. RY*(1) N 7	19.57	1.11	0.131
44. BD (1) C 23 - H 34	/195. RY*(5) N 7	36.87	1.05	0.176
44. BD (1) C 23 - H 34	/196. RY*(6) N 7	0.81	1.74	0.034
44. BD (1) C 23 - H 34	/197. RY*(7) N 7	1.39	2.38	0.051
44. BD (1) C 23 - H 34	/198. RY*(8) N 7	12.09	2.07	0.141

44. BD (1) C 23 - H 34	/199. RY*(9) N 7	19.02	2.84	0.208
44. BD (1) C 23 - H 34	/200. RY*(10) N 7	50.98	1.54	0.251
44. BD (1) C 23 - H 34	/202. RY*(12) N 7	0.56	2.70	0.035
44. BD (1) C 23 - H 34	/204. RY*(14) N 7	1.65	3.27	0.066
44. BD (1) C 23 - H 34	/208. RY*(1) N 8	14.80	1.13	0.116
44. BD (1) C 23 - H 34	/212. RY*(5) N 8	5.40	2.04	0.094
44. BD (1) C 23 - H 34	/214. RY*(7) N 8	0.70	1.76	0.031
44. BD (1) C 23 - H 34	/216. RY*(9) N 8	4.64	3.35	0.112
44. BD (1) C 23 - H 34	/217. RY*(10) N 8	3.11	1.38	0.059
44. BD (1) C 23 - H 34	/225. RY*(1) C 9	1.07	1.77	0.039
44. BD (1) C 23 - H 34	/226. RY*(2) C 9	1.32	1.42	0.039
44. BD (1) C 23 - H 34	/227. RY*(3) C 9	2.85	1.51	0.059
44. BD (1) C 23 - H 34	/228. RY*(4) C 9	2.35	1.76	0.057
44. BD (1) C 23 - H 34	/229. RY*(5) C 9	2.84	2.38	0.074
44. BD (1) C 23 - H 34	/230. RY*(6) C 9	9.35	1.61	0.110
44. BD (1) C 23 - H 34	/231. RY*(7) C 9	69.50	1.46	0.286
44. BD (1) C 23 - H 34	/232. RY*(8) C 9	33.36	1.78	0.218
44. BD (1) C 23 - H 34	/233. RY*(9) C 9	36.91	2.69	0.282
44. BD (1) C 23 - H 34	/234. RY*(10) C 9	64.95	1.66	0.294
44. BD (1) C 23 - H 34	/235. RY*(11) C 9	2582.99	0.10	0.445
44. BD (1) C 23 - H 34	/236. RY*(12) C 9	4.65	2.55	0.098
44. BD (1) C 23 - H 34	/237. RY*(13) C 9	137.16	2.10	0.480
44. BD (1) C 23 - H 34	/238. RY*(14) C 9	3.89	2.65	0.091
44. BD (1) C 23 - H 34	/239. RY*(15) C 9	3.39	2.93	0.089
44. BD (1) C 23 - H 34	/240. RY*(16) C 9	1.53	3.79	0.068
44. BD (1) C 23 - H 34	/241. RY*(17) C 9	2.71	19.95	0.208
44. BD (1) C 23 - H 34	/242. RY*(1) C 10	28.01	1.37	0.175
44. BD (1) C 23 - H 34	/244. RY*(3) C 10	1.76	2.08	0.054

44. BD (1) C 23 - H 34	/245. RY*(4) C 10	5.27	2.04	0.093
44. BD (1) C 23 - H 34	/246. RY*(5) C 10	1.59	1.55	0.044
44. BD (1) C 23 - H 34	/250. RY*(9) C 10	1.50	2.23	0.052
44. BD (1) C 23 - H 34	/251. RY*(10) C 10	5.07	1.81	0.086
44. BD (1) C 23 - H 34	/252. RY*(11) C 10	128.67	0.80	0.288
44. BD (1) C 23 - H 34	/253. RY*(12) C 10	4.74	2.03	0.088
44. BD (1) C 23 - H 34	/255. RY*(14) C 10	1.62	2.15	0.053
44. BD (1) C 23 - H 34	/256. RY*(15) C 10	4.29	3.52	0.110
44. BD (1) C 23 - H 34	/258. RY*(17) C 10	0.53	3.19	0.037
44. BD (1) C 23 - H 34	/260. RY*(2) C 11	4.44	1.78	0.079
44. BD (1) C 23 - H 34	/261. RY*(3) C 11	0.84	1.32	0.030
44. BD (1) C 23 - H 34	/262. RY*(4) C 11	0.58	1.59	0.027
44. BD (1) C 23 - H 34	/263. RY*(5) C 11	2.83	1.81	0.064
44. BD (1) C 23 - H 34	/264. RY*(6) C 11	0.59	1.72	0.028
44. BD (1) C 23 - H 34	/265. RY*(7) C 11	6.19	2.12	0.102
44. BD (1) C 23 - H 34	/266. RY*(8) C 11	1.55	1.90	0.049
44. BD (1) C 23 - H 34	/267. RY*(9) C 11	28.37	1.72	0.198
44. BD (1) C 23 - H 34	/268. RY*(10) C 11	15.38	2.42	0.172
44. BD (1) C 23 - H 34	/270. RY*(12) C 11	58.21	1.48	0.263
44. BD (1) C 23 - H 34	/272. RY*(14) C 11	0.56	4.83	0.046
44. BD (1) C 23 - H 34	/273. RY*(15) C 11	16.27	2.13	0.167
44. BD (1) C 23 - H 34	/274. RY*(16) C 11	6.60	3.14	0.129
44. BD (1) C 23 - H 34	/278. RY*(3) C 12	0.66	1.06	0.024
44. BD (1) C 23 - H 34	/279. RY*(4) C 12	9.95	1.48	0.109
44. BD (1) C 23 - H 34	/280. RY*(5) C 12	2.42	1.38	0.052
44. BD (1) C 23 - H 34	/281. RY*(6) C 12	5.85	1.66	0.088
44. BD (1) C 23 - H 34	/284. RY*(9) C 12	1.24	2.84	0.053
44. BD (1) C 23 - H 34	/285. RY*(10) C 12	2.78	3.14	0.084

44. BD (1) C 23 - H 34	/286. RY*(11) C 12	30.34	1.32	0.179
44. BD (1) C 23 - H 34	/287. RY*(12) C 12	5.24	2.41	0.101
44. BD (1) C 23 - H 34	/288. RY*(13) C 12	3.21	1.87	0.069
44. BD (1) C 23 - H 34	/296. RY*(4) C 13	0.84	1.47	0.031
44. BD (1) C 23 - H 34	/298. RY*(6) C 13	3.78	1.53	0.068
44. BD (1) C 23 - H 34	/299. RY*(7) C 13	5.89	2.23	0.103
44. BD (1) C 23 - H 34	/300. RY*(8) C 13	1.06	2.88	0.049
44. BD (1) C 23 - H 34	/301. RY*(9) C 13	0.92	2.46	0.043
44. BD (1) C 23 - H 34	/302. RY*(10) C 13	0.65	2.62	0.037
44. BD (1) C 23 - H 34	/303. RY*(11) C 13	0.67	1.01	0.023
44. BD (1) C 23 - H 34	/305. RY*(13) C 13	0.69	2.61	0.038
44. BD (1) C 23 - H 34	/309. RY*(17) C 13	0.64	2.13	0.033
44. BD (1) C 23 - H 34	/318. RY*(9) C 14	1.33	2.45	0.051
44. BD (1) C 23 - H 34	/319. RY*(10) C 14	1.65	1.70	0.047
44. BD (1) C 23 - H 34	/323. RY*(14) C 14	0.68	1.86	0.032
44. BD (1) C 23 - H 34	/326. RY*(17) C 14	2.29	2.14	0.063
44. BD (1) C 23 - H 34	/327. RY*(1) C 15	1.44	1.63	0.043
44. BD (1) C 23 - H 34	/330. RY*(4) C 15	8.93	1.38	0.099
44. BD (1) C 23 - H 34	/331. RY*(5) C 15	0.91	1.82	0.036
44. BD (1) C 23 - H 34	/334. RY*(8) C 15	4.00	1.49	0.069
44. BD (1) C 23 - H 34	/338. RY*(12) C 15	2.52	1.27	0.051
44. BD (1) C 23 - H 34	/339. RY*(13) C 15	1.91	1.95	0.055
44. BD (1) C 23 - H 34	/340. RY*(14) C 15	2.97	3.02	0.085
44. BD (1) C 23 - H 34	/345. RY*(2) C 16	2.25	1.48	0.052
44. BD (1) C 23 - H 34	/346. RY*(3) C 16	0.78	1.27	0.028
44. BD (1) C 23 - H 34	/348. RY*(5) C 16	24.15	1.83	0.188
44. BD (1) C 23 - H 34	/351. RY*(8) C 16	3.68	2.00	0.077
44. BD (1) C 23 - H 34	/352. RY*(9) C 16	3.91	2.20	0.083

44. BD (1) C 23 - H 34	/354. RY*(11) C 16	2.14	3.42	0.076
44. BD (1) C 23 - H 34	/355. RY*(12) C 16	1.24	4.06	0.063
44. BD (1) C 23 - H 34	/357. RY*(14) C 16	16.90	2.23	0.174
44. BD (1) C 23 - H 34	/358. RY*(15) C 16	22.87	1.87	0.185
44. BD (1) C 23 - H 34	/361. RY*(1) C 17	1.11	1.54	0.037
44. BD (1) C 23 - H 34	/362. RY*(2) C 17	1.14	1.97	0.042
44. BD (1) C 23 - H 34	/365. RY*(5) C 17	18.64	1.45	0.147
44. BD (1) C 23 - H 34	/367. RY*(7) C 17	1.50	2.52	0.055
44. BD (1) C 23 - H 34	/368. RY*(8) C 17	4.01	1.50	0.070
44. BD (1) C 23 - H 34	/370. RY*(10) C 17	20.19	3.64	0.243
44. BD (1) C 23 - H 34	/371. RY*(11) C 17	9.04	2.31	0.129
44. BD (1) C 23 - H 34	/372. RY*(12) C 17	7.74	3.46	0.146
44. BD (1) C 23 - H 34	/373. RY*(13) C 17	43.68	2.15	0.275
44. BD (1) C 23 - H 34	/380. RY*(4) C 18	0.60	2.17	0.032
44. BD (1) C 23 - H 34	/382. RY*(6) C 18	2.88	1.66	0.062
44. BD (1) C 23 - H 34	/383. RY*(7) C 18	31.77	1.26	0.179
44. BD (1) C 23 - H 34	/385. RY*(9) C 18	3.15	2.38	0.078
44. BD (1) C 23 - H 34	/386. RY*(10) C 18	4.23	2.49	0.092
44. BD (1) C 23 - H 34	/387. RY*(11) C 18	8.00	4.44	0.169
44. BD (1) C 23 - H 34	/388. RY*(12) C 18	6.61	2.72	0.120
44. BD (1) C 23 - H 34	/389. RY*(13) C 18	0.71	3.34	0.044
44. BD (1) C 23 - H 34	/392. RY*(16) C 18	41.01	0.90	0.172
44. BD (1) C 23 - H 34	/395. RY*(2) C 19	25.08	1.32	0.163
44. BD (1) C 23 - H 34	/396. RY*(3) C 19	0.94	1.98	0.039
44. BD (1) C 23 - H 34	/402. RY*(9) C 19	0.52	1.30	0.023
44. BD (1) C 23 - H 34	/405. RY*(12) C 19	1.47	1.45	0.041
44. BD (1) C 23 - H 34	/413. RY*(3) C 20	1.38	1.04	0.034
44. BD (1) C 23 - H 34	/417. RY*(7) C 20	2.50	2.29	0.068

44. BD (1) C 23 - H 34	/427. RY*(17) C 20	0.64	2.50	0.036
44. BD (1) C 23 - H 34	/433. RY*(6) C 21	1.56	1.61	0.045
44. BD (1) C 23 - H 34	/438. RY*(11) C 21	1.64	0.98	0.036
44. BD (1) C 23 - H 34	/447. RY*(3) C 22	0.73	1.02	0.024
44. BD (1) C 23 - H 34	/449. RY*(5) C 22	1.59	1.92	0.049
44. BD (1) C 23 - H 34	/450. RY*(6) C 22	1.38	1.53	0.041
44. BD (1) C 23 - H 34	/451. RY*(7) C 22	4.73	1.83	0.083
44. BD (1) C 23 - H 34	/454. RY*(10) C 22	1.02	2.90	0.049
44. BD (1) C 23 - H 34	/455. RY*(11) C 22	0.78	1.77	0.033
44. BD (1) C 23 - H 34	/457. RY*(13) C 22	1.10	2.05	0.043
44. BD (1) C 23 - H 34	/458. RY*(14) C 22	2.00	1.19	0.044
44. BD (1) C 23 - H 34	/462. RY*(1) C 23	405.28	0.42	0.371
44. BD (1) C 23 - H 34	/463. RY*(2) C 23	59.34	0.99	0.216
44. BD (1) C 23 - H 34	/464. RY*(3) C 23	15.76	1.31	0.129
44. BD (1) C 23 - H 34	/465. RY*(4) C 23	97.24	1.24	0.311
44. BD (1) C 23 - H 34	/467. RY*(6) C 23	0.63	2.07	0.032
44. BD (1) C 23 - H 34	/469. RY*(8) C 23	128.25	1.31	0.367
44. BD (1) C 23 - H 34	/471. RY*(10) C 23	248.25	1.10	0.467
44. BD (1) C 23 - H 34	/473. RY*(12) C 23	0.91	2.37	0.042
44. BD (1) C 23 - H 34	/474. RY*(13) C 23	3.56	3.27	0.097
44. BD (1) C 23 - H 34	/475. RY*(14) C 23	1.74	22.82	0.178
44. BD (1) C 23 - H 34	/476. RY*(15) C 23	69.99	1.54	0.294
44. BD (1) C 23 - H 34	/477. RY*(16) C 23	185.39	1.52	0.476
44. BD (1) C 23 - H 34	/478. RY*(17) C 23	1.08	2.88	0.050
44. BD (1) C 23 - H 34	/479. RY*(1) H 24	5.84	1.16	0.074
44. BD (1) C 23 - H 34	/483. RY*(5) H 24	2.41	3.10	0.077
44. BD (1) C 23 - H 34	/492. RY*(4) H 26	3.08	2.44	0.078
44. BD (1) C 23 - H 34	/496. RY*(3) H 27	5.41	2.03	0.094

44. BD (1) C 23 - H 34	/497. RY*(4) H 27	475.24	0.62	0.488
44. BD (1) C 23 - H 34	/498. RY*(5) H 27	1.88	2.97	0.067
44. BD (1) C 23 - H 34	/499. RY*(1) H 28	3.04	1.41	0.059
44. BD (1) C 23 - H 34	/500. RY*(2) H 28	2.22	2.44	0.066
44. BD (1) C 23 - H 34	/502. RY*(4) H 28	10.55	2.27	0.138
44. BD (1) C 23 - H 34	/504. RY*(1) H 29	0.77	1.16	0.027
44. BD (1) C 23 - H 34	/506. RY*(3) H 29	13.95	2.82	0.177
44. BD (1) C 23 - H 34	/507. RY*(4) H 29	0.57	3.27	0.039
44. BD (1) C 23 - H 34	/508. RY*(5) H 29	0.86	2.64	0.043
44. BD (1) C 23 - H 34	/509. RY*(1) H 30	1.38	1.42	0.040
44. BD (1) C 23 - H 34	/511. RY*(3) H 30	1.30	2.12	0.047
44. BD (1) C 23 - H 34	/528. RY*(1) H 34	1.36	1.92	0.046
44. BD (1) C 23 - H 34	/529. RY*(2) H 34	247.28	0.71	0.375
44. BD (1) C 23 - H 34	/530. RY*(3) H 34	10.49	2.26	0.138
44. BD (1) C 23 - H 34	/531. RY*(4) H 34	1.64	2.33	0.055
44. BD (1) C 23 - H 34	/533. RY*(1) H 35	31.64	1.25	0.178
44. BD (1) C 23 - H 34	/534. RY*(2) H 35	97.38	1.41	0.331
44. BD (1) C 23 - H 34	/535. RY*(3) H 35	7.07	2.26	0.113
44. BD (1) C 23 - H 34	/536. RY*(4) H 35	3.62	2.29	0.081
44. BD (1) C 23 - H 34	/540. RY*(3) H 36	0.83	0.77	0.023
44. BD (1) C 23 - H 34	/542. RY*(5) H 36	9.89	2.28	0.134
44. BD (1) C 23 - H 34	/551. BD*(1) N 6 - C 9	3.38	0.87	0.049
44. BD (1) C 23 - H 34	/562. BD*(1) C 10 - C 11	0.72	0.97	0.024
44. BD (1) C 23 - H 34	/572. BD*(1) C 14 - H 27	4.48	0.91	0.057
44. BD (1) C 23 - H 34	/574. BD*(2) C 15 - C 16	1.74	0.54	0.030
44. BD (1) C 23 - H 34	/575. BD*(1) C 15 - H 28	0.88	0.96	0.026
44. BD (1) C 23 - H 34	/576. BD*(1) C 18 - C 22	4.75	1.04	0.063
44. BD (1) C 23 - H 34	/578. BD*(2) C 19 - C 20	137.63	0.27	0.185

44. BD (1) C 23 - H 34	/580. BD*(1) C 20 - C 21	0.63	1.11	0.024
44. BD (1) C 23 - H 34	/581. BD*(1) C 20 - H 30	1.05	0.96	0.028
44. BD (1) C 23 - H 34	/582. BD*(1) C 21 - C 22	1.62	1.10	0.038
44. BD (1) C 23 - H 34	/583. BD*(2) C 21 - C 22	16.69	0.49	0.087
44. BD (1) C 23 - H 34	/586. BD*(1) C 23 - H 34	4.03	3.56	0.107
44. BD (1) C 23 - H 34	/587. BD*(1) C 23 - H 35	21.78	3.84	0.258
44. BD (1) C 23 - H 34	/588. BD*(1) C 23 - H 36	23.23	3.21	0.244
45. BD (1) C 23 - H 35	/ 87. RY*(1) S 1	3.63	1.31	0.062
45. BD (1) C 23 - H 35	/ 88. RY*(2) S 1	2.66	1.23	0.052
45. BD (1) C 23 - H 35	/ 92. RY*(6) S 1	2.00	2.14	0.058
45. BD (1) C 23 - H 35	/ 95. RY*(9) S 1	3.29	1.54	0.064
45. BD (1) C 23 - H 35	/ 96. RY*(10) S 1	4.04	1.42	0.068
45. BD (1) C 23 - H 35	/ 98. RY*(12) S 1	160.63	0.89	0.338
45. BD (1) C 23 - H 35	/100. RY*(14) S 1	32.87	1.22	0.179
45. BD (1) C 23 - H 35	/101. RY*(15) S 1	107.22	0.89	0.276
45. BD (1) C 23 - H 35	/108. RY*(1) O 2	1.19	1.64	0.040
45. BD (1) C 23 - H 35	/109. RY*(2) O 2	1.75	1.33	0.043
45. BD (1) C 23 - H 35	/110. RY*(3) O 2	4.04	1.48	0.069
45. BD (1) C 23 - H 35	/112. RY*(5) O 2	50.45	1.24	0.224
45. BD (1) C 23 - H 35	/113. RY*(6) O 2	1.12	1.48	0.036
45. BD (1) C 23 - H 35	/114. RY*(7) O 2	16.48	2.16	0.169
45. BD (1) C 23 - H 35	/115. RY*(8) O 2	1.44	1.93	0.047
45. BD (1) C 23 - H 35	/116. RY*(9) O 2	0.77	3.39	0.046
45. BD (1) C 23 - H 35	/117. RY*(10) O 2	0.81	3.36	0.047
45. BD (1) C 23 - H 35	/122. RY*(15) O 2	0.65	3.21	0.041
45. BD (1) C 23 - H 35	/124. RY*(17) O 2	0.87	5.27	0.061
45. BD (1) C 23 - H 35	/127. RY*(3) O 3	9.67	1.43	0.105
45. BD (1) C 23 - H 35	/128. RY*(4) O 3	1.40	1.14	0.036

45. BD (1) C 23 - H 35	/129. RY*(5) O 3	3.86	1.60	0.070
45. BD (1) C 23 - H 35	/130. RY*(6) O 3	49.01	1.14	0.212
45. BD (1) C 23 - H 35	/131. RY*(7) O 3	4.82	2.38	0.096
45. BD (1) C 23 - H 35	/133. RY*(9) O 3	2.00	3.46	0.074
45. BD (1) C 23 - H 35	/140. RY*(16) O 3	1.05	3.60	0.055
45. BD (1) C 23 - H 35	/142. RY*(1) O 4	588.70	0.20	0.306
45. BD (1) C 23 - H 35	/147. RY*(6) O 4	1.48	1.83	0.047
45. BD (1) C 23 - H 35	/160. RY*(3) O 5	3.75	1.25	0.061
45. BD (1) C 23 - H 35	/164. RY*(7) O 5	1.02	2.12	0.042
45. BD (1) C 23 - H 35	/177. RY*(4) N 6	1.36	1.38	0.039
45. BD (1) C 23 - H 35	/180. RY*(7) N 6	2.26	1.62	0.054
45. BD (1) C 23 - H 35	/186. RY*(13) N 6	1.20	3.65	0.059
45. BD (1) C 23 - H 35	/188. RY*(15) N 6	1.98	4.45	0.084
45. BD (1) C 23 - H 35	/190. RY*(17) N 6	16.45	32.04	0.650
45. BD (1) C 23 - H 35	/191. RY*(1) N 7	19.74	1.11	0.132
45. BD (1) C 23 - H 35	/195. RY*(5) N 7	35.72	1.05	0.174
45. BD (1) C 23 - H 35	/196. RY*(6) N 7	0.73	1.74	0.032
45. BD (1) C 23 - H 35	/197. RY*(7) N 7	1.48	2.38	0.053
45. BD (1) C 23 - H 35	/198. RY*(8) N 7	11.08	2.07	0.136
45. BD (1) C 23 - H 35	/199. RY*(9) N 7	19.62	2.84	0.211
45. BD (1) C 23 - H 35	/200. RY*(10) N 7	50.27	1.54	0.249
45. BD (1) C 23 - H 35	/202. RY*(12) N 7	0.55	2.70	0.035
45. BD (1) C 23 - H 35	/204. RY*(14) N 7	1.64	3.27	0.066
45. BD (1) C 23 - H 35	/208. RY*(1) N 8	15.31	1.13	0.118
45. BD (1) C 23 - H 35	/212. RY*(5) N 8	5.09	2.04	0.091
45. BD (1) C 23 - H 35	/214. RY*(7) N 8	0.81	1.76	0.034
45. BD (1) C 23 - H 35	/215. RY*(8) N 8	0.62	2.00	0.031
45. BD (1) C 23 - H 35	/216. RY*(9) N 8	4.67	3.35	0.112

45. BD (1) C 23 - H 35	/217. RY*(10) N 8	3.01	1.38	0.058
45. BD (1) C 23 - H 35	/226. RY*(2) C 9	2.13	1.42	0.049
45. BD (1) C 23 - H 35	/227. RY*(3) C 9	1.73	1.51	0.046
45. BD (1) C 23 - H 35	/228. RY*(4) C 9	1.89	1.76	0.052
45. BD (1) C 23 - H 35	/229. RY*(5) C 9	2.50	2.38	0.069
45. BD (1) C 23 - H 35	/230. RY*(6) C 9	10.22	1.61	0.115
45. BD (1) C 23 - H 35	/231. RY*(7) C 9	73.21	1.46	0.293
45. BD (1) C 23 - H 35	/232. RY*(8) C 9	32.20	1.78	0.215
45. BD (1) C 23 - H 35	/233. RY*(9) C 9	39.50	2.69	0.292
45. BD (1) C 23 - H 35	/234. RY*(10) C 9	67.91	1.66	0.301
45. BD (1) C 23 - H 35	/235. RY*(11) C 9	2666.43	0.10	0.452
45. BD (1) C 23 - H 35	/236. RY*(12) C 9	4.64	2.55	0.097
45. BD (1) C 23 - H 35	/237. RY*(13) C 9	139.00	2.10	0.484
45. BD (1) C 23 - H 35	/238. RY*(14) C 9	4.90	2.65	0.102
45. BD (1) C 23 - H 35	/239. RY*(15) C 9	3.52	2.93	0.091
45. BD (1) C 23 - H 35	/240. RY*(16) C 9	1.32	3.79	0.063
45. BD (1) C 23 - H 35	/241. RY*(17) C 9	2.24	19.95	0.189
45. BD (1) C 23 - H 35	/242. RY*(1) C 10	28.97	1.37	0.178
45. BD (1) C 23 - H 35	/244. RY*(3) C 10	1.39	2.08	0.048
45. BD (1) C 23 - H 35	/245. RY*(4) C 10	5.61	2.04	0.096
45. BD (1) C 23 - H 35	/246. RY*(5) C 10	1.85	1.55	0.048
45. BD (1) C 23 - H 35	/250. RY*(9) C 10	1.49	2.23	0.052
45. BD (1) C 23 - H 35	/251. RY*(10) C 10	5.29	1.81	0.088
45. BD (1) C 23 - H 35	/252. RY*(11) C 10	130.08	0.80	0.290
45. BD (1) C 23 - H 35	/253. RY*(12) C 10	4.66	2.03	0.087
45. BD (1) C 23 - H 35	/255. RY*(14) C 10	1.75	2.15	0.055
45. BD (1) C 23 - H 35	/256. RY*(15) C 10	4.60	3.52	0.114
45. BD (1) C 23 - H 35	/260. RY*(2) C 11	4.97	1.78	0.084

45. BD (1) C 23 - H 35	/261. RY*(3) C 11	1.00	1.32	0.033
45. BD (1) C 23 - H 35	/262. RY*(4) C 11	0.57	1.59	0.027
45. BD (1) C 23 - H 35	/263. RY*(5) C 11	2.85	1.81	0.064
45. BD (1) C 23 - H 35	/264. RY*(6) C 11	0.61	1.72	0.029
45. BD (1) C 23 - H 35	/265. RY*(7) C 11	6.35	2.12	0.104
45. BD (1) C 23 - H 35	/266. RY*(8) C 11	1.81	1.90	0.053
45. BD (1) C 23 - H 35	/267. RY*(9) C 11	28.26	1.72	0.197
45. BD (1) C 23 - H 35	/268. RY*(10) C 11	16.25	2.42	0.177
45. BD (1) C 23 - H 35	/270. RY*(12) C 11	59.68	1.48	0.266
45. BD (1) C 23 - H 35	/272. RY*(14) C 11	0.58	4.83	0.048
45. BD (1) C 23 - H 35	/273. RY*(15) C 11	16.68	2.13	0.169
45. BD (1) C 23 - H 35	/274. RY*(16) C 11	6.81	3.14	0.131
45. BD (1) C 23 - H 35	/278. RY*(3) C 12	0.72	1.06	0.025
45. BD (1) C 23 - H 35	/279. RY*(4) C 12	10.28	1.48	0.110
45. BD (1) C 23 - H 35	/280. RY*(5) C 12	2.51	1.38	0.053
45. BD (1) C 23 - H 35	/281. RY*(6) C 12	6.06	1.66	0.090
45. BD (1) C 23 - H 35	/284. RY*(9) C 12	1.27	2.84	0.054
45. BD (1) C 23 - H 35	/285. RY*(10) C 12	2.83	3.14	0.084
45. BD (1) C 23 - H 35	/286. RY*(11) C 12	30.16	1.32	0.178
45. BD (1) C 23 - H 35	/287. RY*(12) C 12	5.28	2.41	0.101
45. BD (1) C 23 - H 35	/288. RY*(13) C 12	3.24	1.87	0.070
45. BD (1) C 23 - H 35	/296. RY*(4) C 13	0.84	1.47	0.032
45. BD (1) C 23 - H 35	/298. RY*(6) C 13	3.85	1.53	0.069
45. BD (1) C 23 - H 35	/299. RY*(7) C 13	6.01	2.23	0.104
45. BD (1) C 23 - H 35	/300. RY*(8) C 13	1.07	2.87	0.050
45. BD (1) C 23 - H 35	/301. RY*(9) C 13	0.95	2.46	0.043
45. BD (1) C 23 - H 35	/302. RY*(10) C 13	0.68	2.62	0.038
45. BD (1) C 23 - H 35	/303. RY*(11) C 13	0.65	1.01	0.023

45. BD (1) C 23 - H 35	/305. RY*(13) C 13	0.72	2.61	0.039
45. BD (1) C 23 - H 35	/309. RY*(17) C 13	0.68	2.13	0.034
45. BD (1) C 23 - H 35	/318. RY*(9) C 14	1.45	2.45	0.053
45. BD (1) C 23 - H 35	/319. RY*(10) C 14	1.72	1.70	0.048
45. BD (1) C 23 - H 35	/323. RY*(14) C 14	0.60	1.86	0.030
45. BD (1) C 23 - H 35	/326. RY*(17) C 14	2.35	2.14	0.064
45. BD (1) C 23 - H 35	/327. RY*(1) C 15	1.20	1.63	0.039
45. BD (1) C 23 - H 35	/330. RY*(4) C 15	9.10	1.38	0.100
45. BD (1) C 23 - H 35	/331. RY*(5) C 15	0.98	1.82	0.038
45. BD (1) C 23 - H 35	/334. RY*(8) C 15	3.59	1.49	0.065
45. BD (1) C 23 - H 35	/338. RY*(12) C 15	2.42	1.27	0.050
45. BD (1) C 23 - H 35	/339. RY*(13) C 15	1.97	1.95	0.056
45. BD (1) C 23 - H 35	/340. RY*(14) C 15	3.48	3.02	0.092
45. BD (1) C 23 - H 35	/345. RY*(2) C 16	2.19	1.48	0.051
45. BD (1) C 23 - H 35	/346. RY*(3) C 16	0.54	1.27	0.023
45. BD (1) C 23 - H 35	/348. RY*(5) C 16	24.71	1.83	0.191
45. BD (1) C 23 - H 35	/351. RY*(8) C 16	3.53	2.00	0.075
45. BD (1) C 23 - H 35	/352. RY*(9) C 16	4.07	2.20	0.085
45. BD (1) C 23 - H 35	/354. RY*(11) C 16	2.20	3.42	0.078
45. BD (1) C 23 - H 35	/355. RY*(12) C 16	1.22	4.06	0.063
45. BD (1) C 23 - H 35	/357. RY*(14) C 16	16.83	2.23	0.173
45. BD (1) C 23 - H 35	/358. RY*(15) C 16	23.64	1.87	0.188
45. BD (1) C 23 - H 35	/361. RY*(1) C 17	1.15	1.54	0.038
45. BD (1) C 23 - H 35	/362. RY*(2) C 17	1.26	1.97	0.045
45. BD (1) C 23 - H 35	/365. RY*(5) C 17	20.66	1.45	0.155
45. BD (1) C 23 - H 35	/367. RY*(7) C 17	1.46	2.52	0.054
45. BD (1) C 23 - H 35	/368. RY*(8) C 17	4.43	1.50	0.073
45. BD (1) C 23 - H 35	/370. RY*(10) C 17	20.07	3.64	0.242

45. BD (1) C 23 - H 35	/371. RY*(11) C 17	9.49	2.31	0.133
45. BD (1) C 23 - H 35	/372. RY*(12) C 17	7.92	3.46	0.148
45. BD (1) C 23 - H 35	/373. RY*(13) C 17	46.16	2.15	0.282
45. BD (1) C 23 - H 35	/380. RY*(4) C 18	0.68	2.17	0.034
45. BD (1) C 23 - H 35	/382. RY*(6) C 18	3.02	1.66	0.063
45. BD (1) C 23 - H 35	/383. RY*(7) C 18	33.00	1.26	0.182
45. BD (1) C 23 - H 35	/385. RY*(9) C 18	3.08	2.38	0.077
45. BD (1) C 23 - H 35	/386. RY*(10) C 18	4.62	2.49	0.096
45. BD (1) C 23 - H 35	/387. RY*(11) C 18	8.63	4.44	0.175
45. BD (1) C 23 - H 35	/388. RY*(12) C 18	7.00	2.72	0.124
45. BD (1) C 23 - H 35	/389. RY*(13) C 18	0.72	3.34	0.044
45. BD (1) C 23 - H 35	/392. RY*(16) C 18	41.83	0.90	0.174
45. BD (1) C 23 - H 35	/395. RY*(2) C 19	26.04	1.32	0.166
45. BD (1) C 23 - H 35	/396. RY*(3) C 19	0.95	1.98	0.039
45. BD (1) C 23 - H 35	/402. RY*(9) C 19	0.60	1.30	0.025
45. BD (1) C 23 - H 35	/405. RY*(12) C 19	1.53	1.45	0.042
45. BD (1) C 23 - H 35	/413. RY*(3) C 20	1.39	1.04	0.034
45. BD (1) C 23 - H 35	/417. RY*(7) C 20	2.63	2.29	0.070
45. BD (1) C 23 - H 35	/426. RY*(16) C 20	0.51	0.94	0.020
45. BD (1) C 23 - H 35	/427. RY*(17) C 20	0.68	2.50	0.037
45. BD (1) C 23 - H 35	/433. RY*(6) C 21	1.66	1.61	0.046
45. BD (1) C 23 - H 35	/437. RY*(10) C 21	0.52	2.02	0.029
45. BD (1) C 23 - H 35	/438. RY*(11) C 21	1.65	0.98	0.036
45. BD (1) C 23 - H 35	/447. RY*(3) C 22	0.66	1.02	0.023
45. BD (1) C 23 - H 35	/449. RY*(5) C 22	1.58	1.92	0.049
45. BD (1) C 23 - H 35	/450. RY*(6) C 22	1.38	1.53	0.041
45. BD (1) C 23 - H 35	/451. RY*(7) C 22	4.73	1.83	0.083
45. BD (1) C 23 - H 35	/454. RY*(10) C 22	1.02	2.90	0.049

45. BD (1) C 23 - H 35	/455. RY*(11) C 22	0.61	1.77	0.029
45. BD (1) C 23 - H 35	/457. RY*(13) C 22	1.11	2.05	0.043
45. BD (1) C 23 - H 35	/458. RY*(14) C 22	1.89	1.19	0.042
45. BD (1) C 23 - H 35	/462. RY*(1) C 23	408.90	0.42	0.373
45. BD (1) C 23 - H 35	/463. RY*(2) C 23	58.04	0.99	0.214
45. BD (1) C 23 - H 35	/464. RY*(3) C 23	14.99	1.31	0.126
45. BD (1) C 23 - H 35	/465. RY*(4) C 23	87.97	1.24	0.296
45. BD (1) C 23 - H 35	/467. RY*(6) C 23	0.98	2.07	0.040
45. BD (1) C 23 - H 35	/469. RY*(8) C 23	131.04	1.31	0.371
45. BD (1) C 23 - H 35	/471. RY*(10) C 23	251.16	1.09	0.470
45. BD (1) C 23 - H 35	/473. RY*(12) C 23	1.27	2.37	0.049
45. BD (1) C 23 - H 35	/474. RY*(13) C 23	4.66	3.27	0.111
45. BD (1) C 23 - H 35	/475. RY*(14) C 23	1.76	22.82	0.180
45. BD (1) C 23 - H 35	/476. RY*(15) C 23	70.61	1.54	0.296
45. BD (1) C 23 - H 35	/477. RY*(16) C 23	178.54	1.52	0.467
45. BD (1) C 23 - H 35	/478. RY*(17) C 23	1.14	2.88	0.051
45. BD (1) C 23 - H 35	/479. RY*(1) H 24	5.60	1.16	0.072
45. BD (1) C 23 - H 35	/483. RY*(5) H 24	2.53	3.10	0.079
45. BD (1) C 23 - H 35	/492. RY*(4) H 26	3.10	2.44	0.078
45. BD (1) C 23 - H 35	/496. RY*(3) H 27	5.39	2.03	0.094
45. BD (1) C 23 - H 35	/497. RY*(4) H 27	469.66	0.62	0.485
45. BD (1) C 23 - H 35	/498. RY*(5) H 27	1.73	2.97	0.064
45. BD (1) C 23 - H 35	/499. RY*(1) H 28	2.98	1.41	0.058
45. BD (1) C 23 - H 35	/500. RY*(2) H 28	2.14	2.44	0.065
45. BD (1) C 23 - H 35	/502. RY*(4) H 28	10.99	2.27	0.141
45. BD (1) C 23 - H 35	/504. RY*(1) H 29	0.79	1.16	0.027
45. BD (1) C 23 - H 35	/506. RY*(3) H 29	14.10	2.82	0.178
45. BD (1) C 23 - H 35	/507. RY*(4) H 29	0.52	3.27	0.037

45. BD (1) C 23 - H 35	/509. RY*(1) H 30	2.73	1.42	0.056
45. BD (1) C 23 - H 35	/511. RY*(3) H 30	1.05	2.12	0.042
45. BD (1) C 23 - H 35	/528. RY*(1) H 34	1.54	1.92	0.049
45. BD (1) C 23 - H 35	/529. RY*(2) H 34	254.91	0.71	0.381
45. BD (1) C 23 - H 35	/530. RY*(3) H 34	10.84	2.26	0.140
45. BD (1) C 23 - H 35	/531. RY*(4) H 34	1.00	2.33	0.043
45. BD (1) C 23 - H 35	/533. RY*(1) H 35	30.77	1.25	0.175
45. BD (1) C 23 - H 35	/534. RY*(2) H 35	97.94	1.41	0.332
45. BD (1) C 23 - H 35	/535. RY*(3) H 35	7.68	2.26	0.118
45. BD (1) C 23 - H 35	/536. RY*(4) H 35	2.69	2.29	0.070
45. BD (1) C 23 - H 35	/537. RY*(5) H 35	1.02	3.20	0.051
45. BD (1) C 23 - H 35	/540. RY*(3) H 36	17.30	0.77	0.104
45. BD (1) C 23 - H 35	/542. RY*(5) H 36	16.32	2.28	0.173
45. BD (1) C 23 - H 35	/545. BD*(1) S 1 - N 6	3.62	0.65	0.046
45. BD (1) C 23 - H 35	/562. BD*(1) C 10 - C 11	0.77	0.97	0.024
45. BD (1) C 23 - H 35	/572. BD*(1) C 14 - H 27	4.58	0.91	0.058
45. BD (1) C 23 - H 35	/574. BD*(2) C 15 - C 16	1.18	0.54	0.025
45. BD (1) C 23 - H 35	/576. BD*(1) C 18 - C 22	4.71	1.04	0.063
45. BD (1) C 23 - H 35	/578. BD*(2) C 19 - C 20	136.57	0.27	0.185
45. BD (1) C 23 - H 35	/580. BD*(1) C 20 - C 21	2.08	1.11	0.043
45. BD (1) C 23 - H 35	/581. BD*(1) C 20 - H 30	2.31	0.96	0.042
45. BD (1) C 23 - H 35	/582. BD*(1) C 21 - C 22	1.52	1.10	0.037
45. BD (1) C 23 - H 35	/583. BD*(2) C 21 - C 22	16.99	0.49	0.087
45. BD (1) C 23 - H 35	/586. BD*(1) C 23 - H 34	21.54	3.56	0.248
45. BD (1) C 23 - H 35	/587. BD*(1) C 23 - H 35	7.96	3.84	0.156
45. BD (1) C 23 - H 35	/588. BD*(1) C 23 - H 36	19.87	3.21	0.225
46. BD (1) C 23 - H 36	/ 87. RY*(1) S 1	10.79	1.26	0.106
46. BD (1) C 23 - H 36	/ 88. RY*(2) S 1	10.02	1.19	0.099

46. BD (1) C 23 - H 36	/ 89. RY*(3) S 1	1.37	1.35	0.039
46. BD (1) C 23 - H 36	/ 90. RY*(4) S 1	1.55	1.29	0.040
46. BD (1) C 23 - H 36	/ 92. RY*(6) S 1	7.52	2.10	0.112
46. BD (1) C 23 - H 36	/ 95. RY*(9) S 1	12.86	1.50	0.124
46. BD (1) C 23 - H 36	/ 96. RY*(10) S 1	13.65	1.38	0.122
46. BD (1) C 23 - H 36	/ 97. RY*(11) S 1	1.14	1.80	0.040
46. BD (1) C 23 - H 36	/ 98. RY*(12) S 1	532.11	0.84	0.598
46. BD (1) C 23 - H 36	/100. RY*(14) S 1	102.23	1.18	0.310
46. BD (1) C 23 - H 36	/101. RY*(15) S 1	350.59	0.84	0.486
46. BD (1) C 23 - H 36	/103. RY*(17) S 1	0.80	15.15	0.098
46. BD (1) C 23 - H 36	/108. RY*(1) O 2	3.80	1.59	0.069
46. BD (1) C 23 - H 36	/109. RY*(2) O 2	5.17	1.29	0.073
46. BD (1) C 23 - H 36	/110. RY*(3) O 2	12.75	1.44	0.121
46. BD (1) C 23 - H 36	/112. RY*(5) O 2	166.61	1.20	0.399
46. BD (1) C 23 - H 36	/113. RY*(6) O 2	4.18	1.43	0.069
46. BD (1) C 23 - H 36	/114. RY*(7) O 2	52.70	2.12	0.299
46. BD (1) C 23 - H 36	/115. RY*(8) O 2	4.47	1.89	0.082
46. BD (1) C 23 - H 36	/116. RY*(9) O 2	2.21	3.34	0.077
46. BD (1) C 23 - H 36	/117. RY*(10) O 2	2.59	3.31	0.083
46. BD (1) C 23 - H 36	/122. RY*(15) O 2	2.06	3.16	0.072
46. BD (1) C 23 - H 36	/123. RY*(16) O 2	0.72	3.62	0.046
46. BD (1) C 23 - H 36	/124. RY*(17) O 2	2.89	5.23	0.110
46. BD (1) C 23 - H 36	/125. RY*(1) O 3	1.73	1.66	0.048
46. BD (1) C 23 - H 36	/127. RY*(3) O 3	33.66	1.39	0.193
46. BD (1) C 23 - H 36	/128. RY*(4) O 3	5.52	1.10	0.070
46. BD (1) C 23 - H 36	/129. RY*(5) O 3	14.42	1.56	0.134
46. BD (1) C 23 - H 36	/130. RY*(6) O 3	167.02	1.10	0.383
46. BD (1) C 23 - H 36	/131. RY*(7) O 3	17.28	2.34	0.180

46. BD (1) C 23 - H 36	/132. RY*(8) O 3	1.08	1.60	0.037
46. BD (1) C 23 - H 36	/133. RY*(9) O 3	6.33	3.41	0.131
46. BD (1) C 23 - H 36	/135. RY*(11) O 3	0.95	5.48	0.064
46. BD (1) C 23 - H 36	/139. RY*(15) O 3	0.65	3.14	0.040
46. BD (1) C 23 - H 36	/140. RY*(16) O 3	3.60	3.56	0.101
46. BD (1) C 23 - H 36	/142. RY*(1) O 4	2357.92	0.16	0.541
46. BD (1) C 23 - H 36	/145. RY*(4) O 4	1.37	1.77	0.044
46. BD (1) C 23 - H 36	/147. RY*(6) O 4	5.06	1.79	0.085
46. BD (1) C 23 - H 36	/148. RY*(7) O 4	0.53	2.67	0.034
46. BD (1) C 23 - H 36	/158. RY*(1) O 5	0.57	1.01	0.021
46. BD (1) C 23 - H 36	/159. RY*(2) O 5	0.82	1.37	0.030
46. BD (1) C 23 - H 36	/160. RY*(3) O 5	12.58	1.21	0.110
46. BD (1) C 23 - H 36	/162. RY*(5) O 5	1.62	2.02	0.051
46. BD (1) C 23 - H 36	/163. RY*(6) O 5	1.41	1.79	0.045
46. BD (1) C 23 - H 36	/164. RY*(7) O 5	3.47	2.08	0.076
46. BD (1) C 23 - H 36	/168. RY*(11) O 5	0.57	5.27	0.049
46. BD (1) C 23 - H 36	/175. RY*(2) N 6	1.26	1.33	0.036
46. BD (1) C 23 - H 36	/176. RY*(3) N 6	4.02	1.47	0.069
46. BD (1) C 23 - H 36	/177. RY*(4) N 6	4.80	1.34	0.072
46. BD (1) C 23 - H 36	/178. RY*(5) N 6	0.78	1.28	0.028
46. BD (1) C 23 - H 36	/180. RY*(7) N 6	4.95	1.57	0.079
46. BD (1) C 23 - H 36	/186. RY*(13) N 6	3.09	3.61	0.094
46. BD (1) C 23 - H 36	/188. RY*(15) N 6	6.30	4.40	0.149
46. BD (1) C 23 - H 36	/190. RY*(17) N 6	51.91	31.99	1.152
46. BD (1) C 23 - H 36	/191. RY*(1) N 7	63.35	1.06	0.232
46. BD (1) C 23 - H 36	/192. RY*(2) N 7	1.51	1.21	0.038
46. BD (1) C 23 - H 36	/193. RY*(3) N 7	0.83	1.25	0.029
46. BD (1) C 23 - H 36	/195. RY*(5) N 7	121.59	1.01	0.313

46. BD (1) C 23 - H 36	/196. RY*(6) N 7	2.50	1.70	0.058
46. BD (1) C 23 - H 36	/197. RY*(7) N 7	4.28	2.33	0.089
46. BD (1) C 23 - H 36	/198. RY*(8) N 7	38.89	2.02	0.251
46. BD (1) C 23 - H 36	/199. RY*(9) N 7	60.76	2.80	0.368
46. BD (1) C 23 - H 36	/200. RY*(10) N 7	160.48	1.49	0.437
46. BD (1) C 23 - H 36	/201. RY*(11) N 7	0.62	3.48	0.041
46. BD (1) C 23 - H 36	/202. RY*(12) N 7	1.78	2.66	0.061
46. BD (1) C 23 - H 36	/204. RY*(14) N 7	5.30	3.23	0.117
46. BD (1) C 23 - H 36	/208. RY*(1) N 8	47.91	1.09	0.204
46. BD (1) C 23 - H 36	/211. RY*(4) N 8	0.64	2.59	0.036
46. BD (1) C 23 - H 36	/212. RY*(5) N 8	16.65	2.00	0.163
46. BD (1) C 23 - H 36	/213. RY*(6) N 8	0.98	1.79	0.037
46. BD (1) C 23 - H 36	/214. RY*(7) N 8	2.34	1.71	0.057
46. BD (1) C 23 - H 36	/215. RY*(8) N 8	1.86	1.96	0.054
46. BD (1) C 23 - H 36	/216. RY*(9) N 8	14.74	3.31	0.197
46. BD (1) C 23 - H 36	/217. RY*(10) N 8	10.26	1.33	0.105
46. BD (1) C 23 - H 36	/225. RY*(1) C 9	1.19	1.72	0.040
46. BD (1) C 23 - H 36	/226. RY*(2) C 9	6.55	1.38	0.085
46. BD (1) C 23 - H 36	/227. RY*(3) C 9	6.81	1.47	0.089
46. BD (1) C 23 - H 36	/228. RY*(4) C 9	6.52	1.71	0.094
46. BD (1) C 23 - H 36	/229. RY*(5) C 9	7.57	2.34	0.119
46. BD (1) C 23 - H 36	/230. RY*(6) C 9	30.08	1.57	0.194
46. BD (1) C 23 - H 36	/231. RY*(7) C 9	224.37	1.42	0.505
46. BD (1) C 23 - H 36	/232. RY*(8) C 9	105.61	1.74	0.383
46. BD (1) C 23 - H 36	/233. RY*(9) C 9	123.36	2.65	0.510
46. BD (1) C 23 - H 36	/234. RY*(10) C 9	216.16	1.62	0.529
46. BD (1) C 23 - H 36	/235. RY*(11) C 9	14899.78	0.05	0.790
46. BD (1) C 23 - H 36	/236. RY*(12) C 9	15.21	2.51	0.175

46. BD (1) C 23 - H 36	/237. RY*(13) C 9	451.04	2.06	0.860
46. BD (1) C 23 - H 36	/238. RY*(14) C 9	14.26	2.61	0.172
46. BD (1) C 23 - H 36	/239. RY*(15) C 9	11.43	2.89	0.162
46. BD (1) C 23 - H 36	/240. RY*(16) C 9	3.97	3.74	0.109
46. BD (1) C 23 - H 36	/241. RY*(17) C 9	7.03	19.90	0.334
46. BD (1) C 23 - H 36	/242. RY*(1) C 10	91.95	1.33	0.312
46. BD (1) C 23 - H 36	/244. RY*(3) C 10	4.83	2.04	0.089
46. BD (1) C 23 - H 36	/245. RY*(4) C 10	16.76	2.00	0.164
46. BD (1) C 23 - H 36	/246. RY*(5) C 10	5.80	1.50	0.083
46. BD (1) C 23 - H 36	/249. RY*(8) C 10	0.85	2.19	0.038
46. BD (1) C 23 - H 36	/250. RY*(9) C 10	4.82	2.19	0.092
46. BD (1) C 23 - H 36	/251. RY*(10) C 10	16.30	1.76	0.152
46. BD (1) C 23 - H 36	/252. RY*(11) C 10	426.07	0.76	0.509
46. BD (1) C 23 - H 36	/253. RY*(12) C 10	14.63	1.98	0.152
46. BD (1) C 23 - H 36	/255. RY*(14) C 10	5.14	2.11	0.093
46. BD (1) C 23 - H 36	/256. RY*(15) C 10	13.70	3.47	0.195
46. BD (1) C 23 - H 36	/257. RY*(16) C 10	0.69	17.81	0.099
46. BD (1) C 23 - H 36	/258. RY*(17) C 10	1.44	3.15	0.060
46. BD (1) C 23 - H 36	/260. RY*(2) C 11	15.68	1.74	0.147
46. BD (1) C 23 - H 36	/261. RY*(3) C 11	2.61	1.28	0.052
46. BD (1) C 23 - H 36	/262. RY*(4) C 11	1.75	1.55	0.046
46. BD (1) C 23 - H 36	/263. RY*(5) C 11	9.44	1.76	0.115
46. BD (1) C 23 - H 36	/264. RY*(6) C 11	2.02	1.68	0.052
46. BD (1) C 23 - H 36	/265. RY*(7) C 11	20.40	2.08	0.184
46. BD (1) C 23 - H 36	/266. RY*(8) C 11	5.00	1.86	0.086
46. BD (1) C 23 - H 36	/267. RY*(9) C 11	93.77	1.68	0.354
46. BD (1) C 23 - H 36	/268. RY*(10) C 11	50.31	2.37	0.309
46. BD (1) C 23 - H 36	/270. RY*(12) C 11	193.03	1.44	0.470

46. BD (1) C 23 - H 36	/271. RY*(13) C 11	0.92	3.35	0.049
46. BD (1) C 23 - H 36	/272. RY*(14) C 11	1.77	4.78	0.082
46. BD (1) C 23 - H 36	/273. RY*(15) C 11	52.31	2.08	0.295
46. BD (1) C 23 - H 36	/274. RY*(16) C 11	21.32	3.10	0.230
46. BD (1) C 23 - H 36	/278. RY*(3) C 12	2.20	1.01	0.042
46. BD (1) C 23 - H 36	/279. RY*(4) C 12	32.49	1.43	0.193
46. BD (1) C 23 - H 36	/280. RY*(5) C 12	8.09	1.33	0.093
46. BD (1) C 23 - H 36	/281. RY*(6) C 12	19.30	1.62	0.158
46. BD (1) C 23 - H 36	/282. RY*(7) C 12	1.21	1.75	0.041
46. BD (1) C 23 - H 36	/283. RY*(8) C 12	0.87	2.72	0.043
46. BD (1) C 23 - H 36	/284. RY*(9) C 12	3.94	2.79	0.094
46. BD (1) C 23 - H 36	/285. RY*(10) C 12	8.97	3.09	0.149
46. BD (1) C 23 - H 36	/286. RY*(11) C 12	98.57	1.27	0.316
46. BD (1) C 23 - H 36	/287. RY*(12) C 12	16.64	2.36	0.177
46. BD (1) C 23 - H 36	/288. RY*(13) C 12	10.49	1.82	0.124
46. BD (1) C 23 - H 36	/292. RY*(17) C 12	0.82	3.01	0.044
46. BD (1) C 23 - H 36	/295. RY*(3) C 13	1.26	1.42	0.038
46. BD (1) C 23 - H 36	/296. RY*(4) C 13	2.70	1.42	0.055
46. BD (1) C 23 - H 36	/298. RY*(6) C 13	12.51	1.49	0.122
46. BD (1) C 23 - H 36	/299. RY*(7) C 13	19.23	2.18	0.183
46. BD (1) C 23 - H 36	/300. RY*(8) C 13	3.43	2.83	0.088
46. BD (1) C 23 - H 36	/301. RY*(9) C 13	3.06	2.42	0.077
46. BD (1) C 23 - H 36	/302. RY*(10) C 13	2.12	2.57	0.066
46. BD (1) C 23 - H 36	/303. RY*(11) C 13	2.21	0.97	0.041
46. BD (1) C 23 - H 36	/304. RY*(12) C 13	0.61	3.12	0.039
46. BD (1) C 23 - H 36	/305. RY*(13) C 13	2.29	2.56	0.068
46. BD (1) C 23 - H 36	/309. RY*(17) C 13	2.14	2.09	0.060
46. BD (1) C 23 - H 36	/314. RY*(5) C 14	1.11	1.38	0.035

46. BD (1) C 23 - H 36	/316. RY*(7) C 14	1.03	2.06	0.041
46. BD (1) C 23 - H 36	/318. RY*(9) C 14	4.44	2.41	0.092
46. BD (1) C 23 - H 36	/319. RY*(10) C 14	5.41	1.66	0.085
46. BD (1) C 23 - H 36	/320. RY*(11) C 14	0.85	2.42	0.040
46. BD (1) C 23 - H 36	/323. RY*(14) C 14	2.16	1.81	0.056
46. BD (1) C 23 - H 36	/326. RY*(17) C 14	7.49	2.10	0.112
46. BD (1) C 23 - H 36	/327. RY*(1) C 15	4.36	1.59	0.074
46. BD (1) C 23 - H 36	/330. RY*(4) C 15	29.68	1.33	0.178
46. BD (1) C 23 - H 36	/331. RY*(5) C 15	3.10	1.77	0.066
46. BD (1) C 23 - H 36	/332. RY*(6) C 15	0.67	1.33	0.027
46. BD (1) C 23 - H 36	/334. RY*(8) C 15	12.22	1.45	0.119
46. BD (1) C 23 - H 36	/335. RY*(9) C 15	1.17	4.31	0.063
46. BD (1) C 23 - H 36	/337. RY*(11) C 15	1.61	2.39	0.056
46. BD (1) C 23 - H 36	/338. RY*(12) C 15	8.56	1.23	0.092
46. BD (1) C 23 - H 36	/339. RY*(13) C 15	6.28	1.90	0.098
46. BD (1) C 23 - H 36	/340. RY*(14) C 15	9.85	2.98	0.153
46. BD (1) C 23 - H 36	/345. RY*(2) C 16	7.54	1.44	0.093
46. BD (1) C 23 - H 36	/346. RY*(3) C 16	2.19	1.23	0.046
46. BD (1) C 23 - H 36	/347. RY*(4) C 16	1.67	1.47	0.044
46. BD (1) C 23 - H 36	/348. RY*(5) C 16	78.88	1.79	0.336
46. BD (1) C 23 - H 36	/349. RY*(6) C 16	0.58	1.51	0.027
46. BD (1) C 23 - H 36	/351. RY*(8) C 16	11.99	1.96	0.137
46. BD (1) C 23 - H 36	/352. RY*(9) C 16	12.30	2.16	0.146
46. BD (1) C 23 - H 36	/353. RY*(10) C 16	1.10	1.55	0.037
46. BD (1) C 23 - H 36	/354. RY*(11) C 16	6.93	3.38	0.137
46. BD (1) C 23 - H 36	/355. RY*(12) C 16	3.97	4.01	0.113
46. BD (1) C 23 - H 36	/356. RY*(13) C 16	1.91	1.66	0.050
46. BD (1) C 23 - H 36	/357. RY*(14) C 16	54.84	2.18	0.309

46. BD (1) C 23 - H 36	/358. RY*(15) C 16	75.27	1.82	0.331
46. BD (1) C 23 - H 36	/361. RY*(1) C 17	3.79	1.50	0.067
46. BD (1) C 23 - H 36	/362. RY*(2) C 17	3.68	1.93	0.075
46. BD (1) C 23 - H 36	/363. RY*(3) C 17	0.78	1.94	0.035
46. BD (1) C 23 - H 36	/365. RY*(5) C 17	64.64	1.41	0.269
46. BD (1) C 23 - H 36	/367. RY*(7) C 17	4.77	2.47	0.097
46. BD (1) C 23 - H 36	/368. RY*(8) C 17	13.40	1.46	0.125
46. BD (1) C 23 - H 36	/370. RY*(10) C 17	64.80	3.60	0.432
46. BD (1) C 23 - H 36	/371. RY*(11) C 17	29.08	2.26	0.229
46. BD (1) C 23 - H 36	/372. RY*(12) C 17	24.90	3.41	0.261
46. BD (1) C 23 - H 36	/373. RY*(13) C 17	144.11	2.11	0.493
46. BD (1) C 23 - H 36	/375. RY*(15) C 17	0.52	5.98	0.050
46. BD (1) C 23 - H 36	/379. RY*(3) C 18	1.35	1.96	0.046
46. BD (1) C 23 - H 36	/380. RY*(4) C 18	2.02	2.13	0.059
46. BD (1) C 23 - H 36	/382. RY*(6) C 18	9.75	1.62	0.112
46. BD (1) C 23 - H 36	/383. RY*(7) C 18	104.37	1.22	0.318
46. BD (1) C 23 - H 36	/385. RY*(9) C 18	9.46	2.34	0.133
46. BD (1) C 23 - H 36	/386. RY*(10) C 18	13.87	2.45	0.165
46. BD (1) C 23 - H 36	/387. RY*(11) C 18	26.46	4.40	0.305
46. BD (1) C 23 - H 36	/388. RY*(12) C 18	21.33	2.68	0.214
46. BD (1) C 23 - H 36	/389. RY*(13) C 18	2.20	3.30	0.076
46. BD (1) C 23 - H 36	/392. RY*(16) C 18	137.88	0.86	0.308
46. BD (1) C 23 - H 36	/395. RY*(2) C 19	83.10	1.28	0.291
46. BD (1) C 23 - H 36	/396. RY*(3) C 19	3.05	1.94	0.069
46. BD (1) C 23 - H 36	/397. RY*(4) C 19	0.63	1.96	0.031
46. BD (1) C 23 - H 36	/398. RY*(5) C 19	0.66	1.27	0.026
46. BD (1) C 23 - H 36	/402. RY*(9) C 19	1.98	1.26	0.045
46. BD (1) C 23 - H 36	/403. RY*(10) C 19	1.16	0.98	0.030

46. BD (1) C 23 - H 36	/405. RY*(12) C 19	4.79	1.41	0.073
46. BD (1) C 23 - H 36	/408. RY*(15) C 19	0.70	1.70	0.031
46. BD (1) C 23 - H 36	/409. RY*(16) C 19	0.54	3.29	0.038
46. BD (1) C 23 - H 36	/413. RY*(3) C 20	4.53	1.00	0.060
46. BD (1) C 23 - H 36	/414. RY*(4) C 20	0.86	1.25	0.029
46. BD (1) C 23 - H 36	/415. RY*(5) C 20	1.06	1.49	0.036
46. BD (1) C 23 - H 36	/417. RY*(7) C 20	8.16	2.25	0.121
46. BD (1) C 23 - H 36	/421. RY*(11) C 20	1.21	2.06	0.045
46. BD (1) C 23 - H 36	/426. RY*(16) C 20	1.59	0.90	0.034
46. BD (1) C 23 - H 36	/427. RY*(17) C 20	2.12	2.46	0.064
46. BD (1) C 23 - H 36	/431. RY*(4) C 21	1.05	1.61	0.037
46. BD (1) C 23 - H 36	/432. RY*(5) C 21	0.62	1.23	0.025
46. BD (1) C 23 - H 36	/433. RY*(6) C 21	5.15	1.57	0.080
46. BD (1) C 23 - H 36	/437. RY*(10) C 21	1.79	1.98	0.053
46. BD (1) C 23 - H 36	/438. RY*(11) C 21	5.34	0.93	0.063
46. BD (1) C 23 - H 36	/440. RY*(13) C 21	1.01	2.56	0.045
46. BD (1) C 23 - H 36	/446. RY*(2) C 22	0.69	1.73	0.031
46. BD (1) C 23 - H 36	/447. RY*(3) C 22	2.36	0.98	0.043
46. BD (1) C 23 - H 36	/449. RY*(5) C 22	5.33	1.88	0.089
46. BD (1) C 23 - H 36	/450. RY*(6) C 22	4.77	1.48	0.075
46. BD (1) C 23 - H 36	/451. RY*(7) C 22	14.98	1.79	0.146
46. BD (1) C 23 - H 36	/452. RY*(8) C 22	0.86	2.65	0.043
46. BD (1) C 23 - H 36	/454. RY*(10) C 22	3.27	2.86	0.086
46. BD (1) C 23 - H 36	/455. RY*(11) C 22	2.44	1.73	0.058
46. BD (1) C 23 - H 36	/457. RY*(13) C 22	3.54	2.01	0.075
46. BD (1) C 23 - H 36	/458. RY*(14) C 22	6.55	1.14	0.077
46. BD (1) C 23 - H 36	/461. RY*(17) C 22	0.69	2.68	0.038
46. BD (1) C 23 - H 36	/462. RY*(1) C 23	1411.36	0.38	0.655

46. BD (1) C 23 - H 36	/463. RY*(2) C 23	192.82	0.94	0.381
46. BD (1) C 23 - H 36	/464. RY*(3) C 23	53.57	1.27	0.233
46. BD (1) C 23 - H 36	/465. RY*(4) C 23	297.49	1.20	0.534
46. BD (1) C 23 - H 36	/467. RY*(6) C 23	2.60	2.03	0.065
46. BD (1) C 23 - H 36	/469. RY*(8) C 23	412.71	1.27	0.646
46. BD (1) C 23 - H 36	/471. RY*(10) C 23	852.24	1.05	0.846
46. BD (1) C 23 - H 36	/473. RY*(12) C 23	2.29	2.33	0.065
46. BD (1) C 23 - H 36	/474. RY*(13) C 23	10.84	3.23	0.167
46. BD (1) C 23 - H 36	/475. RY*(14) C 23	5.24	22.77	0.309
46. BD (1) C 23 - H 36	/476. RY*(15) C 23	235.98	1.50	0.532
46. BD (1) C 23 - H 36	/477. RY*(16) C 23	565.15	1.48	0.817
46. BD (1) C 23 - H 36	/478. RY*(17) C 23	5.32	2.84	0.110
46. BD (1) C 23 - H 36	/479. RY*(1) H 24	19.27	1.12	0.131
46. BD (1) C 23 - H 36	/480. RY*(2) H 24	0.57	2.78	0.035
46. BD (1) C 23 - H 36	/481. RY*(3) H 24	1.06	2.11	0.042
46. BD (1) C 23 - H 36	/482. RY*(4) H 24	1.07	2.62	0.047
46. BD (1) C 23 - H 36	/483. RY*(5) H 24	7.59	3.06	0.136
46. BD (1) C 23 - H 36	/484. RY*(1) H 25	1.48	1.36	0.040
46. BD (1) C 23 - H 36	/485. RY*(2) H 25	0.86	2.47	0.041
46. BD (1) C 23 - H 36	/491. RY*(3) H 26	0.91	2.06	0.039
46. BD (1) C 23 - H 36	/492. RY*(4) H 26	9.86	2.40	0.137
46. BD (1) C 23 - H 36	/494. RY*(1) H 27	0.73	1.19	0.026
46. BD (1) C 23 - H 36	/496. RY*(3) H 27	17.17	1.99	0.165
46. BD (1) C 23 - H 36	/497. RY*(4) H 27	1581.77	0.58	0.857
46. BD (1) C 23 - H 36	/498. RY*(5) H 27	6.31	2.93	0.121
46. BD (1) C 23 - H 36	/499. RY*(1) H 28	9.82	1.37	0.104
46. BD (1) C 23 - H 36	/500. RY*(2) H 28	7.10	2.40	0.117
46. BD (1) C 23 - H 36	/502. RY*(4) H 28	36.04	2.23	0.253

46. BD (1) C 23 - H 36	/504. RY*(1) H 29	2.56	1.11	0.048
46. BD (1) C 23 - H 36	/505. RY*(2) H 29	1.33	2.09	0.047
46. BD (1) C 23 - H 36	/506. RY*(3) H 29	43.87	2.77	0.312
46. BD (1) C 23 - H 36	/507. RY*(4) H 29	2.80	3.23	0.085
46. BD (1) C 23 - H 36	/508. RY*(5) H 29	2.01	2.60	0.065
46. BD (1) C 23 - H 36	/509. RY*(1) H 30	6.66	1.38	0.086
46. BD (1) C 23 - H 36	/511. RY*(3) H 30	4.58	2.08	0.087
46. BD (1) C 23 - H 36	/516. RY*(3) H 31	0.67	2.06	0.033
46. BD (1) C 23 - H 36	/517. RY*(4) H 31	0.79	2.46	0.039
46. BD (1) C 23 - H 36	/528. RY*(1) H 34	4.56	1.88	0.083
46. BD (1) C 23 - H 36	/529. RY*(2) H 34	855.25	0.67	0.675
46. BD (1) C 23 - H 36	/530. RY*(3) H 34	30.71	2.21	0.233
46. BD (1) C 23 - H 36	/531. RY*(4) H 34	3.46	2.29	0.079
46. BD (1) C 23 - H 36	/533. RY*(1) H 35	99.60	1.20	0.309
46. BD (1) C 23 - H 36	/534. RY*(2) H 35	324.41	1.36	0.594
46. BD (1) C 23 - H 36	/535. RY*(3) H 35	18.98	2.22	0.183
46. BD (1) C 23 - H 36	/536. RY*(4) H 35	10.31	2.24	0.136
46. BD (1) C 23 - H 36	/537. RY*(5) H 35	2.09	3.16	0.073
46. BD (1) C 23 - H 36	/540. RY*(3) H 36	1.12	0.73	0.026
46. BD (1) C 23 - H 36	/542. RY*(5) H 36	45.29	2.23	0.284
46. BD (1) C 23 - H 36	/543. BD*(1) S 1 - O 2	0.53	0.76	0.019
46. BD (1) C 23 - H 36	/548. BD*(2) O 4 - C 17	0.50	0.46	0.015
46. BD (1) C 23 - H 36	/562. BD*(1) C 10 - C 11	2.33	0.93	0.042
46. BD (1) C 23 - H 36	/571. BD*(1) C 14 - C 15	0.69	1.03	0.024
46. BD (1) C 23 - H 36	/572. BD*(1) C 14 - H 27	14.77	0.87	0.101
46. BD (1) C 23 - H 36	/574. BD*(2) C 15 - C 16	4.78	0.49	0.048
46. BD (1) C 23 - H 36	/575. BD*(1) C 15 - H 28	1.21	0.92	0.030
46. BD (1) C 23 - H 36	/576. BD*(1) C 18 - C 22	14.70	1.00	0.109

46. BD (1) C 23 - H 36	/577. BD*(1) C 19 - C 20	0.56	1.04	0.022
46. BD (1) C 23 - H 36	/578. BD*(2) C 19 - C 20	508.38	0.22	0.327
46. BD (1) C 23 - H 36	/580. BD*(1) C 20 - C 21	3.11	1.07	0.052
46. BD (1) C 23 - H 36	/581. BD*(1) C 20 - H 30	5.28	0.92	0.062
46. BD (1) C 23 - H 36	/582. BD*(1) C 21 - C 22	4.96	1.06	0.065
46. BD (1) C 23 - H 36	/583. BD*(2) C 21 - C 22	57.51	0.44	0.154
46. BD (1) C 23 - H 36	/586. BD*(1) C 23 - H 34	32.79	3.52	0.303
46. BD (1) C 23 - H 36	/587. BD*(1) C 23 - H 35	50.45	3.80	0.391
46. BD (1) C 23 - H 36	/588. BD*(1) C 23 - H 36	103.85	3.16	0.513
47. CR (1) S 1	/493. RY*(5) H 26	0.95	72.09	0.233
47. CR (1) S 1	/538. RY*(1) H 36	0.77	72.14	0.210
47. CR (1) S 1	/539. RY*(2) H 36	1.02	71.38	0.241
47. CR (1) S 1	/584. BD*(1) C 21 - H 31	0.92	71.45	0.230
47. CR (1) S 1	/585. BD*(1) C 22 - H 32	1.29	66.59	0.262
48. CR (2) S 1	/ 98. RY*(12) S 1	1.17	9.44	0.094
48. CR (2) S 1	/ 99. RY*(13) S 1	1.68	8.16	0.104
48. CR (2) S 1	/101. RY*(15) S 1	0.66	9.44	0.070
48. CR (2) S 1	/102. RY*(16) S 1	3.57	6.70	0.138
48. CR (2) S 1	/112. RY*(5) O 2	1.03	9.79	0.090
48. CR (2) S 1	/142. RY*(1) O 4	0.74	8.75	0.072
48. CR (2) S 1	/190. RY*(17) N 6	0.67	40.59	0.148
48. CR (2) S 1	/194. RY*(4) N 7	4.56	6.99	0.159
48. CR (2) S 1	/231. RY*(7) C 9	0.56	10.02	0.067
48. CR (2) S 1	/233. RY*(9) C 9	0.51	11.24	0.067
48. CR (2) S 1	/235. RY*(11) C 9	1.64	8.65	0.106
48. CR (2) S 1	/237. RY*(13) C 9	1.62	10.65	0.117
48. CR (2) S 1	/252. RY*(11) C 10	0.61	9.36	0.067
48. CR (2) S 1	/270. RY*(12) C 11	0.58	10.03	0.068

48. CR (2) S 1	/344. RY*(1) C 16	1.15	10.36	0.098
48. CR (2) S 1	/369. RY*(9) C 17	5.77	6.17	0.168
48. CR (2) S 1	/462. RY*(1) C 23	0.95	8.98	0.083
48. CR (2) S 1	/465. RY*(4) C 23	0.57	9.80	0.067
48. CR (2) S 1	/466. RY*(5) C 23	1.40	8.50	0.097
48. CR (2) S 1	/468. RY*(7) C 23	4.29	7.44	0.160
48. CR (2) S 1	/469. RY*(8) C 23	1.29	9.86	0.101
48. CR (2) S 1	/470. RY*(9) C 23	16.06	3.47	0.211
48. CR (2) S 1	/471. RY*(10) C 23	1.35	9.65	0.102
48. CR (2) S 1	/472. RY*(11) C 23	11.75	4.71	0.210
48. CR (2) S 1	/477. RY*(16) C 23	2.10	10.08	0.130
48. CR (2) S 1	/497. RY*(4) H 27	2.03	9.18	0.122
48. CR (2) S 1	/501. RY*(3) H 28	4.50	7.43	0.163
48. CR (2) S 1	/529. RY*(2) H 34	1.15	9.26	0.092
48. CR (2) S 1	/534. RY*(2) H 35	0.80	9.96	0.080
48. CR (2) S 1	/541. RY*(4) H 36	4.88	6.92	0.164
48. CR (2) S 1	/543. BD*(1) S 1 - O 2	1.84	9.36	0.121
48. CR (2) S 1	/544. BD*(1) S 1 - O 3	1.78	9.36	0.120
48. CR (2) S 1	/545. BD*(1) S 1 - N 6	0.74	9.20	0.079
48. CR (2) S 1	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.61	9.43	0.068
48. CR (2) S 1	/552. BD*(1) N 6 - C 23	0.77	9.35	0.076
48. CR (2) S 1	/573. BD*(1) C 15 - C 16	4.12	8.35	0.166
48. CR (2) S 1	/579. BD*(1) C 19 - H 29	0.99	8.53	0.083
49. CR (3) S 1	/470. RY*(9) C 23	1.77	0.48	0.026
49. CR (3) S 1	/472. RY*(11) C 23	0.51	1.71	0.026
50. CR (4) S 1	/102. RY*(16) S 1	0.58	3.70	0.041
50. CR (4) S 1	/194. RY*(4) N 7	0.55	3.99	0.042
50. CR (4) S 1	/369. RY*(9) C 17	0.79	3.17	0.045

50. CR (4) S 1 /470. RY*(9) C 23 8.77 0.48 0.058

50. CR (4) S 1 /472. RY*(11) C 23 2.23 1.71 0.055

50. CR (4) S 1 /501. RY*(3) H 28 0.51 4.44 0.042

50. CR (4) S 1 /541. RY*(4) H 36 0.51 3.93 0.040

50. CR (4) S 1 /573. BD*(1) C 15 - C 16 0.55 5.36 0.049

51. CR (5) S 1 /102. RY*(16) S 1 0.82 3.70 0.049

51. CR (5) S 1 /194. RY*(4) N 7 0.84 3.99 0.052

51. CR (5) S 1 /369. RY*(9) C 17 1.20 3.17 0.055

51. CR (5) S 1 /468. RY*(7) C 23 0.75 4.44 0.051

51. CR (5) S 1 /470. RY*(9) C 23 12.79 0.47 0.070

51. CR (5) S 1 /472. RY*(11) C 23 3.45 1.71 0.069

51. CR (5) S 1 /501. RY*(3) H 28 0.80 4.44 0.053

51. CR (5) S 1 /541. RY*(4) H 36 0.93 3.92 0.054

52. CR (1) O 2 / 87. RY*(1) S 1 0.62 19.67 0.100

52. CR (1) O 2 / 89. RY*(3) S 1 1.27 19.77 0.143

52. CR (1) O 2 / 92. RY*(6) S 1 1.24 20.51 0.142

52. CR (1) O 2 /470. RY*(9) C 23 0.92 13.29 0.099

52. CR (1) O 2 /472. RY*(11) C 23 0.78 14.52 0.095

52. CR (1) O 2 /493. RY*(5) H 26 11.03 3.11 0.165

52. CR (1) O 2 /538. RY*(1) H 36 9.26 3.16 0.153

52. CR (1) O 2 /539. RY*(2) H 36 14.50 2.40 0.166

52. CR (1) O 2 /584. BD*(1) C 21 - H 31 13.05 2.47 0.161

53. CR (1) O 3 / 87. RY*(1) S 1 0.53 19.67 0.092

53. CR (1) O 3 / 89. RY*(3) S 1 1.36 19.76 0.148

53. CR (1) O 3 / 92. RY*(6) S 1 0.81 20.50 0.115

53. CR (1) O 3 / 93. RY*(7) S 1 0.91 20.42 0.122

54. CR (1) O 4 /361. RY*(1) C 17 5.38 19.90 0.293

54. CR (1) O 4 /561. BD*(1) C 9 - C 17 0.56 19.31 0.094

55. CR (1) O 5	/ 92. RY*(6) S 1	0.63	20.84	0.102
55. CR (1) O 5	/ 95. RY*(9) S 1	0.76	20.24	0.111
55. CR (1) O 5	/ 96. RY*(10) S 1	0.68	20.12	0.104
55. CR (1) O 5	/ 98. RY*(12) S 1	18.16	19.59	0.532
55. CR (1) O 5	/ 99. RY*(13) S 1	34.93	18.31	0.714
55. CR (1) O 5	/100. RY*(14) S 1	4.70	19.92	0.273
55. CR (1) O 5	/101. RY*(15) S 1	12.00	19.59	0.433
55. CR (1) O 5	/102. RY*(16) S 1	68.50	16.85	0.959
55. CR (1) O 5	/110. RY*(3) O 2	0.85	20.18	0.117
55. CR (1) O 5	/112. RY*(5) O 2	7.95	19.94	0.355
55. CR (1) O 5	/114. RY*(7) O 2	4.20	20.87	0.264
55. CR (1) O 5	/127. RY*(3) O 3	1.76	20.13	0.168
55. CR (1) O 5	/129. RY*(5) O 3	0.75	20.30	0.110
55. CR (1) O 5	/130. RY*(6) O 3	7.17	19.84	0.337
55. CR (1) O 5	/131. RY*(7) O 3	1.41	21.09	0.154
55. CR (1) O 5	/133. RY*(9) O 3	0.79	22.16	0.118
55. CR (1) O 5	/142. RY*(1) O 4	15.31	18.90	0.481
55. CR (1) O 5	/160. RY*(3) O 5	0.77	19.95	0.111
55. CR (1) O 5	/180. RY*(7) N 6	0.69	20.32	0.106
55. CR (1) O 5	/188. RY*(15) N 6	0.77	23.15	0.119
55. CR (1) O 5	/190. RY*(17) N 6	27.38	50.74	1.052
55. CR (1) O 5	/191. RY*(1) N 7	2.60	19.81	0.203
55. CR (1) O 5	/194. RY*(4) N 7	77.40	17.13	1.028
55. CR (1) O 5	/195. RY*(5) N 7	5.04	19.76	0.282
55. CR (1) O 5	/198. RY*(8) N 7	2.80	20.77	0.215
55. CR (1) O 5	/199. RY*(9) N 7	6.29	21.54	0.329
55. CR (1) O 5	/200. RY*(10) N 7	9.39	20.24	0.389
55. CR (1) O 5	/204. RY*(14) N 7	0.59	21.97	0.101

55. CR (1) O 5	/208. RY*(1) N 8	2.12	19.83	0.183
55. CR (1) O 5	/212. RY*(5) N 8	1.28	20.74	0.145
55. CR (1) O 5	/216. RY*(9) N 8	1.81	22.05	0.178
55. CR (1) O 5	/217. RY*(10) N 8	0.53	20.08	0.092
55. CR (1) O 5	/229. RY*(5) C 9	0.82	21.09	0.118
55. CR (1) O 5	/230. RY*(6) C 9	1.83	20.31	0.172
55. CR (1) O 5	/231. RY*(7) C 9	12.24	20.17	0.444
55. CR (1) O 5	/232. RY*(8) C 9	7.50	20.49	0.350
55. CR (1) O 5	/233. RY*(9) C 9	12.19	21.39	0.456
55. CR (1) O 5	/234. RY*(10) C 9	13.01	20.36	0.459
55. CR (1) O 5	/235. RY*(11) C 9	33.28	18.80	0.706
55. CR (1) O 5	/236. RY*(12) C 9	1.44	21.25	0.156
55. CR (1) O 5	/237. RY*(13) C 9	35.55	20.80	0.768
55. CR (1) O 5	/238. RY*(14) C 9	1.47	21.36	0.158
55. CR (1) O 5	/239. RY*(15) C 9	1.20	21.64	0.144
55. CR (1) O 5	/241. RY*(17) C 9	2.94	38.65	0.301
55. CR (1) O 5	/242. RY*(1) C 10	15.04	20.07	0.491
55. CR (1) O 5	/244. RY*(3) C 10	0.57	20.79	0.097
55. CR (1) O 5	/245. RY*(4) C 10	0.93	20.75	0.124
55. CR (1) O 5	/250. RY*(9) C 10	0.55	20.93	0.096
55. CR (1) O 5	/251. RY*(10) C 10	0.92	20.51	0.123
55. CR (1) O 5	/252. RY*(11) C 10	13.26	19.51	0.454
55. CR (1) O 5	/253. RY*(12) C 10	0.62	20.73	0.101
55. CR (1) O 5	/256. RY*(15) C 10	1.60	22.22	0.168
55. CR (1) O 5	/260. RY*(2) C 11	0.92	20.48	0.123
55. CR (1) O 5	/263. RY*(5) C 11	0.64	20.51	0.102
55. CR (1) O 5	/265. RY*(7) C 11	1.62	20.82	0.164
55. CR (1) O 5	/267. RY*(9) C 11	6.18	20.42	0.317

55. CR (1) O 5	/268. RY*(10) C 11	4.60	21.12	0.278
55. CR (1) O 5	/270. RY*(12) C 11	10.99	20.18	0.420
55. CR (1) O 5	/273. RY*(15) C 11	4.44	20.83	0.272
55. CR (1) O 5	/274. RY*(16) C 11	2.49	21.85	0.208
55. CR (1) O 5	/279. RY*(4) C 12	1.92	20.18	0.176
55. CR (1) O 5	/281. RY*(6) C 12	1.25	20.36	0.142
55. CR (1) O 5	/285. RY*(10) C 12	1.05	21.84	0.135
55. CR (1) O 5	/286. RY*(11) C 12	5.08	20.02	0.285
55. CR (1) O 5	/287. RY*(12) C 12	1.49	21.11	0.158
55. CR (1) O 5	/288. RY*(13) C 12	0.74	20.57	0.110
55. CR (1) O 5	/298. RY*(6) C 13	0.72	20.23	0.108
55. CR (1) O 5	/299. RY*(7) C 13	1.65	20.93	0.166
55. CR (1) O 5	/326. RY*(17) C 14	0.59	20.84	0.099
55. CR (1) O 5	/330. RY*(4) C 15	1.45	20.08	0.152
55. CR (1) O 5	/334. RY*(8) C 15	0.69	20.19	0.105
55. CR (1) O 5	/340. RY*(14) C 15	1.20	21.73	0.144
55. CR (1) O 5	/348. RY*(5) C 16	5.26	20.53	0.294
55. CR (1) O 5	/351. RY*(8) C 16	0.92	20.70	0.123
55. CR (1) O 5	/352. RY*(9) C 16	1.04	20.90	0.131
55. CR (1) O 5	/354. RY*(11) C 16	0.82	22.12	0.120
55. CR (1) O 5	/355. RY*(12) C 16	0.57	22.76	0.102
55. CR (1) O 5	/357. RY*(14) C 16	4.63	20.93	0.278
55. CR (1) O 5	/358. RY*(15) C 16	5.45	20.57	0.299
55. CR (1) O 5	/365. RY*(5) C 17	3.44	20.15	0.235
55. CR (1) O 5	/368. RY*(8) C 17	0.77	20.21	0.111
55. CR (1) O 5	/369. RY*(9) C 17	92.84	16.32	1.099
55. CR (1) O 5	/370. RY*(10) C 17	8.05	22.35	0.379
55. CR (1) O 5	/371. RY*(11) C 17	2.54	21.01	0.206

55. CR (1) O 5	/372. RY*(12) C 17	3.05	22.16	0.232
55. CR (1) O 5	/373. RY*(13) C 17	11.43	20.86	0.436
55. CR (1) O 5	/382. RY*(6) C 18	0.62	20.36	0.101
55. CR (1) O 5	/383. RY*(7) C 18	5.07	19.96	0.284
55. CR (1) O 5	/385. RY*(9) C 18	0.87	21.09	0.121
55. CR (1) O 5	/386. RY*(10) C 18	1.26	21.19	0.146
55. CR (1) O 5	/387. RY*(11) C 18	3.99	23.15	0.271
55. CR (1) O 5	/388. RY*(12) C 18	2.18	21.43	0.193
55. CR (1) O 5	/392. RY*(16) C 18	4.81	19.60	0.274
55. CR (1) O 5	/395. RY*(2) C 19	4.16	20.02	0.258
55. CR (1) O 5	/417. RY*(7) C 20	0.70	21.00	0.108
55. CR (1) O 5	/451. RY*(7) C 22	1.05	20.53	0.131
55. CR (1) O 5	/462. RY*(1) C 23	19.48	19.13	0.545
55. CR (1) O 5	/463. RY*(2) C 23	5.78	19.69	0.301
55. CR (1) O 5	/464. RY*(3) C 23	2.28	20.01	0.191
55. CR (1) O 5	/465. RY*(4) C 23	17.40	19.95	0.526
55. CR (1) O 5	/466. RY*(5) C 23	26.45	18.65	0.627
55. CR (1) O 5	/467. RY*(6) C 23	0.76	20.77	0.112
55. CR (1) O 5	/468. RY*(7) C 23	78.87	17.59	1.051
55. CR (1) O 5	/469. RY*(8) C 23	24.13	20.01	0.620
55. CR (1) O 5	/470. RY*(9) C 23	180.84	13.62	1.401
55. CR (1) O 5	/471. RY*(10) C 23	28.78	19.80	0.674
55. CR (1) O 5	/472. RY*(11) C 23	156.46	14.86	1.361
55. CR (1) O 5	/473. RY*(12) C 23	0.56	21.07	0.097
55. CR (1) O 5	/474. RY*(13) C 23	2.69	21.98	0.217
55. CR (1) O 5	/475. RY*(14) C 23	0.89	41.52	0.172
55. CR (1) O 5	/476. RY*(15) C 23	13.60	20.25	0.468
55. CR (1) O 5	/477. RY*(16) C 23	38.75	20.22	0.790

55. CR (1) O 5	/479. RY*(1) H 24	0.97	19.86	0.124
55. CR (1) O 5	/483. RY*(5) H 24	0.81	21.80	0.119
55. CR (1) O 5	/492. RY*(4) H 26	0.89	21.14	0.123
55. CR (1) O 5	/493. RY*(5) H 26	2018.17	3.44	2.353
55. CR (1) O 5	/496. RY*(3) H 27	1.33	20.74	0.148
55. CR (1) O 5	/497. RY*(4) H 27	38.70	19.33	0.772
55. CR (1) O 5	/499. RY*(1) H 28	0.54	20.12	0.093
55. CR (1) O 5	/500. RY*(2) H 28	0.69	21.14	0.108
55. CR (1) O 5	/501. RY*(3) H 28	77.96	17.58	1.045
55. CR (1) O 5	/502. RY*(4) H 28	2.60	20.97	0.208
55. CR (1) O 5	/506. RY*(3) H 29	4.90	21.52	0.290
55. CR (1) O 5	/524. RY*(1) H 33	1.09	21.48	0.137
55. CR (1) O 5	/528. RY*(1) H 34	0.54	20.63	0.094
55. CR (1) O 5	/529. RY*(2) H 34	22.31	19.41	0.587
55. CR (1) O 5	/530. RY*(3) H 34	1.98	20.96	0.182
55. CR (1) O 5	/533. RY*(1) H 35	5.36	19.95	0.292
55. CR (1) O 5	/534. RY*(2) H 35	15.81	20.11	0.503
55. CR (1) O 5	/535. RY*(3) H 35	1.55	20.96	0.161
55. CR (1) O 5	/536. RY*(4) H 35	0.60	20.99	0.100
55. CR (1) O 5	/537. RY*(5) H 35	0.54	21.91	0.097
55. CR (1) O 5	/538. RY*(1) H 36	1818.27	3.49	2.249
55. CR (1) O 5	/539. RY*(2) H 36	2587.67	2.73	2.373
55. CR (1) O 5	/541. RY*(4) H 36	64.49	17.07	0.937
55. CR (1) O 5	/542. RY*(5) H 36	4.36	20.98	0.270
55. CR (1) O 5	/562. BD*(1) C 10 - C 11	0.72	19.67	0.107
55. CR (1) O 5	/573. BD*(1) C 15 - C 16	26.86	18.50	0.633
55. CR (1) O 5	/576. BD*(1) C 18 - C 22	0.60	19.74	0.098
55. CR (1) O 5	/578. BD*(2) C 19 - C 20	4.72	18.97	0.290

55. CR (1) O 5 /579. BD*(1) C 19 - H 29 19.47 18.68 0.541

55. CR (1) O 5 /583. BD*(2) C 21 - C 22 1.05 19.19 0.137

55. CR (1) O 5 /584. BD*(1) C 21 - H 31 2301.66 2.80 2.274

55. CR (1) O 5 /586. BD*(1) C 23 - H 34 4.79 22.27 0.292

55. CR (1) O 5 /587. BD*(1) C 23 - H 35 2.59 22.54 0.216

55. CR (1) O 5 /588. BD*(1) C 23 - H 36 3.62 21.91 0.252

56. CR (1) N 6 /102. RY*(16) S 1 0.92 11.68 0.093

56. CR (1) N 6 /194. RY*(4) N 7 0.79 11.97 0.087

56. CR (1) N 6 /225. RY*(1) C 9 1.58 15.31 0.139

56. CR (1) N 6 /369. RY*(9) C 17 1.12 11.16 0.100

56. CR (1) N 6 /464. RY*(3) C 23 1.27 14.85 0.122

56. CR (1) N 6 /465. RY*(4) C 23 1.03 14.78 0.110

56. CR (1) N 6 /467. RY*(6) C 23 0.66 15.61 0.090

56. CR (1) N 6 /468. RY*(7) C 23 1.16 12.43 0.107

56. CR (1) N 6 /470. RY*(9) C 23 2.76 8.46 0.136

56. CR (1) N 6 /472. RY*(11) C 23 1.63 9.69 0.112

56. CR (1) N 6 /476. RY*(15) C 23 0.56 15.08 0.082

56. CR (1) N 6 /501. RY*(3) H 28 0.64 12.42 0.080

56. CR (1) N 6 /542. RY*(5) H 36 8.82 15.82 0.333

56. CR (1) N 6 /586. BD*(1) C 23 - H 34 2.84 17.10 0.197

56. CR (1) N 6 /587. BD*(1) C 23 - H 35 1.80 17.38 0.158

57. CR (1) N 7 /361. RY*(1) C 17 0.58 15.21 0.084

57. CR (1) N 7 /363. RY*(3) C 17 1.94 15.65 0.156

57. CR (1) N 7 /378. RY*(2) C 18 1.51 15.54 0.137

57. CR (1) N 7 /380. RY*(4) C 18 0.89 15.84 0.106

57. CR (1) N 7 /480. RY*(2) H 24 0.60 16.49 0.089

57. CR (1) N 7 /547. BD*(1) O 4 - C 17 0.57 14.69 0.082

57. CR (1) N 7 /576. BD*(1) C 18 - C 22 0.54 14.71 0.080

58. CR (1) N 8	/377. RY*(1) C 18	3.11	15.40	0.196
58. CR (1) N 8	/394. RY*(1) C 19	2.03	15.17	0.157
58. CR (1) N 8	/576. BD*(1) C 18 - C 22	0.88	14.65	0.102
58. CR (1) N 8	/577. BD*(1) C 19 - C 20	0.60	14.69	0.085
59. CR (1) C 9	/ 98. RY*(12) S 1	1.55	10.45	0.113
59. CR (1) C 9	/ 99. RY*(13) S 1	3.20	9.17	0.153
59. CR (1) C 9	/101. RY*(15) S 1	0.95	10.45	0.089
59. CR (1) C 9	/102. RY*(16) S 1	6.73	7.71	0.203
59. CR (1) C 9	/112. RY*(5) O 2	0.66	10.80	0.075
59. CR (1) C 9	/130. RY*(6) O 3	0.57	10.70	0.070
59. CR (1) C 9	/142. RY*(1) O 4	1.34	9.76	0.102
59. CR (1) C 9	/190. RY*(17) N 6	1.29	41.60	0.207
59. CR (1) C 9	/194. RY*(4) N 7	7.65	8.00	0.221
59. CR (1) C 9	/200. RY*(10) N 7	0.76	11.10	0.082
59. CR (1) C 9	/231. RY*(7) C 9	0.95	11.03	0.091
59. CR (1) C 9	/233. RY*(9) C 9	0.94	12.25	0.096
59. CR (1) C 9	/234. RY*(10) C 9	0.94	11.22	0.092
59. CR (1) C 9	/235. RY*(11) C 9	3.05	9.66	0.153
59. CR (1) C 9	/237. RY*(13) C 9	2.72	11.66	0.159
59. CR (1) C 9	/244. RY*(3) C 10	0.92	11.65	0.092
59. CR (1) C 9	/252. RY*(11) C 10	0.82	10.37	0.082
59. CR (1) C 9	/267. RY*(9) C 11	0.54	11.28	0.070
59. CR (1) C 9	/270. RY*(12) C 11	1.02	11.04	0.095
59. CR (1) C 9	/363. RY*(3) C 17	0.91	11.54	0.092
59. CR (1) C 9	/365. RY*(5) C 17	1.03	11.01	0.095
59. CR (1) C 9	/369. RY*(9) C 17	9.56	7.18	0.234
59. CR (1) C 9	/370. RY*(10) C 17	1.03	13.21	0.104
59. CR (1) C 9	/373. RY*(13) C 17	1.01	11.72	0.097

59. CR (1) C 9	/462. RY*(1) C 23	2.04	9.99	0.128
59. CR (1) C 9	/463. RY*(2) C 23	0.55	10.55	0.068
59. CR (1) C 9	/465. RY*(4) C 23	1.02	10.81	0.094
59. CR (1) C 9	/466. RY*(5) C 23	2.65	9.51	0.142
59. CR (1) C 9	/468. RY*(7) C 23	7.16	8.45	0.220
59. CR (1) C 9	/469. RY*(8) C 23	2.31	10.87	0.141
59. CR (1) C 9	/470. RY*(9) C 23	24.89	4.48	0.298
59. CR (1) C 9	/471. RY*(10) C 23	2.30	10.66	0.140
59. CR (1) C 9	/472. RY*(11) C 23	19.11	5.72	0.295
59. CR (1) C 9	/476. RY*(15) C 23	0.78	11.11	0.083
59. CR (1) C 9	/477. RY*(16) C 23	3.84	11.08	0.184
59. CR (1) C 9	/497. RY*(4) H 27	3.70	10.19	0.173
59. CR (1) C 9	/501. RY*(3) H 28	7.94	8.44	0.231
59. CR (1) C 9	/506. RY*(3) H 29	0.55	12.38	0.074
59. CR (1) C 9	/529. RY*(2) H 34	2.01	10.27	0.128
59. CR (1) C 9	/534. RY*(2) H 35	1.44	10.97	0.112
59. CR (1) C 9	/541. RY*(4) H 36	9.13	7.93	0.240
59. CR (1) C 9	/549. BD*(1) O 5 - C 10	0.72	10.44	0.077
59. CR (1) C 9	/552. BD*(1) N 6 - C 23	0.77	10.36	0.080
59. CR (1) C 9	/559. BD*(1) C 9 - C 10	0.87	10.65	0.087
59. CR (1) C 9	/562. BD*(1) C 10 - C 11	1.08	10.53	0.096
59. CR (1) C 9	/573. BD*(1) C 15 - C 16	2.47	9.36	0.136
59. CR (1) C 9	/579. BD*(1) C 19 - H 29	1.73	9.54	0.115
60. CR (1) C 10	/ 87. RY*(1) S 1	0.65	11.15	0.077
60. CR (1) C 10	/ 88. RY*(2) S 1	0.65	11.08	0.077
60. CR (1) C 10	/ 92. RY*(6) S 1	0.81	11.98	0.088
60. CR (1) C 10	/ 95. RY*(9) S 1	1.04	11.38	0.097
60. CR (1) C 10	/ 96. RY*(10) S 1	0.88	11.26	0.089

60. CR (1) C 10	/ 98. RY*(12) S 1	25.31	10.73	0.465
60. CR (1) C 10	/ 99. RY*(13) S 1	51.76	9.45	0.625
60. CR (1) C 10	/100. RY*(14) S 1	6.42	11.06	0.238
60. CR (1) C 10	/101. RY*(15) S 1	16.55	10.73	0.376
60. CR (1) C 10	/102. RY*(16) S 1	110.70	7.99	0.840
60. CR (1) C 10	/110. RY*(3) O 2	1.09	11.32	0.099
60. CR (1) C 10	/112. RY*(5) O 2	10.82	11.08	0.309
60. CR (1) C 10	/114. RY*(7) O 2	5.51	12.01	0.230
60. CR (1) C 10	/124. RY*(17) O 2	0.59	15.11	0.084
60. CR (1) C 10	/127. RY*(3) O 3	2.44	11.27	0.148
60. CR (1) C 10	/129. RY*(5) O 3	1.12	11.44	0.101
60. CR (1) C 10	/130. RY*(6) O 3	9.96	10.98	0.295
60. CR (1) C 10	/131. RY*(7) O 3	1.90	12.23	0.136
60. CR (1) C 10	/133. RY*(9) O 3	0.97	13.30	0.102
60. CR (1) C 10	/140. RY*(16) O 3	0.56	13.44	0.077
60. CR (1) C 10	/142. RY*(1) O 4	21.81	10.04	0.418
60. CR (1) C 10	/160. RY*(3) O 5	0.67	11.09	0.077
60. CR (1) C 10	/164. RY*(7) O 5	0.70	11.97	0.082
60. CR (1) C 10	/180. RY*(7) N 6	0.91	11.46	0.091
60. CR (1) C 10	/188. RY*(15) N 6	0.95	14.29	0.104
60. CR (1) C 10	/190. RY*(17) N 6	25.05	41.88	0.915
60. CR (1) C 10	/191. RY*(1) N 7	3.61	10.95	0.178
60. CR (1) C 10	/194. RY*(4) N 7	122.56	8.28	0.899
60. CR (1) C 10	/195. RY*(5) N 7	6.99	10.90	0.246
60. CR (1) C 10	/197. RY*(7) N 7	0.51	12.22	0.070
60. CR (1) C 10	/198. RY*(8) N 7	3.90	11.91	0.192
60. CR (1) C 10	/199. RY*(9) N 7	7.95	12.68	0.283
60. CR (1) C 10	/200. RY*(10) N 7	12.59	11.38	0.338

60. CR (1) C 10	/204. RY*(14) N 7	0.74	13.12	0.088
60. CR (1) C 10	/208. RY*(1) N 8	2.90	10.97	0.159
60. CR (1) C 10	/212. RY*(5) N 8	1.73	11.88	0.128
60. CR (1) C 10	/216. RY*(9) N 8	2.32	13.19	0.156
60. CR (1) C 10	/217. RY*(10) N 8	0.73	11.22	0.081
60. CR (1) C 10	/225. RY*(1) C 9	0.84	11.61	0.088
60. CR (1) C 10	/226. RY*(2) C 9	0.51	11.27	0.067
60. CR (1) C 10	/227. RY*(3) C 9	1.61	11.36	0.121
60. CR (1) C 10	/228. RY*(4) C 9	1.43	11.60	0.115
60. CR (1) C 10	/229. RY*(5) C 9	2.59	12.23	0.159
60. CR (1) C 10	/230. RY*(6) C 9	2.68	11.46	0.157
60. CR (1) C 10	/231. RY*(7) C 9	16.32	11.31	0.384
60. CR (1) C 10	/232. RY*(8) C 9	12.03	11.63	0.334
60. CR (1) C 10	/233. RY*(9) C 9	14.28	12.53	0.378
60. CR (1) C 10	/234. RY*(10) C 9	17.85	11.50	0.405
60. CR (1) C 10	/235. RY*(11) C 9	48.87	9.94	0.622
60. CR (1) C 10	/236. RY*(12) C 9	1.99	12.39	0.140
60. CR (1) C 10	/237. RY*(13) C 9	47.99	11.94	0.676
60. CR (1) C 10	/238. RY*(14) C 9	2.01	12.50	0.142
60. CR (1) C 10	/239. RY*(15) C 9	1.69	12.78	0.131
60. CR (1) C 10	/241. RY*(17) C 9	2.65	29.79	0.251
60. CR (1) C 10	/242. RY*(1) C 10	9.26	11.22	0.288
60. CR (1) C 10	/244. RY*(3) C 10	0.64	11.93	0.078
60. CR (1) C 10	/245. RY*(4) C 10	1.36	11.89	0.113
60. CR (1) C 10	/250. RY*(9) C 10	0.53	12.08	0.071
60. CR (1) C 10	/251. RY*(10) C 10	1.65	11.65	0.124
60. CR (1) C 10	/252. RY*(11) C 10	19.17	10.65	0.403
60. CR (1) C 10	/253. RY*(12) C 10	1.27	11.87	0.110

60. CR (1) C 10	/256. RY*(15) C 10	1.51	13.36	0.127
60. CR (1) C 10	/259. RY*(1) C 11	1.02	11.79	0.098
60. CR (1) C 10	/260. RY*(2) C 11	1.58	11.62	0.121
60. CR (1) C 10	/263. RY*(5) C 11	0.57	11.65	0.073
60. CR (1) C 10	/265. RY*(7) C 11	1.67	11.96	0.126
60. CR (1) C 10	/266. RY*(8) C 11	0.93	11.75	0.093
60. CR (1) C 10	/267. RY*(9) C 11	9.74	11.56	0.300
60. CR (1) C 10	/268. RY*(10) C 11	5.80	12.26	0.238
60. CR (1) C 10	/270. RY*(12) C 11	14.71	11.32	0.364
60. CR (1) C 10	/273. RY*(15) C 11	6.47	11.97	0.248
60. CR (1) C 10	/274. RY*(16) C 11	3.04	12.99	0.177
60. CR (1) C 10	/279. RY*(4) C 12	2.52	11.32	0.151
60. CR (1) C 10	/280. RY*(5) C 12	0.65	11.22	0.076
60. CR (1) C 10	/281. RY*(6) C 12	1.63	11.50	0.122
60. CR (1) C 10	/284. RY*(9) C 12	0.52	12.68	0.072
60. CR (1) C 10	/285. RY*(10) C 12	1.42	12.98	0.121
60. CR (1) C 10	/286. RY*(11) C 12	6.99	11.16	0.249
60. CR (1) C 10	/287. RY*(12) C 12	1.87	12.25	0.135
60. CR (1) C 10	/288. RY*(13) C 12	1.03	11.71	0.098
60. CR (1) C 10	/298. RY*(6) C 13	1.00	11.38	0.095
60. CR (1) C 10	/299. RY*(7) C 13	2.21	12.07	0.146
60. CR (1) C 10	/326. RY*(17) C 14	0.78	11.98	0.086
60. CR (1) C 10	/330. RY*(4) C 15	2.02	11.22	0.134
60. CR (1) C 10	/334. RY*(8) C 15	0.96	11.33	0.093
60. CR (1) C 10	/338. RY*(12) C 15	0.57	11.11	0.071
60. CR (1) C 10	/339. RY*(13) C 15	0.59	11.79	0.074
60. CR (1) C 10	/340. RY*(14) C 15	1.50	12.87	0.124
60. CR (1) C 10	/345. RY*(2) C 16	0.74	11.33	0.082

60. CR (1) C 10	/348. RY*(5) C 16	7.12	11.68	0.257
60. CR (1) C 10	/351. RY*(8) C 16	1.19	11.84	0.106
60. CR (1) C 10	/352. RY*(9) C 16	1.34	12.04	0.113
60. CR (1) C 10	/354. RY*(11) C 16	0.99	13.26	0.102
60. CR (1) C 10	/355. RY*(12) C 16	0.70	13.90	0.088
60. CR (1) C 10	/357. RY*(14) C 16	6.02	12.07	0.241
60. CR (1) C 10	/358. RY*(15) C 16	7.16	11.71	0.258
60. CR (1) C 10	/365. RY*(5) C 17	4.91	11.29	0.210
60. CR (1) C 10	/367. RY*(7) C 17	0.52	12.36	0.072
60. CR (1) C 10	/368. RY*(8) C 17	1.08	11.35	0.099
60. CR (1) C 10	/369. RY*(9) C 17	155.87	7.46	0.963
60. CR (1) C 10	/370. RY*(10) C 17	10.35	13.49	0.334
60. CR (1) C 10	/371. RY*(11) C 17	3.23	12.15	0.177
60. CR (1) C 10	/372. RY*(12) C 17	3.84	13.30	0.202
60. CR (1) C 10	/373. RY*(13) C 17	15.14	12.00	0.381
60. CR (1) C 10	/382. RY*(6) C 18	0.81	11.50	0.086
60. CR (1) C 10	/383. RY*(7) C 18	6.78	11.10	0.245
60. CR (1) C 10	/385. RY*(9) C 18	1.08	12.23	0.103
60. CR (1) C 10	/386. RY*(10) C 18	1.61	12.33	0.126
60. CR (1) C 10	/387. RY*(11) C 18	4.87	14.29	0.236
60. CR (1) C 10	/388. RY*(12) C 18	2.75	12.57	0.166
60. CR (1) C 10	/392. RY*(16) C 18	6.65	10.75	0.239
60. CR (1) C 10	/395. RY*(2) C 19	5.70	11.16	0.225
60. CR (1) C 10	/417. RY*(7) C 20	0.92	12.14	0.094
60. CR (1) C 10	/449. RY*(5) C 22	0.51	11.77	0.069
60. CR (1) C 10	/451. RY*(7) C 22	1.38	11.67	0.114
60. CR (1) C 10	/462. RY*(1) C 23	27.39	10.27	0.473
60. CR (1) C 10	/463. RY*(2) C 23	8.42	10.83	0.270

60. CR (1) C 10	/464. RY*(3) C 23	3.10	11.16	0.166
60. CR (1) C 10	/465. RY*(4) C 23	23.04	11.09	0.451
60. CR (1) C 10	/466. RY*(5) C 23	39.32	9.79	0.554
60. CR (1) C 10	/467. RY*(6) C 23	0.81	11.91	0.088
60. CR (1) C 10	/468. RY*(7) C 23	119.80	8.73	0.913
60. CR (1) C 10	/469. RY*(8) C 23	33.26	11.15	0.544
60. CR (1) C 10	/470. RY*(9) C 23	391.54	4.76	1.219
60. CR (1) C 10	/471. RY*(10) C 23	39.79	10.94	0.589
60. CR (1) C 10	/472. RY*(11) C 23	297.12	6.00	1.192
60. CR (1) C 10	/473. RY*(12) C 23	0.71	12.21	0.083
60. CR (1) C 10	/474. RY*(13) C 23	2.98	13.12	0.176
60. CR (1) C 10	/475. RY*(14) C 23	1.01	32.66	0.162
60. CR (1) C 10	/476. RY*(15) C 23	17.99	11.39	0.404
60. CR (1) C 10	/477. RY*(16) C 23	52.55	11.37	0.690
60. CR (1) C 10	/479. RY*(1) H 24	1.22	11.01	0.104
60. CR (1) C 10	/483. RY*(5) H 24	1.08	12.94	0.106
60. CR (1) C 10	/492. RY*(4) H 26	1.18	12.28	0.107
60. CR (1) C 10	/496. RY*(3) H 27	1.77	11.88	0.130
60. CR (1) C 10	/497. RY*(4) H 27	54.53	10.47	0.675
60. CR (1) C 10	/498. RY*(5) H 27	0.62	12.82	0.080
60. CR (1) C 10	/499. RY*(1) H 28	0.75	11.26	0.082
60. CR (1) C 10	/500. RY*(2) H 28	0.88	12.28	0.093
60. CR (1) C 10	/501. RY*(3) H 28	119.27	8.72	0.911
60. CR (1) C 10	/502. RY*(4) H 28	3.40	12.11	0.181
60. CR (1) C 10	/506. RY*(3) H 29	6.51	12.66	0.256
60. CR (1) C 10	/528. RY*(1) H 34	0.69	11.77	0.081
60. CR (1) C 10	/529. RY*(2) H 34	30.88	10.55	0.510
60. CR (1) C 10	/530. RY*(3) H 34	2.80	12.10	0.164

60. CR (1) C 10	/533. RY*(1) H 35	7.16	11.09	0.251
60. CR (1) C 10	/534. RY*(2) H 35	21.83	11.25	0.442
60. CR (1) C 10	/535. RY*(3) H 35	1.85	12.10	0.133
60. CR (1) C 10	/536. RY*(4) H 35	0.90	12.13	0.093
60. CR (1) C 10	/537. RY*(5) H 35	0.55	13.05	0.076
60. CR (1) C 10	/541. RY*(4) H 36	104.46	8.21	0.827
60. CR (1) C 10	/542. RY*(5) H 36	4.39	12.12	0.206
60. CR (1) C 10	/549. BD*(1) O 5 - C 10	0.71	10.72	0.078
60. CR (1) C 10	/559. BD*(1) C 9 - C 10	1.12	10.93	0.099
60. CR (1) C 10	/561. BD*(1) C 9 - C 17	0.56	10.80	0.071
60. CR (1) C 10	/562. BD*(1) C 10 - C 11	0.88	10.81	0.088
60. CR (1) C 10	/563. BD*(1) C 11 - C 12	0.61	10.91	0.073
60. CR (1) C 10	/565. BD*(1) C 11 - C 16	0.55	10.89	0.070
60. CR (1) C 10	/572. BD*(1) C 14 - H 27	0.63	10.75	0.074
60. CR (1) C 10	/573. BD*(1) C 15 - C 16	40.08	9.64	0.558
60. CR (1) C 10	/576. BD*(1) C 18 - C 22	0.76	10.88	0.082
60. CR (1) C 10	/578. BD*(2) C 19 - C 20	6.74	10.11	0.253
60. CR (1) C 10	/579. BD*(1) C 19 - H 29	28.19	9.82	0.472
60. CR (1) C 10	/583. BD*(2) C 21 - C 22	1.49	10.33	0.120
60. CR (1) C 10	/586. BD*(1) C 23 - H 34	2.92	13.41	0.177
60. CR (1) C 10	/587. BD*(1) C 23 - H 35	3.41	13.68	0.193
60. CR (1) C 10	/588. BD*(1) C 23 - H 36	8.48	13.05	0.298
61. CR (1) C 11	/ 99. RY*(13) S 1	0.72	9.16	0.072
61. CR (1) C 11	/102. RY*(16) S 1	1.52	7.69	0.097
61. CR (1) C 11	/194. RY*(4) N 7	1.69	7.98	0.104
61. CR (1) C 11	/235. RY*(11) C 9	0.67	9.64	0.072
61. CR (1) C 11	/237. RY*(13) C 9	0.62	11.65	0.076
61. CR (1) C 11	/244. RY*(3) C 10	1.08	11.63	0.100

61. CR (1) C 11	/277. RY*(2) C 12	1.53	11.14	0.117
61. CR (1) C 11	/345. RY*(2) C 16	0.95	11.03	0.092
61. CR (1) C 11	/369. RY*(9) C 17	2.10	7.16	0.110
61. CR (1) C 11	/466. RY*(5) C 23	0.53	9.49	0.064
61. CR (1) C 11	/468. RY*(7) C 23	1.66	8.43	0.106
61. CR (1) C 11	/470. RY*(9) C 23	5.51	4.47	0.140
61. CR (1) C 11	/471. RY*(10) C 23	0.59	10.64	0.071
61. CR (1) C 11	/472. RY*(11) C 23	4.09	5.70	0.136
61. CR (1) C 11	/477. RY*(16) C 23	0.61	11.07	0.074
61. CR (1) C 11	/497. RY*(4) H 27	0.68	10.17	0.074
61. CR (1) C 11	/501. RY*(3) H 28	1.50	8.43	0.100
61. CR (1) C 11	/541. RY*(4) H 36	1.02	7.92	0.080
61. CR (1) C 11	/546. BD*(1) S 1 - C 16	0.58	10.22	0.073
61. CR (1) C 11	/559. BD*(1) C 9 - C 10	0.68	10.64	0.076
61. CR (1) C 11	/565. BD*(1) C 11 - C 16	0.57	10.60	0.070
61. CR (1) C 11	/566. BD*(1) C 12 - C 13	0.64	10.63	0.074
62. CR (1) C 12	/260. RY*(2) C 11	1.60	11.31	0.120
62. CR (1) C 12	/294. RY*(2) C 13	1.54	11.31	0.118
62. CR (1) C 12	/562. BD*(1) C 10 - C 11	0.78	10.50	0.081
62. CR (1) C 12	/565. BD*(1) C 11 - C 16	0.92	10.58	0.089
62. CR (1) C 12	/568. BD*(1) C 13 - C 14	0.71	10.61	0.077
63. CR (1) C 13	/277. RY*(2) C 12	1.08	11.13	0.098
63. CR (1) C 13	/311. RY*(2) C 14	1.53	11.33	0.118
63. CR (1) C 13	/563. BD*(1) C 11 - C 12	0.74	10.60	0.080
63. CR (1) C 13	/571. BD*(1) C 14 - C 15	0.66	10.61	0.075
64. CR (1) C 14	/ 98. RY*(12) S 1	3.19	10.45	0.163
64. CR (1) C 14	/ 99. RY*(13) S 1	6.59	9.17	0.219
64. CR (1) C 14	/100. RY*(14) S 1	0.81	10.79	0.084

64. CR (1) C 14	/101. RY*(15) S 1	2.16	10.45	0.134
64. CR (1) C 14	/102. RY*(16) S 1	14.22	7.71	0.296
64. CR (1) C 14	/112. RY*(5) O 2	1.39	10.80	0.109
64. CR (1) C 14	/114. RY*(7) O 2	0.72	11.73	0.082
64. CR (1) C 14	/130. RY*(6) O 3	1.26	10.71	0.104
64. CR (1) C 14	/142. RY*(1) O 4	2.79	9.76	0.147
64. CR (1) C 14	/190. RY*(17) N 6	3.14	41.60	0.323
64. CR (1) C 14	/194. RY*(4) N 7	15.77	8.00	0.317
64. CR (1) C 14	/195. RY*(5) N 7	0.90	10.62	0.088
64. CR (1) C 14	/199. RY*(9) N 7	1.03	12.41	0.101
64. CR (1) C 14	/200. RY*(10) N 7	1.61	11.10	0.119
64. CR (1) C 14	/231. RY*(7) C 9	2.14	11.03	0.137
64. CR (1) C 14	/232. RY*(8) C 9	1.25	11.35	0.107
64. CR (1) C 14	/233. RY*(9) C 9	2.02	12.25	0.140
64. CR (1) C 14	/234. RY*(10) C 9	2.28	11.23	0.143
64. CR (1) C 14	/235. RY*(11) C 9	6.09	9.66	0.217
64. CR (1) C 14	/237. RY*(13) C 9	5.98	11.66	0.236
64. CR (1) C 14	/242. RY*(1) C 10	0.83	10.94	0.085
64. CR (1) C 14	/252. RY*(11) C 10	2.31	10.37	0.138
64. CR (1) C 14	/267. RY*(9) C 11	1.01	11.29	0.095
64. CR (1) C 14	/268. RY*(10) C 11	0.77	11.98	0.086
64. CR (1) C 14	/270. RY*(12) C 11	1.89	11.04	0.129
64. CR (1) C 14	/273. RY*(15) C 11	0.73	11.69	0.082
64. CR (1) C 14	/286. RY*(11) C 12	0.81	10.88	0.084
64. CR (1) C 14	/294. RY*(2) C 13	1.39	11.34	0.112
64. CR (1) C 14	/327. RY*(1) C 15	0.80	11.20	0.085
64. CR (1) C 14	/328. RY*(2) C 15	1.16	11.18	0.102
64. CR (1) C 14	/330. RY*(4) C 15	1.34	10.94	0.108

64. CR (1) C 14	/348. RY*(5) C 16	0.90	11.40	0.090
64. CR (1) C 14	/357. RY*(14) C 16	0.76	11.79	0.084
64. CR (1) C 14	/358. RY*(15) C 16	0.91	11.43	0.091
64. CR (1) C 14	/365. RY*(5) C 17	0.59	11.02	0.072
64. CR (1) C 14	/369. RY*(9) C 17	19.97	7.18	0.338
64. CR (1) C 14	/370. RY*(10) C 17	1.28	13.21	0.116
64. CR (1) C 14	/373. RY*(13) C 17	1.94	11.72	0.135
64. CR (1) C 14	/383. RY*(7) C 18	0.87	10.82	0.087
64. CR (1) C 14	/387. RY*(11) C 18	0.62	14.01	0.083
64. CR (1) C 14	/392. RY*(16) C 18	0.85	10.47	0.084
64. CR (1) C 14	/395. RY*(2) C 19	0.72	10.89	0.079
64. CR (1) C 14	/462. RY*(1) C 23	3.45	9.99	0.166
64. CR (1) C 14	/463. RY*(2) C 23	1.07	10.55	0.095
64. CR (1) C 14	/465. RY*(4) C 23	3.03	10.81	0.162
64. CR (1) C 14	/466. RY*(5) C 23	5.02	9.51	0.195
64. CR (1) C 14	/468. RY*(7) C 23	15.44	8.45	0.322
64. CR (1) C 14	/469. RY*(8) C 23	4.24	10.88	0.192
64. CR (1) C 14	/470. RY*(9) C 23	51.69	4.48	0.430
64. CR (1) C 14	/471. RY*(10) C 23	5.08	10.66	0.208
64. CR (1) C 14	/472. RY*(11) C 23	38.72	5.72	0.420
64. CR (1) C 14	/476. RY*(15) C 23	2.35	11.11	0.144
64. CR (1) C 14	/477. RY*(16) C 23	6.65	11.09	0.242
64. CR (1) C 14	/497. RY*(4) H 27	6.65	10.19	0.232
64. CR (1) C 14	/501. RY*(3) H 28	15.27	8.45	0.321
64. CR (1) C 14	/506. RY*(3) H 29	0.80	12.38	0.089
64. CR (1) C 14	/529. RY*(2) H 34	3.93	10.28	0.179
64. CR (1) C 14	/533. RY*(1) H 35	0.92	10.81	0.089
64. CR (1) C 14	/534. RY*(2) H 35	2.74	10.97	0.155

64. CR (1) C 14	/541. RY*(4) H 36	12.97	7.93	0.286
64. CR (1) C 14	/542. RY*(5) H 36	0.80	11.84	0.087
64. CR (1) C 14	/566. BD*(1) C 12 - C 13	0.69	10.65	0.077
64. CR (1) C 14	/573. BD*(1) C 15 - C 16	9.93	9.36	0.274
64. CR (1) C 14	/578. BD*(2) C 19 - C 20	0.86	9.83	0.089
64. CR (1) C 14	/579. BD*(1) C 19 - H 29	3.60	9.54	0.166
64. CR (1) C 14	/587. BD*(1) C 23 - H 35	0.52	13.40	0.075
64. CR (1) C 14	/588. BD*(1) C 23 - H 36	1.10	12.77	0.106
65. CR (1) C 15	/102. RY*(16) S 1	0.66	7.68	0.064
65. CR (1) C 15	/194. RY*(4) N 7	0.75	7.97	0.069
65. CR (1) C 15	/311. RY*(2) C 14	1.45	11.33	0.114
65. CR (1) C 15	/345. RY*(2) C 16	1.24	11.02	0.104
65. CR (1) C 15	/346. RY*(3) C 16	0.58	10.80	0.071
65. CR (1) C 15	/347. RY*(4) C 16	0.64	11.04	0.075
65. CR (1) C 15	/369. RY*(9) C 17	0.95	7.15	0.073
65. CR (1) C 15	/468. RY*(7) C 23	0.73	8.42	0.070
65. CR (1) C 15	/470. RY*(9) C 23	2.45	4.45	0.093
65. CR (1) C 15	/472. RY*(11) C 23	1.82	5.69	0.091
65. CR (1) C 15	/501. RY*(3) H 28	1.28	8.41	0.093
65. CR (1) C 15	/541. RY*(4) H 36	0.64	7.90	0.063
65. CR (1) C 15	/546. BD*(1) S 1 - C 16	0.76	10.21	0.083
65. CR (1) C 15	/565. BD*(1) C 11 - C 16	1.10	10.59	0.097
65. CR (1) C 15	/568. BD*(1) C 13 - C 14	0.68	10.61	0.076
66. CR (1) C 16	/ 99. RY*(13) S 1	0.62	9.18	0.067
66. CR (1) C 16	/102. RY*(16) S 1	1.08	7.71	0.081
66. CR (1) C 16	/194. RY*(4) N 7	1.12	8.00	0.085
66. CR (1) C 16	/259. RY*(1) C 11	0.79	11.51	0.085
66. CR (1) C 16	/260. RY*(2) C 11	1.50	11.35	0.116

66. CR (1) C 16	/328. RY*(2) C 15	1.90	11.18	0.130
66. CR (1) C 16	/369. RY*(9) C 17	1.39	7.19	0.089
66. CR (1) C 16	/468. RY*(7) C 23	1.07	8.46	0.085
66. CR (1) C 16	/470. RY*(9) C 23	3.57	4.49	0.113
66. CR (1) C 16	/472. RY*(11) C 23	2.76	5.72	0.112
66. CR (1) C 16	/477. RY*(16) C 23	0.54	11.09	0.069
66. CR (1) C 16	/497. RY*(4) H 27	0.52	10.19	0.065
66. CR (1) C 16	/501. RY*(3) H 28	1.18	8.45	0.089
66. CR (1) C 16	/541. RY*(4) H 36	1.26	7.94	0.089
66. CR (1) C 16	/546. BD*(1) S 1 - C 16	1.28	10.24	0.108
66. CR (1) C 16	/562. BD*(1) C 10 - C 11	0.74	10.54	0.079
66. CR (1) C 16	/563. BD*(1) C 11 - C 12	0.67	10.63	0.076
66. CR (1) C 16	/565. BD*(1) C 11 - C 16	0.57	10.62	0.070
66. CR (1) C 16	/571. BD*(1) C 14 - C 15	0.68	10.64	0.076
66. CR (1) C 16	/573. BD*(1) C 15 - C 16	1.86	9.37	0.118
67. CR (1) C 17	/226. RY*(2) C 9	0.53	11.08	0.068
67. CR (1) C 17	/227. RY*(3) C 9	1.01	11.17	0.095
67. CR (1) C 17	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.53	10.53	0.067
67. CR (1) C 17	/554. BD*(1) N 7 - C 18	1.29	10.59	0.105
68. CR (1) C 18	/102. RY*(16) S 1	0.83	7.75	0.072
68. CR (1) C 18	/194. RY*(4) N 7	2.52	8.04	0.127
68. CR (1) C 18	/209. RY*(2) N 8	0.72	11.42	0.081
68. CR (1) C 18	/369. RY*(9) C 17	1.06	7.22	0.078
68. CR (1) C 18	/445. RY*(1) C 22	0.58	11.26	0.072
68. CR (1) C 18	/446. RY*(2) C 22	0.92	11.37	0.091
68. CR (1) C 18	/468. RY*(7) C 23	1.09	8.49	0.086
68. CR (1) C 18	/470. RY*(9) C 23	3.38	4.52	0.110
68. CR (1) C 18	/472. RY*(11) C 23	2.39	5.76	0.105

68. CR (1) C 18	/477. RY*(16) C 23	0.79	11.13	0.084
68. CR (1) C 18	/497. RY*(4) H 27	0.52	10.23	0.065
68. CR (1) C 18	/501. RY*(3) H 28	1.12	8.48	0.087
68. CR (1) C 18	/541. RY*(4) H 36	1.13	7.97	0.085
68. CR (1) C 18	/553. BD*(1) N 7 - C 17	1.04	10.57	0.095
68. CR (1) C 18	/558. BD*(1) N 8 - C 19	1.22	10.66	0.102
68. CR (1) C 18	/576. BD*(1) C 18 - C 22	0.65	10.64	0.075
68. CR (1) C 18	/582. BD*(1) C 21 - C 22	0.53	10.71	0.067
69. CR (1) C 19	/209. RY*(2) N 8	0.64	11.37	0.076
69. CR (1) C 19	/412. RY*(2) C 20	1.25	11.40	0.107
69. CR (1) C 19	/556. BD*(1) N 8 - C 18	1.26	10.59	0.104
69. CR (1) C 19	/580. BD*(1) C 20 - C 21	0.69	10.67	0.077
70. CR (1) C 20	/395. RY*(2) C 19	1.40	10.84	0.110
70. CR (1) C 20	/429. RY*(2) C 21	1.49	11.27	0.116
70. CR (1) C 20	/558. BD*(1) N 8 - C 19	0.58	10.57	0.070
70. CR (1) C 20	/582. BD*(1) C 21 - C 22	0.66	10.62	0.075
71. CR (1) C 21	/412. RY*(2) C 20	1.68	11.37	0.123
71. CR (1) C 21	/446. RY*(2) C 22	1.53	11.30	0.117
71. CR (1) C 21	/576. BD*(1) C 18 - C 22	0.56	10.57	0.069
71. CR (1) C 21	/577. BD*(1) C 19 - C 20	0.56	10.61	0.069
72. CR (1) C 22	/377. RY*(1) C 18	1.51	11.31	0.117
72. CR (1) C 22	/378. RY*(2) C 18	1.06	11.38	0.098
72. CR (1) C 22	/429. RY*(2) C 21	1.66	11.27	0.122
72. CR (1) C 22	/519. RY*(1) H 32	0.62	11.23	0.075
72. CR (1) C 22	/554. BD*(1) N 7 - C 18	0.70	10.45	0.077
72. CR (1) C 22	/556. BD*(1) N 8 - C 18	0.78	10.55	0.081
72. CR (1) C 22	/580. BD*(1) C 20 - C 21	0.77	10.63	0.081
73. CR (1) C 23	/ 87. RY*(1) S 1	5.27	10.82	0.217

73. CR (1) C 23	/ 88. RY*(2) S 1	4.59	10.75	0.201
73. CR (1) C 23	/ 89. RY*(3) S 1	0.77	10.92	0.083
73. CR (1) C 23	/ 90. RY*(4) S 1	0.98	10.85	0.093
73. CR (1) C 23	/ 92. RY*(6) S 1	5.74	11.66	0.231
73. CR (1) C 23	/ 95. RY*(9) S 1	6.37	11.06	0.237
73. CR (1) C 23	/ 96. RY*(10) S 1	8.01	10.94	0.264
73. CR (1) C 23	/ 97. RY*(11) S 1	0.97	11.36	0.094
73. CR (1) C 23	/ 98. RY*(12) S 1	188.05	10.40	1.249
73. CR (1) C 23	/ 99. RY*(13) S 1	381.44	9.13	1.666
73. CR (1) C 23	/100. RY*(14) S 1	51.16	10.74	0.662
73. CR (1) C 23	/101. RY*(15) S 1	129.75	10.40	1.037
73. CR (1) C 23	/102. RY*(16) S 1	831.12	7.66	2.253
73. CR (1) C 23	/103. RY*(17) S 1	1.79	24.71	0.188
73. CR (1) C 23	/106. RY*(20) S 1	0.85	26.82	0.135
73. CR (1) C 23	/108. RY*(1) O 2	1.74	11.15	0.124
73. CR (1) C 23	/109. RY*(2) O 2	2.41	10.85	0.144
73. CR (1) C 23	/110. RY*(3) O 2	6.41	11.00	0.237
73. CR (1) C 23	/112. RY*(5) O 2	78.83	10.76	0.822
73. CR (1) C 23	/113. RY*(6) O 2	2.19	10.99	0.138
73. CR (1) C 23	/114. RY*(7) O 2	40.57	11.68	0.615
73. CR (1) C 23	/115. RY*(8) O 2	2.95	11.45	0.164
73. CR (1) C 23	/116. RY*(9) O 2	2.50	12.90	0.160
73. CR (1) C 23	/117. RY*(10) O 2	2.66	12.87	0.165
73. CR (1) C 23	/122. RY*(15) O 2	2.09	12.72	0.145
73. CR (1) C 23	/123. RY*(16) O 2	1.00	13.18	0.103
73. CR (1) C 23	/124. RY*(17) O 2	4.33	14.79	0.226
73. CR (1) C 23	/125. RY*(1) O 3	1.35	11.22	0.110
73. CR (1) C 23	/127. RY*(3) O 3	19.15	10.95	0.409

73. CR (1) C 23	/128. RY*(4) O 3	2.69	10.66	0.151
73. CR (1) C 23	/129. RY*(5) O 3	10.45	11.12	0.304
73. CR (1) C 23	/130. RY*(6) O 3	76.86	10.66	0.808
73. CR (1) C 23	/131. RY*(7) O 3	16.68	11.90	0.398
73. CR (1) C 23	/133. RY*(9) O 3	7.44	12.97	0.277
73. CR (1) C 23	/135. RY*(11) O 3	1.78	15.04	0.146
73. CR (1) C 23	/136. RY*(12) O 3	0.76	14.73	0.094
73. CR (1) C 23	/139. RY*(15) O 3	0.90	12.70	0.095
73. CR (1) C 23	/140. RY*(16) O 3	4.45	13.12	0.216
73. CR (1) C 23	/141. RY*(17) O 3	0.89	59.53	0.205
73. CR (1) C 23	/142. RY*(1) O 4	164.50	9.72	1.129
73. CR (1) C 23	/145. RY*(4) O 4	1.05	11.33	0.097
73. CR (1) C 23	/147. RY*(6) O 4	3.61	11.35	0.181
73. CR (1) C 23	/148. RY*(7) O 4	0.52	12.23	0.072
73. CR (1) C 23	/160. RY*(3) O 5	6.15	10.77	0.230
73. CR (1) C 23	/162. RY*(5) O 5	1.25	11.58	0.107
73. CR (1) C 23	/163. RY*(6) O 5	0.91	11.35	0.091
73. CR (1) C 23	/164. RY*(7) O 5	2.35	11.64	0.148
73. CR (1) C 23	/168. RY*(11) O 5	1.14	14.83	0.116
73. CR (1) C 23	/175. RY*(2) N 6	1.03	10.89	0.095
73. CR (1) C 23	/176. RY*(3) N 6	1.99	11.03	0.132
73. CR (1) C 23	/177. RY*(4) N 6	2.29	10.90	0.141
73. CR (1) C 23	/180. RY*(7) N 6	1.78	11.13	0.126
73. CR (1) C 23	/181. RY*(8) N 6	0.78	11.37	0.084
73. CR (1) C 23	/185. RY*(12) N 6	0.50	12.42	0.070
73. CR (1) C 23	/186. RY*(13) N 6	5.86	13.17	0.248
73. CR (1) C 23	/188. RY*(15) N 6	8.89	13.96	0.315
73. CR (1) C 23	/190. RY*(17) N 6	169.36	41.56	2.368

73. CR (1) C 23	/191. RY*(1) N 7	29.55	10.62	0.501
73. CR (1) C 23	/192. RY*(2) N 7	0.73	10.77	0.079
73. CR (1) C 23	/194. RY*(4) N 7	890.96	7.95	2.376
73. CR (1) C 23	/195. RY*(5) N 7	46.68	10.57	0.627
73. CR (1) C 23	/196. RY*(6) N 7	1.53	11.26	0.117
73. CR (1) C 23	/197. RY*(7) N 7	3.66	11.90	0.186
73. CR (1) C 23	/198. RY*(8) N 7	28.57	11.58	0.514
73. CR (1) C 23	/199. RY*(9) N 7	60.98	12.36	0.775
73. CR (1) C 23	/200. RY*(10) N 7	93.13	11.05	0.906
73. CR (1) C 23	/201. RY*(11) N 7	0.72	13.04	0.086
73. CR (1) C 23	/202. RY*(12) N 7	1.72	12.22	0.130
73. CR (1) C 23	/204. RY*(14) N 7	6.27	12.79	0.253
73. CR (1) C 23	/208. RY*(1) N 8	20.56	10.65	0.418
73. CR (1) C 23	/211. RY*(4) N 8	0.55	12.15	0.073
73. CR (1) C 23	/212. RY*(5) N 8	11.51	11.56	0.326
73. CR (1) C 23	/213. RY*(6) N 8	0.63	11.35	0.075
73. CR (1) C 23	/214. RY*(7) N 8	1.76	11.27	0.126
73. CR (1) C 23	/215. RY*(8) N 8	1.39	11.52	0.113
73. CR (1) C 23	/216. RY*(9) N 8	14.13	12.87	0.381
73. CR (1) C 23	/217. RY*(10) N 8	5.16	10.89	0.212
73. CR (1) C 23	/225. RY*(1) C 9	1.59	11.29	0.120
73. CR (1) C 23	/226. RY*(2) C 9	3.09	10.94	0.164
73. CR (1) C 23	/227. RY*(3) C 9	4.51	11.03	0.199
73. CR (1) C 23	/228. RY*(4) C 9	5.35	11.27	0.219
73. CR (1) C 23	/229. RY*(5) C 9	6.42	11.90	0.247
73. CR (1) C 23	/230. RY*(6) C 9	16.28	11.13	0.380
73. CR (1) C 23	/231. RY*(7) C 9	127.43	10.98	1.056
73. CR (1) C 23	/232. RY*(8) C 9	64.02	11.30	0.759

73. CR (1) C 23	/233. RY*(9) C 9	114.72	12.21	1.056
73. CR (1) C 23	/234. RY*(10) C 9	146.39	11.18	1.142
73. CR (1) C 23	/235. RY*(11) C 9	352.41	9.61	1.643
73. CR (1) C 23	/236. RY*(12) C 9	11.51	12.07	0.333
73. CR (1) C 23	/237. RY*(13) C 9	328.67	11.62	1.744
73. CR (1) C 23	/238. RY*(14) C 9	9.87	12.17	0.309
73. CR (1) C 23	/239. RY*(15) C 9	11.57	12.45	0.339
73. CR (1) C 23	/240. RY*(16) C 9	5.35	13.30	0.238
73. CR (1) C 23	/241. RY*(17) C 9	21.37	29.47	0.708
73. CR (1) C 23	/242. RY*(1) C 10	47.00	10.89	0.640
73. CR (1) C 23	/244. RY*(3) C 10	3.95	11.60	0.191
73. CR (1) C 23	/245. RY*(4) C 10	11.90	11.56	0.331
73. CR (1) C 23	/246. RY*(5) C 10	2.83	11.06	0.158
73. CR (1) C 23	/249. RY*(8) C 10	0.60	11.75	0.075
73. CR (1) C 23	/250. RY*(9) C 10	3.15	11.75	0.172
73. CR (1) C 23	/251. RY*(10) C 10	10.24	11.32	0.304
73. CR (1) C 23	/252. RY*(11) C 10	128.38	10.32	1.028
73. CR (1) C 23	/253. RY*(12) C 10	9.79	11.54	0.300
73. CR (1) C 23	/255. RY*(14) C 10	3.54	11.67	0.181
73. CR (1) C 23	/256. RY*(15) C 10	16.19	13.03	0.410
73. CR (1) C 23	/257. RY*(16) C 10	1.95	27.37	0.206
73. CR (1) C 23	/258. RY*(17) C 10	1.63	12.71	0.128
73. CR (1) C 23	/260. RY*(2) C 11	9.88	11.30	0.299
73. CR (1) C 23	/261. RY*(3) C 11	1.37	10.84	0.109
73. CR (1) C 23	/262. RY*(4) C 11	1.14	11.11	0.100
73. CR (1) C 23	/263. RY*(5) C 11	6.48	11.32	0.242
73. CR (1) C 23	/264. RY*(6) C 11	1.18	11.24	0.103
73. CR (1) C 23	/265. RY*(7) C 11	14.97	11.64	0.373

73. CR (1) C 23	/266. RY*(8) C 11	2.64	11.42	0.155
73. CR (1) C 23	/267. RY*(9) C 11	59.92	11.24	0.733
73. CR (1) C 23	/268. RY*(10) C 11	40.01	11.93	0.617
73. CR (1) C 23	/270. RY*(12) C 11	101.13	11.00	0.941
73. CR (1) C 23	/271. RY*(13) C 11	0.89	12.91	0.096
73. CR (1) C 23	/272. RY*(14) C 11	2.40	14.35	0.166
73. CR (1) C 23	/273. RY*(15) C 11	35.11	11.65	0.571
73. CR (1) C 23	/274. RY*(16) C 11	21.68	12.66	0.468
73. CR (1) C 23	/278. RY*(3) C 12	1.11	10.58	0.097
73. CR (1) C 23	/279. RY*(4) C 12	17.12	10.99	0.387
73. CR (1) C 23	/280. RY*(5) C 12	4.00	10.89	0.186
73. CR (1) C 23	/281. RY*(6) C 12	11.29	11.18	0.317
73. CR (1) C 23	/282. RY*(7) C 12	0.67	11.31	0.078
73. CR (1) C 23	/283. RY*(8) C 12	0.96	12.28	0.097
73. CR (1) C 23	/284. RY*(9) C 12	3.96	12.35	0.197
73. CR (1) C 23	/285. RY*(10) C 12	8.93	12.65	0.300
73. CR (1) C 23	/286. RY*(11) C 12	45.64	10.83	0.628
73. CR (1) C 23	/287. RY*(12) C 12	13.43	11.92	0.357
73. CR (1) C 23	/288. RY*(13) C 12	7.20	11.39	0.256
73. CR (1) C 23	/292. RY*(17) C 12	0.74	12.57	0.086
73. CR (1) C 23	/295. RY*(3) C 13	0.61	10.98	0.073
73. CR (1) C 23	/296. RY*(4) C 13	1.22	10.98	0.104
73. CR (1) C 23	/298. RY*(6) C 13	7.02	11.05	0.249
73. CR (1) C 23	/299. RY*(7) C 13	14.35	11.74	0.366
73. CR (1) C 23	/300. RY*(8) C 13	3.22	12.39	0.178
73. CR (1) C 23	/301. RY*(9) C 13	2.45	11.98	0.153
73. CR (1) C 23	/302. RY*(10) C 13	1.78	12.13	0.131
73. CR (1) C 23	/303. RY*(11) C 13	0.74	10.53	0.079

73. CR (1) C 23	/304. RY*(12) C 13	0.67	12.68	0.082
73. CR (1) C 23	/305. RY*(13) C 13	2.08	12.13	0.142
73. CR (1) C 23	/309. RY*(17) C 13	1.52	11.65	0.119
73. CR (1) C 23	/314. RY*(5) C 14	0.54	10.94	0.068
73. CR (1) C 23	/316. RY*(7) C 14	0.72	11.62	0.082
73. CR (1) C 23	/318. RY*(9) C 14	4.27	11.97	0.202
73. CR (1) C 23	/319. RY*(10) C 14	3.44	11.22	0.175
73. CR (1) C 23	/320. RY*(11) C 14	0.69	11.98	0.081
73. CR (1) C 23	/323. RY*(14) C 14	1.51	11.37	0.117
73. CR (1) C 23	/326. RY*(17) C 14	5.71	11.66	0.230
73. CR (1) C 23	/327. RY*(1) C 15	2.63	11.15	0.153
73. CR (1) C 23	/330. RY*(4) C 15	16.12	10.90	0.374
73. CR (1) C 23	/331. RY*(5) C 15	2.06	11.34	0.136
73. CR (1) C 23	/334. RY*(8) C 15	6.85	11.01	0.245
73. CR (1) C 23	/335. RY*(9) C 15	1.57	13.87	0.132
73. CR (1) C 23	/337. RY*(11) C 15	1.39	11.95	0.115
73. CR (1) C 23	/338. RY*(12) C 15	4.41	10.79	0.195
73. CR (1) C 23	/339. RY*(13) C 15	4.54	11.46	0.204
73. CR (1) C 23	/340. RY*(14) C 15	8.35	12.54	0.289
73. CR (1) C 23	/345. RY*(2) C 16	4.57	11.00	0.200
73. CR (1) C 23	/346. RY*(3) C 16	0.92	10.79	0.089
73. CR (1) C 23	/347. RY*(4) C 16	1.07	11.03	0.097
73. CR (1) C 23	/348. RY*(5) C 16	55.52	11.35	0.709
73. CR (1) C 23	/351. RY*(8) C 16	8.15	11.52	0.274
73. CR (1) C 23	/352. RY*(9) C 16	9.00	11.72	0.290
73. CR (1) C 23	/353. RY*(10) C 16	1.28	11.11	0.107
73. CR (1) C 23	/354. RY*(11) C 16	7.62	12.94	0.280
73. CR (1) C 23	/355. RY*(12) C 16	5.23	13.57	0.238

73. CR (1) C 23	/356. RY*(13) C 16	1.19	11.22	0.103
73. CR (1) C 23	/357. RY*(14) C 16	42.86	11.74	0.633
73. CR (1) C 23	/358. RY*(15) C 16	48.62	11.38	0.664
73. CR (1) C 23	/361. RY*(1) C 17	2.23	11.06	0.141
73. CR (1) C 23	/362. RY*(2) C 17	2.70	11.49	0.158
73. CR (1) C 23	/363. RY*(3) C 17	0.56	11.50	0.072
73. CR (1) C 23	/365. RY*(5) C 17	37.16	10.97	0.570
73. CR (1) C 23	/367. RY*(7) C 17	4.02	12.03	0.196
73. CR (1) C 23	/368. RY*(8) C 17	7.45	11.02	0.256
73. CR (1) C 23	/369. RY*(9) C 17	1173.41	7.13	2.583
73. CR (1) C 23	/370. RY*(10) C 17	74.17	13.16	0.882
73. CR (1) C 23	/371. RY*(11) C 17	25.11	11.82	0.486
73. CR (1) C 23	/372. RY*(12) C 17	29.08	12.97	0.548
73. CR (1) C 23	/373. RY*(13) C 17	115.53	11.67	1.037
73. CR (1) C 23	/375. RY*(15) C 17	0.86	15.54	0.103
73. CR (1) C 23	/379. RY*(3) C 18	0.94	11.52	0.093
73. CR (1) C 23	/380. RY*(4) C 18	1.61	11.69	0.122
73. CR (1) C 23	/382. RY*(6) C 18	6.28	11.18	0.236
73. CR (1) C 23	/383. RY*(7) C 18	52.34	10.78	0.670
73. CR (1) C 23	/385. RY*(9) C 18	8.36	11.90	0.282
73. CR (1) C 23	/386. RY*(10) C 18	12.88	12.01	0.351
73. CR (1) C 23	/387. RY*(11) C 18	38.49	13.96	0.654
73. CR (1) C 23	/388. RY*(12) C 18	21.11	12.24	0.454
73. CR (1) C 23	/389. RY*(13) C 18	2.49	12.86	0.160
73. CR (1) C 23	/392. RY*(16) C 18	49.24	10.42	0.640
73. CR (1) C 23	/395. RY*(2) C 19	42.91	10.84	0.609
73. CR (1) C 23	/396. RY*(3) C 19	2.21	11.50	0.142
73. CR (1) C 23	/402. RY*(9) C 19	1.00	10.82	0.093

73. CR (1) C 23	/403. RY*(10) C 19	0.51	10.54	0.065
73. CR (1) C 23	/405. RY*(12) C 19	2.67	10.97	0.153
73. CR (1) C 23	/409. RY*(16) C 19	0.53	12.85	0.074
73. CR (1) C 23	/413. RY*(3) C 20	1.81	10.56	0.123
73. CR (1) C 23	/415. RY*(5) C 20	0.58	11.05	0.072
73. CR (1) C 23	/417. RY*(7) C 20	6.77	11.81	0.253
73. CR (1) C 23	/421. RY*(11) C 20	0.92	11.62	0.092
73. CR (1) C 23	/426. RY*(16) C 20	0.56	10.46	0.069
73. CR (1) C 23	/427. RY*(17) C 20	1.79	12.02	0.131
73. CR (1) C 23	/431. RY*(4) C 21	0.65	11.17	0.076
73. CR (1) C 23	/433. RY*(6) C 21	3.04	11.13	0.164
73. CR (1) C 23	/435. RY*(8) C 21	0.55	12.48	0.074
73. CR (1) C 23	/437. RY*(10) C 21	1.34	11.54	0.111
73. CR (1) C 23	/438. RY*(11) C 21	2.05	10.49	0.131
73. CR (1) C 23	/440. RY*(13) C 21	0.90	12.12	0.093
73. CR (1) C 23	/447. RY*(3) C 22	0.91	10.54	0.087
73. CR (1) C 23	/449. RY*(5) C 22	3.85	11.44	0.187
73. CR (1) C 23	/450. RY*(6) C 22	2.83	11.04	0.158
73. CR (1) C 23	/451. RY*(7) C 22	10.18	11.35	0.303
73. CR (1) C 23	/452. RY*(8) C 22	0.79	12.21	0.088
73. CR (1) C 23	/454. RY*(10) C 22	3.29	12.42	0.180
73. CR (1) C 23	/455. RY*(11) C 22	1.58	11.29	0.119
73. CR (1) C 23	/457. RY*(13) C 22	2.56	11.57	0.154
73. CR (1) C 23	/458. RY*(14) C 22	2.92	10.70	0.158
73. CR (1) C 23	/461. RY*(17) C 22	0.66	12.24	0.080
73. CR (1) C 23	/462. RY*(1) C 23	246.89	9.94	1.399
73. CR (1) C 23	/463. RY*(2) C 23	78.07	10.50	0.809
73. CR (1) C 23	/464. RY*(3) C 23	25.92	10.83	0.473

73. CR (1) C 23	/465. RY*(4) C 23	151.68	10.76	1.140
73. CR (1) C 23	/466. RY*(5) C 23	272.65	9.46	1.434
73. CR (1) C 23	/467. RY*(6) C 23	4.83	11.59	0.211
73. CR (1) C 23	/468. RY*(7) C 23	780.65	8.40	2.287
73. CR (1) C 23	/469. RY*(8) C 23	184.19	10.83	1.261
73. CR (1) C 23	/470. RY*(9) C 23	2905.93	4.44	3.206
73. CR (1) C 23	/471. RY*(10) C 23	440.03	10.61	1.929
73. CR (1) C 23	/472. RY*(11) C 23	2281.85	5.67	3.212
73. CR (1) C 23	/474. RY*(13) C 23	4.23	12.79	0.208
73. CR (1) C 23	/475. RY*(14) C 23	12.72	32.34	0.572
73. CR (1) C 23	/476. RY*(15) C 23	169.15	11.06	1.221
73. CR (1) C 23	/477. RY*(16) C 23	243.43	11.04	1.464
73. CR (1) C 23	/478. RY*(17) C 23	18.24	12.40	0.425
73. CR (1) C 23	/479. RY*(1) H 24	8.51	10.68	0.269
73. CR (1) C 23	/481. RY*(3) H 24	0.74	11.67	0.083
73. CR (1) C 23	/482. RY*(4) H 24	0.95	12.18	0.096
73. CR (1) C 23	/483. RY*(5) H 24	7.96	12.62	0.283
73. CR (1) C 23	/484. RY*(1) H 25	0.78	10.92	0.082
73. CR (1) C 23	/485. RY*(2) H 25	0.84	12.03	0.090
73. CR (1) C 23	/491. RY*(3) H 26	0.68	11.62	0.080
73. CR (1) C 23	/492. RY*(4) H 26	8.51	11.96	0.285
73. CR (1) C 23	/496. RY*(3) H 27	11.67	11.55	0.328
73. CR (1) C 23	/497. RY*(4) H 27	352.14	10.14	1.687
73. CR (1) C 23	/498. RY*(5) H 27	13.01	12.49	0.360
73. CR (1) C 23	/499. RY*(1) H 28	5.05	10.93	0.210
73. CR (1) C 23	/500. RY*(2) H 28	5.06	11.96	0.220
73. CR (1) C 23	/501. RY*(3) H 28	796.57	8.40	2.309
73. CR (1) C 23	/502. RY*(4) H 28	44.67	11.79	0.648

73. CR (1) C 23	/504. RY*(1) H 29	0.85	10.67	0.085
73. CR (1) C 23	/506. RY*(3) H 29	28.62	12.33	0.530
73. CR (1) C 23	/507. RY*(4) H 29	19.55	12.79	0.446
73. CR (1) C 23	/508. RY*(5) H 29	10.28	12.16	0.316
73. CR (1) C 23	/509. RY*(1) H 30	18.97	10.94	0.407
73. CR (1) C 23	/511. RY*(3) H 30	5.23	11.64	0.220
73. CR (1) C 23	/516. RY*(3) H 31	0.53	11.62	0.070
73. CR (1) C 23	/517. RY*(4) H 31	0.69	12.02	0.081
73. CR (1) C 23	/528. RY*(1) H 34	0.90	11.44	0.090
73. CR (1) C 23	/529. RY*(2) H 34	234.41	10.23	1.382
73. CR (1) C 23	/530. RY*(3) H 34	31.68	11.78	0.545
73. CR (1) C 23	/531. RY*(4) H 34	3.64	11.85	0.185
73. CR (1) C 23	/533. RY*(1) H 35	37.37	10.76	0.566
73. CR (1) C 23	/534. RY*(2) H 35	180.63	10.92	1.254
73. CR (1) C 23	/535. RY*(3) H 35	22.80	11.78	0.463
73. CR (1) C 23	/536. RY*(4) H 35	8.48	11.80	0.282
73. CR (1) C 23	/537. RY*(5) H 35	2.18	12.72	0.149
73. CR (1) C 23	/541. RY*(4) H 36	550.44	7.89	1.860
73. CR (1) C 23	/542. RY*(5) H 36	296.99	11.80	1.671
73. CR (1) C 23	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.89	10.39	0.086
73. CR (1) C 23	/562. BD*(1) C 10 - C 11	0.85	10.49	0.085
73. CR (1) C 23	/572. BD*(1) C 14 - H 27	5.23	10.43	0.209
73. CR (1) C 23	/573. BD*(1) C 15 - C 16	277.02	9.32	1.442
73. CR (1) C 23	/574. BD*(2) C 15 - C 16	2.69	10.05	0.162
73. CR (1) C 23	/576. BD*(1) C 18 - C 22	7.17	10.56	0.248
73. CR (1) C 23	/578. BD*(2) C 19 - C 20	49.84	9.78	0.677
73. CR (1) C 23	/579. BD*(1) C 19 - H 29	208.86	9.49	1.264
73. CR (1) C 23	/580. BD*(1) C 20 - C 21	1.01	10.63	0.093

73. CR (1) C 23	/581. BD*(1) C 20 - H 30	3.97	10.48	0.183
73. CR (1) C 23	/582. BD*(1) C 21 - C 22	3.32	10.62	0.168
73. CR (1) C 23	/583. BD*(2) C 21 - C 22	10.60	10.00	0.315
73. CR (1) C 23	/586. BD*(1) C 23 - H 34	143.68	13.08	1.226
73. CR (1) C 23	/587. BD*(1) C 23 - H 35	185.47	13.36	1.409
73. CR (1) C 23	/588. BD*(1) C 23 - H 36	244.62	12.73	1.581
74. LP (1) O 2	/ 89. RY*(3) S 1	0.63	1.70	0.029
74. LP (1) O 2	/ 92. RY*(6) S 1	6.40	2.44	0.112
74. LP (1) O 2	/ 93. RY*(7) S 1	1.46	2.36	0.052
74. LP (1) O 2	/101. RY*(15) S 1	0.62	1.19	0.024
74. LP (1) O 2	/235. RY*(11) C 9	0.71	0.40	0.015
74. LP (1) O 2	/544. BD*(1) S 1 - O 3	1.51	1.11	0.038
74. LP (1) O 2	/546. BD*(1) S 1 - C 16	0.71	0.98	0.025
74. LP (1) O 2	/573. BD*(1) C 15 - C 16	6.85	0.10	0.023
74. LP (1) O 2	/579. BD*(1) C 19 - H 29	0.50	0.28	0.011
75. LP (2) O 2	/ 87. RY*(1) S 1	2.88	1.09	0.052
75. LP (2) O 2	/ 88. RY*(2) S 1	2.67	1.01	0.048
75. LP (2) O 2	/ 89. RY*(3) S 1	2.54	1.18	0.051
75. LP (2) O 2	/ 90. RY*(4) S 1	3.90	1.11	0.061
75. LP (2) O 2	/ 91. RY*(5) S 1	1.23	1.13	0.035
75. LP (2) O 2	/462. RY*(1) C 23	0.94	0.20	0.013
75. LP (2) O 2	/497. RY*(4) H 27	0.95	0.40	0.018
75. LP (2) O 2	/544. BD*(1) S 1 - O 3	10.66	0.59	0.071
75. LP (2) O 2	/545. BD*(1) S 1 - N 6	1.87	0.43	0.026
75. LP (2) O 2	/546. BD*(1) S 1 - C 16	17.61	0.46	0.080
75. LP (2) O 2	/565. BD*(1) C 11 - C 16	0.60	0.83	0.021
75. LP (2) O 2	/578. BD*(2) C 19 - C 20	0.86	0.05	0.006
76. LP (3) O 2	/ 87. RY*(1) S 1	4.87	1.09	0.067

76. LP (3) O 2	/ 88. RY*(2) S 1	1.31	1.01	0.034
76. LP (3) O 2	/ 89. RY*(3) S 1	0.63	1.18	0.025
76. LP (3) O 2	/ 90. RY*(4) S 1	5.81	1.11	0.075
76. LP (3) O 2	/ 91. RY*(5) S 1	0.88	1.13	0.030
76. LP (3) O 2	/462. RY*(1) C 23	1.19	0.20	0.015
76. LP (3) O 2	/497. RY*(4) H 27	1.01	0.40	0.019
76. LP (3) O 2	/529. RY*(2) H 34	0.60	0.49	0.016
76. LP (3) O 2	/544. BD*(1) S 1 - O 3	10.52	0.58	0.071
76. LP (3) O 2	/545. BD*(1) S 1 - N 6	23.91	0.42	0.091
76. LP (3) O 2	/546. BD*(1) S 1 - C 16	0.75	0.46	0.017
76. LP (3) O 2	/578. BD*(2) C 19 - C 20	1.24	0.05	0.007
77. LP (1) O 3	/ 92. RY*(6) S 1	4.32	2.44	0.092
77. LP (1) O 3	/ 93. RY*(7) S 1	3.99	2.36	0.087
77. LP (1) O 3	/106. RY*(20) S 1	0.57	17.61	0.090
77. LP (1) O 3	/543. BD*(1) S 1 - O 2	1.56	1.10	0.038
77. LP (1) O 3	/546. BD*(1) S 1 - C 16	0.78	0.98	0.026
78. LP (2) O 3	/ 88. RY*(2) S 1	6.48	1.00	0.075
78. LP (2) O 3	/ 89. RY*(3) S 1	0.87	1.17	0.030
78. LP (2) O 3	/ 90. RY*(4) S 1	6.19	1.10	0.077
78. LP (2) O 3	/543. BD*(1) S 1 - O 2	2.59	0.57	0.035
78. LP (2) O 3	/545. BD*(1) S 1 - N 6	10.24	0.42	0.059
78. LP (2) O 3	/546. BD*(1) S 1 - C 16	17.17	0.45	0.078
78. LP (2) O 3	/574. BD*(2) C 15 - C 16	1.01	0.31	0.016
79. LP (3) O 3	/ 87. RY*(1) S 1	8.04	1.08	0.086
79. LP (3) O 3	/ 89. RY*(3) S 1	2.82	1.17	0.054
79. LP (3) O 3	/ 90. RY*(4) S 1	1.45	1.10	0.038
79. LP (3) O 3	/ 91. RY*(5) S 1	0.69	1.12	0.026
79. LP (3) O 3	/497. RY*(4) H 27	0.57	0.39	0.014

79. LP (3) O 3	/543. BD*(1) S 1 - O 2	18.21	0.57	0.093
79. LP (3) O 3	/545. BD*(1) S 1 - N 6	15.20	0.41	0.072
79. LP (3) O 3	/546. BD*(1) S 1 - C 16	1.02	0.45	0.019
79. LP (3) O 3	/578. BD*(2) C 19 - C 20	0.92	0.04	0.005
80. LP (1) O 4	/361. RY*(1) C 17	10.60	1.71	0.121
80. LP (1) O 4	/550. BD*(1) O 5 - H 33	5.16	1.02	0.065
80. LP (1) O 4	/561. BD*(1) C 9 - C 17	4.17	1.12	0.061
81. LP (2) O 4	/361. RY*(1) C 17	1.49	1.34	0.041
81. LP (2) O 4	/363. RY*(3) C 17	0.77	1.78	0.034
81. LP (2) O 4	/364. RY*(4) C 17	1.83	2.59	0.064
81. LP (2) O 4	/497. RY*(4) H 27	0.50	0.42	0.013
81. LP (2) O 4	/550. BD*(1) O 5 - H 33	28.00	0.65	0.122
81. LP (2) O 4	/551. BD*(1) N 6 - C 9	0.55	0.67	0.018
81. LP (2) O 4	/553. BD*(1) N 7 - C 17	20.96	0.76	0.116
81. LP (2) O 4	/561. BD*(1) C 9 - C 17	9.76	0.75	0.078
82. LP (1) O 5	/242. RY*(1) C 10	4.53	1.46	0.073
82. LP (1) O 5	/524. RY*(1) H 33	1.79	2.86	0.064
82. LP (1) O 5	/559. BD*(1) C 9 - C 10	6.40	1.17	0.077
82. LP (1) O 5	/562. BD*(1) C 10 - C 11	0.59	1.05	0.022
83. LP (2) O 5	/243. RY*(2) C 10	1.77	1.65	0.051
83. LP (2) O 5	/526. RY*(3) H 33	1.07	1.88	0.042
83. LP (2) O 5	/560. BD*(2) C 9 - C 10	43.30	0.33	0.109
84. LP (1) N 6	/ 91. RY*(5) S 1	3.86	1.16	0.062
84. LP (1) N 6	/142. RY*(1) O 4	5.33	0.01	0.007
84. LP (1) N 6	/228. RY*(4) C 9	0.72	1.57	0.031
84. LP (1) N 6	/462. RY*(1) C 23	2.36	0.24	0.022
84. LP (1) N 6	/463. RY*(2) C 23	0.69	0.80	0.022
84. LP (1) N 6	/464. RY*(3) C 23	0.52	1.12	0.022

84. LP (1) N 6	/471. RY*(10) C 23	0.82	0.91	0.025
84. LP (1) N 6	/540. RY*(3) H 36	0.68	0.58	0.018
84. LP (1) N 6	/542. RY*(5) H 36	3.12	2.09	0.075
84. LP (1) N 6	/544. BD*(1) S 1 - O 3	2.84	0.62	0.037
84. LP (1) N 6	/546. BD*(1) S 1 - C 16	5.42	0.49	0.047
84. LP (1) N 6	/549. BD*(1) O 5 - C 10	0.50	0.69	0.017
84. LP (1) N 6	/555. BD*(1) N 7 - H 24	1.28	0.71	0.028
84. LP (1) N 6	/559. BD*(1) C 9 - C 10	5.78	0.90	0.066
84. LP (1) N 6	/560. BD*(2) C 9 - C 10	3.09	0.34	0.030
84. LP (1) N 6	/561. BD*(1) C 9 - C 17	3.35	0.77	0.046
84. LP (1) N 6	/588. BD*(1) C 23 - H 36	5.84	3.02	0.122
85. LP (1) N 7	/ 98. RY*(12) S 1	0.74	0.64	0.021
85. LP (1) N 7	/237. RY*(13) C 9	0.59	1.85	0.033
85. LP (1) N 7	/252. RY*(11) C 10	0.69	0.56	0.019
85. LP (1) N 7	/362. RY*(2) C 17	2.12	1.72	0.060
85. LP (1) N 7	/365. RY*(5) C 17	0.75	1.20	0.030
85. LP (1) N 7	/368. RY*(8) C 17	0.56	1.26	0.026
85. LP (1) N 7	/379. RY*(3) C 18	1.18	1.75	0.045
85. LP (1) N 7	/381. RY*(5) C 18	0.82	1.53	0.035
85. LP (1) N 7	/392. RY*(16) C 18	0.53	0.65	0.018
85. LP (1) N 7	/462. RY*(1) C 23	3.09	0.18	0.023
85. LP (1) N 7	/465. RY*(4) C 23	0.53	1.00	0.023
85. LP (1) N 7	/469. RY*(8) C 23	0.76	1.06	0.028
85. LP (1) N 7	/471. RY*(10) C 23	0.66	0.85	0.023
85. LP (1) N 7	/477. RY*(16) C 23	1.26	1.27	0.040
85. LP (1) N 7	/481. RY*(3) H 24	0.71	1.90	0.036
85. LP (1) N 7	/497. RY*(4) H 27	3.21	0.38	0.034
85. LP (1) N 7	/529. RY*(2) H 34	1.18	0.46	0.023

85. LP (1) N 7	/534. RY*(2) H 35	0.82	1.16	0.030
85. LP (1) N 7	/548. BD*(2) O 4 - C 17	70.72	0.25	0.121
85. LP (1) N 7	/557. BD*(2) N 8 - C 18	40.08	0.27	0.094
85. LP (1) N 7	/578. BD*(2) C 19 - C 20	13.75	0.02	0.015
85. LP (1) N 7	/583. BD*(2) C 21 - C 22	0.82	0.24	0.013
86. LP (1) N 8	/142. RY*(1) O 4	4.34	0.03	0.010
86. LP (1) N 8	/377. RY*(1) C 18	4.03	1.63	0.074
86. LP (1) N 8	/394. RY*(1) C 19	3.36	1.40	0.062
86. LP (1) N 8	/462. RY*(1) C 23	0.65	0.25	0.012
86. LP (1) N 8	/497. RY*(4) H 27	0.72	0.45	0.016
86. LP (1) N 8	/554. BD*(1) N 7 - C 18	5.20	0.76	0.057
86. LP (1) N 8	/576. BD*(1) C 18 - C 22	10.60	0.87	0.087
86. LP (1) N 8	/577. BD*(1) C 19 - C 20	8.05	0.91	0.078
86. LP (1) N 8	/578. BD*(2) C 19 - C 20	0.53	0.10	0.007
543. BD*(1) S 1 - O 2	/ 87. RY*(1) S 1	8.24	0.50	0.181
543. BD*(1) S 1 - O 2	/ 88. RY*(2) S 1	0.90	0.43	0.057
543. BD*(1) S 1 - O 2	/ 89. RY*(3) S 1	10.12	0.59	0.233
543. BD*(1) S 1 - O 2	/ 91. RY*(5) S 1	2.26	0.55	0.115
543. BD*(1) S 1 - O 2	/ 98. RY*(12) S 1	6.42	0.08	0.079
543. BD*(1) S 1 - O 2	/101. RY*(15) S 1	3.23	0.08	0.057
543. BD*(1) S 1 - O 2	/108. RY*(1) O 2	1.37	0.83	0.116
543. BD*(1) S 1 - O 2	/109. RY*(2) O 2	0.50	0.53	0.056
543. BD*(1) S 1 - O 2	/111. RY*(4) O 2	2.10	0.34	0.093
543. BD*(1) S 1 - O 2	/471. RY*(10) C 23	0.61	0.29	0.046
543. BD*(1) S 1 - O 2	/551. BD*(1) N 6 - C 9	2.11	0.07	0.037
543. BD*(1) S 1 - O 2	/565. BD*(1) C 11 - C 16	0.83	0.25	0.044
544. BD*(1) S 1 - O 3	/ 87. RY*(1) S 1	7.87	0.50	0.173
544. BD*(1) S 1 - O 3	/ 89. RY*(3) S 1	12.73	0.59	0.255

544. BD*(1) S 1 - O 3 / 91. RY*(5) S 1 0.55 0.55 0.055

544. BD*(1) S 1 - O 3 /125. RY*(1) O 3 1.44 0.89 0.119

544. BD*(1) S 1 - O 3 /126. RY*(2) O 3 0.52 0.68 0.063

544. BD*(1) S 1 - O 3 /127. RY*(3) O 3 0.52 0.62 0.060

544. BD*(1) S 1 - O 3 /128. RY*(4) O 3 1.28 0.33 0.069

544. BD*(1) S 1 - O 3 /463. RY*(2) C 23 0.67 0.18 0.036

544. BD*(1) S 1 - O 3 /471. RY*(10) C 23 0.52 0.29 0.041

545. BD*(1) S 1 - N 6 / 87. RY*(1) S 1 5.76 0.66 0.137

545. BD*(1) S 1 - N 6 / 88. RY*(2) S 1 8.41 0.59 0.158

545. BD*(1) S 1 - N 6 / 91. RY*(5) S 1 0.81 0.71 0.058

545. BD*(1) S 1 - N 6 / 95. RY*(9) S 1 0.59 0.89 0.057

545. BD*(1) S 1 - N 6 / 98. RY*(12) S 1 1.32 0.24 0.044

545. BD*(1) S 1 - N 6 /101. RY*(15) S 1 2.58 0.24 0.062

545. BD*(1) S 1 - N 6 /180. RY*(7) N 6 0.58 0.97 0.059

545. BD*(1) S 1 - N 6 /183. RY*(10) N 6 0.75 1.85 0.092

545. BD*(1) S 1 - N 6 /237. RY*(13) C 9 0.54 1.45 0.070

545. BD*(1) S 1 - N 6 /252. RY*(11) C 10 1.69 0.16 0.041

545. BD*(1) S 1 - N 6 /463. RY*(2) C 23 0.55 0.34 0.034

545. BD*(1) S 1 - N 6 /465. RY*(4) C 23 1.08 0.60 0.063

545. BD*(1) S 1 - N 6 /469. RY*(8) C 23 0.59 0.66 0.049

545. BD*(1) S 1 - N 6 /471. RY*(10) C 23 0.63 0.45 0.042

545. BD*(1) S 1 - N 6 /477. RY*(16) C 23 0.73 0.88 0.063

545. BD*(1) S 1 - N 6 /529. RY*(2) H 34 4.91 0.06 0.044

545. BD*(1) S 1 - N 6 /534. RY*(2) H 35 0.55 0.76 0.051

545. BD*(1) S 1 - N 6 /543. BD*(1) S 1 - O 2 0.84 0.16 0.023

545. BD*(1) S 1 - N 6 /544. BD*(1) S 1 - O 3 0.56 0.16 0.019

545. BD*(1) S 1 - N 6 /551. BD*(1) N 6 - C 9 1.01 0.23 0.036

545. BD*(1) S 1 - N 6 /552. BD*(1) N 6 - C 23 1.90 0.15 0.041

545. BD*(1) S 1 - N 6	/561. BD*(1) C 9 - C 17	0.60	0.31	0.031
546. BD*(1) S 1 - C 16	/ 87. RY*(1) S 1	1.23	0.63	0.068
546. BD*(1) S 1 - C 16	/ 88. RY*(2) S 1	9.26	0.56	0.178
546. BD*(1) S 1 - C 16	/347. RY*(4) C 16	0.87	0.83	0.075
546. BD*(1) S 1 - C 16	/529. RY*(2) H 34	0.82	0.03	0.015
546. BD*(1) S 1 - C 16	/543. BD*(1) S 1 - O 2	0.63	0.13	0.020
546. BD*(1) S 1 - C 16	/544. BD*(1) S 1 - O 3	0.93	0.13	0.024
546. BD*(1) S 1 - C 16	/562. BD*(1) C 10 - C 11	1.40	0.29	0.053
546. BD*(1) S 1 - C 16	/563. BD*(1) C 11 - C 12	1.01	0.39	0.053
546. BD*(1) S 1 - C 16	/571. BD*(1) C 14 - C 15	1.04	0.40	0.055
546. BD*(1) S 1 - C 16	/575. BD*(1) C 15 - H 28	1.34	0.29	0.053
548. BD*(2) O 4 - C 17	/155. RY*(14) O 4	0.59	3.06	0.084
548. BD*(2) O 4 - C 17	/362. RY*(2) C 17	2.64	1.47	0.121
548. BD*(2) O 4 - C 17	/368. RY*(8) C 17	1.07	1.00	0.064
548. BD*(2) O 4 - C 17	/557. BD*(2) N 8 - C 18	1.50	0.02	0.007
548. BD*(2) O 4 - C 17	/560. BD*(2) C 9 - C 10	85.34	0.03	0.074
557. BD*(2) N 8 - C 18	/193. RY*(3) N 7	0.67	0.78	0.043
557. BD*(2) N 8 - C 18	/210. RY*(3) N 8	3.09	0.60	0.081
557. BD*(2) N 8 - C 18	/379. RY*(3) C 18	0.96	1.49	0.071
557. BD*(2) N 8 - C 18	/381. RY*(5) C 18	0.94	1.26	0.064
560. BD*(2) C 9 - C 10	/158. RY*(1) O 5	0.79	0.53	0.048
560. BD*(2) C 9 - C 10	/243. RY*(2) C 10	0.66	1.32	0.069
560. BD*(2) C 9 - C 10	/252. RY*(11) C 10	0.77	0.28	0.034
560. BD*(2) C 9 - C 10	/545. BD*(1) S 1 - N 6	2.50	0.12	0.029
560. BD*(2) C 9 - C 10	/552. BD*(1) N 6 - C 23	1.01	0.27	0.037
564. BD*(2) C 11 - C 12	/ 98. RY*(12) S 1	0.89	0.35	0.037
564. BD*(2) C 11 - C 12	/101. RY*(15) S 1	0.53	0.36	0.029
564. BD*(2) C 11 - C 12	/252. RY*(11) C 10	0.76	0.27	0.030

564. BD*(2) C 11 - C 12	/263. RY*(5) C 11	0.93	1.27	0.072
564. BD*(2) C 11 - C 12	/278. RY*(3) C 12	3.15	0.53	0.086
564. BD*(2) C 11 - C 12	/279. RY*(4) C 12	0.77	0.95	0.057
564. BD*(2) C 11 - C 12	/469. RY*(8) C 23	0.59	0.78	0.045
564. BD*(2) C 11 - C 12	/471. RY*(10) C 23	0.81	0.56	0.045
564. BD*(2) C 11 - C 12	/477. RY*(16) C 23	0.72	0.99	0.056
564. BD*(2) C 11 - C 12	/497. RY*(4) H 27	7.22	0.09	0.055
564. BD*(2) C 11 - C 12	/529. RY*(2) H 34	2.10	0.18	0.041
569. BD*(2) C 13 - C 14	/295. RY*(3) C 13	1.58	0.93	0.086
569. BD*(2) C 13 - C 14	/312. RY*(3) C 14	2.34	0.67	0.089
574. BD*(2) C 15 - C 16	/ 98. RY*(12) S 1	2.87	0.35	0.066
574. BD*(2) C 15 - C 16	/101. RY*(15) S 1	0.85	0.35	0.036
574. BD*(2) C 15 - C 16	/231. RY*(7) C 9	0.54	0.93	0.047
574. BD*(2) C 15 - C 16	/237. RY*(13) C 9	1.01	1.56	0.083
574. BD*(2) C 15 - C 16	/252. RY*(11) C 10	2.30	0.27	0.052
574. BD*(2) C 15 - C 16	/270. RY*(12) C 11	0.55	0.94	0.048
574. BD*(2) C 15 - C 16	/329. RY*(3) C 15	3.14	0.66	0.095
574. BD*(2) C 15 - C 16	/346. RY*(3) C 16	1.12	0.73	0.060
574. BD*(2) C 15 - C 16	/348. RY*(5) C 16	1.20	1.29	0.083
574. BD*(2) C 15 - C 16	/465. RY*(4) C 23	0.85	0.71	0.052
574. BD*(2) C 15 - C 16	/469. RY*(8) C 23	2.99	0.77	0.101
574. BD*(2) C 15 - C 16	/474. RY*(13) C 23	0.78	2.74	0.097
574. BD*(2) C 15 - C 16	/477. RY*(16) C 23	6.22	0.99	0.164
574. BD*(2) C 15 - C 16	/497. RY*(4) H 27	25.88	0.09	0.100
574. BD*(2) C 15 - C 16	/529. RY*(2) H 34	5.66	0.17	0.066
574. BD*(2) C 15 - C 16	/534. RY*(2) H 35	0.76	0.87	0.054
574. BD*(2) C 15 - C 16	/542. RY*(5) H 36	0.56	1.74	0.066
574. BD*(2) C 15 - C 16	/543. BD*(1) S 1 - O 2	0.50	0.27	0.021

574. BD*(2) C 15 - C 16	/544. BD*(1) S 1 - O 3	2.35	0.27	0.045
574. BD*(2) C 15 - C 16	/545. BD*(1) S 1 - N 6	1.35	0.11	0.019
574. BD*(2) C 15 - C 16	/587. BD*(1) C 23 - H 35	2.15	3.30	0.174
574. BD*(2) C 15 - C 16	/588. BD*(1) C 23 - H 36	1.53	2.67	0.131
578. BD*(2) C 19 - C 20	/ 87. RY*(1) S 1	1.65	1.04	0.086
578. BD*(2) C 19 - C 20	/ 88. RY*(2) S 1	1.66	0.96	0.084
578. BD*(2) C 19 - C 20	/ 92. RY*(6) S 1	1.00	1.87	0.098
578. BD*(2) C 19 - C 20	/ 95. RY*(9) S 1	1.79	1.27	0.109
578. BD*(2) C 19 - C 20	/ 96. RY*(10) S 1	1.60	1.15	0.098
578. BD*(2) C 19 - C 20	/ 98. RY*(12) S 1	79.41	0.62	0.505
578. BD*(2) C 19 - C 20	/100. RY*(14) S 1	13.41	0.95	0.258
578. BD*(2) C 19 - C 20	/101. RY*(15) S 1	53.07	0.62	0.414
578. BD*(2) C 19 - C 20	/109. RY*(2) O 2	0.71	1.07	0.063
578. BD*(2) C 19 - C 20	/110. RY*(3) O 2	1.86	1.21	0.108
578. BD*(2) C 19 - C 20	/112. RY*(5) O 2	22.75	0.97	0.339
578. BD*(2) C 19 - C 20	/114. RY*(7) O 2	6.44	1.90	0.252
578. BD*(2) C 19 - C 20	/115. RY*(8) O 2	0.55	1.66	0.069
578. BD*(2) C 19 - C 20	/127. RY*(3) O 3	4.37	1.16	0.162
578. BD*(2) C 19 - C 20	/128. RY*(4) O 3	0.70	0.87	0.056
578. BD*(2) C 19 - C 20	/129. RY*(5) O 3	1.85	1.33	0.113
578. BD*(2) C 19 - C 20	/130. RY*(6) O 3	23.23	0.87	0.325
578. BD*(2) C 19 - C 20	/131. RY*(7) O 3	2.08	2.12	0.151
578. BD*(2) C 19 - C 20	/133. RY*(9) O 3	0.72	3.19	0.109
578. BD*(2) C 19 - C 20	/147. RY*(6) O 4	0.66	1.56	0.073
578. BD*(2) C 19 - C 20	/160. RY*(3) O 5	1.75	0.98	0.094
578. BD*(2) C 19 - C 20	/177. RY*(4) N 6	0.85	1.12	0.070
578. BD*(2) C 19 - C 20	/180. RY*(7) N 6	1.63	1.35	0.107
578. BD*(2) C 19 - C 20	/188. RY*(15) N 6	0.57	4.18	0.112

578. BD*(2) C 19 - C 20	/190. RY*(17) N 6	6.03	31.77	0.999
578. BD*(2) C 19 - C 20	/191. RY*(1) N 7	9.09	0.84	0.197
578. BD*(2) C 19 - C 20	/195. RY*(5) N 7	17.92	0.79	0.270
578. BD*(2) C 19 - C 20	/197. RY*(7) N 7	0.52	2.11	0.076
578. BD*(2) C 19 - C 20	/198. RY*(8) N 7	4.74	1.80	0.211
578. BD*(2) C 19 - C 20	/199. RY*(9) N 7	7.30	2.57	0.312
578. BD*(2) C 19 - C 20	/200. RY*(10) N 7	20.46	1.27	0.367
578. BD*(2) C 19 - C 20	/204. RY*(14) N 7	0.62	3.01	0.098
578. BD*(2) C 19 - C 20	/208. RY*(1) N 8	6.77	0.86	0.173
578. BD*(2) C 19 - C 20	/212. RY*(5) N 8	2.50	1.77	0.152
578. BD*(2) C 19 - C 20	/216. RY*(9) N 8	1.75	3.08	0.168
578. BD*(2) C 19 - C 20	/217. RY*(10) N 8	1.17	1.11	0.082
578. BD*(2) C 19 - C 20	/226. RY*(2) C 9	0.90	1.16	0.073
578. BD*(2) C 19 - C 20	/228. RY*(4) C 9	0.76	1.49	0.077
578. BD*(2) C 19 - C 20	/229. RY*(5) C 9	0.98	2.12	0.104
578. BD*(2) C 19 - C 20	/230. RY*(6) C 9	3.76	1.34	0.162
578. BD*(2) C 19 - C 20	/231. RY*(7) C 9	28.98	1.20	0.425
578. BD*(2) C 19 - C 20	/232. RY*(8) C 9	13.54	1.52	0.327
578. BD*(2) C 19 - C 20	/233. RY*(9) C 9	14.99	2.42	0.434
578. BD*(2) C 19 - C 20	/234. RY*(10) C 9	27.67	1.39	0.448
578. BD*(2) C 19 - C 20	/236. RY*(12) C 9	1.80	2.28	0.146
578. BD*(2) C 19 - C 20	/237. RY*(13) C 9	55.12	1.83	0.725
578. BD*(2) C 19 - C 20	/238. RY*(14) C 9	1.71	2.39	0.146
578. BD*(2) C 19 - C 20	/239. RY*(15) C 9	1.38	2.67	0.138
578. BD*(2) C 19 - C 20	/241. RY*(17) C 9	0.79	19.68	0.285
578. BD*(2) C 19 - C 20	/242. RY*(1) C 10	12.55	1.11	0.265
578. BD*(2) C 19 - C 20	/244. RY*(3) C 10	0.57	1.82	0.073
578. BD*(2) C 19 - C 20	/245. RY*(4) C 10	2.12	1.78	0.140

578. BD*(2) C 19 - C 20	/246. RY*(5) C 10	0.68	1.28	0.067
578. BD*(2) C 19 - C 20	/250. RY*(9) C 10	0.57	1.97	0.076
578. BD*(2) C 19 - C 20	/251. RY*(10) C 10	1.88	1.54	0.123
578. BD*(2) C 19 - C 20	/252. RY*(11) C 10	65.37	0.54	0.427
578. BD*(2) C 19 - C 20	/253. RY*(12) C 10	1.79	1.76	0.128
578. BD*(2) C 19 - C 20	/255. RY*(14) C 10	0.62	1.89	0.078
578. BD*(2) C 19 - C 20	/256. RY*(15) C 10	1.64	3.25	0.166
578. BD*(2) C 19 - C 20	/260. RY*(2) C 11	1.85	1.51	0.120
578. BD*(2) C 19 - C 20	/263. RY*(5) C 11	1.20	1.54	0.098
578. BD*(2) C 19 - C 20	/265. RY*(7) C 11	2.52	1.85	0.156
578. BD*(2) C 19 - C 20	/266. RY*(8) C 11	0.65	1.64	0.075
578. BD*(2) C 19 - C 20	/267. RY*(9) C 11	11.91	1.45	0.300
578. BD*(2) C 19 - C 20	/268. RY*(10) C 11	6.04	2.15	0.260
578. BD*(2) C 19 - C 20	/270. RY*(12) C 11	25.01	1.21	0.397
578. BD*(2) C 19 - C 20	/273. RY*(15) C 11	6.48	1.86	0.250
578. BD*(2) C 19 - C 20	/274. RY*(16) C 11	2.55	2.88	0.195
578. BD*(2) C 19 - C 20	/279. RY*(4) C 12	4.22	1.21	0.163
578. BD*(2) C 19 - C 20	/280. RY*(5) C 12	1.11	1.11	0.080
578. BD*(2) C 19 - C 20	/281. RY*(6) C 12	2.42	1.39	0.132
578. BD*(2) C 19 - C 20	/285. RY*(10) C 12	1.08	2.87	0.127
578. BD*(2) C 19 - C 20	/286. RY*(11) C 12	13.14	1.05	0.268
578. BD*(2) C 19 - C 20	/287. RY*(12) C 12	2.01	2.14	0.150
578. BD*(2) C 19 - C 20	/288. RY*(13) C 12	1.31	1.60	0.104
578. BD*(2) C 19 - C 20	/298. RY*(6) C 13	1.61	1.27	0.103
578. BD*(2) C 19 - C 20	/299. RY*(7) C 13	2.37	1.96	0.155
578. BD*(2) C 19 - C 20	/318. RY*(9) C 14	0.54	2.18	0.078
578. BD*(2) C 19 - C 20	/319. RY*(10) C 14	0.68	1.43	0.071
578. BD*(2) C 19 - C 20	/326. RY*(17) C 14	0.94	1.87	0.096

578. BD*(2) C 19 - C 20	/327. RY*(1) C 15	0.52	1.36	0.060
578. BD*(2) C 19 - C 20	/330. RY*(4) C 15	3.77	1.11	0.147
578. BD*(2) C 19 - C 20	/334. RY*(8) C 15	1.62	1.22	0.101
578. BD*(2) C 19 - C 20	/338. RY*(12) C 15	1.15	1.00	0.078
578. BD*(2) C 19 - C 20	/339. RY*(13) C 15	0.78	1.68	0.082
578. BD*(2) C 19 - C 20	/340. RY*(14) C 15	1.23	2.76	0.133
578. BD*(2) C 19 - C 20	/345. RY*(2) C 16	1.02	1.22	0.080
578. BD*(2) C 19 - C 20	/348. RY*(5) C 16	9.73	1.57	0.281
578. BD*(2) C 19 - C 20	/351. RY*(8) C 16	1.49	1.73	0.116
578. BD*(2) C 19 - C 20	/352. RY*(9) C 16	1.54	1.93	0.124
578. BD*(2) C 19 - C 20	/354. RY*(11) C 16	0.81	3.15	0.115
578. BD*(2) C 19 - C 20	/357. RY*(14) C 16	6.80	1.96	0.263
578. BD*(2) C 19 - C 20	/358. RY*(15) C 16	9.46	1.60	0.280
578. BD*(2) C 19 - C 20	/365. RY*(5) C 17	8.46	1.18	0.227
578. BD*(2) C 19 - C 20	/367. RY*(7) C 17	0.59	2.25	0.083
578. BD*(2) C 19 - C 20	/368. RY*(8) C 17	1.76	1.24	0.106
578. BD*(2) C 19 - C 20	/370. RY*(10) C 17	7.33	3.38	0.359
578. BD*(2) C 19 - C 20	/371. RY*(11) C 17	3.58	2.04	0.195
578. BD*(2) C 19 - C 20	/372. RY*(12) C 17	2.95	3.19	0.221
578. BD*(2) C 19 - C 20	/373. RY*(13) C 17	17.73	1.89	0.417
578. BD*(2) C 19 - C 20	/382. RY*(6) C 18	1.14	1.39	0.091
578. BD*(2) C 19 - C 20	/383. RY*(7) C 18	14.90	0.99	0.277
578. BD*(2) C 19 - C 20	/385. RY*(9) C 18	1.17	2.12	0.114
578. BD*(2) C 19 - C 20	/386. RY*(10) C 18	1.68	2.22	0.139
578. BD*(2) C 19 - C 20	/387. RY*(11) C 18	3.09	4.18	0.259
578. BD*(2) C 19 - C 20	/388. RY*(12) C 18	2.58	2.46	0.182
578. BD*(2) C 19 - C 20	/392. RY*(16) C 18	19.97	0.64	0.257
578. BD*(2) C 19 - C 20	/395. RY*(2) C 19	11.33	1.05	0.247

578. BD*(2) C 19 - C 20	/398. RY*(5) C 19	2.27	1.05	0.111
578. BD*(2) C 19 - C 20	/405. RY*(12) C 19	0.59	1.18	0.060
578. BD*(2) C 19 - C 20	/413. RY*(3) C 20	2.69	0.78	0.104
578. BD*(2) C 19 - C 20	/417. RY*(7) C 20	0.98	2.03	0.102
578. BD*(2) C 19 - C 20	/426. RY*(16) C 20	1.05	0.68	0.061
578. BD*(2) C 19 - C 20	/433. RY*(6) C 21	0.70	1.35	0.070
578. BD*(2) C 19 - C 20	/449. RY*(5) C 22	0.57	1.66	0.070
578. BD*(2) C 19 - C 20	/450. RY*(6) C 22	0.60	1.26	0.063
578. BD*(2) C 19 - C 20	/451. RY*(7) C 22	1.87	1.56	0.123
578. BD*(2) C 19 - C 20	/458. RY*(14) C 22	1.09	0.92	0.072
578. BD*(2) C 19 - C 20	/462. RY*(1) C 23	333.29	0.16	0.520
578. BD*(2) C 19 - C 20	/463. RY*(2) C 23	23.18	0.72	0.294
578. BD*(2) C 19 - C 20	/464. RY*(3) C 23	5.82	1.05	0.177
578. BD*(2) C 19 - C 20	/465. RY*(4) C 23	48.62	0.98	0.497
578. BD*(2) C 19 - C 20	/467. RY*(6) C 23	1.12	1.80	0.103
578. BD*(2) C 19 - C 20	/469. RY*(8) C 23	63.71	1.04	0.588
578. BD*(2) C 19 - C 20	/471. RY*(10) C 23	101.87	0.83	0.662
578. BD*(2) C 19 - C 20	/473. RY*(12) C 23	0.52	2.10	0.076
578. BD*(2) C 19 - C 20	/474. RY*(13) C 23	1.84	3.01	0.170
578. BD*(2) C 19 - C 20	/476. RY*(15) C 23	31.83	1.28	0.460
578. BD*(2) C 19 - C 20	/477. RY*(16) C 23	78.89	1.26	0.718
578. BD*(2) C 19 - C 20	/478. RY*(17) C 23	0.77	2.61	0.102
578. BD*(2) C 19 - C 20	/479. RY*(1) H 24	2.80	0.90	0.114
578. BD*(2) C 19 - C 20	/483. RY*(5) H 24	0.89	2.83	0.115
578. BD*(2) C 19 - C 20	/492. RY*(4) H 26	1.20	2.17	0.117
578. BD*(2) C 19 - C 20	/496. RY*(3) H 27	2.12	1.77	0.139
578. BD*(2) C 19 - C 20	/497. RY*(4) H 27	281.89	0.36	0.724
578. BD*(2) C 19 - C 20	/498. RY*(5) H 27	0.70	2.71	0.099

578. BD*(2) C 19 - C 20 /499. RY*(1) H 28 1.31 1.15 0.088

578. BD*(2) C 19 - C 20 /500. RY*(2) H 28 0.87 2.17 0.099

578. BD*(2) C 19 - C 20 /502. RY*(4) H 28 4.30 2.00 0.212

578. BD*(2) C 19 - C 20 /506. RY*(3) H 29 5.42 2.55 0.268

578. BD*(2) C 19 - C 20 /509. RY*(1) H 30 0.74 1.16 0.067

578. BD*(2) C 19 - C 20 /528. RY*(1) H 34 0.97 1.66 0.091

578. BD*(2) C 19 - C 20 /529. RY*(2) H 34 132.91 0.44 0.553

578. BD*(2) C 19 - C 20 /530. RY*(3) H 34 3.18 1.99 0.181

578. BD*(2) C 19 - C 20 /533. RY*(1) H 35 15.13 0.98 0.277

578. BD*(2) C 19 - C 20 /534. RY*(2) H 35 38.25 1.14 0.476

578. BD*(2) C 19 - C 20 /535. RY*(3) H 35 2.23 1.99 0.152

578. BD*(2) C 19 - C 20 /536. RY*(4) H 35 0.99 2.02 0.102

578. BD*(2) C 19 - C 20 /542. RY*(5) H 36 8.99 2.01 0.307

578. BD*(2) C 19 - C 20 /557. BD*(2) N 8 - C 18 12.76 0.25 0.082

578. BD*(2) C 19 - C 20 /564. BD*(2) C 11 - C 12 0.63 0.26 0.020

578. BD*(2) C 19 - C 20 /572. BD*(1) C 14 - H 27 2.23 0.64 0.084

578. BD*(2) C 19 - C 20 /574. BD*(2) C 15 - C 16 1.32 0.27 0.029

578. BD*(2) C 19 - C 20 /576. BD*(1) C 18 - C 22 2.19 0.77 0.089

578. BD*(2) C 19 - C 20 /580. BD*(1) C 20 - C 21 0.53 0.84 0.047

578. BD*(2) C 19 - C 20 /581. BD*(1) C 20 - H 30 0.87 0.69 0.055

578. BD*(2) C 19 - C 20 /582. BD*(1) C 21 - C 22 0.65 0.84 0.052

578. BD*(2) C 19 - C 20 /583. BD*(2) C 21 - C 22 76.31 0.22 0.210

578. BD*(2) C 19 - C 20 /586. BD*(1) C 23 - H 34 4.01 3.30 0.259

578. BD*(2) C 19 - C 20 /587. BD*(1) C 23 - H 35 3.56 3.57 0.253

578. BD*(2) C 19 - C 20 /588. BD*(1) C 23 - H 36 12.22 2.94 0.422

583. BD*(2) C 21 - C 22 / 98. RY*(12) S 1 26.21 0.40 0.237

583. BD*(2) C 21 - C 22 /100. RY*(14) S 1 3.78 0.74 0.122

583. BD*(2) C 21 - C 22 /101. RY*(15) S 1 17.73 0.40 0.196

583. BD*(2) C 21 - C 22	/112. RY*(5) O 2	6.28	0.75	0.159
583. BD*(2) C 21 - C 22	/114. RY*(7) O 2	1.57	1.68	0.119
583. BD*(2) C 21 - C 22	/127. RY*(3) O 3	1.18	0.94	0.077
583. BD*(2) C 21 - C 22	/130. RY*(6) O 3	6.67	0.66	0.153
583. BD*(2) C 21 - C 22	/190. RY*(17) N 6	1.31	31.55	0.472
583. BD*(2) C 21 - C 22	/191. RY*(1) N 7	2.67	0.62	0.093
583. BD*(2) C 21 - C 22	/195. RY*(5) N 7	5.38	0.57	0.128
583. BD*(2) C 21 - C 22	/198. RY*(8) N 7	1.27	1.58	0.104
583. BD*(2) C 21 - C 22	/199. RY*(9) N 7	1.74	2.36	0.148
583. BD*(2) C 21 - C 22	/200. RY*(10) N 7	5.37	1.05	0.174
583. BD*(2) C 21 - C 22	/208. RY*(1) N 8	1.96	0.65	0.082
583. BD*(2) C 21 - C 22	/212. RY*(5) N 8	0.53	1.55	0.066
583. BD*(2) C 21 - C 22	/230. RY*(6) C 9	0.93	1.13	0.075
583. BD*(2) C 21 - C 22	/231. RY*(7) C 9	7.71	0.98	0.201
583. BD*(2) C 21 - C 22	/232. RY*(8) C 9	3.38	1.30	0.153
583. BD*(2) C 21 - C 22	/233. RY*(9) C 9	3.55	2.20	0.205
583. BD*(2) C 21 - C 22	/234. RY*(10) C 9	7.15	1.18	0.212
583. BD*(2) C 21 - C 22	/237. RY*(13) C 9	13.45	1.61	0.341
583. BD*(2) C 21 - C 22	/242. RY*(1) C 10	3.37	0.89	0.125
583. BD*(2) C 21 - C 22	/245. RY*(4) C 10	0.52	1.56	0.066
583. BD*(2) C 21 - C 22	/252. RY*(11) C 10	23.61	0.32	0.201
583. BD*(2) C 21 - C 22	/265. RY*(7) C 11	0.61	1.63	0.073
583. BD*(2) C 21 - C 22	/267. RY*(9) C 11	3.02	1.24	0.141
583. BD*(2) C 21 - C 22	/268. RY*(10) C 11	1.44	1.93	0.122
583. BD*(2) C 21 - C 22	/270. RY*(12) C 11	6.53	0.99	0.187
583. BD*(2) C 21 - C 22	/273. RY*(15) C 11	1.56	1.64	0.117
583. BD*(2) C 21 - C 22	/274. RY*(16) C 11	0.59	2.66	0.092
583. BD*(2) C 21 - C 22	/279. RY*(4) C 12	1.11	0.99	0.077

583. BD*(2) C 21 - C 22	/281. RY*(6) C 12	0.61	1.17	0.062
583. BD*(2) C 21 - C 22	/286. RY*(11) C 12	3.57	0.83	0.126
583. BD*(2) C 21 - C 22	/299. RY*(7) C 13	0.57	1.74	0.073
583. BD*(2) C 21 - C 22	/330. RY*(4) C 15	1.01	0.89	0.070
583. BD*(2) C 21 - C 22	/348. RY*(5) C 16	2.45	1.35	0.133
583. BD*(2) C 21 - C 22	/357. RY*(14) C 16	1.65	1.74	0.124
583. BD*(2) C 21 - C 22	/358. RY*(15) C 16	2.34	1.38	0.132
583. BD*(2) C 21 - C 22	/365. RY*(5) C 17	2.14	0.96	0.105
583. BD*(2) C 21 - C 22	/370. RY*(10) C 17	1.72	3.16	0.171
583. BD*(2) C 21 - C 22	/371. RY*(11) C 17	0.94	1.82	0.096
583. BD*(2) C 21 - C 22	/372. RY*(12) C 17	0.68	2.97	0.104
583. BD*(2) C 21 - C 22	/373. RY*(13) C 17	4.37	1.67	0.198
583. BD*(2) C 21 - C 22	/383. RY*(7) C 18	6.23	0.77	0.161
583. BD*(2) C 21 - C 22	/387. RY*(11) C 18	0.71	3.96	0.123
583. BD*(2) C 21 - C 22	/388. RY*(12) C 18	0.59	2.24	0.084
583. BD*(2) C 21 - C 22	/392. RY*(16) C 18	7.29	0.42	0.128
583. BD*(2) C 21 - C 22	/395. RY*(2) C 19	3.09	0.84	0.117
583. BD*(2) C 21 - C 22	/432. RY*(5) C 21	1.43	0.78	0.077
583. BD*(2) C 21 - C 22	/438. RY*(11) C 21	1.23	0.49	0.057
583. BD*(2) C 21 - C 22	/447. RY*(3) C 22	1.48	0.53	0.065
583. BD*(2) C 21 - C 22	/449. RY*(5) C 22	0.71	1.44	0.074
583. BD*(2) C 21 - C 22	/458. RY*(14) C 22	0.70	0.70	0.051
583. BD*(2) C 21 - C 22	/463. RY*(2) C 23	7.47	0.50	0.141
583. BD*(2) C 21 - C 22	/464. RY*(3) C 23	1.62	0.83	0.085
583. BD*(2) C 21 - C 22	/465. RY*(4) C 23	13.69	0.76	0.236
583. BD*(2) C 21 - C 22	/469. RY*(8) C 23	16.82	0.82	0.273
583. BD*(2) C 21 - C 22	/471. RY*(10) C 23	31.24	0.61	0.320
583. BD*(2) C 21 - C 22	/476. RY*(15) C 23	8.74	1.06	0.223

583. BD*(2) C 21 - C 22 /477. RY*(16) C 23 19.78 1.04 0.332

583. BD*(2) C 21 - C 22 /479. RY*(1) H 24 0.79 0.68 0.053

583. BD*(2) C 21 - C 22 /496. RY*(3) H 27 0.52 1.55 0.066

583. BD*(2) C 21 - C 22 /497. RY*(4) H 27 155.29 0.14 0.341

583. BD*(2) C 21 - C 22 /502. RY*(4) H 28 1.10 1.78 0.103

583. BD*(2) C 21 - C 22 /506. RY*(3) H 29 1.21 2.33 0.123

583. BD*(2) C 21 - C 22 /529. RY*(2) H 34 56.57 0.22 0.261

583. BD*(2) C 21 - C 22 /530. RY*(3) H 34 0.82 1.77 0.088

583. BD*(2) C 21 - C 22 /533. RY*(1) H 35 4.21 0.76 0.131

583. BD*(2) C 21 - C 22 /534. RY*(2) H 35 10.31 0.92 0.226

583. BD*(2) C 21 - C 22 /535. RY*(3) H 35 0.56 1.78 0.073

583. BD*(2) C 21 - C 22 /542. RY*(5) H 36 2.51 1.79 0.155

583. BD*(2) C 21 - C 22 /557. BD*(2) N 8 - C 18 104.30 0.03 0.083

583. BD*(2) C 21 - C 22 /564. BD*(2) C 11 - C 12 0.81 0.05 0.010

583. BD*(2) C 21 - C 22 /572. BD*(1) C 14 - H 27 0.73 0.42 0.040

583. BD*(2) C 21 - C 22 /574. BD*(2) C 15 - C 16 1.86 0.05 0.015

583. BD*(2) C 21 - C 22 /576. BD*(1) C 18 - C 22 0.69 0.55 0.043

583. BD*(2) C 21 - C 22 /586. BD*(1) C 23 - H 34 1.06 3.08 0.131

583. BD*(2) C 21 - C 22 /587. BD*(1) C 23 - H 35 1.26 3.35 0.148

583. BD*(2) C 21 - C 22 /588. BD*(1) C 23 - H 36 2.97 2.72 0.203

Natural Bond Orbitals (Summary):

Principal Delocalizations

NBO Occupancy Energy (geminal,vicinal,remote)

==========

Molecular unit 1 (C15H13N3O4S)

1. BD (1) S 1 - O 2 1.98721 -1.01921 99(g),501(r),573(v),468(r)

194(r),541(r),235(r),466(r)

102(g),589(r),369(r),579(r)

497(r),472(r),470(r),462(r)

493(r),539(r),477(r),584(r)

529(r),585(r),142(r),538(r)

471(r),469(r),237(r),252(r)

98(g),545(g),534(r),101(g)

465(r),231(r),578(r),544(g)

270(r),234(r),565(v),476(r)

200(r),546(g),543(g),551(v)

112(g),373(r),345(v),89(g)

87(g),392(r),370(r)

2. BD (1) S 1 - O 3 1.98501 -1.00440 589(r),545(g),573(v),552(v)

543(g),544(g),546(g),574(v)

3. BD (1) S 1 - N 6 1.97305 -0.78617 573(v),99(g),466(v),468(v)

501(r),235(v),579(r),541(r)

194(r),497(r),102(g),462(v)

369(r),472(v),142(r),477(v)

470(v),529(r),539(r),493(r)

584(r),585(r),589(r),538(r)

471(v),469(v),237(v),98(g)

252(r),578(r),534(r),231(v)

101(g),465(v),234(v),270(r)

130(v),112(v),200(r),373(r)

233(v),476(v),232(v),195(r)

392(r),100(g),533(r),286(r)

267(r),543(g),383(r),544(g)

358(v),395(r),242(r),463(v)

506(r),273(r),199(r),225(v)

348(v),114(v),190(g),230(v)

357(v),268(r),370(r),561(v)

583(r),542(r),191(r),208(r)

198(r),365(r),545(g),88(g)

371(r),546(g),474(v),372(r)

279(r),330(r),560(v),387(r)

260(r),351(v),238(v),245(r)

530(r),265(r),274(r),479(r)

388(r),281(r),299(r),287(r)

95(g),496(r),473(v),216(r)

352(v),253(r),212(r),131(v)

229(v),256(r)

4. BD (1) S 1 - C 16 1.96567 -0.83306 99(g),573(g),466(r),501(r)

468(r),235(r),579(r),194(r)

541(r),497(r),102(g),369(r)

472(r),142(r),462(r),470(r)

493(r),539(r),529(r),471(r)

477(r),538(r),584(r),585(r)

237(r),98(g),469(r),252(r)

465(r),101(g),534(r),578(r)

476(r),231(r),234(r),270(v)

112(v),130(v),200(r),373(r)

463(r),233(r),392(r),195(r)

232(r),533(r),267(v),383(r)

242(r),286(r),100(g),395(r)

358(g),348(g),588(r),370(r)

190(v),589(r),199(r),357(g)

191(r),365(r),114(v),506(r)

273(v),464(r),583(r),208(r)

268(v),198(r),542(r),279(r)

502(r),371(r),387(r),372(r)

230(r),530(r),587(r),127(v)

274(v),388(r),245(r),287(r)

586(r),281(r),479(r),299(r)

474(r),535(r),265(v),496(r)

499(r),256(r),212(r),236(r)

330(v),216(r),238(r),253(r)

451(r),131(v),386(r),571(v)

545(g),251(r),129(v),572(r)

96(g),543(g),95(g),351(g)

352(g),160(r),576(r),239(r)

260(v),368(r),180(v),563(v)

492(r),110(v),385(r),500(r)

382(r),288(r),217(r),338(v)

298(r),326(r),345(g),334(v)

263(v),467(r),417(r),259(v)

536(r),229(r),354(g),483(r)

285(r),241(r),340(v),355(g)

92(g),115(v),319(r),177(v)

108(v),339(v),133(v),528(r)

458(r),318(r),562(v),188(v)

250(r),280(r),128(v),204(r)

255(r),367(r),284(r),266(v)

473(r),87(g),449(r),246(r)

433(r),546(g),147(r),228(r)

197(r),544(g),450(r),438(r)

405(r),575(v),176(v),244(r)

498(r),226(r),300(r),511(r)

140(v),413(r),531(r),478(r)

362(r),537(r),301(r),581(r)

582(r),335(v),125(v),457(r)

227(r),454(r),117(v),580(r)

164(r),240(r),361(r),186(v)

331(v),396(r),332(v),124(v)

174(v),509(r),116(v),271(v)

309(r),475(r),261(v),504(r)

113(v),389(r),89(g),214(r)

302(r),196(r),455(r),303(r)

305(r),427(r),323(r),88(g)

447(r),257(r),192(r),380(r)

122(v),505(r),202(r),551(v)

5. BD (1) O 4 - C 17 1.98947 -4.62828 472(r),470(r),369(g),493(r)

539(r),538(r),584(r),194(v)

102(r),585(r),468(r),501(r)

541(r),99(r),497(r),235(v)

477(r),573(r),466(r),237(v)

471(r),579(r),529(r),469(r)

462(r),98(r),142(g),465(r)

534(r),252(r),476(r),234(v)

101(r),231(v),270(r),373(g)

190(r),233(v),200(v),112(r)

588(r),130(r),232(v),463(r)

578(r),370(g),267(r),533(r)

542(r),195(v),199(v),392(r)

383(r),286(r),348(r),358(r)

242(r),100(r),395(r),357(r)

587(r),268(r),506(r),273(r)

114(r),365(g),191(v),387(r)

586(r),198(v),502(r),372(g)

371(g),464(r),208(r),530(r)

274(r),127(r),279(r),388(r)

230(v),330(r),474(r),265(r)

299(r),216(r),241(v),583(r)

535(r),256(r),131(r),287(r)

236(v),496(r),212(r),245(r)

238(v),281(r),386(r),239(v)

253(r),251(r),451(r),479(r)

260(r),352(r),340(r),285(r)

129(r),351(r),95(r),492(r)

110(r),385(r),368(g),180(r)

298(r),483(r),334(r),288(r)

467(r),229(v),354(r),96(r)

160(r),417(r),133(r),263(r)

536(r),576(r),382(r),188(r)

92(r),500(r),326(r),572(r)

217(r),528(r),499(r),498(r)

87(r),478(r),88(r),204(v)

280(r),355(r),345(r),339(r)

338(r),228(v),367(g),240(v)

255(r),197(v),449(r),475(r)

177(r),244(r),250(r),266(r)

284(r),318(r),124(r),140(r)

147(g),319(r),537(r),531(r)

473(r),511(r),458(r),433(r)

226(v),246(r),186(r),115(r)

300(r),509(r),454(r),109(r)

450(r),405(r),362(g),164(r)

457(r),301(r),327(r),117(r)

128(r),108(r),389(r),272(r)

116(r),113(r),582(r),396(r)

438(r),122(r),227(v),581(r)

507(r),331(r),413(r),305(r)

176(r),302(r),427(r),202(v)

309(r),296(r),261(r),196(v)

380(r),580(r),214(r),455(r)

258(r),323(r),264(r),335(r)

337(r),215(r),90(r),437(r)

508(r),347(r),356(r),162(r)

504(r),103(r),183(r),135(r)

89(r),346(r),505(r),361(g)

447(r),125(r),379(r),257(r)

163(r),562(r),402(r),421(r)

303(r),551(v),532(r),278(r)

145(g),440(r),482(r),132(r)

97(r),262(r),192(v),484(r)

282(r),271(r),123(r),375(g)

292(r),481(r),283(r),574(r)

316(r),213(r),295(r),485(r)

168(r),201(v),320(r),491(r)

415(r),452(r),431(r),517(r)

139(r),426(r),461(r),314(r)

304(r),181(r),211(r),353(r)

249(r),409(r),106(r),589(r)

363(g),516(r),141(r),403(r)

159(r),397(r),321(r),408(r)

480(r),414(r),575(r),435(r)

332(r),221(r),545(r),439(r)

175(r),349(r),494(r),148(g)

193(v),420(r),488(r),571(r)

543(r),171(r),121(r),564(r)

398(r),325(r),376(g),446(r)

136(r),432(r),137(r),178(r)

407(r),503(r),390(r),185(r)

205(v),158(r),225(v),577(r)

336(r),418(r),400(r),174(r)

453(r),247(r),111(r),254(r)

182(r),544(r),448(r),441(r)

207(v),203(v),360(r),146(g)

394(r),374(g),308(r),269(r)

291(r),428(r),107(r),218(r)

210(r),328(r),155(g),555(v)

540(r),276(r),377(r),167(r)

341(r),406(r),445(r),412(r)

306(r),434(r),277(r),399(r)

6. BD (2) O 4 - C 17 1.98199 -0.84733 99(r),573(r),466(r),468(r)

501(r),235(v),579(r),194(v)

541(r),497(r),102(r),369(g)

472(r),142(g),470(r),462(r)

493(r),539(r),538(r),471(r)

584(r),529(r),585(r),477(r)

237(v),98(r),469(r),252(r)

465(r),101(r),534(r),578(r)

476(r),234(v),231(v),270(r)

112(r),200(v),130(r),373(g)

463(r),233(v),392(r),195(v)

232(v),533(r),383(r),286(r)

267(r),100(r),242(r),588(r)

395(r),348(r),358(r),542(r)

370(g),199(v),190(r),589(r)

365(g),357(r),191(v),273(r)

114(r),268(r),506(r),583(r)

208(r),587(r),198(v),464(r)

502(r),127(r),279(r),371(g)

586(r),387(r),530(r),372(g)

330(r),230(v),274(r),388(r)

265(r),299(r),281(r),479(r)

535(r),474(r),131(r),496(r)

245(r),287(r),212(r),216(r)

236(v),256(r),251(r),253(r)

451(r),238(v),386(r),260(r)

129(r),110(r),95(r),576(r)

368(g),352(r),239(v),351(r)

572(r),334(r),298(r),96(r)

160(r),180(r),340(r),467(r)

288(r),492(r),217(r),385(r)

285(r),88(r),263(r),87(r)

382(r),499(r),229(v),241(v)

417(r),536(r),92(r),483(r)

528(r),338(r),280(r),326(r)

500(r),354(r),345(r),133(r)

177(r),339(r),498(r),458(r)

197(v),478(r),188(r),204(v)

449(r),319(r),266(r),228(v)

255(r),367(g),226(v),433(r)

509(r),250(r),109(r),147(g)

246(r),450(r),318(r),244(r)

128(r),355(r),438(r),405(r)

115(r),473(r),531(r),581(r)

582(r),511(r),284(r),227(v)

413(r),327(r),537(r),240(v)

362(g),140(r),164(r),300(r)

113(r),108(r),176(r),457(r)

454(r),124(r),301(r),580(r)

186(r),361(g),396(r),331(r)

261(r),117(r),296(r),214(r)

116(r),196(v),305(r),122(r)

504(r),562(r),389(r),475(r)

455(r),302(r),427(r),309(r)

90(r),264(r),272(r),323(r)

380(r),346(r),574(r),347(r)

507(r),89(r),303(r),215(r)

356(r),402(r),437(r),447(r)

163(r),258(r),278(r),162(r)

337(r),505(r),202(v),379(r)

192(v),125(r),508(r),484(r)

560(v),262(r),183(r),97(r)

132(r),426(r),335(r),145(g)

421(r),295(r),282(r),548(g)

564(r),225(v),545(r),482(r)

213(r),440(r),316(r),415(r)

431(r),532(r),314(r),481(r)

175(r),575(r),135(r),491(r)

485(r),257(r),403(r),320(r)

271(r),353(r),543(r),292(r)

283(r),123(r),452(r),159(r)

517(r),414(r),249(r),181(r)

461(r),332(r),363(g),158(r)

201(v),494(r),571(r),139(r)

103(r),446(r),211(r),408(r)

349(r),397(r),516(r),304(r)

551(v),398(r),409(r),168(r)

375(g),432(r),178(r),148(g)

544(r),321(r),577(r),592(r)

591(r)

7. BD (1) O 5 - C 10 1.99073 -0.94995 589(r),99(r),551(v),565(v)

559(g),592(r),591(r),242(g)

562(g),260(v),237(v),590(r)

8. BD (1) O 5 - H 33 1.98301 -0.73084 589(r),573(r),562(v),242(v)

244(v),590(r),246(v),591(r)

592(r)

9. BD (1) N 6 - C 9 1.98054 -0.80492 573(r),99(v),466(v),235(g)

501(r),468(v),579(r),541(r)

194(r),497(r),102(v),369(v)

472(v),142(r),477(v),470(v)

493(r),539(r),529(r),584(r)

585(r),462(v),538(r),471(v)

469(v),98(v),237(g),589(r)

252(v),465(v),101(v),534(r)

578(r),231(g),270(r),234(g)

373(v),463(v),112(r),476(v)

130(r),200(r),232(g),233(g)

195(r),392(r),286(r),267(r)

370(v),100(v),383(r),533(r)

358(r),395(r),348(r),242(v)

365(v),506(r),199(r),191(r)

357(r),273(r),268(r),190(g)

114(r),583(r),588(v),208(r)

198(r),279(r),127(r),230(g)

549(v),330(r),474(v),244(v)

387(r),530(r),274(r),238(g)

502(r),251(v),95(v),299(r)

559(g),372(v),281(r),388(r)

265(r),256(v),464(v),496(r)

212(r),547(v),371(v),216(r)

287(r),110(r),245(v),368(v)

241(g),352(r),131(r),88(v)

386(r),451(r),535(r),479(r)

473(v),160(r),255(v),340(r)

334(r),239(g),298(r),572(r)

351(r),536(r),236(g),129(r)

576(r),288(r),226(g),492(r)

217(r),385(r),285(r),253(v)

263(r),499(r),382(r),417(r)

225(g),326(r),229(g),500(r)

354(r),361(v),483(r),542(r)

338(r),345(r),260(r),266(r)

96(v),228(g),528(r),188(g)

543(v),458(r),339(r),133(r)

280(r),592(r),590(r)

10. BD (1) N 6 - C 23 1.98132 -0.58298 466(g),579(r),589(r),235(v)

573(r),99(v),501(r),541(v)

468(g),497(r),142(r),194(r)

462(g),369(r),472(g),102(v)

529(v),471(g),539(v),477(g)

470(g),493(r),584(r),585(r)

98(v),237(v),469(g),538(v)

578(r),252(r),534(v),101(v)

588(g),231(v),234(v),270(r)

465(g),463(g),112(r),130(r)

476(g),200(r),373(r),392(r)

232(v),100(v),233(v),195(r)

242(r),286(r),267(r),383(r)

395(r),348(r),358(r),365(r)

370(r),533(v),199(r),191(r)

591(r),583(r),506(r),357(r)

114(r),273(r),268(r),208(r)

464(g),190(g),198(r),592(r)

127(r),530(v),226(v),330(r)

92(v),279(r),560(v),371(r)

502(r),230(v),387(r),372(r)

590(r),274(r),535(v),265(r)

281(r),388(r),299(r),251(r)

88(v),131(r),245(r),540(v)

496(r),212(r),287(r),129(r)

238(v),216(r),368(r),260(r)

451(r),475(g),572(r),544(v)

474(g),256(r),386(r),334(r)

298(r),253(r),352(r),96(v)

236(v),536(v),340(r),351(r)

160(r),110(r),95(v),479(r)

217(r),288(r),90(v),492(r)

285(r),246(r),263(r),382(r)

326(r),128(r),385(r),483(r)

511(r),499(r),551(g),417(r)

280(r),354(r),338(r),327(r)

576(r),228(v),188(g),367(r)

250(r),559(v),473(g),339(r)

458(r)

11. BD (1) N 7 - C 17 1.98778 -1.02591 99(r),468(r),501(r),573(r)

194(g),466(r),235(v),541(r)

102(r),369(g),579(r),472(r)

497(r),470(r),493(r),539(r)

538(r),462(r),142(v),584(r)

585(r),471(r),529(r),477(r)

237(v),98(r),469(r),252(r)

465(r),101(r),534(r),476(r)

578(r),234(v),231(v),270(r)

200(g),112(r),130(r),233(v)

373(g),463(r),392(v),232(v)

195(g),533(r),267(r),286(r)

100(r),242(r),383(v),542(r)

588(r),348(r),358(r),395(r)

190(r),199(g),370(g),365(g)

191(g),357(r),114(r),273(r)

268(r),587(r),586(r),208(r)

506(r),464(r),583(r),502(r)

198(g),371(g),127(r),279(r)

387(v),372(g),388(v),530(r)

330(r),230(v),274(r),236(v)

535(r),265(r),299(r),281(r)

131(r),287(r),496(r),216(r)

386(v),576(v),474(r),251(r)

253(r),451(r),245(r),212(r)

260(r),239(v),479(v),129(r)

256(r),110(r),95(r),352(r)

238(v),351(r),180(r),368(g)

298(r),334(r),572(r),340(r)

96(r),492(r),288(r),160(r)

285(r),229(v),467(r),217(r)

263(r),87(r),88(r),499(r)

417(r),92(r),509(r),528(r)

280(r),354(r),500(r),326(r)

536(r),338(r),133(r),478(r)

498(r),382(v),385(v),188(r)

345(r),244(r),483(v),339(r)

228(v),241(v),458(r),246(r)

255(r),227(v),319(r),449(r)

266(r),197(g),147(v),554(g)

204(g),109(r),355(r),318(r)

405(r),581(r),367(g),450(r)

128(r),531(r),433(r),115(r)

250(r),284(r),438(r),582(r)

547(g),177(r),164(r),362(g)

537(r),511(r),559(v),186(r)

580(r),140(r),413(r),561(g)

327(r),300(r),454(r),108(r)

473(r),377(v),457(r),124(r)

226(v),301(r),113(r),240(v)

363(g),396(r),331(r),214(r)

507(r),196(g),117(r),296(r)

176(r),261(r),562(r),556(v)

305(r),116(r),475(r),122(r)

302(r),90(r),508(r),427(r)

309(r),202(g),323(r),447(r)

346(r),504(r),272(r),258(r)

379(v),455(r),264(r),574(r)

192(g),347(r),89(r),356(r)

303(r),481(v),337(r),378(v)

125(r),278(r),225(v),437(r)

402(r),361(g),551(v)

12. BD (1) N 7 - C 18 1.98720 -1.13235 99(r),468(r),501(r),194(g)

573(r),541(r),102(r),235(r)

466(r),369(v),472(r),579(r)

497(r),470(r),493(r),539(r)

538(r),584(r),585(v),471(r)

462(r),142(r),529(r),477(r)

237(r),98(r),469(r),465(r)

252(r),101(r),534(r),476(r)

578(r),231(r),234(r),270(r)

200(g),112(r),130(r),373(v)

233(r),463(r),392(g),232(r)

195(g),533(r),267(r),383(g)

286(r),542(r),100(r),242(r)

588(r),370(v),348(r),395(r)

358(r),190(r),365(v),199(g)

587(r),357(r),586(r),191(g)

273(r),114(r),268(r),506(r)

464(r),502(r),583(v),198(g)

127(r),279(r),208(v),371(v)

387(g),530(r),230(r),330(r)

274(r),576(g),372(v),388(g)

535(r),265(r),299(r),479(v)

212(v),281(r),245(r),131(r)

386(g),287(r),496(r),256(r)

474(r),216(v),238(r),451(v)

251(r),236(r),260(r),253(r)

129(r),110(r),95(r),239(r)

352(r),368(v),180(r),351(r)

298(r),160(r),334(r),582(v)

96(r),467(r),572(r),241(r)

340(r),492(r),385(g),288(r)

285(r),263(r),88(r),499(r)

217(v),509(r),87(r),229(r)

417(r),92(r),528(r),382(g)

536(r),354(r),478(r),500(r)

338(r),326(r),280(r),133(r)

345(r),483(v),498(r),226(r)

177(r),367(v),339(r),228(r)

188(r),197(g),458(v),449(v)

255(r),319(r),147(r),204(g)

266(r),433(r),355(r),246(r)

250(r),318(r),244(r),531(r)

581(r),109(r),115(r),240(r)

284(r),580(r),454(v),405(r)

128(r),438(r),537(r),511(r)

140(r),362(v),300(r),413(r)

186(r),327(r),176(r),113(r)

558(v),164(r),457(v),507(r)

124(r),450(v),108(r),301(r)

473(r),396(r),331(r),196(g)

389(g),561(v),455(v),117(r)

225(r),261(r),427(r),116(r)

508(r),122(r),296(r),305(r)

475(r),504(r),562(r),380(g)

302(r),272(r),215(v),309(r)

202(g),227(r),323(r),347(r)

90(r),264(r),482(v),447(v)

402(r),574(r),437(r),356(r)

89(r),346(r),303(r),553(g)

162(r),278(r),337(r),257(r)

145(r),163(r),192(g),258(r)

125(r),213(v),445(v),97(r)

379(g),183(r),262(r),132(r)

335(r),484(r),415(r),426(r)

214(v),505(r),282(r),481(v)

295(r),431(r),135(r),201(g)

316(r),421(r),446(v),314(r)

175(r),283(r),491(r),403(r)

453(v),181(r),414(r),517(r)

564(r),440(r),320(r),123(r)

292(r),271(r),485(r),103(r)

353(r)

13. BD (1) N 7 - H 24 1.97966 -0.67215 573(r),466(r),579(r),99(r)

235(r),501(r),468(r),497(r)

194(g),369(v),142(r),541(r)

462(r),102(r),472(r),547(v)

471(r),470(r),576(v),529(r)

493(r),477(r),539(r),585(r)

538(r),584(r),98(r),237(r)

469(r),252(r),534(r),578(r)

465(r),101(r),476(r),234(r)

231(r),270(r),363(v),112(r)

200(g),463(r),130(r),232(r)

233(r),242(r),377(v),380(v)

364(v),395(r),556(v),100(r)

286(r),392(v),387(v),267(r)

533(r),589(r),199(g),348(r)

208(r),370(v),195(g),358(r)

14. BD (1) N 8 - C 18 1.98207 -0.84090 579(v),395(v),576(g),553(v)

558(g),191(v),446(v),589(r)

15. BD (2) N 8 - C 18 1.71299 -0.31866 578(v),583(v),142(r),396(v)

193(v),235(r),589(r)

16. BD (1) N 8 - C 19 1.98459 -0.86711 99(r),573(r),466(r),468(r)

501(r),235(r),194(r),579(g)

541(r),102(r),497(r),369(r)

472(r),142(r),470(r),462(r)

493(r),539(r),471(r),538(r)

584(r),529(r),585(r),477(r)

237(r),98(r),469(r),252(r)

465(r),101(r),534(r),578(g)

476(r),231(r),234(r),270(r)

200(r),112(r),130(r),373(r)

463(r),233(r),392(v),195(r)

232(r),533(r),267(r),286(r)

100(r),242(r),588(r),383(v)

348(r),370(r),542(r),358(r)

190(r),506(v),365(r),395(g)

357(r),199(r),273(r),114(r)

268(r),554(v),198(r),583(r)

586(r),464(r),388(v),208(g)

191(r),502(r),587(r),378(v)

127(r),279(r),230(r),530(r)

330(r),387(v),371(r),372(r)

212(g),274(r),576(v),589(r)

265(r),299(r),535(r),281(r)

216(g),556(g),131(r),474(r)

496(r),287(r),245(r),577(g)

236(r),386(v),256(r),253(r)

238(r),260(r),251(r),368(r)

110(r),129(r),95(r),479(r)

180(r),239(r),412(v),352(r)

451(r),351(r),572(r),298(r)

96(r),160(r),334(r),340(r)

288(r),492(r),217(g),377(v)

509(r),285(r),417(v),467(r)

263(r),88(r),87(r),499(r)

92(r),528(r),536(r),241(r)

280(r),229(r),483(r),338(r)

326(r),500(r),226(r),354(r)

17. BD (1) C 9 - C 10 1.97764 -0.89522 99(r),573(r),468(r),501(r)

466(r),235(g),194(r),579(r)

541(r),102(r),369(v),497(r)

472(r),470(r),142(r),462(r)

493(r),539(r),584(r),538(r)

585(r),529(r),477(r),471(r)

469(r),98(r),237(g),252(g)

465(r),101(r),534(r),578(r)

476(r),231(g),234(g),270(v)

112(r),200(r),130(r),463(r)

373(v),233(g),392(r),232(g)

195(r),286(r),383(r),533(r)

267(v),370(v),100(r),348(r)

395(r),358(r),365(v),242(g)

199(r),588(r),190(v),273(v)

357(r),268(v),191(r),114(r)

506(r),208(r),583(r),464(r)

198(r),279(r),502(r),127(r)

387(r),230(g),330(r),530(r)

274(v),542(r),371(v),388(r)

586(r),562(g),265(v),474(r)

245(g),281(r),479(r),299(r)

372(v),287(r),238(g),496(r)

535(r),587(r),212(r),251(g)

131(r),216(r),451(r),160(v)

110(r),368(v),241(g),236(g)

95(r),253(g),386(r),239(g)

129(r),298(r),96(r),334(r)

576(r),340(r),256(g),352(r)

572(r),351(r),382(r),492(r)

229(g),88(r),385(r),499(r)

263(v),217(r),288(r),180(v)

228(g),87(r),536(r),417(r)

244(g),326(r),467(r),483(r)

500(r),367(v),280(r),285(r)

528(r),338(r),553(v),561(g)

354(r),133(r),345(r),473(r)

563(v),458(r),188(v),339(r)

226(g),204(r),284(r),227(g)

449(r),176(v),92(r),319(r)

246(g),109(r),147(r),433(r)

240(g),250(g),318(r),498(r)

115(r),405(r),266(v),438(r)

537(r),450(r),255(g),355(r)

108(r),531(r),300(r),413(r)

581(r),511(r),140(r),580(r)

128(r),582(r),197(r),113(r)

457(r),454(r),264(v),362(v)

478(r),124(r),301(r),327(r)

331(r),549(g),396(r),177(v)

90(r),164(v),475(r),117(r)

347(r),296(r),261(v),186(v)

116(r),504(r),122(r),346(r)

174(v),389(r),302(r),551(g)

97(r),505(r),427(r),214(r)

509(r),305(r),455(r),309(r)

323(r),162(v),356(r),303(r)

447(r),196(r),380(r),564(v)

202(r),552(v),402(r),89(r)

181(v),437(r),258(g),574(r)

589(r)

18. BD (2) C 9 - C 10 1.80574 -0.48973 235(g),579(r),466(r),573(r)

142(r),99(r),497(r),468(r)

501(r),462(r),194(r),541(r)

529(r),369(v),102(r),472(r)

471(r),477(r),470(r),578(r)

493(r),539(r),98(r),538(r)

584(r),585(r),469(r),237(g)

252(g),465(r),101(r),534(r)

476(r),234(g),231(g),270(v)

112(r),130(r),463(r),200(r)

373(v),392(r),195(r),233(g)

232(g),533(r),383(r),286(r)

100(r),267(v),242(g),395(r)

348(r),358(r),588(r),583(r)

370(v),191(r),199(r),357(r)

190(v),273(v),114(r),268(v)

208(r),506(r),464(r),365(v)

542(r),198(r),127(r),502(r)

279(r),548(v),230(g),371(v)

330(r),265(v),387(r),530(r)

586(r),372(v),564(v),274(v)

388(r),479(r),299(r),587(r)

281(r),535(r),474(r),496(r)

131(r),212(r),287(r),245(g)

251(g),216(r),253(g),451(r)

236(g),572(r),260(v),110(r)

238(g),589(r),129(r),95(r)

256(g),180(v),576(r),386(r)

351(r),368(v),298(r),160(v)

334(r),96(r),87(r),352(r)

340(r),288(r),88(r),239(g)

217(r),492(r),499(r),382(r)

177(v),385(r),285(r),338(r)

280(r),417(r),92(r),229(g)

536(r),263(v),246(g),528(r)

483(r),467(r),500(r),326(r)

241(g),354(r),226(g),552(v)

133(r),362(v),545(v),261(v)

458(r),339(r),228(g),128(r)

345(r),581(r),109(r),319(r)

158(v),449(r),433(r),438(r)

473(r),266(v),147(r),204(r)

255(g),498(r),405(r),227(g)

450(r),197(r),115(r),413(r)

580(r),250(g),318(r),244(g)

367(v),355(r),188(v),582(r)

478(r),327(r),511(r),537(r)

108(r),509(r),113(r),284(r)

531(r),457(r),543(r),300(r)

560(g),361(v),454(r),140(r)

240(g),301(r),396(r),331(r)

296(r),574(r),90(r),186(v)

124(r),562(g),504(r),89(r)

117(r),176(v),475(r),214(r)

303(r),164(v),305(r),122(r)

116(r),455(r),309(r),447(r)

356(r),427(r),302(r),323(r)

389(r),347(r),196(r),272(v)

380(r),346(r),402(r),215(r)

192(r),505(r),437(r),278(r)

337(r),484(r),426(r),540(r)

258(g),202(r),125(r),132(r)

282(r),379(r),264(v),174(v)

295(r),145(r),421(r),162(v)

159(v),175(v),507(r),335(r)

19. BD (1) C 9 - C 17 1.97202 -0.71326 573(r),466(r),99(r),235(g)

579(r),501(r),468(r),194(v)

497(r),541(r),142(v),102(r)

369(g),472(r),462(r),477(r)

470(r),529(r),493(r),539(r)

585(r),584(r),471(r),538(r)

589(r),98(r),469(r),534(r)

578(r),252(v),465(r),101(r)

237(g),195(v),554(v),562(v)

270(r),231(g),476(r),463(r)

373(g),112(r),559(g),234(g)

233(g),130(r),191(v),200(v)

232(g),392(r),100(r),545(v)

547(g),245(v),286(r),358(r)

395(r),533(r),348(r),365(g)

383(r),553(g),267(r),199(v)

268(r),506(r),273(r),371(g)

357(r),192(v),114(r),551(g)

583(r),190(v),208(r),372(g)

370(g),464(r),230(g),174(v)

576(r),143(v),552(v),279(r)

20. BD (1) C 10 - C 11 1.97141 -0.70413 573(v),466(r),99(r),579(r)

235(v),501(r),468(r),541(r)

497(r),194(r),102(r),142(r)

462(r),472(r),369(r),237(v)

477(r),470(r),529(r),589(r)

493(r),539(r),584(r),471(r)

585(r),538(r),252(g),469(r)

559(g),98(r),578(r),565(g)

563(g),561(v),534(r),465(r)

101(r),270(g),550(v),566(v)

373(r),276(v),344(v),234(v)

200(r),112(r),463(r),476(r)

231(v),233(v),130(r),195(r)

392(r),242(g),100(r),268(g)

225(v),273(g),236(v),533(r)

383(r),232(v),286(v),395(r)

358(v),357(v),506(r),226(v)

330(r),348(v),372(r)

21. BD (1) C 11 - C 12 1.96928 -0.72484 573(v),589(r),565(g),546(v)

562(g),566(g),570(v),466(r)

235(r),559(v),294(v),242(v)

579(r),293(v),567(g),99(r)

501(r),468(r),194(r),344(v)

541(r),345(v)

22. BD (2) C 11 - C 12 1.61624 -0.53502 579(r),466(r),235(r),573(v)

99(r),142(r),468(r),501(r)

497(r),462(r),194(r),369(r)

541(r),102(r),472(r),529(r)

471(r),477(r),470(r),493(r)

539(r),538(r),584(r),585(r)

98(r),578(r),469(r),237(r)

252(v),465(r),101(r),534(r)

476(r),231(r),234(r),270(g)

589(r),112(r),130(r),200(r)

463(r),373(r),392(r),233(r)

195(r),533(r),232(r),383(r)

100(r),286(g),267(g),242(v)

348(v),542(r),395(r),358(v)

588(r),370(r),365(r),583(r)

191(r),199(r),190(r),357(v)

273(g),114(r),268(g),208(r)

506(r),464(r),198(r),586(r)

587(r),502(r),127(r),574(v)

371(r),330(r),230(r),279(g)

387(r),281(g),530(r),372(r)

388(r),274(g),265(g),479(r)

299(v),535(r),474(r),496(r)

131(r),212(r),245(v),287(g)

569(v),560(v),236(r),451(r)

216(r),576(r),256(v),351(v)

238(r),572(r),251(v),253(v)

110(r),129(r),386(r),260(g)

95(r),368(r),96(r),160(r)

334(r),180(r),352(v),239(r)

263(g),298(v),246(v),88(r)

340(r),467(r),217(r),492(r)

499(r),382(r),385(r),288(g)

87(r),285(g),417(r),92(r)

338(r),280(g),229(r),528(r)

536(r),483(r),241(r),326(r)

500(r),226(r),354(v),261(g)

133(r),458(r),339(r),228(r)

509(r),177(r),498(r),319(r)

581(r),255(v),449(r),109(r)

204(r),478(r),433(r),147(r)

244(v),438(r),188(r),266(g)

367(r),128(r),405(r),250(v)

582(r),345(v),450(r),197(r)

115(r),473(r),413(r),318(r)

355(v),511(r),580(r),531(r)

537(r),327(r),362(r),296(v)

108(r),113(r),176(r),164(r)

457(r),240(r),284(g),140(r)

300(v),303(v),227(r),454(r)

361(r),396(r),186(r),301(v)

124(r),347(v),278(g),331(r)

562(g),504(r),117(r),214(r)

447(r),305(v),89(r),122(r)

116(r),389(r),455(r),196(r)

427(r),309(v),90(r),302(v)

380(r),323(r),564(g),272(g)

475(r),545(r),507(r),349(v)

402(r),264(g),202(r),297(v)

192(r),215(r),437(r),356(v)

337(r),426(r),505(r),163(r)

162(r),258(v),484(v),97(r)

125(r),132(r),379(r),183(r)

145(r),353(v),421(r),508(r)

282(g),491(r),335(r),213(r)

403(r),415(r),543(r),431(r)

544(r),482(r),158(r),440(r)

481(r),314(r),551(r),316(r)

592(r)

23. BD (1) C 11 - C 16 1.96940 -1.52332 468(r),501(r),194(r),541(r)

102(v),369(r),99(v),472(r)

573(g),470(r),235(r),466(r)

493(r),539(r),497(r),538(r)

584(r),585(r),579(r),477(r)

471(r),462(r),529(r),142(r)

237(r),469(r),98(v),465(r)

252(v),534(r),101(v),476(r)

234(r),231(r),270(g),578(r)

373(r),200(r),233(r),112(r)

130(r),463(r),232(r),392(r)

195(r),242(v),533(r),267(g)

383(r),286(v),190(r),100(v)

588(r),348(g),358(g),370(r)

395(r),199(r),357(g),114(r)

268(g),365(r),273(g),542(r)

506(r),191(r),464(r),208(r)

198(r),387(r),371(r),502(r)

583(r),279(v),587(r),372(r)

586(r),127(r),530(r),230(r)

274(g),388(r),330(v),265(g)

474(r),299(r),281(v),287(v)

535(r),256(v),216(r),496(r)

131(r),212(r),236(r),253(v)

260(g),479(r),245(v),238(r)

386(r),451(r),110(r),251(v)

239(r),352(g),340(v),129(r)

95(v),96(v),368(r),351(g)

298(r),576(r),492(r),160(r)

385(r),180(r),285(v),288(v)

572(r),589(r),334(v),241(r)

382(r),354(g),88(v),229(r)

217(r),483(r),467(r),417(r)

263(g),87(v),536(r),338(v)

345(g),326(r),499(r),280(v)

327(v),133(r),500(r),528(r)

339(v),188(r),250(v),228(r)

204(r),92(v),266(g),473(r)

498(r),355(g),458(r),449(r)

367(r),246(v),226(r),255(v)

147(r),319(r),109(r),197(r)

433(r),177(r),318(r),537(r)

115(r),300(r),450(r),405(r)

478(r),531(r),140(r),511(r)

362(r),438(r),240(r),108(r)

454(r),124(r),581(r),128(r)

457(r),272(g),413(r),176(r)

582(r),113(r),164(r),509(r)

475(r),580(r),186(r),361(r)

301(r),396(r),284(v),117(r)

261(g),347(g),122(r),244(v)

116(r),331(v),389(r),296(r)

227(r),305(r),302(r),427(r)

214(r),90(v),504(r),196(r)

309(r),380(r),455(r),337(v)

202(r),323(r),264(g),283(v)

505(r),447(r),215(r),563(g)

162(r),437(r),89(v),303(r)

402(r),356(g),125(r),346(g)

258(v),282(v),257(v),192(r)

328(v),183(r),379(r),103(v)

335(v),421(r),278(v),163(r)

507(r),145(r),316(r),132(r)

482(r),249(v),567(v),295(r)

426(r),485(r),314(r),292(v)

574(g),440(r),532(r),545(v)

549(v),213(r),135(r),484(r)

481(r),431(r),415(r),491(r)

336(v),320(r),452(r),123(r)

517(r),403(r),363(r),262(g)

461(r),201(r),225(r),446(r)

375(r),168(r),508(r),175(r)

414(r),211(r),159(r),304(r)

139(r),571(v),397(r),516(r)

178(r),408(r),409(r),564(g)

193(r),494(r),271(g),480(r)

349(g),148(r),254(v),540(r)

247(v),174(r),398(r),544(v)

321(r),158(r),221(r),435(r)

551(r),432(r),488(r),332(v)

439(r),353(g),97(v),181(r)

121(r),420(r),269(g),577(r)

325(r),171(r),376(r),107(v)

590(r),592(r),591(r)

24. BD (1) C 12 - C 13 1.97968 -2.08068 194(r),541(r),102(r),468(r)

501(r),369(r),472(r),470(r)

99(r),493(v),539(r),538(r)

584(r),585(r),235(r),573(r)

497(r),466(r),477(r),579(r)

471(r),237(r),529(r),462(r)

469(r),142(r),98(r),465(r)

252(r),534(r),101(r),476(r)

234(r),231(r),270(v),373(r)

233(r),200(r),578(r),112(r)

130(r),463(r),232(r),190(r)

267(v),195(r),392(r),533(r)

286(g),383(r),588(r),242(r)

370(r),100(r),348(r),358(r)

199(r),395(r),542(r),357(r)

268(v),273(v),114(r),365(r)

506(r),191(r),198(r),586(r)

587(r),464(r),208(r),502(r)

387(r),371(r),372(r),127(r)

279(g),530(r),583(r),274(v)

230(r),388(r),330(r),474(r)

299(g),265(v),535(r),216(r)

287(g),131(r),496(r),236(r)

281(g),212(r),256(r),238(r)

245(r),479(r),253(r),386(r)

451(r),251(r),239(r),352(r)

110(r),129(r),95(r),340(r)

351(r),368(r),241(r),492(v)

285(g),180(r),298(g),260(v)

385(r),334(r),96(r),288(g)

576(r),160(r),263(v),467(r)

382(r),229(r),483(r),417(r)

499(r),217(r),536(r),92(r)

354(r),88(r),87(r),500(r)

280(g),133(r),326(v),528(r)

338(r),345(r),188(r),204(r)

498(r),339(r),228(r),226(r)

266(v),473(r),367(r),284(g)

318(v),572(v),449(r),255(r)

250(r),355(r),458(r),319(v)

177(r),147(r),478(r),246(r)

197(r),537(r),433(r),109(r)

115(r),140(r),240(r),244(r)

531(r),450(r),405(r),511(r)

124(r),327(r),509(r),454(r)

362(r),128(r),589(r),457(r)

438(r),164(r),301(g),475(r)

108(r),581(r),186(r),300(g)

582(r),113(r),413(r),227(r)

117(r),176(r),396(r),580(r)

305(g),331(r),361(r),116(r)

122(r),389(r),302(g),264(v)

427(r),214(r),272(v),309(g)

380(r),202(r),455(r),296(g)

196(r),504(r),356(r),347(r)

323(v),90(r),258(r),337(r)

261(v),215(r),505(r),346(r)

437(r),162(r),447(r),89(r)

507(r),335(r),278(g),402(r)

303(g),125(r),183(r),192(r)

379(r),163(r),271(v),421(r)

282(g),132(r),97(r),145(r)

135(r),482(r),103(r),532(r)

440(r),262(v),213(r),316(v)

426(r),481(r),295(g),574(r)

484(v),491(v),314(v),431(r)

415(r),508(r),568(g),123(r)

452(r),517(r),494(r),353(r)

563(g),201(r),461(r),175(r)

320(v),225(r),168(r),363(r)

403(r),292(g),139(r),304(g)

257(r),375(r),211(r),159(r)

249(r),332(r),446(r),488(v)

349(r),409(r),516(r),283(g)

397(r),414(r),408(r),181(r)

545(r),551(r),564(g),193(r)

325(v),485(v),480(r),148(r)

435(r),321(v),221(r),398(r)

543(r),571(v),575(r),439(r)

311(v),106(r),178(r),432(r)

420(r),376(r),540(r),308(g)

171(r),121(r),247(r),567(g)

141(r),336(r),111(r),577(r)

277(g),158(r),407(r),544(r)

448(r),276(g),185(r),205(r)

503(r),136(r),137(r),360(r)

146(r),390(r),174(r),418(r)

400(r),394(r),317(v),441(r)

453(r),182(r),428(r),592(r)

25. BD (1) C 12 - H 25 1.97772 -0.54524 589(r),579(r),466(r),235(r)

573(r),99(r),142(r),468(r)

501(r),497(r),194(r),462(r)

541(r),102(r),369(r),472(r)

529(r),471(r),477(r),470(r)

493(r),539(r),538(r),584(r)

585(r),98(r),237(r),578(r)

469(r),252(r),565(v),101(r)

465(r),534(r),568(v),591(r)

592(r),476(r),231(r),270(v)

234(r),200(r),112(r),130(r)

373(r),463(r),392(r),233(r)

232(r),242(r),195(r),533(r)

383(r),259(v),100(r),273(v)

293(v),395(r),348(r),298(v)

590(r),542(r),260(v),299(v)

365(r),370(r),358(r),583(r)

199(r),190(r),330(r),191(r)

588(r),566(g),286(g),268(v)

114(r),357(r),265(v),563(g)

208(r),506(r),464(r),570(v)

198(r)

26. BD (1) C 13 - C 14 1.98022 -0.72899 567(v),566(g),571(g),575(v)

328(v),277(v),589(r),572(g)

570(g),276(v),327(v)

27. BD (2) C 13 - C 14 1.63036 -0.28066 574(v),564(v),589(r),278(v)

281(v),331(v),578(r),142(r)

28. BD (1) C 13 - H 26 1.97992 -0.54429 579(r),563(v),571(v),466(r)

589(r),235(r),573(r),276(v)

310(v),566(g),497(r),99(r)

568(g)

29. BD (1) C 14 - C 15 1.97550 -0.73176 573(g),546(v),568(g),570(v)

344(v),294(v),575(g),293(v)

572(g),501(v)

30. BD (1) C 14 - H 27 1.97956 -0.54552 573(v),566(v),327(v),293(v)

589(r),568(g),571(g),570(v)

31. BD (1) C 15 - C 16 1.97720 -0.75605 573(g),99(v),466(r),565(g)

571(g),562(v),579(r),501(v)

235(r),468(r),497(r),572(v)

589(r),194(r),311(v),102(v)

541(r),260(v),575(g),472(r)

369(r),142(r),310(v),462(r)

470(r),477(r),493(r),539(r)

529(r),259(v),584(r),252(r)

585(r),538(r),471(r)

32. BD (2) C 15 - C 16 1.68515 -0.29701 142(r),564(v),569(v),235(r)

578(r),497(r),462(r),466(r)

579(r),99(v),573(g),544(v)

529(r),468(r),541(r),589(r)

477(r),194(r),501(v),261(v)

472(r),102(v),369(r),471(r)

545(v),252(r),469(r),539(r)

470(r),493(r),98(v),584(r)

585(r),237(r),101(v),538(r)

348(g),534(r),465(r),89(v)

313(v),543(v),270(v),130(r)

33. BD (1) C 15 - H 28 1.97649 -0.66653 573(g),466(r),579(r),235(r)

99(r),468(r),501(g),497(r)

194(r),142(r),462(r),102(r)

369(r),541(r),472(r),471(r)

529(r),470(r),493(r),539(r)

538(r),584(r),585(r),477(r)

237(r),98(r),469(r),578(r)

252(r),465(r),101(r),476(r)

534(r),234(r),231(r),270(r)

463(r),130(r),112(r),200(r)

373(r),233(r),392(r),587(r)

542(r),588(r),195(r),533(r)

232(r),383(r),100(r),267(r)

286(r),242(r),395(r),348(v)

358(v),370(r),199(r),357(v)

191(r),365(r),190(r),268(r)

114(r),583(r),586(r),273(r)

502(g),208(r),464(r),198(r)

506(r),127(r),530(r),330(g)

371(r),279(r),387(r),230(r)

372(r),572(v),274(r),388(r)

535(r),265(r),479(r),299(r)

281(r),287(r),131(r),576(r)

245(r),212(r),496(r),129(r)

509(r),565(v),334(g),180(r)

251(r),451(r),260(r),478(r)

216(r),236(r),386(r),256(r)

298(r),96(r),352(v),95(r)

368(r),238(r),253(r),467(r)

239(r),160(r),110(r),351(v)

280(r),492(r),288(r),87(r)

285(r),385(r),382(r),263(r)

217(r),528(r),498(r),340(g)

568(v),88(r),229(r),417(r)

92(r),338(g),241(r),536(r)

483(r),500(g),507(r),133(r)

508(r),499(g),582(r),228(r)

458(r),474(r),347(v),574(g)

531(r),226(r),177(r),266(r)

327(g),204(r),326(v),339(g)

188(r),581(r),571(g),109(r)

246(r),344(v),449(r),147(r)

433(r),367(r),511(r),255(r)

438(r),244(r),450(r),197(r)

405(r),128(r),413(r),115(r)

310(v),250(r),176(r),562(r)

186(r),362(r),227(r),240(r)

164(r),140(r),345(v),284(r)

319(v),354(v),457(r),454(r)

300(r),302(r),296(r),124(r)

108(r),346(v),331(g),396(r)

316(v),361(r),113(r),301(r)

261(r),117(r),305(r),537(r)

214(r),116(r),323(v),356(v)

389(r),447(r),122(r),455(r)

90(r),355(v),278(r),272(r)

427(r),580(r),504(r),303(r)

314(v),192(r),196(r),125(r)

380(r),202(r),215(r),337(g)

402(r),484(r),262(r),315(v)

175(r),264(r),475(r),437(r)

89(r),162(r),163(r),349(v)

34. BD (1) C 18 - C 22 1.97765 -1.10240 99(r),468(r),501(r),194(v)

573(r),541(r),466(r),235(r)

102(r),369(r),472(r),579(r)

497(r),470(r),493(r),539(r)

538(r),585(g),584(v),462(r)

142(r),471(r),477(r),529(r)

237(r),98(r),469(r),465(r)

252(r),101(r),534(r),476(r)

578(r),234(r),231(r),270(r)

200(v),373(r),112(r),130(r)

463(r),233(r),392(g),232(r)

533(r),195(v),383(g),267(r)

286(r),100(r),242(r),542(r)

370(r),588(r),348(r),358(r)

190(r),395(r),587(r),199(v)

365(r),357(r),273(r),114(r)

268(r),208(v),506(r),191(v)

464(r),586(r),198(v),502(r)

583(g),127(r),279(r),387(g)

530(r),371(r),230(r),330(r)

372(r),274(r),265(r),299(r)

535(r),212(v),388(g),451(g)

281(r),131(r),496(r),287(r)

245(r),236(r),479(r),216(v)

474(r),256(r),386(g),238(r)

253(r),251(r),260(r),368(r)

582(g),129(r),239(r),95(r)

110(r),385(g),352(r),180(r)

351(r),576(g),298(r),334(r)

160(r),572(r),96(r),467(r)

340(r),492(r),288(r),417(r)

285(r),241(r),263(r),499(r)

217(v),87(r),88(r),382(g)

528(r),229(r),536(r),92(r)

483(r),354(r),280(r),326(r)

500(r),133(r),338(r),345(r)

177(r),498(r),478(r),226(r)

509(r),204(v),339(r),188(r)

458(g),228(r),449(g),319(r)

266(r),255(r),197(v),531(r)

250(r),246(r),147(r),433(v)

355(r),318(r),109(r),244(r)

367(r),115(r),284(r),128(r)

389(g),450(g),511(r),405(r)

438(v),140(r),537(r),362(r)

227(r),240(r),327(r),300(r)

413(r),581(r),192(v),473(r)

457(g),164(r),186(r),113(r)

580(v),124(r),108(r),176(r)

301(r),396(r),331(r),196(v)

380(g),117(r),437(v),214(v)

507(r),261(r),296(r),454(g)

116(r),305(r),122(r),504(r)

475(r),508(r),302(r),272(r)

455(g),309(r),429(v),264(r)

562(r),323(r),90(r),574(r)

556(g),347(r),447(g),202(v)

346(r),427(r),89(r),356(r)

303(r),421(r),337(r),278(r)

258(r),163(r),361(r),555(v)

162(r),402(r),183(r),125(r)

415(r),554(g),262(r),484(r)

97(r),517(r),505(r),335(r)

132(r),215(v),426(r),282(r)

379(g),295(r),481(r),145(r)

452(g),532(r),316(r),135(r)

575(r),213(v),440(v),314(r)

271(r),491(r),257(r),545(r)

283(r),225(r),564(r),403(r)

320(r),123(r),292(r),414(r)

485(r),353(r),377(g),249(r)

175(r),103(r),181(r),211(v)

520(v),201(v),139(r),159(r)

332(r),551(r),431(v),516(r)

543(r),445(g),571(r),589(r)

35. BD (1) C 19 - C 20 1.98502 -0.72308 579(g),580(g),429(v),558(g)

209(v),428(v),581(g),208(v)

589(r)

36. BD (2) C 19 - C 20 1.64638 -0.27110 578(g),583(v),557(v),589(r)

142(r),235(r),462(r),497(r)

432(v),466(r),430(v),210(v)

579(g)

37. BD (1) C 19 - H 29 1.98170 -0.53451 579(g),466(r),235(r),573(r)

99(r),142(r),468(r),501(r)

497(r),556(v),462(r),194(r)

580(v),369(r),541(r),102(r)

472(r),529(r),471(r),470(r)

477(r),208(v),493(r),539(r)

538(r),585(r),98(r),578(g)

584(r),469(r),237(r),252(r)

465(r),101(r),534(r),411(v)

476(r),231(r),234(r),270(r)

200(r),373(r),112(r),463(r)

130(r),233(r),589(r)

38. BD (1) C 20 - C 21 1.98012 -0.80857 573(r),99(r),466(r),579(v)

235(r),468(r),501(r),194(r)

497(r),541(r),102(r),369(r)

472(r),142(r),462(r),470(r)

493(r),471(r),539(r),584(g)

529(r),538(r),477(r),585(v)

237(r),98(r),469(r),252(r)

465(r),101(r),578(g),534(r)

476(r),234(r),231(r),270(r)

112(r),130(r),200(r),463(r)

373(r),233(r),392(r),195(r)

232(r),533(r),383(r),286(r)

267(r),100(r),242(r),588(r)

395(v),542(r),348(r),358(r)

370(r),199(r),190(r),365(r)

357(r),587(r),273(r),114(r)

191(r),506(r),268(r),583(g)

464(r),208(r),502(r),198(r)

582(g),127(r),586(r),279(r)

371(r),530(r),230(r),372(r)

330(r),387(r),451(v),274(r)

265(r),299(r),281(r),535(r)

581(g),479(r),131(r),388(r)

496(r),287(r),245(r),212(r)

386(r),236(r),216(r),474(r)

256(r),253(r),251(r),238(r)

260(r),129(r),95(r),110(r)

368(r),417(g),576(v),352(r)

572(r),180(r),351(r),239(r)

160(r),298(r),334(r),96(r)

445(v),382(r),385(r),467(r)

288(r),340(r),492(r),285(r)

87(r),88(r),499(r),263(r)

217(r),241(r),229(r),528(r)

536(r),92(r),483(r),338(r)

280(r),326(r),345(r),500(r)

354(r),133(r),478(r),577(g)

498(r),226(r),405(v),339(r)

228(r),177(r),458(v),394(v)

197(r),204(r),188(r),255(r)

319(r),449(v),147(r),266(r)

246(r),367(r),109(r),531(r)

450(v),250(r),244(r),511(v)

389(r),128(r),355(r),318(r)

115(r),284(r),438(g),413(g)

507(r),327(r),362(r),240(r)

140(r),113(r),176(r),300(r)

227(r),473(r),537(r),164(r)

108(r),457(v),433(g),196(r)

186(r),301(r),124(r),509(v)

580(g),589(r),437(g),396(v)

331(r),361(r),261(r),215(r)

421(g),427(g),117(r),574(r)

296(r)

39. BD (1) C 20 - H 30 1.97978 -0.53834 466(r),579(v),235(r),573(r)

99(r),142(r),468(r),501(r)

497(r),462(r),194(r),102(r)

541(r),369(r),472(r),529(r)

471(r),470(r),558(v),477(r)

493(r),582(v),539(r),585(r)

538(r),578(g),98(r),237(r)

584(v),469(r),252(r),465(r)

101(r),534(r),476(r),231(r)

234(r),270(r),589(r),195(r)

130(r),463(r),112(r),428(v)

200(r),373(r),392(r),580(g)

233(r),533(r),232(r),383(r)

286(r),100(r),267(r),242(r)

542(r),588(r),358(r),348(r)

191(r)

40. BD (1) C 21 - C 22 1.97693 -0.72131 573(r),589(r),554(v),580(g)

576(g),581(v),466(r),377(v)

99(r),411(v),235(r),412(v)

468(r),501(r),579(r),585(g)

41. BD (2) C 21 - C 22 1.66295 -0.27310 578(v),557(v),142(r),235(r)

462(r),497(r),466(r),579(r)

573(r),468(r),99(r),501(r)

529(r),194(r),471(r),383(v)

477(r),369(r),541(r),472(r)

102(r),98(r),589(r),252(r)

469(r),413(v),470(r),493(r)

539(r),538(r),584(g),585(g)

237(r),101(r),465(r),534(r)

476(r),231(r),392(v),234(r)

270(r),463(r),130(r),112(r)

200(r),195(r),373(r),233(r)

42. BD (1) C 21 - H 31 1.97995 -0.68812 573(r),466(r),579(r),99(r)

235(r),468(r),501(r),497(r)

194(r),142(r),541(r),102(r)

369(r),462(r),472(r),470(r)

529(r),471(r),493(r),477(r)

539(r),538(r),584(g),585(v)

98(r),469(r),237(r),252(r)

578(v),465(r),101(r),534(r)

476(r),231(r),234(r),270(r)

112(r),130(r),200(r),373(r)

463(r),233(r),392(r),195(r)

232(r),533(r),383(r),286(r)

100(r),267(r),242(r),395(r)

358(r),348(r),370(r),199(r)

542(r),190(r),365(r),357(r)

191(r),588(r),273(r),114(r)

583(g),268(r),506(r),208(r)

464(r),198(r),586(r),589(r)

502(r),127(r),279(r),371(r)

230(r),587(r),330(r),372(r)

387(r),530(r),274(r),265(r)

474(r),299(r),388(r),212(r)

479(r),281(r),535(r),496(r)

245(r),287(r),131(r),236(r)

216(r),386(r),238(r),253(r)

251(r),256(r),260(r),110(r)

95(r),368(r),129(r),572(r)

352(r),577(v),351(r),298(r)

160(r),417(v),96(r),334(r)

180(r),239(r),340(r),451(v)

580(g),382(r),581(v),288(r)

492(r),385(r),88(r),467(r)

217(r),499(r),285(r),263(r)

87(r),229(r),338(r),280(r)

92(r),241(r),528(r),500(r)

483(r),536(r),326(r),345(r)

354(r),133(r),458(v),226(r)

339(r),228(r),177(r),473(r)

266(r),188(r),449(v),255(r)

319(r),454(v),109(r),246(r)

498(r),438(g),147(r),204(r)

367(r),445(v),128(r),250(r)

197(r),244(r),115(r),318(r)

537(r),355(r),450(v),413(v)

284(r),405(r),531(r),362(r)

108(r),327(r),113(r),300(r)

240(r),411(v),478(r),140(r)

433(g),164(r),361(r),511(r)

457(v),227(r),301(r),124(r)

331(r),396(r),176(r),455(v)

261(r),186(r),427(v),296(r)

389(r),446(v),117(r),431(g)

415(v),504(r),509(r),402(r)

562(r),305(r),116(r),447(v)

122(r),475(r),196(r),302(r)

380(r),309(r),90(r),264(r)

214(r),303(r),347(r),323(r)

272(r),215(r),346(r),202(r)

89(r),356(r),505(r),278(r)

412(v),337(r),574(r),213(r)

162(r),414(v),258(r),163(r)

192(r),125(r),426(v),437(g)

262(r)

43. BD (1) C 22 - H 32 1.97671 -0.53572 579(r),466(r),235(r),573(r)

99(r),142(r),468(r),501(r)

497(r),462(r),194(r),541(r)

102(r),472(r),529(r),369(r)

471(r),470(r),477(r),493(r)

539(r),538(r),98(r),578(r)

589(r),585(g),584(v),469(r)

237(r),252(r),465(r),556(v)

101(r),534(r),476(r),195(r)

231(r),234(r),270(r),580(v)

200(r),130(r),112(r),463(r)

373(r),233(r),576(g),378(v)

533(r),232(r),392(v),100(r)

286(r),267(r),242(r),395(r)

383(v),358(r),348(r),542(r)

583(g),191(r),588(r),190(r)

357(r),428(v),273(r),208(r)

114(r),370(r),506(r),268(r)

365(r),386(v),582(g),464(r)

199(r),198(r),587(r),586(r)

554(v)

44. BD (1) C 23 - H 34 1.98885 -0.53200 579(r),466(g),235(r),573(r)

99(r),142(r),501(r),497(r)

468(g),462(g),194(r),102(r)

369(r),471(g),529(g),472(g)

541(v),539(v),470(g),477(g)

493(r),589(r),584(r),578(r)

585(r),98(r),538(v),237(r)

252(r),469(g),101(r),534(v)

465(g),476(g),231(r),234(r)

463(g),270(r),200(r),130(r)

112(r),373(r),392(r),233(r)

195(r),232(r),383(r),533(v)

100(r),286(r),267(r),242(r)

395(r),348(r),588(g),358(r)

587(g),370(r),191(r),583(r)

199(r),365(r),357(r),190(v)

273(r),114(r),464(g),268(r)

208(r),506(r),198(r),502(r)

530(g),127(r),279(r),542(v)

230(r),371(r),330(r),387(r)

372(r),535(v),388(r),274(r)

265(r),299(r),281(r),479(r)

496(r),212(r),245(r),287(r)

131(r),251(r),576(r),253(r)

451(r),236(r),216(r),572(r)

260(r),129(r),256(r),386(r)

95(r),368(r),586(g),334(r)

352(r),238(r),298(r),160(r)

351(r),110(r),536(v),474(g)

551(v),239(r),88(r),288(r)

385(r),217(r),87(r),492(r)

499(r),340(r),96(r),382(r)

227(r),229(r),263(r),285(r)

241(r),338(r),417(r),280(r)

483(r),228(r),326(r),345(r)

188(v),500(r),92(r),354(r)

574(r),133(r),458(r),339(r)

498(r),244(r),475(g),204(r)

319(r),438(r),531(g),255(r)

582(r),246(r),449(r),433(r)

266(r),240(r),147(r),250(r)

367(r),115(r),405(r),180(v)

327(r),128(r),109(r),197(r)

450(r),509(r),413(r),528(g)

318(r),226(r),176(v),511(r)

284(r),355(r),113(r),362(r)

361(r),457(r),478(g),164(r)

225(r),140(r),300(r),581(r)

454(r),396(r),108(r),301(r)

331(r),473(g),575(r),508(r)

124(r),296(r),261(r),186(v)

540(v),196(r),181(v),346(r)

455(r),504(r),117(r),447(r)

562(r),90(r),389(r),214(r)

305(r),323(r),303(r),278(r)

302(r),427(r),309(r),580(r)

467(g),122(r),380(r),264(r)

262(r),507(r),202(r),116(r)

272(r),125(r),258(r),402(r)

162(r),591(r),592(r)

45. BD (1) C 23 - H 35 1.98616 -0.53193 579(r),466(g),235(r),573(r)

99(r),142(r),501(r),497(r)

468(g),462(g),194(r),541(v)

369(r),529(v),471(g),472(g)

102(r),470(g),539(v),493(r)

477(g),584(r),585(r),98(r)

578(r),538(v),237(r),469(g)

252(r),589(r),101(r),534(g)

465(g),231(r),476(g),234(r)

270(r),463(g),112(r),200(r)

130(r),373(r),392(r),233(r)

195(r),383(r),100(r),232(r)

533(g),286(r),242(r),267(r)

395(r),348(r),358(r),586(g)

365(r),370(r),588(g),191(r)

583(r),199(r),540(v),357(r)

273(r),114(r),190(v),542(v)

268(r),208(r),464(g),506(r)

198(r),502(r),530(v),279(r)

230(r),127(r),371(r),330(r)

387(r),372(r),587(g),535(g)

388(r),274(r),265(r),281(r)

299(r),245(r),479(r),496(r)

251(r),287(r),212(r),260(r)

238(r),131(r),451(r),576(r)

216(r),474(g),253(r),236(r)

386(r),256(r),572(r),368(r)

545(v),352(r),110(r),96(r)

129(r),298(r),160(r),87(r)

334(r),351(r),239(r),340(r)

95(r),288(r),492(r),385(r)

382(r),217(r),499(r),263(r)

285(r),509(r),88(r),536(g)

417(r),483(r),280(r),229(r)

338(r),326(r),581(r),180(v)

241(r),354(r),345(r),500(r)

226(r),580(r),133(r),92(r)

188(v),339(r),458(r),228(r)

246(r),266(r),475(g),255(r)

109(r),227(r),498(r),319(r)

433(r),438(r),204(r),449(r)

528(v),405(r),582(r),250(r)

197(r),147(r),367(r),318(r)

115(r),574(r),128(r),413(r)

244(r),450(r),177(v),240(r)

473(g),284(r),362(r),355(r)

186(v),108(r),327(r),361(r)

478(g),113(r),457(r),300(r)

511(r),140(r),454(r),537(g)

164(r),531(v),261(r),467(g)

331(r),301(r),396(r),124(r)

296(r),117(r),214(r),504(r)

562(r),116(r),196(r),389(r)

278(r),305(r),309(r),427(r)

302(r),380(r),447(r),122(r)

303(r),215(r),455(r),264(r)

402(r),323(r),272(r),262(r)

202(r),346(r),437(r),507(r)

426(r),591(r),592(r),590(r)

46. BD (1) C 23 - H 36 1.99531 -0.48892 235(r),579(r),466(g),573(r)

142(r),99(r),497(r),501(r)

462(g),468(g),194(r),529(v)

471(g),541(g),369(r),102(r)

472(g),589(r),578(r),470(g)

539(g),493(r),477(g),98(r)

584(r),585(r),538(g),237(r)

252(r),469(g),101(r),534(v)

465(g),476(g),231(r),234(r)

270(r),463(g),130(r),112(r)

200(r),373(r),392(r),233(r)

195(r),232(r),383(r),588(g)

100(r),533(v),286(r),267(r)

242(r),395(r),348(r),358(r)

583(r),370(r),365(r),191(r)

199(r),357(r),464(g),114(r)

273(r),190(v),587(g),268(r)

208(r),542(g),506(r),198(r)

502(r),127(r),586(g),279(r)

530(v),230(r),330(r),371(r)

387(r),372(r),388(r),274(r)

265(r),281(r),479(r),299(r)

535(v),131(r),496(r),245(r)

212(r),287(r),251(r),260(r)

236(r),451(r),576(r),572(r)

216(r),253(r),129(r),238(r)

386(r),256(r),96(r),368(r)

95(r),110(r),160(r),298(r)

352(r),334(r),351(r),239(r)

87(r),474(g),288(r),536(v)

217(r),88(r),492(r),340(r)

499(r),382(r),385(r),263(r)

285(r),338(r),417(r),280(r)

483(r),229(r),345(r),92(r)

326(r),500(r),241(r),354(r)

227(r),509(r),458(r),226(r)

228(r),133(r),498(r),188(v)

339(r),574(r),246(r),128(r)

319(r),438(r),449(r),478(g)

204(r),581(r),475(g),109(r)

433(r),255(r),147(r),266(r)

582(r),180(v),250(r),244(r)

177(v),405(r),367(r),450(r)

511(r),528(v),413(r),115(r)

318(r),327(r),197(r),113(r)

176(v),240(r),355(r),284(r)

108(r),361(r),362(r),140(r)

457(r),164(r),531(v),300(r)

454(r),580(r),331(r),186(v)

301(r),396(r),124(r),507(r)

296(r),261(r),467(g),117(r)

504(r),196(r),455(r),562(r)

447(r),214(r),473(g),305(r)

303(r),116(r),389(r),278(r)

346(r),323(r),309(r),302(r)

427(r),537(v),122(r),380(r)

264(r),508(r),402(r),356(r)

215(r),437(r),202(r),272(r)

262(r),125(r),347(r),162(r)

337(r),426(r),90(r),192(r)

484(r),258(r),163(r),89(r)

145(r),379(r),505(r),295(r)

175(v),421(r),282(r),575(r)

225(r),335(r),403(r),97(r)

540(g),314(r),353(r),132(r)

482(r),415(r),481(r),431(r)

316(r),440(r),213(r),135(r)

271(r),491(r),283(r),485(r)

414(r),452(r),592(r),249(r)

320(r),193(r),292(r),159(r)

103(r),517(r),363(r),178(v)

591(r),494(r),123(r),408(r)

446(r),257(r),571(r),461(r)

516(r),332(r),398(r),139(r)

211(r),548(r),397(r),432(r)

201(r),304(r),349(r),158(r)

168(r),480(r),577(r),543(r)

409(r),148(r),375(r),561(r)

590(r)

47. CR (1) S 1 2.00000 -87.88397 585(r),539(r),493(r),584(r)

538(r),589(r)

48. CR (2) S 1 1.99864 -9.08583 493(r),539(r),538(r),584(r)

585(r),470(r),472(r),369(r)

541(r),194(r),501(r),468(r)

573(v),102(g),477(r),497(r)

543(g),544(g),99(g),235(r)

237(r),466(r),471(r),469(r)

98(g),344(v),529(r),112(v)

579(r),462(r),545(g),534(r)

552(v),142(r),190(v),101(g)

551(v),252(r),270(r),465(r)

231(r),233(r)

49. CR (3) S 1 1.99984 -6.09006 470(r),472(r)

50. CR (4) S 1 1.99987 -6.08890 470(r),472(r),493(r),539(r)

538(r),584(r),585(r),369(r)

102(g),573(v),194(r),501(r)

541(r)

51. CR (5) S 1 1.99986 -6.08797 470(r),472(r),493(r),539(r)

584(r),538(r),585(r),369(r)

541(r),194(r),102(g),501(r)

468(r)

52. CR (1) O 2 1.99980 -18.89949 585(r),539(r),584(r),493(r)

538(r),89(v),92(v),470(r)

472(r),87(v)

53. CR (1) O 3 1.99980 -18.89319 89(v),93(v),92(v),87(v)

54. CR (1) O 4 1.99974 -18.88826 361(v),561(v)

55. CR (1) O 5 1.99975 -19.23413 585(r),539(r),584(r),493(r)

538(r),470(r),472(r),369(r)

468(r),501(r),194(r),102(r)

541(r),477(r),497(r),237(r)

99(r),235(r),471(r),190(r)

573(r),466(r),469(r),529(r)

579(r),462(r),98(r),465(r)

534(r),142(r),242(v),476(r)

252(v),234(r),231(r),233(r)

101(r),373(r),270(r),200(r)

370(r),112(r),232(r),130(r)

199(r),267(r),463(r),578(r)

358(r),533(r),348(r),286(r)

383(r),195(r),506(r),392(r)

586(r),100(r),357(r),268(r)

273(r),542(r),114(r),395(r)

387(r),588(r),365(r),372(r)

241(r),198(r),474(r),191(r)

502(r),587(r),371(r),274(r)

464(r),388(r),208(r),530(r)

279(r),230(r),216(r),127(r)

299(r),265(r),256(v),535(r)

287(r),238(r),330(r),236(r)

131(r),496(r),212(r),386(r)

281(r),583(r),340(r),239(r)

524(v),451(r),285(r),352(r)

479(r),245(v),351(r),260(r)

251(v),475(r),492(r),385(r)

110(r),229(r),354(r),483(r)

133(r),160(g),368(r),188(r)

467(r),95(r),129(r),288(r)

562(v),298(r),417(r),180(r)

334(r),500(r),96(r),263(r)

92(r),382(r),253(v),576(r)

536(r),326(r),204(r),355(r)

244(v),473(r),250(v),499(r)

537(r),528(r),217(r)

56. CR (1) N 6 1.99941 -14.07228 538(r),493(r),539(r),584(r)

542(r),585(r),586(v),470(v)

587(v),472(v),225(v),464(v)

468(v),369(r),465(v),102(v)

194(r),467(v),501(r),476(v)

57. CR (1) N 7 1.99925 -14.20148 363(v),378(v),380(v),493(r)

480(v),361(v),547(v),538(r)

576(v)

58. CR (1) N 8 1.99937 -14.13844 377(v),394(v),493(r),538(r)

576(v),539(r),584(r),577(v)

59. CR (1) C 9 1.99881 -10.09431 493(r),539(r),584(r),538(r)

585(r),470(r),472(r),369(v)

541(r),501(r),194(r),468(r)

102(r),477(r),497(r),99(r)

235(g),237(g),466(r),573(r)

469(r),471(r),462(r),529(r)

579(r),98(r),534(r),142(r)

190(v),562(v),370(v),365(v)

270(r),465(r),373(v),101(r)

231(g),233(g),234(g),244(v)

363(v),559(g),252(v),476(r)

552(v),200(r),549(v),112(r)

130(r),463(r),506(r),267(r)

60. CR (1) C 10 1.99870 -10.37519 493(r),538(r),539(r),584(r)

585(r),470(r),472(r),369(r)

194(r),468(r),501(r),102(r)

541(r),497(r),477(r),99(r)

235(v),237(v),573(r),471(r)

466(r),469(r),529(r),579(r)

462(r),98(r),190(r),465(r)

534(r),142(r),252(g),476(r)

234(v),101(r),231(v),373(r)

270(v),233(v),200(r),232(v)

112(r),370(r),130(r),267(v)

242(g),588(r),463(r),199(r)

578(r),358(r),533(r),348(r)

286(r),195(r),383(r),392(r)

506(r),273(v),100(r),357(r)

268(v),395(r),114(r),365(r)

387(r),542(r),198(r),372(r)

191(r),587(r),502(r),371(r)

464(r),274(v),474(r),586(r)

208(r),530(r),388(r),230(v)

241(v),229(v),279(r),127(r)

216(r),299(r),330(r),238(v)

236(v),131(r),287(r),535(r)

496(r),583(r),212(r),239(v)

265(v),251(g),281(r),386(r)

227(v),260(v),256(g),340(r)

228(v),285(r),451(r),245(g)

352(r),253(g),479(r),351(r)

492(r),559(g),129(r),110(r)

368(r),385(r),483(r),95(r)

288(r),259(v),475(r),298(r)

354(r),133(r),334(r),188(r)

266(v),417(r),180(r),536(r)

562(g),500(r),96(r),225(v)

92(r),382(r),467(r),326(r)

576(r),499(r),345(r),204(r)

217(r),549(g),473(r),164(v)

355(r),528(r),87(r),88(r)

160(v),280(r),244(g),572(r)

498(r),563(v),124(r),339(r)

561(v),263(v),338(r),565(v)

140(r),537(r),250(g),367(r)

284(r),449(r),197(r),226(v)

61. CR (1) C 11 1.99888 -10.07914 493(r),538(r),539(r),584(r)

585(r),470(r),472(r),369(r)

194(r),468(r),277(v),102(r)

501(r),244(v),541(r),345(v)

99(r),559(v),497(r),235(r)

546(v),566(v),237(r),477(r)

471(r),565(g),466(r)

62. CR (1) C 12 1.99908 -10.06485 260(v),294(v),565(v),562(v)

568(v)

63. CR (1) C 13 1.99916 -10.06812 311(v),493(v),277(v),563(v)

571(v),538(r),539(r)

64. CR (1) C 14 1.99916 -10.09786 493(r),538(r),539(r),584(r)

585(r),470(r),472(r),369(r)

194(r),468(r),501(r),102(r)

541(r),573(v),497(v),477(r)

99(r),235(r),237(r),471(r)

466(r),469(r),529(r),579(r)

462(r),98(r),190(r),465(r)

142(r),534(r),476(r),252(r)

234(r),101(r),231(r),233(r)

373(r),270(r),200(r),294(v)

112(r),330(v),370(r),130(r)

232(r),328(v),588(r),463(r)

199(r),578(r),267(r),533(r)

358(r),195(r),348(r),383(r)

392(r),242(r),100(r),286(r)

506(r),327(v),542(r),268(r)

357(r),273(r),395(r),114(r)

566(v),387(r),365(r),587(r)

65. CR (1) C 15 1.99904 -10.06688 493(r),538(r),539(r),584(r)

585(r),470(r),472(r),311(v)

501(v),345(v),565(v),369(r)

546(v),194(r),468(r),568(v)

102(r),541(r),347(v),346(v)

589(r)

66. CR (1) C 16 1.99872 -10.10060 493(r),539(r),538(r),584(r)

585(r),470(r),472(r),328(v)

573(g),260(v),546(g),369(r)

541(r),501(r),194(r),102(v)

468(r),259(v),562(v),571(v)

563(v),99(v),565(g),477(r)

497(r),589(r)

67. CR (1) C 17 1.99904 -10.18516 554(v),227(v),493(r),551(v)

226(v),539(r),561(g)

68. CR (1) C 18 1.99908 -10.13640 585(v),493(r),539(r),538(r)

584(r),470(r),194(v),472(r)

558(v),541(r),501(r),468(r)

553(v),369(r),446(v),102(r)

477(r),209(v),576(g),445(v)

582(v),497(r),589(r)

69. CR (1) C 19 1.99923 -10.08853 589(r),556(v),412(v),584(r)

493(r),580(v),538(r),539(r)

209(v)

70. CR (1) C 20 1.99915 -10.04890 429(v),395(v),582(v),558(v)

71. CR (1) C 21 1.99917 -10.05820 412(v),446(v),585(v),576(v)

577(v)

72. CR (1) C 22 1.99905 -10.04602 429(v),377(v),378(v),493(r)

538(r),539(r),556(v),580(v)

554(v),519(v),585(g)

73. CR (1) C 23 1.99930 -10.04957 539(v),493(r),584(r),538(v)

585(r),470(g),472(g),369(r)

194(r),102(r),501(r),468(g)

541(v),471(g),99(r),235(r)

497(r),237(r),542(v),573(r)

466(g),462(g),588(g),477(g)

529(v),579(r),98(r),587(g)

469(g),534(v),190(v),476(g)

142(r),465(g),234(r),586(g)

101(r),252(r),231(r),373(r)

233(r),270(r),200(r),112(r)

463(g),130(r),370(r),232(r)

199(r),267(r),578(r),348(r)

383(r),100(r),392(r),358(r)

242(r),195(r),286(r),502(r)

395(r),357(r),114(r),268(r)

387(r),533(v),365(r),273(r)

530(v),191(r),372(r),506(r)

198(r),464(g),371(r),535(v)

274(r),241(r),388(r),208(r)

507(r),127(r),509(r),478(g)

279(r),131(r),230(r),256(r)

330(r),265(r),299(r),216(r)

287(r),498(r),386(r),475(g)

583(r),245(r),496(r),239(r)

212(r),236(r),281(r),129(r)

508(r),251(r),451(r),260(r)

238(r),253(r),352(r),285(r)

188(v),479(r),492(r),536(v)

385(r),340(r),351(r),96(r)

483(r),354(r),368(r),133(r)

576(r),288(r),298(r),334(r)

417(r),263(r),229(r),110(r)

95(r),382(r),204(r),160(r)

186(v),92(r),326(r),87(r)

228(r),240(r),572(r),511(r)

355(r),217(r),500(r),499(r)

467(g),88(r),345(r),339(r)

227(r),140(r),338(r),124(r)

318(r),474(g),367(r),280(r)

581(r),284(r),244(r),449(r)

197(r),531(v),147(r),255(r)

319(r),582(r),454(r),574(r)

300(r),250(r),226(r),433(r)

115(r),458(r),450(r),246(r)

362(r),128(r),405(r),117(r)

327(r),266(r),457(r),116(r)

389(r),301(r),109(r),272(r)

164(r),177(v),361(r),396(r)

113(r),537(v),122(r),305(r)

331(r),438(r),176(v),257(r)

413(r),427(r),103(r),180(v)

135(r),302(r),214(r),108(r)

202(r),258(r),380(r),225(r)

455(r),335(r),196(r),309(r)

323(r),215(r),337(r),261(r)

125(r),437(r),353(r),162(r)

296(r),356(r),264(r),168(r)

262(r),278(r),347(r),145(r)

175(v),580(r),402(r),123(r)

90(r),97(r),283(r),482(r)

379(r),346(r),421(r),163(r)

447(r),551(v),440(r),528(v)

139(r),271(r),141(r),562(r)

375(r),504(r),106(r),485(r)

452(r),89(r),181(v),484(r)

136(r),292(r),481(r),303(r)

192(r),316(r),201(r),320(r)

517(r),491(r),304(r),282(r)

461(r),431(r),213(r),295(r)

249(r),415(r),426(r),363(r)

211(r),435(r),314(r),516(r)

409(r),148(r),403(r),545(v)

185(v)

74. LP (1) O 2 1.98392 -0.83351 573(r),92(v),544(v),93(v)

99(v),468(r),546(v),501(r)

235(r),541(r),89(v),101(v)

579(r)

75. LP (2) O 2 1.81287 -0.31143 546(v),544(v),142(r),90(v)

87(v),88(v),89(v),545(v)

235(r),91(v),466(r),497(r)

462(r),578(r),565(r),579(r)

76. LP (3) O 2 1.78507 -0.31077 545(v),544(v),142(r),90(v)

87(v),235(r),88(v),462(r)

578(r),497(r),91(v),466(r)

501(r),579(r),468(r),546(v)

89(v),529(r),541(r)

77. LP (1) O 3 1.98370 -0.83142 92(v),93(v),543(v),99(v)

546(v),106(v)

78. LP (2) O 3 1.79927 -0.30273 546(v),545(v),88(v),90(v)
543(v),142(r),574(r),89(v)
235(r)
79. LP (3) O 3 1.77949 -0.30085 543(v),545(v),87(v),142(r)
89(v),90(v),235(r),546(v)
578(r),91(v),466(r),497(r)
80. LP (1) O 4 1.96784 -0.70144 361(v),550(r),561(v),573(r)
81. LP (2) O 4 1.84569 -0.32882 550(r),553(v),142(g),561(v)
235(r),364(v),361(v),363(v)
551(r),466(r),497(r)
82. LP (1) O 5 1.97282 -0.61567 559(v),242(v),524(v),562(v)
83. LP (2) O 5 1.79123 -0.33320 142(r),560(v),243(v),526(v)
84. LP (1) N 6 1.86715 -0.34395 588(v),559(v),142(r),546(v)
91(v),235(v),561(v),560(v)
542(r),544(v),462(v),573(r)
555(r),471(v),228(v),463(v)
540(r),589(r),464(v)
85. LP (1) N 7 1.63200 -0.28365 548(v),557(v),142(r),578(r)
235(r),497(r),462(r),466(r)
362(v),579(r),573(r),501(r)
99(r),468(r),477(r),529(r)
379(v),194(g),541(r),534(r)
381(v),472(r),102(r),469(r)
365(v),98(r),369(v),481(v)
583(r),252(r),470(r),471(r)
493(r),539(r),538(r),585(r)
584(r),237(r),368(v),392(v)
465(r),589(r)

86. LP (1) N 8 1.91135 -0.36179 579(v),576(v),577(v),554(v)
142(r),377(v),394(v),235(r)
589(r),466(r),497(r),462(r)
573(r),578(v)

87. RY*(1) S 1 0.06762 0.77530

88. RY*(2) S 1 0.05624 0.69982

89. RY*(3) S 1 0.04293 0.86586

90. RY*(4) S 1 0.03281 0.80001

91. RY*(5) S 1 0.01445 0.82071

92. RY*(6) S 1 0.00835 1.60882

93. RY*(7) S 1 0.00395 1.52546

94. RY*(8) S 1 0.00098 1.26068

95. RY*(9) S 1 0.00090 1.00806

96. RY*(10) S 1 0.00055 0.88781

97. RY*(11) S 1 0.00051 1.30989

98. RY*(12) S 1 0.00020 0.35332

99. RY*(13) S 1 0.00012 -0.92289

100. RY*(14) S 1 0.00007 0.68876

101. RY*(15) S 1 0.00006 0.35486

102. RY*(16) S 1 0.00002 -2.38895

103. RY*(17) S 1 0.00003 14.65653

104. RY*(18) S 1 0.00000 180.84036

105. RY*(19) S 1 0.00000 16.69227

106. RY*(20) S 1 0.00000 16.77454

107. RY*(21) S 1 0.00000 16.74502

108. RY*(1) O 2 0.00161 1.10355

109. RY*(2) O 2 0.00104 0.80077

110. RY*(3) O 2 0.00065 0.94776

111.	RY*(4)	O	2	0.00029 0.61658
112.	RY*(5)	O	2	0.00019 0.70669
113.	RY*(6)	O	2	0.00009 0.94384
114.	RY*(7)	O	2	0.00007 1.63290
115.	RY*(8)	O	2	0.00004 1.39860
116.	RY*(9)	O	2	0.00002 2.85541
117.	RY*(10)	O	2	0.00001 2.82509
118.	RY*(11)	O	2	0.00000 4.94202
119.	RY*(12)	O	2	0.00000 4.94666
120.	RY*(13)	O	2	0.00000 49.59544
121.	RY*(14)	O	2	0.00001 2.74073
122.	RY*(15)	O	2	0.00001 2.67496
123.	RY*(16)	O	2	0.00001 3.13448
124.	RY*(17)	O	2	0.00000 4.73966
125.	RY*(1)	O	3	0.00149 1.16630
126.	RY*(2)	O	3	0.00089 0.95747
127.	RY*(3)	O	3	0.00069 0.89637
128.	RY*(4)	O	3	0.00029 0.60726
129.	RY*(5)	O	3	0.00019 1.06618
130.	RY*(6)	O	3	0.00010 0.60979
131.	RY*(7)	O	3	0.00007 1.85291
132.	RY*(8)	O	3	0.00005 1.11288
133.	RY*(9)	O	3	0.00002 2.92484
134.	RY*(10)	O	3	0.00001 2.85176
135.	RY*(11)	O	3	0.00000 4.99342
136.	RY*(12)	O	3	0.00000 4.68535
137.	RY*(13)	O	3	0.00000 4.93073
138.	RY*(14)	O	3	0.00001 3.02693

139.	RY*(15)	O	3	0.00001 2.64869
140.	RY*(16)	O	3	0.00001 3.06627
141.	RY*(17)	O	3	0.00000 49.48356
142.	RY*(1)	O	4	0.00273 -0.33305
143.	RY*(2)	O	4	0.00172 1.01438
144.	RY*(3)	O	4	0.00050 0.53888
145.	RY*(4)	O	4	0.00017 1.27616
146.	RY*(5)	O	4	0.00012 1.71446
147.	RY*(6)	O	4	0.00011 1.29894
148.	RY*(7)	O	4	0.00007 2.18516
149.	RY*(8)	O	4	0.00005 3.28175
150.	RY*(9)	O	4	0.00003 4.05274
151.	RY*(10)	O	4	0.00001 2.76483
152.	RY*(11)	O	4	0.00000 4.99579
153.	RY*(12)	O	4	0.00000 4.95981
154.	RY*(13)	O	4	0.00000 49.37576
155.	RY*(14)	O	4	0.00000 3.03052
156.	RY*(15)	O	4	0.00001 4.09220
157.	RY*(16)	O	4	0.00001 3.03255
158.	RY*(1)	O	5	0.00279 0.52558
159.	RY*(2)	O	5	0.00168 0.87663
160.	RY*(3)	O	5	0.00046 0.71641
161.	RY*(4)	O	5	0.00021 1.12104
162.	RY*(5)	O	5	0.00012 1.53408
163.	RY*(6)	O	5	0.00012 1.29821
164.	RY*(7)	O	5	0.00006 1.59027
165.	RY*(8)	O	5	0.00003 3.57489
166.	RY*(9)	O	5	0.00001 3.22827

167.	RY*(10)	O	5	0.00001 5.17811
168.	RY*(11)	O	5	0.00000 4.77934
169.	RY*(12)	O	5	0.00001 4.71856
170.	RY*(13)	O	5	0.00000 49.55040
171.	RY*(14)	O	5	0.00000 2.91440
172.	RY*(15)	O	5	0.00001 3.13225
173.	RY*(16)	O	5	0.00001 3.03833
174.	RY*(1)	N	6	0.00707 0.68376
175.	RY*(2)	N	6	0.00561 0.83721
176.	RY*(3)	N	6	0.00351 0.98007
177.	RY*(4)	N	6	0.00228 0.85237
178.	RY*(5)	N	6	0.00217 0.79440
179.	RY*(6)	N	6	0.00138 1.11049
180.	RY*(7)	N	6	0.00098 1.08351
181.	RY*(8)	N	6	0.00074 1.31764
182.	RY*(9)	N	6	0.00043 2.41436
183.	RY*(10)	N	6	0.00028 1.96263
184.	RY*(11)	N	6	0.00022 2.33994
185.	RY*(12)	N	6	0.00011 2.37127
186.	RY*(13)	N	6	0.00007 3.12099
187.	RY*(14)	N	6	0.00005 3.44809
188.	RY*(15)	N	6	0.00001 3.91467
189.	RY*(16)	N	6	0.00001 3.71952
190.	RY*(17)	N	6	0.00000 31.50606
191.	RY*(1)	N	7	0.00689 0.57313
192.	RY*(2)	N	7	0.00370 0.71891
193.	RY*(3)	N	7	0.00334 0.76026
194.	RY*(4)	N	7	0.00164 -2.09921

195.	RY*(5) N	7	0.00099	0.52150
196.	RY*(6) N	7	0.00053	1.21039
197.	RY*(7) N	7	0.00033	1.84592
198.	RY*(8) N	7	0.00029	1.53403
199.	RY*(9) N	7	0.00012	2.30827
200.	RY*(10) N	7	0.00008	1.00433
201.	RY*(11) N	7	0.00009	2.99408
202.	RY*(12) N	7	0.00004	2.17020
203.	RY*(13) N	7	0.00003	3.58003
204.	RY*(14) N	7	0.00003	2.74036
205.	RY*(15) N	7	0.00001	4.40749
206.	RY*(16) N	7	0.00000	3.80731
207.	RY*(17) N	7	0.00000	34.71835
208.	RY*(1) N	8	0.00529	0.59885
209.	RY*(2) N	8	0.00141	1.28611
210.	RY*(3) N	8	0.00069	0.58756
211.	RY*(4) N	8	0.00040	2.09632
212.	RY*(5) N	8	0.00036	1.50640
213.	RY*(6) N	8	0.00017	1.30166
214.	RY*(7) N	8	0.00012	1.22437
215.	RY*(8) N	8	0.00008	1.47191
216.	RY*(9) N	8	0.00005	2.81794
217.	RY*(10) N	8	0.00003	0.84397
218.	RY*(11) N	8	0.00001	2.06749
219.	RY*(12) N	8	0.00002	4.29895
220.	RY*(13) N	8	0.00002	3.91956
221.	RY*(14) N	8	0.00001	2.24703
222.	RY*(15) N	8	0.00001	2.14208

223.	RY*(16)	N	8	0.00000 34.99622
224.	RY*(17)	N	8	0.00000 3.83715
225.	RY*(1)	C	9	0.00582 1.23586
226.	RY*(2)	C	9	0.00508 0.89277
227.	RY*(3)	C	9	0.00381 0.98266
228.	RY*(4)	C	9	0.00169 1.22464
229.	RY*(5)	C	9	0.00113 1.85288
230.	RY*(6)	C	9	0.00050 1.08013
231.	RY*(7)	C	9	0.00050 0.93235
232.	RY*(8)	C	9	0.00043 1.25136
233.	RY*(9)	C	9	0.00024 2.15634
234.	RY*(10)	C	9	0.00019 1.12949
235.	RY*(11)	C	9	0.00016 -0.43651
236.	RY*(12)	C	9	0.00013 2.01922
237.	RY*(13)	C	9	0.00009 1.56631
238.	RY*(14)	C	9	0.00006 2.12251
239.	RY*(15)	C	9	0.00004 2.40111
240.	RY*(16)	C	9	0.00002 3.25459
241.	RY*(17)	C	9	0.00001 19.41585
242.	RY*(1)	C	10	0.00854 0.84084
243.	RY*(2)	C	10	0.00400 1.31415
244.	RY*(3)	C	10	0.00316 1.55195
245.	RY*(4)	C	10	0.00187 1.51266
246.	RY*(5)	C	10	0.00144 1.01409
247.	RY*(6)	C	10	0.00088 1.77833
248.	RY*(7)	C	10	0.00056 1.26224
249.	RY*(8)	C	10	0.00036 1.69728
250.	RY*(9)	C	10	0.00021 1.70046

251.	RY*(10) C 10	0.00016	1.27487
252.	RY*(11) C 10	0.00013	0.27247
253.	RY*(12) C 10	0.00012	1.49364
254.	RY*(13) C 10	0.00010	6.13834
255.	RY*(14) C 10	0.00007	1.62017
256.	RY*(15) C 10	0.00003	2.98529
257.	RY*(16) C 10	0.00003	17.32139
258.	RY*(17) C 10	0.00001	2.65834
259.	RY*(1) C 11	0.00658	1.41304
260.	RY*(2) C 11	0.00538	1.24696
261.	RY*(3) C 11	0.00136	0.78807
262.	RY*(4) C 11	0.00103	1.05786
263.	RY*(5) C 11	0.00071	1.27345
264.	RY*(6) C 11	0.00060	1.18748
265.	RY*(7) C 11	0.00042	1.58725
266.	RY*(8) C 11	0.00021	1.37257
267.	RY*(9) C 11	0.00017	1.18867
268.	RY*(10) C 11	0.00017	1.88308
269.	RY*(11) C 11	0.00014	2.27791
270.	RY*(12) C 11	0.00009	0.94681
271.	RY*(13) C 11	0.00009	2.85681
272.	RY*(14) C 11	0.00007	4.29553
273.	RY*(15) C 11	0.00005	1.59576
274.	RY*(16) C 11	0.00001	2.61095
275.	RY*(17) C 11	0.00001	20.16164
276.	RY*(1) C 12	0.00605	1.10392
277.	RY*(2) C 12	0.00277	1.05935
278.	RY*(3) C 12	0.00111	0.52575

279.	RY*(4) C 12	0.00067	0.94505
280.	RY*(5) C 12	0.00061	0.84329
281.	RY*(6) C 12	0.00053	1.12805
282.	RY*(7) C 12	0.00025	1.25972
283.	RY*(8) C 12	0.00016	2.23019
284.	RY*(9) C 12	0.00013	2.30463
285.	RY*(10) C 12	0.00007	2.60507
286.	RY*(11) C 12	0.00006	0.78312
287.	RY*(12) C 12	0.00004	1.87491
288.	RY*(13) C 12	0.00003	1.33590
289.	RY*(14) C 12	0.00002	3.36356
290.	RY*(15) C 12	0.00000	20.04622
291.	RY*(16) C 12	0.00000	2.78232
292.	RY*(17) C 12	0.00000	2.52283
293.	RY*(1) C 13	0.00581	1.06736
294.	RY*(2) C 13	0.00220	1.24640
295.	RY*(3) C 13	0.00069	0.93237
296.	RY*(4) C 13	0.00049	0.93453
297.	RY*(5) C 13	0.00049	1.23320
298.	RY*(6) C 13	0.00038	1.00021
299.	RY*(7) C 13	0.00023	1.69350
300.	RY*(8) C 13	0.00008	2.34307
301.	RY*(9) C 13	0.00005	1.92995
302.	RY*(10) C 13	0.00003	2.08448
303.	RY*(11) C 13	0.00001	0.47935
304.	RY*(12) C 13	0.00000	2.62963
305.	RY*(13) C 13	0.00001	2.07553
306.	RY*(14) C 13	0.00000	1.49048

307. RY*(15) C 13	0.00000	2.32052
308. RY*(16) C 13	0.00000	21.62612
309. RY*(17) C 13	0.00000	1.59633
310. RY*(1) C 14	0.00620	1.06695
311. RY*(2) C 14	0.00211	1.26307
312. RY*(3) C 14	0.00074	0.66945
313. RY*(4) C 14	0.00053	1.45099
314. RY*(5) C 14	0.00043	0.88649
315. RY*(6) C 14	0.00036	1.01793
316. RY*(7) C 14	0.00022	1.56755
317. RY*(8) C 14	0.00009	2.72881
318. RY*(9) C 14	0.00005	1.91959
319. RY*(10) C 14	0.00004	1.16885
320. RY*(11) C 14	0.00003	1.93343
321. RY*(12) C 14	0.00000	2.60939
322. RY*(13) C 14	0.00001	1.58115
323. RY*(14) C 14	0.00001	1.32357
324. RY*(15) C 14	0.00000	21.70171
325. RY*(16) C 14	0.00001	2.28549
326. RY*(17) C 14	0.00001	1.60862
327. RY*(1) C 15	0.00741	1.09844
328. RY*(2) C 15	0.00289	1.08409
329. RY*(3) C 15	0.00131	0.66638
330. RY*(4) C 15	0.00089	0.84550
331. RY*(5) C 15	0.00058	1.28580
332. RY*(6) C 15	0.00045	0.83708
333. RY*(7) C 15	0.00035	1.16972
334. RY*(8) C 15	0.00019	0.95623

335.	RY*(9) C 15	0.00010	3.82144
336.	RY*(10) C 15	0.00008	3.11097
337.	RY*(11) C 15	0.00006	1.90026
338.	RY*(12) C 15	0.00005	0.73897
339.	RY*(13) C 15	0.00004	1.41334
340.	RY*(14) C 15	0.00004	2.49204
341.	RY*(15) C 15	0.00000	20.51100
342.	RY*(16) C 15	0.00000	2.71101
343.	RY*(17) C 15	0.00001	2.42931
344.	RY*(1) C 16	0.00774	1.27910
345.	RY*(2) C 16	0.00596	0.95094
346.	RY*(3) C 16	0.00270	0.73644
347.	RY*(4) C 16	0.00164	0.97724
348.	RY*(5) C 16	0.00089	1.30019
349.	RY*(6) C 16	0.00059	1.02440
350.	RY*(7) C 16	0.00035	2.08751
351.	RY*(8) C 16	0.00033	1.46612
352.	RY*(9) C 16	0.00026	1.66691
353.	RY*(10) C 16	0.00021	1.06201
354.	RY*(11) C 16	0.00015	2.88792
355.	RY*(12) C 16	0.00013	3.52374
356.	RY*(13) C 16	0.00006	1.17338
357.	RY*(14) C 16	0.00006	1.69442
358.	RY*(15) C 16	0.00003	1.33327
359.	RY*(16) C 16	0.00001	2.74438
360.	RY*(17) C 16	0.00000	21.94327
361.	RY*(1) C 17	0.01332	1.01036
362.	RY*(2) C 17	0.00697	1.44036

363.	RY*(3) C 17	0.00599	1.44821
364.	RY*(4) C 17	0.00302	2.26289
365.	RY*(5) C 17	0.00187	0.91779
366.	RY*(6) C 17	0.00113	1.26084
367.	RY*(7) C 17	0.00050	1.98494
368.	RY*(8) C 17	0.00042	0.97222
369.	RY*(9) C 17	0.00022	-2.91551
370.	RY*(10) C 17	0.00016	3.11195
371.	RY*(11) C 17	0.00015	1.77414
372.	RY*(12) C 17	0.00010	2.92528
373.	RY*(13) C 17	0.00006	1.62191
374.	RY*(14) C 17	0.00003	13.82920
375.	RY*(15) C 17	0.00004	5.49282
376.	RY*(16) C 17	0.00002	3.32763
377.	RY*(1) C 18	0.00966	1.26335
378.	RY*(2) C 18	0.00509	1.33657
379.	RY*(3) C 18	0.00246	1.47012
380.	RY*(4) C 18	0.00212	1.64063
381.	RY*(5) C 18	0.00155	1.24234
382.	RY*(6) C 18	0.00051	1.12716
383.	RY*(7) C 18	0.00049	0.72619
384.	RY*(8) C 18	0.00030	2.22951
385.	RY*(9) C 18	0.00012	1.85279
386.	RY*(10) C 18	0.00009	1.95628
387.	RY*(11) C 18	0.00009	3.91196
388.	RY*(12) C 18	0.00004	2.19264
389.	RY*(13) C 18	0.00004	2.81291
390.	RY*(14) C 18	0.00004	2.40181

391.	RY*(15) C 18	0.00001	2.65901
392.	RY*(16) C 18	0.00001	0.37031
393.	RY*(17) C 18	0.00000	17.29125
394.	RY*(1) C 19	0.00744	1.03627
395.	RY*(2) C 19	0.00553	0.78938
396.	RY*(3) C 19	0.00151	1.44807
397.	RY*(4) C 19	0.00084	1.47282
398.	RY*(5) C 19	0.00067	0.78215
399.	RY*(6) C 19	0.00033	0.85278
400.	RY*(7) C 19	0.00022	2.83399
401.	RY*(8) C 19	0.00006	1.73286
402.	RY*(9) C 19	0.00007	0.76956
403.	RY*(10) C 19	0.00004	0.49459
404.	RY*(11) C 19	0.00000	21.98637
405.	RY*(12) C 19	0.00001	0.92014
406.	RY*(13) C 19	0.00000	2.69999
407.	RY*(14) C 19	0.00000	2.40792
408.	RY*(15) C 19	0.00000	1.21041
409.	RY*(16) C 19	0.00000	2.79973
410.	RY*(17) C 19	0.00001	1.89045
411.	RY*(1) C 20	0.00495	1.14361
412.	RY*(2) C 20	0.00177	1.30946
413.	RY*(3) C 20	0.00106	0.51024
414.	RY*(4) C 20	0.00045	0.75900
415.	RY*(5) C 20	0.00039	1.00139
416.	RY*(6) C 20	0.00034	1.54796
417.	RY*(7) C 20	0.00019	1.76192
418.	RY*(8) C 20	0.00006	3.02786

419.	RY*(9) C 20	0.00007	1.49112
420.	RY*(10) C 20	0.00001	2.90556
421.	RY*(11) C 20	0.00001	1.56799
422.	RY*(12) C 20	0.00000	2.73033
423.	RY*(13) C 20	0.00000	21.77821
424.	RY*(14) C 20	0.00000	1.51006
425.	RY*(15) C 20	0.00000	1.61177
426.	RY*(16) C 20	0.00000	0.41256
427.	RY*(17) C 20	0.00001	1.96948
428.	RY*(1) C 21	0.00614	1.02714
429.	RY*(2) C 21	0.00222	1.22294
430.	RY*(3) C 21	0.00071	1.56051
431.	RY*(4) C 21	0.00039	1.12193
432.	RY*(5) C 21	0.00030	0.73643
433.	RY*(6) C 21	0.00030	1.08039
434.	RY*(7) C 21	0.00016	2.68863
435.	RY*(8) C 21	0.00007	2.42626
436.	RY*(9) C 21	0.00004	2.15882
437.	RY*(10) C 21	0.00003	1.49154
438.	RY*(11) C 21	0.00000	0.44352
439.	RY*(12) C 21	0.00000	2.65989
440.	RY*(13) C 21	0.00001	2.06617
441.	RY*(14) C 21	0.00001	1.99545
442.	RY*(15) C 21	0.00001	1.38511
443.	RY*(16) C 21	0.00000	21.35269
444.	RY*(17) C 21	0.00000	1.63893
445.	RY*(1) C 22	0.00456	1.12022
446.	RY*(2) C 22	0.00247	1.23821

447.	RY*(3) C 22	0.00098	0.48749
448.	RY*(4) C 22	0.00055	0.91803
449.	RY*(5) C 22	0.00041	1.39142
450.	RY*(6) C 22	0.00029	0.99382
451.	RY*(7) C 22	0.00022	1.29839
452.	RY*(8) C 22	0.00009	2.15993
453.	RY*(9) C 22	0.00007	4.66908
454.	RY*(10) C 22	0.00007	2.37002
455.	RY*(11) C 22	0.00003	1.24244
456.	RY*(12) C 22	0.00003	2.71649
457.	RY*(13) C 22	0.00002	1.51676
458.	RY*(14) C 22	0.00003	0.65310
459.	RY*(15) C 22	0.00000	20.25183
460.	RY*(16) C 22	0.00000	2.76695
461.	RY*(17) C 22	0.00000	2.19400
462.	RY*(1) C 23	0.00245	-0.10786
463.	RY*(2) C 23	0.00199	0.45414
464.	RY*(3) C 23	0.00147	0.78052
465.	RY*(4) C 23	0.00073	0.71266
466.	RY*(5) C 23	0.00027	-0.58890
467.	RY*(6) C 23	0.00019	1.53768
468.	RY*(7) C 23	0.00012	-1.64475
469.	RY*(8) C 23	0.00009	0.77771
470.	RY*(9) C 23	0.00007	-5.61321
471.	RY*(10) C 23	0.00003	0.56305
472.	RY*(11) C 23	0.00002	-4.37769
473.	RY*(12) C 23	0.00003	1.83942
474.	RY*(13) C 23	0.00002	2.74207

475.	RY*(14) C 23	0.00000	22.28549
476.	RY*(15) C 23	0.00001	1.01113
477.	RY*(16) C 23	0.00001	0.99042
478.	RY*(17) C 23	0.00001	2.34635
479.	RY*(1) H 24	0.00228	0.63054
480.	RY*(2) H 24	0.00062	2.28618
481.	RY*(3) H 24	0.00046	1.61682
482.	RY*(4) H 24	0.00014	2.13034
483.	RY*(5) H 24	0.00007	2.56833
484.	RY*(1) H 25	0.00109	0.87100
485.	RY*(2) H 25	0.00024	1.98402
486.	RY*(3) H 25	0.00016	1.63618
487.	RY*(4) H 25	0.00011	1.97235
488.	RY*(5) H 25	0.00004	2.49805
489.	RY*(1) H 26	0.00048	0.76059
490.	RY*(2) H 26	0.00019	2.21785
491.	RY*(3) H 26	0.00017	1.57436
492.	RY*(4) H 26	0.00011	1.90975
493.	RY*(5) H 26	0.00003	-15.79138
494.	RY*(1) H 27	0.00048	0.70433
495.	RY*(2) H 27	0.00018	2.25229
496.	RY*(3) H 27	0.00017	1.50115
497.	RY*(4) H 27	0.00010	0.09243
498.	RY*(5) H 27	0.00003	2.44093
499.	RY*(1) H 28	0.00089	0.88112
500.	RY*(2) H 28	0.00022	1.90811
501.	RY*(3) H 28	0.00017	-1.65227
502.	RY*(4) H 28	0.00015	1.73729

503.	RY*(5) H 28	0.00005	2.50659
504.	RY*(1) H 29	0.00057	0.62412
505.	RY*(2) H 29	0.00016	1.60025
506.	RY*(3) H 29	0.00015	2.28361
507.	RY*(4) H 29	0.00010	2.74262
508.	RY*(5) H 29	0.00006	2.10938
509.	RY*(1) H 30	0.00062	0.89253
510.	RY*(2) H 30	0.00019	2.31473
511.	RY*(3) H 30	0.00018	1.58850
512.	RY*(4) H 30	0.00010	1.96286
513.	RY*(5) H 30	0.00004	2.44867
514.	RY*(1) H 31	0.00053	0.73163
515.	RY*(2) H 31	0.00018	2.24231
516.	RY*(3) H 31	0.00016	1.57349
517.	RY*(4) H 31	0.00011	1.96767
518.	RY*(5) H 31	0.00003	2.43039
519.	RY*(1) H 32	0.00103	1.17932
520.	RY*(2) H 32	0.00024	1.92003
521.	RY*(3) H 32	0.00015	1.61628
522.	RY*(4) H 32	0.00008	1.95922
523.	RY*(5) H 32	0.00005	2.42063
524.	RY*(1) H 33	0.00276	2.24780
525.	RY*(2) H 33	0.00094	2.09912
526.	RY*(3) H 33	0.00092	1.54408
527.	RY*(4) H 33	0.00016	2.47516
528.	RY*(1) H 34	0.00069	1.39147
529.	RY*(2) H 34	0.00029	0.17774
530.	RY*(3) H 34	0.00012	1.72545

531. RY*(4) H 34 0.00013 1.79998

532. RY*(5) H 34 0.00003 2.56387

533. RY*(1) H 35 0.00076 0.71442

534. RY*(2) H 35 0.00032 0.87404

535. RY*(3) H 35 0.00014 1.72916

536. RY*(4) H 35 0.00009 1.75411

537. RY*(5) H 35 0.00004 2.67200

538. RY*(1) H 36 0.00130 -15.74385

539. RY*(2) H 36 0.00021 -16.50317

540. RY*(3) H 36 0.00017 0.24009

541. RY*(4) H 36 0.00011 -2.16314

542. RY*(5) H 36 0.00004 1.74578

543. BD*(1) S 1 - O 2 0.13354 0.27194 252(r),544(g),552(v),89(g)
98(g),87(g),101(g),111(g)
91(g),551(v),497(r),108(g)
529(r),565(v),88(g),471(r)

544. BD*(1) S 1 - O 3 0.14250 0.27391 543(g),252(r),552(v),89(g)
87(g),125(g),529(r),128(g)
497(r),574(v),463(r),471(r)
127(g),126(g),91(g)

545. BD*(1) S 1 - N 6 0.25751 0.11411 497(r),88(g),529(r),87(g)
101(g),552(g),252(r),98(g)
560(v),573(v),462(v),235(v)
465(v),551(g),91(g),183(g)
477(v),471(v),95(g),469(v)
180(g),574(v),501(r),543(g)
534(r),463(v),237(v),466(v)

546. BD*(1) S 1 - C 16 0.20132 0.14437 88(g),575(v),562(v),571(v)

497(r),87(g),563(v),347(g)

529(r),544(g)

547. BD*(1) O 4 - C 17 0.01400 0.48590

548. BD*(2) O 4 - C 17 0.41288 -0.03151 560(v),142(g),362(g),368(g)

557(r),155(g)

549. BD*(1) O 5 - C 10 0.01753 0.34500

550. BD*(1) O 5 - H 33 0.07829 0.31716

551. BD*(1) N 6 - C 9 0.03003 0.34020

552. BD*(1) N 6 - C 23 0.02303 0.26855

553. BD*(1) N 7 - C 17 0.05832 0.43174

554. BD*(1) N 7 - C 18 0.04199 0.40019

555. BD*(1) N 7 - H 24 0.02067 0.37088

556. BD*(1) N 8 - C 18 0.02118 0.50468

557. BD*(2) N 8 - C 18 0.45013 -0.01621 583(v),578(v),210(g),379(g)

381(g),548(r),193(v)

558. BD*(1) N 8 - C 19 0.01265 0.52003

559. BD*(1) C 9 - C 10 0.03152 0.55622

560. BD*(2) C 9 - C 10 0.29001 -0.00314 564(v),548(v),545(v),552(v)

158(v),252(g),243(g)

561. BD*(1) C 9 - C 17 0.05583 0.42197

562. BD*(1) C 10 - C 11 0.03537 0.43640

563. BD*(1) C 11 - C 12 0.02372 0.53011

564. BD*(2) C 11 - C 12 0.35880 -0.00093 569(v),560(v),574(v),497(r)

278(g),462(r),529(r),235(r)

263(g),98(r),471(r),466(r)

279(g),252(v),501(r),142(r)

477(r),468(r),99(r),469(r)

579(r),541(r),194(r),101(r)

573(v)

565. BD*(1) C 11 - C 16 0.03137 0.51812

566. BD*(1) C 12 - C 13 0.01413 0.55091

567. BD*(1) C 12 - H 25 0.01334 0.41202

568. BD*(1) C 13 - C 14 0.01577 0.54246

569. BD*(2) C 13 - C 14 0.31669 -0.00025 564(v),574(v),312(g),295(g)

570. BD*(1) C 13 - H 26 0.01346 0.40198

571. BD*(1) C 14 - C 15 0.01626 0.54435

572. BD*(1) C 14 - H 27 0.01332 0.37632

573. BD*(1) C 15 - C 16 0.02180 -0.73332

574. BD*(2) C 15 - C 16 0.36149 0.00522 569(v),564(v),497(r),477(r)

529(r),235(r),329(g),462(r)

469(r),98(v),468(r),252(r)

466(r),587(r),541(r),501(v)

544(v),142(r),588(r),573(g)

194(r),579(r),348(g),99(v)

346(g),472(r),539(r),583(r)

237(r),470(r),369(r),585(r)

584(r),102(v),493(r),538(r)

465(r),101(v),545(v),474(r)

534(r),578(r),542(r),270(v)

231(r)

575. BD*(1) C 15 - H 28 0.01452 0.43209

576. BD*(1) C 18 - C 22 0.03250 0.50756

577. BD*(1) C 19 - C 20 0.02402 0.55129

578. BD*(2) C 19 - C 20 0.30631 -0.26483 142(r),235(r),462(r),497(r)

466(r),579(g),573(r),468(r)

99(r),501(r),529(r),471(r)

194(r),369(r),98(r),477(r)

472(r),541(r),102(r),252(r)

469(r),470(r),493(r),539(r)

538(r),584(v),237(r),585(r)

101(r),465(r),583(v),534(r)

476(r),231(r),234(r),270(r)

130(r),463(r),112(r),200(r)

392(r),195(r),373(r),533(r)

233(r),383(r),232(r),100(r)

286(r),242(r),267(r),588(r)

395(g),348(r),358(r),542(r)

191(r),365(r),370(r),199(r)

357(r),208(v),273(r),114(r)

268(r),190(r),464(r),506(v)

557(v),198(r),127(r),502(r)

279(r),586(r),330(r),230(r)

371(r),587(r),530(r),387(r)

372(r),479(r),413(g),589(r)

388(r),274(r),265(r),212(v)

281(r),299(r),398(g),535(r)

572(r),496(r),245(r),131(r)

287(r),576(r),251(r),451(r)

110(r),129(r),474(r),260(r)

236(r),95(r),253(r),368(r)

216(v),160(r),238(r),386(r)

256(r),180(r),334(r),298(r)

96(r),352(r),351(r),88(r)

239(r),87(r),288(r),499(r)

340(r),492(r),263(r),217(v)

385(r),338(r),382(r),467(r)

280(r),458(r),285(r),426(g)

345(r),536(r),417(g),92(r)

229(r),528(r),326(r),483(r)

226(r),500(r),177(r),581(g)

354(r),241(r),339(r),478(r)

228(r),509(v),133(r),109(r)

128(r),498(r),433(v),319(r)

246(r),147(r),266(r),255(r)

582(v),204(r),574(r),450(r)

367(r),405(g),188(r),449(r)

250(r),244(r),115(r),318(r)

473(r),197(r),327(r),590(r)

579. BD*(1) C 19 - H 29 0.02258 -0.55502

580. BD*(1) C 20 - C 21 0.01599 0.57932

581. BD*(1) C 20 - H 30 0.01338 0.42787

582. BD*(1) C 21 - C 22 0.01510 0.57170

583. BD*(2) C 21 - C 22 0.29681 -0.04684 462(r),497(r),589(r),529(r)

235(r),557(v),578(v),471(r)

142(r),466(r),98(r),468(r)

501(r),252(r),99(r),579(r)

573(r),477(r),194(r),101(r)

469(r),472(r),369(r),102(r)

541(r),465(r),237(r),493(r)

470(r),539(r),538(r),584(g)

585(g),534(r),476(r),231(r)

463(r),392(v),234(r),130(r)

270(r),112(r),383(v),200(r)

195(r),373(r),533(r),100(r)

286(r),233(r),232(r),242(r)

590(r),395(r),267(r),588(r)

591(r),191(r),542(r),348(r)

358(r),365(r),208(r),199(r)

370(r),357(r),464(r),114(r)

273(r),447(g),268(r),432(g)

190(r),198(r),438(g),506(r)

587(r),127(r),592(r),279(r)

502(r),586(r),330(r),371(r)

230(r),574(r),530(r),479(r)

449(g),387(v),572(r),458(g)

372(r),576(g),281(r),265(r)

274(r),388(v),299(r),535(r)

212(r),496(r),245(r)

584. BD*(1) C 21 - H 31 0.01418 -16.43355

585. BD*(1) C 22 - H 32 0.01495 -21.29388

586. BD*(1) C 23 - H 34 0.00655 3.03128

587. BD*(1) C 23 - H 35 0.01083 3.30650

588. BD*(1) C 23 - H 36 0.01541 2.67562

Total Lewis 167.10664 (97.1550%)

Valence non-Lewis 4.33159 (2.5184%)

Rydberg non-Lewis 0.56177 (0.3266%)

Total unit 1 172.00000 (100.0000%)

Charge unit 1 0.00000