Synthesis, Characterization, Antimicrobial, DFT and Molecular Docking Studies of novel Mn(II), Fe(III) and Cr(III) Complexes Incorporating 4-(2-hydroxyphenyl azo)-1-naphthol (Az)

Hany M. Abd El-Lateef[1,2*], Mai M. Khalaf[1,2], Amer A. Amer[2], Mahmoud Kandeel[3,4], Antar A. Abdelhamid[2, 5], Aly Abdou[2]

[1]Department of Chemistry, College of Science, King Faisal University, Al-Ahsa 31982, Saudi Arabia

[2] Department of Chemistry, Faculty of Science, Sohag University, Sohag 82524, Egypt

[3] Department of Biomedical Sciences, College of Veterinary Medicine, King Faisal University, 31982 Al-Ahsa, Saudi Arabia

[4] Department of Pharmacology, Faculty of Veterinary Medicine, Kafrelsheikh University, 33516 Kafrelsheikh, Egypt

[5] Chemistry Department, Faculty of Science, Albaha University, Albaha 1988, Saudi Arabia

1. Instruments for Characterization

The compositions of the complexes were determined using elemental analysis (for C, H, and N content), molar conductance (10^{-3} mol/L DMF and acetonitrile solution), thermal decomposition (TGA), magnetic measurements, infrared (IR) spectroscopy, and electronic spectra (10^{-3} mol/L acetonitrile solution). Elemental analysis was performed at the University of Cairo's Central Laboratory using a Perkin-Elmer 2408 analyzer. Infrared spectra of KBr pellets were obtained using a Shimadzu DR-8001 spectrometer and an infrared spectrometer. 1H-NMR spectra of DMSO-d6 were obtained using a Bruker DRX 400 MHz instrument with TMS as a reference. Mass spectra were carried out using Direct Inlet part to the mass analyzer in Thermo Scientific GCMS model ISQ. UV-Vis spectra were obtained using a Jenway UV-Vis spectrophotometer. Thermal decomposition (TGA) analysis was performed on the required compounds using a Shimadzu type 60 H analyzer. The molar conductance of a DMF and acetonitrile solution (10^{-3} mol/L) was measured using a JENWAY model 4320 electronic conductivity meter. The molar magnetic susceptibility of powdered materials was determined using a Bartington Susceptibility machine (model 4320). The stoichiometry of the compounds was determined using a continuous-variation spectrophotometric method.

List of Figures

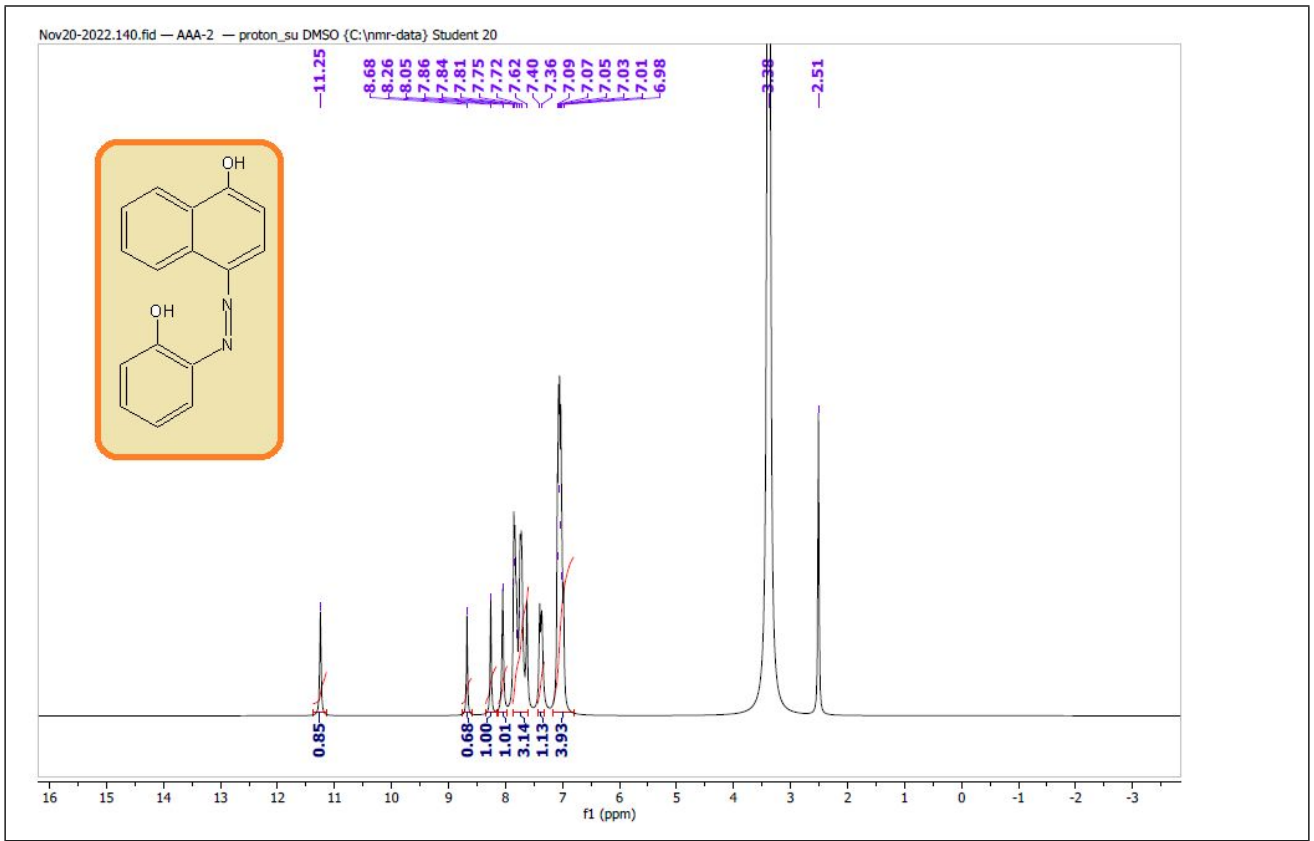

Figure (S1.a): ^{1}H-NMR of the AZ free ligand

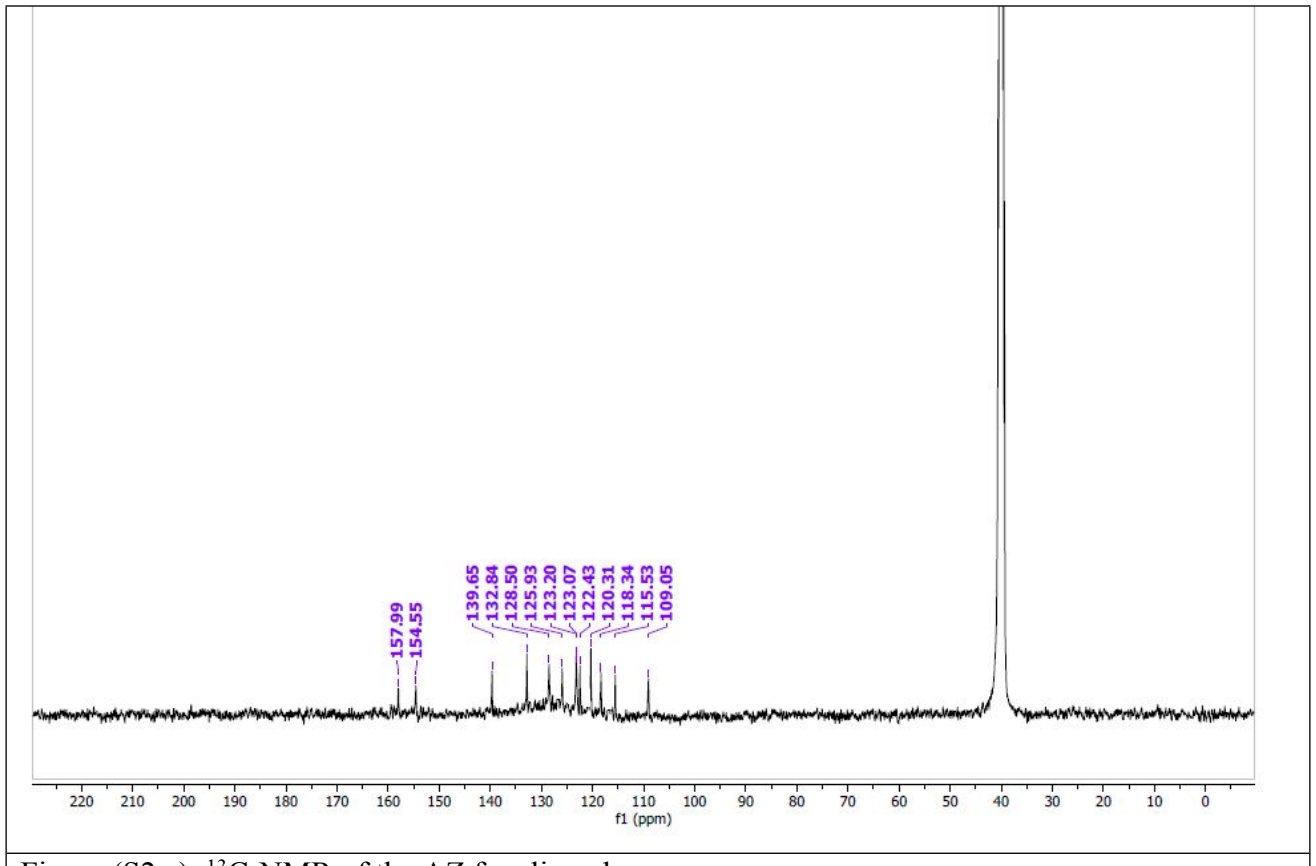

Figure (S2.a): ^{13}C-NMR of the AZ free ligand

List of Tables

Table (S1): Binding energy of the studied complexes based on DFT/B3LYP with cc-PVQZ basis set in ethanol as solvent.		
	ETotal	Binding
Az	-29028.12	
$CrAz_2$	-117049.33	-475.78
$MnAz_2$	-112342.85	-589.06
$FeAz_2$	-123228.14	-692.26
Cr(III)	-33569.30	
Mn(II)	-39198.19	
Fe(III)	-39531.63	
H_2O	-7249.68	
Cl(-1)	-17698.33	

Table (S2): Comparison between the minimum inhibition concentrations (MIC) of the current compounds with previously reported compounds in the literature survey against E. coli.

	E. coli (G-)		
		MIC	
1	**CrHPN**	**12.5**	**This work**
2	**MnHPN**	**6.25**	
3	**FeHPN**	**6.25**	
4	**Co:FMBT (1:1)**	100.00	**1**
5	**Co:FMBT (1:2)**	125.00	
6	**Ni:FMBT (1:1)**	125.00	
7	**Ni:FMBT (1:2)**	62.50	
8	**Pd:FMBT (1:1)**	125.00	
9	**Pd:FMBT (1:2)**	100.00	
10	**FeLQ**	25.50	2
11	**FeLB**	22.50	
12	**FeLI**	23.50	
13	**CuLQ**	21.50	3
14	**CuLB**	22.50	
15	**CuLI**	22.50	
16	**NiLQ**	35.50	4
17	**NiLB**	34.50	
18	**NiLI**	37.50	
19	**FeL**	50.00	5
20	**CoL**	55.00	
21	**NiL**	60.00	
22	**CuL**	50.00	
23	**ZnL**	70.00	
24	**3a**	25.20	6
25	**3b**	78.50	
26	**3c**	18.20	
27	**3e**	15.40	
28	**[Ag(3-Py-CHO)2NO3]**	62.50	7
29	**[Pd(HL)(Cl2)].H2O**	12.50	8
30	**[Pt(HL)(Cl2)].2H2O**	25.00	

[1] A. Skotnicka, E. Kolehmainen, P. Czeleń, A. Valkonen, R. Gawinecki, Synthesis and structural characterization of substituted 2-phenacylbenzoxazoles. Int. J. Mol. Sci. 14 (2013) 4444–4460. https://doi.org/10.3390/ijms14034444.

[2] M. Rahimizadeh, H. Eshghi, A. Shiri, Z. Ghadamyari, M.M. Matin, F. Oroojalian, P. Pordeli, $Fe(HSO_4)_3$ as an Efficient Catalyst for Diazotization and Diazo Coupling Reactions. J. Korean Chem. Soc. 56 (2012) 716-719. https://doi.org/10.5012/jkcs.2012.56.6.716.

[3] A. Shomali, H. Valizadeh, S. Noorshargh, New Generation of Nitrite Functionalized Star-like Polyvinyl Imidazolium Compound: Application as a Nitrosonium Source and Three Dimensional Nanocatalyst for the Synthesis of Azo Dyes. Lett. Org. Chem. 14 (2017) 14, 409–418. DOI: https://doi.org/10.2174/1570178614666170321125216.

[4] M. Akki, D.S. Reddy, K.S. Katagi, A. Kumar, H.C. Devarajegowda, V. Babagond, S. Mane, S.D. Joshi, Synthesis of coumarin-thioether conjugates as potential anti-tubercular agents: Their molecular docking and X-ray crystal studies. J. Mol. Struct. 1266 (2022) 133452. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.133452.

[5] F. Perveen, R. Qureshi, F.L. Ansari, S. Kalsoom, S. Ahmed, Investigations of drug–DNA interactions using molecular docking, cyclic voltammetry and UV–Vis spectroscopy. J. Mol. Struct. 1004 (2011) 67–73. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2011.07.027.

[6] X.-Y. Meng, H.-X. Zhang, M. Mezei, M. Cui, Molecular Docking: A Powerful Approach for Structure-Based Drug Discovery. Curr. Comput. Aided Drug Des. 7 (2011) 146–157. DOI: https://doi.org/10.2174/157340911795677602.

[7] M. Akki, D.S. Reddy, K.S. Katagi, A. Kumar, H.C. Devarajegowda, V. Babagond, S. Mane, S.D. Joshi, Synthesis of coumarin-thioether conjugates as potential anti-tubercular agents: Their molecular docking and X-ray crystal studies. J. Mol. Struct. 1266 (2022) 133452. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.133452.

[8] R.G. Deghadi, A.A. Abbas, G.G. Mohamed, Theoretical and experimental investigations of new bis(amino triazole) Schiff base ligand: Preparation of its UO_2(II), Er (III) and La (III) complexes, studying of their antibacterial, anticancer and molecular docking. Appl. Organomet. Chem. 35 (2021) e6292. https://doi.org/10.1002/aoc.6292.

Table (S3): The bond parameters (bond length, bond angles, and dihedral angles) of the free ligand and its metal complexes

Ligand		**Cr(III) complex**		**Mn(II) complex**		**Fe(III) complex**	
Bond Length	**value**	**Bond Length**	**value**	**Bond Length**	**value**	**Bond Length**	**value**
O(20)-H(31)	0.9495	Cl(66)-Cr(67)	2.2794	O(68)-Mn(69)	1.9131	Cl(66)-Fe(67)	2.2282
O(19)-H(32)	0.9501	O(65)-Cr(67)	1.9235	H(67)-O(68)	0.9892	O(65)-Fe(67)	1.8708
C(18)-H(30)	1.0952	O(62)-Cr(67)	1.9218	H(66)-O(68)	0.9888	O(62)-Fe(67)	1.8652
C(17)-H(29)	1.0962	O(62)-H(64)	0.9876	O(65)-Mn(69)	1.9237	O(62)-H(64)	0.9881
C(17)-C(18)	1.3857	O(62)-H(63)	0.9896	O(62)-Mn(69)	1.9247	O(62)-H(63)	0.9907
C(16)-H(28)	1.0948	O(50)-H(60)	1.0079	O(62)-H(64)	0.9879	O(50)-H(60)	1.0073
C(16)-C(18)	1.3943	C(49)-H(59)	1.0824	O(62)-H(63)	0.9866	C(49)-H(59)	1.0823
C(15)-O(19)	1.3618	C(48)-H(58)	1.0814	O(50)-H(60)	1.008	C(48)-H(58)	1.0825
C(15)-C(17)	1.4049	C(48)-C(49)	1.3368	C(49)-H(59)	1.0824	C(48)-C(49)	1.337
C(14)-H(27)	1.0977	C(47)-H(57)	1.0824	C(48)-H(58)	1.0827	C(47)-H(57)	1.0823
C(14)-C(16)	1.3866	C(47)-C(49)	1.4731	C(48)-C(49)	1.3369	C(47)-C(49)	1.4745
C(13)-C(15)	1.4126	C(46)-O(65)	1.3936	C(47)-H(57)	1.0823	C(46)-O(65)	1.3918
C(13)-C(14)	1.4013	C(46)-C(48)	1.4813	C(47)-C(49)	1.4737	C(46)-C(48)	1.4801
N(12)-C(13)	1.4422	C(45)-H(56)	1.0829	C(46)-O(65)	1.3918	C(45)-H(56)	1.0827
N(11)-N(12)	1.234	C(45)-C(47)	1.3371	C(46)-C(48)	1.4805	C(45)-C(47)	1.3379
C(10)-H(26)	1.0952	C(44)-C(46)	1.3524	C(45)-H(56)	1.0828	C(44)-C(46)	1.3511
C(9)-H(25)	1.0972	C(44)-C(45)	1.482	C(45)-C(47)	1.3375	C(44)-C(45)	1.4814
C(9)-C(10)	1.3696	N(43)-C(44)	1.4304	C(44)-C(46)	1.352	N(43)-C(44)	1.4314
C(8)-H(24)	1.0948	N(42)-Cr(67)	2.001	C(44)-C(45)	1.4819	N(42)-Fe(67)	1.9384
C(8)-C(10)	1.4111	N(42)-N(43)	1.2712	N(43)-C(44)	1.4313	N(42)-N(43)	1.2723
C(7)-H(23)	1.0962	C(41)-H(55)	1.0824	N(42)-Mn(69)	2.0063	C(41)-H(55)	1.0825
C(7)-C(8)	1.3692	C(40)-H(54)	1.0822	N(42)-N(43)	1.2716	C(40)-H(54)	1.0816
C(6)-N(11)	1.4418	C(40)-C(41)	1.3352	C(41)-H(55)	1.0824	C(40)-C(41)	1.3349
C(5)-H(22)	1.0977	C(39)-H(53)	1.0825	C(40)-H(54)	1.0816	C(39)-H(53)	1.0826
C(5)-C(6)	1.3798	C(39)-C(41)	1.4716	C(40)-C(41)	1.3352	C(39)-C(41)	1.4709
C(4)-C(9)	1.4216	C(38)-H(52)	1.0788	C(39)-H(53)	1.0826	C(38)-H(52)	1.0783
C(4)-C(6)	1.4355	C(38)-C(39)	1.3374	C(39)-C(41)	1.4716	C(38)-C(39)	1.3372
C(3)-H(21)	1.0965	C(37)-N(42)	1.4324	C(38)-H(52)	1.0789	C(37)-N(42)	1.4328
C(3)-C(5)	1.4062	C(36)-H(61)	1.0824	C(38)-C(39)	1.3373	C(36)-H(61)	1.0796
C(2)-C(4)	1.4136	C(36)-C(37)	1.3383	C(37)-N(42)	1.4328	C(36)-C(37)	1.3371
C(2)-C(7)	1.4206	C(35)-C(40)	1.4869	C(36)-H(61)	1.0821	C(35)-C(40)	1.4874
C(1)-O(20)	1.3647	C(35)-C(37)	1.4904	C(36)-C(37)	1.3386	C(35)-C(37)	1.4918
C(1)-C(3)	1.3818	C(34)-H(51)	1.083	C(35)-C(40)	1.4864	C(34)-H(51)	1.083
C(1)-C(2)	1.4337	C(34)-C(36)	1.4713	C(35)-C(37)	1.4903	C(34)-C(36)	1.4704
Bond Angles		C(33)-C(35)	1.3604	C(34)-H(51)	1.0829	C(33)-C(35)	1.3611
H(31)-O(20)-C(1)	108.0501	C(33)-C(38)	1.4922	C(34)-C(36)	1.4714	C(33)-C(38)	1.4928
H(32)-O(19)-C(15)	108.8189	C(32)-O(50)	1.3987	C(33)-C(35)	1.3603	C(32)-O(50)	1.399
H(30)-C(18)-C(17)	119.6629	C(32)-C(34)	1.3388	C(33)-C(38)	1.4921	C(32)-C(34)	1.3384
H(30)-C(18)-C(16)	119.7381	C(32)-C(33)	1.5016	C(32)-O(50)	1.3986	C(32)-C(33)	1.5027
C(17)-C(18)-C(16)	120.599	O(20)-H(30)	1.0079	C(32)-C(34)	1.3386	O(20)-H(30)	1.0075
H(29)-C(17)-C(18)	120.4956	O(19)-Cr(67)	1.9341	C(32)-C(33)	1.5014	O(19)-Fe(67)	1.885
H(29)-C(17)-C(15)	119.9881	C(18)-H(29)	1.0823	O(20)-H(30)	1.0076	C(18)-H(29)	1.0824
C(18)-C(17)-C(15)	119.5163	C(17)-H(28)	1.0827	O(19)-Mn(69)	1.9331	C(17)-H(28)	1.0826
H(28)-C(16)-C(18)	119.7716	C(17)-C(18)	1.3368	C(18)-H(29)	1.0824	C(17)-C(18)	1.3379
H(28)-C(16)-C(14)	119.7977	C(16)-H(27)	1.0824	C(17)-H(28)	1.0827	C(16)-H(27)	1.0822
C(18)-C(16)-C(14)	120.4307	C(16)-C(18)	1.4729	C(17)-C(18)	1.3367	C(16)-C(18)	1.4754

O(19)-C(15)-C(17)	115.3294	C(15)-O(19)	1.3926	C(16)-H(27)	1.0824	C(15)-O(19)	1.3908
O(19)-C(15)-C(13)	124.5944	C(15)-C(17)	1.4811	C(16)-C(18)	1.473	C(15)-C(17)	1.4803
C(17)-C(15)-C(13)	120.0762	C(14)-H(26)	1.0829	C(15)-O(19)	1.3942	C(14)-H(26)	1.0827
H(27)-C(14)-C(16)	119.4703	C(14)-C(16)	1.3372	C(15)-C(17)	1.481	C(14)-C(16)	1.3383
H(27)-C(14)-C(13)	120.4325	C(13)-C(15)	1.3504	C(14)-H(26)	1.0828	C(13)-C(15)	1.3437
C(16)-C(14)-C(13)	120.0971	C(13)-C(14)	1.4823	C(14)-C(16)	1.3372	C(13)-C(14)	1.4809
C(15)-C(13)-C(14)	119.2806	N(12)-C(13)	1.4288	C(13)-C(15)	1.3526	N(12)-C(13)	1.4259
C(15)-C(13)-N(12)	116.4941	N(11)-Cr(67)	2.0106	C(13)-C(14)	1.4822	N(11)-Fe(67)	1.9549
C(14)-C(13)-N(12)	124.2253	N(11)-N(12)	1.2712	N(12)-C(13)	1.4299	N(11)-N(12)	1.2717
C(13)-N(12)-N(11)	119.7143	C(10)-H(25)	1.0825	N(11)-Mn(69)	2.0009	C(10)-H(25)	1.0824
N(12)-N(11)-C(6)	120.2291	C(9)-H(24)	1.0823	N(11)-N(12)	1.2706	C(9)-H(24)	1.082
H(26)-C(10)-C(9)	120.3505	C(9)-C(10)	1.3352	C(10)-H(25)	1.0825	C(9)-C(10)	1.335
H(26)-C(10)-C(8)	119.1607	C(8)-H(23)	1.0826	C(9)-H(24)	1.0785	C(8)-H(23)	1.0826
C(9)-C(10)-C(8)	120.4888	C(8)-C(10)	1.4716	C(9)-C(10)	1.3351	C(8)-C(10)	1.4715
H(25)-C(9)-C(10)	119.6605	C(7)-H(22)	1.079	C(8)-H(23)	1.0826	C(7)-H(22)	1.0787
H(25)-C(9)-C(4)	119.6154	C(7)-C(8)	1.3375	C(8)-C(10)	1.4711	C(7)-C(8)	1.3376
C(10)-C(9)-C(4)	120.7241	C(6)-N(11)	1.4315	C(7)-H(22)	1.0787	C(6)-N(11)	1.4312
H(24)-C(8)-C(10)	119.3209	C(5)-H(31)	1.0832	C(7)-C(8)	1.3372	C(5)-H(31)	1.0819
H(24)-C(8)-C(7)	120.4939	C(5)-C(6)	1.3388	C(6)-N(11)	1.4328	C(5)-C(6)	1.3369
C(10)-C(8)-C(7)	120.1852	C(4)-C(9)	1.4855	C(5)-H(31)	1.0826	C(4)-C(9)	1.4868
H(23)-C(7)-C(8)	119.9077	C(4)-C(6)	1.4884	C(5)-C(6)	1.3383	C(4)-C(6)	1.489
H(23)-C(7)-C(2)	119.6249	C(3)-H(21)	1.0829	C(4)-C(9)	1.4851	C(3)-H(21)	1.0829
C(8)-C(7)-C(2)	120.4673	C(3)-C(5)	1.4715	C(4)-C(6)	1.4904	C(3)-C(5)	1.4714
N(11)-C(6)-C(5)	123.4007	C(2)-C(4)	1.3601	C(3)-H(21)	1.0829	C(2)-C(4)	1.3599
N(11)-C(6)-C(4)	116.0376	C(2)-C(7)	1.4922	C(3)-C(5)	1.4706	C(2)-C(7)	1.4924
C(5)-C(6)-C(4)	120.5617	C(1)-O(20)	1.3986	C(2)-C(4)	1.361	C(1)-O(20)	1.3988
H(22)-C(5)-C(6)	121.4636	C(1)-C(3)	1.3392	C(2)-C(7)	1.4925	C(1)-C(3)	1.3392
H(22)-C(5)-C(3)	117.8788	C(1)-C(2)	1.5017	C(1)-O(20)	1.3988	C(1)-C(2)	1.5023
C(6)-C(5)-C(3)	120.6576	**Bond Angles**		C(1)-C(3)	1.3384	**Bond Angles**	
C(9)-C(4)-C(6)	122.2952	Cl(66)-Cr(67)-O(65)	89.345	C(1)-C(2)	1.5022	Cl(66)-Fe(67)-O(65)	74.7263
C(9)-C(4)-C(2)	118.6136	Cl(66)-Cr(67)-O(62)	88.5937	**Bond Angles**		Cl(66)-Fe(67)-O(62)	71.548
C(6)-C(4)-C(2)	119.0912	Cl(66)-Cr(67)-N(42)	88.9102	O(68)-Mn(69)-O(65)	89.7527	Cl(66)-Fe(67)-N(42)	90.1183
H(21)-C(3)-C(5)	118.8444	Cl(66)-Cr(67)-O(19)	178.1789	O(68)-Mn(69)-O(62)	89.1426	Cl(66)-Fe(67)-O(19)	163.77
H(21)-C(3)-C(1)	121.2686	Cl(66)-Cr(67)-N(11)	91.5894	O(68)-Mn(69)-N(42)	90.7184	Cl(66)-Fe(67)-N(11)	108.9723
C(5)-C(3)-C(1)	119.8871	O(65)-Cr(67)-O(62)	177.9297	O(68)-Mn(69)-O(19)	179.5957	O(65)-Fe(67)-O(62)	144.0427
C(4)-C(2)-C(7)	119.5209	O(65)-Cr(67)-N(42)	89.8324	O(68)-Mn(69)-N(11)	89.3339	O(65)-Fe(67)-N(42)	90.7546
C(4)-C(2)-C(1)	118.6178	O(65)-Cr(67)-O(19)	90.0151	O(65)-Mn(69)-O(62)	178.8762	O(65)-Fe(67)-O(19)	110.6881
C(7)-C(2)-C(1)	121.8613	O(65)-Cr(67)-N(11)	89.2169	O(65)-Mn(69)-N(42)	89.5823	O(65)-Fe(67)-N(11)	85.751
O(20)-C(1)-C(3)	122.3321	O(62)-Cr(67)-N(42)	90.3206	O(65)-Mn(69)-O(19)	89.94	O(62)-Fe(67)-N(42)	101.3284
O(20)-C(1)-C(2)	116.4833	O(62)-Cr(67)-O(19)	92.0511	O(65)-Mn(69)-N(11)	88.918	O(62)-Fe(67)-O(19)	105.1625
C(3)-C(1)-C(2)	121.1846	O(62)-Cr(67)-N(11)	90.6479	O(62)-Mn(69)-N(42)	90.2254	O(62)-Fe(67)-N(11)	93.5875
Dihedral Angles		N(42)-Cr(67)-O(19)	89.383	O(62)-Mn(69)-O(19)	91.1657	N(42)-Fe(67)-O(19)	74.7676
C(15)-C(17)-C(18)-C(16)	-0.0044	N(42)-Cr(67)-N(11)	178.9209	O(62)-Mn(69)-N(11)	91.2752	N(42)-Fe(67)-N(11)	158.8249
C(15)-C(17)-C(18)-H(30)	-179.9962	O(19)-Cr(67)-N(11)	90.1066	N(42)-Mn(69)-O(19)	89.5421	O(19)-Fe(67)-N(11)	86.9391
H(29)-C(17)-C(18)-C(16)	179.9948	Cr(67)-O(65)-C(46)	116.3996	N(42)-Mn(69)-N(11)	178.4992	Fe(67)-O(65)-C(46)	113.8384
H(29)-C(17)-C(18)-H(30)	0.003	Cr(67)-O(62)-H(64)	109.3842	O(19)-Mn(69)-N(11)	90.3976	Fe(67)-O(62)-H(64)	106.804
C(14)-C(16)-C(18)-C(17)	0.0052	Cr(67)-O(62)-H(63)	107.858	Mn(69)-O(68)-H(67)	107.368	Fe(67)-O(62)-H(63)	107.4385
C(14)-C(16)-C(18)-H(30)	179.997	H(64)-O(62)-H(63)	105.3912	Mn(69)-O(68)-H(66)	106.8329	H(64)-O(62)-H(63)	104.0478
H(28)-C(16)-C(18)-C(17)	179.9974	H(60)-O(50)-C(32)	114.9478	H(67)-O(68)-H(66)	105.2546	H(60)-O(50)-C(32)	115.2868
H(28)-C(16)-C(18)-H(30)	-0.0108	H(59)-C(49)-C(48)	120.2013	Mn(69)-O(65)-C(46)	116.244	H(59)-C(49)-C(48)	120.1722
C(13)-C(15)-O(19)-H(32)	-0.0291	H(59)-C(49)-C(47)	119.8797	Mn(69)-O(62)-H(64)	108.3596	H(59)-C(49)-C(47)	119.8962
C(17)-C(15)-O(19)-H(32)	179.975	C(48)-C(49)-C(47)	119.9167	Mn(69)-O(62)-H(63)	108.6036	C(48)-C(49)-C(47)	119.9272
C(13)-C(15)-C(17)-C(18)	0.0039	H(58)-C(48)-C(49)	119.5573	H(64)-O(62)-H(63)	104.6257	H(58)-C(48)-C(49)	119.773
C(13)-C(15)-C(17)-H(29)	-179.9953	H(58)-C(48)-C(46)	119.8136	H(60)-O(50)-C(32)	114.9085	H(58)-C(48)-C(46)	119.7645

O(19)-C(15)-C(17)-C(18)	180	C(49)-C(48)-C(46)	120.6291	H(59)-C(49)-C(48)	120.2001	C(49)-C(48)-C(46)	120.4623
O(19)-C(15)-C(17)-H(29)	0.0008	H(57)-C(47)-C(49)	119.8663	H(59)-C(49)-C(47)	119.8842	H(57)-C(47)-C(49)	119.8419
C(13)-C(14)-C(16)-C(18)	-0.0054	H(57)-C(47)-C(45)	120.1958	C(48)-C(49)-C(47)	119.9147	H(57)-C(47)-C(45)	120.17
C(13)-C(14)-C(16)-H(28)	-179.9976	C(49)-C(47)-C(45)	119.9334	H(58)-C(48)-C(49)	119.7808	C(49)-C(47)-C(45)	119.9814
H(27)-C(14)-C(16)-C(18)	-180	O(65)-C(46)-C(48)	117.566	H(58)-C(48)-C(46)	119.6735	O(65)-C(46)-C(48)	118.0448
H(27)-C(14)-C(16)-H(28)	0.0078	O(65)-C(46)-C(44)	122.8463	C(49)-C(48)-C(46)	120.5448	O(65)-C(46)-C(44)	122.0893
N(12)-C(13)-C(15)-C(17)	-179.9952	C(48)-C(46)-C(44)	119.5149	H(57)-C(47)-C(49)	119.8512	C(48)-C(46)-C(44)	119.7132
N(12)-C(13)-C(15)-O(19)	0.0091	H(56)-C(45)-C(47)	119.596	H(57)-C(47)-C(45)	120.1922	H(56)-C(45)-C(47)	119.705
C(14)-C(13)-C(15)-C(17)	-0.0041	H(56)-C(45)-C(44)	119.6968	C(49)-C(47)-C(45)	119.9538	H(56)-C(45)-C(44)	119.7301
C(14)-C(13)-C(15)-O(19)	-179.9998	C(47)-C(45)-C(44)	120.707	O(65)-C(46)-C(48)	117.4855	C(47)-C(45)-C(44)	120.5648
N(12)-C(13)-C(14)-C(16)	179.9952	C(46)-C(44)-C(45)	119.2737	O(65)-C(46)-C(44)	122.7585	C(46)-C(44)-C(45)	119.303
N(12)-C(13)-C(14)-H(27)	-0.0102	C(46)-C(44)-N(43)	123.2844	C(48)-C(46)-C(44)	119.6855	C(46)-C(44)-N(43)	122.5354
C(15)-C(13)-C(14)-C(16)	0.0049	C(45)-C(44)-N(43)	117.1462	H(56)-C(45)-C(47)	119.6119	C(45)-C(44)-N(43)	117.8158
C(15)-C(13)-C(14)-H(27)	179.9994	C(44)-N(43)-N(42)	125.1601	H(56)-C(45)-C(44)	119.6994	C(44)-N(43)-N(42)	123.668
N(11)-N(12)-C(13)-C(14)	0.051	Cr(67)-N(42)-N(43)	120.6673	C(47)-C(45)-C(44)	120.6884	Fe(67)-N(42)-N(43)	120.1676
N(11)-N(12)-C(13)-C(15)	-179.9583	Cr(67)-N(42)-C(37)	121.4338	C(46)-C(44)-C(45)	119.2017	Fe(67)-N(42)-C(37)	121.0363
C(6)-N(11)-N(12)-C(13)	179.9964	N(43)-N(42)-C(37)	117.8395	C(46)-C(44)-N(43)	123.254	N(43)-N(42)-C(37)	118.7947
C(4)-C(9)-C(10)-C(8)	0.0032	H(55)-C(41)-C(40)	120.1347	C(45)-C(44)-N(43)	117.2699	H(55)-C(41)-C(40)	120.142
C(4)-C(9)-C(10)-H(26)	-179.995	H(55)-C(41)-C(39)	119.7741	C(44)-N(43)-N(42)	125.1607	H(55)-C(41)-C(39)	119.7507
H(25)-C(9)-C(10)-C(8)	179.9969	C(40)-C(41)-C(39)	120.0869	Mn(69)-N(42)-N(43)	120.5497	C(40)-C(41)-C(39)	120.1039
H(25)-C(9)-C(10)-H(26)	-0.0012	H(54)-C(40)-C(41)	118.89	Mn(69)-N(42)-C(37)	121.5983	H(54)-C(40)-C(41)	118.6915
C(7)-C(8)-C(10)-C(9)	-0.0046	H(54)-C(40)-C(35)	120.6236	N(43)-N(42)-C(37)	117.7916	H(54)-C(40)-C(35)	120.791
C(7)-C(8)-C(10)-H(26)	179.9936	C(41)-C(40)-C(35)	120.4864	H(55)-C(41)-C(40)	120.134	C(41)-C(40)-C(35)	120.5152
H(24)-C(8)-C(10)-C(9)	179.9989	H(53)-C(39)-C(41)	119.5656	H(55)-C(41)-C(39)	119.7607	H(53)-C(39)-C(41)	119.5655
H(24)-C(8)-C(10)-H(26)	-0.0029	H(53)-C(39)-C(38)	120.0916	C(40)-C(41)-C(39)	120.0946	H(53)-C(39)-C(38)	120.089
C(2)-C(7)-C(8)-C(10)	0.0058	C(41)-C(39)-C(38)	120.3358	H(54)-C(40)-C(41)	118.8317	C(41)-C(39)-C(38)	120.3416
C(2)-C(7)-C(8)-H(24)	-179.9977	H(52)-C(38)-C(39)	117.5795	H(54)-C(40)-C(35)	120.669	H(52)-C(38)-C(39)	117.3864
H(23)-C(7)-C(8)-C(10)	179.9975	H(52)-C(38)-C(33)	121.8448	C(41)-C(40)-C(35)	120.4917	H(52)-C(38)-C(33)	122.0137
H(23)-C(7)-C(8)-H(24)	-0.006	C(39)-C(38)-C(33)	120.558	H(53)-C(39)-C(41)	119.5761	C(39)-C(38)-C(33)	120.591
C(4)-C(6)-N(11)-N(12)	179.8859	N(42)-C(37)-C(36)	119.598	H(53)-C(39)-C(38)	120.0925	N(42)-C(37)-C(36)	119.6227
C(5)-C(6)-N(11)-N(12)	-0.1306	N(42)-C(37)-C(35)	120.654	C(41)-C(39)-C(38)	120.319	N(42)-C(37)-C(35)	120.7777
C(3)-C(5)-C(6)-C(4)	-0.0015	C(36)-C(37)-C(35)	119.5357	H(52)-C(38)-C(39)	117.5907	C(36)-C(37)-C(35)	119.58
C(3)-C(5)-C(6)-N(11)	-179.9843	H(61)-C(36)-C(37)	120.469	H(52)-C(38)-C(33)	121.8385	H(61)-C(36)-C(37)	120.5852
H(22)-C(5)-C(6)-C(4)	179.9977	H(61)-C(36)-C(34)	118.9842	C(39)-C(38)-C(33)	120.5556	H(61)-C(36)-C(34)	118.727
H(22)-C(5)-C(6)-N(11)	0.0148	C(37)-C(36)-C(34)	120.5457	N(42)-C(37)-C(36)	119.6413	C(37)-C(36)-C(34)	120.663
C(2)-C(4)-C(9)-C(10)	-0.003	C(40)-C(35)-C(37)	120.1459	N(42)-C(37)-C(35)	120.7133	C(40)-C(35)-C(37)	120.1708
C(2)-C(4)-C(9)-H(25)	-179.9968	C(40)-C(35)-C(33)	119.7465	C(36)-C(37)-C(35)	119.4752	C(40)-C(35)-C(33)	119.7108
C(6)-C(4)-C(9)-C(10)	-179.9984	C(37)-C(35)-C(33)	120.0893	H(61)-C(36)-C(37)	120.523	C(37)-C(35)-C(33)	120.1044
C(6)-C(4)-C(9)-H(25)	0.0079	H(51)-C(34)-C(36)	118.9444	H(61)-C(36)-C(34)	118.9415	H(51)-C(34)-C(36)	118.8794
C(2)-C(4)-C(6)-C(5)	0.0059	H(51)-C(34)-C(32)	120.0586	C(37)-C(36)-C(34)	120.5286	H(51)-C(34)-C(32)	120.0469
C(2)-C(4)-C(6)-N(11)	179.99	C(36)-C(34)-C(32)	120.9693	C(40)-C(35)-C(37)	120.1688	C(36)-C(34)-C(32)	121.0526
C(9)-C(4)-C(6)-C(5)	-179.9987	C(35)-C(33)-C(38)	118.7694	C(40)-C(35)-C(33)	119.7325	C(35)-C(33)-C(38)	118.7268
C(9)-C(4)-C(6)-N(11)	-0.0147	C(35)-C(33)-C(32)	119.2159	C(37)-C(35)-C(33)	120.0669	C(35)-C(33)-C(32)	119.2047
C(1)-C(3)-C(5)-C(6)	-0.0046	C(38)-C(33)-C(32)	121.9748	H(51)-C(34)-C(36)	118.942	C(38)-C(33)-C(32)	122.0556
C(1)-C(3)-C(5)-H(22)	179.9962	O(50)-C(32)-C(34)	117.4363	H(51)-C(34)-C(32)	120.0615	O(50)-C(32)-C(34)	117.2542
H(21)-C(3)-C(5)-C(6)	-179.9996	O(50)-C(32)-C(33)	123.1914	C(36)-C(34)-C(32)	120.9524	O(50)-C(32)-C(33)	123.3718
H(21)-C(3)-C(5)-H(22)	0.0013	C(34)-C(32)-C(33)	119.371	C(35)-C(33)-C(38)	118.7919	C(34)-C(32)-C(33)	119.3701
C(1)-C(2)-C(4)-C(6)	-0.0043	H(30)-O(20)-C(1)	114.9208	C(35)-C(33)-C(32)	119.2212	H(30)-O(20)-C(1)	115.0838
C(1)-C(2)-C(4)-C(9)	-179.9998	Cr(67)-O(19)-C(15)	119.0678	C(38)-C(33)-C(32)	121.9337	Fe(67)-O(19)-C(15)	115.4443
C(7)-C(2)-C(4)-C(6)	179.9997	H(29)-C(18)-C(17)	120.2228	O(50)-C(32)-C(34)	117.4695	H(29)-C(18)-C(17)	120.1982
C(7)-C(2)-C(4)-C(9)	0.0042	H(29)-C(18)-C(16)	119.9025	O(50)-C(32)-C(33)	123.1755	H(29)-C(18)-C(16)	119.8786
C(1)-C(2)-C(7)-C(8)	179.9984	C(17)-C(18)-C(16)	119.8742	C(34)-C(32)-C(33)	119.3547	C(17)-C(18)-C(16)	119.9208
C(1)-C(2)-C(7)-H(23)	0.0068	H(28)-C(17)-C(18)	119.7222	H(30)-O(20)-C(1)	115.1596	H(28)-C(17)-C(18)	119.8695
C(4)-C(2)-C(7)-C(8)	-0.0057	H(28)-C(17)-C(15)	119.6346	Mn(69)-O(19)-C(15)	118.2087	H(28)-C(17)-C(15)	119.8077

C(4)-C(2)-C(7)-H(23)	-179.9973	C(18)-C(17)-C(15)	120.6422	H(29)-C(18)-C(17)	120.2093	C(18)-C(17)-C(15)	120.322
C(2)-C(1)-O(20)-H(31)	-179.9896	H(27)-C(16)-C(18)	119.878	H(29)-C(18)-C(16)	119.8916	H(27)-C(16)-C(18)	119.863
C(3)-C(1)-O(20)-H(31)	0.0176	H(27)-C(16)-C(14)	120.2081	C(17)-C(18)-C(16)	119.8985	H(27)-C(16)-C(14)	120.1856
C(2)-C(1)-C(3)-C(5)	0.0062	C(18)-C(16)-C(14)	119.9114	H(28)-C(17)-C(18)	119.7239	C(18)-C(16)-C(14)	119.9456
C(2)-C(1)-C(3)-H(21)	-179.999	O(19)-C(15)-C(17)	117.0507	H(28)-C(17)-C(15)	119.6187	O(19)-C(15)-C(17)	118.6547
O(20)-C(1)-C(3)-C(5)	179.9986	O(19)-C(15)-C(13)	123.3288	C(18)-C(17)-C(15)	120.6561	O(19)-C(15)-C(13)	121.4124
O(20)-C(1)-C(3)-H(21)	-0.0066	C(17)-C(15)-C(13)	119.5958	H(27)-C(16)-C(18)	119.8654	C(17)-C(15)-C(13)	119.8125
C(3)-C(1)-C(2)-C(7)	179.9942	H(26)-C(14)-C(16)	119.5755	H(27)-C(16)-C(14)	120.2008	H(26)-C(14)-C(16)	119.7884
C(3)-C(1)-C(2)-C(4)	-0.0017	H(26)-C(14)-C(13)	119.6778	C(18)-C(16)-C(14)	119.9314	H(26)-C(14)-C(13)	119.8177
O(20)-C(1)-C(2)-C(7)	0.0014	C(16)-C(14)-C(13)	120.7461	O(19)-C(15)-C(17)	117.0414	C(16)-C(14)-C(13)	120.3931
O(20)-C(1)-C(2)-C(4)	-179.9945	C(15)-C(13)-C(14)	119.2222	O(19)-C(15)-C(13)	123.383	C(15)-C(13)-C(14)	119.5752
		C(15)-C(13)-N(12)	123.4595	C(17)-C(15)-C(13)	119.5482	C(15)-C(13)-N(12)	121.6129
		C(14)-C(13)-N(12)	117.0019	H(26)-C(14)-C(16)	119.5789	C(14)-C(13)-N(12)	118.3655
		C(13)-N(12)-N(11)	125.9684	H(26)-C(14)-C(13)	119.6797	C(13)-N(12)-N(11)	123.6942
		Cr(67)-N(11)-N(12)	121.6602	C(16)-C(14)-C(13)	120.7412	Fe(67)-N(11)-N(12)	121.1678
		Cr(67)-N(11)-C(6)	121.0832	C(15)-C(13)-C(14)	119.2156	Fe(67)-N(11)-C(6)	120.6264
		N(12)-N(11)-C(6)	117.2556	C(15)-C(13)-N(12)	123.465	N(12)-N(11)-C(6)	117.8456
		H(25)-C(10)-C(9)	120.1306	C(14)-C(13)-N(12)	117.029	H(25)-C(10)-C(9)	120.1324
		H(25)-C(10)-C(8)	119.7692	C(13)-N(12)-N(11)	125.3502	H(25)-C(10)-C(8)	119.7797
		C(9)-C(10)-C(8)	120.0954	Mn(69)-N(11)-N(12)	122.0391	C(9)-C(10)-C(8)	120.0814
		H(24)-C(9)-C(10)	118.9773	Mn(69)-N(11)-C(6)	119.556	H(24)-C(9)-C(10)	118.8653
		H(24)-C(9)-C(4)	120.5611	N(12)-N(11)-C(6)	118.2929	H(24)-C(9)-C(4)	120.6881
		C(10)-C(9)-C(4)	120.4586	H(25)-C(10)-C(9)	120.1509	C(10)-C(9)-C(4)	120.4369
		H(23)-C(8)-C(10)	119.5794	H(25)-C(10)-C(8)	119.7673	H(23)-C(8)-C(10)	119.5497
		H(23)-C(8)-C(7)	120.0793	C(9)-C(10)-C(8)	120.0817	H(23)-C(8)-C(7)	120.0873
		C(10)-C(8)-C(7)	120.3325	H(24)-C(9)-C(10)	118.7855	C(10)-C(8)-C(7)	120.3584
		H(22)-C(7)-C(8)	117.5988	H(24)-C(9)-C(4)	120.6514	H(22)-C(7)-C(8)	117.5211
		H(22)-C(7)-C(2)	121.8446	C(10)-C(9)-C(4)	120.5507	H(22)-C(7)-C(2)	121.901
		C(8)-C(7)-C(2)	120.54	H(23)-C(8)-C(10)	119.5856	C(8)-C(7)-C(2)	120.5608
		N(11)-C(6)-C(5)	119.5361	H(23)-C(8)-C(7)	120.1079	N(11)-C(6)-C(5)	119.7103
		N(11)-C(6)-C(4)	120.6784	C(10)-C(8)-C(7)	120.3061	N(11)-C(6)-C(4)	120.4716
		C(5)-C(6)-C(4)	119.621	H(22)-C(7)-C(8)	117.5007	C(5)-C(6)-C(4)	119.8181
		H(31)-C(5)-C(6)	120.2959	H(22)-C(7)-C(2)	121.9347	H(31)-C(5)-C(6)	120.4872
		H(31)-C(5)-C(3)	119.1898	C(8)-C(7)-C(2)	120.5456	H(31)-C(5)-C(3)	119.031
		C(6)-C(5)-C(3)	120.468	N(11)-C(6)-C(5)	119.2035	C(6)-C(5)-C(3)	120.453
		C(9)-C(4)-C(6)	120.0532	N(11)-C(6)-C(4)	121.2036	C(9)-C(4)-C(6)	120.0352
		C(9)-C(4)-C(2)	119.8241	C(5)-C(6)-C(4)	119.5895	C(9)-C(4)-C(2)	119.8495
		C(6)-C(4)-C(2)	120.0774	H(31)-C(5)-C(6)	120.4755	C(6)-C(4)-C(2)	120.0876
		H(21)-C(3)-C(5)	118.9526	H(31)-C(5)-C(3)	118.8752	H(21)-C(3)-C(5)	118.9104
		H(21)-C(3)-C(1)	120.0669	C(6)-C(5)-C(3)	120.6474	H(21)-C(3)-C(1)	120.044
		C(5)-C(3)-C(1)	120.9372	C(9)-C(4)-C(6)	120.2694	C(5)-C(3)-C(1)	121.0233
		C(4)-C(2)-C(7)	118.7419	C(9)-C(4)-C(2)	119.6676	C(4)-C(2)-C(7)	118.6895
		C(4)-C(2)-C(1)	119.2063	C(6)-C(4)-C(2)	120.0628	C(4)-C(2)-C(1)	119.1765
		C(7)-C(2)-C(1)	121.9976	H(21)-C(3)-C(5)	118.9245	C(7)-C(2)-C(1)	122.1121
		O(20)-C(1)-C(3)	117.4555	H(21)-C(3)-C(1)	120.054	O(20)-C(1)-C(3)	117.3591
		O(20)-C(1)-C(2)	123.1734	C(5)-C(3)-C(1)	121.0129	O(20)-C(1)-C(2)	123.2395
		C(3)-C(1)-C(2)	119.3704	C(4)-C(2)-C(7)	118.7432	C(3)-C(1)-C(2)	119.3937
		Dihedral Angles		C(4)-C(2)-C(1)	119.2398	**Dihedral Angles**	
		C(46)-O(65)-Cr(67)-N(11)	131.88	C(7)-C(2)-C(1)	122.0105	C(46)-O(65)-Fe(67)-N(11)	106.3112
		C(46)-O(65)-Cr(67)-O(19)	41.7735	O(20)-C(1)-C(3)	117.3183	C(46)-O(65)-Fe(67)-O(19)	21.204
		C(46)-O(65)-Cr(67)-N(42)	-47.6094	O(20)-C(1)-C(2)	123.2873	C(46)-O(65)-Fe(67)-N(42)	-52.7806
		C(46)-O(65)-Cr(67)-O(62)	-141.851	C(3)-C(1)-C(2)	119.3785	C(46)-O(65)-Fe(67)-O(62)	-163.4344
		C(46)-O(65)-Cr(67)-Cl(66)	-136.5214	**Dihedral Angles**		C(46)-O(65)-Fe(67)-Cl(66)	-142.6971
		H(63)-O(62)-Cr(67)-N(11)	14.9145	H(66)-O(68)-Mn(69)-N(11)	120.689	H(63)-O(62)-Fe(67)-N(11)	14.1734

		H(63)-O(62)-Cr(67)-O(19)	105.0444	H(66)-O(68)-Mn(69)-O(19)	72.2968	H(63)-O(62)-Fe(67)-O(19)	101.9702
		H(63)-O(62)-Cr(67)-N(42)	-165.5615	H(66)-O(68)-Mn(69)-N(42)	-57.811	H(63)-O(62)-Fe(67)-N(42)	179.0655
		H(63)-O(62)-Cr(67)-O(65)	-71.3287	H(66)-O(68)-Mn(69)-O(62)	-148.0257	H(63)-O(62)-Fe(67)-O(65)	-73.5343
		H(63)-O(62)-Cr(67)-Cl(66)	-76.6595	H(66)-O(68)-Mn(69)-O(65)	31.7682	H(63)-O(62)-Fe(67)-Cl(66)	-94.6399
		H(64)-O(62)-Cr(67)-N(11)	-99.2249	H(67)-O(68)-Mn(69)-N(11)	-126.8135	H(64)-O(62)-Fe(67)-N(11)	-96.9659
		H(64)-O(62)-Cr(67)-O(19)	-9.095	H(67)-O(68)-Mn(69)-O(19)	-175.2057	H(64)-O(62)-Fe(67)-O(19)	-9.169
		H(64)-O(62)-Cr(67)-N(42)	80.2991	H(67)-O(68)-Mn(69)-N(42)	54.6865	H(64)-O(62)-Fe(67)-N(42)	67.9262
		H(64)-O(62)-Cr(67)-O(65)	174.5319	H(67)-O(68)-Mn(69)-O(62)	-35.5281	H(64)-O(62)-Fe(67)-O(65)	175.3264
		H(64)-O(62)-Cr(67)-Cl(66)	169.2011	H(67)-O(68)-Mn(69)-O(65)	144.2657	H(64)-O(62)-Fe(67)-Cl(66)	154.2208
		C(46)-C(48)-C(49)-C(47)	0.8486	C(46)-O(65)-Mn(69)-N(11)	131.5251	C(46)-C(48)-C(49)-C(47)	1.2477
		C(46)-C(48)-C(49)-H(59)	-179.7019	C(46)-O(65)-Mn(69)-O(19)	41.1262	C(46)-C(48)-C(49)-H(59)	-179.5164
		H(58)-C(48)-C(49)-C(47)	-179.1917	C(46)-O(65)-Mn(69)-N(42)	-48.4163	H(58)-C(48)-C(49)-C(47)	-178.899
		H(58)-C(48)-C(49)-H(59)	0.2579	C(46)-O(65)-Mn(69)-O(62)	-128.5681	H(58)-C(48)-C(49)-H(59)	0.337
		C(45)-C(47)-C(49)-C(48)	0.4586	C(46)-O(65)-Mn(69)-O(68)	-139.1365	C(45)-C(47)-C(49)-C(48)	0.5303
		C(45)-C(47)-C(49)-H(59)	-178.9927	H(63)-O(62)-Mn(69)-N(11)	3.6704	C(45)-C(47)-C(49)-H(59)	-178.7077
		H(57)-C(47)-C(49)-C(48)	179.685	H(63)-O(62)-Mn(69)-O(19)	94.0942	H(57)-C(47)-C(49)-C(48)	179.5829
		H(57)-C(47)-C(49)-H(59)	0.2337	H(63)-O(62)-Mn(69)-N(42)	-176.3592	H(57)-C(47)-C(49)-H(59)	0.3449
		C(44)-C(46)-O(65)-Cr(67)	36.9544	H(63)-O(62)-Mn(69)-O(65)	-96.2136	C(44)-C(46)-O(65)-Fe(67)	40.8314
		C(48)-C(46)-O(65)-Cr(67)	-146.1671	H(63)-O(62)-Mn(69)-O(68)	-85.6441	C(48)-C(46)-O(65)-Fe(67)	-143.6759
		C(44)-C(46)-C(48)-C(49)	-1.8439	H(64)-O(62)-Mn(69)-N(11)	-109.435	C(44)-C(46)-C(48)-C(49)	-2.5822
		C(44)-C(46)-C(48)-H(58)	178.1964	H(64)-O(62)-Mn(69)-O(19)	-19.0112	C(44)-C(46)-C(48)-H(58)	177.5644
		O(65)-C(46)-C(48)-C(49)	-178.8305	H(64)-O(62)-Mn(69)-N(42)	70.5354	O(65)-C(46)-C(48)-C(49)	-178.1856
		O(65)-C(46)-C(48)-H(58)	1.2099	H(64)-O(62)-Mn(69)-O(65)	150.681	O(65)-C(46)-C(48)-H(58)	1.961
		C(44)-C(45)-C(47)-C(49)	-0.8092	H(64)-O(62)-Mn(69)-O(68)	161.2505	C(44)-C(45)-C(47)-C(49)	-1.0377
		C(44)-C(45)-C(47)-H(57)	179.967	C(46)-C(48)-C(49)-C(47)	0.6589	C(44)-C(45)-C(47)-H(57)	179.9128
		H(56)-C(45)-C(47)-C(49)	179.0034	C(46)-C(48)-C(49)-H(59)	-179.7056	H(56)-C(45)-C(47)-C(49)	178.8246
		H(56)-C(45)-C(47)-H(57)	-0.2205	H(58)-C(48)-C(49)-C(47)	-179.6818	H(56)-C(45)-C(47)-H(57)	-0.2249
		N(43)-C(44)-C(46)-C(48)	-172.0924	H(58)-C(48)-C(49)-H(59)	-0.0462	N(43)-C(44)-C(46)-C(48)	-171.0409
		N(43)-C(44)-C(46)-O(65)	4.7278	C(45)-C(47)-C(49)-C(48)	0.2481	N(43)-C(44)-C(46)-O(65)	4.3786
		C(45)-C(44)-C(46)-C(48)	1.4785	C(45)-C(47)-C(49)-H(59)	-179.3886	C(45)-C(44)-C(46)-C(48)	2.0565
		C(45)-C(44)-C(46)-O(65)	178.2987	H(57)-C(47)-C(49)-C(48)	179.6458	C(45)-C(44)-C(46)-O(65)	177.476
		N(43)-C(44)-C(45)-C(47)	173.7701	H(57)-C(47)-C(49)-H(59)	0.0091	N(43)-C(44)-C(45)-C(47)	173.1228
		N(43)-C(44)-C(45)-H(56)	-6.0423	C(44)-C(46)-O(65)-Mn(69)	38.209	N(43)-C(44)-C(45)-H(56)	-6.7394
		C(46)-C(44)-C(45)-C(47)	-0.1916	C(48)-C(46)-O(65)-Mn(69)	-144.8569	C(46)-C(44)-C(45)-C(47)	-0.2991
		C(46)-C(44)-C(45)-H(56)	179.996	C(44)-C(46)-C(48)-C(49)	-1.2279	C(46)-C(44)-C(45)-H(56)	179.8387
		N(42)-N(43)-C(44)-C(45)	163.3135	C(44)-C(46)-C(48)-H(58)	179.1124	N(42)-N(43)-C(44)-C(45)	161.4045
		N(42)-N(43)-C(44)-C(46)	-22.9883	O(65)-C(46)-C(48)-C(49)	-178.2602	N(42)-N(43)-C(44)-C(46)	-25.4008
		C(37)-N(42)-Cr(67)-N(11)	-177.5062	O(65)-C(46)-C(48)-H(58)	2.0801	C(37)-N(42)-Fe(67)-N(11)	137.1828
		C(37)-N(42)-Cr(67)-O(19)	120.7176	C(44)-C(45)-C(47)-C(49)	-0.6114	C(37)-N(42)-Fe(67)-O(19)	106.07
		C(37)-N(42)-Cr(67)-O(62)	28.6698	C(44)-C(45)-C(47)-H(57)	179.993	C(37)-N(42)-Fe(67)-O(62)	3.2485
		C(37)-N(42)-Cr(67)-O(65)	-149.2656	H(56)-C(45)-C(47)-C(49)	179.1701	C(37)-N(42)-Fe(67)-O(65)	-142.6707
		C(37)-N(42)-Cr(67)-Cl(66)	-59.9175	H(56)-C(45)-C(47)-H(57)	-0.2255	C(37)-N(42)-Fe(67)-Cl(66)	-67.9442
		N(43)-N(42)-Cr(67)-N(11)	5.3558	N(43)-C(44)-C(46)-C(48)	-172.956	N(43)-N(42)-Fe(67)-N(11)	-43.2648
		N(43)-N(42)-Cr(67)-O(19)	-56.4204	N(43)-C(44)-C(46)-O(65)	3.9132	N(43)-N(42)-Fe(67)-O(19)	-74.3775
		N(43)-N(42)-Cr(67)-O(62)	-148.4682	C(45)-C(44)-C(46)-C(48)	0.8571	N(43)-N(42)-Fe(67)-O(62)	-177.199
		N(43)-N(42)-Cr(67)-O(65)	33.5964	C(45)-C(44)-C(46)-O(65)	177.7263	N(43)-N(42)-Fe(67)-O(65)	36.8817
		N(43)-N(42)-Cr(67)-Cl(66)	122.9445	N(43)-C(44)-C(45)-C(47)	174.2205	N(43)-N(42)-Fe(67)-Cl(66)	111.6082
		C(37)-N(42)-N(43)-C(44)	177.9821	N(43)-C(44)-C(45)-H(56)	-5.5608	C(37)-N(42)-N(43)-C(44)	175.4884
		Cr(67)-N(42)-N(43)-C(44)	-4.7794	C(46)-C(44)-C(45)-C(47)	0.0399	Fe(67)-N(42)-N(43)-C(44)	-4.074
		C(35)-C(40)-C(41)-C(39)	-0.8275	C(46)-C(44)-C(45)-H(56)	-179.7414	C(35)-C(40)-C(41)-C(39)	0.4728
		C(35)-C(40)-C(41)-H(55)	179.9295	N(42)-N(43)-C(44)-C(45)	163.1811	C(35)-C(40)-C(41)-H(55)	179.8028
		H(54)-C(40)-C(41)-C(39)	179.1703	N(42)-N(43)-C(44)-C(46)	-22.8943	H(54)-C(40)-C(41)-C(39)	-178.9698
		H(54)-C(40)-C(41)-H(55)	-0.0727	C(37)-N(42)-Mn(69)-N(11)	-151.38	H(54)-C(40)-C(41)-H(55)	0.3602
		C(38)-C(39)-C(41)-C(40)	0.4984	C(37)-N(42)-Mn(69)-O(19)	120.9147	C(38)-C(39)-C(41)-C(40)	-0.3393

		C(38)-C(39)-C(41)-H(55)	179.7442	C(37)-N(42)-Mn(69)-O(62)	29.7508	C(38)-C(39)-C(41)-H(55)	-179.6719
		H(53)-C(39)-C(41)-C(40)	-178.5407	C(37)-N(42)-Mn(69)-O(65)	-149.142	H(53)-C(39)-C(41)-C(40)	178.9517
		H(53)-C(39)-C(41)-H(55)	0.7051	C(37)-N(42)-Mn(69)-O(68)	-59.3946	H(53)-C(39)-C(41)-H(55)	-0.3809
		C(33)-C(38)-C(39)-C(41)	0.6376	N(43)-N(42)-Mn(69)-N(11)	31.5099	C(33)-C(38)-C(39)-C(41)	-0.4745
		C(33)-C(38)-C(39)-H(53)	179.6716	N(43)-N(42)-Mn(69)-O(19)	-56.1954	C(33)-C(38)-C(39)-H(53)	-179.7617
		H(52)-C(38)-C(39)-C(41)	-177.8601	N(43)-N(42)-Mn(69)-O(62)	-147.3593	H(52)-C(38)-C(39)-C(41)	178.4621
		H(52)-C(38)-C(39)-H(53)	1.1739	N(43)-N(42)-Mn(69)-O(65)	33.7479	H(52)-C(38)-C(39)-H(53)	-0.8252
		C(35)-C(37)-N(42)-N(43)	-77.4729	N(43)-N(42)-Mn(69)-O(68)	123.4953	C(35)-C(37)-N(42)-N(43)	-67.0411
		C(35)-C(37)-N(42)-Cr(67)	105.311	C(37)-N(42)-N(43)-C(44)	178.1364	C(35)-C(37)-N(42)-Fe(67)	112.5174
		C(36)-C(37)-N(42)-N(43)	97.2088	Mn(69)-N(42)-N(43)-C(44)	-4.6459	C(36)-C(37)-N(42)-N(43)	111.3431
		C(36)-C(37)-N(42)-Cr(67)	-80.0073	C(35)-C(40)-C(41)-C(39)	-1.0197	C(36)-C(37)-N(42)-Fe(67)	-69.0985
		C(34)-C(36)-C(37)-C(35)	-5.2788	C(35)-C(40)-C(41)-H(55)	-179.8269	C(34)-C(36)-C(37)-C(35)	0.1197
		C(34)-C(36)-C(37)-N(42)	179.9796	H(54)-C(40)-C(41)-C(39)	177.9846	C(34)-C(36)-C(37)-N(42)	-178.284
		H(61)-C(36)-C(37)-C(35)	175.1038	H(54)-C(40)-C(41)-H(55)	-0.8226	H(61)-C(36)-C(37)-C(35)	178.2827
		H(61)-C(36)-C(37)-N(42)	0.3621	C(38)-C(39)-C(41)-C(40)	0.0676	H(61)-C(36)-C(37)-N(42)	-0.121
		C(33)-C(35)-C(40)-C(41)	-0.006	C(38)-C(39)-C(41)-H(55)	178.8793	C(33)-C(35)-C(40)-C(41)	0.2365
		C(33)-C(35)-C(40)-H(54)	179.9963	H(53)-C(39)-C(41)-C(40)	-178.6568	C(33)-C(35)-C(40)-H(54)	179.6672
		C(37)-C(35)-C(40)-C(41)	178.436	H(53)-C(39)-C(41)-H(55)	0.1548	C(37)-C(35)-C(40)-C(41)	-178.4035
		C(37)-C(35)-C(40)-H(54)	-1.5617	C(33)-C(38)-C(39)-C(41)	0.964	C(37)-C(35)-C(40)-H(54)	1.0273
		C(33)-C(35)-C(37)-C(36)	4.1977	C(33)-C(38)-C(39)-H(53)	179.6818	C(33)-C(35)-C(37)-C(36)	0.134
		C(33)-C(35)-C(37)-N(42)	178.8826	H(52)-C(38)-C(39)-C(41)	-177.6384	C(33)-C(35)-C(37)-N(42)	178.5189
		C(40)-C(35)-C(37)-C(36)	-174.239	H(52)-C(38)-C(39)-H(53)	1.0794	C(40)-C(35)-C(37)-C(36)	178.7686
		C(40)-C(35)-C(37)-N(42)	0.446	C(35)-C(37)-N(42)-N(43)	-80.5671	C(40)-C(35)-C(37)-N(42)	-2.8466
		C(32)-C(34)-C(36)-C(37)	1.7369	C(35)-C(37)-N(42)-Mn(69)	102.2461	C(32)-C(34)-C(36)-C(37)	0.716
		C(32)-C(34)-C(36)-H(61)	-178.64	C(36)-C(37)-N(42)-N(43)	94.6662	C(32)-C(34)-C(36)-H(61)	-177.4807
		H(51)-C(34)-C(36)-C(37)	-176.3496	C(36)-C(37)-N(42)-Mn(69)	-82.5206	H(51)-C(34)-C(36)-C(37)	179.0463
		H(51)-C(34)-C(36)-H(61)	3.2735	C(34)-C(36)-C(37)-C(35)	-6.3705	H(51)-C(34)-C(36)-H(61)	0.8496
		C(32)-C(33)-C(35)-C(37)	0.4163	C(34)-C(36)-C(37)-N(42)	178.3367	C(32)-C(33)-C(35)-C(37)	-1.1012
		C(32)-C(33)-C(35)-C(40)	178.8591	H(61)-C(36)-C(37)-C(35)	174.5882	C(32)-C(33)-C(35)-C(40)	-179.7421
		C(38)-C(33)-C(35)-C(37)	-177.3302	H(61)-C(36)-C(37)-N(42)	-0.7046	C(38)-C(33)-C(35)-C(37)	177.6169
		C(38)-C(33)-C(35)-C(40)	1.1127	C(33)-C(35)-C(40)-C(41)	0.9358	C(38)-C(33)-C(35)-C(40)	-1.024
		C(32)-C(33)-C(38)-C(39)	-179.1291	C(33)-C(35)-C(40)-H(54)	-178.0501	C(32)-C(33)-C(38)-C(39)	179.8451
		C(32)-C(33)-C(38)-H(52)	-0.6967	C(37)-C(35)-C(40)-C(41)	178.8852	C(32)-C(33)-C(38)-H(52)	0.9588
		C(35)-C(33)-C(38)-C(39)	-1.4479	C(37)-C(35)-C(40)-H(54)	-0.1007	C(35)-C(33)-C(38)-C(39)	1.1653
		C(35)-C(33)-C(38)-H(52)	176.9846	C(33)-C(35)-C(37)-C(36)	5.7681	C(35)-C(33)-C(38)-H(52)	-177.721
		C(33)-C(32)-O(50)-H(60)	-10.8808	C(33)-C(35)-C(37)-N(42)	-178.9907	C(33)-C(32)-O(50)-H(60)	7.932
		C(34)-C(32)-O(50)-H(60)	168.6986	C(40)-C(35)-C(37)-C(36)	-172.1743	C(34)-C(32)-O(50)-H(60)	-171.3489
		C(33)-C(32)-C(34)-C(36)	2.9373	C(40)-C(35)-C(37)-N(42)	3.0669	C(33)-C(32)-C(34)-C(36)	-1.6881
		C(33)-C(32)-C(34)-H(51)	-178.9974	C(32)-C(34)-C(36)-C(37)	1.692	C(33)-C(32)-C(34)-H(51)	-179.999
		O(50)-C(32)-C(34)-C(36)	-176.6588	C(32)-C(34)-C(36)-H(61)	-179.2518	O(50)-C(32)-C(34)-C(36)	177.6228
		O(50)-C(32)-C(34)-H(51)	1.4066	H(51)-C(34)-C(36)-C(37)	-175.8943	O(50)-C(32)-C(34)-H(51)	-0.6882
		C(34)-C(32)-C(33)-C(38)	173.7428	H(51)-C(34)-C(36)-H(61)	3.162	C(34)-C(32)-C(33)-C(38)	-176.7668
		C(34)-C(32)-C(33)-C(35)	-3.9285	C(32)-C(33)-C(35)-C(37)	-0.4669	C(34)-C(32)-C(33)-C(35)	1.9069
		O(50)-C(32)-C(33)-C(38)	-6.6856	C(32)-C(33)-C(35)-C(40)	177.4845	O(50)-C(32)-C(33)-C(38)	3.9668
		O(50)-C(32)-C(33)-C(35)	175.6431	C(38)-C(33)-C(35)-C(37)	-177.8674	O(50)-C(32)-C(33)-C(35)	-177.3595
		C(15)-O(19)-Cr(67)-N(11)	41.4882	C(38)-C(33)-C(35)-C(40)	0.084	C(15)-O(19)-Fe(67)-N(11)	55.3659
		C(15)-O(19)-Cr(67)-N(42)	-139.4626	C(32)-C(33)-C(38)-C(39)	-178.3554	C(15)-O(19)-Fe(67)-N(42)	-135.4071
		C(15)-O(19)-Cr(67)-O(62)	-49.1639	C(32)-C(33)-C(38)-H(52)	0.1866	C(15)-O(19)-Fe(67)-O(62)	-37.5249
		C(15)-O(19)-Cr(67)-O(65)	130.7051	C(35)-C(33)-C(38)-C(39)	-1.0287	C(15)-O(19)-Fe(67)-O(65)	139.6553
		C(15)-O(19)-Cr(67)-Cl(66)	-159.8729	C(35)-C(33)-C(38)-H(52)	177.5133	C(15)-O(19)-Fe(67)-Cl(66)	-113.4997
		C(15)-C(17)-C(18)-C(16)	-0.5076	C(33)-C(32)-O(50)-H(60)	-11.6098	C(15)-C(17)-C(18)-C(16)	-0.9821
		C(15)-C(17)-C(18)-H(29)	179.745	C(34)-C(32)-O(50)-H(60)	168.2081	C(15)-C(17)-C(18)-H(29)	179.584
		H(28)-C(17)-C(18)-C(16)	179.8473	C(33)-C(32)-C(34)-C(36)	3.6728	H(28)-C(17)-C(18)-C(16)	179.3389
		H(28)-C(17)-C(18)-H(29)	0.0998	C(33)-C(32)-C(34)-H(51)	-178.7678	H(28)-C(17)-C(18)-H(29)	-0.095

		C(14)-C(16)-C(18)-C(17)	-0.2736	O(50)-C(32)-C(34)-C(36)	-176.1523	C(14)-C(16)-C(18)-C(17)	-0.4563
		C(14)-C(16)-C(18)-H(29)	179.4746	O(50)-C(32)-C(34)-H(51)	1.4071	C(14)-C(16)-C(18)-H(29)	178.9794
		H(27)-C(16)-C(18)-C(17)	-179.7015	C(34)-C(32)-C(33)-C(38)	173.1421	H(27)-C(16)-C(18)-C(17)	-179.5869
		H(27)-C(16)-C(18)-H(29)	0.0467	C(34)-C(32)-C(33)-C(35)	-4.1734	H(27)-C(16)-C(18)-H(29)	-0.1512
		C(13)-C(15)-O(19)-Cr(67)	-31.7568	O(50)-C(32)-C(33)-C(38)	-7.0433	C(13)-C(15)-O(19)-Fe(67)	-42.1835
		C(17)-C(15)-O(19)-Cr(67)	150.0641	O(50)-C(32)-C(33)-C(35)	175.6411	C(17)-C(15)-O(19)-Fe(67)	141.814
		C(13)-C(15)-C(17)-C(18)	1.0393	C(15)-O(19)-Mn(69)-N(11)	42.2092	C(13)-C(15)-C(17)-C(18)	2.0553
		C(13)-C(15)-C(17)-H(28)	-179.3153	C(15)-O(19)-Mn(69)-N(42)	-139.2905	C(13)-C(15)-C(17)-H(28)	-178.2655
		O(19)-C(15)-C(17)-C(18)	179.2896	C(15)-O(19)-Mn(69)-O(62)	-49.0744	O(19)-C(15)-C(17)-C(18)	178.1234
		O(19)-C(15)-C(17)-H(28)	-1.0649	C(15)-O(19)-Mn(69)-O(65)	131.1267	O(19)-C(15)-C(17)-H(28)	-2.1974
		C(13)-C(14)-C(16)-C(18)	0.5433	C(15)-O(19)-Mn(69)-O(68)	90.5985	C(13)-C(14)-C(16)-C(18)	0.8767
		C(13)-C(14)-C(16)-H(27)	179.9693	C(15)-C(17)-C(18)-C(16)	-0.597	C(13)-C(14)-C(16)-H(27)	-179.9955
		H(26)-C(14)-C(16)-C(18)	-179.1628	C(15)-C(17)-C(18)-H(29)	179.6849	H(26)-C(14)-C(16)-C(18)	-178.7894
		H(26)-C(14)-C(16)-H(27)	0.2633	H(28)-C(17)-C(18)-C(16)	179.821	H(26)-C(14)-C(16)-H(27)	0.3384
		N(12)-C(13)-C(15)-C(17)	172.5778	H(28)-C(17)-C(18)-H(29)	0.1029	N(12)-C(13)-C(15)-C(17)	170.5809
		N(12)-C(13)-C(15)-O(19)	-5.5572	C(14)-C(16)-C(18)-C(17)	-0.2377	N(12)-C(13)-C(15)-O(19)	-5.3761
		C(14)-C(13)-C(15)-C(17)	-0.7625	C(14)-C(16)-C(18)-H(29)	179.4812	C(14)-C(13)-C(15)-C(17)	-1.626
		C(14)-C(13)-C(15)-O(19)	-178.8975	H(27)-C(16)-C(18)-C(17)	-179.6763	C(14)-C(13)-C(15)-O(19)	-177.583
		N(12)-C(13)-C(14)-C(16)	-173.775	H(27)-C(16)-C(18)-H(29)	0.0427	N(12)-C(13)-C(14)-C(16)	-172.2618
		N(12)-C(13)-C(14)-H(26)	5.9308	C(13)-C(15)-O(19)-Mn(69)	-32.9767	N(12)-C(13)-C(14)-H(26)	7.4041
		C(15)-C(13)-C(14)-C(16)	-0.0091	C(17)-C(15)-O(19)-Mn(69)	148.9383	C(15)-C(13)-C(14)-C(16)	0.1974
		C(15)-C(13)-C(14)-H(26)	179.6967	C(13)-C(15)-C(17)-C(18)	1.1005	C(15)-C(13)-C(14)-H(26)	179.8633
		N(11)-N(12)-C(13)-C(14)	-165.2797	C(13)-C(15)-C(17)-H(28)	-179.3171	N(11)-N(12)-C(13)-C(14)	-163.781
		N(11)-N(12)-C(13)-C(15)	21.2429	O(19)-C(15)-C(17)-C(18)	179.2624	N(11)-N(12)-C(13)-C(15)	23.9211
		C(6)-N(11)-Cr(67)-O(19)	151.3239	O(19)-C(15)-C(17)-H(28)	-1.1552	C(6)-N(11)-Fe(67)-O(19)	146.1276
		C(6)-N(11)-Cr(67)-N(42)	89.5537	C(13)-C(14)-C(16)-C(18)	0.5881	C(6)-N(11)-Fe(67)-N(42)	116.1751
		C(6)-N(11)-Cr(67)-O(62)	-116.6237	C(13)-C(14)-C(16)-H(27)	-179.9752	C(6)-N(11)-Fe(67)-O(62)	-108.8562
		C(6)-N(11)-Cr(67)-O(65)	61.3103	H(26)-C(14)-C(16)-C(18)	-179.2114	C(6)-N(11)-Fe(67)-O(65)	35.1052
		C(6)-N(11)-Cr(67)-Cl(66)	-28.0126	H(26)-C(14)-C(16)-H(27)	0.2252	C(6)-N(11)-Fe(67)-Cl(66)	-37.1442
		N(12)-N(11)-Cr(67)-O(19)	-29.0558	N(12)-C(13)-C(15)-C(17)	172.8769	N(12)-N(11)-Fe(67)-O(19)	-40.9114
		N(12)-N(11)-Cr(67)-N(42)	-90.826	N(12)-C(13)-C(15)-O(19)	-5.1624	N(12)-N(11)-Fe(67)-N(42)	-70.8639
		N(12)-N(11)-Cr(67)-O(62)	62.9967	C(14)-C(13)-C(15)-C(17)	-0.7434	N(12)-N(11)-Fe(67)-O(62)	64.1048
		N(12)-N(11)-Cr(67)-O(65)	-119.0694	C(14)-C(13)-C(15)-O(19)	-178.7826	N(12)-N(11)-Fe(67)-O(65)	-151.9338
		N(12)-N(11)-Cr(67)-Cl(66)	151.6077	N(12)-C(13)-C(14)-C(16)	-174.1074	N(12)-N(11)-Fe(67)-Cl(66)	135.8167
		C(6)-N(11)-N(12)-C(13)	-176.5864	N(12)-C(13)-C(14)-H(26)	5.692	C(6)-N(11)-N(12)-C(13)	-178.0729
		Cr(67)-N(11)-N(12)-C(13)	3.7793	C(15)-C(13)-C(14)-C(16)	-0.0806	Fe(67)-N(11)-N(12)-C(13)	8.7765
		C(4)-C(9)-C(10)-C(8)	0.6683	C(15)-C(13)-C(14)-H(26)	179.7188	C(4)-C(9)-C(10)-C(8)	-0.3022
		C(4)-C(9)-C(10)-H(25)	179.8748	N(11)-N(12)-C(13)-C(14)	-163.6025	C(4)-C(9)-C(10)-H(25)	-179.375
		H(24)-C(9)-C(10)-C(8)	-178.7011	N(11)-N(12)-C(13)-C(15)	22.6479	H(24)-C(9)-C(10)-C(8)	178.574
		H(24)-C(9)-C(10)-H(25)	0.5054	C(6)-N(11)-Mn(69)-O(19)	147.4326	H(24)-C(9)-C(10)-H(25)	-0.4988
		C(7)-C(8)-C(10)-C(9)	-0.0365	C(6)-N(11)-Mn(69)-N(42)	59.7385	C(7)-C(8)-C(10)-C(9)	0.5563
		C(7)-C(8)-C(10)-H(25)	-179.2458	C(6)-N(11)-Mn(69)-O(62)	-121.3926	C(7)-C(8)-C(10)-H(25)	179.6324
		H(23)-C(8)-C(10)-C(9)	178.8861	C(6)-N(11)-Mn(69)-O(65)	57.5001	H(23)-C(8)-C(10)-C(9)	-178.6673
		H(23)-C(8)-C(10)-H(25)	-0.3232	C(6)-N(11)-Mn(69)-O(68)	-32.2651	H(23)-C(8)-C(10)-H(25)	0.4088
		C(2)-C(7)-C(8)-C(10)	-0.719	N(12)-N(11)-Mn(69)-O(19)	-28.6529	C(2)-C(7)-C(8)-C(10)	0.3543
		C(2)-C(7)-C(8)-H(23)	-179.6362	N(12)-N(11)-Mn(69)-N(42)	-116.347	C(2)-C(7)-C(8)-H(23)	179.5737
		H(22)-C(7)-C(8)-C(10)	177.8283	N(12)-N(11)-Mn(69)-O(62)	62.522	H(22)-C(7)-C(8)-C(10)	-178.167
		H(22)-C(7)-C(8)-H(23)	-1.0889	N(12)-N(11)-Mn(69)-O(65)	-118.5853	H(22)-C(7)-C(8)-H(23)	1.0524
		C(4)-C(6)-N(11)-N(12)	-103.0673	N(12)-N(11)-Mn(69)-O(68)	151.6495	C(4)-C(6)-N(11)-N(12)	74.0072
		C(4)-C(6)-N(11)-Cr(67)	76.5692	C(6)-N(11)-N(12)-C(13)	-174.027	C(4)-C(6)-N(11)-Fe(67)	-112.8034
		C(5)-C(6)-N(11)-N(12)	81.6119	Mn(69)-N(11)-N(12)-C(13)	2.1059	C(5)-C(6)-N(11)-N(12)	-106.0483
		C(5)-C(6)-N(11)-Cr(67)	-98.7516	C(4)-C(9)-C(10)-C(8)	0.1177	C(5)-C(6)-N(11)-Fe(67)	67.1411
		C(3)-C(5)-C(6)-C(4)	5.6564	C(4)-C(9)-C(10)-H(25)	-179.8231	C(3)-C(5)-C(6)-C(4)	-0.5372
		C(3)-C(5)-C(6)-N(11)	-178.9728	H(24)-C(9)-C(10)-C(8)	178.8423	C(3)-C(5)-C(6)-N(11)	179.5179

		H(31)-C(5)-C(6)-C(4)	-176.8391	H(24)-C(9)-C(10)-H(25)	-1.0984	H(31)-C(5)-C(6)-C(4)	-178.5665
		H(31)-C(5)-C(6)-N(11)	-1.4684	C(7)-C(8)-C(10)-C(9)	-1.4078	H(31)-C(5)-C(6)-N(11)	1.4887
		C(2)-C(4)-C(9)-C(10)	-0.5351	C(7)-C(8)-C(10)-H(25)	178.5332	C(2)-C(4)-C(9)-C(10)	-0.9145
		C(2)-C(4)-C(9)-H(24)	178.8242	H(23)-C(8)-C(10)-C(9)	178.3525	C(2)-C(4)-C(9)-H(24)	-179.77
		C(6)-C(4)-C(9)-C(10)	-178.0879	H(23)-C(8)-C(10)-H(25)	-1.7065	C(6)-C(4)-C(9)-C(10)	177.174
		C(6)-C(4)-C(9)-H(24)	1.2714	C(2)-C(7)-C(8)-C(10)	0.0707	C(6)-C(4)-C(9)-H(24)	-1.6815
		C(2)-C(4)-C(6)-C(5)	-4.8409	C(2)-C(7)-C(8)-H(23)	-179.6884	C(2)-C(4)-C(6)-C(5)	-0.4734
		C(2)-C(4)-C(6)-N(11)	179.8424	H(22)-C(7)-C(8)-C(10)	178.5186	C(2)-C(4)-C(6)-N(11)	179.471
		C(9)-C(4)-C(6)-C(5)	172.7057	H(22)-C(7)-C(8)-H(23)	-1.2405	C(9)-C(4)-C(6)-C(5)	-178.5573
		C(9)-C(4)-C(6)-N(11)	-2.6111	C(4)-C(6)-N(11)-N(12)	60.4752	C(9)-C(4)-C(6)-N(11)	1.3871
		C(1)-C(3)-C(5)-C(6)	-1.5966	C(4)-C(6)-N(11)-Mn(69)	-115.7565	C(1)-C(3)-C(5)-C(6)	-0.1539
		C(1)-C(3)-C(5)-H(31)	-179.1285	C(5)-C(6)-N(11)-N(12)	-118.8517	C(1)-C(3)-C(5)-H(31)	177.9038
		H(21)-C(3)-C(5)-C(6)	176.0112	C(5)-C(6)-N(11)-Mn(69)	64.9166	H(21)-C(3)-C(5)-C(6)	-178.4372
		H(21)-C(3)-C(5)-H(31)	-1.5207	C(3)-C(5)-C(6)-C(4)	-1.1406	H(21)-C(3)-C(5)-H(31)	-0.3795
		C(1)-C(2)-C(4)-C(6)	-0.033	C(3)-C(5)-C(6)-N(11)	178.1973	C(1)-C(2)-C(4)-C(6)	2.0271
		C(1)-C(2)-C(4)-C(9)	-177.5853	H(31)-C(5)-C(6)-C(4)	178.3491	C(1)-C(2)-C(4)-C(9)	-179.8854
		C(7)-C(2)-C(4)-C(6)	177.3433	H(31)-C(5)-C(6)-N(11)	-2.313	C(7)-C(2)-C(4)-C(6)	-176.3021
		C(7)-C(2)-C(4)-C(9)	-0.209	C(2)-C(4)-C(9)-C(10)	2.605	C(7)-C(2)-C(4)-C(9)	1.7854
		C(1)-C(2)-C(7)-C(8)	178.1368	C(2)-C(4)-C(9)-H(24)	-176.0957	C(1)-C(2)-C(7)-C(8)	-179.824
		C(1)-C(2)-C(7)-H(22)	-0.3478	C(6)-C(4)-C(9)-C(10)	-177.214	C(1)-C(2)-C(7)-H(22)	-1.3687
		C(4)-C(2)-C(7)-C(8)	0.8372	C(6)-C(4)-C(9)-H(24)	4.0853	C(4)-C(2)-C(7)-C(8)	-1.5463
		C(4)-C(2)-C(7)-H(22)	-177.6473	C(2)-C(4)-C(6)-C(5)	2.6685	C(4)-C(2)-C(7)-H(22)	176.909
		C(2)-C(1)-O(20)-H(30)	11.1298	C(2)-C(4)-C(6)-N(11)	-176.6559	C(2)-C(1)-O(20)-H(30)	-9.3173
		C(3)-C(1)-O(20)-H(30)	-168.5605	C(9)-C(4)-C(6)-C(5)	-177.5132	C(3)-C(1)-O(20)-H(30)	169.6659
		C(2)-C(1)-C(3)-C(5)	-3.3265	C(9)-C(4)-C(6)-N(11)	3.1624	C(2)-C(1)-C(3)-C(5)	1.7274
		C(2)-C(1)-C(3)-H(21)	179.0922	C(1)-C(3)-C(5)-C(6)	0.2695	C(2)-C(1)-C(3)-H(21)	179.9915
		O(20)-C(1)-C(3)-C(5)	176.376	C(1)-C(3)-C(5)-H(31)	-179.2282	O(20)-C(1)-C(3)-C(5)	-177.2964
		O(20)-C(1)-C(3)-H(21)	-1.2053	H(21)-C(3)-C(5)-C(6)	179.2022	O(20)-C(1)-C(3)-H(21)	0.9676
		C(3)-C(1)-C(2)-C(7)	-173.2364	H(21)-C(3)-C(5)-H(31)	-0.2956	C(3)-C(1)-C(2)-C(7)	175.5778
		C(3)-C(1)-C(2)-C(4)	4.051	C(1)-C(2)-C(4)-C(6)	-3.1387	C(3)-C(1)-C(2)-C(4)	-2.6918
		O(20)-C(1)-C(2)-C(7)	7.079	C(1)-C(2)-C(4)-C(9)	177.0419	O(20)-C(1)-C(2)-C(7)	-5.4587
		O(20)-C(1)-C(2)-C(4)	-175.6336	C(7)-C(2)-C(4)-C(6)	175.9549	O(20)-C(1)-C(2)-C(4)	176.2717
				C(7)-C(2)-C(4)-C(9)	-3.8645		
				C(1)-C(2)-C(7)-C(8)	-178.3138		
				C(1)-C(2)-C(7)-H(22)	3.3085		
				C(4)-C(2)-C(7)-C(8)	2.6189		
				C(4)-C(2)-C(7)-H(22)	-175.7588		
				C(2)-C(1)-O(20)-H(30)	8.7846		
				C(3)-C(1)-O(20)-H(30)	-169.7535		
				C(2)-C(1)-C(3)-C(5)	-0.753		
				C(2)-C(1)-C(3)-H(21)	-179.6737		
				O(20)-C(1)-C(3)-C(5)	177.8446		
				O(20)-C(1)-C(3)-H(21)	-1.0761		
				C(3)-C(1)-C(2)-C(7)	-176.8059		
				C(3)-C(1)-C(2)-C(4)	2.2569		
				O(20)-C(1)-C(2)-C(7)	4.6847		
				O(20)-C(1)-C(2)-C(4)	-176.2525		

Table (S4): Summary of Natural Population Analysis:

Atom	No	Natural Charge	Natural Population			
			Core	Valence	Rydberg	Total
C	1	0.36179	1.99860	3.62338	0.01624	5.63821
C	2	-0.09554	1.99880	4.08392	0.01283	6.09554
C	3	-0.28405	1.99899	4.27248	0.01258	6.28405
C	4	-0.03854	1.99883	4.02707	0.01264	6.03854
C	5	-0.15823	1.99899	4.14748	0.01176	6.15823
C	6	0.09752	1.99878	3.88001	0.02369	5.90248
C	7	-0.18411	1.99904	4.17088	0.01420	6.18411
C	8	-0.19923	1.99908	4.18695	0.01320	6.19923
C	9	-0.18722	1.99903	4.17407	0.01412	6.18722
C	10	-0.19372	1.99907	4.18150	0.01315	6.19372
N	11	-0.23399	1.99942	5.21141	0.02317	7.23399
N	12	-0.25605	1.99940	5.23289	0.02375	7.25605
C	13	0.03170	1.99882	3.94717	0.02231	5.96830
C	14	-0.19007	1.99903	4.17795	0.01309	6.19007
C	15	0.34550	1.99861	3.63864	0.01726	5.65450
C	16	-0.22227	1.99908	4.21016	0.01303	6.22227
C	17	-0.24276	1.99900	4.23008	0.01368	6.24276
C	18	-0.17167	1.99908	4.15979	0.01280	6.17167
O	19	-0.69995	1.99979	6.69686	0.00331	8.69995
O	20	-0.69907	1.99978	6.69608	0.00321	8.69907
H	21	0.22280	0.00000	0.77455	0.00265	0.77720
H	22	0.22881	0.00000	0.76569	0.00550	0.77119
H	23	0.22475	0.00000	0.77302	0.00224	0.77525
H	24	0.21403	0.00000	0.78473	0.00124	0.78597
H	25	0.22777	0.00000	0.76909	0.00314	0.77223
H	26	0.21378	0.00000	0.78501	0.00121	0.78622
H	27	0.22925	0.00000	0.76700	0.00376	0.77075
H	28	0.21481	0.00000	0.78333	0.00186	0.78519
H	29	0.22815	0.00000	0.76960	0.00225	0.77185
H	30	0.21879	0.00000	0.78010	0.00111	0.78121
H	31	0.49594	0.00000	0.50317	0.00089	0.50406
H	32	0.50109	0.00000	0.49513	0.00378	0.49891
* Total *		0.00000	39.98121	97.69917	0.31961	138.00000

Table (S5): NBO data of the Ligand:

Donor NBO (i)	Acceptor NBO (j)	kcal/mol	a.u.	a.u.
within unit 1				
1. BD (1) C 1 - C 2	/ 86. RY*(1) C 3	1.19	1.93	0.043
1. BD (1) C 1 - C 2	/ 94. RY*(1) C 4	1.16	2.27	0.046
1. BD (1) C 1 - C 2	/118. RY*(1) C 7	1.30	1.87	0.044
1. BD (1) C 1 - C 2	/255. BD*(1) C 1 - C 3	3.71	1.27	0.061
1. BD (1) C 1 - C 2	/258. BD*(1) C 2 - C 4	3.61	1.29	0.061
1. BD (1) C 1 - C 2	/260. BD*(1) C 2 - C 7	1.71	1.11	0.039
1. BD (1) C 1 - C 2	/262. BD*(1) C 3 - H 21	2.89	1.09	0.050
1. BD (1) C 1 - C 2	/264. BD*(1) C 4 - C 9	3.96	1.11	0.059
1. BD (1) C 1 - C 2	/269. BD*(1) C 7 - C 8	1.27	1.31	0.037
1. BD (1) C 1 - C 2	/296. BD*(1) O 20 - H 31	1.60	0.96	0.035
2. BD (1) C 1 - C 3	/ 79. RY*(2) C 2	1.83	2.23	0.057
2. BD (1) C 1 - C 3	/103. RY*(2) C 5	0.99	2.00	0.040
2. BD (1) C 1 - C 3	/254. BD*(1) C 1 - C 2	4.09	1.20	0.063
2. BD (1) C 1 - C 3	/260. BD*(1) C 2 - C 7	2.43	1.21	0.049
2. BD (1) C 1 - C 3	/261. BD*(1) C 3 - C 5	2.48	1.22	0.049
2. BD (1) C 1 - C 3	/262. BD*(1) C 3 - H 21	1.73	1.19	0.041
2. BD (1) C 1 - C 3	/267. BD*(1) C 5 - H 22	1.26	1.20	0.035
3. BD (2) C 1 - C 3	/ 81. RY*(4) C 2	0.80	0.87	0.025
3. BD (2) C 1 - C 3	/105. RY*(4) C 5	0.94	0.80	0.026
3. BD (2) C 1 - C 3	/222. RY*(1) O 20	0.74	1.13	0.028
3. BD (2) C 1 - C 3	/256. BD*(2) C 1 - C 3	0.99	0.31	0.016
3. BD (2) C 1 - C 3	/259. BD*(2) C 2 - C 4	11.24	0.32	0.056
3. BD (2) C 1 - C 3	/266. BD*(2) C 5 - C 6	15.57	0.32	0.063
4. BD (1) C 1 - O 20	/ 70. RY*(1) C 1	0.61	2.03	0.031
4. BD (1) C 1 - O 20	/ 79. RY*(2) C 2	0.67	2.37	0.036
4. BD (1) C 1 - O 20	/255. BD*(1) C 1 - C 3	1.23	1.52	0.039
4. BD (1) C 1 - O 20	/258. BD*(1) C 2 - C 4	1.27	1.53	0.039
4. BD (1) C 1 - O 20	/261. BD*(1) C 3 - C 5	2.12	1.36	0.048
5. BD (1) C 2 - C 4	/ 70. RY*(1) C 1	0.77	1.87	0.034
5. BD (1) C 2 - C 4	/111. RY*(2) C 6	0.96	2.09	0.040
5. BD (1) C 2 - C 4	/118. RY*(1) C 7	0.73	1.96	0.034
5. BD (1) C 2 - C 4	/134. RY*(1) C 9	0.80	1.96	0.036
5. BD (1) C 2 - C 4	/254. BD*(1) C 1 - C 2	3.63	1.18	0.058
5. BD (1) C 2 - C 4	/257. BD*(1) C 1 - O 20	2.71	1.01	0.047
5. BD (1) C 2 - C 4	/260. BD*(1) C 2 - C 7	4.04	1.19	0.062
5. BD (1) C 2 - C 4	/263. BD*(1) C 4 - C 6	3.78	1.19	0.060
5. BD (1) C 2 - C 4	/264. BD*(1) C 4 - C 9	3.59	1.19	0.059
5. BD (1) C 2 - C 4	/268. BD*(1) C 6 - N 11	2.67	1.12	0.049
5. BD (1) C 2 - C 4	/271. BD*(1) C 7 - H 23	1.36	1.19	0.036
5. BD (1) C 2 - C 4	/276. BD*(1) C 9 - H 25	1.37	1.19	0.036
6. BD (2) C 2 - C 4	/ 73. RY*(4) C 1	0.67	0.81	0.023
6. BD (2) C 2 - C 4	/113. RY*(4) C 6	0.83	0.83	0.025
6. BD (2) C 2 - C 4	/120. RY*(3) C 7	1.17	0.77	0.029
6. BD (2) C 2 - C 4	/136. RY*(3) C 9	1.10	0.78	0.029
6. BD (2) C 2 - C 4	/256. BD*(2) C 1 - C 3	14.68	0.29	0.059
6. BD (2) C 2 - C 4	/266. BD*(2) C 5 - C 6	11.81	0.30	0.054
6. BD (2) C 2 - C 4	/270. BD*(2) C 7 - C 8	12.06	0.31	0.057
6. BD (2) C 2 - C 4	/275. BD*(2) C 9 - C 10	11.08	0.31	0.055
7. BD (1) C 2 - C 7	/ 70. RY*(1) C 1	1.31	1.76	0.043
7. BD (1) C 2 - C 7	/ 94. RY*(1) C 4	0.61	2.25	0.033
7. BD (1) C 2 - C 7	/ 95. RY*(2) C 4	0.71	2.16	0.035
7. BD (1) C 2 - C 7	/126. RY*(1) C 8	0.70	1.82	0.032
7. BD (1) C 2 - C 7	/127. RY*(2) C 8	1.53	1.96	0.049
7. BD (1) C 2 - C 7	/254. BD*(1) C 1 - C 2	1.52	1.08	0.036
7. BD (1) C 2 - C 7	/255. BD*(1) C 1 - C 3	1.72	1.25	0.041
7. BD (1) C 2 - C 7	/258. BD*(1) C 2 - C 4	4.66	1.26	0.069
7. BD (1) C 2 - C 7	/263. BD*(1) C 4 - C 6	4.81	1.09	0.065
7. BD (1) C 2 - C 7	/269. BD*(1) C 7 - C 8	2.65	1.29	0.052
7. BD (1) C 2 - C 7	/271. BD*(1) C 7 - H 23	0.62	1.09	0.023
7. BD (1) C 2 - C 7	/273. BD*(1) C 8 - H 24	2.99	1.09	0.051
8. BD (1) C 3 - C 5	/ 71. RY*(2) C 1	1.46	2.07	0.049
8. BD (1) C 3 - C 5	/110. RY*(1) C 6	0.91	1.62	0.034
8. BD (1) C 3 - C 5	/111. RY*(2) C 6	1.01	1.99	0.040

8. BD (1) C 3 - C 5	/255. BD*(1) C 1 - C 3	2.66	1.26	0.052
8. BD (1) C 3 - C 5	/257. BD*(1) C 1 - O 20	5.41	0.92	0.063
8. BD (1) C 3 - C 5	/262. BD*(1) C 3 - H 21	0.76	1.08	0.026
8. BD (1) C 3 - C 5	/265. BD*(1) C 5 - C 6	2.76	1.27	0.053
8. BD (1) C 3 - C 5	/267. BD*(1) C 5 - H 22	0.56	1.09	0.022
8. BD (1) C 3 - C 5	/268. BD*(1) C 6 - N 11	5.26	1.03	0.066
9. BD (1) C 3 - H 21	/ 70. RY*(1) C 1	1.10	1.65	0.038
9. BD (1) C 3 - H 21	/ 74. RY*(5) C 1	0.60	9.46	0.068
9. BD (1) C 3 - H 21	/102. RY*(1) C 5	1.02	1.76	0.038
9. BD (1) C 3 - H 21	/254. BD*(1) C 1 - C 2	5.76	0.96	0.067
9. BD (1) C 3 - H 21	/255. BD*(1) C 1 - C 3	1.19	1.14	0.033
9. BD (1) C 3 - H 21	/257. BD*(1) C 1 - O 20	1.62	0.80	0.032
9. BD (1) C 3 - H 21	/265. BD*(1) C 5 - C 6	2.74	1.14	0.050
10. BD (1) C 4 - C 6	/ 78. RY*(1) C 2	1.44	2.29	0.051
10. BD (1) C 4 - C 6	/102. RY*(1) C 5	0.75	1.88	0.034
10. BD (1) C 4 - C 6	/134. RY*(1) C 9	1.21	1.87	0.043
10. BD (1) C 4 - C 6	/258. BD*(1) C 2 - C 4	3.50	1.27	0.060
10. BD (1) C 4 - C 6	/260. BD*(1) C 2 - C 7	4.08	1.10	0.060
10. BD (1) C 4 - C 6	/264. BD*(1) C 4 - C 9	1.82	1.10	0.040
10. BD (1) C 4 - C 6	/265. BD*(1) C 5 - C 6	3.98	1.27	0.064
10. BD (1) C 4 - C 6	/267. BD*(1) C 5 - H 22	2.87	1.09	0.050
10. BD (1) C 4 - C 6	/268. BD*(1) C 6 - N 11	1.17	1.02	0.031
10. BD (1) C 4 - C 6	/274. BD*(1) C 9 - C 10	1.28	1.30	0.037
10. BD (1) C 4 - C 6	/278. BD*(1) N 11 - N 12	2.49	1.17	0.048
11. BD (1) C 4 - C 9	/ 78. RY*(1) C 2	0.78	2.27	0.038
11. BD (1) C 4 - C 9	/110. RY*(1) C 6	1.00	1.61	0.036
11. BD (1) C 4 - C 9	/142. RY*(1) C 10	0.74	1.81	0.033
11. BD (1) C 4 - C 9	/143. RY*(2) C 10	1.48	1.98	0.049
11. BD (1) C 4 - C 9	/254. BD*(1) C 1 - C 2	4.87	1.07	0.065
11. BD (1) C 4 - C 9	/258. BD*(1) C 2 - C 4	4.36	1.26	0.066
11. BD (1) C 4 - C 9	/263. BD*(1) C 4 - C 6	1.68	1.09	0.038
11. BD (1) C 4 - C 9	/265. BD*(1) C 5 - C 6	1.95	1.26	0.044
11. BD (1) C 4 - C 9	/274. BD*(1) C 9 - C 10	2.71	1.29	0.053
11. BD (1) C 4 - C 9	/276. BD*(1) C 9 - H 25	0.67	1.09	0.024
11. BD (1) C 4 - C 9	/277. BD*(1) C 10 - H 26	3.00	1.09	0.051
12. BD (1) C 5 - C 6	/ 87. RY*(2) C 3	1.33	2.04	0.047
12. BD (1) C 5 - C 6	/ 95. RY*(2) C 4	1.52	2.27	0.053
12. BD (1) C 5 - C 6	/151. RY*(2) N 11	0.64	1.86	0.031
12. BD (1) C 5 - C 6	/261. BD*(1) C 3 - C 5	2.42	1.21	0.048
12. BD (1) C 5 - C 6	/262. BD*(1) C 3 - H 21	1.43	1.18	0.037
12. BD (1) C 5 - C 6	/263. BD*(1) C 4 - C 6	4.33	1.20	0.065
12. BD (1) C 5 - C 6	/264. BD*(1) C 4 - C 9	2.45	1.20	0.049
12. BD (1) C 5 - C 6	/267. BD*(1) C 5 - H 22	1.66	1.19	0.040
12. BD (1) C 5 - C 6	/268. BD*(1) C 6 - N 11	1.32	1.13	0.035
13. BD (2) C 5 - C 6	/ 88. RY*(3) C 3	0.95	0.78	0.026
13. BD (2) C 5 - C 6	/ 97. RY*(4) C 4	0.83	0.87	0.026
13. BD (2) C 5 - C 6	/152. RY*(3) N 11	0.84	0.99	0.028
13. BD (2) C 5 - C 6	/256. BD*(2) C 1 - C 3	11.78	0.30	0.053
13. BD (2) C 5 - C 6	/259. BD*(2) C 2 - C 4	14.20	0.32	0.061
13. BD (2) C 5 - C 6	/279. BD*(2) N 11 - N 12	19.46	0.23	0.060
14. BD (1) C 5 - H 22	/ 86. RY*(1) C 3	0.90	1.79	0.036
14. BD (1) C 5 - H 22	/110. RY*(1) C 6	1.05	1.49	0.035
14. BD (1) C 5 - H 22	/112. RY*(3) C 6	0.83	1.64	0.033
14. BD (1) C 5 - H 22	/255. BD*(1) C 1 - C 3	2.84	1.13	0.051
14. BD (1) C 5 - H 22	/262. BD*(1) C 3 - H 21	0.53	0.95	0.020
14. BD (1) C 5 - H 22	/263. BD*(1) C 4 - C 6	6.18	0.97	0.069
14. BD (1) C 5 - H 22	/265. BD*(1) C 5 - C 6	1.56	1.14	0.038
14. BD (1) C 5 - H 22	/268. BD*(1) C 6 - N 11	1.27	0.90	0.030
15. BD (1) C 6 - N 11	/ 95. RY*(2) C 4	1.06	2.30	0.044
15. BD (1) C 6 - N 11	/102. RY*(1) C 5	0.63	2.01	0.032
15. BD (1) C 6 - N 11	/158. RY*(1) N 12	1.04	1.71	0.038
15. BD (1) C 6 - N 11	/258. BD*(1) C 2 - C 4	1.45	1.40	0.040
15. BD (1) C 6 - N 11	/261. BD*(1) C 3 - C 5	2.31	1.23	0.048
15. BD (1) C 6 - N 11	/263. BD*(1) C 4 - C 6	0.93	1.22	0.030
15. BD (1) C 6 - N 11	/265. BD*(1) C 5 - C 6	2.21	1.40	0.050
15. BD (1) C 6 - N 11	/280. BD*(1) N 12 - C 13	4.62	1.15	0.065
16. BD (1) C 7 - C 8	/ 78. RY*(1) C 2	1.43	2.38	0.052
16. BD (1) C 7 - C 8	/ 79. RY*(2) C 2	0.63	2.21	0.033
16. BD (1) C 7 - C 8	/142. RY*(1) C 10	0.91	1.92	0.037
16. BD (1) C 7 - C 8	/143. RY*(2) C 10	0.82	2.08	0.037
16. BD (1) C 7 - C 8	/254. BD*(1) C 1 - C 2	2.54	1.18	0.049

16. BD (1) C 7 - C 8	/260. BD*(1) C 2 - C 7	2.84	1.19	0.052
16. BD (1) C 7 - C 8	/271. BD*(1) C 7 - H 23	1.64	1.19	0.040
16. BD (1) C 7 - C 8	/272. BD*(1) C 8 - C 10	2.36	1.21	0.048
16. BD (1) C 7 - C 8	/273. BD*(1) C 8 - H 24	1.61	1.19	0.039
16. BD (1) C 7 - C 8	/277. BD*(1) C 10 - H 26	1.57	1.19	0.039
17. BD (2) C 7 - C 8	/ 81. RY*(4) C 2	0.71	0.85	0.023
17. BD (2) C 7 - C 8	/144. RY*(3) C 10	0.98	0.77	0.026
17. BD (2) C 7 - C 8	/259. BD*(2) C 2 - C 4	12.56	0.31	0.058
17. BD (2) C 7 - C 8	/275. BD*(2) C 9 - C 10	13.29	0.31	0.058
18. BD (1) C 7 - H 23	/ 78. RY*(1) C 2	1.53	2.15	0.051
18. BD (1) C 7 - H 23	/126. RY*(1) C 8	1.24	1.69	0.041
18. BD (1) C 7 - H 23	/258. BD*(1) C 2 - C 4	3.47	1.14	0.056
18. BD (1) C 7 - H 23	/269. BD*(1) C 7 - C 8	1.50	1.16	0.037
18. BD (1) C 7 - H 23	/272. BD*(1) C 8 - C 10	5.50	0.98	0.065
18. BD (1) C 7 - H 23	/273. BD*(1) C 8 - H 24	1.00	0.96	0.028
19. BD (1) C 8 - C 10	/119. RY*(2) C 7	1.89	1.76	0.052
19. BD (1) C 8 - C 10	/135. RY*(2) C 9	1.90	1.73	0.051
19. BD (1) C 8 - C 10	/269. BD*(1) C 7 - C 8	2.61	1.29	0.052
19. BD (1) C 8 - C 10	/271. BD*(1) C 7 - H 23	3.20	1.09	0.053
19. BD (1) C 8 - C 10	/273. BD*(1) C 8 - H 24	0.58	1.09	0.022
19. BD (1) C 8 - C 10	/274. BD*(1) C 9 - C 10	2.59	1.29	0.052
19. BD (1) C 8 - C 10	/276. BD*(1) C 9 - H 25	3.19	1.09	0.053
19. BD (1) C 8 - C 10	/277. BD*(1) C 10 - H 26	0.57	1.09	0.022
20. BD (1) C 8 - H 24	/118. RY*(1) C 7	1.48	1.73	0.045
20. BD (1) C 8 - H 24	/142. RY*(1) C 10	1.21	1.69	0.040
20. BD (1) C 8 - H 24	/260. BD*(1) C 2 - C 7	6.03	0.96	0.068
20. BD (1) C 8 - H 24	/269. BD*(1) C 7 - C 8	1.40	1.16	0.036
20. BD (1) C 8 - H 24	/271. BD*(1) C 7 - H 23	0.99	0.96	0.028
20. BD (1) C 8 - H 24	/274. BD*(1) C 9 - C 10	2.76	1.16	0.051
21. BD (1) C 9 - C 10	/ 94. RY*(1) C 4	1.75	2.35	0.058
21. BD (1) C 9 - C 10	/126. RY*(1) C 8	0.91	1.92	0.037
21. BD (1) C 9 - C 10	/127. RY*(2) C 8	0.80	2.07	0.036
21. BD (1) C 9 - C 10	/263. BD*(1) C 4 - C 6	2.55	1.19	0.049
21. BD (1) C 9 - C 10	/264. BD*(1) C 4 - C 9	2.85	1.19	0.052
21. BD (1) C 9 - C 10	/272. BD*(1) C 8 - C 10	2.38	1.21	0.048
21. BD (1) C 9 - C 10	/273. BD*(1) C 8 - H 24	1.57	1.19	0.039
21. BD (1) C 9 - C 10	/276. BD*(1) C 9 - H 25	1.66	1.19	0.040
21. BD (1) C 9 - C 10	/277. BD*(1) C 10 - H 26	1.60	1.19	0.039
22. BD (2) C 9 - C 10	/ 97. RY*(4) C 4	0.68	0.86	0.023
22. BD (2) C 9 - C 10	/128. RY*(3) C 8	0.98	0.77	0.026
22. BD (2) C 9 - C 10	/259. BD*(2) C 2 - C 4	13.43	0.31	0.060
22. BD (2) C 9 - C 10	/270. BD*(2) C 7 - C 8	13.24	0.31	0.058
23. BD (1) C 9 - H 25	/ 94. RY*(1) C 4	1.52	2.12	0.051
23. BD (1) C 9 - H 25	/142. RY*(1) C 10	1.18	1.69	0.040
23. BD (1) C 9 - H 25	/258. BD*(1) C 2 - C 4	3.48	1.13	0.056
23. BD (1) C 9 - H 25	/272. BD*(1) C 8 - C 10	5.52	0.97	0.065
23. BD (1) C 9 - H 25	/274. BD*(1) C 9 - C 10	1.51	1.16	0.037
23. BD (1) C 9 - H 25	/277. BD*(1) C 10 - H 26	1.00	0.96	0.028
24. BD (1) C 10 - H 26	/126. RY*(1) C 8	1.21	1.69	0.041
24. BD (1) C 10 - H 26	/134. RY*(1) C 9	1.54	1.73	0.046
24. BD (1) C 10 - H 26	/264. BD*(1) C 4 - C 9	6.09	0.96	0.068
24. BD (1) C 10 - H 26	/269. BD*(1) C 7 - C 8	2.77	1.16	0.051
24. BD (1) C 10 - H 26	/274. BD*(1) C 9 - C 10	1.41	1.16	0.036
24. BD (1) C 10 - H 26	/276. BD*(1) C 9 - H 25	0.98	0.96	0.027
25. BD (1) N 11 - N 12	/110. RY*(1) C 6	0.76	1.95	0.034
25. BD (1) N 11 - N 12	/111. RY*(2) C 6	3.29	2.32	0.078
25. BD (1) N 11 - N 12	/151. RY*(2) N 11	0.58	2.08	0.031
25. BD (1) N 11 - N 12	/159. RY*(2) N 12	0.64	2.05	0.033
25. BD (1) N 11 - N 12	/166. RY*(1) C 13	1.12	1.99	0.042
25. BD (1) N 11 - N 12	/167. RY*(2) C 13	3.13	2.38	0.077
25. BD (1) N 11 - N 12	/263. BD*(1) C 4 - C 6	1.58	1.43	0.043
25. BD (1) N 11 - N 12	/282. BD*(1) C 13 - C 15	1.27	1.57	0.040
26. BD (2) N 11 - N 12	/113. RY*(4) C 6	0.87	0.93	0.026
26. BD (2) N 11 - N 12	/169. RY*(4) C 13	0.93	0.92	0.027
26. BD (2) N 11 - N 12	/266. BD*(2) C 5 - C 6	8.50	0.40	0.055
26. BD (2) N 11 - N 12	/283. BD*(2) C 13 - C 15	9.61	0.39	0.059
27. BD (1) N 12 - C 13	/150. RY*(1) N 11	1.06	1.76	0.039
27. BD (1) N 12 - C 13	/182. RY*(1) C 15	0.55	1.93	0.029
27. BD (1) N 12 - C 13	/183. RY*(2) C 15	0.69	2.10	0.034
27. BD (1) N 12 - C 13	/268. BD*(1) C 6 - N 11	4.71	1.16	0.066
27. BD (1) N 12 - C 13	/281. BD*(1) C 13 - C 14	1.05	1.22	0.032

27. BD (1) N 12 - C 13	/282. BD*(1) C 13 - C 15	1.79	1.37	0.044
27. BD (1) N 12 - C 13	/284. BD*(1) C 14 - C 16	0.88	1.43	0.032
27. BD (1) N 12 - C 13	/287. BD*(1) C 15 - C 17	2.51	1.21	0.049
28. BD (1) C 13 - C 14	/159. RY*(2) N 12	0.51	1.72	0.027
28. BD (1) C 13 - C 14	/183. RY*(2) C 15	1.34	1.97	0.046
28. BD (1) C 13 - C 14	/190. RY*(1) C 16	0.75	1.89	0.034
28. BD (1) C 13 - C 14	/191. RY*(2) C 16	1.56	1.98	0.050
28. BD (1) C 13 - C 14	/282. BD*(1) C 13 - C 15	4.03	1.24	0.063
28. BD (1) C 13 - C 14	/284. BD*(1) C 14 - C 16	2.65	1.29	0.052
28. BD (1) C 13 - C 14	/288. BD*(1) C 15 - O 19	5.19	0.92	0.062
28. BD (1) C 13 - C 14	/290. BD*(1) C 16 - H 28	3.14	1.09	0.052
29. BD (1) C 13 - C 15	/158. RY*(1) N 12	0.61	1.71	0.029
29. BD (1) C 13 - C 15	/174. RY*(1) C 14	0.73	2.04	0.035
29. BD (1) C 13 - C 15	/198. RY*(1) C 17	1.38	2.03	0.047
29. BD (1) C 13 - C 15	/278. BD*(1) N 11 - N 12	2.35	1.29	0.049
29. BD (1) C 13 - C 15	/280. BD*(1) N 12 - C 13	2.36	1.14	0.046
29. BD (1) C 13 - C 15	/281. BD*(1) C 13 - C 14	3.43	1.20	0.058
29. BD (1) C 13 - C 15	/286. BD*(1) C 14 - H 27	1.26	1.21	0.035
29. BD (1) C 13 - C 15	/287. BD*(1) C 15 - C 17	3.19	1.20	0.055
29. BD (1) C 13 - C 15	/293. BD*(1) C 17 - H 29	1.27	1.20	0.035
30. BD (2) C 13 - C 15	/160. RY*(3) N 12	0.87	0.99	0.028
30. BD (2) C 13 - C 15	/177. RY*(4) C 14	1.02	0.80	0.027
30. BD (2) C 13 - C 15	/200. RY*(3) C 17	0.98	0.79	0.027
30. BD (2) C 13 - C 15	/214. RY*(1) O 19	0.72	1.14	0.028
30. BD (2) C 13 - C 15	/279. BD*(2) N 11 - N 12	21.23	0.24	0.065
30. BD (2) C 13 - C 15	/283. BD*(2) C 13 - C 15	1.23	0.31	0.018
30. BD (2) C 13 - C 15	/285. BD*(2) C 14 - C 16	13.15	0.33	0.060
30. BD (2) C 13 - C 15	/292. BD*(2) C 17 - C 18	10.67	0.32	0.054
31. BD (1) C 14 - C 16	/166. RY*(1) C 13	1.38	1.76	0.044
31. BD (1) C 14 - C 16	/168. RY*(3) C 13	0.58	1.77	0.029
31. BD (1) C 14 - C 16	/206. RY*(1) C 18	0.99	1.94	0.039
31. BD (1) C 14 - C 16	/207. RY*(2) C 18	0.83	2.06	0.037
31. BD (1) C 14 - C 16	/280. BD*(1) N 12 - C 13	2.60	1.12	0.048
31. BD (1) C 14 - C 16	/281. BD*(1) C 13 - C 14	2.35	1.18	0.047
31. BD (1) C 14 - C 16	/286. BD*(1) C 14 - H 27	1.71	1.20	0.040
31. BD (1) C 14 - C 16	/289. BD*(1) C 16 - C 18	2.39	1.21	0.048
31. BD (1) C 14 - C 16	/290. BD*(1) C 16 - H 28	1.65	1.19	0.040
31. BD (1) C 14 - C 16	/294. BD*(1) C 18 - H 30	1.58	1.19	0.039
32. BD (2) C 14 - C 16	/169. RY*(4) C 13	0.69	0.82	0.022
32. BD (2) C 14 - C 16	/208. RY*(3) C 18	0.97	0.77	0.026
32. BD (2) C 14 - C 16	/283. BD*(2) C 13 - C 15	12.05	0.29	0.055
32. BD (2) C 14 - C 16	/292. BD*(2) C 17 - C 18	14.92	0.31	0.060
33. BD (1) C 14 - H 27	/166. RY*(1) C 13	0.81	1.53	0.031
33. BD (1) C 14 - H 27	/190. RY*(1) C 16	1.33	1.76	0.043
33. BD (1) C 14 - H 27	/280. BD*(1) N 12 - C 13	0.70	0.89	0.022
33. BD (1) C 14 - H 27	/282. BD*(1) C 13 - C 15	3.16	1.11	0.053
33. BD (1) C 14 - H 27	/284. BD*(1) C 14 - C 16	1.53	1.16	0.038
33. BD (1) C 14 - H 27	/289. BD*(1) C 16 - C 18	5.62	0.98	0.066
33. BD (1) C 14 - H 27	/290. BD*(1) C 16 - H 28	0.98	0.96	0.027
34. BD (1) C 15 - C 17	/167. RY*(2) C 13	1.48	2.07	0.050
34. BD (1) C 15 - C 17	/206. RY*(1) C 18	0.71	1.85	0.033
34. BD (1) C 15 - C 17	/207. RY*(2) C 18	1.46	1.97	0.048
34. BD (1) C 15 - C 17	/280. BD*(1) N 12 - C 13	4.97	1.04	0.064
34. BD (1) C 15 - C 17	/282. BD*(1) C 13 - C 15	3.77	1.26	0.061
34. BD (1) C 15 - C 17	/291. BD*(1) C 17 - C 18	2.38	1.30	0.050
34. BD (1) C 15 - C 17	/293. BD*(1) C 17 - H 29	0.56	1.10	0.022
34. BD (1) C 15 - C 17	/294. BD*(1) C 18 - H 30	2.87	1.11	0.050
34. BD (1) C 15 - C 17	/295. BD*(1) O 19 - H 32	1.79	0.98	0.037
35. BD (1) C 15 - O 19	/182. RY*(1) C 15	0.60	2.04	0.031
35. BD (1) C 15 - O 19	/281. BD*(1) C 13 - C 14	2.46	1.33	0.052
35. BD (1) C 15 - O 19	/282. BD*(1) C 13 - C 15	1.34	1.49	0.040
35. BD (1) C 15 - O 19	/291. BD*(1) C 17 - C 18	0.83	1.54	0.032
36. BD (1) C 16 - C 18	/175. RY*(2) C 14	1.45	1.77	0.045
36. BD (1) C 16 - C 18	/176. RY*(3) C 14	0.50	1.78	0.027
36. BD (1) C 16 - C 18	/199. RY*(2) C 17	1.91	1.90	0.054
36. BD (1) C 16 - C 18	/284. BD*(1) C 14 - C 16	2.57	1.30	0.052
36. BD (1) C 16 - C 18	/286. BD*(1) C 14 - H 27	3.14	1.10	0.052
36. BD (1) C 16 - C 18	/290. BD*(1) C 16 - H 28	0.59	1.09	0.023
36. BD (1) C 16 - C 18	/291. BD*(1) C 17 - C 18	2.44	1.29	0.050
36. BD (1) C 16 - C 18	/293. BD*(1) C 17 - H 29	3.28	1.08	0.053
36. BD (1) C 16 - C 18	/294. BD*(1) C 18 - H 30	0.59	1.09	0.023

37. BD (1) C 16 - H 28	/174. RY*(1) C 14	1.40	1.79	0.045
37. BD (1) C 16 - H 28	/206. RY*(1) C 18	1.04	1.70	0.038
37. BD (1) C 16 - H 28	/281. BD*(1) C 13 - C 14	5.82	0.95	0.067
37. BD (1) C 16 - H 28	/284. BD*(1) C 14 - C 16	1.50	1.16	0.037
37. BD (1) C 16 - H 28	/286. BD*(1) C 14 - H 27	0.94	0.96	0.027
37. BD (1) C 16 - H 28	/291. BD*(1) C 17 - C 18	2.66	1.15	0.050
38. BD (1) C 17 - C 18	/182. RY*(1) C 15	1.53	1.90	0.048
38. BD (1) C 17 - C 18	/190. RY*(1) C 16	1.06	2.00	0.041
38. BD (1) C 17 - C 18	/191. RY*(2) C 16	0.86	2.08	0.038
38. BD (1) C 17 - C 18	/287. BD*(1) C 15 - C 17	2.11	1.19	0.045
38. BD (1) C 17 - C 18	/288. BD*(1) C 15 - O 19	2.75	1.03	0.048
38. BD (1) C 17 - C 18	/289. BD*(1) C 16 - C 18	2.29	1.22	0.047
38. BD (1) C 17 - C 18	/290. BD*(1) C 16 - H 28	1.61	1.20	0.039
38. BD (1) C 17 - C 18	/293. BD*(1) C 17 - H 29	1.84	1.19	0.042
38. BD (1) C 17 - C 18	/294. BD*(1) C 18 - H 30	1.47	1.20	0.038
39. BD (2) C 17 - C 18	/185. RY*(4) C 15	0.56	0.81	0.020
39. BD (2) C 17 - C 18	/192. RY*(3) C 16	0.98	0.79	0.026
39. BD (2) C 17 - C 18	/283. BD*(2) C 13 - C 15	15.15	0.30	0.062
39. BD (2) C 17 - C 18	/285. BD*(2) C 14 - C 16	12.02	0.32	0.055
40. BD (1) C 17 - H 29	/182. RY*(1) C 15	0.57	1.67	0.028
40. BD (1) C 17 - H 29	/206. RY*(1) C 18	1.31	1.71	0.042
40. BD (1) C 17 - H 29	/282. BD*(1) C 13 - C 15	3.06	1.11	0.052
40. BD (1) C 17 - H 29	/288. BD*(1) C 15 - O 19	0.81	0.79	0.023
40. BD (1) C 17 - H 29	/289. BD*(1) C 16 - C 18	5.45	0.98	0.065
40. BD (1) C 17 - H 29	/291. BD*(1) C 17 - C 18	1.59	1.16	0.038
40. BD (1) C 17 - H 29	/294. BD*(1) C 18 - H 30	0.99	0.96	0.028
41. BD (1) C 18 - H 30	/190. RY*(1) C 16	1.30	1.76	0.043
41. BD (1) C 18 - H 30	/198. RY*(1) C 17	1.59	1.79	0.048
41. BD (1) C 18 - H 30	/284. BD*(1) C 14 - C 16	2.74	1.17	0.051
41. BD (1) C 18 - H 30	/287. BD*(1) C 15 - C 17	6.06	0.95	0.068
41. BD (1) C 18 - H 30	/291. BD*(1) C 17 - C 18	1.36	1.16	0.035
41. BD (1) C 18 - H 30	/293. BD*(1) C 17 - H 29	1.00	0.95	0.028
42. BD (1) O 19 - H 32	/182. RY*(1) C 15	2.86	1.87	0.065
42. BD (1) O 19 - H 32	/287. BD*(1) C 15 - C 17	4.00	1.15	0.061
43. BD (1) O 20 - H 31	/ 70. RY*(1) C 1	2.68	1.84	0.063
43. BD (1) O 20 - H 31	/254. BD*(1) C 1 - C 2	4.47	1.16	0.065
44. CR (1) C 1	/ 78. RY*(1) C 2	1.23	11.77	0.108
44. CR (1) C 1	/ 87. RY*(2) C 3	2.32	11.43	0.145
44. CR (1) C 1	/255. BD*(1) C 1 - C 3	1.92	10.75	0.129
44. CR (1) C 1	/257. BD*(1) C 1 - O 20	1.32	10.41	0.105
44. CR (1) C 1	/258. BD*(1) C 2 - C 4	0.69	10.76	0.078
44. CR (1) C 1	/260. BD*(1) C 2 - C 7	0.67	10.58	0.075
44. CR (1) C 1	/261. BD*(1) C 3 - C 5	0.94	10.59	0.089
45. CR (1) C 2	/ 71. RY*(2) C 1	1.59	11.48	0.121
45. CR (1) C 2	/ 94. RY*(1) C 4	1.07	11.67	0.100
45. CR (1) C 2	/ 95. RY*(2) C 4	1.79	11.58	0.128
45. CR (1) C 2	/119. RY*(2) C 7	1.09	11.18	0.099
45. CR (1) C 2	/255. BD*(1) C 1 - C 3	0.69	10.68	0.077
45. CR (1) C 2	/257. BD*(1) C 1 - O 20	0.59	10.34	0.070
45. CR (1) C 2	/258. BD*(1) C 2 - C 4	1.29	10.69	0.105
45. CR (1) C 2	/263. BD*(1) C 4 - C 6	1.21	10.51	0.101
45. CR (1) C 2	/264. BD*(1) C 4 - C 9	1.03	10.51	0.093
45. CR (1) C 2	/269. BD*(1) C 7 - C 8	0.56	10.71	0.069
46. CR (1) C 3	/ 70. RY*(1) C 1	1.99	11.17	0.133
46. CR (1) C 3	/ 72. RY*(3) C 1	1.38	11.31	0.111
46. CR (1) C 3	/104. RY*(3) C 5	0.96	11.53	0.094
46. CR (1) C 3	/231. RY*(2) H 21	0.58	12.28	0.076
46. CR (1) C 3	/254. BD*(1) C 1 - C 2	1.29	10.48	0.105
46. CR (1) C 3	/255. BD*(1) C 1 - C 3	0.64	10.66	0.074
46. CR (1) C 3	/257. BD*(1) C 1 - O 20	0.75	10.32	0.079
46. CR (1) C 3	/265. BD*(1) C 5 - C 6	0.67	10.67	0.076
47. CR (1) C 4	/ 78. RY*(1) C 2	0.56	11.70	0.072
47. CR (1) C 4	/ 79. RY*(2) C 2	2.22	11.53	0.143
47. CR (1) C 4	/111. RY*(2) C 6	0.75	11.41	0.083
47. CR (1) C 4	/112. RY*(3) C 6	0.53	11.18	0.068
47. CR (1) C 4	/135. RY*(2) C 9	1.12	11.15	0.100
47. CR (1) C 4	/254. BD*(1) C 1 - C 2	1.19	10.50	0.101
47. CR (1) C 4	/258. BD*(1) C 2 - C 4	1.20	10.69	0.102
47. CR (1) C 4	/260. BD*(1) C 2 - C 7	1.04	10.51	0.094
47. CR (1) C 4	/265. BD*(1) C 5 - C 6	0.68	10.68	0.076
47. CR (1) C 4	/268. BD*(1) C 6 - N 11	0.60	10.44	0.071

47. CR (1) C 4	/274. BD*(1) C 9 - C 10	0.56	10.71	0.069
48. CR (1) C 5	/ 89. RY*(4) C 3	0.54	11.26	0.069
48. CR (1) C 5	/111. RY*(2) C 6	3.03	11.39	0.166
48. CR (1) C 5	/233. RY*(2) H 22	0.54	12.29	0.073
48. CR (1) C 5	/255. BD*(1) C 1 - C 3	0.66	10.66	0.075
48. CR (1) C 5	/263. BD*(1) C 4 - C 6	1.30	10.50	0.105
48. CR (1) C 5	/265. BD*(1) C 5 - C 6	0.77	10.67	0.082
48. CR (1) C 5	/268. BD*(1) C 6 - N 11	0.81	10.43	0.083
49. CR (1) C 6	/ 94. RY*(1) C 4	1.15	11.70	0.104
49. CR (1) C 6	/ 96. RY*(3) C 4	0.50	11.19	0.067
49. CR (1) C 6	/103. RY*(2) C 5	2.16	11.33	0.140
49. CR (1) C 6	/258. BD*(1) C 2 - C 4	0.70	10.71	0.078
49. CR (1) C 6	/261. BD*(1) C 3 - C 5	0.95	10.55	0.090
49. CR (1) C 6	/264. BD*(1) C 4 - C 9	0.70	10.54	0.077
49. CR (1) C 6	/265. BD*(1) C 5 - C 6	1.50	10.71	0.114
49. CR (1) C 6	/278. BD*(1) N 11 - N 12	0.81	10.61	0.083
50. CR (1) C 7	/ 79. RY*(2) C 2	0.79	11.50	0.085
50. CR (1) C 7	/127. RY*(2) C 8	2.16	11.36	0.140
50. CR (1) C 7	/235. RY*(2) H 23	0.60	12.29	0.076
50. CR (1) C 7	/254. BD*(1) C 1 - C 2	0.66	10.47	0.075
50. CR (1) C 7	/258. BD*(1) C 2 - C 4	0.82	10.66	0.084
50. CR (1) C 7	/269. BD*(1) C 7 - C 8	0.84	10.69	0.085
50. CR (1) C 7	/272. BD*(1) C 8 - C 10	1.06	10.50	0.095
51. CR (1) C 8	/118. RY*(1) C 7	0.67	11.25	0.077
51. CR (1) C 8	/119. RY*(2) C 7	1.23	11.16	0.105
51. CR (1) C 8	/121. RY*(4) C 7	0.97	11.17	0.093
51. CR (1) C 8	/143. RY*(2) C 10	0.92	11.38	0.091
51. CR (1) C 8	/237. RY*(2) H 24	0.64	11.99	0.078
51. CR (1) C 8	/260. BD*(1) C 2 - C 7	1.17	10.49	0.100
51. CR (1) C 8	/269. BD*(1) C 7 - C 8	0.78	10.69	0.082
51. CR (1) C 8	/274. BD*(1) C 9 - C 10	0.62	10.69	0.073
52. CR (1) C 9	/ 95. RY*(2) C 4	1.07	11.56	0.099
52. CR (1) C 9	/143. RY*(2) C 10	2.13	11.38	0.139
52. CR (1) C 9	/239. RY*(2) H 25	0.54	12.28	0.073
52. CR (1) C 9	/258. BD*(1) C 2 - C 4	0.83	10.66	0.084
52. CR (1) C 9	/263. BD*(1) C 4 - C 6	0.68	10.49	0.076
52. CR (1) C 9	/272. BD*(1) C 8 - C 10	1.07	10.50	0.095
52. CR (1) C 9	/274. BD*(1) C 9 - C 10	0.84	10.69	0.085
53. CR (1) C 10	/127. RY*(2) C 8	0.90	11.36	0.090
53. CR (1) C 10	/134. RY*(1) C 9	0.71	11.26	0.080
53. CR (1) C 10	/135. RY*(2) C 9	1.15	11.12	0.101
53. CR (1) C 10	/137. RY*(4) C 9	1.04	11.21	0.096
53. CR (1) C 10	/241. RY*(2) H 26	0.62	11.97	0.077
53. CR (1) C 10	/264. BD*(1) C 4 - C 9	1.18	10.49	0.100
53. CR (1) C 10	/269. BD*(1) C 7 - C 8	0.62	10.69	0.073
53. CR (1) C 10	/274. BD*(1) C 9 - C 10	0.78	10.69	0.082
54. CR (1) N 11	/110. RY*(1) C 6	2.45	15.17	0.173
54. CR (1) N 11	/159. RY*(2) N 12	1.87	15.28	0.151
54. CR (1) N 11	/265. BD*(1) C 5 - C 6	0.70	14.82	0.091
54. CR (1) N 11	/280. BD*(1) N 12 - C 13	1.23	14.58	0.121
55. CR (1) N 12	/151. RY*(2) N 11	1.81	15.31	0.149
55. CR (1) N 12	/166. RY*(1) C 13	2.20	15.22	0.164
55. CR (1) N 12	/268. BD*(1) C 6 - N 11	1.26	14.58	0.122
55. CR (1) N 12	/281. BD*(1) C 13 - C 14	0.58	14.65	0.083
56. CR (1) C 13	/175. RY*(2) C 14	1.22	11.21	0.104
56. CR (1) C 13	/182. RY*(1) C 15	1.93	11.24	0.132
56. CR (1) C 13	/183. RY*(2) C 15	0.68	11.42	0.079
56. CR (1) C 13	/184. RY*(3) C 15	0.64	11.31	0.076
56. CR (1) C 13	/278. BD*(1) N 11 - N 12	0.81	10.62	0.083
56. CR (1) C 13	/282. BD*(1) C 13 - C 15	1.25	10.69	0.104
56. CR (1) C 13	/284. BD*(1) C 14 - C 16	0.57	10.74	0.070
56. CR (1) C 13	/287. BD*(1) C 15 - C 17	1.01	10.53	0.093
56. CR (1) C 13	/288. BD*(1) C 15 - O 19	0.79	10.37	0.081
57. CR (1) C 14	/167. RY*(2) C 13	1.50	11.45	0.117
57. CR (1) C 14	/191. RY*(2) C 16	2.21	11.37	0.142
57. CR (1) C 14	/243. RY*(2) H 27	0.53	12.28	0.072
57. CR (1) C 14	/282. BD*(1) C 13 - C 15	0.76	10.64	0.081
57. CR (1) C 14	/284. BD*(1) C 14 - C 16	0.89	10.69	0.087
57. CR (1) C 14	/289. BD*(1) C 16 - C 18	1.07	10.50	0.095
58. CR (1) C 15	/166. RY*(1) C 13	0.92	11.15	0.091
58. CR (1) C 15	/167. RY*(2) C 13	1.14	11.54	0.103

58. CR (1) C 15	/168. RY*(3) C 13	1.07	11.16	0.098
58. CR (1) C 15	/199. RY*(2) C 17	1.00	11.39	0.095
58. CR (1) C 15	/280. BD*(1) N 12 - C 13	1.00	10.52	0.092
58. CR (1) C 15	/281. BD*(1) C 13 - C 14	1.00	10.58	0.093
58. CR (1) C 15	/282. BD*(1) C 13 - C 15	1.73	10.73	0.123
58. CR (1) C 15	/288. BD*(1) C 15 - O 19	1.21	10.41	0.101
58. CR (1) C 15	/291. BD*(1) C 17 - C 18	0.56	10.78	0.069
59. CR (1) C 16	/174. RY*(1) C 14	0.58	11.31	0.073
59. CR (1) C 16	/175. RY*(2) C 14	0.55	11.16	0.070
59. CR (1) C 16	/176. RY*(3) C 14	1.70	11.17	0.123
59. CR (1) C 16	/207. RY*(2) C 18	0.93	11.35	0.092
59. CR (1) C 16	/245. RY*(2) H 28	0.66	12.29	0.081
59. CR (1) C 16	/281. BD*(1) C 13 - C 14	1.10	10.48	0.097
59. CR (1) C 16	/284. BD*(1) C 14 - C 16	0.78	10.69	0.082
59. CR (1) C 16	/291. BD*(1) C 17 - C 18	0.61	10.68	0.072
60. CR (1) C 17	/183. RY*(2) C 15	1.74	11.37	0.126
60. CR (1) C 17	/207. RY*(2) C 18	2.16	11.36	0.140
60. CR (1) C 17	/247. RY*(2) H 29	0.63	12.30	0.079
60. CR (1) C 17	/282. BD*(1) C 13 - C 15	0.82	10.64	0.084
60. CR (1) C 17	/288. BD*(1) C 15 - O 19	0.51	10.32	0.065
60. CR (1) C 17	/289. BD*(1) C 16 - C 18	1.04	10.51	0.094
60. CR (1) C 17	/291. BD*(1) C 17 - C 18	0.91	10.69	0.088
61. CR (1) C 18	/191. RY*(2) C 16	0.89	11.38	0.090
61. CR (1) C 18	/198. RY*(1) C 17	0.80	11.32	0.085
61. CR (1) C 18	/199. RY*(2) C 17	1.64	11.30	0.122
61. CR (1) C 18	/249. RY*(2) H 30	0.64	11.97	0.078
61. CR (1) C 18	/284. BD*(1) C 14 - C 16	0.61	10.70	0.072
61. CR (1) C 18	/287. BD*(1) C 15 - C 17	1.10	10.48	0.097
61. CR (1) C 18	/291. BD*(1) C 17 - C 18	0.72	10.69	0.079
62. CR (1) O 19	/182. RY*(1) C 15	2.24	20.10	0.190
62. CR (1) O 19	/253. RY*(2) H 32	0.58	20.97	0.099
62. CR (1) O 19	/282. BD*(1) C 13 - C 15	0.59	19.55	0.097
63. CR (1) O 20	/ 70. RY*(1) C 1	2.08	20.09	0.183
63. CR (1) O 20	/255. BD*(1) C 1 - C 3	0.55	19.57	0.093
64. LP (1) N 11	/110. RY*(1) C 6	3.30	1.34	0.060
64. LP (1) N 11	/158. RY*(1) N 12	1.62	1.31	0.042
64. LP (1) N 11	/159. RY*(2) N 12	1.04	1.45	0.035
64. LP (1) N 11	/263. BD*(1) C 4 - C 6	0.94	0.82	0.025
64. LP (1) N 11	/265. BD*(1) C 5 - C 6	6.93	0.99	0.074
65. LP (1) N 12	/150. RY*(1) N 11	2.06	1.36	0.048
65. LP (1) N 12	/151. RY*(2) N 11	1.08	1.48	0.036
65. LP (1) N 12	/166. RY*(1) C 13	2.84	1.39	0.057
65. LP (1) N 12	/281. BD*(1) C 13 - C 14	7.99	0.82	0.072
65. LP (1) N 12	/282. BD*(1) C 13 - C 15	0.80	0.97	0.025
65. LP (1) N 12	/295. BD*(1) O 19 - H 32	0.78	0.69	0.021
66. LP (1) O 19	/182. RY*(1) C 15	2.72	1.73	0.061
66. LP (1) O 19	/253. RY*(2) H 32	0.68	2.60	0.038
66. LP (1) O 19	/282. BD*(1) C 13 - C 15	6.19	1.18	0.076
67. LP (2) O 19	/283. BD*(2) C 13 - C 15	27.81	0.34	0.091
68. LP (1) O 20	/ 70. RY*(1) C 1	2.63	1.72	0.060
68. LP (1) O 20	/255. BD*(1) C 1 - C 3	5.28	1.20	0.071
69. LP (2) O 20	/256. BD*(2) C 1 - C 3	27.19	0.35	0.090
256. BD*(2) C 1 - C 3	/ 73. RY*(4) C 1	1.13	0.51	0.058
256. BD*(2) C 1 - C 3	/ 88. RY*(3) C 3	2.18	0.48	0.078
256. BD*(2) C 1 - C 3	/259. BD*(2) C 2 - C 4	132.62	0.02	0.073
259. BD*(2) C 2 - C 4	/ 81. RY*(4) C 2	2.32	0.54	0.075
259. BD*(2) C 2 - C 4	/ 97. RY*(4) C 4	2.31	0.55	0.075
266. BD*(2) C 5 - C 6	/105. RY*(4) C 5	2.35	0.48	0.082
266. BD*(2) C 5 - C 6	/113. RY*(4) C 6	1.23	0.52	0.062
270. BD*(2) C 7 - C 8	/120. RY*(3) C 7	1.43	0.45	0.075
270. BD*(2) C 7 - C 8	/128. RY*(3) C 8	1.44	0.46	0.077
275. BD*(2) C 9 - C 10	/136. RY*(3) C 9	1.40	0.47	0.076
275. BD*(2) C 9 - C 10	/144. RY*(3) C 10	1.43	0.46	0.076
279. BD*(2) N 11 - N 12	/152. RY*(3) N 11	1.04	0.75	0.070
279. BD*(2) N 11 - N 12	/160. RY*(3) N 12	0.98	0.75	0.067
279. BD*(2) N 11 - N 12	/266. BD*(2) C 5 - C 6	19.28	0.08	0.068
279. BD*(2) N 11 - N 12	/283. BD*(2) C 13 - C 15	21.60	0.07	0.061
283. BD*(2) C 13 - C 15	/169. RY*(4) C 13	1.71	0.53	0.065
283. BD*(2) C 13 - C 15	/185. RY*(4) C 15	1.72	0.51	0.064
283. BD*(2) C 13 - C 15	/285. BD*(2) C 14 - C 16	76.25	0.02	0.069
283. BD*(2) C 13 - C 15	/292. BD*(2) C 17 - C 18	116.70	0.02	0.072

285. BD*(2) C 14 - C 16	/177. RY*(4) C 14	1.47	0.47	0.076
285. BD*(2) C 14 - C 16	/192. RY*(3) C 16	1.48	0.47	0.076
292. BD*(2) C 17 - C 18	/200. RY*(3) C 17	1.58	0.46	0.076
292. BD*(2) C 17 - C 18	/208. RY*(3) C 18	1.56	0.47	0.076

Table (S6): Summary of Natural Population Analysis **of the** Cr(III) complex:

			Natural Population			
Atom	No	Natural Charge	Core	Valence	Rydberg	Total
C	1	0.30563	1.99867	3.67636	0.01934	5.69437
C	2	-0.08377	1.99885	4.06796	0.01696	6.08377
C	3	-0.18124	1.99903	4.16339	0.01882	6.18124
C	4	-0.03697	1.99885	4.02025	0.01787	6.03697
C	5	-0.22476	1.99894	4.20641	0.01942	6.22476
C	6	0.14716	1.99876	3.83109	0.02298	5.85284
C	7	-0.24318	1.99907	4.22811	0.01600	6.24318
C	8	-0.15576	1.99909	4.13997	0.01669	6.15576
C	9	-0.22471	1.99905	4.21058	0.01508	6.22471
C	10	-0.21236	1.99907	4.19690	0.01638	6.21236
N	11	-0.35329	1.99930	5.32830	0.02569	7.35329
N	12	-0.01950	1.99916	5.00064	0.01971	7.01950
C	13	0.06139	1.99873	3.92217	0.01771	5.93861
C	14	-0.23787	1.99905	4.21456	0.02426	6.23787
C	15	0.29681	1.99867	3.68396	0.02056	5.70319
C	16	-0.17334	1.99912	4.15446	0.01976	6.17334
C	17	-0.23487	1.99901	4.21354	0.02232	6.23487
C	18	-0.21038	1.99913	4.19655	0.01470	6.21038
O	19	-0.68886	1.99982	6.68378	0.00526	8.68886
O	20	-0.64528	1.99979	6.64168	0.00381	8.64528
H	21	0.21917	0.00000	0.77836	0.00248	0.78083
H	22	0.20463	0.00000	0.79255	0.00282	0.79537
H	23	0.20517	0.00000	0.79306	0.00177	0.79483
H	24	0.22735	0.00000	0.76972	0.00293	0.77265
H	25	0.20564	0.00000	0.79257	0.00180	0.79436
H	26	0.20955	0.00000	0.78813	0.00232	0.79045
H	27	0.20757	0.00000	0.79125	0.00118	0.79243
H	28	0.21477	0.00000	0.78263	0.00259	0.78523
H	29	0.21489	0.00000	0.78391	0.00120	0.78511
H	30	0.49914	0.00000	0.49975	0.00112	0.50086
H	31	0.22841	0.00000	0.76871	0.00287	0.77159
C	32	0.30866	1.99868	3.67359	0.01908	5.69134
C	33	-0.08055	1.99883	4.06454	0.01717	6.08055
C	34	-0.16290	1.99902	4.14537	0.01851	6.16290
C	35	-0.07761	1.99886	4.05967	0.01908	6.07761
C	36	-0.20982	1.99893	4.18983	0.02106	6.20982
C	37	0.13207	1.99875	3.84524	0.02395	5.86793
C	38	-0.23789	1.99907	4.22290	0.01593	6.23789
C	39	-0.16951	1.99909	4.15414	0.01627	6.16951
C	40	-0.25088	1.99906	4.23580	0.01602	6.25088
C	41	-0.19769	1.99907	4.18109	0.01753	6.19769
N	42	-0.39542	1.99931	5.36935	0.02676	7.39542
N	43	0.00615	1.99915	4.97485	0.01985	6.99385
C	44	0.05764	1.99873	3.92590	0.01772	5.94236
C	45	-0.22003	1.99905	4.19782	0.02315	6.22003
C	46	0.30565	1.99867	3.67526	0.02042	5.69435
C	47	-0.16798	1.99912	4.14916	0.01970	6.16798
C	48	-0.22603	1.99901	4.20597	0.02105	6.22603
C	49	-0.20794	1.99913	4.19454	0.01427	6.20794
O	50	-0.64330	1.99979	6.63974	0.00378	8.64330
H	51	0.22254	0.00000	0.77498	0.00248	0.77746
H	52	0.20665	0.00000	0.79058	0.00277	0.79335
H	53	0.20894	0.00000	0.78985	0.00121	0.79106
H	54	0.21106	0.00000	0.78553	0.00341	0.78894
H	55	0.20760	0.00000	0.79059	0.00181	0.79240
H	56	0.21213	0.00000	0.78565	0.00222	0.78787
H	57	0.20894	0.00000	0.78988	0.00118	0.79106
H	58	0.21794	0.00000	0.77991	0.00215	0.78206
H	59	0.21743	0.00000	0.78140	0.00117	0.78257
H	60	0.49998	0.00000	0.49885	0.00117	0.50002
H	61	0.22623	0.00000	0.77050	0.00327	0.77377
O	62	-0.70008	1.99981	6.69514	0.00513	8.70008
Cr	63	1.44120	17.98827	4.54653	0.02399	22.55880

H	64	0.51876	0.00000	0.47826	0.00298	0.48124
H	65	0.51891	0.00000	0.47765	0.00344	0.48109
O	66	-0.86176	1.99979	6.85673	0.00524	8.86176
Cl	67	-0.64023	9.99978	7.63787	0.00258	17.64023
* Total *		0.00000	109.95011	214.25595	0.79394	325.00000

Table (S7): NBO data of the Cr(III) complex:

Donor NBO (i)	Acceptor NBO (j)	kcal/mol	a.u.	a.u.
within unit 1				
1. BD (1) C 1 - C 2	/198. RY*(2) C 3	0.55	1.99	0.042
1. BD (1) C 1 - C 2	/199. RY*(3) C 3	0.25	2.02	0.029
1. BD (1) C 1 - C 2	/206. RY*(2) C 4	0.73	2.25	0.052
1. BD (1) C 1 - C 2	/229. RY*(1) C 7	0.41	1.53	0.032
1. BD (1) C 1 - C 2	/230. RY*(2) C 7	0.41	1.53	0.032
1. BD (1) C 1 - C 2	/592. BD*(1) C 1 - C 3	1.47	1.26	0.055
1. BD (1) C 1 - C 2	/594. BD*(1) C 2 - C 4	1.20	1.27	0.049
1. BD (1) C 1 - C 2	/595. BD*(1) C 2 - C 7	0.61	1.10	0.033
1. BD (1) C 1 - C 2	/597. BD*(1) C 3 - H 21	1.36	1.09	0.049
1. BD (1) C 1 - C 2	/599. BD*(1) C 4 - C 9	2.02	1.12	0.060
1. BD (1) C 1 - C 2	/603. BD*(1) C 7 - C 8	0.70	1.30	0.038
2. BD (2) C 1 - C 2	/ 9. BD*(2) C 3 - C 5	5.68	0.23	0.066
2. BD (2) C 1 - C 2	/ 13. BD*(2) C 4 - C 6	5.28	0.24	0.062
2. BD (2) C 1 - C 2	/197. RY*(1) C 3	1.20	0.77	0.039
2. BD (2) C 1 - C 2	/205. RY*(1) C 4	0.80	0.87	0.034
2. BD (2) C 1 - C 2	/333. RY*(1) O 20	0.38	1.15	0.027
2. BD (2) C 1 - C 2	/604. BD*(2) C 7 - C 8	6.60	0.30	0.064
3. BD (1) C 1 - C 3	/191. RY*(3) C 2	0.69	2.23	0.050
3. BD (1) C 1 - C 3	/215. RY*(3) C 5	0.50	2.01	0.040
3. BD (1) C 1 - C 3	/590. BD*(1) C 1 - C 2	1.44	1.19	0.053
3. BD (1) C 1 - C 3	/593. BD*(1) C 1 - O 20	0.28	1.04	0.021
3. BD (1) C 1 - C 3	/595. BD*(1) C 2 - C 7	1.13	1.22	0.047
3. BD (1) C 1 - C 3	/596. BD*(1) C 3 - C 5	0.73	1.23	0.038
3. BD (1) C 1 - C 3	/597. BD*(1) C 3 - H 21	0.60	1.20	0.034
3. BD (1) C 1 - C 3	/601. BD*(1) C 5 - H 31	0.64	1.22	0.035
3. BD (1) C 1 - C 3	/626. BD*(1) O 20 - H 30	0.74	1.08	0.036
4. BD (1) C 1 - O 20	/198. RY*(2) C 3	0.29	2.24	0.032
4. BD (1) C 1 - O 20	/592. BD*(1) C 1 - C 3	0.37	1.51	0.030
4. BD (1) C 1 - O 20	/594. BD*(1) C 2 - C 4	0.56	1.52	0.037
4. BD (1) C 1 - O 20	/596. BD*(1) C 3 - C 5	0.99	1.36	0.046
5. BD (1) C 2 - C 4	/183. RY*(3) C 1	0.45	2.21	0.040
5. BD (1) C 2 - C 4	/222. RY*(2) C 6	0.48	1.95	0.039
5. BD (1) C 2 - C 4	/229. RY*(1) C 7	0.29	1.62	0.028
5. BD (1) C 2 - C 4	/245. RY*(1) C 9	0.39	1.98	0.035
5. BD (1) C 2 - C 4	/590. BD*(1) C 1 - C 2	1.21	1.16	0.047
5. BD (1) C 2 - C 4	/593. BD*(1) C 1 - O 20	1.32	1.02	0.046
5. BD (1) C 2 - C 4	/595. BD*(1) C 2 - C 7	1.57	1.19	0.055
5. BD (1) C 2 - C 4	/598. BD*(1) C 4 - C 6	1.50	1.20	0.054
5. BD (1) C 2 - C 4	/599. BD*(1) C 4 - C 9	1.48	1.21	0.053
5. BD (1) C 2 - C 4	/602. BD*(1) C 6 - N 11	1.44	1.12	0.051
5. BD (1) C 2 - C 4	/605. BD*(1) C 7 - H 22	0.76	1.19	0.038
5. BD (1) C 2 - C 4	/610. BD*(1) C 9 - H 24	0.69	1.22	0.037
6. BD (1) C 2 - C 7	/183. RY*(3) C 1	0.35	2.10	0.034
6. BD (1) C 2 - C 7	/206. RY*(2) C 4	0.48	2.24	0.042
6. BD (1) C 2 - C 7	/238. RY*(2) C 8	0.32	1.98	0.032
6. BD (1) C 2 - C 7	/239. RY*(3) C 8	0.70	1.99	0.047
6. BD (1) C 2 - C 7	/590. BD*(1) C 1 - C 2	0.48	1.05	0.029
6. BD (1) C 2 - C 7	/592. BD*(1) C 1 - C 3	0.73	1.25	0.038
6. BD (1) C 2 - C 7	/594. BD*(1) C 2 - C 4	1.77	1.25	0.060
6. BD (1) C 2 - C 7	/598. BD*(1) C 4 - C 6	2.41	1.09	0.065
6. BD (1) C 2 - C 7	/603. BD*(1) C 7 - C 8	1.26	1.28	0.051
6. BD (1) C 2 - C 7	/605. BD*(1) C 7 - H 22	0.30	1.08	0.023
6. BD (1) C 2 - C 7	/607. BD*(1) C 8 - H 23	1.36	1.08	0.049
7. BD (1) C 3 - C 5	/182. RY*(2) C 1	0.50	1.57	0.036
7. BD (1) C 3 - C 5	/183. RY*(3) C 1	0.37	2.12	0.036
7. BD (1) C 3 - C 5	/223. RY*(3) C 6	0.97	1.76	0.053
7. BD (1) C 3 - C 5	/592. BD*(1) C 1 - C 3	0.84	1.26	0.041
7. BD (1) C 3 - C 5	/593. BD*(1) C 1 - O 20	2.68	0.92	0.063
7. BD (1) C 3 - C 5	/600. BD*(1) C 5 - C 6	1.08	1.29	0.047
7. BD (1) C 3 - C 5	/602. BD*(1) C 6 - N 11	2.94	1.02	0.069
8. BD (2) C 3 - C 5	/ 13. BD*(2) C 4 - C 6	6.01	0.23	0.067

8. BD (2) C 3 - C 5	/181. RY*(1) C 1	0.28	1.04	0.022
8. BD (2) C 3 - C 5	/221. RY*(1) C 6	0.30	1.14	0.024
8. BD (2) C 3 - C 5	/591. BD*(2) C 1 - C 2	7.08	0.23	0.069
9. BD*(2) C 3 - C 5	/197. RY*(1) C 3	1.76	0.54	0.051
9. BD*(2) C 3 - C 5	/213. RY*(1) C 5	1.68	0.59	0.052
10. BD (1) C 3 - H 21	/183. RY*(3) C 1	0.47	1.99	0.039
10. BD (1) C 3 - H 21	/186. RY*(6) C 1	0.29	8.73	0.064
10. BD (1) C 3 - H 21	/214. RY*(2) C 5	0.55	1.92	0.041
10. BD (1) C 3 - H 21	/590. BD*(1) C 1 - C 2	3.08	0.94	0.068
10. BD (1) C 3 - H 21	/592. BD*(1) C 1 - C 3	0.39	1.13	0.027
10. BD (1) C 3 - H 21	/593. BD*(1) C 1 - O 20	0.94	0.79	0.034
10. BD (1) C 3 - H 21	/600. BD*(1) C 5 - C 6	1.44	1.15	0.051
10. BD (1) C 3 - H 21	/601. BD*(1) C 5 - H 31	0.29	0.97	0.021
11. BD (1) C 4 - C 6	/190. RY*(2) C 2	0.77	2.34	0.054
11. BD (1) C 4 - C 6	/214. RY*(2) C 5	0.39	2.05	0.036
11. BD (1) C 4 - C 6	/245. RY*(1) C 9	0.62	1.89	0.044
11. BD (1) C 4 - C 6	/261. RY*(1) N 11	0.54	1.52	0.036
11. BD (1) C 4 - C 6	/594. BD*(1) C 2 - C 4	1.44	1.27	0.054
11. BD (1) C 4 - C 6	/595. BD*(1) C 2 - C 7	1.97	1.10	0.059
11. BD (1) C 4 - C 6	/599. BD*(1) C 4 - C 9	0.77	1.11	0.037
11. BD (1) C 4 - C 6	/600. BD*(1) C 5 - C 6	1.59	1.28	0.057
11. BD (1) C 4 - C 6	/601. BD*(1) C 5 - H 31	1.43	1.10	0.050
11. BD (1) C 4 - C 6	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.29	1.02	0.022
11. BD (1) C 4 - C 6	/608. BD*(1) C 9 - C 10	0.71	1.31	0.039
12. BD (2) C 4 - C 6	/ 9. BD*(2) C 3 - C 5	6.14	0.22	0.066
12. BD (2) C 4 - C 6	/189. RY*(1) C 2	0.90	0.86	0.036
12. BD (2) C 4 - C 6	/213. RY*(1) C 5	1.21	0.81	0.041
12. BD (2) C 4 - C 6	/246. RY*(2) C 9	0.57	0.88	0.029
12. BD (2) C 4 - C 6	/591. BD*(2) C 1 - C 2	6.68	0.22	0.065
12. BD (2) C 4 - C 6	/609. BD*(2) C 9 - C 10	7.25	0.31	0.066
12. BD (2) C 4 - C 6	/612. BD*(1) N 11 - N 12	2.11	0.76	0.052
13. BD*(2) C 4 - C 6	/189. RY*(1) C 2	0.77	0.62	0.038
13. BD*(2) C 4 - C 6	/205. RY*(1) C 4	1.65	0.63	0.055
13. BD*(2) C 4 - C 6	/213. RY*(1) C 5	1.37	0.58	0.048
13. BD*(2) C 4 - C 6	/221. RY*(1) C 6	0.72	0.90	0.043
13. BD*(2) C 4 - C 6	/222. RY*(2) C 6	0.27	1.25	0.032
13. BD*(2) C 4 - C 6	/246. RY*(2) C 9	0.44	0.65	0.029
13. BD*(2) C 4 - C 6	/604. BD*(2) C 7 - C 8	0.28	0.06	0.006
13. BD*(2) C 4 - C 6	/609. BD*(2) C 9 - C 10	38.89	0.08	0.078
13. BD*(2) C 4 - C 6	/612. BD*(1) N 11 - N 12	2.40	0.53	0.060
14. BD (1) C 4 - C 9	/190. RY*(2) C 2	0.41	2.32	0.039
14. BD (1) C 4 - C 9	/221. RY*(1) C 6	0.45	1.49	0.033
14. BD (1) C 4 - C 9	/222. RY*(2) C 6	0.80	1.83	0.049
14. BD (1) C 4 - C 9	/254. RY*(2) C 10	0.31	2.01	0.032
14. BD (1) C 4 - C 9	/255. RY*(3) C 10	0.74	2.01	0.049
14. BD (1) C 4 - C 9	/590. BD*(1) C 1 - C 2	2.40	1.05	0.063
14. BD (1) C 4 - C 9	/594. BD*(1) C 2 - C 4	1.72	1.25	0.059
14. BD (1) C 4 - C 9	/598. BD*(1) C 4 - C 6	0.75	1.08	0.036
14. BD (1) C 4 - C 9	/600. BD*(1) C 5 - C 6	1.02	1.26	0.045
14. BD (1) C 4 - C 9	/608. BD*(1) C 9 - C 10	1.28	1.29	0.052
14. BD (1) C 4 - C 9	/610. BD*(1) C 9 - H 24	0.34	1.10	0.025
14. BD (1) C 4 - C 9	/611. BD*(1) C 10 - H 25	1.45	1.08	0.050
15. BD (1) C 5 - C 6	/199. RY*(3) C 3	0.65	2.13	0.047
15. BD (1) C 5 - C 6	/207. RY*(3) C 4	0.70	2.36	0.051
15. BD (1) C 5 - C 6	/261. RY*(1) N 11	0.70	1.63	0.043
15. BD (1) C 5 - C 6	/596. BD*(1) C 3 - C 5	0.94	1.22	0.043
15. BD (1) C 5 - C 6	/597. BD*(1) C 3 - H 21	0.59	1.19	0.034
15. BD (1) C 5 - C 6	/598. BD*(1) C 4 - C 6	1.65	1.21	0.057
15. BD (1) C 5 - C 6	/599. BD*(1) C 4 - C 9	1.09	1.22	0.046
15. BD (1) C 5 - C 6	/601. BD*(1) C 5 - H 31	0.81	1.21	0.040
15. BD (1) C 5 - C 6	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.71	1.13	0.036
15. BD (1) C 5 - C 6	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.51	1.24	0.032
16. BD (1) C 5 - H 31	/198. RY*(2) C 3	0.45	1.85	0.037
16. BD (1) C 5 - H 31	/221. RY*(1) C 6	0.42	1.36	0.030
16. BD (1) C 5 - H 31	/222. RY*(2) C 6	0.79	1.71	0.047
16. BD (1) C 5 - H 31	/592. BD*(1) C 1 - C 3	1.36	1.12	0.049
16. BD (1) C 5 - H 31	/597. BD*(1) C 3 - H 21	0.29	0.94	0.021
16. BD (1) C 5 - H 31	/598. BD*(1) C 4 - C 6	3.32	0.96	0.072
16. BD (1) C 5 - H 31	/600. BD*(1) C 5 - C 6	0.71	1.14	0.036
16. BD (1) C 5 - H 31	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.69	0.88	0.031
17. BD (1) C 6 - N 11	/207. RY*(3) C 4	0.68	2.39	0.051

17. BD (1) C 6 - N 11	/214. RY*(2) C 5	0.60	2.19	0.046
17. BD (1) C 6 - N 11	/269. RY*(1) N 12	0.46	1.58	0.034
17. BD (1) C 6 - N 11	/270. RY*(2) N 12	0.65	1.61	0.041
17. BD (1) C 6 - N 11	/594. BD*(1) C 2 - C 4	0.72	1.41	0.040
17. BD (1) C 6 - N 11	/596. BD*(1) C 3 - C 5	1.22	1.25	0.049
17. BD (1) C 6 - N 11	/598. BD*(1) C 4 - C 6	0.46	1.24	0.030
17. BD (1) C 6 - N 11	/600. BD*(1) C 5 - C 6	0.86	1.42	0.044
17. BD (1) C 6 - N 11	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.60	1.27	0.035
17. BD (1) C 6 - N 11	/613. BD*(1) N 12 - C 13	2.81	1.14	0.072
18. BD (1) C 7 - C 8	/190. RY*(2) C 2	0.49	2.43	0.044
18. BD (1) C 7 - C 8	/191. RY*(3) C 2	0.45	2.20	0.040
18. BD (1) C 7 - C 8	/254. RY*(2) C 10	0.44	2.12	0.038
18. BD (1) C 7 - C 8	/255. RY*(3) C 10	0.39	2.13	0.037
18. BD (1) C 7 - C 8	/590. BD*(1) C 1 - C 2	1.26	1.16	0.049
18. BD (1) C 7 - C 8	/595. BD*(1) C 2 - C 7	1.35	1.19	0.051
18. BD (1) C 7 - C 8	/605. BD*(1) C 7 - H 22	0.80	1.19	0.039
18. BD (1) C 7 - C 8	/606. BD*(1) C 8 - C 10	0.94	1.21	0.043
18. BD (1) C 7 - C 8	/607. BD*(1) C 8 - H 23	0.65	1.19	0.035
18. BD (1) C 7 - C 8	/611. BD*(1) C 10 - H 25	0.78	1.20	0.039
19. BD (2) C 7 - C 8	/189. RY*(1) C 2	0.40	0.86	0.024
19. BD (2) C 7 - C 8	/253. RY*(1) C 10	0.73	0.78	0.031
19. BD (2) C 7 - C 8	/591. BD*(2) C 1 - C 2	3.47	0.23	0.049
19. BD (2) C 7 - C 8	/604. BD*(2) C 7 - C 8	0.36	0.30	0.015
19. BD (2) C 7 - C 8	/609. BD*(2) C 9 - C 10	4.59	0.32	0.054
20. BD (1) C 7 - H 22	/190. RY*(2) C 2	0.67	2.20	0.049
20. BD (1) C 7 - H 22	/238. RY*(2) C 8	0.72	1.86	0.046
20. BD (1) C 7 - H 22	/594. BD*(1) C 2 - C 4	1.59	1.13	0.054
20. BD (1) C 7 - H 22	/603. BD*(1) C 7 - C 8	0.65	1.16	0.035
20. BD (1) C 7 - H 22	/606. BD*(1) C 8 - C 10	2.59	0.99	0.064
20. BD (1) C 7 - H 22	/607. BD*(1) C 8 - H 23	0.46	0.96	0.027
21. BD (1) C 8 - C 10	/231. RY*(3) C 7	0.94	1.78	0.052
21. BD (1) C 8 - C 10	/247. RY*(3) C 9	0.92	1.77	0.051
21. BD (1) C 8 - C 10	/603. BD*(1) C 7 - C 8	1.05	1.29	0.047
21. BD (1) C 8 - C 10	/605. BD*(1) C 7 - H 22	1.66	1.09	0.054
21. BD (1) C 8 - C 10	/608. BD*(1) C 9 - C 10	1.11	1.30	0.048
21. BD (1) C 8 - C 10	/610. BD*(1) C 9 - H 24	1.66	1.11	0.054
22. BD (1) C 8 - H 23	/229. RY*(1) C 7	0.44	1.38	0.031
22. BD (1) C 8 - H 23	/230. RY*(2) C 7	0.45	1.38	0.032
22. BD (1) C 8 - H 23	/254. RY*(2) C 10	0.58	1.88	0.042
22. BD (1) C 8 - H 23	/595. BD*(1) C 2 - C 7	3.22	0.95	0.070
22. BD (1) C 8 - H 23	/603. BD*(1) C 7 - C 8	0.56	1.16	0.032
22. BD (1) C 8 - H 23	/605. BD*(1) C 7 - H 22	0.57	0.96	0.030
22. BD (1) C 8 - H 23	/608. BD*(1) C 9 - C 10	1.32	1.17	0.050
22. BD (1) C 8 - H 23	/611. BD*(1) C 10 - H 25	0.26	0.96	0.020
23. BD (1) C 9 - C 10	/206. RY*(2) C 4	0.63	2.34	0.048
23. BD (1) C 9 - C 10	/207. RY*(3) C 4	0.34	2.33	0.036
23. BD (1) C 9 - C 10	/238. RY*(2) C 8	0.38	2.08	0.036
23. BD (1) C 9 - C 10	/239. RY*(3) C 8	0.38	2.09	0.036
23. BD (1) C 9 - C 10	/598. BD*(1) C 4 - C 6	1.20	1.18	0.048
23. BD (1) C 9 - C 10	/599. BD*(1) C 4 - C 9	1.33	1.20	0.051
23. BD (1) C 9 - C 10	/606. BD*(1) C 8 - C 10	1.02	1.20	0.044
23. BD (1) C 9 - C 10	/607. BD*(1) C 8 - H 23	0.76	1.18	0.038
23. BD (1) C 9 - C 10	/610. BD*(1) C 9 - H 24	0.87	1.21	0.041
23. BD (1) C 9 - C 10	/611. BD*(1) C 10 - H 25	0.76	1.19	0.038
24. BD (2) C 9 - C 10	/ 13. BD*(2) C 4 - C 6	3.31	0.23	0.049
24. BD (2) C 9 - C 10	/205. RY*(1) C 4	0.35	0.86	0.022
24. BD (2) C 9 - C 10	/237. RY*(1) C 8	0.68	0.76	0.029
24. BD (2) C 9 - C 10	/604. BD*(2) C 7 - C 8	4.88	0.29	0.055
24. BD (2) C 9 - C 10	/609. BD*(2) C 9 - C 10	0.41	0.30	0.016
25. BD (1) C 9 - H 24	/206. RY*(2) C 4	0.66	2.10	0.047
25. BD (1) C 9 - H 24	/254. RY*(2) C 10	0.66	1.87	0.045
25. BD (1) C 9 - H 24	/594. BD*(1) C 2 - C 4	1.72	1.12	0.055
25. BD (1) C 9 - H 24	/606. BD*(1) C 8 - C 10	2.69	0.97	0.065
25. BD (1) C 9 - H 24	/608. BD*(1) C 9 - C 10	0.80	1.16	0.039
25. BD (1) C 9 - H 24	/611. BD*(1) C 10 - H 25	0.47	0.95	0.027
26. BD (1) C 10 - H 25	/238. RY*(2) C 8	0.54	1.85	0.040
26. BD (1) C 10 - H 25	/245. RY*(1) C 9	0.68	1.74	0.044
26. BD (1) C 10 - H 25	/599. BD*(1) C 4 - C 9	3.16	0.96	0.070
26. BD (1) C 10 - H 25	/603. BD*(1) C 7 - C 8	1.32	1.15	0.049
26. BD (1) C 10 - H 25	/607. BD*(1) C 8 - H 23	0.26	0.95	0.020
26. BD (1) C 10 - H 25	/608. BD*(1) C 9 - C 10	0.70	1.16	0.036

26. BD (1) C 10 - H 25	/610. BD*(1) C 9 - H 24	0.47	0.97	0.027
27. BD (1) N 11 - N 12	/221. RY*(1) C 6	1.02	1.85	0.055
27. BD (1) N 11 - N 12	/277. RY*(1) C 13	0.74	2.11	0.050
27. BD (1) N 11 - N 12	/278. RY*(2) C 13	0.79	2.42	0.055
27. BD (1) N 11 - N 12	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.61	1.36	0.037
27. BD (1) N 11 - N 12	/613. BD*(1) N 12 - C 13	0.41	1.35	0.030
27. BD (1) N 11 - N 12	/614. BD*(1) C 13 - C 14	0.56	1.43	0.036
28. BD (1) N 12 - C 13	/221. RY*(1) C 6	0.31	1.65	0.029
28. BD (1) N 12 - C 13	/262. RY*(2) N 11	0.89	2.73	0.063
28. BD (1) N 12 - C 13	/263. RY*(3) N 11	0.63	2.14	0.047
28. BD (1) N 12 - C 13	/286. RY*(2) C 14	0.36	2.11	0.035
28. BD (1) N 12 - C 13	/293. RY*(1) C 15	0.41	1.98	0.036
28. BD (1) N 12 - C 13	/602. BD*(1) C 6 - N 11	2.43	1.17	0.068
28. BD (1) N 12 - C 13	/614. BD*(1) C 13 - C 14	0.30	1.24	0.024
28. BD (1) N 12 - C 13	/615. BD*(1) C 13 - C 15	0.95	1.40	0.046
28. BD (1) N 12 - C 13	/617. BD*(1) C 14 - C 16	0.40	1.44	0.030
28. BD (1) N 12 - C 13	/619. BD*(1) C 15 - C 17	1.19	1.24	0.049
29. BD (1) C 13 - C 14	/269. RY*(1) N 12	0.34	1.45	0.028
29. BD (1) C 13 - C 14	/295. RY*(3) C 15	0.34	2.17	0.034
29. BD (1) C 13 - C 14	/296. RY*(4) C 15	0.25	1.66	0.026
29. BD (1) C 13 - C 14	/302. RY*(2) C 16	0.38	1.88	0.034
29. BD (1) C 13 - C 14	/303. RY*(3) C 16	0.69	2.03	0.048
29. BD (1) C 13 - C 14	/612. BD*(1) N 11 - N 12	1.60	1.13	0.054
29. BD (1) C 13 - C 14	/613. BD*(1) N 12 - C 13	0.38	1.01	0.025
29. BD (1) C 13 - C 14	/615. BD*(1) C 13 - C 15	1.81	1.25	0.060
29. BD (1) C 13 - C 14	/617. BD*(1) C 14 - C 16	0.89	1.29	0.043
29. BD (1) C 13 - C 14	/620. BD*(1) C 15 - O 19	2.64	0.97	0.064
29. BD (1) C 13 - C 14	/622. BD*(1) C 16 - H 27	1.41	1.10	0.050
30. BD (1) C 13 - C 15	/271. RY*(3) N 12	0.30	1.89	0.030
30. BD (1) C 13 - C 15	/286. RY*(2) C 14	0.43	2.08	0.038
30. BD (1) C 13 - C 15	/310. RY*(2) C 17	0.63	2.10	0.046
30. BD (1) C 13 - C 15	/613. BD*(1) N 12 - C 13	0.68	1.13	0.035
30. BD (1) C 13 - C 15	/614. BD*(1) C 13 - C 14	1.77	1.21	0.059
30. BD (1) C 13 - C 15	/618. BD*(1) C 14 - H 26	0.55	1.21	0.033
30. BD (1) C 13 - C 15	/619. BD*(1) C 15 - C 17	1.43	1.21	0.053
30. BD (1) C 13 - C 15	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.34	1.09	0.024
30. BD (1) C 13 - C 15	/624. BD*(1) C 17 - H 28	0.57	1.22	0.033
31. BD (2) C 13 - C 15	/ 36. BD*(1) C 16 - C 17	0.50	0.13	0.053
31. BD (2) C 13 - C 15	/270. RY*(2) N 12	0.26	1.12	0.022
31. BD (2) C 13 - C 15	/285. RY*(1) C 14	0.76	0.80	0.031
31. BD (2) C 13 - C 15	/309. RY*(1) C 17	1.19	0.81	0.039
31. BD (2) C 13 - C 15	/325. RY*(1) O 19	0.37	1.40	0.029
31. BD (2) C 13 - C 15	/616. BD*(2) C 13 - C 15	0.48	0.32	0.017
32. BD (1) C 14 - C 16	/278. RY*(2) C 13	0.99	2.19	0.059
32. BD (1) C 14 - C 16	/317. RY*(1) C 18	0.54	1.95	0.041
32. BD (1) C 14 - C 16	/319. RY*(3) C 18	0.43	2.06	0.038
32. BD (1) C 14 - C 16	/613. BD*(1) N 12 - C 13	1.41	1.11	0.050
32. BD (1) C 14 - C 16	/614. BD*(1) C 13 - C 14	0.86	1.20	0.041
32. BD (1) C 14 - C 16	/618. BD*(1) C 14 - H 26	0.66	1.19	0.035
32. BD (1) C 14 - C 16	/621. BD*(1) C 16 - C 18	0.85	1.22	0.041
32. BD (1) C 14 - C 16	/622. BD*(1) C 16 - H 27	0.54	1.20	0.032
32. BD (1) C 14 - C 16	/625. BD*(1) C 18 - H 29	0.84	1.21	0.040
33. BD (1) C 14 - H 26	/277. RY*(1) C 13	0.43	1.63	0.033
33. BD (1) C 14 - H 26	/302. RY*(2) C 16	0.61	1.73	0.041
33. BD (1) C 14 - H 26	/613. BD*(1) N 12 - C 13	0.37	0.86	0.023
33. BD (1) C 14 - H 26	/615. BD*(1) C 13 - C 15	1.75	1.11	0.056
33. BD (1) C 14 - H 26	/617. BD*(1) C 14 - C 16	0.50	1.15	0.030
33. BD (1) C 14 - H 26	/621. BD*(1) C 16 - C 18	2.72	0.98	0.065
33. BD (1) C 14 - H 26	/622. BD*(1) C 16 - H 27	0.54	0.96	0.029
34. BD (1) C 15 - C 17	/277. RY*(1) C 13	0.57	1.78	0.040
34. BD (1) C 15 - C 17	/317. RY*(1) C 18	0.34	1.85	0.032
34. BD (1) C 15 - C 17	/319. RY*(3) C 18	0.78	1.95	0.050
34. BD (1) C 15 - C 17	/613. BD*(1) N 12 - C 13	2.80	1.01	0.067
34. BD (1) C 15 - C 17	/615. BD*(1) C 13 - C 15	1.64	1.25	0.057
34. BD (1) C 15 - C 17	/623. BD*(1) C 17 - C 18	0.96	1.30	0.045
34. BD (1) C 15 - C 17	/625. BD*(1) C 18 - H 29	1.56	1.11	0.053
35. BD (1) C 15 - O 19	/277. RY*(1) C 13	0.27	1.97	0.029
35. BD (1) C 15 - O 19	/293. RY*(1) C 15	0.50	2.02	0.040
35. BD (1) C 15 - O 19	/614. BD*(1) C 13 - C 14	1.27	1.29	0.051
35. BD (1) C 15 - O 19	/615. BD*(1) C 13 - C 15	0.67	1.45	0.039
35. BD (1) C 15 - O 19	/623. BD*(1) C 17 - C 18	0.47	1.49	0.034

36. BD*(1) C 16 - C 17	/285. RY*(1) C 14	1.51	0.67	0.040
36. BD*(1) C 16 - C 17	/294. RY*(2) C 15	0.28	0.81	0.019
36. BD*(1) C 16 - C 17	/616. BD*(2) C 13 - C 15	5.86	0.19	0.047
37. BD (1) C 16 - C 17	/285. RY*(1) C 14	0.75	0.63	0.037
37. BD (1) C 16 - C 17	/318. RY*(2) C 18	1.55	0.65	0.055
37. BD (1) C 16 - C 17	/616. BD*(2) C 13 - C 15	10.59	0.15	0.058
38. BD (1) C 16 - C 18	/287. RY*(3) C 14	0.84	1.93	0.051
38. BD (1) C 16 - C 18	/311. RY*(3) C 17	0.84	1.90	0.051
38. BD (1) C 16 - C 18	/617. BD*(1) C 14 - C 16	0.90	1.28	0.043
38. BD (1) C 16 - C 18	/618. BD*(1) C 14 - H 26	1.59	1.08	0.053
38. BD (1) C 16 - C 18	/623. BD*(1) C 17 - C 18	1.07	1.29	0.047
38. BD (1) C 16 - C 18	/624. BD*(1) C 17 - H 28	1.54	1.09	0.052
38. BD (1) C 16 - C 18	/625. BD*(1) C 18 - H 29	0.27	1.10	0.022
39. BD (1) C 16 - H 27	/286. RY*(2) C 14	0.76	1.82	0.047
39. BD (1) C 16 - H 27	/317. RY*(1) C 18	0.65	1.71	0.042
39. BD (1) C 16 - H 27	/614. BD*(1) C 13 - C 14	3.00	0.95	0.068
39. BD (1) C 16 - H 27	/617. BD*(1) C 14 - C 16	0.43	1.15	0.028
39. BD (1) C 16 - H 27	/618. BD*(1) C 14 - H 26	0.54	0.95	0.029
39. BD (1) C 16 - H 27	/623. BD*(1) C 17 - C 18	1.45	1.16	0.052
39. BD (1) C 16 - H 27	/625. BD*(1) C 18 - H 29	0.25	0.97	0.020
40. BD (1) C 17 - C 18	/293. RY*(1) C 15	0.59	1.93	0.043
40. BD (1) C 17 - C 18	/295. RY*(3) C 15	0.47	2.26	0.041
40. BD (1) C 17 - C 18	/302. RY*(2) C 16	0.51	1.97	0.040
40. BD (1) C 17 - C 18	/303. RY*(3) C 16	0.38	2.13	0.036
40. BD (1) C 17 - C 18	/619. BD*(1) C 15 - C 17	0.77	1.19	0.038
40. BD (1) C 17 - C 18	/620. BD*(1) C 15 - O 19	1.23	1.06	0.046
40. BD (1) C 17 - C 18	/621. BD*(1) C 16 - C 18	1.00	1.22	0.044
40. BD (1) C 17 - C 18	/622. BD*(1) C 16 - H 27	0.73	1.20	0.037
40. BD (1) C 17 - C 18	/624. BD*(1) C 17 - H 28	0.75	1.19	0.038
40. BD (1) C 17 - C 18	/625. BD*(1) C 18 - H 29	0.70	1.20	0.037
41. BD (1) C 17 - H 28	/293. RY*(1) C 15	0.37	1.69	0.032
41. BD (1) C 17 - H 28	/317. RY*(1) C 18	0.67	1.71	0.043
41. BD (1) C 17 - H 28	/615. BD*(1) C 13 - C 15	1.61	1.11	0.054
41. BD (1) C 17 - H 28	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.53	0.82	0.027
41. BD (1) C 17 - H 28	/621. BD*(1) C 16 - C 18	2.90	0.98	0.067
41. BD (1) C 17 - H 28	/623. BD*(1) C 17 - C 18	0.61	1.16	0.034
41. BD (1) C 17 - H 28	/625. BD*(1) C 18 - H 29	0.52	0.96	0.028
42. BD (1) C 18 - H 29	/302. RY*(2) C 16	0.59	1.73	0.041
42. BD (1) C 18 - H 29	/310. RY*(2) C 17	0.75	1.83	0.047
42. BD (1) C 18 - H 29	/617. BD*(1) C 14 - C 16	1.30	1.15	0.049
42. BD (1) C 18 - H 29	/619. BD*(1) C 15 - C 17	2.84	0.95	0.066
42. BD (1) C 18 - H 29	/623. BD*(1) C 17 - C 18	0.61	1.16	0.034
42. BD (1) C 18 - H 29	/624. BD*(1) C 17 - H 28	0.48	0.95	0.027
43. BD (1) O 20 - H 30	/181. RY*(1) C 1	0.64	1.49	0.039
43. BD (1) O 20 - H 30	/182. RY*(2) C 1	0.84	1.65	0.047
43. BD (1) O 20 - H 30	/592. BD*(1) C 1 - C 3	1.59	1.34	0.058
89. CR (1) C 1	/190. RY*(2) C 2	0.56	11.81	0.102
89. CR (1) C 1	/199. RY*(3) C 3	1.08	11.49	0.140
89. CR (1) C 1	/592. BD*(1) C 1 - C 3	0.92	10.73	0.126
89. CR (1) C 1	/593. BD*(1) C 1 - O 20	0.66	10.39	0.106
89. CR (1) C 1	/594. BD*(1) C 2 - C 4	0.29	10.74	0.071
89. CR (1) C 1	/595. BD*(1) C 2 - C 7	0.31	10.57	0.073
89. CR (1) C 1	/596. BD*(1) C 3 - C 5	0.40	10.58	0.082
90. CR (1) C 2	/182. RY*(2) C 1	0.32	10.98	0.075
90. CR (1) C 2	/207. RY*(3) C 4	1.15	11.66	0.146
90. CR (1) C 2	/231. RY*(3) C 7	0.51	11.20	0.096
90. CR (1) C 2	/592. BD*(1) C 1 - C 3	0.27	10.67	0.069
90. CR (1) C 2	/594. BD*(1) C 2 - C 4	0.60	10.68	0.101
90. CR (1) C 2	/598. BD*(1) C 4 - C 6	0.53	10.51	0.096
90. CR (1) C 2	/599. BD*(1) C 4 - C 9	0.46	10.53	0.088
90. CR (1) C 2	/603. BD*(1) C 7 - C 8	0.27	10.71	0.068
91. CR (1) C 3	/183. RY*(3) C 1	1.52	11.51	0.167
91. CR (1) C 3	/216. RY*(4) C 5	0.47	11.20	0.092
91. CR (1) C 3	/342. RY*(2) H 21	0.29	12.28	0.075
91. CR (1) C 3	/590. BD*(1) C 1 - C 2	0.59	10.46	0.100
91. CR (1) C 3	/592. BD*(1) C 1 - C 3	0.29	10.66	0.070
91. CR (1) C 3	/593. BD*(1) C 1 - O 20	0.36	10.32	0.077
91. CR (1) C 3	/600. BD*(1) C 5 - C 6	0.31	10.68	0.073
92. CR (1) C 4	/191. RY*(3) C 2	1.21	11.51	0.149
92. CR (1) C 4	/223. RY*(3) C 6	0.79	11.16	0.118
92. CR (1) C 4	/247. RY*(3) C 9	0.57	11.18	0.101

92. CR (1) C 4	/590. BD*(1) C 1 - C 2	0.51	10.47	0.094
92. CR (1) C 4	/594. BD*(1) C 2 - C 4	0.52	10.67	0.095
92. CR (1) C 4	/595. BD*(1) C 2 - C 7	0.46	10.50	0.088
92. CR (1) C 4	/600. BD*(1) C 5 - C 6	0.32	10.69	0.075
92. CR (1) C 4	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.27	10.42	0.067
92. CR (1) C 4	/608. BD*(1) C 9 - C 10	0.28	10.72	0.069
93. CR (1) C 5	/222. RY*(2) C 6	0.54	11.23	0.099
93. CR (1) C 5	/223. RY*(3) C 6	0.71	11.14	0.112
93. CR (1) C 5	/224. RY*(4) C 6	0.49	11.07	0.093
93. CR (1) C 5	/362. RY*(2) H 31	0.26	12.34	0.071
93. CR (1) C 5	/592. BD*(1) C 1 - C 3	0.29	10.64	0.070
93. CR (1) C 5	/598. BD*(1) C 4 - C 6	0.64	10.48	0.105
93. CR (1) C 5	/600. BD*(1) C 5 - C 6	0.43	10.67	0.086
93. CR (1) C 5	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.44	10.40	0.086
94. CR (1) C 6	/206. RY*(2) C 4	0.58	11.69	0.104
94. CR (1) C 6	/215. RY*(3) C 5	1.11	11.33	0.142
94. CR (1) C 6	/594. BD*(1) C 2 - C 4	0.33	10.70	0.076
94. CR (1) C 6	/596. BD*(1) C 3 - C 5	0.43	10.55	0.086
94. CR (1) C 6	/599. BD*(1) C 4 - C 9	0.31	10.55	0.072
94. CR (1) C 6	/600. BD*(1) C 5 - C 6	0.71	10.72	0.111
94. CR (1) C 6	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.40	10.57	0.082
95. CR (1) C 7	/190. RY*(2) C 2	0.28	11.72	0.073
95. CR (1) C 7	/239. RY*(3) C 8	1.04	11.39	0.137
95. CR (1) C 7	/344. RY*(2) H 22	0.27	12.26	0.073
95. CR (1) C 7	/590. BD*(1) C 1 - C 2	0.33	10.45	0.075
95. CR (1) C 7	/594. BD*(1) C 2 - C 4	0.36	10.65	0.078
95. CR (1) C 7	/603. BD*(1) C 7 - C 8	0.38	10.68	0.081
95. CR (1) C 7	/606. BD*(1) C 8 - C 10	0.48	10.50	0.090
96. CR (1) C 8	/231. RY*(3) C 7	0.66	11.17	0.108
96. CR (1) C 8	/232. RY*(4) C 7	0.39	11.07	0.083
96. CR (1) C 8	/255. RY*(3) C 10	0.41	11.41	0.086
96. CR (1) C 8	/346. RY*(2) H 23	0.33	12.30	0.080
96. CR (1) C 8	/595. BD*(1) C 2 - C 7	0.60	10.48	0.101
96. CR (1) C 8	/603. BD*(1) C 7 - C 8	0.39	10.68	0.081
96. CR (1) C 8	/608. BD*(1) C 9 - C 10	0.28	10.69	0.069
97. CR (1) C 9	/207. RY*(3) C 4	0.36	11.62	0.082
97. CR (1) C 9	/255. RY*(3) C 10	1.00	11.40	0.135
97. CR (1) C 9	/348. RY*(2) H 24	0.27	12.36	0.072
97. CR (1) C 9	/594. BD*(1) C 2 - C 4	0.40	10.64	0.083
97. CR (1) C 9	/598. BD*(1) C 4 - C 6	0.32	10.47	0.074
97. CR (1) C 9	/606. BD*(1) C 8 - C 10	0.51	10.49	0.093
97. CR (1) C 9	/608. BD*(1) C 9 - C 10	0.40	10.68	0.083
98. CR (1) C 10	/239. RY*(3) C 8	0.38	11.38	0.083
98. CR (1) C 10	/245. RY*(1) C 9	0.37	11.26	0.082
98. CR (1) C 10	/247. RY*(3) C 9	0.56	11.15	0.099
98. CR (1) C 10	/248. RY*(4) C 9	0.54	11.13	0.098
98. CR (1) C 10	/350. RY*(2) H 25	0.33	12.30	0.080
98. CR (1) C 10	/599. BD*(1) C 4 - C 9	0.60	10.48	0.101
98. CR (1) C 10	/603. BD*(1) C 7 - C 8	0.29	10.67	0.070
98. CR (1) C 10	/608. BD*(1) C 9 - C 10	0.43	10.68	0.086
99. CR (1) N 11	/221. RY*(1) C 6	0.38	15.07	0.096
99. CR (1) N 11	/222. RY*(2) C 6	0.68	15.42	0.129
99. CR (1) N 11	/271. RY*(3) N 12	0.85	15.34	0.144
99. CR (1) N 11	/598. BD*(1) C 4 - C 6	0.27	14.67	0.080
99. CR (1) N 11	/600. BD*(1) C 5 - C 6	0.26	14.85	0.078
99. CR (1) N 11	/613. BD*(1) N 12 - C 13	0.70	14.57	0.129
100. CR (1) N 12	/263. RY*(3) N 11	0.94	15.60	0.153
100. CR (1) N 12	/277. RY*(1) C 13	0.67	15.38	0.128
100. CR (1) N 12	/278. RY*(2) C 13	0.33	15.69	0.091
100. CR (1) N 12	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.60	14.62	0.120
100. CR (1) N 12	/615. BD*(1) C 13 - C 15	0.34	14.86	0.091
101. CR (1) C 13	/287. RY*(3) C 14	0.42	11.39	0.088
101. CR (1) C 13	/293. RY*(1) C 15	0.58	11.29	0.103
101. CR (1) C 13	/295. RY*(3) C 15	0.97	11.62	0.134
101. CR (1) C 13	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.47	10.59	0.090
101. CR (1) C 13	/615. BD*(1) C 13 - C 15	0.62	10.71	0.104
101. CR (1) C 13	/619. BD*(1) C 15 - C 17	0.46	10.55	0.088
101. CR (1) C 13	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.41	10.42	0.083
102. CR (1) C 14	/277. RY*(1) C 13	0.42	11.15	0.087
102. CR (1) C 14	/279. RY*(3) C 13	0.31	10.95	0.074
102. CR (1) C 14	/303. RY*(3) C 16	0.99	11.41	0.134

102. CR (1) C 14	/352. RY*(2) H 26	0.30	12.30	0.076
102. CR (1) C 14	/613. BD*(1) N 12 - C 13	0.26	10.38	0.066
102. CR (1) C 14	/615. BD*(1) C 13 - C 15	0.39	10.63	0.082
102. CR (1) C 14	/617. BD*(1) C 14 - C 16	0.40	10.67	0.083
102. CR (1) C 14	/621. BD*(1) C 16 - C 18	0.45	10.50	0.088
103. CR (1) C 15	/278. RY*(2) C 13	1.57	11.54	0.170
103. CR (1) C 15	/311. RY*(3) C 17	0.48	11.37	0.093
103. CR (1) C 15	/613. BD*(1) N 12 - C 13	0.47	10.47	0.089
103. CR (1) C 15	/614. BD*(1) C 13 - C 14	0.48	10.55	0.091
103. CR (1) C 15	/615. BD*(1) C 13 - C 15	0.83	10.71	0.120
103. CR (1) C 15	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.45	10.43	0.087
103. CR (1) C 15	/623. BD*(1) C 17 - C 18	0.26	10.76	0.067
104. CR (1) C 16	/286. RY*(2) C 14	0.28	11.35	0.071
104. CR (1) C 16	/287. RY*(3) C 14	0.76	11.32	0.117
104. CR (1) C 16	/288. RY*(4) C 14	0.27	10.96	0.069
104. CR (1) C 16	/319. RY*(3) C 18	0.50	11.34	0.095
104. CR (1) C 16	/354. RY*(2) H 27	0.31	11.95	0.076
104. CR (1) C 16	/614. BD*(1) C 13 - C 14	0.49	10.48	0.091
104. CR (1) C 16	/617. BD*(1) C 14 - C 16	0.32	10.68	0.074
104. CR (1) C 16	/623. BD*(1) C 17 - C 18	0.29	10.69	0.071
105. CR (1) C 17	/295. RY*(3) C 15	0.48	11.54	0.094
105. CR (1) C 17	/296. RY*(4) C 15	0.39	11.04	0.083
105. CR (1) C 17	/319. RY*(3) C 18	1.06	11.33	0.139
105. CR (1) C 17	/356. RY*(2) H 28	0.30	12.31	0.076
105. CR (1) C 17	/615. BD*(1) C 13 - C 15	0.40	10.63	0.083
105. CR (1) C 17	/621. BD*(1) C 16 - C 18	0.51	10.50	0.092
105. CR (1) C 17	/623. BD*(1) C 17 - C 18	0.45	10.68	0.088
106. CR (1) C 18	/303. RY*(3) C 16	0.42	11.41	0.087
106. CR (1) C 18	/310. RY*(2) C 17	0.36	11.36	0.081
106. CR (1) C 18	/311. RY*(3) C 17	0.72	11.29	0.114
106. CR (1) C 18	/358. RY*(2) H 29	0.32	11.98	0.078
106. CR (1) C 18	/617. BD*(1) C 14 - C 16	0.27	10.68	0.068
106. CR (1) C 18	/619. BD*(1) C 15 - C 17	0.49	10.48	0.091
106. CR (1) C 18	/623. BD*(1) C 17 - C 18	0.33	10.69	0.075
107. CR (1) O 19	/293. RY*(1) C 15	1.37	20.10	0.210
107. CR (1) O 19	/615. BD*(1) C 13 - C 15	0.29	19.53	0.096
108. CR (1) O 20	/181. RY*(1) C 1	0.49	19.74	0.125
108. CR (1) O 20	/182. RY*(2) C 1	0.59	19.89	0.137
108. CR (1) O 20	/360. RY*(2) H 30	0.29	20.83	0.099
144. LP (1) N 11	/269. RY*(1) N 12	0.99	1.10	0.042
144. LP (1) N 11	/270. RY*(2) N 12	0.65	1.12	0.035
144. LP (1) N 11	/598. BD*(1) C 4 - C 6	4.42	0.75	0.073
144. LP (1) N 11	/600. BD*(1) C 5 - C 6	2.66	0.94	0.064
145. LP (2) N 11	/ 13. BD*(2) C 4 - C 6	2.93	0.42	0.057
145. LP (2) N 11	/221. RY*(1) C 6	0.64	1.32	0.040
145. LP (2) N 11	/262. RY*(2) N 11	0.98	2.40	0.066
145. LP (2) N 11	/263. RY*(3) N 11	0.46	1.81	0.039
145. LP (2) N 11	/270. RY*(2) N 12	0.37	1.28	0.030
145. LP (2) N 11	/598. BD*(1) C 4 - C 6	0.33	0.92	0.023
145. LP (2) N 11	/600. BD*(1) C 5 - C 6	0.36	1.10	0.027
146. LP (1) N 12	/262. RY*(2) N 11	0.34	2.38	0.036
146. LP (1) N 12	/263. RY*(3) N 11	0.34	1.79	0.031
146. LP (1) N 12	/277. RY*(1) C 13	0.82	1.57	0.046
146. LP (1) N 12	/614. BD*(1) C 13 - C 14	0.56	0.89	0.028
146. LP (1) N 12	/615. BD*(1) C 13 - C 15	3.51	1.05	0.077
147. LP (2) N 12	/261. RY*(1) N 11	1.34	1.17	0.052
147. LP (2) N 12	/280. RY*(4) C 13	0.51	0.91	0.028
147. LP (2) N 12	/616. BD*(2) C 13 - C 15	16.46	0.31	0.097
148. LP (1) C 14	/280. RY*(4) C 13	0.29	0.78	0.021
148. LP (1) C 14	/301. RY*(1) C 16	2.90	0.66	0.059
148. LP (1) C 14	/616. BD*(2) C 13 - C 15	29.13	0.19	0.097
149. LP (1) C 18	/301. RY*(1) C 16	1.02	0.60	0.043
149. LP (1) C 18	/309. RY*(1) C 17	2.02	0.62	0.062
149. LP (1) C 18	/318. RY*(2) C 18	1.34	0.62	0.051
150. LP (1) O 19	/293. RY*(1) C 15	1.10	1.79	0.056
150. LP (1) O 19	/327. RY*(3) O 19	0.29	2.47	0.034
150. LP (1) O 19	/615. BD*(1) C 13 - C 15	2.87	1.21	0.075
151. LP (2) O 19	/615. BD*(1) C 13 - C 15	0.50	0.94	0.027
151. LP (2) O 19	/616. BD*(2) C 13 - C 15	5.74	0.35	0.063
151. LP (2) O 19	/619. BD*(1) C 15 - C 17	1.41	0.78	0.042
152. LP (3) O 19	/262. RY*(2) N 11	0.30	2.37	0.036

152. LP (3) O 19	/293. RY*(1) C 15	0.33	1.61	0.031
152. LP (3) O 19	/326. RY*(2) O 19	0.30	2.09	0.034
152. LP (3) O 19	/327. RY*(3) O 19	0.35	2.29	0.039
152. LP (3) O 19	/615. BD*(1) C 13 - C 15	0.28	1.03	0.023
152. LP (3) O 19	/616. BD*(2) C 13 - C 15	2.78	0.44	0.046
152. LP (3) O 19	/619. BD*(1) C 15 - C 17	2.48	0.87	0.063
153. LP (1) O 20	/181. RY*(1) C 1	0.67	1.37	0.038
153. LP (1) O 20	/182. RY*(2) C 1	0.80	1.52	0.044
153. LP (1) O 20	/590. BD*(1) C 1 - C 2	3.22	1.02	0.073
154. LP (2) O 20	/591. BD*(2) C 1 - C 2	6.84	0.29	0.078
591. BD*(2) C 1 - C 2	/181. RY*(1) C 1	0.43	0.82	0.033
591. BD*(2) C 1 - C 2	/182. RY*(2) C 1	0.28	0.97	0.029
591. BD*(2) C 1 - C 2	/189. RY*(1) C 2	0.93	0.63	0.043
591. BD*(2) C 1 - C 2	/197. RY*(1) C 3	1.03	0.54	0.042
591. BD*(2) C 1 - C 2	/205. RY*(1) C 4	0.58	0.64	0.034
591. BD*(2) C 1 - C 2	/333. RY*(1) O 20	0.36	0.92	0.032
591. BD*(2) C 1 - C 2	/604. BD*(2) C 7 - C 8	41.96	0.07	0.078
604. BD*(2) C 7 - C 8	/229. RY*(1) C 7	0.65	0.86	0.056
604. BD*(2) C 7 - C 8	/230. RY*(2) C 7	0.64	0.86	0.055
604. BD*(2) C 7 - C 8	/237. RY*(1) C 8	1.77	0.47	0.068
604. BD*(2) C 7 - C 8	/609. BD*(2) C 9 - C 10	88.93	0.01	0.061
609. BD*(2) C 9 - C 10	/246. RY*(2) C 9	1.62	0.57	0.076
609. BD*(2) C 9 - C 10	/253. RY*(1) C 10	1.61	0.47	0.068
616. BD*(2) C 13 - C 15	/280. RY*(4) C 13	0.93	0.60	0.063
616. BD*(2) C 13 - C 15	/285. RY*(1) C 14	0.41	0.48	0.037
616. BD*(2) C 13 - C 15	/294. RY*(2) C 15	0.58	0.61	0.050
616. BD*(2) C 13 - C 15	/309. RY*(1) C 17	0.28	0.49	0.031

from unit 1 to unit 2

9. BD*(2) C 3 - C 5	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.05	0.36	0.007
15. BD (1) C 5 - C 6	/539. RY*(3) O 62	0.03	2.38	0.011
35. BD (1) C 15 - O 19	/459. RY*(1) C 44	0.05	2.00	0.012
35. BD (1) C 15 - O 19	/477. RY*(3) C 46	0.03	2.37	0.010
36. BD*(1) C 16 - C 17	/535. RY*(1) H 61	0.03	0.66	0.006
144. LP (1) N 11	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.10	0.61	0.010
145. LP (2) N 11	/404. RY*(2) C 37	0.12	1.56	0.019
145. LP (2) N 11	/408. RY*(6) C 37	0.05	4.03	0.020
145. LP (2) N 11	/444. RY*(2) N 42	0.13	2.47	0.024
145. LP (2) N 11	/445. RY*(3) N 42	0.07	1.79	0.016
145. LP (2) N 11	/453. RY*(3) N 43	0.03	1.55	0.009
145. LP (2) N 11	/475. RY*(1) C 46	0.08	1.65	0.016
145. LP (2) N 11	/538. RY*(2) O 62	0.14	2.32	0.025
145. LP (2) N 11	/539. RY*(3) O 62	0.26	2.08	0.032
145. LP (2) N 11	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.07	0.78	0.010
150. LP (1) O 19	/404. RY*(2) C 37	0.06	1.71	0.012
150. LP (1) O 19	/444. RY*(2) N 42	0.21	2.61	0.030
150. LP (1) O 19	/445. RY*(3) N 42	0.14	1.93	0.021
150. LP (1) O 19	/454. RY*(4) N 43	0.03	2.28	0.010
150. LP (1) O 19	/475. RY*(1) C 46	0.04	1.80	0.011
150. LP (1) O 19	/480. RY*(6) C 46	0.04	3.29	0.015
150. LP (1) O 19	/538. RY*(2) O 62	0.04	2.47	0.013
150. LP (1) O 19	/539. RY*(3) O 62	0.07	2.23	0.016
150. LP (1) O 19	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.04	0.97	0.008
150. LP (1) O 19	/650. BD*(1) N 43 - C 44	0.05	0.96	0.009
150. LP (1) O 19	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.05	0.92	0.009
151. LP (2) O 19	/491. RY*(1) C 48	0.03	0.84	0.006
151. LP (2) O 19	/535. RY*(1) H 61	0.03	0.82	0.006
151. LP (2) O 19	/653. BD*(2) C 44 - C 46	0.13	0.34	0.009
151. LP (2) O 19	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.16	0.65	0.013
152. LP (3) O 19	/404. RY*(2) C 37	0.11	1.52	0.017
152. LP (3) O 19	/444. RY*(2) N 42	0.36	2.43	0.040
152. LP (3) O 19	/445. RY*(3) N 42	0.11	1.75	0.019
152. LP (3) O 19	/475. RY*(1) C 46	0.08	1.61	0.015
152. LP (3) O 19	/476. RY*(2) C 46	0.03	1.05	0.008
152. LP (3) O 19	/477. RY*(3) C 46	0.04	1.96	0.012
152. LP (3) O 19	/480. RY*(6) C 46	0.04	3.11	0.016
152. LP (3) O 19	/538. RY*(2) O 62	0.08	2.29	0.018
152. LP (3) O 19	/539. RY*(3) O 62	0.07	2.05	0.016
152. LP (3) O 19	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.09	0.79	0.011
152. LP (3) O 19	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.05	0.74	0.008

from unit 1 to unit 3

11. BD (1) C 4 - C 6	/168. LP (6)Cr 63	0.04	1.29	0.010
11. BD (1) C 4 - C 6	/545. RY*(1)Cr 63	0.03	1.16	0.007
12. BD (2) C 4 - C 6	/166. LP (4)Cr 63	0.10	0.13	0.006
12. BD (2) C 4 - C 6	/167. LP (5)Cr 63	0.06	0.15	0.005
12. BD (2) C 4 - C 6	/171. LP*(9)Cr 63	0.05	2.09	0.013
13. BD*(2) C 4 - C 6	/551. RY*(7)Cr 63	0.03	1.95	0.012
15. BD (1) C 5 - C 6	/171. LP*(9)Cr 63	0.03	2.57	0.012
15. BD (1) C 5 - C 6	/556. RY*(12)Cr 63	0.03	8.80	0.020
17. BD (1) C 6 - N 11	/166. LP (4)Cr 63	0.17	0.65	0.017
17. BD (1) C 6 - N 11	/167. LP (5)Cr 63	0.06	0.66	0.009
17. BD (1) C 6 - N 11	/168. LP (6)Cr 63	0.85	1.43	0.047
17. BD (1) C 6 - N 11	/170. LP*(8)Cr 63	0.10	2.60	0.020
17. BD (1) C 6 - N 11	/546. RY*(2)Cr 63	0.04	2.37	0.013
17. BD (1) C 6 - N 11	/548. RY*(4)Cr 63	0.05	2.33	0.014
17. BD (1) C 6 - N 11	/549. RY*(5)Cr 63	0.04	2.18	0.012
17. BD (1) C 6 - N 11	/550. RY*(6)Cr 63	0.13	3.59	0.027
17. BD (1) C 6 - N 11	/552. RY*(8)Cr 63	0.04	9.48	0.024
17. BD (1) C 6 - N 11	/555. RY*(11)Cr 63	0.04	5.14	0.018
27. BD (1) N 11 - N 12	/166. LP (4)Cr 63	0.10	0.85	0.015
27. BD (1) N 11 - N 12	/167. LP (5)Cr 63	0.04	0.87	0.009
27. BD (1) N 11 - N 12	/168. LP (6)Cr 63	0.85	1.63	0.050
27. BD (1) N 11 - N 12	/169. LP (7)Cr 63	0.06	2.60	0.016
27. BD (1) N 11 - N 12	/170. LP*(8)Cr 63	0.06	2.80	0.016
27. BD (1) N 11 - N 12	/171. LP*(9)Cr 63	0.10	2.80	0.021
27. BD (1) N 11 - N 12	/545. RY*(1)Cr 63	0.06	1.50	0.012
27. BD (1) N 11 - N 12	/546. RY*(2)Cr 63	0.26	2.57	0.033
27. BD (1) N 11 - N 12	/547. RY*(3)Cr 63	0.07	2.69	0.017
27. BD (1) N 11 - N 12	/548. RY*(4)Cr 63	0.07	2.54	0.017
27. BD (1) N 11 - N 12	/550. RY*(6)Cr 63	0.05	3.79	0.017
27. BD (1) N 11 - N 12	/554. RY*(10)Cr 63	0.05	10.07	0.029
27. BD (1) N 11 - N 12	/561. RY*(17)Cr 63	0.06	38.53	0.060
27. BD (1) N 11 - N 12	/564. RY*(20)Cr 63	0.03	675.27	0.166
28. BD (1) N 12 - C 13	/168. LP (6)Cr 63	0.10	1.44	0.016
28. BD (1) N 12 - C 13	/171. LP*(9)Cr 63	0.05	2.61	0.014
28. BD (1) N 12 - C 13	/545. RY*(1)Cr 63	0.03	1.31	0.008
28. BD (1) N 12 - C 13	/546. RY*(2)Cr 63	0.03	2.37	0.011
28. BD (1) N 12 - C 13	/550. RY*(6)Cr 63	0.07	3.60	0.020
28. BD (1) N 12 - C 13	/556. RY*(12)Cr 63	0.08	8.84	0.033
28. BD (1) N 12 - C 13	/561. RY*(17)Cr 63	0.12	38.34	0.087
28. BD (1) N 12 - C 13	/564. RY*(20)Cr 63	0.04	675.07	0.211
28. BD (1) N 12 - C 13	/565. RY*(21)Cr 63	0.04	27.02	0.039
30. BD (1) C 13 - C 15	/168. LP (6)Cr 63	0.09	1.41	0.015
30. BD (1) C 13 - C 15	/545. RY*(1)Cr 63	0.05	1.28	0.010
30. BD (1) C 13 - C 15	/549. RY*(5)Cr 63	0.03	2.16	0.011
31. BD (2) C 13 - C 15	/167. LP (5)Cr 63	0.06	0.18	0.005
34. BD (1) C 15 - C 17	/168. LP (6)Cr 63	0.15	1.29	0.019
34. BD (1) C 15 - C 17	/170. LP*(8)Cr 63	0.03	2.46	0.011
34. BD (1) C 15 - C 17	/545. RY*(1)Cr 63	0.03	1.16	0.008
34. BD (1) C 15 - C 17	/550. RY*(6)Cr 63	0.03	3.46	0.012
35. BD (1) C 15 - O 19	/167. LP (5)Cr 63	0.08	0.72	0.012
35. BD (1) C 15 - O 19	/168. LP (6)Cr 63	0.73	1.48	0.045
35. BD (1) C 15 - O 19	/169. LP (7)Cr 63	0.05	2.46	0.013
35. BD (1) C 15 - O 19	/170. LP*(8)Cr 63	0.18	2.66	0.028
35. BD (1) C 15 - O 19	/171. LP*(9)Cr 63	0.03	2.65	0.011
35. BD (1) C 15 - O 19	/547. RY*(3)Cr 63	0.04	2.54	0.013
35. BD (1) C 15 - O 19	/548. RY*(4)Cr 63	0.04	2.39	0.012
35. BD (1) C 15 - O 19	/549. RY*(5)Cr 63	0.05	2.23	0.014
35. BD (1) C 15 - O 19	/552. RY*(8)Cr 63	0.04	9.54	0.024
35. BD (1) C 15 - O 19	/553. RY*(9)Cr 63	0.03	5.27	0.017
35. BD (1) C 15 - O 19	/554. RY*(10)Cr 63	0.03	9.93	0.023
99. CR (1) N 11	/166. LP (4)Cr 63	0.19	14.07	0.084
99. CR (1) N 11	/167. LP (5)Cr 63	0.06	14.09	0.045
99. CR (1) N 11	/168. LP (6)Cr 63	1.13	14.86	0.176
100. CR (1) N 12	/168. LP (6)Cr 63	0.03	14.89	0.028
103. CR (1) C 15	/168. LP (6)Cr 63	0.04	10.75	0.029
107. CR (1) O 19	/167. LP (5)Cr 63	0.17	18.80	0.088
107. CR (1) O 19	/168. LP (6)Cr 63	1.60	19.56	0.241
144. LP (1) N 11	/166. LP (4)Cr 63	0.50	0.16	0.014
144. LP (1) N 11	/167. LP (5)Cr 63	0.08	0.18	0.006
144. LP (1) N 11	/168. LP (6)Cr 63	0.37	0.94	0.025

144. LP (1) N 11	/169. LP (7)Cr 63	0.04	1.92	0.012
144. LP (1) N 11	/170. LP*(8)Cr 63	0.04	2.12	0.011
144. LP (1) N 11	/550. RY*(6)Cr 63	0.07	3.11	0.019
144. LP (1) N 11	/561. RY*(17)Cr 63	0.07	37.84	0.068
145. LP (2) N 11	/166. LP (4)Cr 63	22.12	0.32	0.125
145. LP (2) N 11	/167. LP (5)Cr 63	5.56	0.34	0.061
145. LP (2) N 11	/168. LP (6)Cr 63	18.49	1.11	0.181
145. LP (2) N 11	/169. LP (7)Cr 63	0.08	2.08	0.018
145. LP (2) N 11	/170. LP*(8)Cr 63	0.60	2.28	0.050
145. LP (2) N 11	/171. LP*(9)Cr 63	1.31	2.27	0.074
145. LP (2) N 11	/545. RY*(1)Cr 63	0.41	0.98	0.027
145. LP (2) N 11	/546. RY*(2)Cr 63	0.43	2.04	0.040
145. LP (2) N 11	/547. RY*(3)Cr 63	0.08	2.17	0.017
145. LP (2) N 11	/549. RY*(5)Cr 63	0.15	1.85	0.023
145. LP (2) N 11	/550. RY*(6)Cr 63	2.38	3.27	0.120
145. LP (2) N 11	/551. RY*(7)Cr 63	0.07	2.37	0.017
145. LP (2) N 11	/554. RY*(10)Cr 63	0.04	9.55	0.027
145. LP (2) N 11	/555. RY*(11)Cr 63	0.06	4.82	0.022
145. LP (2) N 11	/556. RY*(12)Cr 63	0.15	8.50	0.048
145. LP (2) N 11	/558. RY*(14)Cr 63	0.03	5.04	0.016
145. LP (2) N 11	/560. RY*(16)Cr 63	0.30	115.36	0.254
145. LP (2) N 11	/561. RY*(17)Cr 63	1.75	38.01	0.351
145. LP (2) N 11	/562. RY*(18)Cr 63	0.05	4.97	0.022
145. LP (2) N 11	/564. RY*(20)Cr 63	0.56	674.74	0.833
145. LP (2) N 11	/565. RY*(21)Cr 63	0.07	26.68	0.060
146. LP (1) N 12	/166. LP (4)Cr 63	0.07	0.30	0.008
146. LP (1) N 12	/168. LP (6)Cr 63	0.11	1.08	0.014
146. LP (1) N 12	/171. LP*(9)Cr 63	0.12	2.25	0.021
146. LP (1) N 12	/551. RY*(7)Cr 63	0.05	2.34	0.014
150. LP (1) O 19	/167. LP (5)Cr 63	1.24	0.49	0.037
150. LP (1) O 19	/168. LP (6)Cr 63	7.16	1.25	0.128
150. LP (1) O 19	/169. LP (7)Cr 63	0.24	2.23	0.029
150. LP (1) O 19	/170. LP*(8)Cr 63	0.12	2.42	0.022
150. LP (1) O 19	/171. LP*(9)Cr 63	0.19	2.42	0.027
150. LP (1) O 19	/545. RY*(1)Cr 63	0.05	1.12	0.009
150. LP (1) O 19	/546. RY*(2)Cr 63	0.30	2.19	0.032
150. LP (1) O 19	/548. RY*(4)Cr 63	0.48	2.16	0.041
150. LP (1) O 19	/549. RY*(5)Cr 63	0.16	2.00	0.022
150. LP (1) O 19	/550. RY*(6)Cr 63	0.54	3.42	0.055
150. LP (1) O 19	/551. RY*(7)Cr 63	0.20	2.51	0.029
150. LP (1) O 19	/558. RY*(14)Cr 63	0.03	5.18	0.016
150. LP (1) O 19	/560. RY*(16)Cr 63	0.10	115.51	0.136
150. LP (1) O 19	/561. RY*(17)Cr 63	0.65	38.15	0.200
150. LP (1) O 19	/564. RY*(20)Cr 63	0.23	674.89	0.505
151. LP (2) O 19	/167. LP (5)Cr 63	0.78	0.21	0.019
151. LP (2) O 19	/168. LP (6)Cr 63	1.62	0.98	0.053
151. LP (2) O 19	/169. LP (7)Cr 63	0.17	1.95	0.023
151. LP (2) O 19	/170. LP*(8)Cr 63	0.16	2.15	0.024
151. LP (2) O 19	/546. RY*(2)Cr 63	0.03	1.91	0.009
151. LP (2) O 19	/549. RY*(5)Cr 63	0.12	1.72	0.018
151. LP (2) O 19	/550. RY*(6)Cr 63	0.13	3.14	0.026
151. LP (2) O 19	/551. RY*(7)Cr 63	0.05	2.24	0.014
151. LP (2) O 19	/561. RY*(17)Cr 63	0.16	37.88	0.098
151. LP (2) O 19	/564. RY*(20)Cr 63	0.05	674.61	0.241
152. LP (3) O 19	/166. LP (4)Cr 63	0.55	0.29	0.019
152. LP (3) O 19	/167. LP (5)Cr 63	20.05	0.30	0.109
152. LP (3) O 19	/168. LP (6)Cr 63	20.30	1.07	0.186
152. LP (3) O 19	/169. LP (7)Cr 63	0.16	2.04	0.024
152. LP (3) O 19	/170. LP*(8)Cr 63	1.34	2.24	0.074
152. LP (3) O 19	/171. LP*(9)Cr 63	0.45	2.24	0.043
152. LP (3) O 19	/545. RY*(1)Cr 63	0.31	0.94	0.023
152. LP (3) O 19	/546. RY*(2)Cr 63	0.34	2.01	0.035
152. LP (3) O 19	/548. RY*(4)Cr 63	0.34	1.98	0.035
152. LP (3) O 19	/549. RY*(5)Cr 63	0.16	1.82	0.023
152. LP (3) O 19	/550. RY*(6)Cr 63	0.87	3.23	0.072
152. LP (3) O 19	/551. RY*(7)Cr 63	0.34	2.33	0.038
152. LP (3) O 19	/554. RY*(10)Cr 63	0.04	9.51	0.028
152. LP (3) O 19	/558. RY*(14)Cr 63	0.03	5.00	0.017
152. LP (3) O 19	/560. RY*(16)Cr 63	0.20	115.32	0.204
152. LP (3) O 19	/561. RY*(17)Cr 63	1.19	37.97	0.289
152. LP (3) O 19	/563. RY*(19)Cr 63	0.07	26.08	0.059

152. LP (3) O 19	/564. RY*(20)Cr 63	0.36	674.71	0.672
from unit 1 to unit 4				
11. BD (1) C 4 - C 6	/571. RY*(2) O 66	0.04	1.68	0.010
12. BD (2) C 4 - C 6	/571. RY*(2) O 66	0.03	1.31	0.008
12. BD (2) C 4 - C 6	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.04	0.60	0.006
13. BD*(2) C 4 - C 6	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.05	0.37	0.007
28. BD (1) N 12 - C 13	/570. RY*(1) O 66	0.04	2.92	0.014
144. LP (1) N 11	/570. RY*(1) O 66	0.03	2.43	0.010
145. LP (2) N 11	/566. RY*(1) H 64	0.12	1.09	0.015
145. LP (2) N 11	/568. RY*(1) H 65	0.13	1.20	0.017
145. LP (2) N 11	/570. RY*(1) O 66	0.60	2.59	0.054
150. LP (1) O 19	/566. RY*(1) H 64	0.05	1.23	0.010
150. LP (1) O 19	/568. RY*(1) H 65	0.05	1.34	0.011
150. LP (1) O 19	/570. RY*(1) O 66	0.18	2.74	0.029
151. LP (2) O 19	/568. RY*(1) H 65	0.03	1.07	0.007
151. LP (2) O 19	/570. RY*(1) O 66	0.05	2.46	0.014
152. LP (3) O 19	/566. RY*(1) H 64	0.05	1.05	0.009
152. LP (3) O 19	/568. RY*(1) H 65	0.05	1.16	0.010
152. LP (3) O 19	/570. RY*(1) O 66	0.23	2.55	0.033
152. LP (3) O 19	/572. RY*(3) O 66	0.07	1.73	0.015
152. LP (3) O 19	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.03	0.75	0.006
152. LP (3) O 19	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.03	0.75	0.007
from unit 1 to unit 5				
30. BD (1) C 13 - C 15	/578. RY*(1)Cl 67	0.04	1.33	0.009
31. BD (2) C 13 - C 15	/578. RY*(1)Cl 67	0.04	0.86	0.007
144. LP (1) N 11	/580. RY*(3)Cl 67	0.03	1.19	0.007
144. LP (1) N 11	/581. RY*(4)Cl 67	0.03	1.93	0.009
145. LP (2) N 11	/578. RY*(1)Cl 67	0.03	1.02	0.008
145. LP (2) N 11	/579. RY*(2)Cl 67	0.43	1.12	0.030
145. LP (2) N 11	/580. RY*(3)Cl 67	0.09	1.36	0.015
145. LP (2) N 11	/581. RY*(4)Cl 67	0.32	2.09	0.035
150. LP (1) O 19	/579. RY*(2)Cl 67	0.13	1.26	0.017
150. LP (1) O 19	/580. RY*(3)Cl 67	0.06	1.50	0.012
150. LP (1) O 19	/581. RY*(4)Cl 67	0.16	2.24	0.024
151. LP (2) O 19	/579. RY*(2)Cl 67	0.04	0.99	0.008
151. LP (2) O 19	/580. RY*(3)Cl 67	0.03	1.23	0.008
151. LP (2) O 19	/581. RY*(4)Cl 67	0.07	1.96	0.015
152. LP (3) O 19	/579. RY*(2)Cl 67	0.26	1.08	0.023
152. LP (3) O 19	/580. RY*(3)Cl 67	0.08	1.32	0.014
152. LP (3) O 19	/581. RY*(4)Cl 67	0.15	2.05	0.024
from unit 2 to unit 1				
71. BD (1) N 43 - C 44	/327. RY*(3) O 19	0.03	2.66	0.012
73. BD (1) C 44 - C 46	/327. RY*(3) O 19	0.08	2.64	0.018
74. BD (2) C 44 - C 46	/327. RY*(3) O 19	0.05	2.17	0.013
74. BD (2) C 44 - C 46	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.11	0.62	0.011
155. LP (1) N 42	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.05	0.63	0.007
156. LP (2) N 42	/222. RY*(2) C 6	0.08	1.68	0.016
156. LP (2) N 42	/224. RY*(4) C 6	0.07	1.51	0.014
156. LP (2) N 42	/226. RY*(6) C 6	0.05	3.47	0.017
156. LP (2) N 42	/262. RY*(2) N 11	0.14	2.41	0.025
156. LP (2) N 42	/263. RY*(3) N 11	0.04	1.81	0.011
156. LP (2) N 42	/293. RY*(1) C 15	0.09	1.65	0.016
156. LP (2) N 42	/295. RY*(3) C 15	0.03	1.99	0.010
156. LP (2) N 42	/297. RY*(5) C 15	0.03	4.28	0.016
156. LP (2) N 42	/326. RY*(2) O 19	0.14	2.14	0.023
156. LP (2) N 42	/327. RY*(3) O 19	0.31	2.33	0.037
156. LP (2) N 42	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.12	0.79	0.013
163. LP (1) O 62	/ 9. BD*(2) C 3 - C 5	0.09	0.56	0.013
163. LP (1) O 62	/262. RY*(2) N 11	0.19	2.55	0.028
163. LP (1) O 62	/263. RY*(3) N 11	0.13	1.95	0.020
163. LP (1) O 62	/293. RY*(1) C 15	0.04	1.79	0.011
163. LP (1) O 62	/326. RY*(2) O 19	0.05	2.28	0.013
163. LP (1) O 62	/327. RY*(3) O 19	0.08	2.47	0.018
163. LP (1) O 62	/596. BD*(1) C 3 - C 5	0.05	1.07	0.009
163. LP (1) O 62	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.04	1.09	0.009
164. LP (2) O 62	/327. RY*(3) O 19	0.03	2.22	0.010
164. LP (2) O 62	/601. BD*(1) C 5 - H 31	0.04	0.81	0.008
165. LP (3) O 62	/222. RY*(2) C 6	0.07	1.63	0.015

165. LP (3) O 62	/261. RY*(1) N 11	0.04	1.30	0.010
165. LP (3) O 62	/262. RY*(2) N 11	0.28	2.36	0.035
165. LP (3) O 62	/263. RY*(3) N 11	0.20	1.77	0.026
165. LP (3) O 62	/271. RY*(3) N 12	0.03	1.54	0.009
165. LP (3) O 62	/293. RY*(1) C 15	0.06	1.60	0.014
165. LP (3) O 62	/326. RY*(2) O 19	0.10	2.09	0.019
165. LP (3) O 62	/327. RY*(3) O 19	0.16	2.28	0.026
165. LP (3) O 62	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.04	0.79	0.008
165. LP (3) O 62	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.08	0.90	0.011
165. LP (3) O 62	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.06	0.74	0.009
within unit 2				
44. BD (1) C 32 - C 33	/380. RY*(2) C 34	0.54	2.00	0.042
44. BD (1) C 32 - C 33	/381. RY*(3) C 34	0.28	2.00	0.030
44. BD (1) C 32 - C 33	/388. RY*(2) C 35	0.70	2.21	0.050
44. BD (1) C 32 - C 33	/411. RY*(1) C 38	0.59	1.83	0.042
44. BD (1) C 32 - C 33	/629. BD*(1) C 32 - C 34	1.45	1.26	0.054
44. BD (1) C 32 - C 33	/631. BD*(1) C 33 - C 35	1.25	1.27	0.050
44. BD (1) C 32 - C 33	/632. BD*(1) C 33 - C 38	0.60	1.10	0.032
44. BD (1) C 32 - C 33	/634. BD*(1) C 34 - H 51	1.33	1.09	0.048
44. BD (1) C 32 - C 33	/636. BD*(1) C 35 - C 40	2.12	1.11	0.061
44. BD (1) C 32 - C 33	/640. BD*(1) C 38 - C 39	0.69	1.30	0.038
45. BD (2) C 32 - C 33	/ 52. BD*(2) C 34 - C 36	5.84	0.22	0.066
45. BD (2) C 32 - C 33	/ 56. BD*(2) C 35 - C 37	7.32	0.23	0.071
45. BD (2) C 32 - C 33	/379. RY*(1) C 34	1.06	0.77	0.037
45. BD (2) C 32 - C 33	/387. RY*(1) C 35	0.88	0.87	0.036
45. BD (2) C 32 - C 33	/412. RY*(2) C 38	0.62	0.83	0.029
45. BD (2) C 32 - C 33	/507. RY*(1) O 50	0.34	1.15	0.026
45. BD (2) C 32 - C 33	/628. BD*(2) C 32 - C 33	0.40	0.23	0.016
45. BD (2) C 32 - C 33	/641. BD*(2) C 38 - C 39	7.07	0.31	0.065
45. BD (2) C 32 - C 33	/646. BD*(2) C 40 - C 41	0.28	0.30	0.013
46. BD (1) C 32 - C 34	/373. RY*(3) C 33	0.64	2.23	0.048
46. BD (1) C 32 - C 34	/397. RY*(3) C 36	0.58	1.94	0.043
46. BD (1) C 32 - C 34	/627. BD*(1) C 32 - C 33	1.44	1.19	0.053
46. BD (1) C 32 - C 34	/630. BD*(1) C 32 - O 50	0.28	1.04	0.021
46. BD (1) C 32 - C 34	/632. BD*(1) C 33 - C 38	1.12	1.22	0.047
46. BD (1) C 32 - C 34	/633. BD*(1) C 34 - C 36	0.73	1.23	0.038
46. BD (1) C 32 - C 34	/634. BD*(1) C 34 - H 51	0.58	1.20	0.034
46. BD (1) C 32 - C 34	/638. BD*(1) C 36 - H 61	0.65	1.22	0.036
46. BD (1) C 32 - C 34	/663. BD*(1) O 50 - H 60	0.72	1.08	0.035
47. BD (1) C 32 - O 50	/380. RY*(2) C 34	0.28	2.24	0.032
47. BD (1) C 32 - O 50	/629. BD*(1) C 32 - C 34	0.38	1.51	0.030
47. BD (1) C 32 - O 50	/631. BD*(1) C 33 - C 35	0.56	1.52	0.037
47. BD (1) C 32 - O 50	/633. BD*(1) C 34 - C 36	0.98	1.36	0.046
48. BD (1) C 33 - C 35	/365. RY*(3) C 32	0.43	2.20	0.039
48. BD (1) C 33 - C 35	/404. RY*(2) C 37	0.37	1.84	0.033
48. BD (1) C 33 - C 35	/411. RY*(1) C 38	0.41	1.93	0.036
48. BD (1) C 33 - C 35	/627. BD*(1) C 32 - C 33	1.24	1.16	0.048
48. BD (1) C 33 - C 35	/630. BD*(1) C 32 - O 50	1.31	1.02	0.046
48. BD (1) C 33 - C 35	/632. BD*(1) C 33 - C 38	1.60	1.19	0.055
48. BD (1) C 33 - C 35	/635. BD*(1) C 35 - C 37	1.64	1.19	0.056
48. BD (1) C 33 - C 35	/636. BD*(1) C 35 - C 40	1.60	1.20	0.056
48. BD (1) C 33 - C 35	/639. BD*(1) C 37 - N 42	1.44	1.11	0.051
48. BD (1) C 33 - C 35	/642. BD*(1) C 38 - H 52	0.75	1.20	0.038
48. BD (1) C 33 - C 35	/647. BD*(1) C 40 - H 54	0.72	1.20	0.037
49. BD (1) C 33 - C 38	/363. RY*(1) C 32	0.33	1.48	0.028
49. BD (1) C 33 - C 38	/365. RY*(3) C 32	0.34	2.08	0.034
49. BD (1) C 33 - C 38	/388. RY*(2) C 35	0.45	2.19	0.040
49. BD (1) C 33 - C 38	/420. RY*(2) C 39	0.34	1.87	0.032
49. BD (1) C 33 - C 38	/421. RY*(3) C 39	0.72	1.99	0.048
49. BD (1) C 33 - C 38	/627. BD*(1) C 32 - C 33	0.48	1.05	0.028
49. BD (1) C 33 - C 38	/629. BD*(1) C 32 - C 34	0.74	1.24	0.038
49. BD (1) C 33 - C 38	/631. BD*(1) C 33 - C 35	1.82	1.25	0.060
49. BD (1) C 33 - C 38	/635. BD*(1) C 35 - C 37	2.50	1.08	0.066
49. BD (1) C 33 - C 38	/640. BD*(1) C 38 - C 39	1.26	1.29	0.051
49. BD (1) C 33 - C 38	/642. BD*(1) C 38 - H 52	0.29	1.09	0.022
49. BD (1) C 33 - C 38	/644. BD*(1) C 39 - H 53	1.36	1.09	0.049
50. BD (1) C 34 - C 36	/363. RY*(1) C 32	0.28	1.50	0.026
50. BD (1) C 34 - C 36	/364. RY*(2) C 32	0.48	1.52	0.034
50. BD (1) C 34 - C 36	/365. RY*(3) C 32	0.35	2.10	0.034
50. BD (1) C 34 - C 36	/405. RY*(3) C 37	0.89	1.72	0.050

50. BD (1) C 34 - C 36	/629. BD*(1) C 32 - C 34	0.81	1.26	0.041
50. BD (1) C 34 - C 36	/630. BD*(1) C 32 - O 50	2.67	0.93	0.063
50. BD (1) C 34 - C 36	/637. BD*(1) C 36 - C 37	1.03	1.28	0.046
50. BD (1) C 34 - C 36	/639. BD*(1) C 37 - N 42	3.00	1.02	0.070
51. BD (2) C 34 - C 36	/ 56. BD*(2) C 35 - C 37	5.77	0.23	0.064
51. BD (2) C 34 - C 36	/403. RY*(1) C 37	0.44	1.12	0.028
51. BD (2) C 34 - C 36	/628. BD*(2) C 32 - C 33	6.60	0.23	0.067
52. BD*(2) C 34 - C 36	/379. RY*(1) C 34	2.12	0.54	0.056
52. BD*(2) C 34 - C 36	/395. RY*(1) C 36	1.49	0.59	0.049
53. BD (1) C 34 - H 51	/365. RY*(3) C 32	0.48	1.97	0.039
53. BD (1) C 34 - H 51	/368. RY*(6) C 32	0.30	8.49	0.064
53. BD (1) C 34 - H 51	/396. RY*(2) C 36	0.51	1.78	0.038
53. BD (1) C 34 - H 51	/627. BD*(1) C 32 - C 33	3.08	0.94	0.068
53. BD (1) C 34 - H 51	/629. BD*(1) C 32 - C 34	0.40	1.13	0.027
53. BD (1) C 34 - H 51	/630. BD*(1) C 32 - O 50	0.94	0.79	0.034
53. BD (1) C 34 - H 51	/637. BD*(1) C 36 - C 37	1.45	1.15	0.052
53. BD (1) C 34 - H 51	/638. BD*(1) C 36 - H 61	0.30	0.97	0.021
54. BD (1) C 35 - C 37	/372. RY*(2) C 33	0.83	2.34	0.056
54. BD (1) C 35 - C 37	/396. RY*(2) C 36	0.49	1.92	0.039
54. BD (1) C 35 - C 37	/427. RY*(1) C 40	0.34	1.49	0.029
54. BD (1) C 35 - C 37	/428. RY*(2) C 40	0.47	1.62	0.035
54. BD (1) C 35 - C 37	/443. RY*(1) N 42	0.59	1.52	0.038
54. BD (1) C 35 - C 37	/631. BD*(1) C 33 - C 35	1.55	1.27	0.056
54. BD (1) C 35 - C 37	/632. BD*(1) C 33 - C 38	1.92	1.10	0.058
54. BD (1) C 35 - C 37	/636. BD*(1) C 35 - C 40	0.81	1.11	0.038
54. BD (1) C 35 - C 37	/637. BD*(1) C 36 - C 37	1.63	1.28	0.058
54. BD (1) C 35 - C 37	/638. BD*(1) C 36 - H 61	1.41	1.10	0.050
54. BD (1) C 35 - C 37	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.29	1.02	0.022
54. BD (1) C 35 - C 37	/645. BD*(1) C 40 - C 41	0.72	1.31	0.039
54. BD (1) C 35 - C 37	/649. BD*(1) N 42 - N 43	0.29	1.13	0.023
55. BD (2) C 35 - C 37	/ 52. BD*(2) C 34 - C 36	6.29	0.23	0.069
55. BD (2) C 35 - C 37	/371. RY*(1) C 33	0.79	0.87	0.034
55. BD (2) C 35 - C 37	/395. RY*(1) C 36	1.56	0.81	0.046
55. BD (2) C 35 - C 37	/628. BD*(2) C 32 - C 33	4.54	0.23	0.055
55. BD (2) C 35 - C 37	/646. BD*(2) C 40 - C 41	5.88	0.30	0.061
55. BD (2) C 35 - C 37	/649. BD*(1) N 42 - N 43	2.60	0.76	0.057
56. BD*(2) C 35 - C 37	/371. RY*(1) C 33	0.91	0.63	0.042
56. BD*(2) C 35 - C 37	/387. RY*(1) C 35	1.49	0.64	0.054
56. BD*(2) C 35 - C 37	/395. RY*(1) C 36	1.14	0.58	0.045
56. BD*(2) C 35 - C 37	/403. RY*(1) C 37	0.51	0.89	0.037
56. BD*(2) C 35 - C 37	/635. BD*(1) C 35 - C 37	0.38	0.49	0.023
56. BD*(2) C 35 - C 37	/646. BD*(2) C 40 - C 41	53.76	0.07	0.085
56. BD*(2) C 35 - C 37	/649. BD*(1) N 42 - N 43	2.12	0.52	0.057
57. BD (1) C 35 - C 40	/372. RY*(2) C 33	0.48	2.32	0.042
57. BD (1) C 35 - C 40	/403. RY*(1) C 37	0.50	1.48	0.034
57. BD (1) C 35 - C 40	/404. RY*(2) C 37	0.68	1.73	0.044
57. BD (1) C 35 - C 40	/436. RY*(2) C 41	0.38	1.96	0.035
57. BD (1) C 35 - C 40	/437. RY*(3) C 41	0.74	2.01	0.049
57. BD (1) C 35 - C 40	/627. BD*(1) C 32 - C 33	2.33	1.05	0.063
57. BD (1) C 35 - C 40	/631. BD*(1) C 33 - C 35	1.83	1.25	0.061
57. BD (1) C 35 - C 40	/635. BD*(1) C 35 - C 37	0.80	1.08	0.037
57. BD (1) C 35 - C 40	/637. BD*(1) C 36 - C 37	1.02	1.26	0.045
57. BD (1) C 35 - C 40	/645. BD*(1) C 40 - C 41	1.38	1.29	0.054
57. BD (1) C 35 - C 40	/647. BD*(1) C 40 - H 54	0.32	1.09	0.023
57. BD (1) C 35 - C 40	/648. BD*(1) C 41 - H 55	1.41	1.09	0.050
58. BD (1) C 36 - C 37	/381. RY*(3) C 34	0.66	2.11	0.047
58. BD (1) C 36 - C 37	/389. RY*(3) C 35	0.71	2.31	0.051
58. BD (1) C 36 - C 37	/443. RY*(1) N 42	0.70	1.63	0.043
58. BD (1) C 36 - C 37	/633. BD*(1) C 34 - C 36	0.90	1.22	0.042
58. BD (1) C 36 - C 37	/634. BD*(1) C 34 - H 51	0.58	1.20	0.033
58. BD (1) C 36 - C 37	/635. BD*(1) C 35 - C 37	1.69	1.21	0.058
58. BD (1) C 36 - C 37	/636. BD*(1) C 35 - C 40	1.15	1.22	0.047
58. BD (1) C 36 - C 37	/638. BD*(1) C 36 - H 61	0.75	1.21	0.038
58. BD (1) C 36 - C 37	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.69	1.13	0.035
58. BD (1) C 36 - C 37	/649. BD*(1) N 42 - N 43	0.40	1.24	0.028
59. BD (1) C 36 - H 61	/380. RY*(2) C 34	0.49	1.85	0.038
59. BD (1) C 36 - H 61	/403. RY*(1) C 37	0.38	1.35	0.029
59. BD (1) C 36 - H 61	/404. RY*(2) C 37	0.68	1.61	0.042
59. BD (1) C 36 - H 61	/406. RY*(4) C 37	0.30	1.56	0.028
59. BD (1) C 36 - H 61	/629. BD*(1) C 32 - C 34	1.35	1.12	0.049
59. BD (1) C 36 - H 61	/634. BD*(1) C 34 - H 51	0.29	0.94	0.021

59. BD (1) C 36 - H 61	/635. BD*(1) C 35 - C 37		3.38	0.95	0.072
59. BD (1) C 36 - H 61	/637. BD*(1) C 36 - C 37		0.66	1.14	0.035
59. BD (1) C 36 - H 61	/639. BD*(1) C 37 - N 42		0.72	0.87	0.032
60. BD (1) C 37 - N 42	/389. RY*(3) C 35		0.69	2.34	0.051
60. BD (1) C 37 - N 42	/396. RY*(2) C 36		0.63	2.06	0.046
60. BD (1) C 37 - N 42	/404. RY*(2) C 37		0.26	1.89	0.028
60. BD (1) C 37 - N 42	/451. RY*(1) N 43		0.72	1.62	0.043
60. BD (1) C 37 - N 42	/452. RY*(2) N 43		0.35	1.62	0.030
60. BD (1) C 37 - N 42	/631. BD*(1) C 33 - C 35		0.76	1.41	0.041
60. BD (1) C 37 - N 42	/633. BD*(1) C 34 - C 36		1.21	1.25	0.049
60. BD (1) C 37 - N 42	/635. BD*(1) C 35 - C 37		0.44	1.24	0.030
60. BD (1) C 37 - N 42	/637. BD*(1) C 36 - C 37		0.88	1.42	0.045
60. BD (1) C 37 - N 42	/649. BD*(1) N 42 - N 43		0.56	1.27	0.034
60. BD (1) C 37 - N 42	/650. BD*(1) N 43 - C 44		2.82	1.15	0.072
61. BD (1) C 38 - C 39	/372. RY*(2) C 33		0.42	2.43	0.040
61. BD (1) C 38 - C 39	/373. RY*(3) C 33		0.51	2.20	0.042
61. BD (1) C 38 - C 39	/436. RY*(2) C 41		0.43	2.06	0.038
61. BD (1) C 38 - C 39	/437. RY*(3) C 41		0.41	2.11	0.037
61. BD (1) C 38 - C 39	/627. BD*(1) C 32 - C 33		1.26	1.16	0.049
61. BD (1) C 38 - C 39	/632. BD*(1) C 33 - C 38		1.36	1.19	0.051
61. BD (1) C 38 - C 39	/642. BD*(1) C 38 - H 52		0.83	1.19	0.040
61. BD (1) C 38 - C 39	/643. BD*(1) C 39 - C 41		0.97	1.21	0.043
61. BD (1) C 38 - C 39	/644. BD*(1) C 39 - H 53		0.70	1.19	0.036
61. BD (1) C 38 - C 39	/648. BD*(1) C 41 - H 55		0.76	1.19	0.038
62. BD (2) C 38 - C 39	/371. RY*(1) C 33		0.41	0.86	0.024
62. BD (2) C 38 - C 39	/435. RY*(1) C 41		0.68	0.78	0.029
62. BD (2) C 38 - C 39	/628. BD*(2) C 32 - C 33		3.49	0.22	0.049
62. BD (2) C 38 - C 39	/646. BD*(2) C 40 - C 41		4.14	0.30	0.052
63. BD (1) C 38 - H 52	/372. RY*(2) C 33		0.63	2.20	0.047
63. BD (1) C 38 - H 52	/420. RY*(2) C 39		0.68	1.75	0.044
63. BD (1) C 38 - H 52	/631. BD*(1) C 33 - C 35		1.60	1.13	0.054
63. BD (1) C 38 - H 52	/640. BD*(1) C 38 - C 39		0.70	1.16	0.036
63. BD (1) C 38 - H 52	/643. BD*(1) C 39 - C 41		2.64	0.98	0.064
63. BD (1) C 38 - H 52	/644. BD*(1) C 39 - H 53		0.47	0.97	0.027
64. BD (1) C 39 - C 41	/413. RY*(3) C 38		0.92	1.78	0.052
64. BD (1) C 39 - C 41	/429. RY*(3) C 40		0.91	1.77	0.051
64. BD (1) C 39 - C 41	/640. BD*(1) C 38 - C 39		1.07	1.29	0.047
64. BD (1) C 39 - C 41	/642. BD*(1) C 38 - H 52		1.63	1.09	0.053
64. BD (1) C 39 - C 41	/645. BD*(1) C 40 - C 41		1.15	1.30	0.049
64. BD (1) C 39 - C 41	/647. BD*(1) C 40 - H 54		1.76	1.09	0.055
65. BD (1) C 39 - H 53	/411. RY*(1) C 38		0.76	1.69	0.045
65. BD (1) C 39 - H 53	/436. RY*(2) C 41		0.65	1.83	0.044
65. BD (1) C 39 - H 53	/632. BD*(1) C 33 - C 38		3.27	0.95	0.071
65. BD (1) C 39 - H 53	/640. BD*(1) C 38 - C 39		0.60	1.16	0.033
65. BD (1) C 39 - H 53	/642. BD*(1) C 38 - H 52		0.56	0.96	0.029
65. BD (1) C 39 - H 53	/645. BD*(1) C 40 - C 41		1.37	1.16	0.051
65. BD (1) C 39 - H 53	/648. BD*(1) C 41 - H 55		0.26	0.96	0.020
66. BD (1) C 40 - C 41	/388. RY*(2) C 35		0.62	2.30	0.048
66. BD (1) C 40 - C 41	/389. RY*(3) C 35		0.36	2.29	0.036
66. BD (1) C 40 - C 41	/420. RY*(2) C 39		0.43	1.98	0.037
66. BD (1) C 40 - C 41	/421. RY*(3) C 39		0.39	2.10	0.036
66. BD (1) C 40 - C 41	/635. BD*(1) C 35 - C 37		1.24	1.19	0.049
66. BD (1) C 40 - C 41	/636. BD*(1) C 35 - C 40		1.44	1.20	0.053
66. BD (1) C 40 - C 41	/643. BD*(1) C 39 - C 41		1.01	1.21	0.044
66. BD (1) C 40 - C 41	/644. BD*(1) C 39 - H 53		0.75	1.19	0.038
66. BD (1) C 40 - C 41	/647. BD*(1) C 40 - H 54		0.85	1.19	0.040
66. BD (1) C 40 - C 41	/648. BD*(1) C 41 - H 55		0.74	1.19	0.038
67. BD (2) C 40 - C 41	/ 56. BD*(2) C 35 - C 37		3.89	0.23	0.052
67. BD (2) C 40 - C 41	/387. RY*(1) C 35		0.36	0.87	0.023
67. BD (2) C 40 - C 41	/419. RY*(1) C 39		0.67	0.77	0.029
67. BD (2) C 40 - C 41	/641. BD*(2) C 38 - C 39		5.50	0.30	0.058
67. BD (2) C 40 - C 41	/646. BD*(2) C 40 - C 41		0.64	0.30	0.020
68. BD (1) C 40 - H 54	/388. RY*(2) C 35		0.68	2.07	0.048
68. BD (1) C 40 - H 54	/436. RY*(2) C 41		0.69	1.83	0.045
68. BD (1) C 40 - H 54	/631. BD*(1) C 33 - C 35		1.76	1.13	0.056
68. BD (1) C 40 - H 54	/643. BD*(1) C 39 - C 41		2.57	0.98	0.063
68. BD (1) C 40 - H 54	/645. BD*(1) C 40 - C 41		0.75	1.17	0.037
68. BD (1) C 40 - H 54	/648. BD*(1) C 41 - H 55		0.46	0.96	0.026
69. BD (1) C 41 - H 55	/420. RY*(2) C 39		0.51	1.74	0.038
69. BD (1) C 41 - H 55	/427. RY*(1) C 40		0.35	1.34	0.028
69. BD (1) C 41 - H 55	/428. RY*(2) C 40		0.48	1.47	0.034

69. BD (1) C 41 - H 55	/636. BD*(1) C 35 - C 40	3.21	0.96	0.070
69. BD (1) C 41 - H 55	/640. BD*(1) C 38 - C 39	1.34	1.15	0.050
69. BD (1) C 41 - H 55	/644. BD*(1) C 39 - H 53	0.26	0.96	0.020
69. BD (1) C 41 - H 55	/645. BD*(1) C 40 - C 41	0.66	1.16	0.035
69. BD (1) C 41 - H 55	/647. BD*(1) C 40 - H 54	0.51	0.95	0.028
70. BD (1) N 42 - N 43	/403. RY*(1) C 37	0.87	1.83	0.051
70. BD (1) N 42 - N 43	/459. RY*(1) C 44	0.76	2.15	0.051
70. BD (1) N 42 - N 43	/460. RY*(2) C 44	0.73	2.41	0.053
70. BD (1) N 42 - N 43	/635. BD*(1) C 35 - C 37	0.25	1.44	0.024
70. BD (1) N 42 - N 43	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.61	1.36	0.036
70. BD (1) N 42 - N 43	/650. BD*(1) N 43 - C 44	0.42	1.34	0.030
70. BD (1) N 42 - N 43	/651. BD*(1) C 44 - C 45	0.57	1.43	0.036
71. BD (1) N 43 - C 44	/403. RY*(1) C 37	0.30	1.64	0.028
71. BD (1) N 43 - C 44	/444. RY*(2) N 42	0.83	2.81	0.061
71. BD (1) N 43 - C 44	/445. RY*(3) N 42	0.67	2.13	0.048
71. BD (1) N 43 - C 44	/468. RY*(2) C 45	0.35	2.12	0.035
71. BD (1) N 43 - C 44	/475. RY*(1) C 46	0.41	1.99	0.036
71. BD (1) N 43 - C 44	/639. BD*(1) C 37 - N 42	2.41	1.16	0.067
71. BD (1) N 43 - C 44	/651. BD*(1) C 44 - C 45	0.30	1.24	0.025
71. BD (1) N 43 - C 44	/652. BD*(1) C 44 - C 46	0.95	1.40	0.046
71. BD (1) N 43 - C 44	/654. BD*(1) C 45 - C 47	0.38	1.44	0.030
71. BD (1) N 43 - C 44	/656. BD*(1) C 46 - C 48	1.20	1.24	0.049
72. BD (1) C 44 - C 45	/451. RY*(1) N 43	0.32	1.48	0.028
72. BD (1) C 44 - C 45	/477. RY*(3) C 46	0.30	2.19	0.033
72. BD (1) C 44 - C 45	/478. RY*(4) C 46	0.26	1.69	0.027
72. BD (1) C 44 - C 45	/484. RY*(2) C 47	0.38	1.89	0.034
72. BD (1) C 44 - C 45	/485. RY*(3) C 47	0.68	2.04	0.047
72. BD (1) C 44 - C 45	/649. BD*(1) N 42 - N 43	1.57	1.13	0.053
72. BD (1) C 44 - C 45	/650. BD*(1) N 43 - C 44	0.39	1.00	0.025
72. BD (1) C 44 - C 45	/652. BD*(1) C 44 - C 46	1.82	1.25	0.060
72. BD (1) C 44 - C 45	/654. BD*(1) C 45 - C 47	0.85	1.29	0.042
72. BD (1) C 44 - C 45	/657. BD*(1) C 46 - O 62	2.57	0.97	0.063
72. BD (1) C 44 - C 45	/659. BD*(1) C 47 - H 57	1.39	1.10	0.050
73. BD (1) C 44 - C 46	/453. RY*(3) N 43	0.32	1.86	0.031
73. BD (1) C 44 - C 46	/468. RY*(2) C 45	0.42	2.09	0.037
73. BD (1) C 44 - C 46	/492. RY*(2) C 48	0.61	2.10	0.046
73. BD (1) C 44 - C 46	/650. BD*(1) N 43 - C 44	0.68	1.13	0.035
73. BD (1) C 44 - C 46	/651. BD*(1) C 44 - C 45	1.78	1.21	0.059
73. BD (1) C 44 - C 46	/655. BD*(1) C 45 - H 56	0.55	1.21	0.033
73. BD (1) C 44 - C 46	/656. BD*(1) C 46 - C 48	1.45	1.21	0.053
73. BD (1) C 44 - C 46	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.34	1.09	0.024
73. BD (1) C 44 - C 46	/661. BD*(1) C 48 - H 58	0.57	1.22	0.033
74. BD (2) C 44 - C 46	/ 79. BD*(1) C 47 - C 48	0.75	0.13	0.053
74. BD (2) C 44 - C 46	/452. RY*(2) N 43	0.27	1.13	0.022
74. BD (2) C 44 - C 46	/467. RY*(1) C 45	0.70	0.80	0.030
74. BD (2) C 44 - C 46	/491. RY*(1) C 48	1.14	0.81	0.039
74. BD (2) C 44 - C 46	/537. RY*(1) O 62	0.37	1.36	0.029
74. BD (2) C 44 - C 46	/653. BD*(2) C 44 - C 46	0.57	0.32	0.019
75. BD (1) C 45 - C 47	/460. RY*(2) C 44	0.98	2.17	0.058
75. BD (1) C 45 - C 47	/499. RY*(1) C 49	0.54	1.96	0.041
75. BD (1) C 45 - C 47	/501. RY*(3) C 49	0.44	2.06	0.038
75. BD (1) C 45 - C 47	/650. BD*(1) N 43 - C 44	1.44	1.11	0.051
75. BD (1) C 45 - C 47	/651. BD*(1) C 44 - C 45	0.83	1.20	0.040
75. BD (1) C 45 - C 47	/655. BD*(1) C 45 - H 56	0.64	1.20	0.035
75. BD (1) C 45 - C 47	/658. BD*(1) C 47 - C 49	0.82	1.22	0.040
75. BD (1) C 45 - C 47	/659. BD*(1) C 47 - H 57	0.52	1.21	0.032
75. BD (1) C 45 - C 47	/662. BD*(1) C 49 - H 59	0.83	1.22	0.040
76. BD (1) C 45 - H 56	/459. RY*(1) C 44	0.41	1.67	0.033
76. BD (1) C 45 - H 56	/484. RY*(2) C 47	0.61	1.75	0.041
76. BD (1) C 45 - H 56	/650. BD*(1) N 43 - C 44	0.37	0.86	0.023
76. BD (1) C 45 - H 56	/652. BD*(1) C 44 - C 46	1.74	1.11	0.056
76. BD (1) C 45 - H 56	/654. BD*(1) C 45 - C 47	0.49	1.15	0.030
76. BD (1) C 45 - H 56	/658. BD*(1) C 47 - C 49	2.70	0.98	0.065
76. BD (1) C 45 - H 56	/659. BD*(1) C 47 - H 57	0.54	0.96	0.029
77. BD (1) C 46 - C 48	/459. RY*(1) C 44	0.56	1.82	0.041
77. BD (1) C 46 - C 48	/499. RY*(1) C 49	0.34	1.86	0.032
77. BD (1) C 46 - C 48	/501. RY*(3) C 49	0.77	1.96	0.049
77. BD (1) C 46 - C 48	/650. BD*(1) N 43 - C 44	2.78	1.01	0.067
77. BD (1) C 46 - C 48	/652. BD*(1) C 44 - C 46	1.66	1.25	0.058
77. BD (1) C 46 - C 48	/660. BD*(1) C 48 - C 49	0.94	1.30	0.044
77. BD (1) C 46 - C 48	/662. BD*(1) C 49 - H 59	1.54	1.11	0.052

78. BD (1) C 46 - O 62	/459. RY*(1) C 44	0.29	2.01	0.030
78. BD (1) C 46 - O 62	/475. RY*(1) C 46	0.48	2.04	0.039
78. BD (1) C 46 - O 62	/651. BD*(1) C 44 - C 45	1.29	1.29	0.052
78. BD (1) C 46 - O 62	/652. BD*(1) C 44 - C 46	0.66	1.45	0.039
78. BD (1) C 46 - O 62	/660. BD*(1) C 48 - C 49	0.46	1.50	0.033
79. BD*(1) C 47 - C 48	/160. LP (1) C 49	2.31	0.07	0.022
79. BD*(1) C 47 - C 48	/467. RY*(1) C 45	1.54	0.67	0.041
79. BD*(1) C 47 - C 48	/476. RY*(2) C 46	0.27	0.81	0.019
79. BD*(1) C 47 - C 48	/653. BD*(2) C 44 - C 46	5.29	0.19	0.045
80. BD (1) C 47 - C 48	/160. LP (1) C 49	655.99	0.03	0.187
80. BD (1) C 47 - C 48	/467. RY*(1) C 45	0.70	0.63	0.036
80. BD (1) C 47 - C 48	/500. RY*(2) C 49	1.55	0.66	0.055
80. BD (1) C 47 - C 48	/653. BD*(2) C 44 - C 46	10.95	0.15	0.059
81. BD (1) C 47 - C 49	/469. RY*(3) C 45	0.83	1.95	0.051
81. BD (1) C 47 - C 49	/493. RY*(3) C 48	0.82	1.93	0.050
81. BD (1) C 47 - C 49	/654. BD*(1) C 45 - C 47	0.86	1.28	0.042
81. BD (1) C 47 - C 49	/655. BD*(1) C 45 - H 56	1.58	1.08	0.052
81. BD (1) C 47 - C 49	/660. BD*(1) C 48 - C 49	1.04	1.29	0.046
81. BD (1) C 47 - C 49	/661. BD*(1) C 48 - H 58	1.54	1.09	0.052
81. BD (1) C 47 - C 49	/662. BD*(1) C 49 - H 59	0.27	1.10	0.022
82. BD (1) C 47 - H 57	/468. RY*(2) C 45	0.75	1.83	0.047
82. BD (1) C 47 - H 57	/499. RY*(1) C 49	0.64	1.71	0.042
82. BD (1) C 47 - H 57	/651. BD*(1) C 44 - C 45	3.00	0.95	0.067
82. BD (1) C 47 - H 57	/654. BD*(1) C 45 - C 47	0.41	1.15	0.028
82. BD (1) C 47 - H 57	/655. BD*(1) C 45 - H 56	0.55	0.95	0.029
82. BD (1) C 47 - H 57	/660. BD*(1) C 48 - C 49	1.45	1.16	0.052
82. BD (1) C 47 - H 57	/662. BD*(1) C 49 - H 59	0.26	0.97	0.020
83. BD (1) C 48 - C 49	/475. RY*(1) C 46	0.57	1.93	0.042
83. BD (1) C 48 - C 49	/477. RY*(3) C 46	0.47	2.28	0.042
83. BD (1) C 48 - C 49	/484. RY*(2) C 47	0.50	1.98	0.040
83. BD (1) C 48 - C 49	/485. RY*(3) C 47	0.37	2.14	0.036
83. BD (1) C 48 - C 49	/656. BD*(1) C 46 - C 48	0.76	1.19	0.038
83. BD (1) C 48 - C 49	/657. BD*(1) C 46 - O 62	1.26	1.06	0.046
83. BD (1) C 48 - C 49	/658. BD*(1) C 47 - C 49	0.98	1.21	0.043
83. BD (1) C 48 - C 49	/659. BD*(1) C 47 - H 57	0.71	1.20	0.037
83. BD (1) C 48 - C 49	/661. BD*(1) C 48 - H 58	0.76	1.19	0.038
83. BD (1) C 48 - C 49	/662. BD*(1) C 49 - H 59	0.71	1.21	0.037
84. BD (1) C 48 - H 58	/475. RY*(1) C 46	0.38	1.69	0.032
84. BD (1) C 48 - H 58	/499. RY*(1) C 49	0.66	1.71	0.043
84. BD (1) C 48 - H 58	/652. BD*(1) C 44 - C 46	1.61	1.11	0.053
84. BD (1) C 48 - H 58	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.52	0.82	0.026
84. BD (1) C 48 - H 58	/658. BD*(1) C 47 - C 49	2.88	0.98	0.067
84. BD (1) C 48 - H 58	/660. BD*(1) C 48 - C 49	0.63	1.16	0.034
84. BD (1) C 48 - H 58	/662. BD*(1) C 49 - H 59	0.52	0.97	0.028
85. BD (1) C 49 - H 59	/484. RY*(2) C 47	0.58	1.74	0.040
85. BD (1) C 49 - H 59	/492. RY*(2) C 48	0.75	1.83	0.047
85. BD (1) C 49 - H 59	/654. BD*(1) C 45 - C 47	1.28	1.14	0.049
85. BD (1) C 49 - H 59	/656. BD*(1) C 46 - C 48	2.85	0.95	0.066
85. BD (1) C 49 - H 59	/660. BD*(1) C 48 - C 49	0.62	1.16	0.034
85. BD (1) C 49 - H 59	/661. BD*(1) C 48 - H 58	0.48	0.95	0.027
86. BD (1) O 50 - H 60	/363. RY*(1) C 32	0.74	1.57	0.043
86. BD (1) O 50 - H 60	/364. RY*(2) C 32	0.78	1.60	0.045
86. BD (1) O 50 - H 60	/629. BD*(1) C 32 - C 34	1.60	1.34	0.058
109. CR (1) C 32	/372. RY*(2) C 33	0.54	11.81	0.101
109. CR (1) C 32	/381. RY*(3) C 34	1.06	11.47	0.139
109. CR (1) C 32	/629. BD*(1) C 32 - C 34	0.90	10.73	0.125
109. CR (1) C 32	/630. BD*(1) C 32 - O 50	0.66	10.40	0.105
109. CR (1) C 32	/631. BD*(1) C 33 - C 35	0.29	10.74	0.071
109. CR (1) C 32	/632. BD*(1) C 33 - C 38	0.31	10.57	0.072
109. CR (1) C 32	/633. BD*(1) C 34 - C 36	0.40	10.58	0.082
110. CR (1) C 33	/364. RY*(2) C 32	0.30	10.93	0.072
110. CR (1) C 33	/389. RY*(3) C 35	1.17	11.61	0.147
110. CR (1) C 33	/413. RY*(3) C 38	0.52	11.20	0.096
110. CR (1) C 33	/629. BD*(1) C 32 - C 34	0.27	10.67	0.069
110. CR (1) C 33	/631. BD*(1) C 33 - C 35	0.63	10.68	0.104
110. CR (1) C 33	/635. BD*(1) C 35 - C 37	0.57	10.51	0.099
110. CR (1) C 33	/636. BD*(1) C 35 - C 40	0.50	10.52	0.092
110. CR (1) C 33	/640. BD*(1) C 38 - C 39	0.27	10.71	0.068
111. CR (1) C 34	/365. RY*(3) C 32	1.48	11.50	0.165
111. CR (1) C 34	/398. RY*(4) C 36	0.45	11.22	0.090
111. CR (1) C 34	/516. RY*(2) H 51	0.29	12.28	0.075

111. CR (1) C 34	/627. BD*(1) C 32 - C 33	0.59	10.47	0.101
111. CR (1) C 34	/629. BD*(1) C 32 - C 34	0.29	10.66	0.070
111. CR (1) C 34	/630. BD*(1) C 32 - O 50	0.36	10.32	0.077
111. CR (1) C 34	/637. BD*(1) C 36 - C 37	0.30	10.68	0.072
112. CR (1) C 35	/373. RY*(3) C 33	1.24	11.51	0.151
112. CR (1) C 35	/405. RY*(3) C 37	0.66	11.12	0.108
112. CR (1) C 35	/429. RY*(3) C 40	0.57	11.18	0.101
112. CR (1) C 35	/627. BD*(1) C 32 - C 33	0.51	10.47	0.093
112. CR (1) C 35	/631. BD*(1) C 33 - C 35	0.50	10.67	0.093
112. CR (1) C 35	/632. BD*(1) C 33 - C 38	0.46	10.50	0.088
112. CR (1) C 35	/637. BD*(1) C 36 - C 37	0.32	10.69	0.075
112. CR (1) C 35	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.27	10.42	0.068
112. CR (1) C 35	/645. BD*(1) C 40 - C 41	0.28	10.71	0.070
113. CR (1) C 36	/404. RY*(2) C 37	0.36	11.13	0.080
113. CR (1) C 36	/405. RY*(3) C 37	1.07	11.10	0.137
113. CR (1) C 36	/406. RY*(4) C 37	0.36	11.09	0.080
113. CR (1) C 36	/536. RY*(2) H 61	0.29	12.37	0.076
113. CR (1) C 36	/629. BD*(1) C 32 - C 34	0.28	10.64	0.069
113. CR (1) C 36	/635. BD*(1) C 35 - C 37	0.64	10.48	0.105
113. CR (1) C 36	/637. BD*(1) C 36 - C 37	0.45	10.66	0.088
113. CR (1) C 36	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.44	10.40	0.086
114. CR (1) C 37	/388. RY*(2) C 35	0.61	11.65	0.106
114. CR (1) C 37	/397. RY*(3) C 36	1.16	11.26	0.144
114. CR (1) C 37	/631. BD*(1) C 33 - C 35	0.35	10.71	0.077
114. CR (1) C 37	/633. BD*(1) C 34 - C 36	0.43	10.55	0.085
114. CR (1) C 37	/636. BD*(1) C 35 - C 40	0.33	10.55	0.075
114. CR (1) C 37	/637. BD*(1) C 36 - C 37	0.70	10.72	0.110
114. CR (1) C 37	/649. BD*(1) N 42 - N 43	0.37	10.56	0.080
115. CR (1) C 38	/372. RY*(2) C 33	0.31	11.72	0.076
115. CR (1) C 38	/421. RY*(3) C 39	1.06	11.39	0.139
115. CR (1) C 38	/518. RY*(2) H 52	0.28	12.27	0.074
115. CR (1) C 38	/627. BD*(1) C 32 - C 33	0.32	10.45	0.074
115. CR (1) C 38	/631. BD*(1) C 33 - C 35	0.36	10.65	0.078
115. CR (1) C 38	/640. BD*(1) C 38 - C 39	0.40	10.68	0.082
115. CR (1) C 38	/643. BD*(1) C 39 - C 41	0.49	10.50	0.091
116. CR (1) C 39	/411. RY*(1) C 38	0.37	11.21	0.082
116. CR (1) C 39	/413. RY*(3) C 38	0.65	11.17	0.108
116. CR (1) C 39	/414. RY*(4) C 38	0.39	11.05	0.083
116. CR (1) C 39	/437. RY*(3) C 41	0.38	11.40	0.083
116. CR (1) C 39	/520. RY*(2) H 53	0.30	11.90	0.075
116. CR (1) C 39	/632. BD*(1) C 33 - C 38	0.61	10.48	0.101
116. CR (1) C 39	/640. BD*(1) C 38 - C 39	0.39	10.68	0.082
116. CR (1) C 39	/645. BD*(1) C 40 - C 41	0.29	10.69	0.070
117. CR (1) C 40	/389. RY*(3) C 35	0.37	11.58	0.083
117. CR (1) C 40	/437. RY*(3) C 41	1.06	11.40	0.139
117. CR (1) C 40	/631. BD*(1) C 33 - C 35	0.42	10.65	0.084
117. CR (1) C 40	/635. BD*(1) C 35 - C 37	0.34	10.47	0.077
117. CR (1) C 40	/643. BD*(1) C 39 - C 41	0.50	10.50	0.091
117. CR (1) C 40	/645. BD*(1) C 40 - C 41	0.39	10.69	0.081
118. CR (1) C 41	/421. RY*(3) C 39	0.39	11.38	0.084
118. CR (1) C 41	/429. RY*(3) C 40	0.54	11.15	0.098
118. CR (1) C 41	/430. RY*(4) C 40	0.55	11.10	0.099
118. CR (1) C 41	/524. RY*(2) H 55	0.33	12.30	0.081
118. CR (1) C 41	/636. BD*(1) C 35 - C 40	0.62	10.48	0.102
118. CR (1) C 41	/640. BD*(1) C 38 - C 39	0.29	10.67	0.070
118. CR (1) C 41	/645. BD*(1) C 40 - C 41	0.43	10.68	0.086
119. CR (1) N 42	/403. RY*(1) C 37	0.35	15.06	0.092
119. CR (1) N 42	/404. RY*(2) C 37	0.83	15.32	0.142
119. CR (1) N 42	/453. RY*(3) N 43	0.83	15.31	0.143
119. CR (1) N 42	/635. BD*(1) C 35 - C 37	0.26	14.66	0.079
119. CR (1) N 42	/637. BD*(1) C 36 - C 37	0.26	14.85	0.079
119. CR (1) N 42	/650. BD*(1) N 43 - C 44	0.69	14.57	0.128
120. CR (1) N 43	/445. RY*(3) N 42	0.93	15.59	0.152
120. CR (1) N 43	/459. RY*(1) C 44	0.65	15.42	0.126
120. CR (1) N 43	/460. RY*(2) C 44	0.33	15.68	0.091
120. CR (1) N 43	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.61	14.63	0.120
120. CR (1) N 43	/652. BD*(1) C 44 - C 46	0.34	14.86	0.090
121. CR (1) C 44	/469. RY*(3) C 45	0.42	11.42	0.088
121. CR (1) C 44	/475. RY*(1) C 46	0.56	11.30	0.101
121. CR (1) C 44	/477. RY*(3) C 46	0.99	11.64	0.136
121. CR (1) C 44	/649. BD*(1) N 42 - N 43	0.46	10.58	0.089

121. CR (1) C 44	/652. BD*(1) C 44 - C 46	0.62	10.71	0.104
121. CR (1) C 44	/656. BD*(1) C 46 - C 48	0.47	10.55	0.089
121. CR (1) C 44	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.39	10.42	0.081
122. CR (1) C 45	/459. RY*(1) C 44	0.42	11.19	0.087
122. CR (1) C 45	/461. RY*(3) C 44	0.28	10.86	0.069
122. CR (1) C 45	/485. RY*(3) C 47	0.99	11.42	0.134
122. CR (1) C 45	/526. RY*(2) H 56	0.30	12.30	0.077
122. CR (1) C 45	/650. BD*(1) N 43 - C 44	0.26	10.38	0.067
122. CR (1) C 45	/652. BD*(1) C 44 - C 46	0.39	10.63	0.082
122. CR (1) C 45	/654. BD*(1) C 45 - C 47	0.39	10.67	0.082
122. CR (1) C 45	/658. BD*(1) C 47 - C 49	0.45	10.50	0.087
123. CR (1) C 46	/460. RY*(2) C 44	1.55	11.53	0.169
123. CR (1) C 46	/493. RY*(3) C 48	0.48	11.40	0.093
123. CR (1) C 46	/650. BD*(1) N 43 - C 44	0.47	10.47	0.089
123. CR (1) C 46	/651. BD*(1) C 44 - C 45	0.49	10.55	0.091
123. CR (1) C 46	/652. BD*(1) C 44 - C 46	0.84	10.71	0.121
123. CR (1) C 46	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.43	10.43	0.085
123. CR (1) C 46	/660. BD*(1) C 48 - C 49	0.26	10.76	0.067
124. CR (1) C 47	/468. RY*(2) C 45	0.26	11.36	0.069
124. CR (1) C 47	/469. RY*(3) C 45	0.76	11.34	0.117
124. CR (1) C 47	/470. RY*(4) C 45	0.27	10.96	0.068
124. CR (1) C 47	/501. RY*(3) C 49	0.49	11.34	0.094
124. CR (1) C 47	/528. RY*(2) H 57	0.30	11.94	0.076
124. CR (1) C 47	/651. BD*(1) C 44 - C 45	0.48	10.48	0.090
124. CR (1) C 47	/654. BD*(1) C 45 - C 47	0.31	10.67	0.073
124. CR (1) C 47	/660. BD*(1) C 48 - C 49	0.29	10.69	0.071
125. CR (1) C 48	/477. RY*(3) C 46	0.44	11.56	0.091
125. CR (1) C 48	/478. RY*(4) C 46	0.41	11.06	0.085
125. CR (1) C 48	/501. RY*(3) C 49	1.07	11.33	0.139
125. CR (1) C 48	/530. RY*(2) H 58	0.29	12.31	0.075
125. CR (1) C 48	/652. BD*(1) C 44 - C 46	0.39	10.63	0.083
125. CR (1) C 48	/658. BD*(1) C 47 - C 49	0.50	10.50	0.092
125. CR (1) C 48	/660. BD*(1) C 48 - C 49	0.46	10.68	0.088
126. CR (1) C 49	/485. RY*(3) C 47	0.41	11.43	0.086
126. CR (1) C 49	/492. RY*(2) C 48	0.35	11.36	0.080
126. CR (1) C 49	/493. RY*(3) C 48	0.72	11.32	0.114
126. CR (1) C 49	/532. RY*(2) H 59	0.32	11.97	0.078
126. CR (1) C 49	/654. BD*(1) C 45 - C 47	0.27	10.67	0.067
126. CR (1) C 49	/656. BD*(1) C 46 - C 48	0.49	10.48	0.091
126. CR (1) C 49	/660. BD*(1) C 48 - C 49	0.32	10.69	0.074
127. CR (1) O 50	/363. RY*(1) C 32	0.60	19.81	0.138
127. CR (1) O 50	/364. RY*(2) C 32	0.47	19.84	0.123
127. CR (1) O 50	/534. RY*(2) H 60	0.30	20.87	0.101
128. CR (1) O 62	/475. RY*(1) C 46	1.36	20.11	0.209
128. CR (1) O 62	/652. BD*(1) C 44 - C 46	0.28	19.53	0.095
155. LP (1) N 42	/451. RY*(1) N 43	0.73	1.14	0.037
155. LP (1) N 42	/452. RY*(2) N 43	0.90	1.13	0.041
155. LP (1) N 42	/635. BD*(1) C 35 - C 37	3.47	0.75	0.065
155. LP (1) N 42	/637. BD*(1) C 36 - C 37	3.29	0.94	0.071
156. LP (2) N 42	/ 56. BD*(2) C 35 - C 37	2.21	0.42	0.050
156. LP (2) N 42	/403. RY*(1) C 37	0.62	1.31	0.038
156. LP (2) N 42	/444. RY*(2) N 42	1.08	2.47	0.070
156. LP (2) N 42	/445. RY*(3) N 42	0.63	1.79	0.045
156. LP (2) N 42	/452. RY*(2) N 43	0.31	1.29	0.027
156. LP (2) N 42	/635. BD*(1) C 35 - C 37	0.99	0.91	0.040
157. LP (1) N 43	/444. RY*(2) N 42	0.29	2.46	0.034
157. LP (1) N 43	/445. RY*(3) N 42	0.34	1.78	0.031
157. LP (1) N 43	/459. RY*(1) C 44	0.82	1.61	0.046
157. LP (1) N 43	/651. BD*(1) C 44 - C 45	0.57	0.89	0.028
157. LP (1) N 43	/652. BD*(1) C 44 - C 46	3.46	1.05	0.076
158. LP (2) N 43	/443. RY*(1) N 42	1.35	1.17	0.053
158. LP (2) N 43	/462. RY*(4) C 44	0.27	1.01	0.022
158. LP (2) N 43	/653. BD*(2) C 44 - C 46	16.07	0.32	0.097
159. LP (1) C 45	/160. LP (1) C 49	1.21	0.07	0.014
159. LP (1) C 45	/483. RY*(1) C 47	2.83	0.66	0.059
159. LP (1) C 45	/653. BD*(2) C 44 - C 46	30.50	0.19	0.098
160. LP (1) C 49	/483. RY*(1) C 47	0.98	0.60	0.043
160. LP (1) C 49	/491. RY*(1) C 48	1.94	0.62	0.061
160. LP (1) C 49	/500. RY*(2) C 49	1.43	0.62	0.053
161. LP (1) O 50	/363. RY*(1) C 32	0.78	1.45	0.043
161. LP (1) O 50	/364. RY*(2) C 32	0.68	1.47	0.040

161. LP (1) O 50	/627. BD*(1) C 32 - C 33	3.23	1.02	0.073
162. LP (2) O 50	/628. BD*(2) C 32 - C 33	7.23	0.29	0.080
163. LP (1) O 62	/475. RY*(1) C 46	1.06	1.80	0.055
163. LP (1) O 62	/652. BD*(1) C 44 - C 46	2.86	1.21	0.074
164. LP (2) O 62	/652. BD*(1) C 44 - C 46	0.54	0.96	0.029
164. LP (2) O 62	/653. BD*(2) C 44 - C 46	4.33	0.37	0.056
164. LP (2) O 62	/656. BD*(1) C 46 - C 48	1.86	0.80	0.049
165. LP (3) O 62	/444. RY*(2) N 42	0.29	2.43	0.036
165. LP (3) O 62	/475. RY*(1) C 46	0.27	1.61	0.028
165. LP (3) O 62	/538. RY*(2) O 62	0.37	2.28	0.040
165. LP (3) O 62	/539. RY*(3) O 62	0.32	2.04	0.035
165. LP (3) O 62	/653. BD*(2) C 44 - C 46	3.78	0.43	0.053
165. LP (3) O 62	/656. BD*(1) C 46 - C 48	2.17	0.86	0.058
628. BD*(2) C 32 - C 33	/363. RY*(1) C 32	0.33	0.89	0.030
628. BD*(2) C 32 - C 33	/364. RY*(2) C 32	0.40	0.92	0.034
628. BD*(2) C 32 - C 33	/371. RY*(1) C 33	0.91	0.64	0.042
628. BD*(2) C 32 - C 33	/379. RY*(1) C 34	1.05	0.54	0.042
628. BD*(2) C 32 - C 33	/387. RY*(1) C 35	0.56	0.65	0.033
628. BD*(2) C 32 - C 33	/412. RY*(2) C 38	0.34	0.60	0.025
628. BD*(2) C 32 - C 33	/507. RY*(1) O 50	0.39	0.92	0.033
628. BD*(2) C 32 - C 33	/641. BD*(2) C 38 - C 39	31.24	0.08	0.073
628. BD*(2) C 32 - C 33	/646. BD*(2) C 40 - C 41	0.27	0.08	0.006
641. BD*(2) C 38 - C 39	/412. RY*(2) C 38	1.56	0.52	0.073
641. BD*(2) C 38 - C 39	/419. RY*(1) C 39	1.54	0.47	0.069
646. BD*(2) C 40 - C 41	/427. RY*(1) C 40	0.96	0.81	0.064
646. BD*(2) C 40 - C 41	/428. RY*(2) C 40	0.52	0.94	0.051
646. BD*(2) C 40 - C 41	/435. RY*(1) C 41	2.02	0.48	0.071
653. BD*(2) C 44 - C 46	/461. RY*(3) C 44	0.38	0.82	0.047
653. BD*(2) C 44 - C 46	/462. RY*(4) C 44	0.53	0.69	0.051
653. BD*(2) C 44 - C 46	/467. RY*(1) C 45	0.40	0.48	0.036
653. BD*(2) C 44 - C 46	/476. RY*(2) C 46	0.60	0.62	0.051
653. BD*(2) C 44 - C 46	/491. RY*(1) C 48	0.26	0.50	0.030

from unit 2 to unit 3

54. BD (1) C 35 - C 37	/168. LP (6)Cr 63	0.05	1.30	0.011
54. BD (1) C 35 - C 37	/545. RY*(1)Cr 63	0.03	1.17	0.008
55. BD (2) C 35 - C 37	/166. LP (4)Cr 63	0.11	0.14	0.006
55. BD (2) C 35 - C 37	/171. LP*(9)Cr 63	0.04	2.09	0.013
58. BD (1) C 36 - C 37	/171. LP*(9)Cr 63	0.03	2.58	0.012
58. BD (1) C 36 - C 37	/545. RY*(1)Cr 63	0.03	1.28	0.008
60. BD (1) C 37 - N 42	/166. LP (4)Cr 63	0.15	0.66	0.016
60. BD (1) C 37 - N 42	/167. LP (5)Cr 63	0.05	0.67	0.008
60. BD (1) C 37 - N 42	/168. LP (6)Cr 63	0.70	1.44	0.043
60. BD (1) C 37 - N 42	/169. LP (7)Cr 63	0.13	2.41	0.023
60. BD (1) C 37 - N 42	/171. LP*(9)Cr 63	0.04	2.61	0.013
60. BD (1) C 37 - N 42	/545. RY*(1)Cr 63	0.05	1.31	0.010
60. BD (1) C 37 - N 42	/546. RY*(2)Cr 63	0.06	2.37	0.016
60. BD (1) C 37 - N 42	/547. RY*(3)Cr 63	0.06	2.50	0.015
60. BD (1) C 37 - N 42	/548. RY*(4)Cr 63	0.06	2.34	0.015
60. BD (1) C 37 - N 42	/552. RY*(8)Cr 63	0.03	9.49	0.021
60. BD (1) C 37 - N 42	/556. RY*(12)Cr 63	0.03	8.84	0.020
60. BD (1) C 37 - N 42	/557. RY*(13)Cr 63	0.03	5.22	0.015
70. BD (1) N 42 - N 43	/166. LP (4)Cr 63	0.08	0.85	0.014
70. BD (1) N 42 - N 43	/167. LP (5)Cr 63	0.04	0.87	0.009
70. BD (1) N 42 - N 43	/168. LP (6)Cr 63	0.87	1.64	0.051
70. BD (1) N 42 - N 43	/169. LP (7)Cr 63	0.06	2.61	0.015
70. BD (1) N 42 - N 43	/170. LP*(8)Cr 63	0.05	2.81	0.015
70. BD (1) N 42 - N 43	/545. RY*(1)Cr 63	0.03	1.51	0.008
70. BD (1) N 42 - N 43	/546. RY*(2)Cr 63	0.22	2.57	0.030
70. BD (1) N 42 - N 43	/548. RY*(4)Cr 63	0.03	2.54	0.012
70. BD (1) N 42 - N 43	/549. RY*(5)Cr 63	0.05	2.38	0.014
70. BD (1) N 42 - N 43	/550. RY*(6)Cr 63	0.17	3.80	0.032
70. BD (1) N 42 - N 43	/552. RY*(8)Cr 63	0.03	9.69	0.021
70. BD (1) N 42 - N 43	/554. RY*(10)Cr 63	0.05	10.08	0.028
70. BD (1) N 42 - N 43	/555. RY*(11)Cr 63	0.04	5.35	0.018
70. BD (1) N 42 - N 43	/561. RY*(17)Cr 63	0.07	38.54	0.065
70. BD (1) N 42 - N 43	/564. RY*(20)Cr 63	0.03	675.27	0.180
71. BD (1) N 43 - C 44	/168. LP (6)Cr 63	0.10	1.44	0.017
71. BD (1) N 43 - C 44	/171. LP*(9)Cr 63	0.03	2.61	0.011
71. BD (1) N 43 - C 44	/545. RY*(1)Cr 63	0.03	1.31	0.008
71. BD (1) N 43 - C 44	/546. RY*(2)Cr 63	0.03	2.38	0.011

71. BD (1) N 43 - C 44	/550. RY*(6)Cr 63	0.07	3.61	0.020
71. BD (1) N 43 - C 44	/556. RY*(12)Cr 63	0.09	8.84	0.037
71. BD (1) N 43 - C 44	/561. RY*(17)Cr 63	0.12	38.34	0.087
71. BD (1) N 43 - C 44	/564. RY*(20)Cr 63	0.04	675.08	0.213
71. BD (1) N 43 - C 44	/565. RY*(21)Cr 63	0.04	27.02	0.040
73. BD (1) C 44 - C 46	/168. LP (6)Cr 63	0.14	1.42	0.019
73. BD (1) C 44 - C 46	/545. RY*(1)Cr 63	0.03	1.29	0.008
73. BD (1) C 44 - C 46	/546. RY*(2)Cr 63	0.07	2.35	0.016
73. BD (1) C 44 - C 46	/561. RY*(17)Cr 63	0.03	38.32	0.044
74. BD (2) C 44 - C 46	/166. LP (4)Cr 63	0.03	0.17	0.003
74. BD (2) C 44 - C 46	/167. LP (5)Cr 63	0.04	0.18	0.004
74. BD (2) C 44 - C 46	/168. LP (6)Cr 63	0.06	0.95	0.010
74. BD (2) C 44 - C 46	/169. LP (7)Cr 63	0.03	1.92	0.010
77. BD (1) C 46 - C 48	/168. LP (6)Cr 63	0.15	1.30	0.019
77. BD (1) C 46 - C 48	/169. LP (7)Cr 63	0.08	2.27	0.017
77. BD (1) C 46 - C 48	/545. RY*(1)Cr 63	0.03	1.17	0.008
77. BD (1) C 46 - C 48	/561. RY*(17)Cr 63	0.03	38.20	0.040
78. BD (1) C 46 - O 62	/166. LP (4)Cr 63	0.07	0.71	0.011
78. BD (1) C 46 - O 62	/167. LP (5)Cr 63	0.18	0.73	0.017
78. BD (1) C 46 - O 62	/168. LP (6)Cr 63	0.92	1.49	0.050
78. BD (1) C 46 - O 62	/169. LP (7)Cr 63	0.13	2.47	0.023
78. BD (1) C 46 - O 62	/171. LP*(9)Cr 63	0.03	2.66	0.011
78. BD (1) C 46 - O 62	/546. RY*(2)Cr 63	0.14	2.43	0.024
78. BD (1) C 46 - O 62	/549. RY*(5)Cr 63	0.05	2.24	0.013
78. BD (1) C 46 - O 62	/550. RY*(6)Cr 63	0.08	3.66	0.022
78. BD (1) C 46 - O 62	/552. RY*(8)Cr 63	0.05	9.55	0.028
78. BD (1) C 46 - O 62	/554. RY*(10)Cr 63	0.04	9.94	0.026
119. CR (1) N 42	/166. LP (4)Cr 63	0.17	14.08	0.079
119. CR (1) N 42	/167. LP (5)Cr 63	0.05	14.10	0.042
119. CR (1) N 42	/168. LP (6)Cr 63	1.08	14.86	0.172
120. CR (1) N 43	/168. LP (6)Cr 63	0.03	14.91	0.029
123. CR (1) C 46	/168. LP (6)Cr 63	0.05	10.76	0.032
128. CR (1) O 62	/166. LP (4)Cr 63	0.11	18.79	0.076
128. CR (1) O 62	/167. LP (5)Cr 63	0.22	18.80	0.099
128. CR (1) O 62	/168. LP (6)Cr 63	1.45	19.57	0.229
155. LP (1) N 42	/166. LP (4)Cr 63	0.37	0.17	0.013
155. LP (1) N 42	/167. LP (5)Cr 63	0.12	0.19	0.007
155. LP (1) N 42	/168. LP (6)Cr 63	0.38	0.95	0.025
155. LP (1) N 42	/169. LP (7)Cr 63	0.05	1.93	0.013
155. LP (1) N 42	/170. LP*(8)Cr 63	0.06	2.13	0.015
155. LP (1) N 42	/550. RY*(6)Cr 63	0.07	3.12	0.018
155. LP (1) N 42	/561. RY*(17)Cr 63	0.04	37.85	0.049
156. LP (2) N 42	/166. LP (4)Cr 63	20.07	0.33	0.121
156. LP (2) N 42	/167. LP (5)Cr 63	4.80	0.35	0.058
156. LP (2) N 42	/168. LP (6)Cr 63	18.63	1.11	0.183
156. LP (2) N 42	/169. LP (7)Cr 63	0.43	2.09	0.040
156. LP (2) N 42	/170. LP*(8)Cr 63	0.57	2.29	0.049
156. LP (2) N 42	/171. LP*(9)Cr 63	1.08	2.28	0.067
156. LP (2) N 42	/545. RY*(1)Cr 63	0.33	0.98	0.024
156. LP (2) N 42	/546. RY*(2)Cr 63	0.32	2.05	0.034
156. LP (2) N 42	/547. RY*(3)Cr 63	0.09	2.18	0.019
156. LP (2) N 42	/548. RY*(4)Cr 63	0.04	2.02	0.012
156. LP (2) N 42	/549. RY*(5)Cr 63	0.16	1.86	0.024
156. LP (2) N 42	/550. RY*(6)Cr 63	2.36	3.28	0.119
156. LP (2) N 42	/551. RY*(7)Cr 63	0.05	2.37	0.015
156. LP (2) N 42	/554. RY*(10)Cr 63	0.06	9.56	0.032
156. LP (2) N 42	/556. RY*(12)Cr 63	0.20	8.51	0.056
156. LP (2) N 42	/560. RY*(16)Cr 63	0.31	115.37	0.256
156. LP (2) N 42	/561. RY*(17)Cr 63	1.81	38.01	0.354
156. LP (2) N 42	/564. RY*(20)Cr 63	0.58	674.75	0.846
156. LP (2) N 42	/565. RY*(21)Cr 63	0.07	26.69	0.058
157. LP (1) N 43	/166. LP (4)Cr 63	0.05	0.31	0.007
157. LP (1) N 43	/168. LP (6)Cr 63	0.15	1.09	0.017
157. LP (1) N 43	/170. LP*(8)Cr 63	0.06	2.27	0.015
157. LP (1) N 43	/171. LP*(9)Cr 63	0.03	2.26	0.011
159. LP (1) C 45	/166. LP (4)Cr 63	0.03	0.03	0.002
163. LP (1) O 62	/166. LP (4)Cr 63	0.86	0.47	0.032
163. LP (1) O 62	/167. LP (5)Cr 63	1.57	0.49	0.042
163. LP (1) O 62	/168. LP (6)Cr 63	6.38	1.25	0.121
163. LP (1) O 62	/169. LP (7)Cr 63	0.69	2.23	0.050
163. LP (1) O 62	/171. LP*(9)Cr 63	0.13	2.42	0.022

163. LP (1) O 62	/545. RY*(1)Cr 63	0.11	1.12	0.014
163. LP (1) O 62	/546. RY*(2)Cr 63	0.38	2.19	0.036
163. LP (1) O 62	/547. RY*(3)Cr 63	0.59	2.32	0.047
163. LP (1) O 62	/548. RY*(4)Cr 63	0.07	2.16	0.015
163. LP (1) O 62	/549. RY*(5)Cr 63	0.07	2.00	0.015
163. LP (1) O 62	/550. RY*(6)Cr 63	0.32	3.42	0.042
163. LP (1) O 62	/551. RY*(7)Cr 63	0.09	2.51	0.019
163. LP (1) O 62	/552. RY*(8)Cr 63	0.08	9.31	0.035
163. LP (1) O 62	/560. RY*(16)Cr 63	0.09	115.51	0.133
163. LP (1) O 62	/561. RY*(17)Cr 63	0.61	38.15	0.195
163. LP (1) O 62	/564. RY*(20)Cr 63	0.22	674.89	0.491
164. LP (2) O 62	/166. LP (4)Cr 63	0.79	0.22	0.021
164. LP (2) O 62	/167. LP (5)Cr 63	1.27	0.24	0.026
164. LP (2) O 62	/168. LP (6)Cr 63	2.36	1.00	0.065
164. LP (2) O 62	/169. LP (7)Cr 63	0.41	1.98	0.036
164. LP (2) O 62	/170. LP*(8)Cr 63	0.14	2.18	0.023
164. LP (2) O 62	/545. RY*(1)Cr 63	0.08	0.87	0.011
164. LP (2) O 62	/547. RY*(3)Cr 63	0.22	2.07	0.028
164. LP (2) O 62	/550. RY*(6)Cr 63	0.13	3.17	0.026
164. LP (2) O 62	/551. RY*(7)Cr 63	0.03	2.26	0.011
164. LP (2) O 62	/552. RY*(8)Cr 63	0.05	9.06	0.028
164. LP (2) O 62	/560. RY*(16)Cr 63	0.03	115.26	0.077
164. LP (2) O 62	/561. RY*(17)Cr 63	0.20	37.90	0.111
164. LP (2) O 62	/564. RY*(20)Cr 63	0.07	674.64	0.275
165. LP (3) O 62	/166. LP (4)Cr 63	12.93	0.28	0.089
165. LP (3) O 62	/167. LP (5)Cr 63	16.19	0.30	0.097
165. LP (3) O 62	/168. LP (6)Cr 63	14.87	1.06	0.159
165. LP (3) O 62	/169. LP (7)Cr 63	3.26	2.04	0.111
165. LP (3) O 62	/171. LP*(9)Cr 63	0.03	2.23	0.010
165. LP (3) O 62	/545. RY*(1)Cr 63	0.50	0.93	0.030
165. LP (3) O 62	/546. RY*(2)Cr 63	0.25	2.00	0.031
165. LP (3) O 62	/547. RY*(3)Cr 63	0.89	2.13	0.059
165. LP (3) O 62	/548. RY*(4)Cr 63	0.07	1.97	0.016
165. LP (3) O 62	/549. RY*(5)Cr 63	0.18	1.81	0.025
165. LP (3) O 62	/550. RY*(6)Cr 63	0.40	3.23	0.049
165. LP (3) O 62	/551. RY*(7)Cr 63	0.06	2.33	0.016
165. LP (3) O 62	/552. RY*(8)Cr 63	0.21	9.12	0.060
165. LP (3) O 62	/559. RY*(15)Cr 63	0.07	26.12	0.060
165. LP (3) O 62	/560. RY*(16)Cr 63	0.21	115.32	0.212
165. LP (3) O 62	/561. RY*(17)Cr 63	1.24	37.96	0.296
165. LP (3) O 62	/564. RY*(20)Cr 63	0.38	674.70	0.695
from unit 2 to unit 4				
54. BD (1) C 35 - C 37	/568. RY*(1) H 65	0.03	1.39	0.009
55. BD (2) C 35 - C 37	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.23	0.61	0.015
68. BD (1) C 40 - H 54	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.03	0.84	0.006
71. BD (1) N 43 - C 44	/570. RY*(1) O 66	0.03	2.93	0.012
156. LP (2) N 42	/566. RY*(1) H 64	0.12	1.09	0.016
156. LP (2) N 42	/568. RY*(1) H 65	0.13	1.21	0.017
156. LP (2) N 42	/570. RY*(1) O 66	0.56	2.60	0.052
156. LP (2) N 42	/572. RY*(3) O 66	0.07	1.78	0.015
156. LP (2) N 42	/573. RY*(4) O 66	0.03	1.61	0.009
156. LP (2) N 42	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.03	0.79	0.006
156. LP (2) N 42	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.06	0.80	0.009
163. LP (1) O 62	/566. RY*(1) H 64	0.03	1.23	0.008
163. LP (1) O 62	/568. RY*(1) H 65	0.07	1.35	0.012
163. LP (1) O 62	/570. RY*(1) O 66	0.19	2.74	0.029
164. LP (2) O 62	/568. RY*(1) H 65	0.03	1.10	0.008
164. LP (2) O 62	/570. RY*(1) O 66	0.08	2.49	0.018
164. LP (2) O 62	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.08	0.69	0.010
164. LP (2) O 62	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.03	0.69	0.006
165. LP (3) O 62	/566. RY*(1) H 64	0.12	1.04	0.015
165. LP (3) O 62	/568. RY*(1) H 65	0.06	1.16	0.012
165. LP (3) O 62	/570. RY*(1) O 66	0.35	2.55	0.041
165. LP (3) O 62	/573. RY*(4) O 66	0.04	1.56	0.011
165. LP (3) O 62	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.05	0.75	0.009
646. BD*(2) C 40 - C 41	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.06	0.30	0.009
from unit 2 to unit 5				
58. BD (1) C 36 - C 37	/580. RY*(3)Cl 67	0.03	1.66	0.009
71. BD (1) N 43 - C 44	/581. RY*(4)Cl 67	0.03	2.43	0.011

156. LP (2) N 42	/579. RY*(2)Cl 67	0.41	1.12	0.029
156. LP (2) N 42	/580. RY*(3)Cl 67	0.16	1.36	0.020
156. LP (2) N 42	/581. RY*(4)Cl 67	0.33	2.10	0.036
163. LP (1) O 62	/579. RY*(2)Cl 67	0.07	1.26	0.012
163. LP (1) O 62	/580. RY*(3)Cl 67	0.04	1.50	0.010
163. LP (1) O 62	/581. RY*(4)Cl 67	0.18	2.24	0.026
164. LP (2) O 62	/579. RY*(2)Cl 67	0.03	1.01	0.007
164. LP (2) O 62	/581. RY*(4)Cl 67	0.06	1.99	0.014
165. LP (3) O 62	/579. RY*(2)Cl 67	0.13	1.08	0.016
165. LP (3) O 62	/580. RY*(3)Cl 67	0.06	1.32	0.012
165. LP (3) O 62	/581. RY*(4)Cl 67	0.36	2.05	0.037

from unit 3 to unit 1

129. CR (1)Cr 63	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.03	215.68	0.094
129. CR (1)Cr 63	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.03	215.63	0.097
130. CR (2)Cr 63	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.15	24.51	0.077
130. CR (2)Cr 63	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.10	24.62	0.063
130. CR (2)Cr 63	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.16	24.46	0.080
131. CR (3)Cr 63	/262. RY*(2) N 11	0.03	5.76	0.015
131. CR (3)Cr 63	/263. RY*(3) N 11	0.12	5.17	0.032
131. CR (3)Cr 63	/293. RY*(1) C 15	0.03	5.00	0.014
131. CR (3)Cr 63	/326. RY*(2) O 19	0.03	5.49	0.015
131. CR (3)Cr 63	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.73	4.19	0.070
131. CR (3)Cr 63	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.48	4.30	0.058
131. CR (3)Cr 63	/619. BD*(1) C 15 - C 17	0.03	4.27	0.015
131. CR (3)Cr 63	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.90	4.14	0.078
133. CR (5)Cr 63	/262. RY*(2) N 11	0.03	3.86	0.014
133. CR (5)Cr 63	/263. RY*(3) N 11	0.08	3.27	0.021
133. CR (5)Cr 63	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.28	2.30	0.032
133. CR (5)Cr 63	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.24	2.41	0.031
135. CR (7)Cr 63	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.04	2.41	0.012
135. CR (7)Cr 63	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.50	2.25	0.043
137. CR (9)Cr 63	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.04	2.30	0.013
166. LP (4)Cr 63	/ 13. BD*(2) C 4 - C 6	0.19	0.10	0.006
166. LP (4)Cr 63	/262. RY*(2) N 11	0.20	2.08	0.041
166. LP (4)Cr 63	/264. RY*(4) N 11	0.04	1.64	0.016
166. LP (4)Cr 63	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.04	0.51	0.009
166. LP (4)Cr 63	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.03	0.62	0.009
166. LP (4)Cr 63	/613. BD*(1) N 12 - C 13	0.04	0.50	0.009
167. LP (5)Cr 63	/ 13. BD*(2) C 4 - C 6	0.07	0.08	0.003
167. LP (5)Cr 63	/222. RY*(2) C 6	0.03	1.33	0.013
167. LP (5)Cr 63	/262. RY*(2) N 11	0.07	2.06	0.027
167. LP (5)Cr 63	/263. RY*(3) N 11	0.05	1.47	0.019
167. LP (5)Cr 63	/293. RY*(1) C 15	0.05	1.31	0.018
167. LP (5)Cr 63	/326. RY*(2) O 19	0.29	1.79	0.050
167. LP (5)Cr 63	/327. RY*(3) O 19	0.34	1.99	0.058
167. LP (5)Cr 63	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.07	0.44	0.012
168. LP (6)Cr 63	/192. RY*(4) C 2	0.07	0.43	0.018
168. LP (6)Cr 63	/206. RY*(2) C 4	0.05	0.96	0.023
168. LP (6)Cr 63	/207. RY*(3) C 4	0.11	0.96	0.035
168. LP (6)Cr 63	/208. RY*(4) C 4	0.05	0.33	0.013
168. LP (6)Cr 63	/214. RY*(2) C 5	0.08	0.76	0.026
168. LP (6)Cr 63	/215. RY*(3) C 5	0.10	0.60	0.026
168. LP (6)Cr 63	/216. RY*(4) C 5	0.04	0.51	0.016
168. LP (6)Cr 63	/218. RY*(6) C 5	0.03	3.35	0.034
168. LP (6)Cr 63	/221. RY*(1) C 6	1.36	0.22	0.057
168. LP (6)Cr 63	/222. RY*(2) C 6	4.66	0.56	0.171
168. LP (6)Cr 63	/223. RY*(3) C 6	0.72	0.47	0.062
168. LP (6)Cr 63	/224. RY*(4) C 6	3.31	0.40	0.122
168. LP (6)Cr 63	/225. RY*(5) C 6	0.04	2.40	0.034
168. LP (6)Cr 63	/226. RY*(6) C 6	0.54	2.36	0.121
168. LP (6)Cr 63	/228. RY*(8) C 6	0.05	2.17	0.035
168. LP (6)Cr 63	/245. RY*(1) C 9	0.07	0.60	0.021
168. LP (6)Cr 63	/247. RY*(3) C 9	0.13	0.49	0.027
168. LP (6)Cr 63	/248. RY*(4) C 9	0.03	0.47	0.013
168. LP (6)Cr 63	/261. RY*(1) N 11	0.19	0.23	0.022
168. LP (6)Cr 63	/262. RY*(2) N 11	16.50	1.30	0.488
168. LP (6)Cr 63	/263. RY*(3) N 11	10.17	0.70	0.284
168. LP (6)Cr 63	/264. RY*(4) N 11	0.10	0.86	0.030
168. LP (6)Cr 63	/266. RY*(6) N 11	0.04	3.35	0.038
168. LP (6)Cr 63	/269. RY*(1) N 12	0.60	0.16	0.032

168. LP (6)Cr 63	/270. RY*(2) N 12	1.33	0.18	0.051
168. LP (6)Cr 63	/271. RY*(3) N 12	1.58	0.48	0.093
168. LP (6)Cr 63	/272. RY*(4) N 12	0.64	1.03	0.086
168. LP (6)Cr 63	/275. RY*(7) N 12	0.08	3.06	0.052
168. LP (6)Cr 63	/278. RY*(2) C 13	0.12	0.79	0.032
168. LP (6)Cr 63	/279. RY*(3) C 13	1.38	0.28	0.067
168. LP (6)Cr 63	/282. RY*(6) C 13	0.05	2.52	0.039
168. LP (6)Cr 63	/287. RY*(3) C 14	0.03	0.65	0.016
168. LP (6)Cr 63	/288. RY*(4) C 14	0.16	0.28	0.022
168. LP (6)Cr 63	/293. RY*(1) C 15	8.19	0.54	0.221
168. LP (6)Cr 63	/295. RY*(3) C 15	1.42	0.88	0.118
168. LP (6)Cr 63	/296. RY*(4) C 15	0.49	0.37	0.045
168. LP (6)Cr 63	/297. RY*(5) C 15	0.82	3.17	0.172
168. LP (6)Cr 63	/299. RY*(7) C 15	0.08	2.53	0.047
168. LP (6)Cr 63	/302. RY*(2) C 16	0.06	0.59	0.019
168. LP (6)Cr 63	/310. RY*(2) C 17	0.37	0.69	0.054
168. LP (6)Cr 63	/312. RY*(4) C 17	0.08	0.26	0.015
168. LP (6)Cr 63	/317. RY*(1) C 18	0.03	0.56	0.014
168. LP (6)Cr 63	/326. RY*(2) O 19	6.21	1.02	0.268
168. LP (6)Cr 63	/327. RY*(3) O 19	7.62	1.22	0.325
168. LP (6)Cr 63	/329. RY*(5) O 19	0.06	4.53	0.054
168. LP (6)Cr 63	/608. BD*(1) C 9 - C 10	0.16	0.02	0.006
168. LP (6)Cr 63	/623. BD*(1) C 17 - C 18	0.13	0.01	0.004
169. LP (7)Cr 63	/262. RY*(2) N 11	0.07	0.32	0.052
169. LP (7)Cr 63	/272. RY*(4) N 12	0.18	0.05	0.039
169. LP (7)Cr 63	/298. RY*(6) C 15	0.03	1.99	0.097
169. LP (7)Cr 63	/326. RY*(2) O 19	1.70	0.05	0.112
169. LP (7)Cr 63	/327. RY*(3) O 19	2.04	0.25	0.279
169. LP (7)Cr 63	/328. RY*(4) O 19	0.07	0.25	0.054
172. LP (1)Cr 63	/325. RY*(1) O 19	0.04	1.37	0.009
172. LP (1)Cr 63	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.04	0.65	0.007
172. LP (1)Cr 63	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.09	0.59	0.009
173. LP (2)Cr 63	/261. RY*(1) N 11	0.19	1.15	0.019
173. LP (2)Cr 63	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.14	0.59	0.012
174. LP (3)Cr 63	/ 13. BD*(2) C 4 - C 6	0.07	0.23	0.007
174. LP (3)Cr 63	/262. RY*(2) N 11	0.04	2.21	0.012
174. LP (3)Cr 63	/264. RY*(4) N 11	0.12	1.77	0.018
174. LP (3)Cr 63	/265. RY*(5) N 11	0.03	4.18	0.015
174. LP (3)Cr 63	/277. RY*(1) C 13	0.03	1.40	0.009
174. LP (3)Cr 63	/602. BD*(1) C 6 - N 11	0.30	0.64	0.018
174. LP (3)Cr 63	/612. BD*(1) N 11 - N 12	0.54	0.76	0.026
174. LP (3)Cr 63	/620. BD*(1) C 15 - O 19	0.04	0.59	0.006

from unit 3 to unit 2

129. CR (1)Cr 63	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.03	215.67	0.094
129. CR (1)Cr 63	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.03	215.62	0.099
130. CR (2)Cr 63	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.15	24.50	0.077
130. CR (2)Cr 63	/649. BD*(1) N 42 - N 43	0.08	24.61	0.057
130. CR (2)Cr 63	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.17	24.45	0.081
131. CR (3)Cr 63	/445. RY*(3) N 42	0.09	5.14	0.027
131. CR (3)Cr 63	/475. RY*(1) C 46	0.03	5.01	0.016
131. CR (3)Cr 63	/538. RY*(2) O 62	0.04	5.68	0.018
131. CR (3)Cr 63	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.73	4.18	0.071
131. CR (3)Cr 63	/649. BD*(1) N 42 - N 43	0.41	4.29	0.053
131. CR (3)Cr 63	/650. BD*(1) N 43 - C 44	0.03	4.17	0.013
131. CR (3)Cr 63	/656. BD*(1) C 46 - C 48	0.04	4.26	0.016
131. CR (3)Cr 63	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.92	4.13	0.078
133. CR (5)Cr 63	/444. RY*(2) N 42	0.03	3.93	0.013
133. CR (5)Cr 63	/445. RY*(3) N 42	0.06	3.25	0.018
133. CR (5)Cr 63	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.30	2.29	0.033
133. CR (5)Cr 63	/649. BD*(1) N 42 - N 43	0.21	2.40	0.029
133. CR (5)Cr 63	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.04	2.24	0.012
135. CR (7)Cr 63	/649. BD*(1) N 42 - N 43	0.03	2.40	0.011
137. CR (9)Cr 63	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.05	2.29	0.013
137. CR (9)Cr 63	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.47	2.24	0.041
166. LP (4)Cr 63	/ 56. BD*(2) C 35 - C 37	0.20	0.09	0.006
166. LP (4)Cr 63	/444. RY*(2) N 42	0.24	2.15	0.044
166. LP (4)Cr 63	/445. RY*(3) N 42	0.06	1.46	0.019
166. LP (4)Cr 63	/446. RY*(4) N 42	0.04	1.60	0.016
166. LP (4)Cr 63	/538. RY*(2) O 62	0.22	2.00	0.042
166. LP (4)Cr 63	/539. RY*(3) O 62	0.12	1.76	0.029

166. LP (4)Cr 63	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.05	0.50	0.010
166. LP (4)Cr 63	/650. BD*(1) N 43 - C 44	0.05	0.49	0.009
166. LP (4)Cr 63	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.05	0.45	0.009
167. LP (5)Cr 63	/404. RY*(2) C 37	0.03	1.22	0.014
167. LP (5)Cr 63	/444. RY*(2) N 42	0.04	2.13	0.020
167. LP (5)Cr 63	/445. RY*(3) N 42	0.07	1.45	0.022
167. LP (5)Cr 63	/475. RY*(1) C 46	0.03	1.31	0.014
167. LP (5)Cr 63	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.05	0.44	0.010
168. LP (6)Cr 63	/374. RY*(4) C 33	0.05	0.38	0.015
168. LP (6)Cr 63	/388. RY*(2) C 35	0.07	0.92	0.027
168. LP (6)Cr 63	/389. RY*(3) C 35	0.15	0.90	0.038
168. LP (6)Cr 63	/390. RY*(4) C 35	0.06	0.30	0.014
168. LP (6)Cr 63	/392. RY*(6) C 35	0.03	2.54	0.028
168. LP (6)Cr 63	/396. RY*(2) C 36	0.03	0.62	0.015
168. LP (6)Cr 63	/397. RY*(3) C 36	0.11	0.52	0.026
168. LP (6)Cr 63	/398. RY*(4) C 36	0.07	0.53	0.020
168. LP (6)Cr 63	/403. RY*(1) C 37	1.95	0.20	0.065
168. LP (6)Cr 63	/404. RY*(2) C 37	7.55	0.45	0.195
168. LP (6)Cr 63	/405. RY*(3) C 37	0.77	0.42	0.061
168. LP (6)Cr 63	/406. RY*(4) C 37	0.66	0.41	0.055
168. LP (6)Cr 63	/408. RY*(6) C 37	0.56	2.92	0.137
168. LP (6)Cr 63	/410. RY*(8) C 37	0.13	2.14	0.056
168. LP (6)Cr 63	/428. RY*(2) C 40	0.04	0.32	0.011
168. LP (6)Cr 63	/429. RY*(3) C 40	0.19	0.48	0.032
168. LP (6)Cr 63	/430. RY*(4) C 40	0.04	0.43	0.014
168. LP (6)Cr 63	/443. RY*(1) N 42	0.23	0.22	0.024
168. LP (6)Cr 63	/444. RY*(2) N 42	15.38	1.36	0.483
168. LP (6)Cr 63	/445. RY*(3) N 42	13.54	0.68	0.323
168. LP (6)Cr 63	/446. RY*(4) N 42	0.08	0.81	0.027
168. LP (6)Cr 63	/447. RY*(5) N 42	0.05	3.24	0.042
168. LP (6)Cr 63	/448. RY*(6) N 42	0.05	3.37	0.043
168. LP (6)Cr 63	/451. RY*(1) N 43	1.70	0.18	0.059
168. LP (6)Cr 63	/452. RY*(2) N 43	1.39	0.18	0.052
168. LP (6)Cr 63	/453. RY*(3) N 43	2.84	0.44	0.119
168. LP (6)Cr 63	/454. RY*(4) N 43	0.24	1.03	0.053
168. LP (6)Cr 63	/455. RY*(5) N 43	0.05	3.54	0.043
168. LP (6)Cr 63	/457. RY*(7) N 43	0.05	3.11	0.042
168. LP (6)Cr 63	/460. RY*(2) C 44	0.06	0.77	0.023
168. LP (6)Cr 63	/461. RY*(3) C 44	1.45	0.19	0.055
168. LP (6)Cr 63	/462. RY*(4) C 44	0.91	0.06	0.024
168. LP (6)Cr 63	/463. RY*(5) C 44	0.03	2.10	0.029
168. LP (6)Cr 63	/464. RY*(6) C 44	0.06	2.60	0.041
168. LP (6)Cr 63	/469. RY*(3) C 45	0.04	0.66	0.016
168. LP (6)Cr 63	/470. RY*(4) C 45	0.25	0.28	0.029
168. LP (6)Cr 63	/475. RY*(1) C 46	7.19	0.54	0.208
168. LP (6)Cr 63	/477. RY*(3) C 46	1.18	0.89	0.109
168. LP (6)Cr 63	/478. RY*(4) C 46	0.35	0.39	0.040
168. LP (6)Cr 63	/479. RY*(5) C 46	0.18	3.99	0.089
168. LP (6)Cr 63	/480. RY*(6) C 46	0.43	2.04	0.100
168. LP (6)Cr 63	/484. RY*(2) C 47	0.05	0.59	0.019
168. LP (6)Cr 63	/486. RY*(4) C 47	0.03	0.42	0.012
168. LP (6)Cr 63	/492. RY*(2) C 48	0.29	0.68	0.047
168. LP (6)Cr 63	/494. RY*(4) C 48	0.04	0.25	0.011
168. LP (6)Cr 63	/499. RY*(1) C 49	0.03	0.56	0.013
168. LP (6)Cr 63	/522. RY*(2) H 54	0.13	1.70	0.050
168. LP (6)Cr 63	/537. RY*(1) O 62	0.04	0.41	0.013
168. LP (6)Cr 63	/538. RY*(2) O 62	5.66	1.22	0.280
168. LP (6)Cr 63	/539. RY*(3) O 62	6.23	0.98	0.263
168. LP (6)Cr 63	/541. RY*(5) O 62	0.20	4.38	0.100
168. LP (6)Cr 63	/542. RY*(6) O 62	0.03	4.26	0.038
168. LP (6)Cr 63	/544. RY*(8) O 62	0.06	4.23	0.052
168. LP (6)Cr 63	/645. BD*(1) C 40 - C 41	0.11	0.01	0.004
169. LP (7)Cr 63	/444. RY*(2) N 42	3.56	0.39	0.410
169. LP (7)Cr 63	/454. RY*(4) N 43	0.85	0.06	0.087
169. LP (7)Cr 63	/479. RY*(5) C 46	0.05	3.02	0.151
169. LP (7)Cr 63	/480. RY*(6) C 46	0.04	1.07	0.081
169. LP (7)Cr 63	/538. RY*(2) O 62	15.31	0.25	0.750
169. LP (7)Cr 63	/540. RY*(4) O 62	0.16	0.24	0.077
172. LP (1)Cr 63	/537. RY*(1) O 62	0.04	1.33	0.009
172. LP (1)Cr 63	/649. BD*(1) N 42 - N 43	0.06	0.75	0.008
172. LP (1)Cr 63	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.07	0.59	0.008

173. LP (2)Cr 63	/ 56. BD*(2) C 35 - C 37	0.03	0.22	0.005
173. LP (2)Cr 63	/408. RY*(6) C 37	0.03	3.84	0.014
173. LP (2)Cr 63	/446. RY*(4) N 42	0.09	1.73	0.016
173. LP (2)Cr 63	/447. RY*(5) N 42	0.03	4.15	0.013
173. LP (2)Cr 63	/459. RY*(1) C 44	0.03	1.43	0.008
173. LP (2)Cr 63	/539. RY*(3) O 62	0.04	1.89	0.010
173. LP (2)Cr 63	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.31	0.63	0.018
173. LP (2)Cr 63	/649. BD*(1) N 42 - N 43	0.53	0.75	0.025
173. LP (2)Cr 63	/656. BD*(1) C 46 - C 48	0.04	0.71	0.006
173. LP (2)Cr 63	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.10	0.59	0.010
174. LP (3)Cr 63	/443. RY*(1) N 42	0.13	1.14	0.016
174. LP (3)Cr 63	/657. BD*(1) C 46 - O 62	0.11	0.59	0.010

within unit 3

130. CR (2)Cr 63	/168. LP (6)Cr 63	0.80	24.78	0.191
131. CR (3)Cr 63	/168. LP (6)Cr 63	2.90	4.46	0.155
166. LP (4)Cr 63	/167. LP (5)Cr 63	0.52	0.02	0.004
166. LP (4)Cr 63	/551. RY*(7)Cr 63	0.28	2.04	0.047
167. LP (5)Cr 63	/168. LP (6)Cr 63	1.40	0.77	0.061
167. LP (5)Cr 63	/547. RY*(3)Cr 63	0.64	1.83	0.075
167. LP (5)Cr 63	/550. RY*(6)Cr 63	0.28	2.93	0.063
167. LP (5)Cr 63	/561. RY*(17)Cr 63	0.32	37.67	0.243
168. LP (6)Cr 63	/169. LP (7)Cr 63	3.40	0.97	0.188
168. LP (6)Cr 63	/546. RY*(2)Cr 63	9.96	0.94	0.325
168. LP (6)Cr 63	/547. RY*(3)Cr 63	3.93	1.06	0.217
168. LP (6)Cr 63	/548. RY*(4)Cr 63	1.15	0.91	0.108
168. LP (6)Cr 63	/549. RY*(5)Cr 63	5.71	0.75	0.220
168. LP (6)Cr 63	/550. RY*(6)Cr 63	27.44	2.16	0.821
168. LP (6)Cr 63	/551. RY*(7)Cr 63	1.43	1.26	0.143
168. LP (6)Cr 63	/554. RY*(10)Cr 63	0.98	8.44	0.307
168. LP (6)Cr 63	/555. RY*(11)Cr 63	0.42	3.71	0.134
168. LP (6)Cr 63	/558. RY*(14)Cr 63	0.33	3.93	0.122
168. LP (6)Cr 63	/560. RY*(16)Cr 63	3.83	114.25	2.234
168. LP (6)Cr 63	/561. RY*(17)Cr 63	23.31	36.90	3.131
168. LP (6)Cr 63	/564. RY*(20)Cr 63	7.38	673.64	7.526
169. LP (7)Cr 63	/547. RY*(3)Cr 63	4.07	0.09	0.230
169. LP (7)Cr 63	/551. RY*(7)Cr 63	0.36	0.29	0.127
169. LP (7)Cr 63	/552. RY*(8)Cr 63	2.98	7.08	1.853
169. LP (7)Cr 63	/559. RY*(15)Cr 63	0.81	24.08	1.782
169. LP (7)Cr 63	/561. RY*(17)Cr 63	0.32	35.93	1.366

from unit 3 to unit 4

133. CR (5)Cr 63	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.03	2.25	0.010
135. CR (7)Cr 63	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.03	2.25	0.010
137. CR (9)Cr 63	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.03	2.25	0.011
137. CR (9)Cr 63	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.03	2.26	0.011
167. LP (5)Cr 63	/566. RY*(1) H 64	0.04	0.75	0.012
167. LP (5)Cr 63	/568. RY*(1) H 65	0.03	0.86	0.012
167. LP (5)Cr 63	/570. RY*(1) O 66	0.48	2.25	0.072
168. LP (6)Cr 63	/568. RY*(1) H 65	36.37	0.09	0.195
168. LP (6)Cr 63	/569. RY*(2) H 65	0.20	1.44	0.057
168. LP (6)Cr 63	/570. RY*(1) O 66	15.67	1.48	0.514
168. LP (6)Cr 63	/571. RY*(2) O 66	0.05	0.39	0.015
168. LP (6)Cr 63	/572. RY*(3) O 66	1.62	0.66	0.110
168. LP (6)Cr 63	/573. RY*(4) O 66	0.70	0.50	0.063
168. LP (6)Cr 63	/575. RY*(6) O 66	0.05	4.24	0.047
169. LP (7)Cr 63	/570. RY*(1) O 66	0.67	0.51	0.231
172. LP (1)Cr 63	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.22	0.60	0.014
172. LP (1)Cr 63	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.11	0.60	0.010
173. LP (2)Cr 63	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.11	0.60	0.010
174. LP (3)Cr 63	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.19	0.60	0.014

from unit 3 to unit 5

166. LP (4)Cr 63	/579. RY*(2)Cl 67	0.05	0.79	0.013
167. LP (5)Cr 63	/581. RY*(4)Cl 67	0.15	1.75	0.036
168. LP (6)Cr 63	/579. RY*(2)Cl 67	421.69	0.01	0.235
168. LP (6)Cr 63	/580. RY*(3)Cl 67	9.57	0.25	0.165
168. LP (6)Cr 63	/581. RY*(4)Cl 67	13.41	0.98	0.388
168. LP (6)Cr 63	/583. RY*(6)Cl 67	0.34	2.13	0.091

from unit 4 to unit 1

```
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /262. RY*(   2) N  11                   0.05    2.72    0.014
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /221. RY*(   1) C   6                   0.04    1.65    0.010
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /222. RY*(   2) C   6                   0.06    1.99    0.014
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /224. RY*(   4) C   6                   0.05    1.83    0.012
175. LP (   1) O  66                / 13. BD*(   2) C   4 - C   6           0.07    0.50    0.011
175. LP (   1) O  66                /222. RY*(   2) C   6                   0.04    1.74    0.011
175. LP (   1) O  66                /262. RY*(   2) N  11                   0.03    2.48    0.011
175. LP (   1) O  66                /263. RY*(   3) N  11                   0.04    1.88    0.011
175. LP (   1) O  66                /264. RY*(   4) N  11                   0.03    2.04    0.010
175. LP (   1) O  66                /602. BD*(   1) C   6 - N  11           0.10    0.91    0.012
175. LP (   1) O  66                /609. BD*(   2) C   9 - C  10           0.03    0.57    0.006
175. LP (   1) O  66                /612. BD*(   1) N  11 - N  12           0.07    1.02    0.010
176. LP (   2) O  66                / 13. BD*(   2) C   4 - C   6           0.06    0.53    0.010
176. LP (   2) O  66                /222. RY*(   2) C   6                   0.13    1.77    0.020
176. LP (   2) O  66                /224. RY*(   4) C   6                   0.04    1.61    0.011
176. LP (   2) O  66                /226. RY*(   6) C   6                   0.06    3.57    0.020
176. LP (   2) O  66                /262. RY*(   2) N  11                   0.25    2.51    0.033
176. LP (   2) O  66                /263. RY*(   3) N  11                   0.35    1.91    0.034
176. LP (   2) O  66                /270. RY*(   2) N  12                   0.03    1.39    0.009
176. LP (   2) O  66                /271. RY*(   3) N  12                   0.09    1.69    0.016
176. LP (   2) O  66                /293. RY*(   1) C  15                   0.05    1.75    0.012
176. LP (   2) O  66                /295. RY*(   3) C  15                   0.05    2.09    0.013
176. LP (   2) O  66                /297. RY*(   5) C  15                   0.05    4.38    0.020
176. LP (   2) O  66                /602. BD*(   1) C   6 - N  11           0.07    0.94    0.010
176. LP (   2) O  66                /612. BD*(   1) N  11 - N  12           0.20    1.05    0.019

from unit  4 to unit  2
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /404. RY*(   2) C  37                   0.04    1.88    0.011
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /444. RY*(   2) N  42                   0.14    2.79    0.025
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /445. RY*(   3) N  42                   0.19    2.11    0.025
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /538. RY*(   2) O  62                   0.05    2.65    0.015
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /539. RY*(   3) O  62                   0.05    2.40    0.014
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /646. BD*(   2) C  40 - C  41           0.04    0.81    0.009
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /657. BD*(   1) C  46 - O  62           0.03    1.10    0.007
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /444. RY*(   2) N  42                   0.07    2.79    0.018
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /445. RY*(   3) N  42                   0.08    2.11    0.017
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /646. BD*(   2) C  40 - C  41           0.03    0.81    0.007
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /657. BD*(   1) C  46 - O  62           0.03    1.10    0.007
175. LP (   1) O  66                /404. RY*(   2) C  37                   0.08    1.63    0.014
175. LP (   1) O  66                /427. RY*(   1) C  40                   0.04    1.37    0.010
175. LP (   1) O  66                /445. RY*(   3) N  42                   0.03    1.86    0.010
176. LP (   2) O  66                /404. RY*(   2) C  37                   0.11    1.66    0.017
176. LP (   2) O  66                /408. RY*(   6) C  37                   0.03    4.13    0.015
176. LP (   2) O  66                /443. RY*(   1) N  42                   0.04    1.43    0.010
176. LP (   2) O  66                /444. RY*(   2) N  42                   0.37    2.57    0.040
176. LP (   2) O  66                /445. RY*(   3) N  42                   0.35    1.89    0.034
176. LP (   2) O  66                /451. RY*(   1) N  43                   0.05    1.39    0.011
176. LP (   2) O  66                /453. RY*(   3) N  43                   0.07    1.65    0.014
176. LP (   2) O  66                /475. RY*(   1) C  46                   0.09    1.75    0.017
176. LP (   2) O  66                /476. RY*(   2) C  46                   0.03    1.19    0.008
176. LP (   2) O  66                /537. RY*(   1) O  62                   0.03    1.62    0.008
176. LP (   2) O  66                /538. RY*(   2) O  62                   0.18    2.43    0.028
176. LP (   2) O  66                /539. RY*(   3) O  62                   0.25    2.19    0.031
176. LP (   2) O  66                /540. RY*(   4) O  62                   0.03    2.42    0.011
176. LP (   2) O  66                /639. BD*(   1) C  37 - N  42           0.04    0.93    0.008
176. LP (   2) O  66                /649. BD*(   1) N  42 - N  43           0.11    1.04    0.014
176. LP (   2) O  66                /657. BD*(   1) C  46 - O  62           0.07    0.88    0.010

from unit  4 to unit  3
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /167. LP (   5)Cr  63                   0.18    0.66    0.017
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /168. LP (   6)Cr  63                   3.19    1.43    0.092
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /169. LP (   7)Cr  63                   0.05    2.40    0.015
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /170. LP*(   8)Cr  63                   0.07    2.60    0.017
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /545. RY*(   1)Cr  63                   0.05    1.30    0.010
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /546. RY*(   2)Cr  63                   0.12    2.36    0.021
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /547. RY*(   3)Cr  63                   0.14    2.49    0.023
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /548. RY*(   4)Cr  63                   0.08    2.33    0.017
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /549. RY*(   5)Cr  63                   0.22    2.17    0.028
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /550. RY*(   6)Cr  63                   0.50    3.59    0.053
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /554. RY*(  10)Cr  63                   0.10    9.87    0.040
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /560. RY*(  16)Cr  63                   0.06  115.68    0.108
```

```
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /561. RY*(  17)Cr  63                    0.39   38.33    0.155
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /564. RY*(  20)Cr  63                    0.14  675.06    0.394
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /167. LP (   5)Cr  63                    0.15    0.67    0.015
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /168. LP (   6)Cr  63                    2.64    1.43    0.084
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /169. LP (   7)Cr  63                    0.03    2.40    0.011
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /170. LP*(   8)Cr  63                    0.05    2.60    0.015
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /545. RY*(   1)Cr  63                    0.04    1.30    0.010
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /546. RY*(   2)Cr  63                    0.20    2.37    0.027
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /547. RY*(   3)Cr  63                    0.11    2.49    0.021
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /548. RY*(   4)Cr  63                    0.04    2.34    0.012
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /550. RY*(   6)Cr  63                    0.36    3.59    0.045
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /553. RY*(   9)Cr  63                    0.03    5.22    0.016
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /554. RY*(  10)Cr  63                    0.08    9.87    0.035
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /560. RY*(  16)Cr  63                    0.03  115.68    0.077
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /561. RY*(  17)Cr  63                    0.20   38.33    0.110
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /564. RY*(  20)Cr  63                    0.08  675.07    0.287
138. CR (   1) O  66                /167. LP (   5)Cr  63                    0.21   18.86    0.096
138. CR (   1) O  66                /168. LP (   6)Cr  63                    1.80   19.62    0.256
175. LP (   1) O  66                /167. LP (   5)Cr  63                    0.40    0.42    0.020
175. LP (   1) O  66                /168. LP (   6)Cr  63                    2.87    1.18    0.079
175. LP (   1) O  66                /170. LP*(   8)Cr  63                    0.03    2.35    0.011
175. LP (   1) O  66                /171. LP*(   9)Cr  63                    0.29    2.35    0.033
175. LP (   1) O  66                /545. RY*(   1)Cr  63                    0.09    1.05    0.012
175. LP (   1) O  66                /546. RY*(   2)Cr  63                    0.15    2.12    0.022
175. LP (   1) O  66                /548. RY*(   4)Cr  63                    0.26    2.09    0.030
175. LP (   1) O  66                /550. RY*(   6)Cr  63                    0.19    3.35    0.032
175. LP (   1) O  66                /551. RY*(   7)Cr  63                    0.06    2.44    0.015
175. LP (   1) O  66                /554. RY*(  10)Cr  63                    0.07    9.63    0.033
175. LP (   1) O  66                /560. RY*(  16)Cr  63                    0.03  115.43    0.074
175. LP (   1) O  66                /561. RY*(  17)Cr  63                    0.19   38.08    0.107
175. LP (   1) O  66                /564. RY*(  20)Cr  63                    0.07  674.82    0.284
176. LP (   2) O  66                /166. LP (   4)Cr  63                    0.32    0.43    0.018
176. LP (   2) O  66                /167. LP (   5)Cr  63                   14.43    0.45    0.116
176. LP (   2) O  66                /168. LP (   6)Cr  63                   23.02    1.21    0.216
176. LP (   2) O  66                /169. LP (   7)Cr  63                    0.20    2.18    0.028
176. LP (   2) O  66                /170. LP*(   8)Cr  63                    2.56    2.38    0.103
176. LP (   2) O  66                /171. LP*(   9)Cr  63                    1.29    2.38    0.073
176. LP (   2) O  66                /545. RY*(   1)Cr  63                    0.30    1.08    0.024
176. LP (   2) O  66                /546. RY*(   2)Cr  63                    0.53    2.15    0.045
176. LP (   2) O  66                /548. RY*(   4)Cr  63                    0.28    2.12    0.032
176. LP (   2) O  66                /549. RY*(   5)Cr  63                    0.06    1.96    0.015
176. LP (   2) O  66                /550. RY*(   6)Cr  63                    1.87    3.37    0.105
176. LP (   2) O  66                /551. RY*(   7)Cr  63                    0.28    2.47    0.035
176. LP (   2) O  66                /552. RY*(   8)Cr  63                    0.06    9.26    0.030
176. LP (   2) O  66                /553. RY*(   9)Cr  63                    0.03    5.00    0.016
176. LP (   2) O  66                /554. RY*(  10)Cr  63                    1.41    9.65    0.154
176. LP (   2) O  66                /557. RY*(  13)Cr  63                    0.03    4.99    0.016
176. LP (   2) O  66                /558. RY*(  14)Cr  63                    0.08    5.14    0.027
176. LP (   2) O  66                /560. RY*(  16)Cr  63                    0.34  115.46    0.262
176. LP (   2) O  66                /561. RY*(  17)Cr  63                    1.88   38.11    0.354
176. LP (   2) O  66                /563. RY*(  19)Cr  63                    0.25   26.22    0.106
176. LP (   2) O  66                /564. RY*(  20)Cr  63                    0.65  674.85    0.877

within unit  4
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /569. RY*(   2) H  65                    0.27    2.87    0.035
138. CR (   1) O  66                /567. RY*(   2) H  64                    0.37   21.15    0.112
138. CR (   1) O  66                /569. RY*(   2) H  65                    0.29   21.06    0.099
175. LP (   1) O  66                /567. RY*(   2) H  64                    0.31    2.71    0.037
175. LP (   1) O  66                /569. RY*(   2) H  65                    0.38    2.62    0.040
176. LP (   2) O  66                /566. RY*(   1) H  64                    0.57    1.19    0.035
176. LP (   2) O  66                /568. RY*(   1) H  65                    0.47    1.30    0.033
176. LP (   2) O  66                /569. RY*(   2) H  65                    0.33    2.65    0.039
176. LP (   2) O  66                /570. RY*(   1) O  66                    1.57    2.69    0.086

from unit  4 to unit  5
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /579. RY*(   2)Cl  67                    0.03    1.44    0.008
 87. BD (   1) H  64 - O  66        /581. RY*(   4)Cl  67                    0.08    2.41    0.017
 88. BD (   1) H  65 - O  66        /579. RY*(   2)Cl  67                    0.05    1.44    0.011
175. LP (   1) O  66                /579. RY*(   2)Cl  67                    0.03    1.19    0.008
175. LP (   1) O  66                /581. RY*(   4)Cl  67                    0.03    2.16    0.010
176. LP (   2) O  66                /579. RY*(   2)Cl  67                    0.46    1.22    0.031
```

176. LP (2) O 66	/580. RY*(3)Cl 67		0.10	1.46	0.016
176. LP (2) O 66	/581. RY*(4)Cl 67		0.36	2.19	0.037
from unit 5 to unit 1					
177. LP (1)Cl 67	/347. RY*(1) H 24		0.05	0.82	0.008
177. LP (1)Cl 67	/609. BD*(2) C 9 - C 10		0.05	0.31	0.006
177. LP (1)Cl 67	/610. BD*(1) C 9 - H 24		0.22	0.75	0.016
177. LP (1)Cl 67	/616. BD*(2) C 13 - C 15		0.15	0.29	0.009
177. LP (1)Cl 67	/620. BD*(1) C 15 - O 19		0.11	0.60	0.010
178. LP (2)Cl 67	/602. BD*(1) C 6 - N 11		0.05	0.65	0.007
178. LP (2)Cl 67	/610. BD*(1) C 9 - H 24		0.12	0.75	0.012
178. LP (2)Cl 67	/613. BD*(1) N 12 - C 13		0.07	0.64	0.008
178. LP (2)Cl 67	/616. BD*(2) C 13 - C 15		0.03	0.29	0.004
178. LP (2)Cl 67	/620. BD*(1) C 15 - O 19		0.07	0.60	0.008
179. LP (3)Cl 67	/222. RY*(2) C 6		0.04	2.05	0.012
179. LP (3)Cl 67	/224. RY*(4) C 6		0.03	1.89	0.009
179. LP (3)Cl 67	/262. RY*(2) N 11		0.22	2.79	0.032
179. LP (3)Cl 67	/263. RY*(3) N 11		0.10	2.19	0.019
179. LP (3)Cl 67	/293. RY*(1) C 15		0.06	2.03	0.013
179. LP (3)Cl 67	/326. RY*(2) O 19		0.06	2.51	0.016
179. LP (3)Cl 67	/327. RY*(3) O 19		0.08	2.71	0.019
179. LP (3)Cl 67	/610. BD*(1) C 9 - H 24		0.05	1.32	0.010
180. LP (4)Cl 67	/221. RY*(1) C 6		0.03	1.20	0.009
180. LP (4)Cl 67	/222. RY*(2) C 6		0.23	1.55	0.025
180. LP (4)Cl 67	/223. RY*(3) C 6		0.06	1.46	0.013
180. LP (4)Cl 67	/224. RY*(4) C 6		0.14	1.38	0.019
180. LP (4)Cl 67	/226. RY*(6) C 6		0.06	3.35	0.019
180. LP (4)Cl 67	/262. RY*(2) N 11		1.30	2.28	0.074
180. LP (4)Cl 67	/263. RY*(3) N 11		0.41	1.69	0.036
180. LP (4)Cl 67	/270. RY*(2) N 12		0.03	1.17	0.008
180. LP (4)Cl 67	/271. RY*(3) N 12		0.03	1.47	0.009
180. LP (4)Cl 67	/272. RY*(4) N 12		0.04	2.01	0.013
180. LP (4)Cl 67	/293. RY*(1) C 15		0.32	1.53	0.030
180. LP (4)Cl 67	/294. RY*(2) C 15		0.07	0.97	0.011
180. LP (4)Cl 67	/295. RY*(3) C 15		0.11	1.86	0.019
180. LP (4)Cl 67	/297. RY*(5) C 15		0.10	4.16	0.028
180. LP (4)Cl 67	/310. RY*(2) C 17		0.03	1.67	0.010
180. LP (4)Cl 67	/325. RY*(1) O 19		0.04	1.44	0.010
180. LP (4)Cl 67	/326. RY*(2) O 19		0.33	2.01	0.035
180. LP (4)Cl 67	/327. RY*(3) O 19		0.44	2.21	0.042
180. LP (4)Cl 67	/347. RY*(1) H 24		0.03	0.89	0.007
180. LP (4)Cl 67	/602. BD*(1) C 6 - N 11		0.15	0.71	0.014
180. LP (4)Cl 67	/620. BD*(1) C 15 - O 19		0.13	0.66	0.013
from unit 5 to unit 2					
177. LP (1)Cl 67	/ 52. BD*(2) C 34 - C 36		0.19	0.22	0.013
177. LP (1)Cl 67	/633. BD*(1) C 34 - C 36		0.03	0.73	0.006
178. LP (2)Cl 67	/ 52. BD*(2) C 34 - C 36		0.11	0.22	0.010
178. LP (2)Cl 67	/ 56. BD*(2) C 35 - C 37		0.16	0.23	0.011
178. LP (2)Cl 67	/639. BD*(1) C 37 - N 42		0.04	0.64	0.006
178. LP (2)Cl 67	/649. BD*(1) N 42 - N 43		0.05	0.75	0.007
179. LP (3)Cl 67	/ 52. BD*(2) C 34 - C 36		0.06	0.79	0.013
179. LP (3)Cl 67	/ 56. BD*(2) C 35 - C 37		0.04	0.80	0.010
179. LP (3)Cl 67	/403. RY*(1) C 37		0.03	1.69	0.009
179. LP (3)Cl 67	/404. RY*(2) C 37		0.04	1.94	0.011
179. LP (3)Cl 67	/444. RY*(2) N 42		0.20	2.85	0.030
179. LP (3)Cl 67	/445. RY*(3) N 42		0.13	2.17	0.022
179. LP (3)Cl 67	/453. RY*(3) N 43		0.03	1.93	0.009
179. LP (3)Cl 67	/475. RY*(1) C 46		0.06	2.03	0.014
179. LP (3)Cl 67	/538. RY*(2) O 62		0.06	2.71	0.016
179. LP (3)Cl 67	/539. RY*(3) O 62		0.06	2.47	0.016
180. LP (4)Cl 67	/ 56. BD*(2) C 35 - C 37		0.12	0.30	0.010
180. LP (4)Cl 67	/403. RY*(1) C 37		0.04	1.18	0.010
180. LP (4)Cl 67	/404. RY*(2) C 37		0.32	1.44	0.029
180. LP (4)Cl 67	/408. RY*(6) C 37		0.07	3.91	0.023
180. LP (4)Cl 67	/444. RY*(2) N 42		0.92	2.35	0.063
180. LP (4)Cl 67	/445. RY*(3) N 42		0.75	1.67	0.048
180. LP (4)Cl 67	/451. RY*(1) N 43		0.04	1.17	0.009
180. LP (4)Cl 67	/452. RY*(2) N 43		0.05	1.16	0.010
180. LP (4)Cl 67	/453. RY*(3) N 43		0.16	1.43	0.021
180. LP (4)Cl 67	/475. RY*(1) C 46		0.23	1.53	0.026

180. LP (4)Cl 67	/476. RY*(2) C 46	0.06	0.97	0.010
180. LP (4)Cl 67	/477. RY*(3) C 46	0.09	1.88	0.018
180. LP (4)Cl 67	/480. RY*(6) C 46	0.05	3.03	0.017
180. LP (4)Cl 67	/538. RY*(2) O 62	0.10	2.21	0.020
180. LP (4)Cl 67	/539. RY*(3) O 62	0.22	1.96	0.028
180. LP (4)Cl 67	/639. BD*(1) C 37 - N 42	0.07	0.71	0.010
180. LP (4)Cl 67	/649. BD*(1) N 42 - N 43	0.21	0.82	0.017
from unit 5 to unit 3				
139. CR (1)Cl 67	/168. LP (6)Cr 63	0.25	100.55	0.217
140. CR (2)Cl 67	/167. LP (5)Cr 63	0.10	10.62	0.049
140. CR (2)Cl 67	/168. LP (6)Cr 63	2.04	11.39	0.208
143. CR (5)Cl 67	/167. LP (5)Cr 63	0.04	7.02	0.024
143. CR (5)Cl 67	/168. LP (6)Cr 63	0.22	7.79	0.056
177. LP (1)Cl 67	/168. LP (6)Cr 63	0.03	0.92	0.007
177. LP (1)Cl 67	/171. LP*(9)Cr 63	0.10	2.09	0.018
177. LP (1)Cl 67	/546. RY*(2)Cr 63	0.12	1.86	0.019
177. LP (1)Cl 67	/549. RY*(5)Cr 63	0.10	1.67	0.016
178. LP (2)Cl 67	/168. LP (6)Cr 63	0.03	0.92	0.008
178. LP (2)Cl 67	/170. LP*(8)Cr 63	0.12	2.10	0.020
178. LP (2)Cl 67	/546. RY*(2)Cr 63	0.07	1.86	0.015
178. LP (2)Cl 67	/549. RY*(5)Cr 63	0.09	1.67	0.016
179. LP (3)Cl 67	/166. LP (4)Cr 63	0.26	0.71	0.022
179. LP (3)Cl 67	/167. LP (5)Cr 63	0.79	0.73	0.037
179. LP (3)Cl 67	/168. LP (6)Cr 63	7.19	1.49	0.140
179. LP (3)Cl 67	/545. RY*(1)Cr 63	0.14	1.36	0.018
179. LP (3)Cl 67	/546. RY*(2)Cr 63	0.25	2.43	0.031
179. LP (3)Cl 67	/547. RY*(3)Cr 63	0.22	2.55	0.030
179. LP (3)Cl 67	/549. RY*(5)Cr 63	0.19	2.24	0.026
179. LP (3)Cl 67	/550. RY*(6)Cr 63	0.89	3.65	0.072
179. LP (3)Cl 67	/551. RY*(7)Cr 63	0.07	2.75	0.018
179. LP (3)Cl 67	/554. RY*(10)Cr 63	0.05	9.93	0.029
179. LP (3)Cl 67	/560. RY*(16)Cr 63	0.13	115.74	0.157
179. LP (3)Cl 67	/561. RY*(17)Cr 63	0.86	38.39	0.230
179. LP (3)Cl 67	/564. RY*(20)Cr 63	0.32	675.13	0.586
180. LP (4)Cl 67	/166. LP (4)Cr 63	10.73	0.20	0.069
180. LP (4)Cl 67	/167. LP (5)Cr 63	16.41	0.22	0.085
180. LP (4)Cl 67	/168. LP (6)Cr 63	29.99	0.99	0.218
180. LP (4)Cl 67	/169. LP (7)Cr 63	1.99	1.96	0.084
180. LP (4)Cl 67	/545. RY*(1)Cr 63	0.93	0.86	0.038
180. LP (4)Cl 67	/546. RY*(2)Cr 63	0.82	1.92	0.054
180. LP (4)Cl 67	/547. RY*(3)Cr 63	1.32	2.05	0.070
180. LP (4)Cl 67	/549. RY*(5)Cr 63	0.90	1.73	0.053
180. LP (4)Cl 67	/550. RY*(6)Cr 63	3.21	3.15	0.136
180. LP (4)Cl 67	/551. RY*(7)Cr 63	0.42	2.25	0.042
180. LP (4)Cl 67	/552. RY*(8)Cr 63	0.48	9.04	0.089
180. LP (4)Cl 67	/554. RY*(10)Cr 63	0.31	9.43	0.073
180. LP (4)Cl 67	/555. RY*(11)Cr 63	0.05	4.70	0.021
180. LP (4)Cl 67	/556. RY*(12)Cr 63	0.03	8.38	0.021
180. LP (4)Cl 67	/559. RY*(15)Cr 63	0.14	26.04	0.081
180. LP (4)Cl 67	/560. RY*(16)Cr 63	0.56	115.24	0.343
180. LP (4)Cl 67	/561. RY*(17)Cr 63	3.29	37.89	0.477
180. LP (4)Cl 67	/562. RY*(18)Cr 63	0.03	4.85	0.017
180. LP (4)Cl 67	/564. RY*(20)Cr 63	1.06	674.62	1.144
from unit 5 to unit 4				
177. LP (1)Cl 67	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.10	0.60	0.010
177. LP (1)Cl 67	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.05	0.60	0.007
178. LP (2)Cl 67	/664. BD*(1) H 64 - O 66	0.03	0.60	0.006
178. LP (2)Cl 67	/665. BD*(1) H 65 - O 66	0.14	0.61	0.012
179. LP (3)Cl 67	/566. RY*(1) H 64	0.05	1.47	0.011
179. LP (3)Cl 67	/568. RY*(1) H 65	0.05	1.58	0.012
179. LP (3)Cl 67	/570. RY*(1) O 66	0.23	2.97	0.033
180. LP (4)Cl 67	/566. RY*(1) H 64	0.32	0.97	0.024
180. LP (4)Cl 67	/568. RY*(1) H 65	0.42	1.08	0.029
180. LP (4)Cl 67	/570. RY*(1) O 66	1.40	2.47	0.079
180. LP (4)Cl 67	/572. RY*(3) O 66	0.11	1.65	0.018
within unit 5				
180. LP (4)Cl 67	/579. RY*(2)Cl 67	0.63	1.00	0.034
180. LP (4)Cl 67	/580. RY*(3)Cl 67	0.43	1.24	0.031

180. LP (4)Cl 67	/581. RY*(4)Cl 67	1.43	1.97	0.072

Table (S8): Summary of Natural Population Analysis of the Mn(II) complex:

Atom	No	Natural Charge	Core	Valence	Rydberg	Total
C	1	0.31891	1.99861	3.66363	0.01885	5.68109
C	2	-0.09395	1.99882	4.08293	0.01219	6.09395
C	3	-0.21623	1.99901	4.20116	0.01606	6.21623
C	4	-0.06428	1.99883	4.05142	0.01403	6.06428
C	5	-0.21755	1.99893	4.20188	0.01674	6.21755
C	6	0.17364	1.99870	3.80431	0.02335	5.82636
C	7	-0.23549	1.99903	4.21965	0.01681	6.23549
C	8	-0.20422	1.99909	4.18991	0.01523	6.20422
C	9	-0.20385	1.99902	4.18858	0.01625	6.20385
C	10	-0.22308	1.99906	4.20948	0.01454	6.22308
N	11	-0.41509	1.99936	5.38613	0.02961	7.41509
N	12	-0.04994	1.99918	5.03041	0.02035	7.04994
C	13	0.02482	1.99873	3.95709	0.01936	5.97518
C	14	-0.28139	1.99905	4.25695	0.02539	6.28139
C	15	0.23846	1.99869	3.73920	0.02366	5.76154
C	16	-0.18251	1.99910	4.16343	0.01999	6.18251
C	17	-0.26125	1.99901	4.23864	0.02360	6.26125
C	18	-0.23377	1.99912	4.21917	0.01548	6.23377
O	19	-0.72266	1.99984	6.71658	0.00624	8.72266
O	20	-0.65330	1.99979	6.64968	0.00383	8.65330
H	21	0.22757	0.00000	0.76998	0.00245	0.77243
H	22	0.20033	0.00000	0.79672	0.00295	0.79967
H	23	0.20956	0.00000	0.78923	0.00121	0.79044
H	24	0.22107	0.00000	0.77528	0.00366	0.77893
H	25	0.20962	0.00000	0.78860	0.00178	0.79038
H	26	0.20443	0.00000	0.79310	0.00246	0.79557
H	27	0.20298	0.00000	0.79579	0.00123	0.79702
H	28	0.20880	0.00000	0.78850	0.00269	0.79120
H	29	0.20865	0.00000	0.79003	0.00132	0.79135
H	30	0.49754	0.00000	0.50129	0.00117	0.50246
H	31	0.22334	0.00000	0.77375	0.00291	0.77666
C	32	0.31251	1.99867	3.66979	0.01904	5.68749
C	33	-0.08378	1.99884	4.06779	0.01715	6.08378
C	34	-0.18629	1.99902	4.16831	0.01896	6.18629
C	35	-0.06154	1.99886	4.04373	0.01895	6.06154
C	36	-0.21584	1.99893	4.19601	0.02090	6.21584
C	37	0.14231	1.99878	3.83488	0.02402	5.85769
C	38	-0.25969	1.99907	4.24363	0.01699	6.25969
C	39	-0.17053	1.99909	4.15446	0.01697	6.17053
C	40	-0.27017	1.99906	4.25280	0.01831	6.27017
C	41	-0.19760	1.99907	4.18131	0.01722	6.19760
N	42	-0.43173	1.99936	5.40230	0.03008	7.43173
N	43	-0.14896	1.99924	5.12664	0.02308	7.14896
C	44	0.08992	1.99871	3.89183	0.01954	5.91008
C	45	-0.20943	1.99902	4.19640	0.01401	6.20943
C	46	0.31195	1.99867	3.66863	0.02076	5.68805
C	47	-0.18440	1.99908	4.17204	0.01328	6.18440
C	48	-0.22409	1.99899	4.21072	0.01438	6.22409
C	49	-0.20839	1.99908	4.19596	0.01334	6.20839
O	50	-0.64897	1.99979	6.64533	0.00384	8.64897
H	51	0.21973	0.00000	0.77772	0.00255	0.78027
H	52	0.20273	0.00000	0.79443	0.00284	0.79727
H	53	0.20437	0.00000	0.79387	0.00176	0.79563
H	54	0.21216	0.00000	0.78386	0.00399	0.78784
H	55	0.20450	0.00000	0.79370	0.00180	0.79550
H	56	0.22292	0.00000	0.77440	0.00269	0.77708
H	57	0.21616	0.00000	0.78266	0.00119	0.78384
H	58	0.22426	0.00000	0.77286	0.00288	0.77574
H	59	0.21350	0.00000	0.78517	0.00133	0.78650
H	60	0.49887	0.00000	0.49985	0.00127	0.50113
H	61	0.21166	0.00000	0.78425	0.00408	0.78834
O	62	-0.94009	1.99981	6.93369	0.00659	8.94009

H	63	0.50216	0.00000	0.49389	0.00395	0.49784
H	64	0.50612	0.00000	0.48934	0.00454	0.49388
O	65	-0.76144	1.99984	6.75617	0.00543	8.76144
H	66	0.50523	0.00000	0.49067	0.00410	0.49477
H	67	0.50059	0.00000	0.49554	0.00388	0.49941
O	68	-0.92844	1.99981	6.92157	0.00706	8.92844
Mn	69	1.51852	17.99029	5.47740	0.01379	23.48148
* Total *		0.00000	101.95204	216.25606	0.79190	319.00000

Table (S9): NBO data of the Mn(II) complex:

Donor NBO (i)	Acceptor NBO (j)	kcal/mol	a.u.	a.u.
within unit 1				
1. BD (1) C 1 - C 2	/190. RY*(2) C 3	0.61	1.94	0.043
1. BD (1) C 1 - C 2	/191. RY*(3) C 3	0.29	1.96	0.031
1. BD (1) C 1 - C 2	/197. RY*(1) C 4	0.68	2.20	0.049
1. BD (1) C 1 - C 2	/222. RY*(2) C 7	0.52	1.77	0.038
1. BD (1) C 1 - C 2	/584. BD*(1) C 1 - C 3	1.65	1.26	0.058
1. BD (1) C 1 - C 2	/586. BD*(1) C 2 - C 4	1.55	1.28	0.056
1. BD (1) C 1 - C 2	/587. BD*(1) C 2 - C 7	0.70	1.10	0.035
1. BD (1) C 1 - C 2	/590. BD*(1) C 3 - H 21	1.48	1.08	0.051
1. BD (1) C 1 - C 2	/593. BD*(1) C 4 - C 9	2.05	1.11	0.060
1. BD (1) C 1 - C 2	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.64	1.30	0.037
2. BD (2) C 1 - C 2	/189. RY*(1) C 3	1.71	0.77	0.049
2. BD (2) C 1 - C 2	/325. RY*(1) O 20	0.55	1.13	0.034
2. BD (2) C 1 - C 2	/583. BD*(2) C 1 - C 2	1.03	0.24	0.023
2. BD (2) C 1 - C 2	/589. BD*(2) C 3 - C 5	18.21	0.25	0.090
2. BD (2) C 1 - C 2	/592. BD*(2) C 4 - C 6	7.16	0.25	0.061
2. BD (2) C 1 - C 2	/598. BD*(2) C 7 - C 8	2.30	0.29	0.035
3. BD (1) C 1 - C 3	/182. RY*(2) C 2	0.81	2.21	0.054
3. BD (1) C 1 - C 3	/207. RY*(3) C 5	0.69	1.96	0.047
3. BD (1) C 1 - C 3	/582. BD*(1) C 1 - C 2	1.60	1.19	0.055
3. BD (1) C 1 - C 3	/585. BD*(1) C 1 - O 20	0.32	1.04	0.023
3. BD (1) C 1 - C 3	/587. BD*(1) C 2 - C 7	1.20	1.22	0.048
3. BD (1) C 1 - C 3	/588. BD*(1) C 3 - C 5	1.01	1.23	0.045
3. BD (1) C 1 - C 3	/590. BD*(1) C 3 - H 21	0.71	1.20	0.037
3. BD (1) C 1 - C 3	/595. BD*(1) C 5 - H 31	0.69	1.21	0.037
3. BD (1) C 1 - C 3	/620. BD*(1) O 20 - H 30	0.75	1.08	0.036
4. BD (1) C 1 - O 20	/173. RY*(1) C 1	0.25	1.87	0.028
4. BD (1) C 1 - O 20	/182. RY*(2) C 2	0.27	2.34	0.032
4. BD (1) C 1 - O 20	/190. RY*(2) C 3	0.30	2.19	0.032
4. BD (1) C 1 - O 20	/584. BD*(1) C 1 - C 3	0.41	1.51	0.032
4. BD (1) C 1 - O 20	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.57	1.53	0.037
4. BD (1) C 1 - O 20	/588. BD*(1) C 3 - C 5	1.08	1.37	0.049
5. BD (1) C 2 - C 4	/175. RY*(3) C 1	0.40	2.18	0.037
5. BD (1) C 2 - C 4	/214. RY*(2) C 6	0.40	1.89	0.035
5. BD (1) C 2 - C 4	/222. RY*(2) C 7	0.30	1.85	0.030
5. BD (1) C 2 - C 4	/238. RY*(2) C 9	0.30	1.82	0.030
5. BD (1) C 2 - C 4	/582. BD*(1) C 1 - C 2	1.52	1.15	0.053
5. BD (1) C 2 - C 4	/585. BD*(1) C 1 - O 20	1.32	1.00	0.046
5. BD (1) C 2 - C 4	/587. BD*(1) C 2 - C 7	1.92	1.18	0.060
5. BD (1) C 2 - C 4	/591. BD*(1) C 4 - C 6	1.88	1.18	0.060
5. BD (1) C 2 - C 4	/593. BD*(1) C 4 - C 9	1.88	1.20	0.060
5. BD (1) C 2 - C 4	/596. BD*(1) C 6 - N 11	1.33	1.10	0.049
5. BD (1) C 2 - C 4	/599. BD*(1) C 7 - H 22	0.75	1.18	0.038
5. BD (1) C 2 - C 4	/604. BD*(1) C 9 - H 24	0.67	1.19	0.036
6. BD (1) C 2 - C 7	/173. RY*(1) C 1	0.28	1.60	0.027
6. BD (1) C 2 - C 7	/175. RY*(3) C 1	0.34	2.08	0.034
6. BD (1) C 2 - C 7	/197. RY*(1) C 4	0.44	2.18	0.039
6. BD (1) C 2 - C 7	/229. RY*(1) C 8	0.34	1.82	0.032
6. BD (1) C 2 - C 7	/231. RY*(3) C 8	0.78	1.93	0.049
6. BD (1) C 2 - C 7	/582. BD*(1) C 1 - C 2	0.57	1.05	0.031
6. BD (1) C 2 - C 7	/584. BD*(1) C 1 - C 3	0.70	1.24	0.037
6. BD (1) C 2 - C 7	/586. BD*(1) C 2 - C 4	2.19	1.26	0.066
6. BD (1) C 2 - C 7	/591. BD*(1) C 4 - C 6	2.42	1.09	0.065
6. BD (1) C 2 - C 7	/597. BD*(1) C 7 - C 8	1.38	1.28	0.053
6. BD (1) C 2 - C 7	/599. BD*(1) C 7 - H 22	0.30	1.08	0.023
6. BD (1) C 2 - C 7	/601. BD*(1) C 8 - H 23	1.48	1.09	0.051
7. BD (1) C 3 - C 5	/173. RY*(1) C 1	0.48	1.62	0.035
7. BD (1) C 3 - C 5	/174. RY*(2) C 1	0.34	1.38	0.027
7. BD (1) C 3 - C 5	/175. RY*(3) C 1	0.31	2.09	0.032
7. BD (1) C 3 - C 5	/215. RY*(3) C 6	0.92	1.76	0.051
7. BD (1) C 3 - C 5	/584. BD*(1) C 1 - C 3	1.09	1.26	0.047
7. BD (1) C 3 - C 5	/585. BD*(1) C 1 - O 20	2.57	0.92	0.061
7. BD (1) C 3 - C 5	/590. BD*(1) C 3 - H 21	0.33	1.08	0.024

7. BD (1) C 3 - C 5	/594. BD*(1) C 5 - C 6		1.34	1.28	0.052
7. BD (1) C 3 - C 5	/595. BD*(1) C 5 - H 31		0.28	1.09	0.022
7. BD (1) C 3 - C 5	/596. BD*(1) C 6 - N 11		2.85	1.02	0.068
8. BD (2) C 3 - C 5	/174. RY*(2) C 1		0.36	0.99	0.025
8. BD (2) C 3 - C 5	/213. RY*(1) C 6		0.34	1.15	0.026
8. BD (2) C 3 - C 5	/583. BD*(2) C 1 - C 2		4.82	0.24	0.052
8. BD (2) C 3 - C 5	/592. BD*(2) C 4 - C 6		3.29	0.25	0.044
9. BD (1) C 3 - H 21	/175. RY*(3) C 1		0.46	1.96	0.038
9. BD (1) C 3 - H 21	/178. RY*(6) C 1		0.28	8.67	0.063
9. BD (1) C 3 - H 21	/206. RY*(2) C 5		0.52	1.77	0.039
9. BD (1) C 3 - H 21	/582. BD*(1) C 1 - C 2		2.95	0.94	0.067
9. BD (1) C 3 - H 21	/584. BD*(1) C 1 - C 3		0.47	1.13	0.029
9. BD (1) C 3 - H 21	/585. BD*(1) C 1 - O 20		0.89	0.79	0.033
9. BD (1) C 3 - H 21	/594. BD*(1) C 5 - C 6		1.47	1.15	0.052
9. BD (1) C 3 - H 21	/595. BD*(1) C 5 - H 31		0.27	0.96	0.020
10. BD (1) C 4 - C 6	/181. RY*(1) C 2		0.71	2.31	0.051
10. BD (1) C 4 - C 6	/206. RY*(2) C 5		0.53	1.90	0.040
10. BD (1) C 4 - C 6	/238. RY*(2) C 9		0.51	1.74	0.038
10. BD (1) C 4 - C 6	/254. RY*(2) N 11		0.25	2.05	0.029
10. BD (1) C 4 - C 6	/586. BD*(1) C 2 - C 4		1.85	1.28	0.061
10. BD (1) C 4 - C 6	/587. BD*(1) C 2 - C 7		1.96	1.10	0.058
10. BD (1) C 4 - C 6	/593. BD*(1) C 4 - C 9		0.90	1.11	0.040
10. BD (1) C 4 - C 6	/594. BD*(1) C 5 - C 6		1.76	1.28	0.060
10. BD (1) C 4 - C 6	/595. BD*(1) C 5 - H 31		1.59	1.09	0.053
10. BD (1) C 4 - C 6	/596. BD*(1) C 6 - N 11		0.30	1.02	0.022
10. BD (1) C 4 - C 6	/602. BD*(1) C 9 - C 10		0.66	1.31	0.037
11. BD (2) C 4 - C 6	/205. RY*(1) C 5		1.88	0.80	0.053
11. BD (2) C 4 - C 6	/583. BD*(2) C 1 - C 2		6.25	0.23	0.054
11. BD (2) C 4 - C 6	/589. BD*(2) C 3 - C 5		23.68	0.24	0.099
11. BD (2) C 4 - C 6	/592. BD*(2) C 4 - C 6		2.19	0.24	0.033
11. BD (2) C 4 - C 6	/603. BD*(2) C 9 - C 10		2.15	0.29	0.033
11. BD (2) C 4 - C 6	/606. BD*(1) N 11 - N 12		3.34	0.74	0.068
12. BD (1) C 4 - C 9	/181. RY*(1) C 2		0.35	2.29	0.036
12. BD (1) C 4 - C 9	/213. RY*(1) C 6		0.46	1.51	0.034
12. BD (1) C 4 - C 9	/214. RY*(2) C 6		0.65	1.79	0.043
12. BD (1) C 4 - C 9	/245. RY*(1) C 10		0.31	1.91	0.031
12. BD (1) C 4 - C 9	/247. RY*(3) C 10		0.79	1.94	0.050
12. BD (1) C 4 - C 9	/582. BD*(1) C 1 - C 2		2.35	1.05	0.063
12. BD (1) C 4 - C 9	/586. BD*(1) C 2 - C 4		2.18	1.26	0.066
12. BD (1) C 4 - C 9	/591. BD*(1) C 4 - C 6		0.90	1.08	0.040
12. BD (1) C 4 - C 9	/594. BD*(1) C 5 - C 6		0.96	1.26	0.044
12. BD (1) C 4 - C 9	/602. BD*(1) C 9 - C 10		1.39	1.29	0.054
12. BD (1) C 4 - C 9	/604. BD*(1) C 9 - H 24		0.34	1.09	0.024
12. BD (1) C 4 - C 9	/605. BD*(1) C 10 - H 25		1.58	1.08	0.052
13. BD (1) C 5 - C 6	/191. RY*(3) C 3		0.71	2.08	0.049
13. BD (1) C 5 - C 6	/198. RY*(2) C 4		0.79	2.30	0.054
13. BD (1) C 5 - C 6	/253. RY*(1) N 11		0.43	2.12	0.038
13. BD (1) C 5 - C 6	/588. BD*(1) C 3 - C 5		1.22	1.23	0.049
13. BD (1) C 5 - C 6	/590. BD*(1) C 3 - H 21		0.62	1.20	0.035
13. BD (1) C 5 - C 6	/591. BD*(1) C 4 - C 6		1.80	1.22	0.060
13. BD (1) C 5 - C 6	/593. BD*(1) C 4 - C 9		1.17	1.23	0.048
13. BD (1) C 5 - C 6	/595. BD*(1) C 5 - H 31		0.85	1.21	0.040
13. BD (1) C 5 - C 6	/596. BD*(1) C 6 - N 11		0.76	1.14	0.037
13. BD (1) C 5 - C 6	/606. BD*(1) N 11 - N 12		0.51	1.25	0.032
14. BD (1) C 5 - H 31	/190. RY*(2) C 3		0.50	1.80	0.038
14. BD (1) C 5 - H 31	/213. RY*(1) C 6		0.40	1.40	0.030
14. BD (1) C 5 - H 31	/214. RY*(2) C 6		0.73	1.68	0.044
14. BD (1) C 5 - H 31	/584. BD*(1) C 1 - C 3		1.37	1.13	0.050
14. BD (1) C 5 - H 31	/590. BD*(1) C 3 - H 21		0.26	0.95	0.020
14. BD (1) C 5 - H 31	/591. BD*(1) C 4 - C 6		3.18	0.97	0.070
14. BD (1) C 5 - H 31	/594. BD*(1) C 5 - C 6		0.72	1.15	0.036
14. BD (1) C 5 - H 31	/596. BD*(1) C 6 - N 11		0.66	0.89	0.031
15. BD (1) C 6 - N 11	/198. RY*(2) C 4		0.69	2.33	0.051
15. BD (1) C 6 - N 11	/206. RY*(2) C 5		0.61	2.04	0.045
15. BD (1) C 6 - N 11	/261. RY*(1) N 12		0.83	1.62	0.047
15. BD (1) C 6 - N 11	/262. RY*(2) N 12		0.25	1.58	0.025
15. BD (1) C 6 - N 11	/586. BD*(1) C 2 - C 4		0.77	1.42	0.042
15. BD (1) C 6 - N 11	/588. BD*(1) C 3 - C 5		1.32	1.25	0.051
15. BD (1) C 6 - N 11	/591. BD*(1) C 4 - C 6		0.51	1.24	0.032
15. BD (1) C 6 - N 11	/594. BD*(1) C 5 - C 6		0.93	1.42	0.046
15. BD (1) C 6 - N 11	/606. BD*(1) N 11 - N 12		0.46	1.28	0.031

15. BD (1) C 6 - N 11	/607. BD*(1) N 12 - C 13	2.78	1.15	0.072
16. BD (1) C 7 - C 8	/181. RY*(1) C 2	0.55	2.40	0.046
16. BD (1) C 7 - C 8	/182. RY*(2) C 2	0.42	2.18	0.038
16. BD (1) C 7 - C 8	/245. RY*(1) C 10	0.48	2.02	0.039
16. BD (1) C 7 - C 8	/247. RY*(3) C 10	0.39	2.06	0.036
16. BD (1) C 7 - C 8	/582. BD*(1) C 1 - C 2	1.37	1.16	0.051
16. BD (1) C 7 - C 8	/587. BD*(1) C 2 - C 7	1.47	1.19	0.053
16. BD (1) C 7 - C 8	/599. BD*(1) C 7 - H 22	0.86	1.18	0.040
16. BD (1) C 7 - C 8	/600. BD*(1) C 8 - C 10	1.20	1.22	0.048
16. BD (1) C 7 - C 8	/601. BD*(1) C 8 - H 23	0.76	1.19	0.038
16. BD (1) C 7 - C 8	/605. BD*(1) C 10 - H 25	0.79	1.19	0.039
17. BD (2) C 7 - C 8	/184. RY*(4) C 2	0.27	1.00	0.022
17. BD (2) C 7 - C 8	/246. RY*(2) C 10	0.44	0.81	0.025
17. BD (2) C 7 - C 8	/583. BD*(2) C 1 - C 2	10.43	0.25	0.076
17. BD (2) C 7 - C 8	/603. BD*(2) C 9 - C 10	5.03	0.31	0.055
18. BD (1) C 7 - H 22	/181. RY*(1) C 2	0.73	2.18	0.051
18. BD (1) C 7 - H 22	/229. RY*(1) C 8	0.70	1.71	0.044
18. BD (1) C 7 - H 22	/586. BD*(1) C 2 - C 4	1.62	1.15	0.054
18. BD (1) C 7 - H 22	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.69	1.17	0.036
18. BD (1) C 7 - H 22	/600. BD*(1) C 8 - C 10	2.75	1.00	0.066
18. BD (1) C 7 - H 22	/601. BD*(1) C 8 - H 23	0.47	0.97	0.027
19. BD (1) C 8 - C 10	/223. RY*(3) C 7	0.87	1.77	0.050
19. BD (1) C 8 - C 10	/239. RY*(3) C 9	0.91	1.71	0.050
19. BD (1) C 8 - C 10	/597. BD*(1) C 7 - C 8	1.32	1.28	0.052
19. BD (1) C 8 - C 10	/599. BD*(1) C 7 - H 22	1.61	1.08	0.053
19. BD (1) C 8 - C 10	/601. BD*(1) C 8 - H 23	0.30	1.09	0.023
19. BD (1) C 8 - C 10	/602. BD*(1) C 9 - C 10	1.36	1.29	0.053
19. BD (1) C 8 - C 10	/604. BD*(1) C 9 - H 24	1.65	1.09	0.054
19. BD (1) C 8 - C 10	/605. BD*(1) C 10 - H 25	0.30	1.09	0.023
20. BD (1) C 8 - H 23	/222. RY*(2) C 7	0.70	1.63	0.043
20. BD (1) C 8 - H 23	/245. RY*(1) C 10	0.68	1.79	0.044
20. BD (1) C 8 - H 23	/587. BD*(1) C 2 - C 7	3.15	0.95	0.069
20. BD (1) C 8 - H 23	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.64	1.16	0.034
20. BD (1) C 8 - H 23	/599. BD*(1) C 7 - H 22	0.53	0.95	0.028
20. BD (1) C 8 - H 23	/602. BD*(1) C 9 - C 10	1.41	1.17	0.051
21. BD (1) C 9 - C 10	/197. RY*(1) C 4	0.74	2.29	0.052
21. BD (1) C 9 - C 10	/198. RY*(2) C 4	0.35	2.28	0.036
21. BD (1) C 9 - C 10	/229. RY*(1) C 8	0.43	1.93	0.036
21. BD (1) C 9 - C 10	/231. RY*(3) C 8	0.42	2.03	0.037
21. BD (1) C 9 - C 10	/591. BD*(1) C 4 - C 6	1.29	1.19	0.050
21. BD (1) C 9 - C 10	/593. BD*(1) C 4 - C 9	1.43	1.20	0.052
21. BD (1) C 9 - C 10	/600. BD*(1) C 8 - C 10	1.25	1.22	0.049
21. BD (1) C 9 - C 10	/601. BD*(1) C 8 - H 23	0.78	1.19	0.039
21. BD (1) C 9 - C 10	/604. BD*(1) C 9 - H 24	0.83	1.20	0.040
21. BD (1) C 9 - C 10	/605. BD*(1) C 10 - H 25	0.80	1.19	0.039
22. BD (2) C 9 - C 10	/199. RY*(3) C 4	0.29	0.89	0.021
22. BD (2) C 9 - C 10	/230. RY*(2) C 8	0.43	0.77	0.024
22. BD (2) C 9 - C 10	/592. BD*(2) C 4 - C 6	10.77	0.25	0.078
22. BD (2) C 9 - C 10	/598. BD*(2) C 7 - C 8	6.07	0.29	0.059
23. BD (1) C 9 - H 24	/197. RY*(1) C 4	0.72	2.05	0.049
23. BD (1) C 9 - H 24	/245. RY*(1) C 10	0.63	1.78	0.043
23. BD (1) C 9 - H 24	/586. BD*(1) C 2 - C 4	1.76	1.13	0.056
23. BD (1) C 9 - H 24	/600. BD*(1) C 8 - C 10	2.80	0.98	0.066
23. BD (1) C 9 - H 24	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.73	1.16	0.037
23. BD (1) C 9 - H 24	/605. BD*(1) C 10 - H 25	0.49	0.95	0.027
24. BD (1) C 10 - H 25	/229. RY*(1) C 8	0.53	1.69	0.038
24. BD (1) C 10 - H 25	/238. RY*(2) C 9	0.59	1.59	0.039
24. BD (1) C 10 - H 25	/593. BD*(1) C 4 - C 9	3.05	0.97	0.069
24. BD (1) C 10 - H 25	/597. BD*(1) C 7 - C 8	1.36	1.15	0.050
24. BD (1) C 10 - H 25	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.71	1.16	0.036
24. BD (1) C 10 - H 25	/604. BD*(1) C 9 - H 24	0.48	0.96	0.027
25. BD (1) N 11 - N 12	/213. RY*(1) C 6	0.96	1.87	0.054
25. BD (1) N 11 - N 12	/269. RY*(1) C 13	0.85	2.09	0.053
25. BD (1) N 11 - N 12	/270. RY*(2) C 13	0.63	2.42	0.050
25. BD (1) N 11 - N 12	/594. BD*(1) C 5 - C 6	0.28	1.62	0.027
25. BD (1) N 11 - N 12	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.49	1.36	0.033
25. BD (1) N 11 - N 12	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.40	1.35	0.029
25. BD (1) N 11 - N 12	/608. BD*(1) C 13 - C 14	0.55	1.44	0.036
26. BD (1) N 12 - C 13	/213. RY*(1) C 6	0.31	1.68	0.029
26. BD (1) N 12 - C 13	/253. RY*(1) N 11	0.47	2.15	0.040
26. BD (1) N 12 - C 13	/254. RY*(2) N 11	0.53	2.20	0.043

26. BD (1) N 12 - C 13	/255. RY*(3) N 11	0.54	2.06	0.042
26. BD (1) N 12 - C 13	/256. RY*(4) N 11	0.27	2.33	0.032
26. BD (1) N 12 - C 13	/278. RY*(2) C 14	0.39	2.10	0.036
26. BD (1) N 12 - C 13	/285. RY*(1) C 15	0.46	1.96	0.038
26. BD (1) N 12 - C 13	/596. BD*(1) C 6 - N 11	2.41	1.17	0.067
26. BD (1) N 12 - C 13	/608. BD*(1) C 13 - C 14	0.32	1.24	0.025
26. BD (1) N 12 - C 13	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.99	1.39	0.047
26. BD (1) N 12 - C 13	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.42	1.44	0.031
26. BD (1) N 12 - C 13	/613. BD*(1) C 15 - C 17	1.19	1.24	0.049
27. BD (1) C 13 - C 14	/261. RY*(1) N 12	0.38	1.47	0.030
27. BD (1) C 13 - C 14	/287. RY*(3) C 15	0.29	1.96	0.030
27. BD (1) C 13 - C 14	/288. RY*(4) C 15	0.33	1.68	0.030
27. BD (1) C 13 - C 14	/294. RY*(2) C 16	0.38	1.85	0.034
27. BD (1) C 13 - C 14	/295. RY*(3) C 16	0.70	1.99	0.048
27. BD (1) C 13 - C 14	/606. BD*(1) N 11 - N 12	1.68	1.13	0.055
27. BD (1) C 13 - C 14	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.42	1.00	0.026
27. BD (1) C 13 - C 14	/609. BD*(1) C 13 - C 15	1.88	1.24	0.061
27. BD (1) C 13 - C 14	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.99	1.29	0.045
27. BD (1) C 13 - C 14	/612. BD*(1) C 14 - H 26	0.25	1.09	0.021
27. BD (1) C 13 - C 14	/614. BD*(1) C 15 - O 19	2.73	0.96	0.065
27. BD (1) C 13 - C 14	/616. BD*(1) C 16 - H 27	1.45	1.09	0.051
28. BD (1) C 13 - C 15	/263. RY*(3) N 12	0.34	1.87	0.032
28. BD (1) C 13 - C 15	/278. RY*(2) C 14	0.44	2.07	0.038
28. BD (1) C 13 - C 15	/302. RY*(2) C 17	0.68	2.09	0.048
28. BD (1) C 13 - C 15	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.70	1.12	0.035
28. BD (1) C 13 - C 15	/608. BD*(1) C 13 - C 14	1.85	1.21	0.060
28. BD (1) C 13 - C 15	/612. BD*(1) C 14 - H 26	0.57	1.20	0.033
28. BD (1) C 13 - C 15	/613. BD*(1) C 15 - C 17	1.42	1.21	0.053
28. BD (1) C 13 - C 15	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.37	1.08	0.025
28. BD (1) C 13 - C 15	/618. BD*(1) C 17 - H 28	0.57	1.21	0.033
29. BD (2) C 13 - C 15	/ 34. BD*(1) C 16 - C 17	0.40	0.13	0.053
29. BD (2) C 13 - C 15	/262. RY*(2) N 12	0.41	1.09	0.027
29. BD (2) C 13 - C 15	/277. RY (1) C 14	0.79	0.80	0.032
29. BD (2) C 13 - C 15	/301. RY (1) C 17	1.12	0.81	0.038
29. BD (2) C 13 - C 15	/318. RY*(2) O 19	0.39	1.40	0.030
29. BD (2) C 13 - C 15	/610. BD*(2) C 13 - C 15	0.30	0.33	0.014
30. BD (1) C 14 - C 16	/270. RY*(2) C 13	1.01	2.18	0.059
30. BD (1) C 14 - C 16	/309. RY*(1) C 18	0.55	1.94	0.041
30. BD (1) C 14 - C 16	/311. RY*(3) C 18	0.43	2.05	0.038
30. BD (1) C 14 - C 16	/607. BD*(1) N 12 - C 13	1.38	1.11	0.050
30. BD (1) C 14 - C 16	/608. BD*(1) C 13 - C 14	0.95	1.20	0.043
30. BD (1) C 14 - C 16	/612. BD*(1) C 14 - H 26	0.71	1.19	0.037
30. BD (1) C 14 - C 16	/615. BD*(1) C 16 - C 18	0.93	1.22	0.043
30. BD (1) C 14 - C 16	/616. BD*(1) C 16 - H 27	0.58	1.20	0.033
30. BD (1) C 14 - C 16	/619. BD*(1) C 18 - H 29	0.86	1.21	0.041
31. BD (1) C 14 - H 26	/269. RY*(1) C 13	0.35	1.61	0.030
31. BD (1) C 14 - H 26	/294. RY*(2) C 16	0.62	1.71	0.041
31. BD (1) C 14 - H 26	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.36	0.86	0.022
31. BD (1) C 14 - H 26	/609. BD*(1) C 13 - C 15	1.71	1.10	0.055
31. BD (1) C 14 - H 26	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.54	1.15	0.032
31. BD (1) C 14 - H 26	/615. BD*(1) C 16 - C 18	2.73	0.97	0.065
31. BD (1) C 14 - H 26	/616. BD*(1) C 16 - H 27	0.51	0.95	0.028
32. BD (1) C 15 - C 17	/269. RY*(1) C 13	0.59	1.75	0.041
32. BD (1) C 15 - C 17	/271. RY*(3) C 13	0.30	1.46	0.027
32. BD (1) C 15 - C 17	/309. RY*(1) C 18	0.34	1.84	0.032
32. BD (1) C 15 - C 17	/311. RY*(3) C 18	0.79	1.94	0.050
32. BD (1) C 15 - C 17	/607. BD*(1) N 12 - C 13	2.85	1.01	0.068
32. BD (1) C 15 - C 17	/609. BD*(1) C 13 - C 15	1.68	1.24	0.058
32. BD (1) C 15 - C 17	/617. BD*(1) C 17 - C 18	1.08	1.30	0.047
32. BD (1) C 15 - C 17	/619. BD*(1) C 18 - H 29	1.62	1.10	0.054
33. BD (1) C 15 - O 19	/285. RY*(1) C 15	0.55	2.01	0.042
33. BD (1) C 15 - O 19	/608. BD*(1) C 13 - C 14	1.26	1.29	0.051
33. BD (1) C 15 - O 19	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.63	1.44	0.038
33. BD (1) C 15 - O 19	/617. BD*(1) C 17 - C 18	0.50	1.50	0.035
34. BD*(1) C 16 - C 17	/277. RY (1) C 14	1.47	0.67	0.040
34. BD*(1) C 16 - C 17	/286. RY*(2) C 15	0.28	0.93	0.020
34. BD*(1) C 16 - C 17	/610. BD*(2) C 13 - C 15	6.55	0.20	0.051
34. BD*(1) C 16 - C 17	/615. BD*(1) C 16 - C 18	0.42	0.65	0.021
35. BD (1) C 16 - C 17	/277. RY (1) C 14	0.83	0.63	0.039
35. BD (1) C 16 - C 17	/310. RY*(2) C 18	1.61	0.64	0.056
35. BD (1) C 16 - C 17	/610. BD*(2) C 13 - C 15	9.86	0.16	0.058

36. BD (1) C 16 - C 18	/279. RY*(3) C 14	0.88	1.89	0.052
36. BD (1) C 16 - C 18	/303. RY*(3) C 17	0.88	1.86	0.051
36. BD (1) C 16 - C 18	/611. BD*(1) C 14 - C 16	1.00	1.28	0.045
36. BD (1) C 16 - C 18	/612. BD*(1) C 14 - H 26	1.65	1.08	0.053
36. BD (1) C 16 - C 18	/617. BD*(1) C 17 - C 18	1.17	1.29	0.049
36. BD (1) C 16 - C 18	/618. BD*(1) C 17 - H 28	1.56	1.08	0.052
36. BD (1) C 16 - C 18	/619. BD*(1) C 18 - H 29	0.29	1.09	0.023
37. BD (1) C 16 - H 27	/278. RY*(2) C 14	0.78	1.82	0.048
37. BD (1) C 16 - H 27	/309. RY*(1) C 18	0.66	1.70	0.043
37. BD (1) C 16 - H 27	/608. BD*(1) C 13 - C 14	3.03	0.96	0.068
37. BD (1) C 16 - H 27	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.46	1.16	0.029
37. BD (1) C 16 - H 27	/612. BD*(1) C 14 - H 26	0.53	0.95	0.028
37. BD (1) C 16 - H 27	/617. BD*(1) C 17 - C 18	1.45	1.17	0.052
38. BD (1) C 17 - C 18	/285. RY*(1) C 15	0.51	1.91	0.040
38. BD (1) C 17 - C 18	/287. RY*(3) C 15	0.57	2.06	0.043
38. BD (1) C 17 - C 18	/294. RY*(2) C 16	0.51	1.95	0.040
38. BD (1) C 17 - C 18	/295. RY*(3) C 16	0.38	2.09	0.036
38. BD (1) C 17 - C 18	/613. BD*(1) C 15 - C 17	0.80	1.19	0.039
38. BD (1) C 17 - C 18	/614. BD*(1) C 15 - O 19	1.19	1.06	0.045
38. BD (1) C 17 - C 18	/615. BD*(1) C 16 - C 18	1.08	1.21	0.046
38. BD (1) C 17 - C 18	/616. BD*(1) C 16 - H 27	0.76	1.19	0.038
38. BD (1) C 17 - C 18	/618. BD*(1) C 17 - H 28	0.77	1.19	0.038
38. BD (1) C 17 - C 18	/619. BD*(1) C 18 - H 29	0.75	1.20	0.038
39. BD (1) C 17 - H 28	/285. RY*(1) C 15	0.39	1.67	0.032
39. BD (1) C 17 - H 28	/309. RY*(1) C 18	0.67	1.70	0.043
39. BD (1) C 17 - H 28	/609. BD*(1) C 13 - C 15	1.64	1.10	0.054
39. BD (1) C 17 - H 28	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.54	0.83	0.027
39. BD (1) C 17 - H 28	/615. BD*(1) C 16 - C 18	2.90	0.97	0.067
39. BD (1) C 17 - H 28	/617. BD*(1) C 17 - C 18	0.63	1.16	0.034
39. BD (1) C 17 - H 28	/619. BD*(1) C 18 - H 29	0.51	0.96	0.028
40. BD (1) C 18 - H 29	/294. RY*(2) C 16	0.61	1.72	0.041
40. BD (1) C 18 - H 29	/302. RY*(2) C 17	0.77	1.84	0.048
40. BD (1) C 18 - H 29	/611. BD*(1) C 14 - C 16	1.31	1.15	0.049
40. BD (1) C 18 - H 29	/613. BD*(1) C 15 - C 17	2.80	0.95	0.066
40. BD (1) C 18 - H 29	/617. BD*(1) C 17 - C 18	0.64	1.16	0.034
40. BD (1) C 18 - H 29	/618. BD*(1) C 17 - H 28	0.46	0.95	0.026
41. BD (1) O 20 - H 30	/173. RY*(1) C 1	1.02	1.70	0.053
41. BD (1) O 20 - H 30	/174. RY*(2) C 1	0.45	1.46	0.032
41. BD (1) O 20 - H 30	/584. BD*(1) C 1 - C 3	1.60	1.34	0.059
89. CR (1) C 1	/181. RY*(1) C 2	0.62	11.78	0.108
89. CR (1) C 1	/191. RY*(3) C 3	1.17	11.44	0.146
89. CR (1) C 1	/584. BD*(1) C 1 - C 3	1.00	10.73	0.131
89. CR (1) C 1	/585. BD*(1) C 1 - O 20	0.66	10.39	0.105
89. CR (1) C 1	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.30	10.75	0.072
89. CR (1) C 1	/587. BD*(1) C 2 - C 7	0.33	10.57	0.075
89. CR (1) C 1	/588. BD*(1) C 3 - C 5	0.45	10.59	0.088
90. CR (1) C 2	/173. RY*(1) C 1	0.31	11.03	0.074
90. CR (1) C 2	/197. RY*(1) C 4	0.28	11.61	0.072
90. CR (1) C 2	/198. RY*(2) C 4	1.12	11.60	0.144
90. CR (1) C 2	/223. RY*(3) C 7	0.50	11.20	0.094
90. CR (1) C 2	/584. BD*(1) C 1 - C 3	0.29	10.67	0.070
90. CR (1) C 2	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.66	10.69	0.106
90. CR (1) C 2	/591. BD*(1) C 4 - C 6	0.59	10.52	0.101
90. CR (1) C 2	/593. BD*(1) C 4 - C 9	0.53	10.53	0.095
90. CR (1) C 2	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.27	10.71	0.068
91. CR (1) C 3	/175. RY*(3) C 1	1.45	11.49	0.163
91. CR (1) C 3	/208. RY*(4) C 5	0.41	11.10	0.085
91. CR (1) C 3	/334. RY*(2) H 21	0.30	12.29	0.076
91. CR (1) C 3	/582. BD*(1) C 1 - C 2	0.61	10.47	0.102
91. CR (1) C 3	/584. BD*(1) C 1 - C 3	0.29	10.66	0.070
91. CR (1) C 3	/585. BD*(1) C 1 - O 20	0.37	10.32	0.078
91. CR (1) C 3	/594. BD*(1) C 5 - C 6	0.34	10.68	0.077
92. CR (1) C 4	/182. RY*(2) C 2	1.18	11.49	0.147
92. CR (1) C 4	/215. RY*(3) C 6	0.77	11.17	0.117
92. CR (1) C 4	/239. RY*(3) C 9	0.56	11.13	0.100
92. CR (1) C 4	/582. BD*(1) C 1 - C 2	0.57	10.47	0.099
92. CR (1) C 4	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.57	10.68	0.099
92. CR (1) C 4	/587. BD*(1) C 2 - C 7	0.51	10.50	0.093
92. CR (1) C 4	/594. BD*(1) C 5 - C 6	0.34	10.69	0.077
92. CR (1) C 4	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.26	10.42	0.066
92. CR (1) C 4	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.29	10.71	0.070

93. CR (1) C 5	/214. RY*(2) C 6	0.46	11.20	0.090
93. CR (1) C 5	/215. RY*(3) C 6	0.76	11.16	0.116
93. CR (1) C 5	/216. RY*(4) C 6	0.54	11.09	0.098
93. CR (1) C 5	/584. BD*(1) C 1 - C 3	0.33	10.65	0.075
93. CR (1) C 5	/591. BD*(1) C 4 - C 6	0.64	10.49	0.105
93. CR (1) C 5	/594. BD*(1) C 5 - C 6	0.42	10.67	0.085
93. CR (1) C 5	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.44	10.41	0.086
94. CR (1) C 6	/197. RY*(1) C 4	0.66	11.64	0.111
94. CR (1) C 6	/207. RY*(3) C 5	1.25	11.28	0.150
94. CR (1) C 6	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.36	10.72	0.079
94. CR (1) C 6	/588. BD*(1) C 3 - C 5	0.48	10.55	0.090
94. CR (1) C 6	/593. BD*(1) C 4 - C 9	0.33	10.55	0.075
94. CR (1) C 6	/594. BD*(1) C 5 - C 6	0.77	10.72	0.116
94. CR (1) C 6	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.39	10.58	0.082
95. CR (1) C 7	/181. RY*(1) C 2	0.25	11.69	0.068
95. CR (1) C 7	/182. RY*(2) C 2	0.34	11.47	0.079
95. CR (1) C 7	/231. RY*(3) C 8	1.14	11.33	0.144
95. CR (1) C 7	/336. RY*(2) H 22	0.27	12.26	0.073
95. CR (1) C 7	/582. BD*(1) C 1 - C 2	0.35	10.45	0.077
95. CR (1) C 7	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.37	10.66	0.080
95. CR (1) C 7	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.45	10.68	0.088
95. CR (1) C 7	/600. BD*(1) C 8 - C 10	0.52	10.51	0.094
96. CR (1) C 8	/222. RY*(2) C 7	0.27	11.15	0.070
96. CR (1) C 8	/223. RY*(3) C 7	0.64	11.16	0.106
96. CR (1) C 8	/224. RY*(4) C 7	0.42	11.07	0.086
96. CR (1) C 8	/247. RY*(3) C 10	0.45	11.34	0.090
96. CR (1) C 8	/338. RY*(2) H 23	0.31	11.94	0.076
96. CR (1) C 8	/587. BD*(1) C 2 - C 7	0.61	10.48	0.102
96. CR (1) C 8	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.38	10.68	0.080
96. CR (1) C 8	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.32	10.69	0.074
97. CR (1) C 9	/198. RY*(2) C 4	0.45	11.56	0.091
97. CR (1) C 9	/247. RY*(3) C 10	1.07	11.34	0.139
97. CR (1) C 9	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.43	10.65	0.086
97. CR (1) C 9	/591. BD*(1) C 4 - C 6	0.35	10.48	0.077
97. CR (1) C 9	/600. BD*(1) C 8 - C 10	0.54	10.50	0.095
97. CR (1) C 9	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.45	10.68	0.088
98. CR (1) C 10	/231. RY*(3) C 8	0.42	11.32	0.088
98. CR (1) C 10	/238. RY*(2) C 9	0.25	11.11	0.067
98. CR (1) C 10	/239. RY*(3) C 9	0.56	11.10	0.100
98. CR (1) C 10	/240. RY*(4) C 9	0.58	11.14	0.102
98. CR (1) C 10	/342. RY*(2) H 25	0.33	12.33	0.081
98. CR (1) C 10	/593. BD*(1) C 4 - C 9	0.60	10.49	0.100
98. CR (1) C 10	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.32	10.67	0.074
98. CR (1) C 10	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.41	10.69	0.083
99. CR (1) N 11	/213. RY*(1) C 6	0.43	15.09	0.103
99. CR (1) N 11	/214. RY*(2) C 6	0.68	15.36	0.130
99. CR (1) N 11	/263. RY*(3) N 12	0.88	15.31	0.146
99. CR (1) N 11	/591. BD*(1) C 4 - C 6	0.27	14.66	0.080
99. CR (1) N 11	/594. BD*(1) C 5 - C 6	0.27	14.84	0.080
99. CR (1) N 11	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.71	14.56	0.130
100. CR (1) N 12	/255. RY*(3) N 11	0.99	15.51	0.157
100. CR (1) N 12	/269. RY*(1) C 13	0.60	15.35	0.121
100. CR (1) N 12	/270. RY*(2) C 13	0.43	15.68	0.104
100. CR (1) N 12	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.62	14.62	0.122
100. CR (1) N 12	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.36	14.84	0.094
101. CR (1) C 13	/279. RY*(3) C 14	0.44	11.36	0.090
101. CR (1) C 13	/285. RY*(1) C 15	0.52	11.26	0.097
101. CR (1) C 13	/287. RY*(3) C 15	0.99	11.41	0.134
101. CR (1) C 13	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.49	10.59	0.092
101. CR (1) C 13	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.58	10.70	0.101
101. CR (1) C 13	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.25	10.75	0.066
101. CR (1) C 13	/613. BD*(1) C 15 - C 17	0.47	10.55	0.090
101. CR (1) C 13	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.44	10.42	0.086
102. CR (1) C 14	/269. RY*(1) C 13	0.39	11.12	0.083
102. CR (1) C 14	/271. RY*(3) C 13	0.34	10.83	0.076
102. CR (1) C 14	/295. RY*(3) C 16	1.02	11.37	0.136
102. CR (1) C 14	/344. RY*(2) H 26	0.29	12.29	0.076
102. CR (1) C 14	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.26	10.38	0.066
102. CR (1) C 14	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.40	10.62	0.083
102. CR (1) C 14	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.42	10.67	0.085
102. CR (1) C 14	/615. BD*(1) C 16 - C 18	0.47	10.49	0.089

103. CR (1) C 15	/270. RY*(2) C 13	1.47	11.54	0.164
103. CR (1) C 15	/303. RY*(3) C 17	0.50	11.33	0.095
103. CR (1) C 15	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.50	10.46	0.092
103. CR (1) C 15	/608. BD*(1) C 13 - C 14	0.50	10.55	0.092
103. CR (1) C 15	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.77	10.70	0.116
103. CR (1) C 15	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.45	10.43	0.087
103. CR (1) C 15	/617. BD*(1) C 17 - C 18	0.28	10.76	0.069
104. CR (1) C 16	/278. RY*(2) C 14	0.31	11.34	0.075
104. CR (1) C 16	/279. RY*(3) C 14	0.75	11.29	0.116
104. CR (1) C 16	/280. RY*(4) C 14	0.28	10.94	0.070
104. CR (1) C 16	/311. RY*(3) C 18	0.50	11.33	0.095
104. CR (1) C 16	/346. RY*(2) H 27	0.31	11.97	0.077
104. CR (1) C 16	/608. BD*(1) C 13 - C 14	0.51	10.48	0.093
104. CR (1) C 16	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.34	10.68	0.077
104. CR (1) C 16	/617. BD*(1) C 17 - C 18	0.30	10.69	0.072
105. CR (1) C 17	/287. RY*(3) C 15	0.36	11.33	0.080
105. CR (1) C 17	/288. RY*(4) C 15	0.51	11.06	0.095
105. CR (1) C 17	/311. RY*(3) C 18	1.07	11.32	0.139
105. CR (1) C 17	/348. RY*(2) H 28	0.29	12.30	0.076
105. CR (1) C 17	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.42	10.62	0.085
105. CR (1) C 17	/615. BD*(1) C 16 - C 18	0.51	10.49	0.093
105. CR (1) C 17	/617. BD*(1) C 17 - C 18	0.47	10.68	0.089
106. CR (1) C 18	/295. RY*(3) C 16	0.42	11.38	0.088
106. CR (1) C 18	/302. RY*(2) C 17	0.43	11.36	0.089
106. CR (1) C 18	/303. RY*(3) C 17	0.67	11.26	0.110
106. CR (1) C 18	/350. RY*(2) H 29	0.32	11.98	0.078
106. CR (1) C 18	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.28	10.68	0.070
106. CR (1) C 18	/613. BD*(1) C 15 - C 17	0.49	10.48	0.091
106. CR (1) C 18	/617. BD*(1) C 17 - C 18	0.35	10.69	0.077
107. CR (1) O 19	/285. RY*(1) C 15	1.41	20.07	0.213
107. CR (1) O 19	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.30	19.50	0.097
108. CR (1) O 20	/173. RY*(1) C 1	0.85	19.94	0.165
108. CR (1) O 20	/352. RY*(2) H 30	0.30	20.86	0.100
140. LP (1) N 11	/261. RY*(1) N 12	0.75	1.15	0.038
140. LP (1) N 11	/262. RY*(2) N 12	0.68	1.11	0.035
140. LP (1) N 11	/591. BD*(1) C 4 - C 6	2.21	0.77	0.053
140. LP (1) N 11	/592. BD*(2) C 4 - C 6	0.68	0.31	0.022
140. LP (1) N 11	/594. BD*(1) C 5 - C 6	3.01	0.95	0.069
141. LP (2) N 11	/213. RY*(1) C 6	0.72	1.33	0.040
141. LP (2) N 11	/253. RY*(1) N 11	1.17	1.80	0.059
141. LP (2) N 11	/254. RY*(2) N 11	0.87	1.85	0.052
141. LP (2) N 11	/255. RY*(3) N 11	0.47	1.72	0.037
141. LP (2) N 11	/262. RY*(2) N 12	0.52	1.23	0.033
141. LP (2) N 11	/317. RY*(1) O 19	0.52	2.82	0.049
141. LP (2) N 11	/591. BD*(1) C 4 - C 6	2.22	0.90	0.057
141. LP (2) N 11	/592. BD*(2) C 4 - C 6	0.93	0.44	0.031
142. LP (1) N 12	/254. RY*(2) N 11	0.46	1.85	0.037
142. LP (1) N 12	/255. RY*(3) N 11	0.31	1.71	0.029
142. LP (1) N 12	/269. RY*(1) C 13	0.88	1.54	0.047
142. LP (1) N 12	/608. BD*(1) C 13 - C 14	0.56	0.89	0.028
142. LP (1) N 12	/609. BD*(1) C 13 - C 15	3.64	1.04	0.078
143. LP (2) N 12	/253. RY*(1) N 11	0.76	1.65	0.047
143. LP (2) N 12	/271. RY*(3) C 13	0.30	1.11	0.024
143. LP (2) N 12	/610. BD*(2) C 13 - C 15	15.99	0.32	0.097
144. LP (1) C 14	/293. RY*(1) C 16	2.99	0.66	0.060
144. LP (1) C 14	/610. BD*(2) C 13 - C 15	26.11	0.19	0.093
145. LP (1) C 18	/293. RY*(1) C 16	1.05	0.60	0.043
145. LP (1) C 18	/301. RY (1) C 17	2.06	0.61	0.062
145. LP (1) C 18	/310. RY*(2) C 18	1.28	0.62	0.049
145. LP (1) C 18	/610. BD*(2) C 13 - C 15	0.25	0.13	0.009
145. LP (1) C 18	/615. BD*(1) C 16 - C 18	0.73	0.58	0.036
146. LP (1) O 19	/285. RY*(1) C 15	1.13	1.72	0.056
146. LP (1) O 19	/609. BD*(1) C 13 - C 15	3.53	1.15	0.081
147. LP (2) O 19	/285. RY*(1) C 15	0.50	1.61	0.036
147. LP (2) O 19	/317. RY*(1) O 19	0.55	2.82	0.051
147. LP (2) O 19	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.27	1.04	0.021
147. LP (2) O 19	/610. BD*(2) C 13 - C 15	1.48	0.47	0.037
147. LP (2) O 19	/613. BD*(1) C 15 - C 17	3.17	0.89	0.068
148. LP (3) O 19	/285. RY*(1) C 15	0.27	1.54	0.026
148. LP (3) O 19	/317. RY*(1) O 19	0.50	2.75	0.048
148. LP (3) O 19	/610. BD*(2) C 13 - C 15	6.86	0.40	0.073

148. LP (3) O 19	/613. BD*(1) C 15 - C 17	0.81	0.82	0.033
149. LP (1) O 20	/173. RY*(1) C 1	1.04	1.58	0.051
149. LP (1) O 20	/174. RY*(2) C 1	0.33	1.34	0.027
149. LP (1) O 20	/582. BD*(1) C 1 - C 2	3.15	1.03	0.072
150. LP (2) O 20	/583. BD*(2) C 1 - C 2	4.52	0.32	0.060
583. BD*(2) C 1 - C 2	/174. RY*(2) C 1	0.39	0.75	0.036
583. BD*(2) C 1 - C 2	/183. RY*(3) C 2	0.30	0.95	0.035
583. BD*(2) C 1 - C 2	/184. RY*(4) C 2	1.26	0.75	0.064
583. BD*(2) C 1 - C 2	/189. RY*(1) C 3	0.44	0.53	0.031
583. BD*(2) C 1 - C 2	/199. RY*(3) C 4	0.41	0.64	0.034
583. BD*(2) C 1 - C 2	/221. RY*(1) C 7	0.39	0.61	0.032
583. BD*(2) C 1 - C 2	/592. BD*(2) C 4 - C 6	720.14	0.01	0.129
583. BD*(2) C 1 - C 2	/598. BD*(2) C 7 - C 8	47.20	0.05	0.077
583. BD*(2) C 1 - C 2	/603. BD*(2) C 9 - C 10	0.26	0.06	0.006
589. BD*(2) C 3 - C 5	/189. RY*(1) C 3	0.81	0.52	0.052
589. BD*(2) C 3 - C 5	/205. RY*(1) C 5	0.78	0.56	0.053
592. BD*(2) C 4 - C 6	/184. RY*(4) C 2	0.46	0.74	0.038
592. BD*(2) C 4 - C 6	/199. RY*(3) C 4	3.31	0.63	0.094
592. BD*(2) C 4 - C 6	/205. RY*(1) C 5	0.45	0.56	0.032
592. BD*(2) C 4 - C 6	/213. RY*(1) C 6	0.37	0.90	0.037
592. BD*(2) C 4 - C 6	/237. RY*(1) C 9	0.44	0.74	0.037
592. BD*(2) C 4 - C 6	/598. BD*(2) C 7 - C 8	0.32	0.04	0.006
592. BD*(2) C 4 - C 6	/603. BD*(2) C 9 - C 10	58.19	0.05	0.083
592. BD*(2) C 4 - C 6	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.86	0.50	0.042
598. BD*(2) C 7 - C 8	/221. RY*(1) C 7	1.39	0.56	0.067
598. BD*(2) C 7 - C 8	/230. RY*(2) C 8	2.38	0.48	0.081
603. BD*(2) C 9 - C 10	/237. RY*(1) C 9	1.14	0.70	0.068
603. BD*(2) C 9 - C 10	/246. RY*(2) C 10	2.18	0.51	0.080
610. BD*(2) C 13 - C 15	/272. RY*(4) C 13	0.65	0.68	0.058
610. BD*(2) C 13 - C 15	/277. RY (1) C 14	0.37	0.47	0.035
610. BD*(2) C 13 - C 15	/287. RY*(3) C 15	0.38	1.29	0.060
610. BD*(2) C 13 - C 15	/301. RY (1) C 17	0.27	0.48	0.031
610. BD*(2) C 13 - C 15	/609. BD*(1) C 13 - C 15	1.58	0.57	0.078

from unit 1 to unit 2

21. BD (1) C 9 - C 10	/521. RY*(1) H 58	0.06	1.27	0.011
22. BD (2) C 9 - C 10	/657. BD*(1) C 48 - H 58	0.09	0.72	0.011
33. BD (1) C 15 - O 19	/435. RY*(1) N 42	0.03	2.73	0.012
33. BD (1) C 15 - O 19	/451. RY*(1) C 44	0.05	1.96	0.012
33. BD (1) C 15 - O 19	/468. RY*(2) C 46	0.03	2.29	0.010
34. BD*(1) C 16 - C 17	/527. RY*(1) H 61	0.03	0.66	0.005
140. LP (1) N 11	/435. RY*(1) N 42	0.04	2.21	0.013
140. LP (1) N 11	/437. RY*(3) N 42	0.04	1.54	0.011
140. LP (1) N 11	/541. RY*(1) O 65	0.07	2.71	0.018
140. LP (1) N 11	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.12	0.65	0.011
141. LP (2) N 11	/396. RY*(2) C 37	0.13	1.54	0.019
141. LP (2) N 11	/398. RY*(4) C 37	0.03	1.49	0.009
141. LP (2) N 11	/400. RY*(6) C 37	0.05	3.58	0.018
141. LP (2) N 11	/435. RY*(1) N 42	0.30	2.34	0.034
141. LP (2) N 11	/436. RY*(2) N 42	0.07	1.39	0.013
141. LP (2) N 11	/437. RY*(3) N 42	0.16	1.67	0.021
141. LP (2) N 11	/438. RY*(4) N 42	0.06	1.94	0.014
141. LP (2) N 11	/445. RY*(3) N 43	0.04	1.54	0.010
141. LP (2) N 11	/467. RY*(1) C 46	0.15	1.61	0.020
141. LP (2) N 11	/468. RY*(2) C 46	0.03	1.90	0.010
141. LP (2) N 11	/470. RY*(4) C 46	0.03	1.21	0.007
141. LP (2) N 11	/471. RY*(5) C 46	0.03	5.29	0.017
141. LP (2) N 11	/541. RY*(1) O 65	0.45	2.83	0.046
141. LP (2) N 11	/543. RY*(3) O 65	0.09	1.85	0.017
141. LP (2) N 11	/544. RY*(4) O 65	0.07	2.13	0.015
141. LP (2) N 11	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.03	0.77	0.006
146. LP (1) O 19	/396. RY*(2) C 37	0.03	1.65	0.009
146. LP (1) O 19	/435. RY*(1) N 42	0.14	2.45	0.023
146. LP (1) O 19	/436. RY*(2) N 42	0.03	1.50	0.008
146. LP (1) O 19	/437. RY*(3) N 42	0.10	1.78	0.017
146. LP (1) O 19	/446. RY*(4) N 43	0.03	2.16	0.010
146. LP (1) O 19	/467. RY*(1) C 46	0.03	1.72	0.009
146. LP (1) O 19	/541. RY*(1) O 65	0.08	2.94	0.020
146. LP (1) O 19	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.03	0.93	0.006
146. LP (1) O 19	/644. BD*(1) N 43 - C 44	0.04	0.93	0.008
146. LP (1) O 19	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.03	0.88	0.007

147. LP (2) O 19	/396. RY*(2) C 37	0.09	1.53	0.015
147. LP (2) O 19	/400. RY*(6) C 37	0.03	3.58	0.012
147. LP (2) O 19	/435. RY*(1) N 42	0.24	2.34	0.030
147. LP (2) O 19	/437. RY*(3) N 42	0.10	1.67	0.017
147. LP (2) O 19	/467. RY*(1) C 46	0.09	1.60	0.016
147. LP (2) O 19	/468. RY*(2) C 46	0.04	1.89	0.011
147. LP (2) O 19	/541. RY*(1) O 65	0.16	2.83	0.027
147. LP (2) O 19	/544. RY*(4) O 65	0.05	2.13	0.013
147. LP (2) O 19	/647. BD*(2) C 44 - C 46	0.12	0.46	0.010
147. LP (2) O 19	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.19	0.77	0.015
148. LP (3) O 19	/396. RY*(2) C 37	0.06	1.47	0.012
148. LP (3) O 19	/435. RY*(1) N 42	0.27	2.27	0.032
148. LP (3) O 19	/436. RY*(2) N 42	0.03	1.32	0.007
148. LP (3) O 19	/437. RY*(3) N 42	0.09	1.60	0.015
148. LP (3) O 19	/438. RY*(4) N 42	0.08	1.87	0.016
148. LP (3) O 19	/467. RY*(1) C 46	0.06	1.53	0.012
148. LP (3) O 19	/541. RY*(1) O 65	0.14	2.76	0.025
148. LP (3) O 19	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.08	0.75	0.010

from unit 1 to unit 3

26. BD (1) N 12 - C 13	/529. RY*(1) O 62	0.04	2.82	0.013
26. BD (1) N 12 - C 13	/537. RY*(1) H 63	0.04	1.35	0.009
28. BD (1) C 13 - C 15	/539. RY*(1) H 64	0.04	1.32	0.009
29. BD (2) C 13 - C 15	/661. BD*(1) O 62 - H 64	0.19	0.64	0.014
32. BD (1) C 15 - C 17	/529. RY*(1) O 62	0.04	2.67	0.013
32. BD (1) C 15 - C 17	/539. RY*(1) H 64	0.05	1.21	0.010
140. LP (1) N 11	/529. RY*(1) O 62	0.12	2.35	0.022
140. LP (1) N 11	/532. RY*(4) O 62	0.04	1.68	0.011
140. LP (1) N 11	/537. RY*(1) H 63	0.06	0.87	0.009
140. LP (1) N 11	/539. RY*(1) H 64	0.03	0.88	0.007
140. LP (1) N 11	/660. BD*(1) O 62 - H 63	0.15	0.65	0.013
141. LP (2) N 11	/529. RY*(1) O 62	0.85	2.47	0.059
141. LP (2) N 11	/531. RY*(3) O 62	0.17	1.80	0.022
141. LP (2) N 11	/532. RY*(4) O 62	0.27	1.81	0.029
141. LP (2) N 11	/537. RY*(1) H 63	0.26	1.00	0.021
141. LP (2) N 11	/539. RY*(1) H 64	0.23	1.01	0.020
146. LP (1) O 19	/529. RY*(1) O 62	0.19	2.58	0.028
146. LP (1) O 19	/531. RY*(3) O 62	0.03	1.91	0.010
146. LP (1) O 19	/532. RY*(4) O 62	0.04	1.92	0.012
146. LP (1) O 19	/537. RY*(1) H 63	0.07	1.11	0.011
146. LP (1) O 19	/539. RY*(1) H 64	0.05	1.12	0.009
146. LP (1) O 19	/661. BD*(1) O 62 - H 64	0.03	0.89	0.006
147. LP (2) O 19	/529. RY*(1) O 62	0.47	2.47	0.043
147. LP (2) O 19	/531. RY*(3) O 62	0.08	1.80	0.015
147. LP (2) O 19	/532. RY*(4) O 62	0.13	1.80	0.020
147. LP (2) O 19	/537. RY*(1) H 63	0.11	1.00	0.013
147. LP (2) O 19	/539. RY*(1) H 64	0.16	1.01	0.016
147. LP (2) O 19	/660. BD*(1) O 62 - H 63	0.03	0.77	0.006
147. LP (2) O 19	/661. BD*(1) O 62 - H 64	0.09	0.78	0.011
148. LP (3) O 19	/529. RY*(1) O 62	0.28	2.40	0.033
148. LP (3) O 19	/531. RY*(3) O 62	0.07	1.73	0.014
148. LP (3) O 19	/532. RY*(4) O 62	0.11	1.73	0.018
148. LP (3) O 19	/537. RY*(1) H 63	0.07	0.93	0.010
148. LP (3) O 19	/539. RY*(1) H 64	0.06	0.94	0.010
301. RY (1) C 17	/539. RY*(1) H 64	0.29	0.06	0.050
610. BD*(2) C 13 - C 15	/661. BD*(1) O 62 - H 64	0.08	0.30	0.013

from unit 1 to unit 4

11. BD (2) C 4 - C 6	/663. BD*(1) H 67 - O 68	0.04	0.59	0.006
13. BD (1) C 5 - C 6	/555. RY*(3) O 68	0.06	1.82	0.014
25. BD (1) N 11 - N 12	/553. RY*(1) O 68	0.04	2.91	0.013
26. BD (1) N 12 - C 13	/553. RY*(1) O 68	0.04	2.72	0.013
140. LP (1) N 11	/549. RY*(1) H 66	0.04	1.01	0.008
140. LP (1) N 11	/551. RY*(1) H 67	0.06	0.95	0.009
140. LP (1) N 11	/553. RY*(1) O 68	0.11	2.25	0.021
140. LP (1) N 11	/556. RY*(4) O 68	0.05	2.12	0.013
141. LP (2) N 11	/549. RY*(1) H 66	0.36	1.14	0.026
141. LP (2) N 11	/551. RY*(1) H 67	0.36	1.07	0.025
141. LP (2) N 11	/553. RY*(1) O 68	0.84	2.37	0.058
141. LP (2) N 11	/555. RY*(3) O 68	0.04	1.51	0.009
141. LP (2) N 11	/556. RY*(4) O 68	0.28	2.25	0.033

146. LP (1) O 19	/549. RY*(1) H 66	0.07	1.25	0.012
146. LP (1) O 19	/551. RY*(1) H 67	0.07	1.18	0.012
146. LP (1) O 19	/553. RY*(1) O 68	0.12	2.48	0.022
146. LP (1) O 19	/556. RY*(4) O 68	0.05	2.36	0.014
147. LP (2) O 19	/549. RY*(1) H 66	0.12	1.14	0.015
147. LP (2) O 19	/551. RY*(1) H 67	0.16	1.07	0.017
147. LP (2) O 19	/553. RY*(1) O 68	0.31	2.37	0.035
147. LP (2) O 19	/556. RY*(4) O 68	0.17	2.25	0.025
148. LP (3) O 19	/549. RY*(1) H 66	0.08	1.07	0.012
148. LP (3) O 19	/551. RY*(1) H 67	0.09	1.00	0.012
148. LP (3) O 19	/553. RY*(1) O 68	0.20	2.30	0.028
148. LP (3) O 19	/556. RY*(4) O 68	0.13	2.18	0.021
148. LP (3) O 19	/663. BD*(1) H 67 - O 68	0.03	0.71	0.006

from unit 1 to unit 5

10. BD (1) C 4 - C 6	/166. LP (6)Mn 69	0.05	1.41	0.011
10. BD (1) C 4 - C 6	/167. LP*(7)Mn 69	0.05	1.19	0.010
11. BD (2) C 4 - C 6	/561. RY*(1)Mn 69	0.04	2.05	0.013
13. BD (1) C 5 - C 6	/167. LP*(7)Mn 69	0.05	1.30	0.010
15. BD (1) C 6 - N 11	/166. LP (6)Mn 69	0.73	1.56	0.045
15. BD (1) C 6 - N 11	/167. LP*(7)Mn 69	0.04	1.33	0.009
15. BD (1) C 6 - N 11	/168. LP*(8)Mn 69	0.09	2.62	0.019
15. BD (1) C 6 - N 11	/169. LP*(9)Mn 69	0.03	2.54	0.011
15. BD (1) C 6 - N 11	/564. RY*(4)Mn 69	0.05	2.98	0.016
15. BD (1) C 6 - N 11	/565. RY*(5)Mn 69	0.05	2.60	0.014
15. BD (1) C 6 - N 11	/567. RY*(7)Mn 69	0.03	2.80	0.012
15. BD (1) C 6 - N 11	/569. RY*(9)Mn 69	0.04	8.82	0.023
15. BD (1) C 6 - N 11	/572. RY*(12)Mn 69	0.03	5.97	0.016
25. BD (1) N 11 - N 12	/166. LP (6)Mn 69	0.79	1.75	0.050
25. BD (1) N 11 - N 12	/167. LP*(7)Mn 69	0.05	1.53	0.011
25. BD (1) N 11 - N 12	/168. LP*(8)Mn 69	0.03	2.82	0.011
25. BD (1) N 11 - N 12	/169. LP*(9)Mn 69	0.09	2.73	0.020
25. BD (1) N 11 - N 12	/561. RY*(1)Mn 69	0.06	2.78	0.016
25. BD (1) N 11 - N 12	/562. RY*(2)Mn 69	0.19	3.98	0.034
25. BD (1) N 11 - N 12	/569. RY*(9)Mn 69	0.06	9.02	0.030
25. BD (1) N 11 - N 12	/580. RY*(20)Mn 69	0.03	149.96	0.090
25. BD (1) N 11 - N 12	/581. RY*(21)Mn 69	0.06	39.36	0.059
26. BD (1) N 12 - C 13	/166. LP (6)Mn 69	0.11	1.56	0.018
26. BD (1) N 12 - C 13	/167. LP*(7)Mn 69	0.04	1.34	0.010
26. BD (1) N 12 - C 13	/561. RY*(1)Mn 69	0.04	2.59	0.012
26. BD (1) N 12 - C 13	/562. RY*(2)Mn 69	0.08	3.78	0.022
26. BD (1) N 12 - C 13	/568. RY*(8)Mn 69	0.04	7.48	0.023
26. BD (1) N 12 - C 13	/570. RY*(10)Mn 69	0.05	9.56	0.029
26. BD (1) N 12 - C 13	/577. RY*(17)Mn 69	0.03	28.06	0.034
26. BD (1) N 12 - C 13	/578. RY*(18)Mn 69	0.03	679.52	0.195
26. BD (1) N 12 - C 13	/580. RY*(20)Mn 69	0.07	149.76	0.126
26. BD (1) N 12 - C 13	/581. RY*(21)Mn 69	0.12	39.17	0.088
27. BD (1) C 13 - C 14	/166. LP (6)Mn 69	0.03	1.41	0.009
28. BD (1) C 13 - C 15	/166. LP (6)Mn 69	0.14	1.53	0.019
28. BD (1) C 13 - C 15	/167. LP*(7)Mn 69	0.07	1.30	0.012
28. BD (1) C 13 - C 15	/562. RY*(2)Mn 69	0.03	3.75	0.014
28. BD (1) C 13 - C 15	/581. RY*(21)Mn 69	0.04	39.14	0.047
29. BD (2) C 13 - C 15	/166. LP (6)Mn 69	0.03	1.07	0.008
32. BD (1) C 15 - C 17	/166. LP (6)Mn 69	0.20	1.41	0.023
32. BD (1) C 15 - C 17	/167. LP*(7)Mn 69	0.05	1.18	0.009
32. BD (1) C 15 - C 17	/562. RY*(2)Mn 69	0.05	3.63	0.016
32. BD (1) C 15 - C 17	/581. RY*(21)Mn 69	0.04	39.02	0.050
33. BD (1) C 15 - O 19	/166. LP (6)Mn 69	0.55	1.61	0.040
33. BD (1) C 15 - O 19	/168. LP*(8)Mn 69	0.11	2.67	0.021
33. BD (1) C 15 - O 19	/169. LP*(9)Mn 69	0.08	2.59	0.018
33. BD (1) C 15 - O 19	/569. RY*(9)Mn 69	0.03	8.87	0.021
33. BD (1) C 15 - O 19	/573. RY*(13)Mn 69	0.03	8.54	0.020
94. CR (1) C 6	/166. LP (6)Mn 69	0.03	10.85	0.024
99. CR (1) N 11	/166. LP (6)Mn 69	1.01	14.97	0.166
100. CR (1) N 12	/166. LP (6)Mn 69	0.03	15.01	0.030
103. CR (1) C 15	/166. LP (6)Mn 69	0.04	10.87	0.029
107. CR (1) O 19	/166. LP (6)Mn 69	1.20	19.67	0.208
140. LP (1) N 11	/166. LP (6)Mn 69	2.54	1.09	0.070
140. LP (1) N 11	/167. LP*(7)Mn 69	0.08	0.86	0.010
140. LP (1) N 11	/561. RY*(1)Mn 69	0.06	2.11	0.015
140. LP (1) N 11	/562. RY*(2)Mn 69	0.35	3.31	0.044

140. LP (1) N 11	/565. RY*(5)Mn 69	0.04	2.13	0.012
140. LP (1) N 11	/567. RY*(7)Mn 69	0.04	2.33	0.012
140. LP (1) N 11	/575. RY*(15)Mn 69	0.05	5.88	0.022
140. LP (1) N 11	/578. RY*(18)Mn 69	0.08	679.05	0.294
140. LP (1) N 11	/580. RY*(20)Mn 69	0.15	149.29	0.195
140. LP (1) N 11	/581. RY*(21)Mn 69	0.28	38.70	0.134
141. LP (2) N 11	/166. LP (6)Mn 69	16.68	1.21	0.188
141. LP (2) N 11	/167. LP*(7)Mn 69	0.23	0.99	0.020
141. LP (2) N 11	/168. LP*(8)Mn 69	0.25	2.28	0.031
141. LP (2) N 11	/169. LP*(9)Mn 69	0.04	2.19	0.011
141. LP (2) N 11	/561. RY*(1)Mn 69	0.54	2.24	0.045
141. LP (2) N 11	/562. RY*(2)Mn 69	2.43	3.44	0.118
141. LP (2) N 11	/564. RY*(4)Mn 69	0.11	2.64	0.022
141. LP (2) N 11	/565. RY*(5)Mn 69	0.17	2.26	0.025
141. LP (2) N 11	/567. RY*(7)Mn 69	0.28	2.46	0.034
141. LP (2) N 11	/568. RY*(8)Mn 69	0.07	7.13	0.028
141. LP (2) N 11	/574. RY*(14)Mn 69	0.05	6.37	0.022
141. LP (2) N 11	/575. RY*(15)Mn 69	0.20	6.00	0.045
141. LP (2) N 11	/578. RY*(18)Mn 69	0.56	679.18	0.796
141. LP (2) N 11	/580. RY*(20)Mn 69	1.11	149.42	0.528
141. LP (2) N 11	/581. RY*(21)Mn 69	2.07	38.82	0.367
142. LP (1) N 12	/166. LP (6)Mn 69	0.16	1.20	0.019
142. LP (1) N 12	/561. RY*(1)Mn 69	0.08	2.23	0.017
146. LP (1) O 19	/166. LP (6)Mn 69	4.01	1.32	0.098
146. LP (1) O 19	/167. LP*(7)Mn 69	0.08	1.10	0.012
146. LP (1) O 19	/169. LP*(9)Mn 69	0.06	2.30	0.015
146. LP (1) O 19	/561. RY*(1)Mn 69	0.05	2.35	0.013
146. LP (1) O 19	/562. RY*(2)Mn 69	0.54	3.55	0.056
146. LP (1) O 19	/563. RY*(3)Mn 69	0.05	2.32	0.014
146. LP (1) O 19	/564. RY*(4)Mn 69	0.04	2.75	0.013
146. LP (1) O 19	/567. RY*(7)Mn 69	0.07	2.57	0.017
146. LP (1) O 19	/569. RY*(9)Mn 69	0.03	8.59	0.020
146. LP (1) O 19	/575. RY*(15)Mn 69	0.06	6.11	0.024
146. LP (1) O 19	/578. RY*(18)Mn 69	0.12	679.28	0.368
146. LP (1) O 19	/580. RY*(20)Mn 69	0.21	149.52	0.225
146. LP (1) O 19	/581. RY*(21)Mn 69	0.38	38.93	0.154
147. LP (2) O 19	/166. LP (6)Mn 69	9.25	1.21	0.141
147. LP (2) O 19	/167. LP*(7)Mn 69	0.66	0.99	0.033
147. LP (2) O 19	/168. LP*(8)Mn 69	0.08	2.27	0.017
147. LP (2) O 19	/169. LP*(9)Mn 69	0.32	2.19	0.034
147. LP (2) O 19	/562. RY*(2)Mn 69	1.08	3.43	0.078
147. LP (2) O 19	/563. RY*(3)Mn 69	0.05	2.21	0.014
147. LP (2) O 19	/564. RY*(4)Mn 69	0.05	2.64	0.014
147. LP (2) O 19	/567. RY*(7)Mn 69	0.22	2.46	0.030
147. LP (2) O 19	/575. RY*(15)Mn 69	0.12	6.00	0.035
147. LP (2) O 19	/578. RY*(18)Mn 69	0.28	679.17	0.560
147. LP (2) O 19	/580. RY*(20)Mn 69	0.54	149.41	0.365
147. LP (2) O 19	/581. RY*(21)Mn 69	1.02	38.82	0.255
148. LP (3) O 19	/166. LP (6)Mn 69	8.27	1.14	0.128
148. LP (3) O 19	/167. LP*(7)Mn 69	0.61	0.92	0.030
148. LP (3) O 19	/168. LP*(8)Mn 69	0.15	2.20	0.023
148. LP (3) O 19	/169. LP*(9)Mn 69	0.24	2.12	0.029
148. LP (3) O 19	/561. RY*(1)Mn 69	0.13	2.17	0.022
148. LP (3) O 19	/562. RY*(2)Mn 69	0.81	3.36	0.068
148. LP (3) O 19	/563. RY*(3)Mn 69	0.03	2.14	0.010
148. LP (3) O 19	/564. RY*(4)Mn 69	0.03	2.57	0.012
148. LP (3) O 19	/567. RY*(7)Mn 69	0.16	2.39	0.025
148. LP (3) O 19	/575. RY*(15)Mn 69	0.09	5.93	0.030
148. LP (3) O 19	/578. RY*(18)Mn 69	0.20	679.10	0.480
148. LP (3) O 19	/580. RY*(20)Mn 69	0.41	149.34	0.319
148. LP (3) O 19	/581. RY*(21)Mn 69	0.77	38.75	0.224
277. RY (1) C 14	/166. LP (6)Mn 69	0.05	0.27	0.012
277. RY (1) C 14	/167. LP*(7)Mn 69	0.03	0.05	0.014
301. RY (1) C 17	/166. LP (6)Mn 69	0.27	0.26	0.029
301. RY (1) C 17	/167. LP*(7)Mn 69	0.10	0.04	0.022

from unit 2 to unit 1

71. BD (1) C 44 - C 46	/319. RY*(3) O 19	0.09	2.10	0.017
72. BD (2) C 44 - C 46	/319. RY*(3) O 19	0.05	1.62	0.012
72. BD (2) C 44 - C 46	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.08	0.61	0.009
76. BD (1) C 46 - C 48	/237. RY*(1) C 9	0.04	1.38	0.009

77. BD (1) C 46 - O 65	/214. RY*(2) C 6	0.06	2.00	0.014
151. LP (1) N 42	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.04	0.62	0.006
152. LP (2) N 42	/214. RY*(2) C 6	0.13	1.61	0.019
152. LP (2) N 42	/216. RY*(4) C 6	0.08	1.49	0.015
152. LP (2) N 42	/218. RY*(6) C 6	0.05	3.66	0.017
152. LP (2) N 42	/253. RY*(1) N 11	0.24	1.80	0.027
152. LP (2) N 42	/254. RY*(2) N 11	0.23	1.85	0.027
152. LP (2) N 42	/255. RY*(3) N 11	0.15	1.71	0.021
152. LP (2) N 42	/256. RY*(4) N 11	0.07	1.98	0.015
152. LP (2) N 42	/285. RY*(1) C 15	0.17	1.61	0.021
152. LP (2) N 42	/286. RY*(2) C 15	0.03	1.21	0.008
152. LP (2) N 42	/289. RY*(5) C 15	0.08	3.89	0.022
152. LP (2) N 42	/317. RY*(1) O 19	0.53	2.82	0.050
152. LP (2) N 42	/319. RY*(3) O 19	0.10	1.78	0.018
152. LP (2) N 42	/320. RY*(4) O 19	0.04	2.25	0.012
152. LP (2) N 42	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.15	0.77	0.014
159. LP (1) O 65	/253. RY*(1) N 11	0.12	1.93	0.019
159. LP (1) O 65	/254. RY*(2) N 11	0.10	1.98	0.018
159. LP (1) O 65	/255. RY*(3) N 11	0.10	1.84	0.017
159. LP (1) O 65	/256. RY*(4) N 11	0.05	2.10	0.013
159. LP (1) O 65	/285. RY*(1) C 15	0.05	1.74	0.011
159. LP (1) O 65	/317. RY*(1) O 19	0.13	2.94	0.025
159. LP (1) O 65	/603. BD*(2) C 9 - C 10	0.10	0.61	0.012
159. LP (1) O 65	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.03	1.06	0.007
160. LP (2) O 65	/214. RY*(2) C 6	0.08	1.62	0.014
160. LP (2) O 65	/253. RY*(1) N 11	0.17	1.82	0.022
160. LP (2) O 65	/254. RY*(2) N 11	0.24	1.87	0.027
160. LP (2) O 65	/255. RY*(3) N 11	0.13	1.73	0.019
160. LP (2) O 65	/256. RY*(4) N 11	0.03	1.99	0.010
160. LP (2) O 65	/263. RY*(3) N 12	0.03	1.57	0.009
160. LP (2) O 65	/285. RY*(1) C 15	0.13	1.63	0.019
160. LP (2) O 65	/286. RY*(2) C 15	0.03	1.22	0.008
160. LP (2) O 65	/289. RY*(5) C 15	0.05	3.90	0.018
160. LP (2) O 65	/317. RY*(1) O 19	0.26	2.83	0.034
160. LP (2) O 65	/319. RY*(3) O 19	0.05	1.79	0.012
160. LP (2) O 65	/320. RY*(4) O 19	0.03	2.27	0.010
160. LP (2) O 65	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.03	0.95	0.007
161. LP (3) O 65	/214. RY*(2) C 6	0.03	1.47	0.008
161. LP (3) O 65	/253. RY*(1) N 11	0.06	1.66	0.013
161. LP (3) O 65	/254. RY*(2) N 11	0.08	1.72	0.016
161. LP (3) O 65	/255. RY*(3) N 11	0.09	1.58	0.015
161. LP (3) O 65	/256. RY*(4) N 11	0.03	1.84	0.009
161. LP (3) O 65	/317. RY*(1) O 19	0.07	2.68	0.018
161. LP (3) O 65	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.03	0.68	0.006
161. LP (3) O 65	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.05	0.80	0.008
161. LP (3) O 65	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.08	0.63	0.009
within unit 2				
42. BD (1) C 32 - C 33	/372. RY*(2) C 34	0.55	2.00	0.042
42. BD (1) C 32 - C 33	/373. RY*(3) C 34	0.27	2.01	0.030
42. BD (1) C 32 - C 33	/380. RY*(2) C 35	0.72	2.25	0.051
42. BD (1) C 32 - C 33	/404. RY*(2) C 38	0.65	1.88	0.044
42. BD (1) C 32 - C 33	/623. BD*(1) C 32 - C 34	1.49	1.26	0.055
42. BD (1) C 32 - C 33	/625. BD*(1) C 33 - C 35	1.24	1.27	0.050
42. BD (1) C 32 - C 33	/626. BD*(1) C 33 - C 38	0.61	1.10	0.033
42. BD (1) C 32 - C 33	/628. BD*(1) C 34 - H 51	1.36	1.08	0.049
42. BD (1) C 32 - C 33	/630. BD*(1) C 35 - C 40	2.08	1.11	0.061
42. BD (1) C 32 - C 33	/634. BD*(1) C 38 - C 39	0.69	1.30	0.038
43. BD (2) C 32 - C 33	/ 50. BD*(2) C 34 - C 36	5.37	0.22	0.064
43. BD (2) C 32 - C 33	/ 54. BD*(2) C 35 - C 37	6.26	0.24	0.065
43. BD (2) C 32 - C 33	/371. RY*(1) C 34	1.12	0.77	0.038
43. BD (2) C 32 - C 33	/379. RY*(1) C 35	0.89	0.87	0.036
43. BD (2) C 32 - C 33	/403. RY*(1) C 38	0.59	0.81	0.028
43. BD (2) C 32 - C 33	/499. RY*(1) O 50	0.35	1.15	0.026
43. BD (2) C 32 - C 33	/622. BD*(2) C 32 - C 33	0.37	0.23	0.015
43. BD (2) C 32 - C 33	/635. BD*(2) C 38 - C 39	6.49	0.30	0.065
43. BD (2) C 32 - C 33	/640. BD*(2) C 40 - C 41	0.26	0.30	0.013
44. BD (1) C 32 - C 34	/365. RY*(3) C 33	0.69	2.22	0.049
44. BD (1) C 32 - C 34	/389. RY*(3) C 36	0.57	1.99	0.043
44. BD (1) C 32 - C 34	/621. BD*(1) C 32 - C 33	1.47	1.19	0.053
44. BD (1) C 32 - C 34	/624. BD*(1) C 32 - O 50	0.28	1.04	0.022

44. BD (1) C 32 - C 34	/626. BD*(1) C 33 - C 38	1.12	1.22	0.047
44. BD (1) C 32 - C 34	/627. BD*(1) C 34 - C 36	0.77	1.23	0.039
44. BD (1) C 32 - C 34	/628. BD*(1) C 34 - H 51	0.61	1.20	0.034
44. BD (1) C 32 - C 34	/632. BD*(1) C 36 - H 61	0.67	1.21	0.036
44. BD (1) C 32 - C 34	/659. BD*(1) O 50 - H 60	0.73	1.08	0.036
45. BD (1) C 32 - O 50	/372. RY*(2) C 34	0.28	2.24	0.032
45. BD (1) C 32 - O 50	/623. BD*(1) C 32 - C 34	0.38	1.51	0.030
45. BD (1) C 32 - O 50	/625. BD*(1) C 33 - C 35	0.56	1.52	0.037
45. BD (1) C 32 - O 50	/627. BD*(1) C 34 - C 36	1.00	1.36	0.047
46. BD (1) C 33 - C 35	/357. RY*(3) C 32	0.44	2.18	0.039
46. BD (1) C 33 - C 35	/395. RY*(1) C 37	0.27	1.65	0.027
46. BD (1) C 33 - C 35	/396. RY*(2) C 37	0.41	1.84	0.035
46. BD (1) C 33 - C 35	/404. RY*(2) C 38	0.39	1.98	0.035
46. BD (1) C 33 - C 35	/420. RY*(2) C 40	0.36	1.91	0.033
46. BD (1) C 33 - C 35	/621. BD*(1) C 32 - C 33	1.23	1.16	0.048
46. BD (1) C 33 - C 35	/624. BD*(1) C 32 - O 50	1.32	1.02	0.046
46. BD (1) C 33 - C 35	/626. BD*(1) C 33 - C 38	1.62	1.19	0.056
46. BD (1) C 33 - C 35	/629. BD*(1) C 35 - C 37	1.54	1.20	0.054
46. BD (1) C 33 - C 35	/630. BD*(1) C 35 - C 40	1.54	1.21	0.054
46. BD (1) C 33 - C 35	/633. BD*(1) C 37 - N 42	1.35	1.13	0.049
46. BD (1) C 33 - C 35	/636. BD*(1) C 38 - H 52	0.76	1.20	0.038
46. BD (1) C 33 - C 35	/641. BD*(1) C 40 - H 54	0.72	1.20	0.037
47. BD (1) C 33 - C 38	/355. RY*(1) C 32	0.34	1.54	0.029
47. BD (1) C 33 - C 38	/357. RY*(3) C 32	0.34	2.07	0.034
47. BD (1) C 33 - C 38	/380. RY*(2) C 35	0.45	2.23	0.040
47. BD (1) C 33 - C 38	/412. RY*(2) C 39	0.31	1.99	0.031
47. BD (1) C 33 - C 38	/413. RY*(3) C 39	0.71	2.00	0.048
47. BD (1) C 33 - C 38	/621. BD*(1) C 32 - C 33	0.49	1.05	0.029
47. BD (1) C 33 - C 38	/623. BD*(1) C 32 - C 34	0.75	1.24	0.039
47. BD (1) C 33 - C 38	/625. BD*(1) C 33 - C 35	1.80	1.25	0.060
47. BD (1) C 33 - C 38	/629. BD*(1) C 35 - C 37	2.42	1.08	0.065
47. BD (1) C 33 - C 38	/634. BD*(1) C 38 - C 39	1.26	1.28	0.051
47. BD (1) C 33 - C 38	/636. BD*(1) C 38 - H 52	0.30	1.08	0.023
47. BD (1) C 33 - C 38	/638. BD*(1) C 39 - H 53	1.37	1.08	0.049
48. BD (1) C 34 - C 36	/355. RY*(1) C 32	0.36	1.57	0.030
48. BD (1) C 34 - C 36	/356. RY*(2) C 32	0.39	1.43	0.030
48. BD (1) C 34 - C 36	/357. RY*(3) C 32	0.36	2.09	0.035
48. BD (1) C 34 - C 36	/397. RY*(3) C 37	0.95	1.79	0.052
48. BD (1) C 34 - C 36	/623. BD*(1) C 32 - C 34	0.84	1.26	0.041
48. BD (1) C 34 - C 36	/624. BD*(1) C 32 - O 50	2.66	0.92	0.063
48. BD (1) C 34 - C 36	/631. BD*(1) C 36 - C 37	1.08	1.29	0.047
48. BD (1) C 34 - C 36	/633. BD*(1) C 37 - N 42	2.85	1.04	0.069
49. BD (2) C 34 - C 36	/ 54. BD*(2) C 35 - C 37	6.75	0.24	0.068
49. BD (2) C 34 - C 36	/356. RY*(2) C 32	0.26	1.06	0.022
49. BD (2) C 34 - C 36	/395. RY*(1) C 37	0.35	1.18	0.026
49. BD (2) C 34 - C 36	/622. BD*(2) C 32 - C 33	7.76	0.23	0.071
50. BD*(2) C 34 - C 36	/ 54. BD*(2) C 35 - C 37	338.46	0.02	0.094
50. BD*(2) C 34 - C 36	/371. RY*(1) C 34	2.02	0.54	0.054
50. BD*(2) C 34 - C 36	/387. RY*(1) C 36	1.69	0.59	0.052
51. BD (1) C 34 - H 51	/357. RY*(3) C 32	0.48	1.95	0.039
51. BD (1) C 34 - H 51	/360. RY*(6) C 32	0.29	8.50	0.063
51. BD (1) C 34 - H 51	/388. RY*(2) C 36	0.49	1.78	0.037
51. BD (1) C 34 - H 51	/621. BD*(1) C 32 - C 33	3.08	0.94	0.068
51. BD (1) C 34 - H 51	/623. BD*(1) C 32 - C 34	0.41	1.13	0.027
51. BD (1) C 34 - H 51	/624. BD*(1) C 32 - O 50	0.94	0.79	0.034
51. BD (1) C 34 - H 51	/631. BD*(1) C 36 - C 37	1.42	1.15	0.051
51. BD (1) C 34 - H 51	/632. BD*(1) C 36 - H 61	0.29	0.96	0.021
52. BD (1) C 35 - C 37	/364. RY*(2) C 33	0.84	2.34	0.056
52. BD (1) C 35 - C 37	/388. RY*(2) C 36	0.50	1.91	0.039
52. BD (1) C 35 - C 37	/420. RY*(2) C 40	0.62	1.81	0.043
52. BD (1) C 35 - C 37	/436. RY*(2) N 42	0.49	1.60	0.035
52. BD (1) C 35 - C 37	/625. BD*(1) C 33 - C 35	1.49	1.27	0.055
52. BD (1) C 35 - C 37	/626. BD*(1) C 33 - C 38	2.00	1.10	0.059
52. BD (1) C 35 - C 37	/630. BD*(1) C 35 - C 40	0.78	1.11	0.037
52. BD (1) C 35 - C 37	/631. BD*(1) C 36 - C 37	1.59	1.28	0.057
52. BD (1) C 35 - C 37	/632. BD*(1) C 36 - H 61	1.47	1.09	0.051
52. BD (1) C 35 - C 37	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.29	1.03	0.022
52. BD (1) C 35 - C 37	/639. BD*(1) C 40 - C 41	0.74	1.31	0.039
53. BD (2) C 35 - C 37	/ 50. BD*(2) C 34 - C 36	5.84	0.22	0.066
53. BD (2) C 35 - C 37	/363. RY*(1) C 33	0.93	0.86	0.037
53. BD (2) C 35 - C 37	/387. RY*(1) C 36	1.25	0.81	0.041

53. BD (2) C 35 - C 37	/419. RY*(1) C 40	0.48	0.91	0.027
53. BD (2) C 35 - C 37	/622. BD*(2) C 32 - C 33	6.25	0.22	0.062
53. BD (2) C 35 - C 37	/640. BD*(2) C 40 - C 41	6.59	0.30	0.065
53. BD (2) C 35 - C 37	/643. BD*(1) N 42 - N 43	2.04	0.79	0.052
54. BD*(2) C 35 - C 37	/363. RY*(1) C 33	0.71	0.62	0.038
54. BD*(2) C 35 - C 37	/379. RY*(1) C 35	1.18	0.63	0.049
54. BD*(2) C 35 - C 37	/387. RY*(1) C 36	1.19	0.58	0.047
54. BD*(2) C 35 - C 37	/395. RY*(1) C 37	0.45	0.94	0.037
54. BD*(2) C 35 - C 37	/396. RY*(2) C 37	0.27	1.14	0.031
54. BD*(2) C 35 - C 37	/419. RY*(1) C 40	0.33	0.67	0.027
54. BD*(2) C 35 - C 37	/635. BD*(2) C 38 - C 39	0.27	0.06	0.006
54. BD*(2) C 35 - C 37	/640. BD*(2) C 40 - C 41	49.04	0.06	0.078
54. BD*(2) C 35 - C 37	/643. BD*(1) N 42 - N 43	2.12	0.55	0.061
55. BD (1) C 35 - C 40	/364. RY*(2) C 33	0.45	2.32	0.041
55. BD (1) C 35 - C 40	/395. RY*(1) C 37	0.55	1.53	0.037
55. BD (1) C 35 - C 40	/396. RY*(2) C 37	0.68	1.73	0.044
55. BD (1) C 35 - C 40	/428. RY*(2) C 41	0.34	2.00	0.033
55. BD (1) C 35 - C 40	/429. RY*(3) C 41	0.75	2.00	0.049
55. BD (1) C 35 - C 40	/621. BD*(1) C 32 - C 33	2.38	1.05	0.063
55. BD (1) C 35 - C 40	/625. BD*(1) C 33 - C 35	1.76	1.25	0.059
55. BD (1) C 35 - C 40	/629. BD*(1) C 35 - C 37	0.79	1.08	0.037
55. BD (1) C 35 - C 40	/631. BD*(1) C 36 - C 37	1.03	1.27	0.046
55. BD (1) C 35 - C 40	/639. BD*(1) C 40 - C 41	1.34	1.29	0.053
55. BD (1) C 35 - C 40	/641. BD*(1) C 40 - H 54	0.32	1.09	0.024
55. BD (1) C 35 - C 40	/642. BD*(1) C 41 - H 55	1.43	1.08	0.050
56. BD (1) C 36 - C 37	/373. RY*(3) C 34	0.65	2.11	0.047
56. BD (1) C 36 - C 37	/381. RY*(3) C 35	0.71	2.33	0.052
56. BD (1) C 36 - C 37	/436. RY*(2) N 42	0.41	1.71	0.034
56. BD (1) C 36 - C 37	/627. BD*(1) C 34 - C 36	0.97	1.22	0.044
56. BD (1) C 36 - C 37	/628. BD*(1) C 34 - H 51	0.60	1.19	0.034
56. BD (1) C 36 - C 37	/629. BD*(1) C 35 - C 37	1.64	1.21	0.057
56. BD (1) C 36 - C 37	/630. BD*(1) C 35 - C 40	1.11	1.22	0.047
56. BD (1) C 36 - C 37	/632. BD*(1) C 36 - H 61	0.77	1.20	0.038
56. BD (1) C 36 - C 37	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.75	1.15	0.037
56. BD (1) C 36 - C 37	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.48	1.27	0.031
57. BD (1) C 36 - H 61	/372. RY*(2) C 34	0.47	1.86	0.038
57. BD (1) C 36 - H 61	/395. RY*(1) C 37	0.45	1.42	0.032
57. BD (1) C 36 - H 61	/396. RY*(2) C 37	0.70	1.61	0.043
57. BD (1) C 36 - H 61	/398. RY*(4) C 37	0.28	1.56	0.027
57. BD (1) C 36 - H 61	/623. BD*(1) C 32 - C 34	1.33	1.12	0.049
57. BD (1) C 36 - H 61	/628. BD*(1) C 34 - H 51	0.28	0.95	0.020
57. BD (1) C 36 - H 61	/629. BD*(1) C 35 - C 37	3.32	0.97	0.072
57. BD (1) C 36 - H 61	/631. BD*(1) C 36 - C 37	0.68	1.15	0.035
57. BD (1) C 36 - H 61	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.67	0.90	0.031
58. BD (1) C 37 - N 42	/381. RY*(3) C 35	0.62	2.34	0.048
58. BD (1) C 37 - N 42	/388. RY*(2) C 36	0.59	2.03	0.044
58. BD (1) C 37 - N 42	/443. RY*(1) N 43	0.90	1.65	0.049
58. BD (1) C 37 - N 42	/625. BD*(1) C 33 - C 35	0.78	1.39	0.042
58. BD (1) C 37 - N 42	/627. BD*(1) C 34 - C 36	1.27	1.23	0.050
58. BD (1) C 37 - N 42	/629. BD*(1) C 35 - C 37	0.51	1.22	0.032
58. BD (1) C 37 - N 42	/631. BD*(1) C 36 - C 37	0.93	1.41	0.046
58. BD (1) C 37 - N 42	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.48	1.29	0.032
58. BD (1) C 37 - N 42	/644. BD*(1) N 43 - C 44	2.84	1.15	0.072
59. BD (1) C 38 - C 39	/364. RY*(2) C 33	0.47	2.43	0.043
59. BD (1) C 38 - C 39	/365. RY*(3) C 33	0.46	2.19	0.040
59. BD (1) C 38 - C 39	/428. RY*(2) C 41	0.41	2.11	0.037
59. BD (1) C 38 - C 39	/429. RY*(3) C 41	0.40	2.11	0.037
59. BD (1) C 38 - C 39	/621. BD*(1) C 32 - C 33	1.28	1.16	0.049
59. BD (1) C 38 - C 39	/626. BD*(1) C 33 - C 38	1.36	1.19	0.051
59. BD (1) C 38 - C 39	/636. BD*(1) C 38 - H 52	0.81	1.19	0.039
59. BD (1) C 38 - C 39	/637. BD*(1) C 39 - C 41	0.95	1.21	0.043
59. BD (1) C 38 - C 39	/638. BD*(1) C 39 - H 53	0.67	1.19	0.036
59. BD (1) C 38 - C 39	/642. BD*(1) C 41 - H 55	0.77	1.19	0.038
60. BD (2) C 38 - C 39	/363. RY*(1) C 33	0.41	0.86	0.024
60. BD (2) C 38 - C 39	/427. RY*(1) C 41	0.69	0.78	0.030
60. BD (2) C 38 - C 39	/622. BD*(2) C 32 - C 33	3.64	0.23	0.049
60. BD (2) C 38 - C 39	/640. BD*(2) C 40 - C 41	4.34	0.30	0.054
61. BD (1) C 38 - H 52	/364. RY*(2) C 33	0.67	2.20	0.049
61. BD (1) C 38 - H 52	/412. RY*(2) C 39	0.72	1.87	0.047
61. BD (1) C 38 - H 52	/625. BD*(1) C 33 - C 35	1.60	1.13	0.054
61. BD (1) C 38 - H 52	/634. BD*(1) C 38 - C 39	0.67	1.16	0.035

61. BD (1) C 38 - H 52	/637. BD*(1) C 39 - C 41	2.62	0.98	0.064
61. BD (1) C 38 - H 52	/638. BD*(1) C 39 - H 53	0.46	0.96	0.027
62. BD (1) C 39 - C 41	/405. RY*(3) C 38	0.93	1.78	0.052
62. BD (1) C 39 - C 41	/421. RY*(3) C 40	0.92	1.76	0.051
62. BD (1) C 39 - C 41	/634. BD*(1) C 38 - C 39	1.06	1.29	0.047
62. BD (1) C 39 - C 41	/636. BD*(1) C 38 - H 52	1.65	1.09	0.054
62. BD (1) C 39 - C 41	/639. BD*(1) C 40 - C 41	1.13	1.30	0.049
62. BD (1) C 39 - C 41	/641. BD*(1) C 40 - H 54	1.74	1.10	0.055
63. BD (1) C 39 - H 53	/404. RY*(2) C 38	0.68	1.74	0.044
63. BD (1) C 39 - H 53	/428. RY*(2) C 41	0.58	1.88	0.042
63. BD (1) C 39 - H 53	/626. BD*(1) C 33 - C 38	3.21	0.95	0.070
63. BD (1) C 39 - H 53	/634. BD*(1) C 38 - C 39	0.58	1.16	0.033
63. BD (1) C 39 - H 53	/636. BD*(1) C 38 - H 52	0.56	0.96	0.029
63. BD (1) C 39 - H 53	/639. BD*(1) C 40 - C 41	1.32	1.17	0.050
63. BD (1) C 39 - H 53	/642. BD*(1) C 41 - H 55	0.26	0.96	0.020
64. BD (1) C 40 - C 41	/380. RY*(2) C 35	0.64	2.33	0.049
64. BD (1) C 40 - C 41	/381. RY*(3) C 35	0.35	2.31	0.036
64. BD (1) C 40 - C 41	/412. RY*(2) C 39	0.40	2.09	0.037
64. BD (1) C 40 - C 41	/413. RY*(3) C 39	0.38	2.10	0.036
64. BD (1) C 40 - C 41	/629. BD*(1) C 35 - C 37	1.21	1.19	0.048
64. BD (1) C 40 - C 41	/630. BD*(1) C 35 - C 40	1.40	1.20	0.052
64. BD (1) C 40 - C 41	/637. BD*(1) C 39 - C 41	1.01	1.21	0.044
64. BD (1) C 40 - C 41	/638. BD*(1) C 39 - H 53	0.75	1.19	0.038
64. BD (1) C 40 - C 41	/641. BD*(1) C 40 - H 54	0.85	1.20	0.040
64. BD (1) C 40 - C 41	/642. BD*(1) C 41 - H 55	0.74	1.19	0.038
65. BD (2) C 40 - C 41	/ 54. BD*(2) C 35 - C 37	3.68	0.24	0.051
65. BD (2) C 40 - C 41	/379. RY*(1) C 35	0.38	0.87	0.023
65. BD (2) C 40 - C 41	/411. RY*(1) C 39	0.66	0.77	0.029
65. BD (2) C 40 - C 41	/635. BD*(2) C 38 - C 39	4.63	0.30	0.055
65. BD (2) C 40 - C 41	/640. BD*(2) C 40 - C 41	0.30	0.30	0.014
66. BD (1) C 40 - H 54	/380. RY*(2) C 35	0.70	2.10	0.048
66. BD (1) C 40 - H 54	/428. RY*(2) C 41	0.70	1.88	0.046
66. BD (1) C 40 - H 54	/625. BD*(1) C 33 - C 35	1.74	1.13	0.056
66. BD (1) C 40 - H 54	/637. BD*(1) C 39 - C 41	2.62	0.98	0.064
66. BD (1) C 40 - H 54	/639. BD*(1) C 40 - C 41	0.75	1.17	0.037
66. BD (1) C 40 - H 54	/642. BD*(1) C 41 - H 55	0.46	0.96	0.027
67. BD (1) C 41 - H 55	/412. RY*(2) C 39	0.55	1.86	0.041
67. BD (1) C 41 - H 55	/420. RY*(2) C 40	0.63	1.66	0.041
67. BD (1) C 41 - H 55	/630. BD*(1) C 35 - C 40	3.21	0.96	0.070
67. BD (1) C 41 - H 55	/634. BD*(1) C 38 - C 39	1.32	1.15	0.049
67. BD (1) C 41 - H 55	/638. BD*(1) C 39 - H 53	0.26	0.95	0.020
67. BD (1) C 41 - H 55	/639. BD*(1) C 40 - C 41	0.66	1.16	0.035
67. BD (1) C 41 - H 55	/641. BD*(1) C 40 - H 54	0.50	0.96	0.028
68. BD (1) N 42 - N 43	/395. RY*(1) C 37	0.79	1.87	0.049
68. BD (1) N 42 - N 43	/451. RY*(1) C 44	0.73	2.10	0.049
68. BD (1) N 42 - N 43	/452. RY*(2) C 44	0.86	2.37	0.057
68. BD (1) N 42 - N 43	/631. BD*(1) C 36 - C 37	0.28	1.60	0.027
68. BD (1) N 42 - N 43	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.50	1.35	0.033
68. BD (1) N 42 - N 43	/644. BD*(1) N 43 - C 44	0.34	1.34	0.027
68. BD (1) N 42 - N 43	/645. BD*(1) C 44 - C 45	0.56	1.42	0.036
69. BD (1) N 43 - C 44	/395. RY*(1) C 37	0.28	1.67	0.028
69. BD (1) N 43 - C 44	/435. RY*(1) N 42	0.77	2.67	0.057
69. BD (1) N 43 - C 44	/437. RY*(3) N 42	0.50	2.00	0.040
69. BD (1) N 43 - C 44	/438. RY*(4) N 42	0.28	2.27	0.032
69. BD (1) N 43 - C 44	/459. RY*(1) C 45	0.40	2.05	0.036
69. BD (1) N 43 - C 44	/467. RY*(1) C 46	0.45	1.94	0.037
69. BD (1) N 43 - C 44	/633. BD*(1) C 37 - N 42	2.40	1.16	0.067
69. BD (1) N 43 - C 44	/645. BD*(1) C 44 - C 45	0.33	1.22	0.025
69. BD (1) N 43 - C 44	/646. BD*(1) C 44 - C 46	1.06	1.38	0.049
69. BD (1) N 43 - C 44	/648. BD*(1) C 45 - C 47	0.49	1.42	0.033
69. BD (1) N 43 - C 44	/651. BD*(1) C 46 - C 48	1.29	1.23	0.050
70. BD (1) C 44 - C 45	/443. RY*(1) N 43	0.34	1.52	0.029
70. BD (1) C 44 - C 45	/468. RY*(2) C 46	0.40	2.10	0.037
70. BD (1) C 44 - C 45	/475. RY*(1) C 47	0.41	1.85	0.035
70. BD (1) C 44 - C 45	/476. RY*(2) C 47	0.74	1.98	0.049
70. BD (1) C 44 - C 45	/643. BD*(1) N 42 - N 43	1.58	1.16	0.054
70. BD (1) C 44 - C 45	/644. BD*(1) N 43 - C 44	0.46	1.02	0.027
70. BD (1) C 44 - C 45	/646. BD*(1) C 44 - C 46	1.77	1.25	0.060
70. BD (1) C 44 - C 45	/648. BD*(1) C 45 - C 47	1.23	1.30	0.051
70. BD (1) C 44 - C 45	/650. BD*(1) C 45 - H 56	0.30	1.09	0.023
70. BD (1) C 44 - C 45	/652. BD*(1) C 46 - O 65	2.61	0.98	0.064

70. BD (1) C 44 - C 45	/654. BD*(1) C 47 - H 57	1.43	1.10	0.050
71. BD (1) C 44 - C 46	/445. RY*(3) N 43	0.31	1.86	0.030
71. BD (1) C 44 - C 46	/459. RY*(1) C 45	0.49	2.04	0.040
71. BD (1) C 44 - C 46	/483. RY*(1) C 48	0.70	2.10	0.048
71. BD (1) C 44 - C 46	/644. BD*(1) N 43 - C 44	0.74	1.14	0.037
71. BD (1) C 44 - C 46	/645. BD*(1) C 44 - C 45	1.79	1.21	0.059
71. BD (1) C 44 - C 46	/650. BD*(1) C 45 - H 56	0.65	1.21	0.035
71. BD (1) C 44 - C 46	/651. BD*(1) C 46 - C 48	1.53	1.22	0.055
71. BD (1) C 44 - C 46	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.38	1.09	0.026
71. BD (1) C 44 - C 46	/657. BD*(1) C 48 - H 58	0.62	1.22	0.035
72. BD (2) C 44 - C 46	/444. RY*(2) N 43	0.44	1.10	0.030
72. BD (2) C 44 - C 46	/461. RY*(3) C 45	0.52	0.83	0.028
72. BD (2) C 44 - C 46	/485. RY*(3) C 48	0.53	0.84	0.028
72. BD (2) C 44 - C 46	/542. RY*(2) O 65	0.28	1.37	0.026
72. BD (2) C 44 - C 46	/649. BD*(2) C 45 - C 47	6.40	0.33	0.058
72. BD (2) C 44 - C 46	/656. BD*(2) C 48 - C 49	7.03	0.33	0.061
73. BD (1) C 45 - C 47	/452. RY*(2) C 44	0.95	2.14	0.057
73. BD (1) C 45 - C 47	/491. RY*(1) C 49	0.51	1.94	0.040
73. BD (1) C 45 - C 47	/492. RY*(2) C 49	0.42	2.09	0.037
73. BD (1) C 45 - C 47	/644. BD*(1) N 43 - C 44	1.31	1.12	0.048
73. BD (1) C 45 - C 47	/645. BD*(1) C 44 - C 45	1.16	1.19	0.047
73. BD (1) C 45 - C 47	/650. BD*(1) C 45 - H 56	0.86	1.19	0.041
73. BD (1) C 45 - C 47	/653. BD*(1) C 47 - C 49	1.14	1.21	0.047
73. BD (1) C 45 - C 47	/654. BD*(1) C 47 - H 57	0.76	1.20	0.038
73. BD (1) C 45 - C 47	/658. BD*(1) C 49 - H 59	0.82	1.20	0.040
74. BD (2) C 45 - C 47	/493. RY*(3) C 49	0.53	0.78	0.027
74. BD (2) C 45 - C 47	/647. BD*(2) C 44 - C 46	6.01	0.29	0.057
74. BD (2) C 45 - C 47	/656. BD*(2) C 48 - C 49	6.03	0.31	0.056
75. BD (1) C 45 - H 56	/451. RY*(1) C 44	0.40	1.63	0.032
75. BD (1) C 45 - H 56	/475. RY*(1) C 47	0.62	1.71	0.041
75. BD (1) C 45 - H 56	/644. BD*(1) N 43 - C 44	0.33	0.88	0.021
75. BD (1) C 45 - H 56	/646. BD*(1) C 44 - C 46	1.63	1.11	0.054
75. BD (1) C 45 - H 56	/648. BD*(1) C 45 - C 47	0.76	1.16	0.037
75. BD (1) C 45 - H 56	/653. BD*(1) C 47 - C 49	2.72	0.98	0.065
75. BD (1) C 45 - H 56	/654. BD*(1) C 47 - H 57	0.50	0.96	0.028
76. BD (1) C 46 - C 48	/451. RY*(1) C 44	0.60	1.77	0.041
76. BD (1) C 46 - C 48	/453. RY*(3) C 44	0.27	1.53	0.026
76. BD (1) C 46 - C 48	/491. RY*(1) C 49	0.36	1.84	0.033
76. BD (1) C 46 - C 48	/492. RY*(2) C 49	0.72	1.99	0.048
76. BD (1) C 46 - C 48	/644. BD*(1) N 43 - C 44	2.67	1.02	0.066
76. BD (1) C 46 - C 48	/646. BD*(1) C 44 - C 46	1.71	1.25	0.059
76. BD (1) C 46 - C 48	/655. BD*(1) C 48 - C 49	1.29	1.30	0.052
76. BD (1) C 46 - C 48	/657. BD*(1) C 48 - H 58	0.31	1.10	0.024
76. BD (1) C 46 - C 48	/658. BD*(1) C 49 - H 59	1.53	1.10	0.052
77. BD (1) C 46 - O 65	/451. RY*(1) C 44	0.30	1.96	0.031
77. BD (1) C 46 - O 65	/467. RY*(1) C 46	0.55	2.00	0.042
77. BD (1) C 46 - O 65	/645. BD*(1) C 44 - C 45	1.30	1.28	0.052
77. BD (1) C 46 - O 65	/646. BD*(1) C 44 - C 46	0.72	1.44	0.041
77. BD (1) C 46 - O 65	/651. BD*(1) C 46 - C 48	0.29	1.29	0.025
77. BD (1) C 46 - O 65	/655. BD*(1) C 48 - C 49	0.54	1.49	0.036
78. BD (1) C 47 - C 49	/460. RY*(2) C 45	0.98	1.84	0.054
78. BD (1) C 47 - C 49	/484. RY*(2) C 48	0.98	1.83	0.054
78. BD (1) C 47 - C 49	/648. BD*(1) C 45 - C 47	1.22	1.29	0.050
78. BD (1) C 47 - C 49	/650. BD*(1) C 45 - H 56	1.64	1.09	0.053
78. BD (1) C 47 - C 49	/654. BD*(1) C 47 - H 57	0.29	1.09	0.022
78. BD (1) C 47 - C 49	/655. BD*(1) C 48 - C 49	1.23	1.30	0.051
78. BD (1) C 47 - C 49	/657. BD*(1) C 48 - H 58	1.64	1.10	0.054
78. BD (1) C 47 - C 49	/658. BD*(1) C 49 - H 59	0.29	1.10	0.022
79. BD (1) C 47 - H 57	/459. RY*(1) C 45	0.80	1.79	0.048
79. BD (1) C 47 - H 57	/491. RY*(1) C 49	0.60	1.71	0.041
79. BD (1) C 47 - H 57	/645. BD*(1) C 44 - C 45	3.06	0.96	0.068
79. BD (1) C 47 - H 57	/648. BD*(1) C 45 - C 47	0.68	1.16	0.036
79. BD (1) C 47 - H 57	/650. BD*(1) C 45 - H 56	0.50	0.96	0.028
79. BD (1) C 47 - H 57	/655. BD*(1) C 48 - C 49	1.36	1.17	0.050
80. BD (1) C 48 - C 49	/467. RY*(1) C 46	0.51	1.90	0.039
80. BD (1) C 48 - C 49	/468. RY*(2) C 46	0.54	2.19	0.044
80. BD (1) C 48 - C 49	/475. RY*(1) C 47	0.50	1.94	0.039
80. BD (1) C 48 - C 49	/476. RY*(2) C 47	0.41	2.07	0.037
80. BD (1) C 48 - C 49	/651. BD*(1) C 46 - C 48	0.98	1.19	0.043
80. BD (1) C 48 - C 49	/652. BD*(1) C 46 - O 65	1.16	1.07	0.045
80. BD (1) C 48 - C 49	/653. BD*(1) C 47 - C 49	1.15	1.21	0.047

80. BD (1) C 48 - C 49	/654. BD*(1) C 47 - H 57	0.82	1.19	0.039
80. BD (1) C 48 - C 49	/657. BD*(1) C 48 - H 58	0.91	1.20	0.042
80. BD (1) C 48 - C 49	/658. BD*(1) C 49 - H 59	0.81	1.19	0.039
81. BD (2) C 48 - C 49	/477. RY*(3) C 47	0.52	0.78	0.027
81. BD (2) C 48 - C 49	/647. BD*(2) C 44 - C 46	5.72	0.29	0.055
81. BD (2) C 48 - C 49	/649. BD*(2) C 45 - C 47	7.14	0.31	0.060
82. BD (1) C 48 - H 58	/467. RY*(1) C 46	0.38	1.67	0.032
82. BD (1) C 48 - H 58	/491. RY*(1) C 49	0.57	1.70	0.039
82. BD (1) C 48 - H 58	/646. BD*(1) C 44 - C 46	1.58	1.11	0.053
82. BD (1) C 48 - H 58	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.45	0.83	0.025
82. BD (1) C 48 - H 58	/653. BD*(1) C 47 - C 49	2.75	0.97	0.065
82. BD (1) C 48 - H 58	/655. BD*(1) C 48 - C 49	0.78	1.16	0.038
82. BD (1) C 48 - H 58	/658. BD*(1) C 49 - H 59	0.48	0.96	0.027
83. BD (1) C 49 - H 59	/475. RY*(1) C 47	0.59	1.70	0.040
83. BD (1) C 49 - H 59	/483. RY*(1) C 48	0.83	1.85	0.050
83. BD (1) C 49 - H 59	/648. BD*(1) C 45 - C 47	1.37	1.16	0.050
83. BD (1) C 49 - H 59	/651. BD*(1) C 46 - C 48	2.91	0.96	0.067
83. BD (1) C 49 - H 59	/655. BD*(1) C 48 - C 49	0.71	1.16	0.036
83. BD (1) C 49 - H 59	/657. BD*(1) C 48 - H 58	0.47	0.96	0.027
84. BD (1) O 50 - H 60	/355. RY*(1) C 32	0.90	1.64	0.049
84. BD (1) O 50 - H 60	/356. RY*(2) C 32	0.60	1.51	0.038
84. BD (1) O 50 - H 60	/623. BD*(1) C 32 - C 34	1.61	1.34	0.059
109. CR (1) C 32	/364. RY*(2) C 33	0.56	11.81	0.102
109. CR (1) C 32	/373. RY*(3) C 34	1.07	11.48	0.140
109. CR (1) C 32	/623. BD*(1) C 32 - C 34	0.91	10.74	0.125
109. CR (1) C 32	/624. BD*(1) C 32 - O 50	0.67	10.39	0.106
109. CR (1) C 32	/625. BD*(1) C 33 - C 35	0.29	10.75	0.071
109. CR (1) C 32	/626. BD*(1) C 33 - C 38	0.31	10.57	0.073
109. CR (1) C 32	/627. BD*(1) C 34 - C 36	0.41	10.58	0.083
110. CR (1) C 33	/355. RY*(1) C 32	0.25	10.97	0.067
110. CR (1) C 33	/381. RY*(3) C 35	1.14	11.63	0.145
110. CR (1) C 33	/405. RY*(3) C 38	0.51	11.20	0.096
110. CR (1) C 33	/623. BD*(1) C 32 - C 34	0.28	10.67	0.069
110. CR (1) C 33	/625. BD*(1) C 33 - C 35	0.61	10.68	0.103
110. CR (1) C 33	/629. BD*(1) C 35 - C 37	0.54	10.51	0.097
110. CR (1) C 33	/630. BD*(1) C 35 - C 40	0.49	10.52	0.091
110. CR (1) C 33	/634. BD*(1) C 38 - C 39	0.27	10.71	0.068
111. CR (1) C 34	/357. RY*(3) C 32	1.49	11.48	0.165
111. CR (1) C 34	/390. RY*(4) C 36	0.49	11.17	0.093
111. CR (1) C 34	/508. RY*(2) H 51	0.29	12.28	0.075
111. CR (1) C 34	/621. BD*(1) C 32 - C 33	0.60	10.47	0.101
111. CR (1) C 34	/623. BD*(1) C 32 - C 34	0.29	10.66	0.071
111. CR (1) C 34	/624. BD*(1) C 32 - O 50	0.36	10.32	0.078
111. CR (1) C 34	/631. BD*(1) C 36 - C 37	0.30	10.68	0.072
112. CR (1) C 35	/365. RY*(3) C 33	1.22	11.50	0.150
112. CR (1) C 35	/397. RY*(3) C 37	0.75	11.19	0.116
112. CR (1) C 35	/421. RY*(3) C 40	0.59	11.17	0.103
112. CR (1) C 35	/621. BD*(1) C 32 - C 33	0.51	10.47	0.094
112. CR (1) C 35	/625. BD*(1) C 33 - C 35	0.51	10.67	0.093
112. CR (1) C 35	/626. BD*(1) C 33 - C 38	0.46	10.50	0.089
112. CR (1) C 35	/631. BD*(1) C 36 - C 37	0.32	10.69	0.075
112. CR (1) C 35	/639. BD*(1) C 40 - C 41	0.28	10.71	0.070
113. CR (1) C 36	/396. RY*(2) C 37	0.40	11.13	0.084
113. CR (1) C 36	/397. RY*(3) C 37	0.87	11.17	0.125
113. CR (1) C 36	/398. RY*(4) C 37	0.50	11.09	0.094
113. CR (1) C 36	/528. RY*(2) H 61	0.26	12.34	0.072
113. CR (1) C 36	/623. BD*(1) C 32 - C 34	0.29	10.64	0.070
113. CR (1) C 36	/629. BD*(1) C 35 - C 37	0.64	10.49	0.105
113. CR (1) C 36	/631. BD*(1) C 36 - C 37	0.46	10.67	0.089
113. CR (1) C 36	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.43	10.42	0.085
114. CR (1) C 37	/380. RY*(2) C 35	0.61	11.68	0.107
114. CR (1) C 37	/389. RY*(3) C 36	1.13	11.30	0.142
114. CR (1) C 37	/625. BD*(1) C 33 - C 35	0.35	10.70	0.078
114. CR (1) C 37	/627. BD*(1) C 34 - C 36	0.44	10.54	0.087
114. CR (1) C 37	/630. BD*(1) C 35 - C 40	0.32	10.54	0.074
114. CR (1) C 37	/631. BD*(1) C 36 - C 37	0.67	10.71	0.108
114. CR (1) C 37	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.38	10.59	0.081
115. CR (1) C 38	/364. RY*(2) C 33	0.29	11.72	0.074
115. CR (1) C 38	/413. RY*(3) C 39	1.04	11.39	0.137
115. CR (1) C 38	/510. RY*(2) H 52	0.27	12.26	0.073
115. CR (1) C 38	/621. BD*(1) C 32 - C 33	0.33	10.45	0.075

115. CR (1) C 38	/625. BD*(1) C 33 - C 35	0.36	10.65	0.078
115. CR (1) C 38	/634. BD*(1) C 38 - C 39	0.39	10.68	0.082
115. CR (1) C 38	/637. BD*(1) C 39 - C 41	0.49	10.50	0.091
116. CR (1) C 39	/404. RY*(2) C 38	0.34	11.26	0.078
116. CR (1) C 39	/405. RY*(3) C 38	0.65	11.17	0.107
116. CR (1) C 39	/406. RY*(4) C 38	0.40	11.07	0.084
116. CR (1) C 39	/429. RY*(3) C 41	0.38	11.40	0.083
116. CR (1) C 39	/512. RY*(2) H 53	0.33	12.30	0.080
116. CR (1) C 39	/626. BD*(1) C 33 - C 38	0.60	10.48	0.101
116. CR (1) C 39	/634. BD*(1) C 38 - C 39	0.39	10.68	0.082
116. CR (1) C 39	/639. BD*(1) C 40 - C 41	0.29	10.69	0.070
117. CR (1) C 40	/381. RY*(3) C 35	0.38	11.59	0.084
117. CR (1) C 40	/429. RY*(3) C 41	1.05	11.39	0.138
117. CR (1) C 40	/625. BD*(1) C 33 - C 35	0.41	10.64	0.084
117. CR (1) C 40	/629. BD*(1) C 35 - C 37	0.34	10.47	0.076
117. CR (1) C 40	/637. BD*(1) C 39 - C 41	0.50	10.49	0.092
117. CR (1) C 40	/639. BD*(1) C 40 - C 41	0.39	10.68	0.082
118. CR (1) C 41	/413. RY*(3) C 39	0.38	11.38	0.083
118. CR (1) C 41	/420. RY*(2) C 40	0.33	11.18	0.077
118. CR (1) C 41	/421. RY*(3) C 40	0.45	11.14	0.090
118. CR (1) C 41	/422. RY*(4) C 40	0.65	11.11	0.107
118. CR (1) C 41	/516. RY*(2) H 55	0.32	12.30	0.080
118. CR (1) C 41	/630. BD*(1) C 35 - C 40	0.61	10.48	0.102
118. CR (1) C 41	/634. BD*(1) C 38 - C 39	0.29	10.67	0.070
118. CR (1) C 41	/639. BD*(1) C 40 - C 41	0.43	10.68	0.086
119. CR (1) N 42	/395. RY*(1) C 37	0.43	15.09	0.102
119. CR (1) N 42	/396. RY*(2) C 37	0.71	15.28	0.132
119. CR (1) N 42	/445. RY*(3) N 43	0.87	15.28	0.145
119. CR (1) N 42	/629. BD*(1) C 35 - C 37	0.29	14.64	0.083
119. CR (1) N 42	/631. BD*(1) C 36 - C 37	0.27	14.82	0.081
119. CR (1) N 42	/644. BD*(1) N 43 - C 44	0.70	14.56	0.129
120. CR (1) N 43	/437. RY*(3) N 42	1.01	15.44	0.158
120. CR (1) N 43	/451. RY*(1) C 44	0.73	15.34	0.134
120. CR (1) N 43	/452. RY*(2) C 44	0.34	15.61	0.092
120. CR (1) N 43	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.62	14.60	0.121
120. CR (1) N 43	/646. BD*(1) C 44 - C 46	0.37	14.82	0.095
121. CR (1) C 44	/460. RY*(2) C 45	0.50	11.30	0.095
121. CR (1) C 44	/467. RY*(1) C 46	0.53	11.26	0.097
121. CR (1) C 44	/468. RY*(2) C 46	1.11	11.55	0.143
121. CR (1) C 44	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.47	10.61	0.090
121. CR (1) C 44	/646. BD*(1) C 44 - C 46	0.61	10.71	0.103
121. CR (1) C 44	/648. BD*(1) C 45 - C 47	0.29	10.75	0.070
121. CR (1) C 44	/651. BD*(1) C 46 - C 48	0.49	10.55	0.092
121. CR (1) C 44	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.40	10.43	0.083
122. CR (1) C 45	/451. RY*(1) C 44	0.38	11.16	0.082
122. CR (1) C 45	/453. RY*(3) C 44	0.31	10.93	0.073
122. CR (1) C 45	/476. RY*(2) C 47	1.05	11.37	0.138
122. CR (1) C 45	/518. RY*(2) H 56	0.31	12.30	0.078
122. CR (1) C 45	/644. BD*(1) N 43 - C 44	0.26	10.41	0.066
122. CR (1) C 45	/646. BD*(1) C 44 - C 46	0.39	10.64	0.083
122. CR (1) C 45	/648. BD*(1) C 45 - C 47	0.43	10.69	0.086
122. CR (1) C 45	/653. BD*(1) C 47 - C 49	0.52	10.51	0.094
123. CR (1) C 46	/452. RY*(2) C 44	1.53	11.51	0.168
123. CR (1) C 46	/484. RY*(2) C 48	0.53	11.30	0.098
123. CR (1) C 46	/644. BD*(1) N 43 - C 44	0.45	10.48	0.088
123. CR (1) C 46	/645. BD*(1) C 44 - C 45	0.50	10.56	0.092
123. CR (1) C 46	/646. BD*(1) C 44 - C 46	0.75	10.72	0.115
123. CR (1) C 46	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.42	10.44	0.085
123. CR (1) C 46	/655. BD*(1) C 48 - C 49	0.30	10.77	0.072
124. CR (1) C 47	/459. RY*(1) C 45	0.40	11.31	0.085
124. CR (1) C 47	/460. RY*(2) C 45	0.80	11.23	0.119
124. CR (1) C 47	/492. RY*(2) C 49	0.47	11.38	0.093
124. CR (1) C 47	/520. RY*(2) H 57	0.33	12.00	0.079
124. CR (1) C 47	/645. BD*(1) C 44 - C 45	0.57	10.48	0.098
124. CR (1) C 47	/648. BD*(1) C 45 - C 47	0.38	10.69	0.080
124. CR (1) C 47	/655. BD*(1) C 48 - C 49	0.30	10.69	0.072
125. CR (1) C 48	/468. RY*(2) C 46	0.55	11.48	0.101
125. CR (1) C 48	/469. RY*(3) C 46	0.32	10.96	0.074
125. CR (1) C 48	/492. RY*(2) C 49	1.04	11.38	0.137
125. CR (1) C 48	/522. RY*(2) H 58	0.27	12.33	0.073
125. CR (1) C 48	/646. BD*(1) C 44 - C 46	0.43	10.64	0.087

125. CR (1) C 48	/653. BD*(1) C 47 - C 49	0.53	10.50	0.095
125. CR (1) C 48	/655. BD*(1) C 48 - C 49	0.44	10.69	0.087
126. CR (1) C 49	/476. RY*(2) C 47	0.47	11.37	0.092
126. CR (1) C 49	/483. RY*(1) C 48	0.47	11.37	0.092
126. CR (1) C 49	/484. RY*(2) C 48	0.80	11.22	0.119
126. CR (1) C 49	/524. RY*(2) H 59	0.30	11.95	0.076
126. CR (1) C 49	/648. BD*(1) C 45 - C 47	0.30	10.68	0.072
126. CR (1) C 49	/651. BD*(1) C 46 - C 48	0.52	10.48	0.094
126. CR (1) C 49	/655. BD*(1) C 48 - C 49	0.39	10.69	0.082
127. CR (1) O 50	/355. RY*(1) C 32	0.76	19.88	0.156
127. CR (1) O 50	/356. RY*(2) C 32	0.33	19.75	0.101
127. CR (1) O 50	/526. RY*(2) H 60	0.31	20.89	0.101
127. CR (1) O 50	/621. BD*(1) C 32 - C 33	0.25	19.39	0.089
129. CR (1) O 65	/467. RY*(1) C 46	1.46	20.05	0.216
129. CR (1) O 65	/646. BD*(1) C 44 - C 46	0.32	19.50	0.101
151. LP (1) N 42	/ 54. BD*(2) C 35 - C 37	0.87	0.25	0.025
151. LP (1) N 42	/443. RY*(1) N 43	0.50	1.16	0.031
151. LP (1) N 42	/444. RY*(2) N 43	1.11	1.10	0.045
151. LP (1) N 42	/627. BD*(1) C 34 - C 36	0.27	0.75	0.018
151. LP (1) N 42	/629. BD*(1) C 35 - C 37	3.09	0.74	0.061
151. LP (1) N 42	/631. BD*(1) C 36 - C 37	3.31	0.92	0.071
152. LP (2) N 42	/ 54. BD*(2) C 35 - C 37	2.21	0.40	0.050
152. LP (2) N 42	/395. RY*(1) C 37	0.73	1.34	0.041
152. LP (2) N 42	/435. RY*(1) N 42	1.62	2.34	0.080
152. LP (2) N 42	/436. RY*(2) N 42	0.30	1.39	0.027
152. LP (2) N 42	/437. RY*(3) N 42	0.61	1.67	0.041
152. LP (2) N 42	/444. RY*(2) N 43	0.35	1.26	0.027
152. LP (2) N 42	/541. RY*(1) O 65	0.57	2.83	0.052
152. LP (2) N 42	/629. BD*(1) C 35 - C 37	1.73	0.89	0.050
153. LP (1) N 43	/437. RY*(3) N 42	0.42	1.63	0.033
153. LP (1) N 43	/451. RY*(1) C 44	0.96	1.53	0.049
153. LP (1) N 43	/645. BD*(1) C 44 - C 45	0.54	0.85	0.027
153. LP (1) N 43	/646. BD*(1) C 44 - C 46	3.76	1.01	0.078
154. LP (2) N 43	/436. RY*(2) N 42	0.96	1.22	0.045
154. LP (2) N 43	/454. RY*(4) C 44	0.32	0.92	0.023
154. LP (2) N 43	/647. BD*(2) C 44 - C 46	15.70	0.29	0.091
155. LP (1) O 50	/355. RY*(1) C 32	0.97	1.52	0.049
155. LP (1) O 50	/356. RY*(2) C 32	0.51	1.39	0.034
155. LP (1) O 50	/621. BD*(1) C 32 - C 33	3.24	1.02	0.073
156. LP (2) O 50	/622. BD*(2) C 32 - C 33	7.52	0.29	0.080
159. LP (1) O 65	/467. RY*(1) C 46	1.23	1.73	0.059
159. LP (1) O 65	/646. BD*(1) C 44 - C 46	3.45	1.17	0.080
160. LP (2) O 65	/435. RY*(1) N 42	0.30	2.35	0.034
160. LP (2) O 65	/467. RY*(1) C 46	0.66	1.62	0.042
160. LP (2) O 65	/541. RY*(1) O 65	0.81	2.85	0.062
160. LP (2) O 65	/646. BD*(1) C 44 - C 46	0.53	1.06	0.030
160. LP (2) O 65	/651. BD*(1) C 46 - C 48	3.94	0.91	0.076
161. LP (3) O 65	/647. BD*(2) C 44 - C 46	12.34	0.33	0.087
622. BD*(2) C 32 - C 33	/ 54. BD*(2) C 35 - C 37	400.09	0.01	0.082
622. BD*(2) C 32 - C 33	/356. RY*(2) C 32	0.50	0.83	0.037
622. BD*(2) C 32 - C 33	/363. RY*(1) C 33	0.88	0.63	0.043
622. BD*(2) C 32 - C 33	/371. RY*(1) C 34	1.02	0.54	0.042
622. BD*(2) C 32 - C 33	/379. RY*(1) C 35	0.56	0.64	0.034
622. BD*(2) C 32 - C 33	/403. RY*(1) C 38	0.35	0.58	0.026
622. BD*(2) C 32 - C 33	/499. RY*(1) O 50	0.36	0.92	0.033
622. BD*(2) C 32 - C 33	/635. BD*(2) C 38 - C 39	41.03	0.07	0.075
635. BD*(2) C 38 - C 39	/403. RY*(1) C 38	2.27	0.52	0.076
635. BD*(2) C 38 - C 39	/411. RY*(1) C 39	2.04	0.47	0.069
640. BD*(2) C 40 - C 41	/419. RY*(1) C 40	1.78	0.61	0.073
640. BD*(2) C 40 - C 41	/427. RY*(1) C 41	2.15	0.47	0.071
647. BD*(2) C 44 - C 46	/454. RY*(4) C 44	0.75	0.63	0.058
647. BD*(2) C 44 - C 46	/470. RY*(4) C 46	0.55	0.74	0.054
647. BD*(2) C 44 - C 46	/649. BD*(2) C 45 - C 47	62.76	0.02	0.071
647. BD*(2) C 44 - C 46	/656. BD*(2) C 48 - C 49	55.32	0.02	0.073
649. BD*(2) C 45 - C 47	/461. RY*(3) C 45	0.88	0.51	0.075
649. BD*(2) C 45 - C 47	/477. RY*(3) C 47	0.93	0.47	0.074
656. BD*(2) C 48 - C 49	/485. RY*(3) C 48	1.02	0.51	0.078
656. BD*(2) C 48 - C 49	/493. RY*(3) C 49	0.98	0.46	0.073

from unit 2 to unit 3

50. BD*(2) C 34 - C 36	/660. BD*(1) O 62 - H 63	0.05	0.39	0.007

56. BD (1) C 36 - C 37	/532. RY*(4) O 62	0.03	2.13	0.010
68. BD (1) N 42 - N 43	/529. RY*(1) O 62	0.03	3.00	0.012
69. BD (1) N 43 - C 44	/529. RY*(1) O 62	0.04	2.81	0.014
151. LP (1) N 42	/529. RY*(1) O 62	0.06	2.32	0.015
152. LP (2) N 42	/529. RY*(1) O 62	0.99	2.47	0.064
152. LP (2) N 42	/531. RY*(3) O 62	0.15	1.80	0.021
152. LP (2) N 42	/532. RY*(4) O 62	0.35	1.81	0.032
152. LP (2) N 42	/537. RY*(1) H 63	0.32	1.00	0.023
152. LP (2) N 42	/539. RY*(1) H 64	0.24	1.01	0.020
159. LP (1) O 65	/529. RY*(1) O 62	0.17	2.60	0.027
159. LP (1) O 65	/531. RY*(3) O 62	0.04	1.93	0.011
159. LP (1) O 65	/532. RY*(4) O 62	0.07	1.93	0.015
159. LP (1) O 65	/537. RY*(1) H 63	0.06	1.12	0.011
159. LP (1) O 65	/539. RY*(1) H 64	0.06	1.13	0.010
160. LP (2) O 65	/529. RY*(1) O 62	0.39	2.49	0.040
160. LP (2) O 65	/531. RY*(3) O 62	0.13	1.82	0.020
160. LP (2) O 65	/532. RY*(4) O 62	0.20	1.82	0.024
160. LP (2) O 65	/537. RY*(1) H 63	0.14	1.01	0.015
160. LP (2) O 65	/539. RY*(1) H 64	0.10	1.02	0.013
160. LP (2) O 65	/660. BD*(1) O 62 - H 63	0.03	0.79	0.006
161. LP (3) O 65	/529. RY*(1) O 62	0.10	2.34	0.020
161. LP (3) O 65	/531. RY*(3) O 62	0.03	1.67	0.010
161. LP (3) O 65	/532. RY*(4) O 62	0.06	1.67	0.013

from unit 2 to unit 4

52. BD (1) C 35 - C 37	/551. RY*(1) H 67	0.03	1.28	0.008
53. BD (2) C 35 - C 37	/663. BD*(1) H 67 - O 68	0.17	0.61	0.013
66. BD (1) C 40 - H 54	/662. BD*(1) H 66 - O 68	0.03	0.85	0.006
68. BD (1) N 42 - N 43	/553. RY*(1) O 68	0.03	2.90	0.011
69. BD (1) N 43 - C 44	/553. RY*(1) O 68	0.03	2.70	0.012
151. LP (1) N 42	/553. RY*(1) O 68	0.03	2.22	0.011
152. LP (2) N 42	/549. RY*(1) H 66	0.37	1.14	0.027
152. LP (2) N 42	/551. RY*(1) H 67	0.41	1.07	0.027
152. LP (2) N 42	/553. RY*(1) O 68	0.90	2.37	0.060
152. LP (2) N 42	/556. RY*(4) O 68	0.35	2.25	0.036
152. LP (2) N 42	/662. BD*(1) H 66 - O 68	0.03	0.78	0.007
152. LP (2) N 42	/663. BD*(1) H 67 - O 68	0.08	0.78	0.010
159. LP (1) O 65	/549. RY*(1) H 66	0.07	1.26	0.012
159. LP (1) O 65	/551. RY*(1) H 67	0.12	1.20	0.015
159. LP (1) O 65	/553. RY*(1) O 68	0.20	2.50	0.029
159. LP (1) O 65	/556. RY*(4) O 68	0.07	2.37	0.016
160. LP (2) O 65	/549. RY*(1) H 66	0.15	1.15	0.017
160. LP (2) O 65	/551. RY*(1) H 67	0.23	1.09	0.020
160. LP (2) O 65	/553. RY*(1) O 68	0.49	2.39	0.044
160. LP (2) O 65	/556. RY*(4) O 68	0.21	2.26	0.028
161. LP (3) O 65	/549. RY*(1) H 66	0.12	1.00	0.015
161. LP (3) O 65	/553. RY*(1) O 68	0.12	2.24	0.021
161. LP (3) O 65	/556. RY*(4) O 68	0.04	2.11	0.011
161. LP (3) O 65	/662. BD*(1) H 66 - O 68	0.13	0.64	0.012
640. BD*(2) C 40 - C 41	/662. BD*(1) H 66 - O 68	0.07	0.32	0.011

from unit 2 to unit 5

52. BD (1) C 35 - C 37	/166. LP (6)Mn 69	0.07	1.42	0.014
52. BD (1) C 35 - C 37	/167. LP*(7)Mn 69	0.03	1.19	0.007
53. BD (2) C 35 - C 37	/561. RY*(1)Mn 69	0.03	2.07	0.010
56. BD (1) C 36 - C 37	/167. LP*(7)Mn 69	0.03	1.31	0.008
56. BD (1) C 36 - C 37	/561. RY*(1)Mn 69	0.05	2.56	0.014
56. BD (1) C 36 - C 37	/570. RY*(10)Mn 69	0.03	9.53	0.021
58. BD (1) C 37 - N 42	/166. LP (6)Mn 69	0.60	1.54	0.041
58. BD (1) C 37 - N 42	/167. LP*(7)Mn 69	0.05	1.32	0.010
58. BD (1) C 37 - N 42	/168. LP*(8)Mn 69	0.06	2.61	0.016
58. BD (1) C 37 - N 42	/169. LP*(9)Mn 69	0.04	2.53	0.013
58. BD (1) C 37 - N 42	/566. RY*(6)Mn 69	0.05	2.54	0.014
58. BD (1) C 37 - N 42	/567. RY*(7)Mn 69	0.03	2.79	0.011
58. BD (1) C 37 - N 42	/568. RY*(8)Mn 69	0.06	7.46	0.027
68. BD (1) N 42 - N 43	/166. LP (6)Mn 69	0.78	1.74	0.050
68. BD (1) N 42 - N 43	/167. LP*(7)Mn 69	0.04	1.51	0.009
68. BD (1) N 42 - N 43	/169. LP*(9)Mn 69	0.13	2.72	0.024
68. BD (1) N 42 - N 43	/561. RY*(1)Mn 69	0.03	2.77	0.011
68. BD (1) N 42 - N 43	/562. RY*(2)Mn 69	0.15	3.96	0.031
68. BD (1) N 42 - N 43	/565. RY*(5)Mn 69	0.04	2.78	0.013

68. BD (1) N 42 - N 43	/568. RY*(8)Mn 69	0.03	7.66	0.019
68. BD (1) N 42 - N 43	/570. RY*(10)Mn 69	0.04	9.74	0.025
68. BD (1) N 42 - N 43	/580. RY*(20)Mn 69	0.03	149.94	0.089
68. BD (1) N 42 - N 43	/581. RY*(21)Mn 69	0.05	39.35	0.058
69. BD (1) N 43 - C 44	/166. LP (6)Mn 69	0.12	1.54	0.018
69. BD (1) N 43 - C 44	/167. LP*(7)Mn 69	0.04	1.32	0.010
69. BD (1) N 43 - C 44	/561. RY*(1)Mn 69	0.04	2.57	0.014
69. BD (1) N 43 - C 44	/562. RY*(2)Mn 69	0.09	3.77	0.023
69. BD (1) N 43 - C 44	/570. RY*(10)Mn 69	0.09	9.54	0.036
69. BD (1) N 43 - C 44	/578. RY*(18)Mn 69	0.04	679.51	0.197
69. BD (1) N 43 - C 44	/580. RY*(20)Mn 69	0.07	149.75	0.126
69. BD (1) N 43 - C 44	/581. RY*(21)Mn 69	0.12	39.15	0.088
70. BD (1) C 44 - C 45	/166. LP (6)Mn 69	0.03	1.42	0.008
71. BD (1) C 44 - C 46	/166. LP (6)Mn 69	0.13	1.53	0.019
71. BD (1) C 44 - C 46	/167. LP*(7)Mn 69	0.03	1.31	0.008
71. BD (1) C 44 - C 46	/562. RY*(2)Mn 69	0.03	3.76	0.013
71. BD (1) C 44 - C 46	/581. RY*(21)Mn 69	0.03	39.14	0.044
76. BD (1) C 46 - C 48	/166. LP (6)Mn 69	0.19	1.41	0.022
76. BD (1) C 46 - C 48	/167. LP*(7)Mn 69	0.06	1.19	0.010
76. BD (1) C 46 - C 48	/562. RY*(2)Mn 69	0.03	3.64	0.014
76. BD (1) C 46 - C 48	/581. RY*(21)Mn 69	0.03	39.02	0.045
77. BD (1) C 46 - O 65	/166. LP (6)Mn 69	0.67	1.60	0.044
77. BD (1) C 46 - O 65	/168. LP*(8)Mn 69	0.09	2.67	0.020
77. BD (1) C 46 - O 65	/169. LP*(9)Mn 69	0.15	2.58	0.025
77. BD (1) C 46 - O 65	/562. RY*(2)Mn 69	0.03	3.83	0.014
77. BD (1) C 46 - O 65	/564. RY*(4)Mn 69	0.03	3.03	0.013
77. BD (1) C 46 - O 65	/568. RY*(8)Mn 69	0.04	7.52	0.022
77. BD (1) C 46 - O 65	/571. RY*(11)Mn 69	0.05	6.92	0.023
114. CR (1) C 37	/166. LP (6)Mn 69	0.03	10.85	0.022
119. CR (1) N 42	/166. LP (6)Mn 69	0.99	14.95	0.165
120. CR (1) N 43	/166. LP (6)Mn 69	0.03	14.98	0.031
123. CR (1) C 46	/166. LP (6)Mn 69	0.05	10.88	0.033
129. CR (1) O 65	/166. LP (6)Mn 69	1.23	19.66	0.211
151. LP (1) N 42	/166. LP (6)Mn 69	0.94	1.06	0.042
151. LP (1) N 42	/168. LP*(8)Mn 69	0.05	2.12	0.014
151. LP (1) N 42	/562. RY*(2)Mn 69	0.13	3.28	0.027
151. LP (1) N 42	/575. RY*(15)Mn 69	0.03	5.85	0.018
151. LP (1) N 42	/578. RY*(18)Mn 69	0.03	679.02	0.172
151. LP (1) N 42	/580. RY*(20)Mn 69	0.05	149.26	0.114
151. LP (1) N 42	/581. RY*(21)Mn 69	0.09	38.67	0.078
152. LP (2) N 42	/166. LP (6)Mn 69	18.47	1.21	0.197
152. LP (2) N 42	/167. LP*(7)Mn 69	0.15	0.99	0.016
152. LP (2) N 42	/168. LP*(8)Mn 69	0.30	2.28	0.034
152. LP (2) N 42	/561. RY*(1)Mn 69	0.65	2.24	0.049
152. LP (2) N 42	/562. RY*(2)Mn 69	2.74	3.44	0.126
152. LP (2) N 42	/564. RY*(4)Mn 69	0.09	2.64	0.020
152. LP (2) N 42	/565. RY*(5)Mn 69	0.15	2.26	0.023
152. LP (2) N 42	/566. RY*(6)Mn 69	0.04	2.21	0.012
152. LP (2) N 42	/567. RY*(7)Mn 69	0.32	2.46	0.036
152. LP (2) N 42	/570. RY*(10)Mn 69	0.09	9.21	0.038
152. LP (2) N 42	/574. RY*(14)Mn 69	0.07	6.37	0.027
152. LP (2) N 42	/575. RY*(15)Mn 69	0.18	6.00	0.042
152. LP (2) N 42	/578. RY*(18)Mn 69	0.62	679.17	0.844
152. LP (2) N 42	/580. RY*(20)Mn 69	1.24	149.41	0.559
152. LP (2) N 42	/581. RY*(21)Mn 69	2.31	38.82	0.388
153. LP (1) N 43	/166. LP (6)Mn 69	0.21	1.17	0.021
153. LP (1) N 43	/561. RY*(1)Mn 69	0.06	2.20	0.015
153. LP (1) N 43	/565. RY*(5)Mn 69	0.03	2.22	0.010
159. LP (1) O 65	/166. LP (6)Mn 69	5.04	1.34	0.110
159. LP (1) O 65	/167. LP*(7)Mn 69	0.13	1.11	0.015
159. LP (1) O 65	/168. LP*(8)Mn 69	0.08	2.40	0.017
159. LP (1) O 65	/561. RY*(1)Mn 69	0.14	2.36	0.023
159. LP (1) O 65	/562. RY*(2)Mn 69	0.64	3.56	0.061
159. LP (1) O 65	/563. RY*(3)Mn 69	0.03	2.34	0.010
159. LP (1) O 65	/567. RY*(7)Mn 69	0.14	2.58	0.024
159. LP (1) O 65	/575. RY*(15)Mn 69	0.03	6.13	0.018
159. LP (1) O 65	/578. RY*(18)Mn 69	0.15	679.30	0.412
159. LP (1) O 65	/580. RY*(20)Mn 69	0.27	149.54	0.254
159. LP (1) O 65	/581. RY*(21)Mn 69	0.48	38.95	0.175
160. LP (2) O 65	/166. LP (6)Mn 69	12.37	1.23	0.164
160. LP (2) O 65	/167. LP*(7)Mn 69	0.60	1.00	0.031

160.	LP	(2)	O	65	/168.	LP*	(8)Mn	69	0.88	2.29	0.058
160.	LP	(2)	O	65	/169.	LP*	(9)Mn	69	0.03	2.21	0.011
160.	LP	(2)	O	65	/561.	RY*	(1)Mn	69	0.12	2.25	0.021
160.	LP	(2)	O	65	/562.	RY*	(2)Mn	69	1.23	3.45	0.084
160.	LP	(2)	O	65	/563.	RY*	(3)Mn	69	0.03	2.23	0.011
160.	LP	(2)	O	65	/567.	RY*	(7)Mn	69	0.28	2.47	0.034
160.	LP	(2)	O	65	/573.	RY*	(13)Mn	69	0.09	8.16	0.035
160.	LP	(2)	O	65	/575.	RY*	(15)Mn	69	0.13	6.02	0.036
160.	LP	(2)	O	65	/578.	RY*	(18)Mn	69	0.35	679.19	0.630
160.	LP	(2)	O	65	/579.	RY*	(19)Mn	69	0.03	27.52	0.035
160.	LP	(2)	O	65	/580.	RY*	(20)Mn	69	0.69	149.43	0.412
160.	LP	(2)	O	65	/581.	RY*	(21)Mn	69	1.28	38.84	0.287
161.	LP	(3)	O	65	/166.	LP	(6)Mn	69	3.67	1.07	0.082
161.	LP	(3)	O	65	/167.	LP*	(7)Mn	69	0.49	0.85	0.027
161.	LP	(3)	O	65	/168.	LP*	(8)Mn	69	0.11	2.14	0.020
161.	LP	(3)	O	65	/169.	LP*	(9)Mn	69	0.09	2.05	0.017
161.	LP	(3)	O	65	/561.	RY*	(1)Mn	69	0.12	2.10	0.021
161.	LP	(3)	O	65	/562.	RY*	(2)Mn	69	0.34	3.30	0.044
161.	LP	(3)	O	65	/567.	RY*	(7)Mn	69	0.05	2.32	0.015
161.	LP	(3)	O	65	/575.	RY*	(15)Mn	69	0.04	5.87	0.020
161.	LP	(3)	O	65	/578.	RY*	(18)Mn	69	0.09	679.04	0.316
161.	LP	(3)	O	65	/580.	RY*	(20)Mn	69	0.18	149.28	0.215
161.	LP	(3)	O	65	/581.	RY*	(21)Mn	69	0.35	38.68	0.151

from unit 3 to unit 1

85.	BD	(1)	O	62 - H 63	/253.	RY*	(1) N	11	0.10	2.13	0.019
85.	BD	(1)	O	62 - H 63	/254.	RY*	(2) N	11	0.04	2.18	0.012
85.	BD	(1)	O	62 - H 63	/255.	RY*	(3) N	11	0.05	2.04	0.013
85.	BD	(1)	O	62 - H 63	/256.	RY*	(4) N	11	0.05	2.30	0.013
85.	BD	(1)	O	62 - H 63	/264.	RY*	(4) N	12	0.03	2.41	0.011
85.	BD	(1)	O	62 - H 63	/289.	RY*	(5) C	15	0.03	4.22	0.015
85.	BD	(1)	O	62 - H 63	/610.	BD*	(2) C	13 - C 15	0.03	0.80	0.007
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/253.	RY*	(1) N	11	0.06	2.13	0.014
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/254.	RY*	(2) N	11	0.03	2.19	0.010
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/255.	RY*	(3) N	11	0.03	2.05	0.010
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/285.	RY*	(1) C	15	0.04	1.94	0.011
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/301.	RY	(1) C	17	0.03	1.28	0.007
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/317.	RY*	(1) O	19	0.04	3.15	0.014
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/610.	BD*	(2) C	13 - C 15	0.04	0.80	0.008
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/614.	BD*	(1) C	15 - O 19	0.07	1.10	0.011
157.	LP	(1)	O	62	/269.	RY*	(1) C	13	0.03	1.55	0.008
157.	LP	(1)	O	62	/286.	RY*	(2) C	15	0.05	1.21	0.010
157.	LP	(1)	O	62	/596.	BD*	(1) C	6 - N 11	0.06	0.82	0.009
157.	LP	(1)	O	62	/614.	BD*	(1) C	15 - O 19	0.06	0.77	0.009
158.	LP	(2)	O	62	/213.	RY*	(1) C	6	0.03	1.53	0.009
158.	LP	(2)	O	62	/214.	RY*	(2) C	6	0.16	1.81	0.021
158.	LP	(2)	O	62	/216.	RY*	(4) C	6	0.08	1.69	0.015
158.	LP	(2)	O	62	/218.	RY*	(6) C	6	0.04	3.86	0.016
158.	LP	(2)	O	62	/253.	RY*	(1) N	11	0.59	2.00	0.044
158.	LP	(2)	O	62	/254.	RY*	(2) N	11	0.36	2.05	0.034
158.	LP	(2)	O	62	/255.	RY*	(3) N	11	0.21	1.91	0.025
158.	LP	(2)	O	62	/256.	RY*	(4) N	11	0.15	2.18	0.023
158.	LP	(2)	O	62	/264.	RY*	(4) N	12	0.03	2.28	0.011
158.	LP	(2)	O	62	/271.	RY*	(3) C	13	0.03	1.46	0.009
158.	LP	(2)	O	62	/285.	RY*	(1) C	15	0.19	1.81	0.024
158.	LP	(2)	O	62	/286.	RY*	(2) C	15	0.09	1.40	0.014
158.	LP	(2)	O	62	/289.	RY*	(5) C	15	0.12	4.09	0.028
158.	LP	(2)	O	62	/317.	RY*	(1) O	19	0.46	3.02	0.048
158.	LP	(2)	O	62	/319.	RY*	(3) O	19	0.05	1.98	0.013
158.	LP	(2)	O	62	/320.	RY*	(4) O	19	0.03	2.45	0.010
158.	LP	(2)	O	62	/596.	BD*	(1) C	6 - N 11	0.06	1.02	0.010
158.	LP	(2)	O	62	/614.	BD*	(1) C	15 - O 19	0.03	0.97	0.007

from unit 3 to unit 2

85.	BD	(1)	O	62 - H 63	/387.	RY*	(1) C	36	0.05	1.30	0.010
85.	BD	(1)	O	62 - H 63	/388.	RY*	(2) C	36	0.04	2.02	0.011
85.	BD	(1)	O	62 - H 63	/397.	RY*	(3) C	37	0.05	1.90	0.013
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/ 50.	BD*	(2) C	34 - C 36	0.04	0.72	0.011
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/387.	RY*	(1) C	36	0.04	1.31	0.009
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/388.	RY*	(2) C	36	0.06	2.03	0.014
86.	BD	(1)	O	62 - H 64	/435.	RY*	(1) N	42	0.06	2.67	0.016

86. BD (1) O 62 - H 64	/437. RY*(3) N 42	0.10	2.00	0.018
157. LP (1) O 62	/ 50. BD*(2) C 34 - C 36	0.11	0.39	0.013
157. LP (1) O 62	/ 54. BD*(2) C 35 - C 37	0.09	0.40	0.011
158. LP (2) O 62	/ 54. BD*(2) C 35 - C 37	0.08	0.60	0.012
158. LP (2) O 62	/395. RY*(1) C 37	0.04	1.54	0.010
158. LP (2) O 62	/396. RY*(2) C 37	0.14	1.73	0.020
158. LP (2) O 62	/400. RY*(6) C 37	0.08	3.78	0.022
158. LP (2) O 62	/435. RY*(1) N 42	0.47	2.54	0.044
158. LP (2) O 62	/436. RY*(2) N 42	0.07	1.59	0.014
158. LP (2) O 62	/437. RY*(3) N 42	0.40	1.87	0.035
158. LP (2) O 62	/438. RY*(4) N 42	0.09	2.14	0.017
158. LP (2) O 62	/443. RY*(1) N 43	0.03	1.51	0.009
158. LP (2) O 62	/444. RY*(2) N 43	0.03	1.45	0.008
158. LP (2) O 62	/445. RY*(3) N 43	0.11	1.73	0.018
158. LP (2) O 62	/467. RY*(1) C 46	0.13	1.80	0.020
158. LP (2) O 62	/468. RY*(2) C 46	0.04	2.09	0.012
158. LP (2) O 62	/470. RY*(4) C 46	0.05	1.40	0.010
158. LP (2) O 62	/471. RY*(5) C 46	0.04	5.49	0.018
158. LP (2) O 62	/541. RY*(1) O 65	0.15	3.03	0.027
158. LP (2) O 62	/543. RY*(3) O 65	0.05	2.04	0.013
158. LP (2) O 62	/544. RY*(4) O 65	0.04	2.33	0.012
158. LP (2) O 62	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.05	1.02	0.009
158. LP (2) O 62	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.18	1.15	0.018
within unit 3				
128. CR (1) O 62	/538. RY*(2) H 63	0.40	21.17	0.116
128. CR (1) O 62	/540. RY*(2) H 64	0.41	21.21	0.118
158. LP (2) O 62	/529. RY*(1) O 62	2.53	2.67	0.105
158. LP (2) O 62	/531. RY*(3) O 62	0.31	2.00	0.032
158. LP (2) O 62	/532. RY*(4) O 62	0.45	2.00	0.038
158. LP (2) O 62	/537. RY*(1) H 63	0.95	1.20	0.043
158. LP (2) O 62	/538. RY*(2) H 63	0.31	2.85	0.038
158. LP (2) O 62	/539. RY*(1) H 64	1.02	1.21	0.045
158. LP (2) O 62	/540. RY*(2) H 64	0.32	2.90	0.039
from unit 3 to unit 4				
85. BD (1) O 62 - H 63	/549. RY*(1) H 66	0.03	1.46	0.009
85. BD (1) O 62 - H 63	/551. RY*(1) H 67	0.05	1.40	0.011
85. BD (1) O 62 - H 63	/553. RY*(1) O 68	0.06	2.70	0.016
86. BD (1) O 62 - H 64	/549. RY*(1) H 66	0.03	1.47	0.009
86. BD (1) O 62 - H 64	/553. RY*(1) O 68	0.03	2.70	0.012
158. LP (2) O 62	/549. RY*(1) H 66	0.46	1.34	0.031
158. LP (2) O 62	/551. RY*(1) H 67	0.44	1.27	0.030
158. LP (2) O 62	/553. RY*(1) O 68	0.93	2.57	0.062
158. LP (2) O 62	/554. RY*(2) O 68	0.05	1.63	0.011
158. LP (2) O 62	/556. RY*(4) O 68	0.35	2.45	0.037
158. LP (2) O 62	/663. BD*(1) H 67 - O 68	0.03	0.98	0.006
from unit 3 to unit 5				
85. BD (1) O 62 - H 63	/166. LP (6)Mn 69	2.19	1.54	0.079
85. BD (1) O 62 - H 63	/167. LP*(7)Mn 69	0.04	1.31	0.009
85. BD (1) O 62 - H 63	/168. LP*(8)Mn 69	0.04	2.60	0.013
85. BD (1) O 62 - H 63	/169. LP*(9)Mn 69	0.03	2.52	0.011
85. BD (1) O 62 - H 63	/562. RY*(2)Mn 69	0.56	3.76	0.058
85. BD (1) O 62 - H 63	/563. RY*(3)Mn 69	0.09	2.54	0.019
85. BD (1) O 62 - H 63	/565. RY*(5)Mn 69	0.04	2.58	0.013
85. BD (1) O 62 - H 63	/568. RY*(8)Mn 69	0.05	7.45	0.023
85. BD (1) O 62 - H 63	/571. RY*(11)Mn 69	0.03	6.86	0.019
85. BD (1) O 62 - H 63	/578. RY*(18)Mn 69	0.07	679.50	0.272
85. BD (1) O 62 - H 63	/580. RY*(20)Mn 69	0.12	149.74	0.168
85. BD (1) O 62 - H 63	/581. RY*(21)Mn 69	0.21	39.15	0.115
86. BD (1) O 62 - H 64	/166. LP (6)Mn 69	2.30	1.54	0.081
86. BD (1) O 62 - H 64	/562. RY*(2)Mn 69	0.55	3.77	0.057
86. BD (1) O 62 - H 64	/563. RY*(3)Mn 69	0.03	2.54	0.012
86. BD (1) O 62 - H 64	/564. RY*(4)Mn 69	0.16	2.97	0.027
86. BD (1) O 62 - H 64	/568. RY*(8)Mn 69	0.03	7.46	0.017
86. BD (1) O 62 - H 64	/575. RY*(15)Mn 69	0.04	6.34	0.020
86. BD (1) O 62 - H 64	/578. RY*(18)Mn 69	0.08	679.51	0.301
86. BD (1) O 62 - H 64	/580. RY*(20)Mn 69	0.15	149.75	0.189
86. BD (1) O 62 - H 64	/581. RY*(21)Mn 69	0.27	39.15	0.129
128. CR (1) O 62	/166. LP (6)Mn 69	1.34	19.72	0.221

157. LP (1) O 62	/166. LP (6)Mn 69	0.27	1.22	0.024
157. LP (1) O 62	/168. LP*(8)Mn 69	0.04	2.28	0.011
157. LP (1) O 62	/169. LP*(9)Mn 69	0.03	2.20	0.010
158. LP (2) O 62	/166. LP (6)Mn 69	19.06	1.41	0.219
158. LP (2) O 62	/167. LP*(7)Mn 69	0.25	1.18	0.022
158. LP (2) O 62	/168. LP*(8)Mn 69	0.92	2.47	0.061
158. LP (2) O 62	/169. LP*(9)Mn 69	0.83	2.39	0.057
158. LP (2) O 62	/561. RY*(1)Mn 69	0.29	2.44	0.034
158. LP (2) O 62	/562. RY*(2)Mn 69	2.94	3.63	0.132
158. LP (2) O 62	/564. RY*(4)Mn 69	0.19	2.84	0.030
158. LP (2) O 62	/565. RY*(5)Mn 69	0.18	2.46	0.027
158. LP (2) O 62	/566. RY*(6)Mn 69	0.03	2.41	0.011
158. LP (2) O 62	/567. RY*(7)Mn 69	0.22	2.65	0.031
158. LP (2) O 62	/568. RY*(8)Mn 69	0.22	7.33	0.052
158. LP (2) O 62	/569. RY*(9)Mn 69	0.04	8.67	0.023
158. LP (2) O 62	/570. RY*(10)Mn 69	0.13	9.41	0.045
158. LP (2) O 62	/571. RY*(11)Mn 69	0.21	6.73	0.048
158. LP (2) O 62	/572. RY*(12)Mn 69	0.08	5.82	0.027
158. LP (2) O 62	/573. RY*(13)Mn 69	0.18	8.34	0.050
158. LP (2) O 62	/574. RY*(14)Mn 69	0.10	6.57	0.033
158. LP (2) O 62	/575. RY*(15)Mn 69	0.30	6.20	0.055
158. LP (2) O 62	/577. RY*(17)Mn 69	0.03	27.91	0.034
158. LP (2) O 62	/578. RY*(18)Mn 69	0.79	679.37	0.932
158. LP (2) O 62	/579. RY*(19)Mn 69	0.11	27.70	0.071
158. LP (2) O 62	/580. RY*(20)Mn 69	1.52	149.61	0.608
158. LP (2) O 62	/581. RY*(21)Mn 69	2.76	39.02	0.419

from unit 4 to unit 1

87. BD (1) H 66 - O 68	/206. RY*(2) C 5	0.05	2.02	0.013
88. BD (1) H 67 - O 68	/213. RY*(1) C 6	0.03	1.66	0.009
88. BD (1) H 67 - O 68	/214. RY*(2) C 6	0.03	1.93	0.009
88. BD (1) H 67 - O 68	/215. RY*(3) C 6	0.05	1.88	0.012
88. BD (1) H 67 - O 68	/216. RY*(4) C 6	0.03	1.82	0.010
88. BD (1) H 67 - O 68	/253. RY*(1) N 11	0.03	2.13	0.010
88. BD (1) H 67 - O 68	/255. RY*(3) N 11	0.03	2.04	0.010
162. LP (1) O 68	/353. RY*(1) H 31	0.04	1.01	0.008
162. LP (1) O 68	/354. RY*(2) H 31	0.03	2.67	0.012
162. LP (1) O 68	/589. BD*(2) C 3 - C 5	0.37	0.43	0.018
162. LP (1) O 68	/592. BD*(2) C 4 - C 6	0.06	0.43	0.008
163. LP (2) O 68	/213. RY*(1) C 6	0.03	1.53	0.009
163. LP (2) O 68	/214. RY*(2) C 6	0.14	1.80	0.020
163. LP (2) O 68	/216. RY*(4) C 6	0.03	1.69	0.009
163. LP (2) O 68	/218. RY*(6) C 6	0.08	3.85	0.022
163. LP (2) O 68	/253. RY*(1) N 11	0.30	2.00	0.031
163. LP (2) O 68	/254. RY*(2) N 11	0.27	2.05	0.030
163. LP (2) O 68	/255. RY*(3) N 11	0.34	1.91	0.032
163. LP (2) O 68	/256. RY*(4) N 11	0.11	2.17	0.020
163. LP (2) O 68	/262. RY*(2) N 12	0.03	1.43	0.008
163. LP (2) O 68	/263. RY*(3) N 12	0.09	1.75	0.016
163. LP (2) O 68	/285. RY*(1) C 15	0.13	1.80	0.019
163. LP (2) O 68	/286. RY*(2) C 15	0.06	1.40	0.011
163. LP (2) O 68	/287. RY*(3) C 15	0.03	1.95	0.010
163. LP (2) O 68	/289. RY*(5) C 15	0.10	4.08	0.026
163. LP (2) O 68	/317. RY*(1) O 19	0.12	3.01	0.024
163. LP (2) O 68	/319. RY*(3) O 19	0.05	1.97	0.013
163. LP (2) O 68	/589. BD*(2) C 3 - C 5	0.06	0.63	0.009
163. LP (2) O 68	/592. BD*(2) C 4 - C 6	0.07	0.63	0.010
163. LP (2) O 68	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.07	1.01	0.011
163. LP (2) O 68	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.22	1.13	0.020

from unit 4 to unit 2

87. BD (1) H 66 - O 68	/396. RY*(2) C 37	0.03	1.86	0.010
87. BD (1) H 66 - O 68	/435. RY*(1) N 42	0.10	2.66	0.020
87. BD (1) H 66 - O 68	/436. RY*(2) N 42	0.04	1.72	0.010
87. BD (1) H 66 - O 68	/437. RY*(3) N 42	0.17	1.99	0.023
87. BD (1) H 66 - O 68	/438. RY*(4) N 42	0.03	2.27	0.010
87. BD (1) H 66 - O 68	/541. RY*(1) O 65	0.09	3.16	0.021
87. BD (1) H 66 - O 68	/544. RY*(4) O 65	0.03	2.46	0.011
87. BD (1) H 66 - O 68	/640. BD*(2) C 40 - C 41	0.04	0.79	0.009
88. BD (1) H 67 - O 68	/395. RY*(1) C 37	0.03	1.66	0.008
88. BD (1) H 67 - O 68	/396. RY*(2) C 37	0.03	1.86	0.010

88. BD (1) H 67 - O 68	/435. RY*(1) N 42	0.05	2.66	0.015
88. BD (1) H 67 - O 68	/436. RY*(2) N 42	0.04	1.72	0.010
88. BD (1) H 67 - O 68	/437. RY*(3) N 42	0.09	1.99	0.017
88. BD (1) H 67 - O 68	/438. RY*(4) N 42	0.03	2.27	0.010
88. BD (1) H 67 - O 68	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.03	1.09	0.007
162. LP (1) O 68	/396. RY*(2) C 37	0.03	1.53	0.009
162. LP (1) O 68	/419. RY*(1) C 40	0.03	1.07	0.007
162. LP (1) O 68	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.03	0.82	0.006
162. LP (1) O 68	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.06	0.95	0.009
163. LP (2) O 68	/396. RY*(2) C 37	0.16	1.73	0.021
163. LP (2) O 68	/398. RY*(4) C 37	0.03	1.68	0.009
163. LP (2) O 68	/400. RY*(6) C 37	0.04	3.78	0.015
163. LP (2) O 68	/419. RY*(1) C 40	0.04	1.27	0.009
163. LP (2) O 68	/435. RY*(1) N 42	0.50	2.53	0.045
163. LP (2) O 68	/436. RY*(2) N 42	0.17	1.59	0.021
163. LP (2) O 68	/437. RY*(3) N 42	0.40	1.86	0.035
163. LP (2) O 68	/438. RY*(4) N 42	0.06	2.14	0.014
163. LP (2) O 68	/443. RY*(1) N 43	0.06	1.51	0.012
163. LP (2) O 68	/445. RY*(3) N 43	0.08	1.73	0.015
163. LP (2) O 68	/453. RY*(3) C 44	0.03	1.53	0.009
163. LP (2) O 68	/467. RY*(1) C 46	0.17	1.80	0.022
163. LP (2) O 68	/470. RY*(4) C 46	0.04	1.40	0.010
163. LP (2) O 68	/471. RY*(5) C 46	0.04	5.49	0.018
163. LP (2) O 68	/541. RY*(1) O 65	0.53	3.03	0.051
163. LP (2) O 68	/543. RY*(3) O 65	0.07	2.04	0.015
163. LP (2) O 68	/544. RY*(4) O 65	0.10	2.33	0.019
163. LP (2) O 68	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.07	1.15	0.011
163. LP (2) O 68	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.06	0.97	0.010
from unit 4 to unit 3				
87. BD (1) H 66 - O 68	/529. RY*(1) O 62	0.06	2.80	0.017
87. BD (1) H 66 - O 68	/537. RY*(1) H 63	0.03	1.32	0.008
87. BD (1) H 66 - O 68	/661. BD*(1) O 62 - H 64	0.03	1.10	0.007
88. BD (1) H 67 - O 68	/529. RY*(1) O 62	0.08	2.80	0.019
163. LP (2) O 68	/529. RY*(1) O 62	0.95	2.67	0.064
163. LP (2) O 68	/531. RY*(3) O 62	0.14	2.00	0.021
163. LP (2) O 68	/532. RY*(4) O 62	0.34	2.00	0.033
163. LP (2) O 68	/537. RY*(1) H 63	0.25	1.19	0.022
163. LP (2) O 68	/539. RY*(1) H 64	0.24	1.20	0.022
163. LP (2) O 68	/660. BD*(1) O 62 - H 63	0.04	0.97	0.008
within unit 4				
88. BD (1) H 67 - O 68	/550. RY*(2) H 66	0.28	2.94	0.036
130. CR (1) O 68	/550. RY*(2) H 66	0.36	21.12	0.110
130. CR (1) O 68	/552. RY*(2) H 67	0.39	21.16	0.115
163. LP (2) O 68	/549. RY*(1) H 66	0.93	1.33	0.045
163. LP (2) O 68	/550. RY*(2) H 66	0.40	2.81	0.043
163. LP (2) O 68	/551. RY*(1) H 67	1.17	1.26	0.049
163. LP (2) O 68	/552. RY*(2) H 67	0.39	2.85	0.042
163. LP (2) O 68	/553. RY*(1) O 68	2.43	2.57	0.101
163. LP (2) O 68	/556. RY*(4) O 68	0.60	2.44	0.049
from unit 4 to unit 5				
87. BD (1) H 66 - O 68	/166. LP (6)Mn 69	2.51	1.53	0.084
87. BD (1) H 66 - O 68	/169. LP*(9)Mn 69	0.05	2.52	0.014
87. BD (1) H 66 - O 68	/562. RY*(2)Mn 69	0.68	3.76	0.064
87. BD (1) H 66 - O 68	/563. RY*(3)Mn 69	0.03	2.54	0.011
87. BD (1) H 66 - O 68	/564. RY*(4)Mn 69	0.05	2.96	0.015
87. BD (1) H 66 - O 68	/569. RY*(9)Mn 69	0.03	8.80	0.022
87. BD (1) H 66 - O 68	/570. RY*(10)Mn 69	0.03	9.53	0.021
87. BD (1) H 66 - O 68	/575. RY*(15)Mn 69	0.04	6.33	0.020
87. BD (1) H 66 - O 68	/578. RY*(18)Mn 69	0.10	679.50	0.324
87. BD (1) H 66 - O 68	/580. RY*(20)Mn 69	0.17	149.74	0.202
87. BD (1) H 66 - O 68	/581. RY*(21)Mn 69	0.30	39.14	0.138
88. BD (1) H 67 - O 68	/166. LP (6)Mn 69	2.43	1.53	0.083
88. BD (1) H 67 - O 68	/169. LP*(9)Mn 69	0.06	2.51	0.016
88. BD (1) H 67 - O 68	/562. RY*(2)Mn 69	0.57	3.76	0.059
88. BD (1) H 67 - O 68	/563. RY*(3)Mn 69	0.03	2.53	0.011
88. BD (1) H 67 - O 68	/566. RY*(6)Mn 69	0.03	2.53	0.011
88. BD (1) H 67 - O 68	/567. RY*(7)Mn 69	0.05	2.78	0.015
88. BD (1) H 67 - O 68	/569. RY*(9)Mn 69	0.06	8.80	0.030

88. BD (1) H 67 - O 68	/578. RY*(18)Mn 69	0.08	679.50	0.291
88. BD (1) H 67 - O 68	/580. RY*(20)Mn 69	0.14	149.74	0.182
88. BD (1) H 67 - O 68	/581. RY*(21)Mn 69	0.25	39.14	0.125
130. CR (1) O 68	/166. LP (6)Mn 69	1.37	19.72	0.222
162. LP (1) O 68	/166. LP (6)Mn 69	0.17	1.21	0.019
162. LP (1) O 68	/168. LP*(8)Mn 69	0.03	2.27	0.010
162. LP (1) O 68	/561. RY*(1)Mn 69	0.03	2.24	0.011
163. LP (2) O 68	/166. LP (6)Mn 69	18.50	1.40	0.216
163. LP (2) O 68	/167. LP*(7)Mn 69	0.18	1.18	0.019
163. LP (2) O 68	/168. LP*(8)Mn 69	0.32	2.47	0.036
163. LP (2) O 68	/169. LP*(9)Mn 69	2.15	2.39	0.091
163. LP (2) O 68	/561. RY*(1)Mn 69	0.15	2.43	0.024
163. LP (2) O 68	/562. RY*(2)Mn 69	2.62	3.63	0.124
163. LP (2) O 68	/563. RY*(3)Mn 69	0.03	2.41	0.011
163. LP (2) O 68	/565. RY*(5)Mn 69	0.08	2.45	0.018
163. LP (2) O 68	/567. RY*(7)Mn 69	0.27	2.65	0.034
163. LP (2) O 68	/568. RY*(8)Mn 69	0.12	7.32	0.038
163. LP (2) O 68	/569. RY*(9)Mn 69	0.57	8.67	0.089
163. LP (2) O 68	/570. RY*(10)Mn 69	0.03	9.40	0.022
163. LP (2) O 68	/573. RY*(13)Mn 69	0.11	8.34	0.038
163. LP (2) O 68	/574. RY*(14)Mn 69	0.24	6.56	0.051
163. LP (2) O 68	/575. RY*(15)Mn 69	0.08	6.20	0.028
163. LP (2) O 68	/576. RY*(16)Mn 69	0.15	27.60	0.083
163. LP (2) O 68	/578. RY*(18)Mn 69	0.75	679.37	0.910
163. LP (2) O 68	/580. RY*(20)Mn 69	1.45	149.61	0.594
163. LP (2) O 68	/581. RY*(21)Mn 69	2.63	39.01	0.409

from unit 5 to unit 1

132. CR (2)Mn 69	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.13	26.79	0.074
132. CR (2)Mn 69	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.09	26.91	0.062
132. CR (2)Mn 69	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.13	26.75	0.075
133. CR (3)Mn 69	/255. RY*(3) N 11	0.08	5.38	0.026
133. CR (3)Mn 69	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.64	4.49	0.068
133. CR (3)Mn 69	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.45	4.61	0.058
133. CR (3)Mn 69	/613. BD*(1) C 15 - C 17	0.03	4.56	0.014
133. CR (3)Mn 69	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.75	4.44	0.074
135. CR (5)Mn 69	/254. RY*(2) N 11	0.03	3.48	0.012
135. CR (5)Mn 69	/255. RY*(3) N 11	0.06	3.34	0.017
135. CR (5)Mn 69	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.19	2.44	0.028
135. CR (5)Mn 69	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.16	2.56	0.026
137. CR (7)Mn 69	/317. RY*(1) O 19	0.03	4.44	0.014
137. CR (7)Mn 69	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.05	2.56	0.015
137. CR (7)Mn 69	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.38	2.39	0.038
139. CR (9)Mn 69	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.08	2.44	0.017
139. CR (9)Mn 69	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.03	2.56	0.011
139. CR (9)Mn 69	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.04	2.40	0.013
164. LP (3)Mn 69	/216. RY*(4) C 6	0.03	1.28	0.008
164. LP (3)Mn 69	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.13	0.60	0.011
164. LP (3)Mn 69	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.41	0.72	0.022
165. LP (5)Mn 69	/214. RY*(2) C 6	0.05	1.37	0.011
165. LP (5)Mn 69	/216. RY*(4) C 6	0.04	1.26	0.009
165. LP (5)Mn 69	/253. RY*(1) N 11	0.92	1.57	0.049
165. LP (5)Mn 69	/254. RY*(2) N 11	0.82	1.62	0.047
165. LP (5)Mn 69	/255. RY*(3) N 11	0.40	1.48	0.031
165. LP (5)Mn 69	/259. RY*(7) N 11	0.03	35.37	0.041
165. LP (5)Mn 69	/261. RY*(1) N 12	0.03	1.04	0.007
165. LP (5)Mn 69	/264. RY*(4) N 12	0.04	1.85	0.011
165. LP (5)Mn 69	/285. RY*(1) C 15	0.16	1.38	0.019
165. LP (5)Mn 69	/286. RY*(2) C 15	0.03	0.97	0.007
165. LP (5)Mn 69	/592. BD*(2) C 4 - C 6	0.03	0.20	0.004
165. LP (5)Mn 69	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.25	0.58	0.015
165. LP (5)Mn 69	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.07	0.57	0.008
166. LP (6)Mn 69	/183. RY*(3) C 2	0.08	0.16	0.013
166. LP (6)Mn 69	/190. RY*(2) C 3	0.03	0.52	0.013
166. LP (6)Mn 69	/197. RY*(1) C 4	0.06	0.79	0.023
166. LP (6)Mn 69	/198. RY*(2) C 4	0.17	0.77	0.040
166. LP (6)Mn 69	/200. RY*(4) C 4	0.04	0.20	0.010
166. LP (6)Mn 69	/201. RY*(5) C 4	0.04	2.35	0.035
166. LP (6)Mn 69	/207. RY*(3) C 5	0.26	0.43	0.036
166. LP (6)Mn 69	/208. RY*(4) C 5	0.48	0.29	0.041
166. LP (6)Mn 69	/213. RY*(1) C 6	3.87	0.12	0.074

166. LP (6)Mn 69	/214. RY*(2) C 6	7.35	0.40	0.186
166. LP (6)Mn 69	/215. RY*(3) C 6	0.26	0.35	0.033
166. LP (6)Mn 69	/216. RY*(4) C 6	4.92	0.28	0.129
166. LP (6)Mn 69	/218. RY*(6) C 6	0.46	2.45	0.117
166. LP (6)Mn 69	/220. RY*(8) C 6	0.07	2.03	0.042
166. LP (6)Mn 69	/239. RY*(3) C 9	0.28	0.31	0.032
166. LP (6)Mn 69	/240. RY*(4) C 9	0.10	0.35	0.021
166. LP (6)Mn 69	/253. RY*(1) N 11	20.18	0.59	0.373
166. LP (6)Mn 69	/254. RY*(2) N 11	18.49	0.64	0.373
166. LP (6)Mn 69	/255. RY*(3) N 11	15.27	0.50	0.304
166. LP (6)Mn 69	/256. RY*(4) N 11	3.18	0.77	0.172
166. LP (6)Mn 69	/258. RY*(6) N 11	0.04	3.21	0.039
166. LP (6)Mn 69	/261. RY*(1) N 12	5.94	0.06	0.066
166. LP (6)Mn 69	/262. RY*(2) N 12	11.07	0.02	0.052
166. LP (6)Mn 69	/263. RY*(3) N 12	2.41	0.34	0.100
166. LP (6)Mn 69	/264. RY*(4) N 12	0.63	0.87	0.081
166. LP (6)Mn 69	/265. RY*(5) N 12	0.05	3.39	0.047
166. LP (6)Mn 69	/266. RY*(6) N 12	0.03	3.07	0.032
166. LP (6)Mn 69	/269. RY*(1) C 13	0.25	0.34	0.031
166. LP (6)Mn 69	/270. RY*(2) C 13	0.28	0.67	0.047
166. LP (6)Mn 69	/271. RY*(3) C 13	7.31	0.05	0.064
166. LP (6)Mn 69	/274. RY*(6) C 13	0.07	2.58	0.047
166. LP (6)Mn 69	/280. RY*(4) C 14	0.14	0.14	0.016
166. LP (6)Mn 69	/285. RY*(1) C 15	14.71	0.40	0.263
166. LP (6)Mn 69	/287. RY*(3) C 15	0.83	0.55	0.074
166. LP (6)Mn 69	/288. RY*(4) C 15	0.38	0.27	0.035
166. LP (6)Mn 69	/289. RY*(5) C 15	1.31	2.68	0.206
166. LP (6)Mn 69	/294. RY*(2) C 16	0.11	0.45	0.024
166. LP (6)Mn 69	/296. RY*(4) C 16	0.08	0.25	0.016
166. LP (6)Mn 69	/302. RY*(2) C 17	0.46	0.57	0.056
166. LP (6)Mn 69	/304. RY*(4) C 17	0.52	0.12	0.027
166. LP (6)Mn 69	/309. RY*(1) C 18	0.07	0.43	0.019
166. LP (6)Mn 69	/317. RY*(1) O 19	13.34	1.61	0.507
166. LP (6)Mn 69	/318. RY*(2) O 19	0.05	0.33	0.013
166. LP (6)Mn 69	/319. RY*(3) O 19	3.63	0.57	0.158
166. LP (6)Mn 69	/320. RY*(4) O 19	0.83	1.04	0.102
170. LP (1)Mn 69	/253. RY*(1) N 11	0.13	1.59	0.018
170. LP (1)Mn 69	/254. RY*(2) N 11	0.13	1.64	0.018
170. LP (1)Mn 69	/255. RY*(3) N 11	0.04	1.50	0.009
170. LP (1)Mn 69	/317. RY*(1) O 19	0.11	2.60	0.021
170. LP (1)Mn 69	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.04	0.60	0.006
170. LP (1)Mn 69	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.10	0.72	0.011
170. LP (1)Mn 69	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.04	0.55	0.006
171. LP (2)Mn 69	/253. RY*(1) N 11	0.03	1.59	0.009
171. LP (2)Mn 69	/269. RY*(1) C 13	0.05	1.33	0.010
171. LP (2)Mn 69	/289. RY*(5) C 15	0.03	3.67	0.013
171. LP (2)Mn 69	/317. RY*(1) O 19	0.04	2.60	0.013
171. LP (2)Mn 69	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.17	0.60	0.013
171. LP (2)Mn 69	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.33	0.72	0.020
171. LP (2)Mn 69	/613. BD*(1) C 15 - C 17	0.04	0.68	0.007
171. LP (2)Mn 69	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.13	0.55	0.011
172. LP (4)Mn 69	/253. RY*(1) N 11	0.10	1.57	0.016
172. LP (4)Mn 69	/254. RY*(2) N 11	0.12	1.62	0.018
172. LP (4)Mn 69	/255. RY*(3) N 11	0.09	1.48	0.015
172. LP (4)Mn 69	/317. RY*(1) O 19	0.61	2.58	0.051
172. LP (4)Mn 69	/318. RY*(2) O 19	0.04	1.30	0.009
172. LP (4)Mn 69	/319. RY*(3) O 19	0.05	1.55	0.011
172. LP (4)Mn 69	/324. RY*(8) O 19	0.03	49.31	0.047
172. LP (4)Mn 69	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.03	0.81	0.006
172. LP (4)Mn 69	/614. BD*(1) C 15 - O 19	0.43	0.54	0.019

from unit 5 to unit 2

132. CR (2)Mn 69	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.13	26.80	0.076
132. CR (2)Mn 69	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.07	26.93	0.056
132. CR (2)Mn 69	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.14	26.75	0.077
133. CR (3)Mn 69	/437. RY*(3) N 42	0.06	5.34	0.022
133. CR (3)Mn 69	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.67	4.49	0.070
133. CR (3)Mn 69	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.37	4.62	0.053
133. CR (3)Mn 69	/651. BD*(1) C 46 - C 48	0.04	4.56	0.017
133. CR (3)Mn 69	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.77	4.44	0.075
135. CR (5)Mn 69	/437. RY*(3) N 42	0.06	3.30	0.017

135. CR (5)Mn 69	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.16	2.45	0.025
135. CR (5)Mn 69	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.21	2.58	0.030
135. CR (5)Mn 69	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.11	2.40	0.020
137. CR (7)Mn 69	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.05	2.40	0.014
139. CR (9)Mn 69	/467. RY*(1) C 46	0.03	3.23	0.012
139. CR (9)Mn 69	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.14	2.45	0.023
139. CR (9)Mn 69	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.25	2.40	0.031
164. LP (3)Mn 69	/435. RY*(1) N 42	0.03	2.12	0.011
164. LP (3)Mn 69	/651. BD*(1) C 46 - C 48	0.03	0.68	0.006
164. LP (3)Mn 69	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.23	0.56	0.014
165. LP (5)Mn 69	/ 54. BD*(2) C 35 - C 37	0.08	0.17	0.006
165. LP (5)Mn 69	/396. RY*(2) C 37	0.04	1.30	0.009
165. LP (5)Mn 69	/435. RY*(1) N 42	1.41	2.11	0.069
165. LP (5)Mn 69	/436. RY*(2) N 42	0.26	1.16	0.022
165. LP (5)Mn 69	/437. RY*(3) N 42	0.46	1.44	0.033
165. LP (5)Mn 69	/441. RY*(7) N 42	0.03	35.43	0.045
165. LP (5)Mn 69	/443. RY*(1) N 43	0.05	1.08	0.009
165. LP (5)Mn 69	/445. RY*(3) N 43	0.06	1.30	0.011
165. LP (5)Mn 69	/446. RY*(4) N 43	0.03	1.82	0.009
165. LP (5)Mn 69	/467. RY*(1) C 46	0.07	1.37	0.013
165. LP (5)Mn 69	/470. RY*(4) C 46	0.05	0.97	0.009
165. LP (5)Mn 69	/541. RY*(1) O 65	0.09	2.60	0.020
165. LP (5)Mn 69	/544. RY*(4) O 65	0.05	1.90	0.013
165. LP (5)Mn 69	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.20	0.59	0.014
165. LP (5)Mn 69	/644. BD*(1) N 43 - C 44	0.08	0.58	0.009
165. LP (5)Mn 69	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.17	0.54	0.012
166. LP (6)Mn 69	/380. RY*(2) C 35	0.08	0.82	0.028
166. LP (6)Mn 69	/381. RY*(3) C 35	0.13	0.80	0.035
166. LP (6)Mn 69	/382. RY*(4) C 35	0.06	0.16	0.011
166. LP (6)Mn 69	/383. RY*(5) C 35	0.03	2.35	0.031
166. LP (6)Mn 69	/389. RY*(3) C 36	0.68	0.45	0.061
166. LP (6)Mn 69	/390. RY*(4) C 36	0.26	0.35	0.033
166. LP (6)Mn 69	/395. RY*(1) C 37	3.79	0.13	0.076
166. LP (6)Mn 69	/396. RY*(2) C 37	9.94	0.32	0.196
166. LP (6)Mn 69	/397. RY*(3) C 37	0.63	0.36	0.053
166. LP (6)Mn 69	/398. RY*(4) C 37	2.23	0.28	0.087
166. LP (6)Mn 69	/400. RY*(6) C 37	0.58	2.37	0.129
166. LP (6)Mn 69	/402. RY*(8) C 37	0.07	2.02	0.043
166. LP (6)Mn 69	/421. RY*(3) C 40	0.27	0.35	0.033
166. LP (6)Mn 69	/422. RY*(4) C 40	0.03	0.31	0.010
166. LP (6)Mn 69	/426. RY*(8) C 40	0.06	2.23	0.041
166. LP (6)Mn 69	/435. RY*(1) N 42	19.29	1.13	0.505
166. LP (6)Mn 69	/436. RY*(2) N 42	14.14	0.18	0.174
166. LP (6)Mn 69	/437. RY*(3) N 42	17.76	0.46	0.313
166. LP (6)Mn 69	/438. RY*(4) N 42	2.95	0.73	0.162
166. LP (6)Mn 69	/440. RY*(6) N 42	0.04	3.26	0.038
166. LP (6)Mn 69	/443. RY*(1) N 43	5.71	0.10	0.083
166. LP (6)Mn 69	/444. RY*(2) N 43	5.14	0.04	0.051
166. LP (6)Mn 69	/445. RY*(3) N 43	4.11	0.33	0.127
166. LP (6)Mn 69	/446. RY*(4) N 43	0.40	0.84	0.064
166. LP (6)Mn 69	/447. RY*(5) N 43	0.07	3.44	0.054
166. LP (6)Mn 69	/449. RY*(7) N 43	0.03	3.04	0.035
166. LP (6)Mn 69	/451. RY*(1) C 44	0.03	0.36	0.011
166. LP (6)Mn 69	/452. RY*(2) C 44	0.07	0.63	0.023
166. LP (6)Mn 69	/453. RY*(3) C 44	5.49	0.12	0.090
166. LP (6)Mn 69	/455. RY*(5) C 44	0.06	1.97	0.038
166. LP (6)Mn 69	/456. RY*(6) C 44	0.05	3.09	0.043
166. LP (6)Mn 69	/460. RY*(2) C 45	0.03	0.43	0.013
166. LP (6)Mn 69	/462. RY*(4) C 45	0.32	0.16	0.025
166. LP (6)Mn 69	/467. RY*(1) C 46	14.08	0.39	0.255
166. LP (6)Mn 69	/468. RY*(2) C 46	1.22	0.68	0.100
166. LP (6)Mn 69	/469. RY*(3) C 46	0.06	0.16	0.011
166. LP (6)Mn 69	/471. RY*(5) C 46	0.51	4.08	0.159
166. LP (6)Mn 69	/472. RY*(6) C 46	0.04	2.01	0.032
166. LP (6)Mn 69	/475. RY*(1) C 47	0.10	0.43	0.023
166. LP (6)Mn 69	/478. RY*(4) C 47	0.09	0.16	0.013
166. LP (6)Mn 69	/483. RY*(1) C 48	0.50	0.57	0.058
166. LP (6)Mn 69	/486. RY*(4) C 48	0.29	0.17	0.024
166. LP (6)Mn 69	/491. RY*(1) C 49	0.07	0.43	0.019
166. LP (6)Mn 69	/514. RY*(2) H 54	0.14	1.56	0.051
166. LP (6)Mn 69	/541. RY*(1) O 65	13.31	1.62	0.509

166. LP (6)Mn 69	/542. RY*(2) O 65	0.14	0.31	0.023
166. LP (6)Mn 69	/543. RY*(3) O 65	3.01	0.64	0.152
166. LP (6)Mn 69	/544. RY*(4) O 65	1.70	0.92	0.138
166. LP (6)Mn 69	/545. RY*(5) O 65	0.06	4.27	0.055
170. LP (1)Mn 69	/435. RY*(1) N 42	0.09	2.12	0.017
170. LP (1)Mn 69	/541. RY*(1) O 65	0.07	2.62	0.017
170. LP (1)Mn 69	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.10	0.61	0.010
170. LP (1)Mn 69	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.38	0.74	0.021
171. LP (2)Mn 69	/396. RY*(2) C 37	0.03	1.32	0.008
171. LP (2)Mn 69	/435. RY*(1) N 42	0.06	2.12	0.014
171. LP (2)Mn 69	/437. RY*(3) N 42	0.04	1.45	0.010
171. LP (2)Mn 69	/451. RY*(1) C 44	0.07	1.35	0.012
171. LP (2)Mn 69	/633. BD*(1) C 37 - N 42	0.26	0.61	0.016
171. LP (2)Mn 69	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.25	0.74	0.017
171. LP (2)Mn 69	/651. BD*(1) C 46 - C 48	0.03	0.68	0.006
172. LP (4)Mn 69	/435. RY*(1) N 42	0.18	2.11	0.025
172. LP (4)Mn 69	/436. RY*(2) N 42	0.03	1.16	0.008
172. LP (4)Mn 69	/467. RY*(1) C 46	0.07	1.37	0.012
172. LP (4)Mn 69	/541. RY*(1) O 65	0.53	2.60	0.047
172. LP (4)Mn 69	/543. RY*(3) O 65	0.07	1.61	0.013
172. LP (4)Mn 69	/643. BD*(1) N 42 - N 43	0.15	0.72	0.013
172. LP (4)Mn 69	/647. BD*(2) C 44 - C 46	0.03	0.23	0.004
172. LP (4)Mn 69	/652. BD*(1) C 46 - O 65	0.15	0.54	0.011

from unit 5 to unit 3

135. CR (5)Mn 69	/660. BD*(1) O 62 - H 63	0.05	2.40	0.013
139. CR (9)Mn 69	/661. BD*(1) O 62 - H 64	0.03	2.40	0.011
164. LP (3)Mn 69	/660. BD*(1) O 62 - H 63	0.17	0.56	0.012
164. LP (3)Mn 69	/661. BD*(1) O 62 - H 64	0.28	0.56	0.016
165. LP (5)Mn 69	/529. RY*(1) O 62	0.03	2.24	0.010
165. LP (5)Mn 69	/531. RY*(3) O 62	0.03	1.57	0.008
165. LP (5)Mn 69	/532. RY*(4) O 62	0.11	1.57	0.016
165. LP (5)Mn 69	/537. RY*(1) H 63	0.20	0.77	0.016
165. LP (5)Mn 69	/539. RY*(1) H 64	0.10	0.77	0.011
165. LP (5)Mn 69	/660. BD*(1) O 62 - H 63	0.21	0.54	0.013
165. LP (5)Mn 69	/661. BD*(1) O 62 - H 64	0.13	0.54	0.011
166. LP (6)Mn 69	/529. RY*(1) O 62	24.33	1.26	0.608
166. LP (6)Mn 69	/530. RY*(2) O 62	0.53	0.25	0.040
166. LP (6)Mn 69	/531. RY*(3) O 62	5.88	0.59	0.205
166. LP (6)Mn 69	/532. RY*(4) O 62	12.07	0.59	0.295
166. LP (6)Mn 69	/538. RY*(2) H 63	0.04	1.44	0.025
170. LP (1)Mn 69	/531. RY*(3) O 62	0.05	1.59	0.011
170. LP (1)Mn 69	/532. RY*(4) O 62	0.03	1.59	0.009
170. LP (1)Mn 69	/537. RY*(1) H 63	0.04	0.78	0.007
170. LP (1)Mn 69	/660. BD*(1) O 62 - H 63	0.04	0.56	0.006
170. LP (1)Mn 69	/661. BD*(1) O 62 - H 64	0.03	0.56	0.005
171. LP (2)Mn 69	/529. RY*(1) O 62	0.04	2.26	0.012
171. LP (2)Mn 69	/661. BD*(1) O 62 - H 64	0.10	0.56	0.010
172. LP (4)Mn 69	/529. RY*(1) O 62	0.22	2.24	0.028
172. LP (4)Mn 69	/532. RY*(4) O 62	0.03	1.57	0.009
172. LP (4)Mn 69	/537. RY*(1) H 63	0.04	0.77	0.007
172. LP (4)Mn 69	/660. BD*(1) O 62 - H 63	0.10	0.54	0.009

from unit 5 to unit 4

137. CR (7)Mn 69	/663. BD*(1) H 67 - O 68	0.03	2.40	0.010
139. CR (9)Mn 69	/662. BD*(1) H 66 - O 68	0.05	2.41	0.013
164. LP (3)Mn 69	/662. BD*(1) H 66 - O 68	0.11	0.56	0.010
164. LP (3)Mn 69	/663. BD*(1) H 67 - O 68	0.33	0.56	0.017
165. LP (5)Mn 69	/549. RY*(1) H 66	0.18	0.90	0.016
165. LP (5)Mn 69	/551. RY*(1) H 67	0.18	0.84	0.016
165. LP (5)Mn 69	/553. RY*(1) O 68	0.17	2.14	0.024
165. LP (5)Mn 69	/555. RY*(3) O 68	0.04	1.27	0.009
165. LP (5)Mn 69	/556. RY*(4) O 68	0.05	2.01	0.013
165. LP (5)Mn 69	/662. BD*(1) H 66 - O 68	0.07	0.55	0.008
165. LP (5)Mn 69	/663. BD*(1) H 67 - O 68	0.03	0.55	0.005
166. LP (6)Mn 69	/550. RY*(2) H 66	0.13	1.40	0.046
166. LP (6)Mn 69	/552. RY*(2) H 67	0.08	1.44	0.037
166. LP (6)Mn 69	/553. RY*(1) O 68	24.02	1.16	0.579
166. LP (6)Mn 69	/554. RY*(2) O 68	1.90	0.22	0.070
166. LP (6)Mn 69	/555. RY*(3) O 68	1.63	0.29	0.076
166. LP (6)Mn 69	/556. RY*(4) O 68	8.27	1.04	0.322

170. LP (1)Mn 69	/549. RY*(1) H 66		0.03	0.92	0.006
170. LP (1)Mn 69	/553. RY*(1) O 68		0.03	2.16	0.011
170. LP (1)Mn 69	/662. BD*(1) H 66 - O 68		0.04	0.56	0.006
170. LP (1)Mn 69	/663. BD*(1) H 67 - O 68		0.03	0.56	0.005
171. LP (2)Mn 69	/662. BD*(1) H 66 - O 68		0.14	0.56	0.011
172. LP (4)Mn 69	/551. RY*(1) H 67		0.03	0.84	0.006
172. LP (4)Mn 69	/553. RY*(1) O 68		0.10	2.14	0.018
172. LP (4)Mn 69	/662. BD*(1) H 66 - O 68		0.13	0.55	0.011
172. LP (4)Mn 69	/663. BD*(1) H 67 - O 68		0.08	0.55	0.008
within unit 5					
132. CR (2)Mn 69	/166. LP (6)Mn 69		0.58	27.19	0.170
133. CR (3)Mn 69	/166. LP (6)Mn 69		2.21	4.88	0.140
165. LP (5)Mn 69	/166. LP (6)Mn 69		0.66	0.98	0.034
165. LP (5)Mn 69	/167. LP*(7)Mn 69		0.25	0.75	0.018
165. LP (5)Mn 69	/562. RY*(2)Mn 69		0.48	3.20	0.050
165. LP (5)Mn 69	/581. RY*(21)Mn 69		0.44	38.59	0.168
166. LP (6)Mn 69	/169. LP*(9)Mn 69		0.36	0.98	0.065
166. LP (6)Mn 69	/562. RY*(2)Mn 69		37.97	2.22	1.010
166. LP (6)Mn 69	/564. RY*(4)Mn 69		1.40	1.43	0.156
166. LP (6)Mn 69	/565. RY*(5)Mn 69		2.05	1.05	0.161
166. LP (6)Mn 69	/567. RY*(7)Mn 69		6.26	1.25	0.308
166. LP (6)Mn 69	/568. RY*(8)Mn 69		0.28	5.92	0.142
166. LP (6)Mn 69	/574. RY*(14)Mn 69		0.38	5.16	0.153
166. LP (6)Mn 69	/575. RY*(15)Mn 69		3.06	4.79	0.422
166. LP (6)Mn 69	/578. RY*(18)Mn 69		7.02	677.96	7.604
166. LP (6)Mn 69	/580. RY*(20)Mn 69		13.87	148.20	4.995
166. LP (6)Mn 69	/581. RY*(21)Mn 69		26.43	37.61	3.474

Table (S10): Summary of Natural Population Analysis **of the** Fe(III) complex:

Fe(III) complex

Atom	No	Natural Charge	Core	Valence	Rydberg	Total
C	1	0.34207	1.99860	3.64275	0.01658	5.65793
C	2	-0.09671	1.99880	4.08565	0.01226	6.09671
C	3	-0.25998	1.99898	4.24769	0.01331	6.25998
C	4	-0.05333	1.99882	4.04048	0.01403	6.05333
C	5	-0.17914	1.99890	4.16773	0.01251	6.17914
C	6	0.15212	1.99874	3.82795	0.02118	5.84788
C	7	-0.19673	1.99903	4.18365	0.01405	6.19673
C	8	-0.19280	1.99908	4.18014	0.01358	6.19280
C	9	-0.18513	1.99902	4.17168	0.01443	6.18513
C	10	-0.19384	1.99905	4.18165	0.01314	6.19384
N	11	-0.48047	1.99931	5.45278	0.02839	7.48047
N	12	-0.16012	1.99929	5.13818	0.02265	7.16012
C	13	0.00772	1.99869	3.97330	0.02029	5.99228
C	14	-0.18372	1.99902	4.17066	0.01404	6.18372
C	15	0.24243	1.99864	3.73645	0.02247	5.75757
C	16	-0.21395	1.99908	4.20151	0.01336	6.21395
C	17	-0.22742	1.99900	4.21412	0.01430	6.22742
C	18	-0.19654	1.99908	4.18401	0.01344	6.19654
O	19	-0.79132	1.99982	6.78416	0.00735	8.79132
O	20	-0.69894	1.99978	6.69558	0.00358	8.69894
H	21	0.22893	0.00000	0.76855	0.00251	0.77107
H	22	0.20887	0.00000	0.78825	0.00289	0.79113
H	23	0.21648	0.00000	0.78235	0.00117	0.78352
H	24	0.22458	0.00000	0.77168	0.00374	0.77542
H	25	0.21629	0.00000	0.78191	0.00180	0.78371
H	26	0.22391	0.00000	0.77356	0.00253	0.77609
H	27	0.21707	0.00000	0.78177	0.00116	0.78293
H	28	0.22621	0.00000	0.77160	0.00220	0.77379
H	29	0.21600	0.00000	0.78275	0.00125	0.78400

H	30	0.49103	0.00000	0.50812	0.00085	0.50897
H	31	0.22581	0.00000	0.77201	0.00219	0.77419
C	32	0.34781	1.99860	3.63709	0.01651	5.65219
C	33	-0.09342	1.99880	4.08238	0.01223	6.09342
C	34	-0.25873	1.99897	4.24623	0.01352	6.25873
C	35	-0.05022	1.99883	4.03808	0.01332	6.05022
C	36	-0.20384	1.99890	4.19230	0.01264	6.20384
C	37	0.14609	1.99874	3.83425	0.02092	5.85391
C	38	-0.19686	1.99903	4.18388	0.01396	6.19686
C	39	-0.18714	1.99908	4.17450	0.01357	6.18714
C	40	-0.17247	1.99902	4.15975	0.01370	6.17247
C	41	-0.19472	1.99906	4.18225	0.01341	6.19472
N	42	-0.36179	1.99928	5.33589	0.02662	7.36179
N	43	-0.21511	1.99928	5.19181	0.02402	7.21511
C	44	0.12654	1.99874	3.85565	0.01907	5.87346
C	45	-0.20723	1.99902	4.19384	0.01437	6.20723
C	46	0.27385	1.99865	3.70604	0.02147	5.72615
C	47	-0.14118	1.99908	4.12939	0.01271	6.14118
C	48	-0.20031	1.99900	4.18664	0.01466	6.20031
C	49	-0.21049	1.99907	4.19812	0.01330	6.21049
O	50	-0.69603	1.99978	6.69270	0.00355	8.69603
H	51	0.23091	0.00000	0.76663	0.00247	0.76909
H	52	0.20890	0.00000	0.78821	0.00289	0.79110
H	53	0.21696	0.00000	0.78183	0.00121	0.78304
H	54	0.22818	0.00000	0.76889	0.00294	0.77182
H	55	0.21657	0.00000	0.78219	0.00123	0.78343
H	56	0.23065	0.00000	0.76672	0.00263	0.76935
H	57	0.22253	0.00000	0.77635	0.00112	0.77747
H	58	0.23335	0.00000	0.76363	0.00302	0.76665
H	59	0.22087	0.00000	0.77785	0.00127	0.77913
H	60	0.49274	0.00000	0.50645	0.00081	0.50726
H	61	0.22603	0.00000	0.77076	0.00321	0.77397
O	62	-0.91532	1.99980	6.90886	0.00666	8.91532
H	63	0.52542	0.00000	0.47249	0.00209	0.47458
H	64	0.50767	0.00000	0.48942	0.00291	0.49233
O	65	-0.64494	1.99981	6.63860	0.00653	8.64494
Cl	66	-0.58061	9.99977	7.57826	0.00258	17.58061
Fe	67	1.74594	17.99113	6.24533	0.01760	24.25406
* Total *		0.00000	109.95218	216.36588	0.68194	327.00000

Table (S11): NBO data of the Fe(III) complex:

Donor NBO (i)	Acceptor NBO (j)	kcal/mol	a.u.	a.u.
within unit 1				
1. BD (1) C 1 - C 2	/189. RY*(1) C 3	0.67	1.97	0.046
1. BD (1) C 1 - C 2	/190. RY*(2) C 3	0.31	2.00	0.032
1. BD (1) C 1 - C 2	/197. RY*(1) C 4	0.65	2.18	0.048
1. BD (1) C 1 - C 2	/221. RY*(1) C 7	0.57	1.85	0.041
1. BD (1) C 1 - C 2	/583. BD*(1) C 1 - C 3	1.87	1.27	0.062
1. BD (1) C 1 - C 2	/586. BD*(1) C 2 - C 4	1.75	1.27	0.060
1. BD (1) C 1 - C 2	/588. BD*(1) C 2 - C 7	0.74	1.09	0.036
1. BD (1) C 1 - C 2	/590. BD*(1) C 3 - H 21	1.44	1.09	0.050
1. BD (1) C 1 - C 2	/592. BD*(1) C 4 - C 9	2.09	1.10	0.061
1. BD (1) C 1 - C 2	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.65	1.29	0.037
2. BD (1) C 1 - C 3	/182. RY*(2) C 2	0.80	2.19	0.053
2. BD (1) C 1 - C 3	/206. RY*(2) C 5	0.61	1.97	0.044
2. BD (1) C 1 - C 3	/582. BD*(1) C 1 - C 2	1.84	1.18	0.059
2. BD (1) C 1 - C 3	/585. BD*(1) C 1 - O 20	0.42	1.03	0.026
2. BD (1) C 1 - C 3	/588. BD*(1) C 2 - C 7	1.22	1.20	0.048
2. BD (1) C 1 - C 3	/589. BD*(1) C 3 - C 5	1.21	1.22	0.049
2. BD (1) C 1 - C 3	/590. BD*(1) C 3 - H 21	0.89	1.19	0.041
2. BD (1) C 1 - C 3	/595. BD*(1) C 5 - H 31	0.70	1.20	0.037
2. BD (1) C 1 - C 3	/622. BD*(1) O 20 - H 30	0.80	1.07	0.037
3. BD (2) C 1 - C 3	/184. RY*(4) C 2	0.35	0.89	0.023
3. BD (2) C 1 - C 3	/325. RY*(1) O 20	0.33	1.19	0.026
3. BD (2) C 1 - C 3	/584. BD*(2) C 1 - C 3	0.28	0.31	0.012
3. BD (2) C 1 - C 3	/587. BD*(2) C 2 - C 4	5.77	0.32	0.057
3. BD (2) C 1 - C 3	/594. BD*(2) C 5 - C 6	6.65	0.32	0.059
4. BD (1) C 1 - O 20	/173. RY*(1) C 1	0.33	1.97	0.032
4. BD (1) C 1 - O 20	/189. RY*(1) C 3	0.29	2.21	0.032
4. BD (1) C 1 - O 20	/582. BD*(1) C 1 - C 2	0.27	1.32	0.024
4. BD (1) C 1 - O 20	/583. BD*(1) C 1 - C 3	0.54	1.52	0.036
4. BD (1) C 1 - O 20	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.58	1.52	0.038
4. BD (1) C 1 - O 20	/589. BD*(1) C 3 - C 5	1.10	1.36	0.049
5. BD (1) C 2 - C 4	/174. RY*(2) C 1	0.44	2.15	0.039
5. BD (1) C 2 - C 4	/213. RY*(1) C 6	0.40	1.88	0.035
5. BD (1) C 2 - C 4	/214. RY*(2) C 6	0.35	1.71	0.031
5. BD (1) C 2 - C 4	/221. RY*(1) C 7	0.35	1.94	0.033
5. BD (1) C 2 - C 4	/237. RY*(1) C 9	0.36	1.94	0.034
5. BD (1) C 2 - C 4	/582. BD*(1) C 1 - C 2	1.65	1.16	0.055
5. BD (1) C 2 - C 4	/585. BD*(1) C 1 - O 20	1.34	1.01	0.047
5. BD (1) C 2 - C 4	/588. BD*(1) C 2 - C 7	1.91	1.18	0.060
5. BD (1) C 2 - C 4	/591. BD*(1) C 4 - C 6	1.99	1.19	0.062
5. BD (1) C 2 - C 4	/592. BD*(1) C 4 - C 9	1.83	1.19	0.059
5. BD (1) C 2 - C 4	/596. BD*(1) C 6 - N 11	1.39	1.11	0.050
5. BD (1) C 2 - C 4	/599. BD*(1) C 7 - H 22	0.76	1.18	0.038
5. BD (1) C 2 - C 4	/604. BD*(1) C 9 - H 24	0.69	1.19	0.036
6. BD (2) C 2 - C 4	/176. RY*(4) C 1	0.30	0.84	0.022
6. BD (2) C 2 - C 4	/223. RY*(3) C 7	0.55	0.77	0.028
6. BD (2) C 2 - C 4	/239. RY*(3) C 9	0.50	0.86	0.028
6. BD (2) C 2 - C 4	/584. BD*(2) C 1 - C 3	6.40	0.30	0.056
6. BD (2) C 2 - C 4	/594. BD*(2) C 5 - C 6	6.35	0.31	0.057
6. BD (2) C 2 - C 4	/598. BD*(2) C 7 - C 8	6.00	0.31	0.056
6. BD (2) C 2 - C 4	/603. BD*(2) C 9 - C 10	5.79	0.31	0.056
7. BD (1) C 2 - C 7	/173. RY*(1) C 1	0.29	1.72	0.028
7. BD (1) C 2 - C 7	/174. RY*(2) C 1	0.36	2.06	0.035
7. BD (1) C 2 - C 7	/197. RY*(1) C 4	0.41	2.17	0.038
7. BD (1) C 2 - C 7	/198. RY*(2) C 4	0.28	2.18	0.031
7. BD (1) C 2 - C 7	/229. RY*(1) C 8	0.36	1.83	0.033
7. BD (1) C 2 - C 7	/230. RY*(2) C 8	0.78	1.94	0.049
7. BD (1) C 2 - C 7	/582. BD*(1) C 1 - C 2	0.62	1.06	0.032
7. BD (1) C 2 - C 7	/583. BD*(1) C 1 - C 3	0.71	1.27	0.038
7. BD (1) C 2 - C 7	/586. BD*(1) C 2 - C 4	2.16	1.26	0.066
7. BD (1) C 2 - C 7	/591. BD*(1) C 4 - C 6	2.35	1.10	0.064
7. BD (1) C 2 - C 7	/597. BD*(1) C 7 - C 8	1.40	1.28	0.054
7. BD (1) C 2 - C 7	/599. BD*(1) C 7 - H 22	0.31	1.08	0.023
7. BD (1) C 2 - C 7	/601. BD*(1) C 8 - H 23	1.45	1.09	0.050

8. BD (1) C 3 - C 5	/173. RY*(1) C 1	0.63	1.72	0.042
8. BD (1) C 3 - C 5	/174. RY*(2) C 1	0.38	2.06	0.036
8. BD (1) C 3 - C 5	/214. RY*(2) C 6	0.29	1.62	0.028
8. BD (1) C 3 - C 5	/215. RY*(3) C 6	0.72	1.77	0.045
8. BD (1) C 3 - C 5	/583. BD*(1) C 1 - C 3	1.29	1.27	0.051
8. BD (1) C 3 - C 5	/585. BD*(1) C 1 - O 20	2.53	0.92	0.061
8. BD (1) C 3 - C 5	/590. BD*(1) C 3 - H 21	0.37	1.08	0.025
8. BD (1) C 3 - C 5	/593. BD*(1) C 5 - C 6	1.50	1.29	0.056
8. BD (1) C 3 - C 5	/595. BD*(1) C 5 - H 31	0.30	1.08	0.023
8. BD (1) C 3 - C 5	/596. BD*(1) C 6 - N 11	3.00	1.02	0.070
9. BD (1) C 3 - H 21	/174. RY*(2) C 1	0.46	1.93	0.038
9. BD (1) C 3 - H 21	/178. RY*(6) C 1	0.27	8.78	0.062
9. BD (1) C 3 - H 21	/205. RY*(1) C 5	0.50	1.82	0.038
9. BD (1) C 3 - H 21	/582. BD*(1) C 1 - C 2	3.06	0.93	0.068
9. BD (1) C 3 - H 21	/583. BD*(1) C 1 - C 3	0.71	1.13	0.036
9. BD (1) C 3 - H 21	/585. BD*(1) C 1 - O 20	0.84	0.79	0.032
9. BD (1) C 3 - H 21	/593. BD*(1) C 5 - C 6	1.41	1.15	0.051
10. BD (1) C 4 - C 6	/181. RY*(1) C 2	0.74	2.30	0.052
10. BD (1) C 4 - C 6	/205. RY*(1) C 5	0.46	1.95	0.038
10. BD (1) C 4 - C 6	/237. RY*(1) C 9	0.59	1.85	0.042
10. BD (1) C 4 - C 6	/253. RY*(1) N 11	0.32	1.74	0.030
10. BD (1) C 4 - C 6	/586. BD*(1) C 2 - C 4	2.02	1.27	0.064
10. BD (1) C 4 - C 6	/588. BD*(1) C 2 - C 7	2.02	1.08	0.059
10. BD (1) C 4 - C 6	/592. BD*(1) C 4 - C 9	0.91	1.10	0.040
10. BD (1) C 4 - C 6	/593. BD*(1) C 5 - C 6	2.05	1.29	0.065
10. BD (1) C 4 - C 6	/595. BD*(1) C 5 - H 31	1.51	1.09	0.051
10. BD (1) C 4 - C 6	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.43	1.02	0.027
10. BD (1) C 4 - C 6	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.70	1.30	0.038
11. BD (1) C 4 - C 9	/181. RY*(1) C 2	0.34	2.29	0.036
11. BD (1) C 4 - C 9	/182. RY*(2) C 2	0.25	2.07	0.029
11. BD (1) C 4 - C 9	/213. RY*(1) C 6	0.76	1.78	0.047
11. BD (1) C 4 - C 9	/214. RY*(2) C 6	0.29	1.61	0.027
11. BD (1) C 4 - C 9	/245. RY*(1) C 10	0.32	1.90	0.031
11. BD (1) C 4 - C 9	/246. RY*(2) C 10	0.81	1.95	0.051
11. BD (1) C 4 - C 9	/582. BD*(1) C 1 - C 2	2.31	1.06	0.063
11. BD (1) C 4 - C 9	/586. BD*(1) C 2 - C 4	2.10	1.26	0.065
11. BD (1) C 4 - C 9	/591. BD*(1) C 4 - C 6	0.95	1.09	0.041
11. BD (1) C 4 - C 9	/593. BD*(1) C 5 - C 6	0.99	1.28	0.045
11. BD (1) C 4 - C 9	/602. BD*(1) C 9 - C 10	1.43	1.29	0.054
11. BD (1) C 4 - C 9	/604. BD*(1) C 9 - H 24	0.33	1.09	0.024
11. BD (1) C 4 - C 9	/605. BD*(1) C 10 - H 25	1.52	1.08	0.051
12. BD (1) C 5 - C 6	/190. RY*(2) C 3	0.73	2.11	0.050
12. BD (1) C 5 - C 6	/198. RY*(2) C 4	0.73	2.29	0.052
12. BD (1) C 5 - C 6	/253. RY*(1) N 11	0.59	1.85	0.042
12. BD (1) C 5 - C 6	/589. BD*(1) C 3 - C 5	1.37	1.22	0.052
12. BD (1) C 5 - C 6	/590. BD*(1) C 3 - H 21	0.65	1.19	0.035
12. BD (1) C 5 - C 6	/591. BD*(1) C 4 - C 6	2.11	1.21	0.064
12. BD (1) C 5 - C 6	/592. BD*(1) C 4 - C 9	1.15	1.21	0.047
12. BD (1) C 5 - C 6	/595. BD*(1) C 5 - H 31	0.96	1.19	0.043
12. BD (1) C 5 - C 6	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.98	1.13	0.042
12. BD (1) C 5 - C 6	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.62	1.25	0.035
13. BD (2) C 5 - C 6	/191. RY*(3) C 3	0.56	0.78	0.028
13. BD (2) C 5 - C 6	/200. RY*(4) C 4	0.34	0.95	0.024
13. BD (2) C 5 - C 6	/584. BD*(2) C 1 - C 3	6.54	0.31	0.058
13. BD (2) C 5 - C 6	/587. BD*(2) C 2 - C 4	6.25	0.32	0.059
13. BD (2) C 5 - C 6	/606. BD*(1) N 11 - N 12	1.88	0.77	0.050
14. BD (1) C 5 - H 31	/189. RY*(1) C 3	0.49	1.83	0.038
14. BD (1) C 5 - H 31	/213. RY*(1) C 6	0.67	1.66	0.042
14. BD (1) C 5 - H 31	/214. RY*(2) C 6	0.28	1.49	0.026
14. BD (1) C 5 - H 31	/583. BD*(1) C 1 - C 3	1.34	1.14	0.049
14. BD (1) C 5 - H 31	/590. BD*(1) C 3 - H 21	0.25	0.95	0.020
14. BD (1) C 5 - H 31	/591. BD*(1) C 4 - C 6	3.28	0.97	0.072
14. BD (1) C 5 - H 31	/593. BD*(1) C 5 - C 6	0.87	1.16	0.040
14. BD (1) C 5 - H 31	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.65	0.89	0.031
15. BD (1) C 6 - N 11	/198. RY*(2) C 4	0.61	2.33	0.048
15. BD (1) C 6 - N 11	/205. RY*(1) C 5	0.57	2.09	0.044
15. BD (1) C 6 - N 11	/261. RY*(1) N 12	0.74	1.61	0.044
15. BD (1) C 6 - N 11	/262. RY*(2) N 12	0.31	1.65	0.029
15. BD (1) C 6 - N 11	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.73	1.41	0.040
15. BD (1) C 6 - N 11	/589. BD*(1) C 3 - C 5	1.23	1.25	0.050
15. BD (1) C 6 - N 11	/591. BD*(1) C 4 - C 6	0.63	1.24	0.035

15. BD (1) C 6 - N 11	/593. BD*(1) C 5 - C 6	1.15	1.43	0.051
15. BD (1) C 6 - N 11	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.74	1.28	0.039
15. BD (1) C 6 - N 11	/607. BD*(1) N 12 - C 13	2.74	1.16	0.071
16. BD (1) C 7 - C 8	/181. RY*(1) C 2	0.59	2.40	0.048
16. BD (1) C 7 - C 8	/182. RY*(2) C 2	0.36	2.18	0.036
16. BD (1) C 7 - C 8	/245. RY*(1) C 10	0.46	2.01	0.039
16. BD (1) C 7 - C 8	/246. RY*(2) C 10	0.41	2.06	0.037
16. BD (1) C 7 - C 8	/582. BD*(1) C 1 - C 2	1.35	1.17	0.050
16. BD (1) C 7 - C 8	/588. BD*(1) C 2 - C 7	1.49	1.19	0.053
16. BD (1) C 7 - C 8	/599. BD*(1) C 7 - H 22	0.88	1.19	0.041
16. BD (1) C 7 - C 8	/600. BD*(1) C 8 - C 10	1.21	1.21	0.048
16. BD (1) C 7 - C 8	/601. BD*(1) C 8 - H 23	0.80	1.19	0.039
16. BD (1) C 7 - C 8	/605. BD*(1) C 10 - H 25	0.78	1.19	0.039
17. BD (2) C 7 - C 8	/184. RY*(4) C 2	0.35	0.89	0.024
17. BD (2) C 7 - C 8	/247. RY*(3) C 10	0.46	0.82	0.026
17. BD (2) C 7 - C 8	/587. BD*(2) C 2 - C 4	6.09	0.31	0.058
17. BD (2) C 7 - C 8	/603. BD*(2) C 9 - C 10	6.43	0.32	0.057
18. BD (1) C 7 - H 22	/181. RY*(1) C 2	0.72	2.18	0.050
18. BD (1) C 7 - H 22	/229. RY*(1) C 8	0.69	1.72	0.044
18. BD (1) C 7 - H 22	/586. BD*(1) C 2 - C 4	1.61	1.15	0.054
18. BD (1) C 7 - H 22	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.75	1.17	0.037
18. BD (1) C 7 - H 22	/600. BD*(1) C 8 - C 10	2.74	0.99	0.066
18. BD (1) C 7 - H 22	/601. BD*(1) C 8 - H 23	0.48	0.97	0.027
19. BD (1) C 8 - C 10	/222. RY*(2) C 7	0.92	1.76	0.051
19. BD (1) C 8 - C 10	/238. RY*(2) C 9	0.96	1.70	0.051
19. BD (1) C 8 - C 10	/597. BD*(1) C 7 - C 8	1.33	1.29	0.052
19. BD (1) C 8 - C 10	/599. BD*(1) C 7 - H 22	1.58	1.08	0.052
19. BD (1) C 8 - C 10	/601. BD*(1) C 8 - H 23	0.30	1.09	0.023
19. BD (1) C 8 - C 10	/602. BD*(1) C 9 - C 10	1.37	1.30	0.053
19. BD (1) C 8 - C 10	/604. BD*(1) C 9 - H 24	1.63	1.10	0.054
19. BD (1) C 8 - C 10	/605. BD*(1) C 10 - H 25	0.29	1.09	0.022
20. BD (1) C 8 - H 23	/221. RY*(1) C 7	0.76	1.72	0.046
20. BD (1) C 8 - H 23	/245. RY*(1) C 10	0.66	1.77	0.043
20. BD (1) C 8 - H 23	/588. BD*(1) C 2 - C 7	3.14	0.95	0.069
20. BD (1) C 8 - H 23	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.71	1.16	0.036
20. BD (1) C 8 - H 23	/599. BD*(1) C 7 - H 22	0.54	0.95	0.029
20. BD (1) C 8 - H 23	/602. BD*(1) C 9 - C 10	1.40	1.17	0.051
21. BD (1) C 9 - C 10	/197. RY*(1) C 4	0.75	2.27	0.052
21. BD (1) C 9 - C 10	/198. RY*(2) C 4	0.30	2.29	0.033
21. BD (1) C 9 - C 10	/229. RY*(1) C 8	0.42	1.94	0.036
21. BD (1) C 9 - C 10	/230. RY*(2) C 8	0.43	2.04	0.038
21. BD (1) C 9 - C 10	/591. BD*(1) C 4 - C 6	1.26	1.20	0.050
21. BD (1) C 9 - C 10	/592. BD*(1) C 4 - C 9	1.47	1.20	0.053
21. BD (1) C 9 - C 10	/600. BD*(1) C 8 - C 10	1.24	1.21	0.049
21. BD (1) C 9 - C 10	/601. BD*(1) C 8 - H 23	0.78	1.19	0.038
21. BD (1) C 9 - C 10	/604. BD*(1) C 9 - H 24	0.85	1.20	0.040
21. BD (1) C 9 - C 10	/605. BD*(1) C 10 - H 25	0.83	1.19	0.040
22. BD (2) C 9 - C 10	/200. RY*(4) C 4	0.26	0.94	0.021
22. BD (2) C 9 - C 10	/231. RY*(3) C 8	0.48	0.78	0.026
22. BD (2) C 9 - C 10	/587. BD*(2) C 2 - C 4	6.46	0.31	0.059
22. BD (2) C 9 - C 10	/598. BD*(2) C 7 - C 8	7.04	0.31	0.059
23. BD (1) C 9 - H 24	/197. RY*(1) C 4	0.71	2.04	0.048
23. BD (1) C 9 - H 24	/245. RY*(1) C 10	0.65	1.77	0.043
23. BD (1) C 9 - H 24	/586. BD*(1) C 2 - C 4	1.75	1.13	0.056
23. BD (1) C 9 - H 24	/600. BD*(1) C 8 - C 10	2.73	0.98	0.065
23. BD (1) C 9 - H 24	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.78	1.16	0.038
23. BD (1) C 9 - H 24	/605. BD*(1) C 10 - H 25	0.49	0.96	0.027
24. BD (1) C 10 - H 25	/229. RY*(1) C 8	0.52	1.70	0.038
24. BD (1) C 10 - H 25	/237. RY*(1) C 9	0.64	1.71	0.042
24. BD (1) C 10 - H 25	/592. BD*(1) C 4 - C 9	3.04	0.96	0.068
24. BD (1) C 10 - H 25	/597. BD*(1) C 7 - C 8	1.36	1.16	0.050
24. BD (1) C 10 - H 25	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.77	1.16	0.038
24. BD (1) C 10 - H 25	/604. BD*(1) C 9 - H 24	0.50	0.96	0.028
25. BD (1) N 11 - N 12	/213. RY*(1) C 6	0.58	2.12	0.044
25. BD (1) N 11 - N 12	/269. RY*(1) C 13	0.56	2.09	0.043
25. BD (1) N 11 - N 12	/270. RY*(2) C 13	0.98	2.41	0.062
25. BD (1) N 11 - N 12	/593. BD*(1) C 5 - C 6	0.37	1.62	0.031
25. BD (1) N 11 - N 12	/594. BD*(2) C 5 - C 6	0.41	1.02	0.028
25. BD (1) N 11 - N 12	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.70	1.36	0.039
25. BD (1) N 11 - N 12	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.27	1.36	0.024
25. BD (1) N 11 - N 12	/608. BD*(1) C 13 - C 14	0.66	1.43	0.039

26. BD (1) N 12 - C 13	/213. RY*(1) C 6	0.31	1.93	0.031
26. BD (1) N 12 - C 13	/254. RY*(2) N 11	0.73	2.53	0.054
26. BD (1) N 12 - C 13	/255. RY*(3) N 11	0.51	2.02	0.041
26. BD (1) N 12 - C 13	/277. RY*(1) C 14	0.43	2.06	0.038
26. BD (1) N 12 - C 13	/285. RY*(1) C 15	0.49	1.91	0.039
26. BD (1) N 12 - C 13	/596. BD*(1) C 6 - N 11	2.42	1.17	0.067
26. BD (1) N 12 - C 13	/608. BD*(1) C 13 - C 14	0.42	1.23	0.029
26. BD (1) N 12 - C 13	/609. BD*(1) C 13 - C 15	1.21	1.40	0.052
26. BD (1) N 12 - C 13	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.44	1.43	0.032
26. BD (1) N 12 - C 13	/614. BD*(1) C 15 - C 17	1.47	1.23	0.054
27. BD (1) C 13 - C 14	/261. RY*(1) N 12	0.35	1.48	0.029
27. BD (1) C 13 - C 14	/287. RY*(3) C 15	0.44	1.77	0.035
27. BD (1) C 13 - C 14	/293. RY*(1) C 16	0.43	1.85	0.036
27. BD (1) C 13 - C 14	/294. RY*(2) C 16	0.75	1.98	0.049
27. BD (1) C 13 - C 14	/606. BD*(1) N 11 - N 12	1.49	1.15	0.052
27. BD (1) C 13 - C 14	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.60	1.03	0.031
27. BD (1) C 13 - C 14	/609. BD*(1) C 13 - C 15	2.20	1.27	0.067
27. BD (1) C 13 - C 14	/611. BD*(1) C 14 - C 16	1.22	1.30	0.050
27. BD (1) C 13 - C 14	/613. BD*(1) C 14 - H 26	0.30	1.09	0.023
27. BD (1) C 13 - C 14	/615. BD*(1) C 15 - O 19	2.60	0.97	0.063
27. BD (1) C 13 - C 14	/617. BD*(1) C 16 - H 27	1.47	1.10	0.051
28. BD (1) C 13 - C 15	/263. RY*(3) N 12	0.29	1.84	0.029
28. BD (1) C 13 - C 15	/277. RY*(1) C 14	0.52	2.05	0.041
28. BD (1) C 13 - C 15	/301. RY*(1) C 17	0.68	2.07	0.048
28. BD (1) C 13 - C 15	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.83	1.15	0.039
28. BD (1) C 13 - C 15	/608. BD*(1) C 13 - C 14	2.16	1.22	0.065
28. BD (1) C 13 - C 15	/613. BD*(1) C 14 - H 26	0.63	1.21	0.035
28. BD (1) C 13 - C 15	/614. BD*(1) C 15 - C 17	1.89	1.22	0.061
28. BD (1) C 13 - C 15	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.41	1.09	0.027
28. BD (1) C 13 - C 15	/620. BD*(1) C 17 - H 28	0.65	1.22	0.035
29. BD (2) C 13 - C 15	/262. RY*(2) N 12	0.29	1.16	0.025
29. BD (2) C 13 - C 15	/279. RY*(3) C 14	0.49	0.84	0.027
29. BD (2) C 13 - C 15	/303. RY*(3) C 17	0.60	0.87	0.031
29. BD (2) C 13 - C 15	/612. BD*(2) C 14 - C 16	5.37	0.34	0.054
29. BD (2) C 13 - C 15	/619. BD*(2) C 17 - C 18	7.33	0.33	0.063
30. BD (1) C 14 - C 16	/270. RY*(2) C 13	0.91	2.18	0.056
30. BD (1) C 14 - C 16	/309. RY*(1) C 18	0.50	1.94	0.039
30. BD (1) C 14 - C 16	/310. RY*(2) C 18	0.42	2.06	0.037
30. BD (1) C 14 - C 16	/607. BD*(1) N 12 - C 13	1.44	1.12	0.051
30. BD (1) C 14 - C 16	/608. BD*(1) C 13 - C 14	1.18	1.19	0.047
30. BD (1) C 14 - C 16	/613. BD*(1) C 14 - H 26	0.85	1.19	0.040
30. BD (1) C 14 - C 16	/616. BD*(1) C 16 - C 18	1.16	1.21	0.047
30. BD (1) C 14 - C 16	/617. BD*(1) C 16 - H 27	0.79	1.20	0.039
30. BD (1) C 14 - C 16	/621. BD*(1) C 18 - H 29	0.79	1.20	0.039
31. BD (2) C 14 - C 16	/272. RY*(4) C 13	0.26	0.93	0.020
31. BD (2) C 14 - C 16	/311. RY*(3) C 18	0.46	0.79	0.025
31. BD (2) C 14 - C 16	/610. BD*(2) C 13 - C 15	6.92	0.29	0.061
31. BD (2) C 14 - C 16	/619. BD*(2) C 17 - C 18	5.76	0.31	0.054
32. BD (1) C 14 - H 26	/269. RY*(1) C 13	0.40	1.63	0.032
32. BD (1) C 14 - H 26	/293. RY*(1) C 16	0.65	1.71	0.042
32. BD (1) C 14 - H 26	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.31	0.89	0.021
32. BD (1) C 14 - H 26	/609. BD*(1) C 13 - C 15	1.64	1.13	0.055
32. BD (1) C 14 - H 26	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.74	1.16	0.037
32. BD (1) C 14 - H 26	/616. BD*(1) C 16 - C 18	2.75	0.98	0.066
32. BD (1) C 14 - H 26	/617. BD*(1) C 16 - H 27	0.50	0.96	0.028
33. BD (1) C 15 - C 17	/269. RY*(1) C 13	0.53	1.77	0.039
33. BD (1) C 15 - C 17	/271. RY*(3) C 13	0.30	1.58	0.028
33. BD (1) C 15 - C 17	/309. RY*(1) C 18	0.40	1.85	0.034
33. BD (1) C 15 - C 17	/310. RY*(2) C 18	0.72	1.96	0.048
33. BD (1) C 15 - C 17	/607. BD*(1) N 12 - C 13	2.53	1.03	0.064
33. BD (1) C 15 - C 17	/609. BD*(1) C 13 - C 15	2.08	1.27	0.065
33. BD (1) C 15 - C 17	/618. BD*(1) C 17 - C 18	1.32	1.30	0.053
33. BD (1) C 15 - C 17	/620. BD*(1) C 17 - H 28	0.30	1.10	0.023
33. BD (1) C 15 - C 17	/621. BD*(1) C 18 - H 29	1.50	1.10	0.052
34. BD (1) C 15 - O 19	/269. RY*(1) C 13	0.29	1.97	0.030
34. BD (1) C 15 - O 19	/285. RY*(1) C 15	0.57	1.98	0.042
34. BD (1) C 15 - O 19	/608. BD*(1) C 13 - C 14	1.40	1.31	0.054
34. BD (1) C 15 - O 19	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.76	1.48	0.043
34. BD (1) C 15 - O 19	/614. BD*(1) C 15 - C 17	0.31	1.31	0.026
34. BD (1) C 15 - O 19	/618. BD*(1) C 17 - C 18	0.49	1.51	0.034
35. BD (1) C 16 - C 18	/278. RY*(2) C 14	0.97	1.83	0.053

35. BD (1) C 16 - C 18	/302. RY*(2) C 17	0.96	1.83	0.053
35. BD (1) C 16 - C 18	/611. BD*(1) C 14 - C 16	1.25	1.29	0.051
35. BD (1) C 16 - C 18	/613. BD*(1) C 14 - H 26	1.63	1.08	0.053
35. BD (1) C 16 - C 18	/617. BD*(1) C 16 - H 27	0.30	1.09	0.023
35. BD (1) C 16 - C 18	/618. BD*(1) C 17 - C 18	1.24	1.29	0.051
35. BD (1) C 16 - C 18	/620. BD*(1) C 17 - H 28	1.69	1.09	0.054
35. BD (1) C 16 - C 18	/621. BD*(1) C 18 - H 29	0.29	1.09	0.023
36. BD (1) C 16 - H 27	/277. RY*(1) C 14	0.78	1.78	0.047
36. BD (1) C 16 - H 27	/309. RY*(1) C 18	0.59	1.70	0.040
36. BD (1) C 16 - H 27	/608. BD*(1) C 13 - C 14	2.99	0.96	0.068
36. BD (1) C 16 - H 27	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.71	1.16	0.036
36. BD (1) C 16 - H 27	/613. BD*(1) C 14 - H 26	0.48	0.95	0.027
36. BD (1) C 16 - H 27	/618. BD*(1) C 17 - C 18	1.36	1.16	0.050
37. BD (1) C 17 - C 18	/285. RY*(1) C 15	0.49	1.87	0.038
37. BD (1) C 17 - C 18	/286. RY*(2) C 15	0.52	2.17	0.043
37. BD (1) C 17 - C 18	/293. RY*(1) C 16	0.52	1.94	0.040
37. BD (1) C 17 - C 18	/294. RY*(2) C 16	0.43	2.08	0.038
37. BD (1) C 17 - C 18	/614. BD*(1) C 15 - C 17	1.07	1.19	0.045
37. BD (1) C 17 - C 18	/615. BD*(1) C 15 - O 19	1.37	1.07	0.048
37. BD (1) C 17 - C 18	/616. BD*(1) C 16 - C 18	1.14	1.21	0.047
37. BD (1) C 17 - C 18	/617. BD*(1) C 16 - H 27	0.80	1.20	0.039
37. BD (1) C 17 - C 18	/620. BD*(1) C 17 - H 28	0.88	1.19	0.041
37. BD (1) C 17 - C 18	/621. BD*(1) C 18 - H 29	0.78	1.20	0.039
38. BD (2) C 17 - C 18	/288. RY*(4) C 15	0.27	0.94	0.021
38. BD (2) C 17 - C 18	/295. RY*(3) C 16	0.52	0.79	0.027
38. BD (2) C 17 - C 18	/610. BD*(2) C 13 - C 15	5.38	0.30	0.054
38. BD (2) C 17 - C 18	/612. BD*(2) C 14 - C 16	7.34	0.31	0.061
39. BD (1) C 17 - H 28	/285. RY*(1) C 15	0.40	1.64	0.033
39. BD (1) C 17 - H 28	/309. RY*(1) C 18	0.63	1.71	0.042
39. BD (1) C 17 - H 28	/609. BD*(1) C 13 - C 15	1.59	1.13	0.054
39. BD (1) C 17 - H 28	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.43	0.83	0.024
39. BD (1) C 17 - H 28	/616. BD*(1) C 16 - C 18	2.70	0.98	0.065
39. BD (1) C 17 - H 28	/618. BD*(1) C 17 - C 18	0.75	1.16	0.037
39. BD (1) C 17 - H 28	/621. BD*(1) C 18 - H 29	0.48	0.96	0.027
40. BD (1) C 18 - H 29	/293. RY*(1) C 16	0.60	1.71	0.041
40. BD (1) C 18 - H 29	/301. RY*(1) C 17	0.80	1.81	0.048
40. BD (1) C 18 - H 29	/611. BD*(1) C 14 - C 16	1.37	1.16	0.050
40. BD (1) C 18 - H 29	/614. BD*(1) C 15 - C 17	2.94	0.96	0.067
40. BD (1) C 18 - H 29	/618. BD*(1) C 17 - C 18	0.67	1.16	0.035
40. BD (1) C 18 - H 29	/620. BD*(1) C 17 - H 28	0.48	0.96	0.027
41. BD (1) O 20 - H 30	/173. RY*(1) C 1	1.35	1.79	0.062
41. BD (1) O 20 - H 30	/583. BD*(1) C 1 - C 3	1.72	1.34	0.061
85. CR (1) C 1	/181. RY*(1) C 2	0.63	11.78	0.109
85. CR (1) C 1	/190. RY*(2) C 3	1.15	11.48	0.145
85. CR (1) C 1	/583. BD*(1) C 1 - C 3	1.02	10.75	0.133
85. CR (1) C 1	/585. BD*(1) C 1 - O 20	0.66	10.40	0.105
85. CR (1) C 1	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.31	10.75	0.074
85. CR (1) C 1	/588. BD*(1) C 2 - C 7	0.34	10.57	0.077
85. CR (1) C 1	/589. BD*(1) C 3 - C 5	0.49	10.60	0.092
86. CR (1) C 2	/173. RY*(1) C 1	0.50	11.14	0.094
86. CR (1) C 2	/197. RY*(1) C 4	0.33	11.59	0.078
86. CR (1) C 2	/198. RY*(2) C 4	1.06	11.61	0.140
86. CR (1) C 2	/222. RY*(2) C 7	0.51	11.18	0.096
86. CR (1) C 2	/583. BD*(1) C 1 - C 3	0.30	10.69	0.072
86. CR (1) C 2	/585. BD*(1) C 1 - O 20	0.26	10.34	0.066
86. CR (1) C 2	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.67	10.69	0.107
86. CR (1) C 2	/591. BD*(1) C 4 - C 6	0.58	10.52	0.100
86. CR (1) C 2	/592. BD*(1) C 4 - C 9	0.53	10.52	0.095
86. CR (1) C 2	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.28	10.71	0.069
87. CR (1) C 3	/174. RY*(2) C 1	1.64	11.45	0.173
87. CR (1) C 3	/334. RY*(2) H 21	0.30	12.29	0.076
87. CR (1) C 3	/582. BD*(1) C 1 - C 2	0.68	10.46	0.107
87. CR (1) C 3	/583. BD*(1) C 1 - C 3	0.33	10.66	0.075
87. CR (1) C 3	/585. BD*(1) C 1 - O 20	0.40	10.31	0.082
87. CR (1) C 3	/593. BD*(1) C 5 - C 6	0.35	10.68	0.077
88. CR (1) C 4	/182. RY*(2) C 2	1.13	11.49	0.144
88. CR (1) C 4	/215. RY*(3) C 6	0.68	11.18	0.110
88. CR (1) C 4	/238. RY*(2) C 9	0.57	11.11	0.101
88. CR (1) C 4	/582. BD*(1) C 1 - C 2	0.56	10.48	0.098
88. CR (1) C 4	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.57	10.68	0.099
88. CR (1) C 4	/588. BD*(1) C 2 - C 7	0.52	10.50	0.094

88. CR (1) C 4	/593. BD*(1) C 5 - C 6	0.35	10.70	0.078
88. CR (1) C 4	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.28	10.44	0.069
88. CR (1) C 4	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.29	10.71	0.070
89. CR (1) C 5	/213. RY*(1) C 6	0.33	11.18	0.076
89. CR (1) C 5	/214. RY*(2) C 6	1.21	11.02	0.146
89. CR (1) C 5	/216. RY*(4) C 6	0.43	11.03	0.086
89. CR (1) C 5	/354. RY*(2) H 31	0.26	12.32	0.071
89. CR (1) C 5	/583. BD*(1) C 1 - C 3	0.33	10.66	0.075
89. CR (1) C 5	/591. BD*(1) C 4 - C 6	0.68	10.50	0.108
89. CR (1) C 5	/593. BD*(1) C 5 - C 6	0.48	10.68	0.091
89. CR (1) C 5	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.49	10.42	0.091
90. CR (1) C 6	/197. RY*(1) C 4	0.66	11.61	0.111
90. CR (1) C 6	/206. RY*(2) C 5	1.18	11.30	0.146
90. CR (1) C 6	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.37	10.71	0.080
90. CR (1) C 6	/589. BD*(1) C 3 - C 5	0.49	10.55	0.091
90. CR (1) C 6	/592. BD*(1) C 4 - C 9	0.34	10.54	0.076
90. CR (1) C 6	/593. BD*(1) C 5 - C 6	0.75	10.73	0.114
90. CR (1) C 6	/595. BD*(1) C 5 - H 31	0.25	10.52	0.066
90. CR (1) C 6	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.39	10.58	0.082
91. CR (1) C 7	/182. RY*(2) C 2	0.35	11.48	0.081
91. CR (1) C 7	/230. RY*(2) C 8	1.15	11.34	0.144
91. CR (1) C 7	/336. RY*(2) H 22	0.27	12.26	0.073
91. CR (1) C 7	/582. BD*(1) C 1 - C 2	0.35	10.47	0.077
91. CR (1) C 7	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.37	10.67	0.080
91. CR (1) C 7	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.43	10.69	0.086
91. CR (1) C 7	/600. BD*(1) C 8 - C 10	0.53	10.51	0.095
92. CR (1) C 8	/221. RY*(1) C 7	0.37	11.24	0.082
92. CR (1) C 8	/222. RY*(2) C 7	0.63	11.15	0.106
92. CR (1) C 8	/224. RY*(4) C 7	0.40	11.08	0.085
92. CR (1) C 8	/246. RY*(2) C 10	0.44	11.35	0.089
92. CR (1) C 8	/338. RY*(2) H 23	0.31	11.93	0.076
92. CR (1) C 8	/588. BD*(1) C 2 - C 7	0.62	10.48	0.102
92. CR (1) C 8	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.38	10.68	0.081
92. CR (1) C 8	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.32	10.69	0.074
93. CR (1) C 9	/198. RY*(2) C 4	0.50	11.58	0.096
93. CR (1) C 9	/246. RY*(2) C 10	1.09	11.35	0.141
93. CR (1) C 9	/340. RY*(2) H 24	0.26	12.40	0.071
93. CR (1) C 9	/586. BD*(1) C 2 - C 4	0.42	10.66	0.085
93. CR (1) C 9	/591. BD*(1) C 4 - C 6	0.34	10.49	0.077
93. CR (1) C 9	/600. BD*(1) C 8 - C 10	0.54	10.50	0.095
93. CR (1) C 9	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.43	10.69	0.086
94. CR (1) C 10	/230. RY*(2) C 8	0.42	11.33	0.087
94. CR (1) C 10	/237. RY*(1) C 9	0.39	11.24	0.084
94. CR (1) C 10	/238. RY*(2) C 9	0.51	11.09	0.095
94. CR (1) C 10	/240. RY*(4) C 9	0.57	11.20	0.101
94. CR (1) C 10	/342. RY*(2) H 25	0.34	12.31	0.082
94. CR (1) C 10	/592. BD*(1) C 4 - C 9	0.61	10.49	0.101
94. CR (1) C 10	/597. BD*(1) C 7 - C 8	0.32	10.68	0.074
94. CR (1) C 10	/602. BD*(1) C 9 - C 10	0.41	10.69	0.084
95. CR (1) N 11	/213. RY*(1) C 6	0.89	15.34	0.148
95. CR (1) N 11	/263. RY*(3) N 12	0.85	15.27	0.144
95. CR (1) N 11	/591. BD*(1) C 4 - C 6	0.28	14.66	0.082
95. CR (1) N 11	/593. BD*(1) C 5 - C 6	0.28	14.84	0.082
95. CR (1) N 11	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.68	14.58	0.127
96. CR (1) N 12	/255. RY*(3) N 11	0.99	15.44	0.156
96. CR (1) N 12	/269. RY*(1) C 13	0.78	15.32	0.138
96. CR (1) N 12	/270. RY*(2) C 13	0.30	15.64	0.086
96. CR (1) N 12	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.63	14.59	0.122
96. CR (1) N 12	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.36	14.83	0.093
97. CR (1) C 13	/278. RY*(2) C 14	0.51	11.28	0.096
97. CR (1) C 13	/285. RY*(1) C 15	0.51	11.21	0.096
97. CR (1) C 13	/286. RY*(2) C 15	1.17	11.51	0.146
97. CR (1) C 13	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.46	10.59	0.088
97. CR (1) C 13	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.74	10.71	0.113
97. CR (1) C 13	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.28	10.73	0.070
97. CR (1) C 13	/614. BD*(1) C 15 - C 17	0.56	10.53	0.098
97. CR (1) C 13	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.40	10.41	0.082
98. CR (1) C 14	/269. RY*(1) C 13	0.29	11.16	0.072
98. CR (1) C 14	/271. RY*(3) C 13	0.40	10.97	0.084
98. CR (1) C 14	/294. RY*(2) C 16	1.07	11.37	0.139
98. CR (1) C 14	/344. RY*(2) H 26	0.31	12.30	0.078

98. CR (1) C 14	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.29	10.42	0.070
98. CR (1) C 14	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.41	10.66	0.084
98. CR (1) C 14	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.44	10.69	0.087
98. CR (1) C 14	/616. BD*(1) C 16 - C 18	0.52	10.51	0.094
99. CR (1) C 15	/270. RY*(2) C 13	1.56	11.54	0.169
99. CR (1) C 15	/302. RY*(2) C 17	0.53	11.30	0.097
99. CR (1) C 15	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.43	10.49	0.086
99. CR (1) C 15	/608. BD*(1) C 13 - C 14	0.56	10.56	0.097
99. CR (1) C 15	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.90	10.73	0.125
99. CR (1) C 15	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.42	10.43	0.085
99. CR (1) C 15	/618. BD*(1) C 17 - C 18	0.30	10.76	0.072
100. CR (1) C 16	/277. RY*(1) C 14	0.43	11.31	0.088
100. CR (1) C 16	/278. RY*(2) C 14	0.75	11.23	0.116
100. CR (1) C 16	/310. RY*(2) C 18	0.45	11.35	0.091
100. CR (1) C 16	/346. RY*(2) H 27	0.33	12.02	0.080
100. CR (1) C 16	/608. BD*(1) C 13 - C 14	0.56	10.48	0.098
100. CR (1) C 16	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.37	10.68	0.080
100. CR (1) C 16	/618. BD*(1) C 17 - C 18	0.30	10.68	0.072
101. CR (1) C 17	/286. RY*(2) C 15	0.26	11.46	0.069
101. CR (1) C 17	/287. RY*(3) C 15	0.65	11.15	0.107
101. CR (1) C 17	/310. RY*(2) C 18	1.06	11.35	0.139
101. CR (1) C 17	/348. RY*(2) H 28	0.30	12.34	0.077
101. CR (1) C 17	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.45	10.66	0.088
101. CR (1) C 17	/616. BD*(1) C 16 - C 18	0.52	10.50	0.094
101. CR (1) C 17	/618. BD*(1) C 17 - C 18	0.42	10.69	0.085
102. CR (1) C 18	/294. RY*(2) C 16	0.46	11.37	0.092
102. CR (1) C 18	/301. RY*(1) C 17	0.44	11.34	0.090
102. CR (1) C 18	/302. RY*(2) C 17	0.82	11.22	0.121
102. CR (1) C 18	/350. RY*(2) H 29	0.31	11.98	0.078
102. CR (1) C 18	/611. BD*(1) C 14 - C 16	0.30	10.68	0.072
102. CR (1) C 18	/614. BD*(1) C 15 - C 17	0.53	10.48	0.095
102. CR (1) C 18	/618. BD*(1) C 17 - C 18	0.38	10.69	0.081
103. CR (1) O 19	/285. RY*(1) C 15	1.45	20.03	0.216
103. CR (1) O 19	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.30	19.53	0.098
104. CR (1) O 20	/173. RY*(1) C 1	1.16	20.03	0.193
104. CR (1) O 20	/582. BD*(1) C 1 - C 2	0.28	19.38	0.094
140. LP (1) N 11	/214. RY*(2) C 6	0.27	1.28	0.024
140. LP (1) N 11	/261. RY*(1) N 12	0.63	1.13	0.034
140. LP (1) N 11	/262. RY*(2) N 12	1.02	1.16	0.044
140. LP (1) N 11	/589. BD*(1) C 3 - C 5	0.25	0.77	0.018
140. LP (1) N 11	/591. BD*(1) C 4 - C 6	4.40	0.76	0.074
140. LP (1) N 11	/593. BD*(1) C 5 - C 6	2.54	0.94	0.063
140. LP (1) N 11	/594. BD*(2) C 5 - C 6	0.62	0.34	0.019
141. LP (2) N 11	/213. RY*(1) C 6	0.82	1.62	0.047
141. LP (2) N 11	/253. RY*(1) N 11	0.88	1.58	0.048
141. LP (2) N 11	/254. RY*(2) N 11	1.67	2.22	0.079
141. LP (2) N 11	/255. RY*(3) N 11	0.68	1.71	0.044
141. LP (2) N 11	/261. RY*(1) N 12	0.37	1.31	0.028
141. LP (2) N 11	/317. RY*(1) O 19	0.45	2.65	0.045
141. LP (2) N 11	/591. BD*(1) C 4 - C 6	0.55	0.94	0.029
141. LP (2) N 11	/594. BD*(2) C 5 - C 6	3.49	0.53	0.056
142. LP (1) N 12	/254. RY*(2) N 11	0.35	2.15	0.035
142. LP (1) N 12	/255. RY*(3) N 11	0.45	1.63	0.035
142. LP (1) N 12	/269. RY*(1) C 13	0.96	1.52	0.049
142. LP (1) N 12	/608. BD*(1) C 13 - C 14	0.57	0.85	0.028
142. LP (1) N 12	/609. BD*(1) C 13 - C 15	3.64	1.02	0.077
143. LP (2) N 12	/253. RY*(1) N 11	1.08	1.38	0.051
143. LP (2) N 12	/272. RY*(4) C 13	0.35	0.94	0.024
143. LP (2) N 12	/610. BD*(2) C 13 - C 15	16.65	0.30	0.095
144. LP (1) O 19	/285. RY*(1) C 15	1.04	1.67	0.053
144. LP (1) O 19	/609. BD*(1) C 13 - C 15	3.39	1.17	0.080
145. LP (2) O 19	/254. RY*(2) N 11	0.37	2.24	0.037
145. LP (2) O 19	/285. RY*(1) C 15	0.69	1.62	0.043
145. LP (2) O 19	/317. RY*(1) O 19	0.54	2.67	0.049
145. LP (2) O 19	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.35	1.12	0.025
145. LP (2) O 19	/610. BD*(2) C 13 - C 15	0.45	0.53	0.021
145. LP (2) O 19	/614. BD*(1) C 15 - C 17	3.58	0.95	0.074
146. LP (3) O 19	/288. RY*(4) C 15	0.34	1.01	0.024
146. LP (3) O 19	/317. RY*(1) O 19	0.25	2.52	0.033
146. LP (3) O 19	/610. BD*(2) C 13 - C 15	10.31	0.37	0.085
146. LP (3) O 19	/614. BD*(1) C 15 - C 17	0.33	0.79	0.021

147. LP (1) O 20	/173. RY*(1) C 1	1.45	1.66	0.062
147. LP (1) O 20	/582. BD*(1) C 1 - C 2	3.52	1.01	0.076
148. LP (2) O 20	/584. BD*(2) C 1 - C 3	12.04	0.35	0.086
584. BD*(2) C 1 - C 3	/176. RY*(4) C 1	0.51	0.54	0.058
584. BD*(2) C 1 - C 3	/191. RY*(3) C 3	1.15	0.48	0.081
587. BD*(2) C 2 - C 4	/184. RY*(4) C 2	1.11	0.57	0.075
587. BD*(2) C 2 - C 4	/200. RY*(4) C 4	0.87	0.63	0.070
594. BD*(2) C 5 - C 6	/207. RY*(3) C 5	0.50	0.68	0.066
594. BD*(2) C 5 - C 6	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.51	0.45	0.053
598. BD*(2) C 7 - C 8	/223. RY*(3) C 7	0.69	0.46	0.073
598. BD*(2) C 7 - C 8	/231. RY*(3) C 8	0.74	0.48	0.077
603. BD*(2) C 9 - C 10	/239. RY*(3) C 9	0.62	0.55	0.077
603. BD*(2) C 9 - C 10	/247. RY*(3) C 10	0.65	0.51	0.076
610. BD*(2) C 13 - C 15	/272. RY*(4) C 13	1.03	0.64	0.070
610. BD*(2) C 13 - C 15	/288. RY*(4) C 15	0.77	0.64	0.061
610. BD*(2) C 13 - C 15	/612. BD*(2) C 14 - C 16	62.76	0.02	0.071
610. BD*(2) C 13 - C 15	/619. BD*(2) C 17 - C 18	82.91	0.01	0.071
612. BD*(2) C 14 - C 16	/279. RY*(3) C 14	0.75	0.50	0.072
612. BD*(2) C 14 - C 16	/295. RY*(3) C 16	0.90	0.48	0.077
619. BD*(2) C 17 - C 18	/303. RY*(3) C 17	0.96	0.54	0.078
619. BD*(2) C 17 - C 18	/311. RY*(3) C 18	0.95	0.48	0.073

from unit 1 to unit 2

5. BD (1) C 2 - C 4	/521. RY*(1) H 58	0.04	1.18	0.009
6. BD (2) C 2 - C 4	/661. BD*(1) C 48 - H 58	0.03	0.71	0.006
10. BD (1) C 4 - C 6	/467. RY*(1) C 46	0.05	1.80	0.011
10. BD (1) C 4 - C 6	/542. RY*(2) O 65	0.04	1.79	0.011
11. BD (1) C 4 - C 9	/483. RY*(1) C 48	0.06	1.92	0.013
11. BD (1) C 4 - C 9	/485. RY*(3) C 48	0.04	1.41	0.009
12. BD (1) C 5 - C 6	/542. RY*(2) O 65	0.03	1.90	0.009
13. BD (2) C 5 - C 6	/542. RY*(2) O 65	0.03	1.42	0.009
13. BD (2) C 5 - C 6	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.04	0.57	0.007
15. BD (1) C 6 - N 11	/467. RY*(1) C 46	0.04	1.94	0.012
15. BD (1) C 6 - N 11	/542. RY*(2) O 65	0.04	1.93	0.012
21. BD (1) C 9 - C 10	/483. RY*(1) C 48	0.05	2.02	0.013
21. BD (1) C 9 - C 10	/485. RY*(3) C 48	0.09	1.52	0.015
22. BD (2) C 9 - C 10	/660. BD*(2) C 48 - C 49	0.17	0.30	0.009
33. BD (1) C 15 - C 17	/527. RY*(1) H 61	0.12	1.34	0.016
34. BD (1) C 15 - O 19	/435. RY*(1) N 42	0.16	2.11	0.023
34. BD (1) C 15 - O 19	/436. RY*(2) N 42	0.05	2.42	0.014
34. BD (1) C 15 - O 19	/451. RY*(1) C 44	0.07	1.99	0.015
38. BD (2) C 17 - C 18	/636. BD*(1) C 36 - H 61	0.05	0.72	0.008
39. BD (1) C 17 - H 28	/636. BD*(1) C 36 - H 61	0.03	0.96	0.007
141. LP (2) N 11	/395. RY*(1) C 37	0.05	1.61	0.011
141. LP (2) N 11	/396. RY*(2) C 37	0.10	1.58	0.016
141. LP (2) N 11	/398. RY*(4) C 37	0.10	1.43	0.016
141. LP (2) N 11	/399. RY*(5) C 37	0.03	3.44	0.014
141. LP (2) N 11	/400. RY*(6) C 37	0.04	3.60	0.015
141. LP (2) N 11	/436. RY*(2) N 42	0.17	2.04	0.024
141. LP (2) N 11	/437. RY*(3) N 42	0.27	1.76	0.028
141. LP (2) N 11	/443. RY*(1) N 43	0.03	1.32	0.008
141. LP (2) N 11	/445. RY*(3) N 43	0.06	1.56	0.012
141. LP (2) N 11	/453. RY*(3) C 44	0.03	1.38	0.008
141. LP (2) N 11	/467. RY*(1) C 46	0.23	1.64	0.025
141. LP (2) N 11	/468. RY*(2) C 46	0.05	1.88	0.013
141. LP (2) N 11	/469. RY*(3) C 46	0.09	1.20	0.013
141. LP (2) N 11	/471. RY*(5) C 46	0.06	3.47	0.018
141. LP (2) N 11	/541. RY*(1) O 65	0.50	2.56	0.046
141. LP (2) N 11	/543. RY*(3) O 65	0.03	1.96	0.009
141. LP (2) N 11	/544. RY*(4) O 65	0.10	2.01	0.018
141. LP (2) N 11	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.14	0.78	0.013
144. LP (1) O 19	/435. RY*(1) N 42	0.15	1.80	0.021
144. LP (1) O 19	/436. RY*(2) N 42	0.19	2.11	0.025
144. LP (1) O 19	/437. RY*(3) N 42	0.17	1.83	0.022
144. LP (1) O 19	/444. RY*(2) N 43	0.03	1.41	0.008
144. LP (1) O 19	/446. RY*(4) N 43	0.03	2.19	0.010
144. LP (1) O 19	/467. RY*(1) C 46	0.04	1.71	0.011
144. LP (1) O 19	/471. RY*(5) C 46	0.03	3.54	0.014
144. LP (1) O 19	/541. RY*(1) O 65	0.06	2.63	0.016
144. LP (1) O 19	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.16	0.92	0.015
144. LP (1) O 19	/648. BD*(1) N 43 - C 44	0.06	0.91	0.010

144. LP (1) O 19	/651. BD*(2) C 44 - C 46	0.08	0.55	0.009
145. LP (2) O 19	/395. RY*(1) C 37	0.03	1.63	0.009
145. LP (2) O 19	/396. RY*(2) C 37	0.05	1.60	0.011
145. LP (2) O 19	/398. RY*(4) C 37	0.04	1.45	0.010
145. LP (2) O 19	/435. RY*(1) N 42	0.03	1.75	0.009
145. LP (2) O 19	/436. RY*(2) N 42	0.17	2.06	0.024
145. LP (2) O 19	/437. RY*(3) N 42	0.22	1.78	0.025
145. LP (2) O 19	/467. RY*(1) C 46	0.06	1.66	0.013
145. LP (2) O 19	/469. RY*(3) C 46	0.03	1.22	0.007
145. LP (2) O 19	/471. RY*(5) C 46	0.03	3.49	0.014
145. LP (2) O 19	/541. RY*(1) O 65	0.05	2.58	0.015
145. LP (2) O 19	/544. RY*(4) O 65	0.05	2.03	0.013
145. LP (2) O 19	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.17	0.87	0.015
145. LP (2) O 19	/648. BD*(1) N 43 - C 44	0.03	0.86	0.007
145. LP (2) O 19	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.03	0.80	0.006
146. LP (3) O 19	/395. RY*(1) C 37	0.03	1.47	0.009
146. LP (3) O 19	/397. RY*(3) C 37	0.03	1.41	0.008
146. LP (3) O 19	/435. RY*(1) N 42	0.49	1.60	0.036
146. LP (3) O 19	/436. RY*(2) N 42	0.31	1.91	0.032
146. LP (3) O 19	/437. RY*(3) N 42	0.14	1.63	0.020
146. LP (3) O 19	/438. RY*(4) N 42	0.03	1.82	0.010
146. LP (3) O 19	/444. RY*(2) N 43	0.03	1.21	0.007
146. LP (3) O 19	/445. RY*(3) N 43	0.04	1.42	0.009
146. LP (3) O 19	/453. RY*(3) C 44	0.03	1.25	0.007
146. LP (3) O 19	/467. RY*(1) C 46	0.05	1.51	0.012
146. LP (3) O 19	/468. RY*(2) C 46	0.05	1.75	0.012
146. LP (3) O 19	/469. RY*(3) C 46	0.06	1.06	0.011
146. LP (3) O 19	/541. RY*(1) O 65	0.03	2.43	0.012
146. LP (3) O 19	/544. RY*(4) O 65	0.03	1.88	0.011
146. LP (3) O 19	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.15	0.72	0.013
146. LP (3) O 19	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.04	0.84	0.007
619. BD*(2) C 17 - C 18	/636. BD*(1) C 36 - H 61	0.06	0.41	0.017

from unit 1 to unit 3

25. BD (1) N 11 - N 12	/529. RY*(1) O 62	0.03	2.74	0.011
26. BD (1) N 12 - C 13	/529. RY*(1) O 62	0.03	2.55	0.012
26. BD (1) N 12 - C 13	/537. RY*(1) H 63	0.03	1.31	0.007
28. BD (1) C 13 - C 15	/539. RY*(1) H 64	0.03	1.39	0.008
29. BD (2) C 13 - C 15	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.18	0.61	0.014
33. BD (1) C 15 - C 17	/529. RY*(1) O 62	0.03	2.41	0.010
33. BD (1) C 15 - C 17	/539. RY*(1) H 64	0.03	1.27	0.008
140. LP (1) N 11	/529. RY*(1) O 62	0.03	2.06	0.010
140. LP (1) N 11	/664. BD*(1) O 62 - H 63	0.12	0.61	0.011
141. LP (2) N 11	/529. RY*(1) O 62	0.91	2.24	0.059
141. LP (2) N 11	/530. RY*(2) O 62	0.21	1.85	0.025
141. LP (2) N 11	/531. RY*(3) O 62	0.10	1.55	0.016
141. LP (2) N 11	/532. RY*(4) O 62	0.14	1.70	0.020
141. LP (2) N 11	/537. RY*(1) H 63	0.28	1.01	0.022
141. LP (2) N 11	/539. RY*(1) H 64	0.28	1.10	0.023
141. LP (2) N 11	/664. BD*(1) O 62 - H 63	0.05	0.79	0.008
144. LP (1) O 19	/529. RY*(1) O 62	0.16	2.31	0.024
144. LP (1) O 19	/530. RY*(2) O 62	0.03	1.92	0.009
144. LP (1) O 19	/537. RY*(1) H 63	0.04	1.08	0.009
144. LP (1) O 19	/539. RY*(1) H 64	0.05	1.17	0.010
145. LP (2) O 19	/529. RY*(1) O 62	0.41	2.26	0.039
145. LP (2) O 19	/530. RY*(2) O 62	0.09	1.87	0.016
145. LP (2) O 19	/531. RY*(3) O 62	0.03	1.57	0.008
145. LP (2) O 19	/532. RY*(4) O 62	0.06	1.72	0.013
145. LP (2) O 19	/537. RY*(1) H 63	0.09	1.03	0.012
145. LP (2) O 19	/539. RY*(1) H 64	0.16	1.12	0.017
145. LP (2) O 19	/664. BD*(1) O 62 - H 63	0.03	0.81	0.006
145. LP (2) O 19	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.06	0.81	0.009
146. LP (3) O 19	/529. RY*(1) O 62	0.14	2.11	0.023
146. LP (3) O 19	/530. RY*(2) O 62	0.06	1.72	0.013
146. LP (3) O 19	/532. RY*(4) O 62	0.03	1.57	0.009
146. LP (3) O 19	/539. RY*(1) H 64	0.03	0.97	0.007
146. LP (3) O 19	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.04	0.66	0.006
610. BD*(2) C 13 - C 15	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.04	0.29	0.009

from unit 1 to unit 4

26. BD (1) N 12 - C 13	/551. RY*(3)Cl 66	0.03	2.17	0.010

```
141. LP (   2) N  11              /549. RY*(   1)Cl  66                    0.16    1.06    0.017
141. LP (   2) N  11              /550. RY*(   2)Cl  66                    0.21    1.11    0.020
141. LP (   2) N  11              /551. RY*(   3)Cl  66                    0.51    1.86    0.040
144. LP (   1) O  19              /550. RY*(   2)Cl  66                    0.04    1.18    0.008
144. LP (   1) O  19              /551. RY*(   3)Cl  66                    0.11    1.93    0.018
145. LP (   2) O  19              /549. RY*(   1)Cl  66                    0.04    1.08    0.008
145. LP (   2) O  19              /550. RY*(   2)Cl  66                    0.13    1.13    0.016
145. LP (   2) O  19              /551. RY*(   3)Cl  66                    0.32    1.88    0.032
146. LP (   3) O  19              /549. RY*(   1)Cl  66                    0.05    0.93    0.009
146. LP (   3) O  19              /550. RY*(   2)Cl  66                    0.05    0.98    0.009
146. LP (   3) O  19              /551. RY*(   3)Cl  66                    0.11    1.73    0.018

from unit  1 to unit  5
 10. BD (   1) C   4 - C   6      /169. LP*(   6)Fe  67                    0.10    1.17    0.015
 10. BD (   1) C   4 - C   6      /561. RY*(   1)Fe  67                    0.03    1.28    0.008
 12. BD (   1) C   5 - C   6      /172. LP*(   9)Fe  67                    0.03    2.44    0.011
 12. BD (   1) C   5 - C   6      /561. RY*(   1)Fe  67                    0.06    1.39    0.012
 12. BD (   1) C   5 - C   6      /571. RY*(  11)Fe  67                    0.03   10.29    0.022
 15. BD (   1) C   6 - N  11      /169. LP*(   6)Fe  67                    1.14    1.31    0.053
 15. BD (   1) C   6 - N  11      /170. LP*(   7)Fe  67                    0.07    2.28    0.015
 15. BD (   1) C   6 - N  11      /561. RY*(   1)Fe  67                    0.03    1.42    0.009
 15. BD (   1) C   6 - N  11      /562. RY*(   2)Fe  67                    0.03    2.39    0.011
 15. BD (   1) C   6 - N  11      /563. RY*(   3)Fe  67                    0.09    4.94    0.026
 15. BD (   1) C   6 - N  11      /564. RY*(   4)Fe  67                    0.04    2.17    0.012
 15. BD (   1) C   6 - N  11      /567. RY*(   7)Fe  67                    0.07    2.85    0.017
 15. BD (   1) C   6 - N  11      /571. RY*(  11)Fe  67                    0.03   10.33    0.021
 15. BD (   1) C   6 - N  11      /575. RY*(  15)Fe  67                    0.04  166.16    0.100
 15. BD (   1) C   6 - N  11      /580. RY*(  20)Fe  67                    0.08   48.80    0.078
 25. BD (   1) N  11 - N  12      /169. LP*(   6)Fe  67                    1.10    1.51    0.056
 25. BD (   1) N  11 - N  12      /563. RY*(   3)Fe  67                    0.31    5.13    0.050
 25. BD (   1) N  11 - N  12      /569. RY*(   9)Fe  67                    0.04   10.16    0.024
 25. BD (   1) N  11 - N  12      /570. RY*(  10)Fe  67                    0.03    6.85    0.018
 25. BD (   1) N  11 - N  12      /575. RY*(  15)Fe  67                    0.06  166.36    0.125
 25. BD (   1) N  11 - N  12      /579. RY*(  19)Fe  67                    0.03  730.90    0.195
 25. BD (   1) N  11 - N  12      /580. RY*(  20)Fe  67                    0.11   49.00    0.094
 26. BD (   1) N  12 - C  13      /169. LP*(   6)Fe  67                    0.14    1.31    0.018
 26. BD (   1) N  12 - C  13      /172. LP*(   9)Fe  67                    0.03    2.47    0.010
 26. BD (   1) N  12 - C  13      /561. RY*(   1)Fe  67                    0.06    1.42    0.012
 26. BD (   1) N  12 - C  13      /563. RY*(   3)Fe  67                    0.12    4.94    0.031
 26. BD (   1) N  12 - C  13      /567. RY*(   7)Fe  67                    0.04    2.85    0.013
 26. BD (   1) N  12 - C  13      /571. RY*(  11)Fe  67                    0.08   10.33    0.037
 26. BD (   1) N  12 - C  13      /575. RY*(  15)Fe  67                    0.07  166.16    0.135
 26. BD (   1) N  12 - C  13      /576. RY*(  16)Fe  67                    0.03   30.87    0.035
 26. BD (   1) N  12 - C  13      /579. RY*(  19)Fe  67                    0.03  730.71    0.198
 26. BD (   1) N  12 - C  13      /580. RY*(  20)Fe  67                    0.14   48.80    0.104
 27. BD (   1) C  13 - C  14      /169. LP*(   6)Fe  67                    0.04    1.17    0.009
 28. BD (   1) C  13 - C  15      /169. LP*(   6)Fe  67                    0.18    1.30    0.021
 28. BD (   1) C  13 - C  15      /561. RY*(   1)Fe  67                    0.04    1.41    0.009
 28. BD (   1) C  13 - C  15      /563. RY*(   3)Fe  67                    0.05    4.92    0.019
 28. BD (   1) C  13 - C  15      /580. RY*(  20)Fe  67                    0.03   48.79    0.052
 29. BD (   2) C  13 - C  15      /169. LP*(   6)Fe  67                    0.20    0.82    0.016
 29. BD (   2) C  13 - C  15      /563. RY*(   3)Fe  67                    0.03    4.45    0.016
 33. BD (   1) C  15 - C  17      /169. LP*(   6)Fe  67                    0.21    1.18    0.022
 33. BD (   1) C  15 - C  17      /170. LP*(   7)Fe  67                    0.04    2.15    0.011
 33. BD (   1) C  15 - C  17      /561. RY*(   1)Fe  67                    0.03    1.29    0.008
 33. BD (   1) C  15 - C  17      /563. RY*(   3)Fe  67                    0.05    4.81    0.019
 33. BD (   1) C  15 - C  17      /580. RY*(  20)Fe  67                    0.04   48.67    0.054
 34. BD (   1) C  15 - O  19      /169. LP*(   6)Fe  67                    0.90    1.39    0.048
 34. BD (   1) C  15 - O  19      /170. LP*(   7)Fe  67                    0.17    2.36    0.025
 34. BD (   1) C  15 - O  19      /171. LP*(   8)Fe  67                    0.03    2.61    0.011
 34. BD (   1) C  15 - O  19      /563. RY*(   3)Fe  67                    0.03    5.01    0.016
 34. BD (   1) C  15 - O  19      /568. RY*(   8)Fe  67                    0.07    9.68    0.032
 34. BD (   1) C  15 - O  19      /569. RY*(   9)Fe  67                    0.06   10.04    0.032
 34. BD (   1) C  15 - O  19      /581. RY*(  21)Fe  67                    0.03   30.63    0.036
 90. CR (   1) C   6              /169. LP*(   6)Fe  67                    0.03   10.61    0.024
 95. CR (   1) N  11              /169. LP*(   6)Fe  67                    1.18   14.73    0.181
 96. CR (   1) N  12              /169. LP*(   6)Fe  67                    0.04   14.73    0.033
 99. CR (   1) C  15              /169. LP*(   6)Fe  67                    0.06   10.64    0.034
103. CR (   1) O  19              /169. LP*(   6)Fe  67                    1.38   19.44    0.224
140. LP (   1) N  11              /169. LP*(   6)Fe  67                    1.34    0.83    0.044
140. LP (   1) N  11              /171. LP*(   8)Fe  67                    0.03    2.05    0.011
```

140. LP (1) N 11	/172. LP*(9)Fe 67	0.10	1.98	0.018
140. LP (1) N 11	/563. RY*(3)Fe 67	0.15	4.45	0.033
140. LP (1) N 11	/567. RY*(7)Fe 67	0.07	2.36	0.017
140. LP (1) N 11	/573. RY*(13)Fe 67	0.03	6.98	0.020
140. LP (1) N 11	/575. RY*(15)Fe 67	0.05	165.67	0.118
140. LP (1) N 11	/580. RY*(20)Fe 67	0.10	48.32	0.089
141. LP (2) N 11	/169. LP*(6)Fe 67	24.59	1.01	0.209
141. LP (2) N 11	/170. LP*(7)Fe 67	0.45	1.98	0.039
141. LP (2) N 11	/172. LP*(9)Fe 67	0.99	2.16	0.060
141. LP (2) N 11	/561. RY*(1)Fe 67	0.50	1.12	0.031
141. LP (2) N 11	/562. RY*(2)Fe 67	0.66	2.09	0.048
141. LP (2) N 11	/563. RY*(3)Fe 67	3.78	4.63	0.172
141. LP (2) N 11	/564. RY*(4)Fe 67	0.21	1.87	0.026
141. LP (2) N 11	/567. RY*(7)Fe 67	0.95	2.54	0.064
141. LP (2) N 11	/570. RY*(10)Fe 67	0.22	6.35	0.049
141. LP (2) N 11	/571. RY*(11)Fe 67	0.05	10.02	0.030
141. LP (2) N 11	/572. RY*(12)Fe 67	0.17	7.20	0.045
141. LP (2) N 11	/573. RY*(13)Fe 67	0.23	7.16	0.053
141. LP (2) N 11	/574. RY*(14)Fe 67	0.22	7.00	0.051
141. LP (2) N 11	/575. RY*(15)Fe 67	1.45	165.86	0.636
141. LP (2) N 11	/576. RY*(16)Fe 67	0.03	30.56	0.041
141. LP (2) N 11	/579. RY*(19)Fe 67	0.67	730.40	0.907
141. LP (2) N 11	/580. RY*(20)Fe 67	2.89	48.50	0.486
142. LP (1) N 12	/169. LP*(6)Fe 67	0.27	0.93	0.021
142. LP (1) N 12	/172. LP*(9)Fe 67	0.10	2.08	0.018
142. LP (1) N 12	/563. RY*(3)Fe 67	0.03	4.55	0.015
144. LP (1) O 19	/169. LP*(6)Fe 67	4.27	1.08	0.092
144. LP (1) O 19	/170. LP*(7)Fe 67	0.10	2.05	0.018
144. LP (1) O 19	/171. LP*(8)Fe 67	0.04	2.30	0.012
144. LP (1) O 19	/172. LP*(9)Fe 67	0.14	2.23	0.022
144. LP (1) O 19	/561. RY*(1)Fe 67	0.04	1.19	0.008
144. LP (1) O 19	/562. RY*(2)Fe 67	0.32	2.16	0.033
144. LP (1) O 19	/563. RY*(3)Fe 67	0.64	4.70	0.070
144. LP (1) O 19	/564. RY*(4)Fe 67	0.05	1.94	0.012
144. LP (1) O 19	/566. RY*(6)Fe 67	0.07	2.32	0.017
144. LP (1) O 19	/567. RY*(7)Fe 67	0.16	2.61	0.026
144. LP (1) O 19	/574. RY*(14)Fe 67	0.05	7.07	0.024
144. LP (1) O 19	/575. RY*(15)Fe 67	0.24	165.93	0.252
144. LP (1) O 19	/579. RY*(19)Fe 67	0.13	730.47	0.390
144. LP (1) O 19	/580. RY*(20)Fe 67	0.48	48.57	0.193
145. LP (2) O 19	/169. LP*(6)Fe 67	13.85	1.03	0.160
145. LP (2) O 19	/170. LP*(7)Fe 67	1.29	2.00	0.065
145. LP (2) O 19	/171. LP*(8)Fe 67	0.03	2.25	0.011
145. LP (2) O 19	/172. LP*(9)Fe 67	0.06	2.18	0.015
145. LP (2) O 19	/561. RY*(1)Fe 67	0.63	1.14	0.034
145. LP (2) O 19	/562. RY*(2)Fe 67	1.05	2.11	0.060
145. LP (2) O 19	/563. RY*(3)Fe 67	1.22	4.65	0.097
145. LP (2) O 19	/565. RY*(5)Fe 67	0.11	1.97	0.019
145. LP (2) O 19	/566. RY*(6)Fe 67	0.09	2.27	0.019
145. LP (2) O 19	/567. RY*(7)Fe 67	0.44	2.56	0.043
145. LP (2) O 19	/568. RY*(8)Fe 67	0.05	9.32	0.029
145. LP (2) O 19	/570. RY*(10)Fe 67	0.08	6.37	0.029
145. LP (2) O 19	/573. RY*(13)Fe 67	0.03	7.18	0.018
145. LP (2) O 19	/574. RY*(14)Fe 67	0.10	7.02	0.034
145. LP (2) O 19	/575. RY*(15)Fe 67	0.67	165.88	0.428
145. LP (2) O 19	/579. RY*(19)Fe 67	0.32	730.42	0.620
145. LP (2) O 19	/580. RY*(20)Fe 67	1.36	48.52	0.330
146. LP (3) O 19	/169. LP*(6)Fe 67	8.48	0.87	0.114
146. LP (3) O 19	/170. LP*(7)Fe 67	0.92	1.84	0.053
146. LP (3) O 19	/172. LP*(9)Fe 67	0.35	2.03	0.035
146. LP (3) O 19	/561. RY*(1)Fe 67	0.39	0.98	0.026
146. LP (3) O 19	/562. RY*(2)Fe 67	0.38	1.96	0.035
146. LP (3) O 19	/563. RY*(3)Fe 67	0.60	4.50	0.068
146. LP (3) O 19	/567. RY*(7)Fe 67	0.23	2.41	0.031
146. LP (3) O 19	/568. RY*(8)Fe 67	0.03	9.16	0.023
146. LP (3) O 19	/574. RY*(14)Fe 67	0.07	6.87	0.029
146. LP (3) O 19	/575. RY*(15)Fe 67	0.34	165.72	0.311
146. LP (3) O 19	/579. RY*(19)Fe 67	0.15	730.27	0.434
146. LP (3) O 19	/580. RY*(20)Fe 67	0.71	48.36	0.242

from unit 2 to unit 1

55.	BD	(1)	C	36	- H	61	/610.	BD*(2)	C	13	- C	15	0.03	0.55	0.006
55.	BD	(1)	C	36	- H	61	/619.	BD*(2)	C	17	- C	18	0.05	0.56	0.007
66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/317.	RY*(1)	O	19			0.03	3.15	0.012
66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/318.	RY*(2)	O	19			0.05	2.25	0.014
67.	BD	(1)	N	43	- C	44	/319.	RY*(3)	O	19			0.04	1.87	0.011
69.	BD	(1)	C	44	- C	46	/319.	RY*(3)	O	19			0.04	1.88	0.011
70.	BD	(2)	C	44	- C	46	/615.	BD*(1)	C	15	- O	19	0.04	0.63	0.007
74.	BD	(1)	C	46	- C	48	/237.	RY*(1)	C	9			0.04	1.87	0.012
74.	BD	(1)	C	46	- C	48	/239.	RY*(3)	C	9			0.07	1.26	0.012
75.	BD	(1)	C	46	- O	65	/214.	RY*(2)	C	6			0.03	1.85	0.009
75.	BD	(1)	C	46	- O	65	/215.	RY*(3)	C	6			0.03	2.00	0.009
80.	BD	(1)	C	48	- H	58	/239.	RY*(3)	C	9			0.03	1.12	0.008
149.	LP	(1)	N	42			/208.	RY*(4)	C	5			0.03	1.35	0.008
149.	LP	(1)	N	42			/213.	RY*(1)	C	6			0.03	1.60	0.009
149.	LP	(1)	N	42			/218.	RY*(6)	C	6			0.03	3.70	0.013
149.	LP	(1)	N	42			/253.	RY*(1)	N	11			0.15	1.56	0.020
149.	LP	(1)	N	42			/254.	RY*(2)	N	11			0.19	2.20	0.027
149.	LP	(1)	N	42			/255.	RY*(3)	N	11			0.15	1.69	0.021
149.	LP	(1)	N	42			/263.	RY*(3)	N	12			0.03	1.52	0.009
149.	LP	(1)	N	42			/271.	RY*(3)	C	13			0.03	1.39	0.008
149.	LP	(1)	N	42			/285.	RY*(1)	C	15			0.21	1.58	0.024
149.	LP	(1)	N	42			/286.	RY*(2)	C	15			0.05	1.88	0.012
149.	LP	(1)	N	42			/288.	RY*(4)	C	15			0.05	1.12	0.009
149.	LP	(1)	N	42			/289.	RY*(5)	C	15			0.04	3.45	0.015
149.	LP	(1)	N	42			/317.	RY*(1)	O	19			0.63	2.63	0.052
149.	LP	(1)	N	42			/318.	RY*(2)	O	19			0.11	1.73	0.017
149.	LP	(1)	N	42			/319.	RY*(3)	O	19			0.08	1.55	0.014
149.	LP	(1)	N	42			/320.	RY*(4)	O	19			0.06	2.29	0.015
149.	LP	(1)	N	42			/615.	BD*(1)	C	15	- O	19	0.95	0.77	0.035
150.	LP	(2)	N	42			/318.	RY*(2)	O	19			0.10	1.60	0.017
157.	LP	(1)	O	65			/253.	RY*(1)	N	11			0.04	1.71	0.010
157.	LP	(1)	O	65			/254.	RY*(2)	N	11			0.08	2.35	0.018
157.	LP	(1)	O	65			/255.	RY*(3)	N	11			0.03	1.84	0.010
157.	LP	(1)	O	65			/256.	RY*(4)	N	11			0.04	2.14	0.011
157.	LP	(1)	O	65			/285.	RY*(1)	C	15			0.04	1.73	0.011
157.	LP	(1)	O	65			/317.	RY*(1)	O	19			0.05	2.78	0.015
157.	LP	(1)	O	65			/594.	BD*(2)	C	5	- C	6	0.41	0.65	0.022
157.	LP	(1)	O	65			/596.	BD*(1)	C	6	- N	11	0.09	0.99	0.012
157.	LP	(1)	O	65			/606.	BD*(1)	N	11	- N	12	0.10	1.11	0.013
158.	LP	(2)	O	65			/253.	RY*(1)	N	11			0.04	1.60	0.011
158.	LP	(2)	O	65			/254.	RY*(2)	N	11			0.16	2.25	0.024
158.	LP	(2)	O	65			/255.	RY*(3)	N	11			0.11	1.73	0.018
158.	LP	(2)	O	65			/263.	RY*(3)	N	12			0.03	1.57	0.009
158.	LP	(2)	O	65			/285.	RY*(1)	C	15			0.06	1.63	0.012
158.	LP	(2)	O	65			/288.	RY*(4)	C	15			0.04	1.17	0.008
158.	LP	(2)	O	65			/289.	RY*(5)	C	15			0.03	3.50	0.012
158.	LP	(2)	O	65			/317.	RY*(1)	O	19			0.04	2.68	0.013
159.	LP	(3)	O	65			/213.	RY*(1)	C	6			0.06	1.54	0.012
159.	LP	(3)	O	65			/214.	RY*(2)	C	6			0.04	1.37	0.009
159.	LP	(3)	O	65			/215.	RY*(3)	C	6			0.03	1.52	0.008
159.	LP	(3)	O	65			/216.	RY*(4)	C	6			0.05	1.38	0.011
159.	LP	(3)	O	65			/253.	RY*(1)	N	11			0.08	1.49	0.014
159.	LP	(3)	O	65			/254.	RY*(2)	N	11			0.22	2.14	0.028
159.	LP	(3)	O	65			/255.	RY*(3)	N	11			0.30	1.62	0.028
159.	LP	(3)	O	65			/256.	RY*(4)	N	11			0.03	1.92	0.009
159.	LP	(3)	O	65			/263.	RY*(3)	N	12			0.07	1.46	0.013
159.	LP	(3)	O	65			/285.	RY*(1)	C	15			0.05	1.52	0.012
159.	LP	(3)	O	65			/286.	RY*(2)	C	15			0.03	1.81	0.010
159.	LP	(3)	O	65			/288.	RY*(4)	C	15			0.04	1.06	0.008
159.	LP	(3)	O	65			/594.	BD*(2)	C	5	- C	6	0.24	0.44	0.013
159.	LP	(3)	O	65			/596.	BD*(1)	C	6	- N	11	0.12	0.77	0.012
159.	LP	(3)	O	65			/606.	BD*(1)	N	11	- N	12	0.47	0.89	0.026
651.	BD*(2)		C	44	- C	46	/603.	BD*(2)	C	9	- C	10	0.07	0.04	0.004
660.	BD*(2)		C	48	- C	49	/603.	BD*(2)	C	9	- C	10	0.74	0.01	0.009

within unit 2

42.	BD	(1)	C	32	- C	33	/371.	RY*(1)	C	34			0.66	1.97	0.046
42.	BD	(1)	C	32	- C	33	/372.	RY*(2)	C	34			0.32	1.99	0.032
42.	BD	(1)	C	32	- C	33	/379.	RY*(1)	C	35			0.65	2.20	0.048
42.	BD	(1)	C	32	- C	33	/403.	RY*(1)	C	38			0.58	1.85	0.042
42.	BD	(1)	C	32	- C	33	/624.	BD*(1)	C	32	- C	34	1.86	1.28	0.062

42. BD (1) C 32 - C 33	/627. BD*(1) C 33 - C 35	1.70	1.27	0.059
42. BD (1) C 32 - C 33	/629. BD*(1) C 33 - C 38	0.73	1.09	0.036
42. BD (1) C 32 - C 33	/631. BD*(1) C 34 - H 51	1.45	1.09	0.050
42. BD (1) C 32 - C 33	/633. BD*(1) C 35 - C 40	2.05	1.11	0.060
42. BD (1) C 32 - C 33	/638. BD*(1) C 38 - C 39	0.65	1.30	0.037
43. BD (1) C 32 - C 34	/364. RY*(2) C 33	0.81	2.18	0.053
43. BD (1) C 32 - C 34	/388. RY*(2) C 36	0.54	1.87	0.040
43. BD (1) C 32 - C 34	/623. BD*(1) C 32 - C 33	1.83	1.18	0.059
43. BD (1) C 32 - C 34	/626. BD*(1) C 32 - O 50	0.42	1.03	0.026
43. BD (1) C 32 - C 34	/629. BD*(1) C 33 - C 38	1.21	1.20	0.048
43. BD (1) C 32 - C 34	/630. BD*(1) C 34 - C 36	1.21	1.22	0.049
43. BD (1) C 32 - C 34	/631. BD*(1) C 34 - H 51	0.90	1.19	0.042
43. BD (1) C 32 - C 34	/636. BD*(1) C 36 - H 61	0.70	1.21	0.037
43. BD (1) C 32 - C 34	/663. BD*(1) O 50 - H 60	0.80	1.07	0.037
44. BD (2) C 32 - C 34	/366. RY*(4) C 33	0.35	0.89	0.023
44. BD (2) C 32 - C 34	/389. RY*(3) C 36	0.26	1.06	0.022
44. BD (2) C 32 - C 34	/499. RY*(1) O 50	0.35	1.18	0.027
44. BD (2) C 32 - C 34	/625. BD*(2) C 32 - C 34	0.27	0.31	0.012
44. BD (2) C 32 - C 34	/628. BD*(2) C 33 - C 35	5.84	0.32	0.057
44. BD (2) C 32 - C 34	/635. BD*(2) C 36 - C 37	6.63	0.31	0.059
45. BD (1) C 32 - O 50	/355. RY*(1) C 32	0.32	1.98	0.032
45. BD (1) C 32 - O 50	/371. RY*(1) C 34	0.29	2.22	0.032
45. BD (1) C 32 - O 50	/623. BD*(1) C 32 - C 33	0.27	1.32	0.024
45. BD (1) C 32 - O 50	/624. BD*(1) C 32 - C 34	0.54	1.52	0.036
45. BD (1) C 32 - O 50	/627. BD*(1) C 33 - C 35	0.58	1.52	0.037
45. BD (1) C 32 - O 50	/630. BD*(1) C 34 - C 36	1.12	1.36	0.049
46. BD (1) C 33 - C 35	/356. RY*(2) C 32	0.44	2.16	0.039
46. BD (1) C 33 - C 35	/395. RY*(1) C 37	0.38	1.86	0.034
46. BD (1) C 33 - C 35	/397. RY*(3) C 37	0.28	1.80	0.029
46. BD (1) C 33 - C 35	/403. RY*(1) C 38	0.36	1.93	0.033
46. BD (1) C 33 - C 35	/419. RY*(1) C 40	0.37	1.94	0.034
46. BD (1) C 33 - C 35	/623. BD*(1) C 32 - C 33	1.62	1.16	0.055
46. BD (1) C 33 - C 35	/626. BD*(1) C 32 - O 50	1.35	1.01	0.047
46. BD (1) C 33 - C 35	/629. BD*(1) C 33 - C 38	1.90	1.18	0.060
46. BD (1) C 33 - C 35	/632. BD*(1) C 35 - C 37	1.89	1.18	0.060
46. BD (1) C 33 - C 35	/633. BD*(1) C 35 - C 40	1.81	1.19	0.059
46. BD (1) C 33 - C 35	/637. BD*(1) C 37 - N 42	1.37	1.11	0.049
46. BD (1) C 33 - C 35	/640. BD*(1) C 38 - H 52	0.76	1.18	0.038
46. BD (1) C 33 - C 35	/645. BD*(1) C 40 - H 54	0.69	1.19	0.036
47. BD (2) C 33 - C 35	/358. RY*(4) C 32	0.30	0.83	0.022
47. BD (2) C 33 - C 35	/405. RY*(3) C 38	0.56	0.76	0.028
47. BD (2) C 33 - C 35	/421. RY*(3) C 40	0.51	0.84	0.028
47. BD (2) C 33 - C 35	/625. BD*(2) C 32 - C 34	6.35	0.30	0.056
47. BD (2) C 33 - C 35	/635. BD*(2) C 36 - C 37	6.71	0.30	0.057
47. BD (2) C 33 - C 35	/639. BD*(2) C 38 - C 39	5.80	0.31	0.055
47. BD (2) C 33 - C 35	/644. BD*(2) C 40 - C 41	5.78	0.32	0.056
48. BD (1) C 33 - C 38	/355. RY*(1) C 32	0.28	1.72	0.028
48. BD (1) C 33 - C 38	/356. RY*(2) C 32	0.36	2.06	0.035
48. BD (1) C 33 - C 38	/379. RY*(1) C 35	0.41	2.18	0.038
48. BD (1) C 33 - C 38	/380. RY*(2) C 35	0.27	2.17	0.031
48. BD (1) C 33 - C 38	/411. RY*(1) C 39	0.37	1.82	0.033
48. BD (1) C 33 - C 38	/412. RY*(2) C 39	0.77	1.95	0.049
48. BD (1) C 33 - C 38	/623. BD*(1) C 32 - C 33	0.61	1.06	0.032
48. BD (1) C 33 - C 38	/624. BD*(1) C 32 - C 34	0.71	1.26	0.038
48. BD (1) C 33 - C 38	/627. BD*(1) C 33 - C 35	2.15	1.26	0.066
48. BD (1) C 33 - C 38	/632. BD*(1) C 35 - C 37	2.35	1.09	0.064
48. BD (1) C 33 - C 38	/638. BD*(1) C 38 - C 39	1.40	1.29	0.054
48. BD (1) C 33 - C 38	/640. BD*(1) C 38 - H 52	0.31	1.08	0.023
48. BD (1) C 33 - C 38	/642. BD*(1) C 39 - H 53	1.44	1.09	0.050
49. BD (1) C 34 - C 36	/355. RY*(1) C 32	0.64	1.73	0.042
49. BD (1) C 34 - C 36	/356. RY*(2) C 32	0.38	2.07	0.035
49. BD (1) C 34 - C 36	/396. RY*(2) C 37	0.54	1.75	0.039
49. BD (1) C 34 - C 36	/397. RY*(3) C 37	0.60	1.71	0.041
49. BD (1) C 34 - C 36	/624. BD*(1) C 32 - C 34	1.29	1.27	0.051
49. BD (1) C 34 - C 36	/626. BD*(1) C 32 - O 50	2.50	0.92	0.061
49. BD (1) C 34 - C 36	/631. BD*(1) C 34 - H 51	0.36	1.09	0.025
49. BD (1) C 34 - C 36	/634. BD*(1) C 36 - C 37	1.53	1.28	0.056
49. BD (1) C 34 - C 36	/636. BD*(1) C 36 - H 61	0.35	1.10	0.025
49. BD (1) C 34 - C 36	/637. BD*(1) C 37 - N 42	3.03	1.02	0.070
50. BD (1) C 34 - H 51	/356. RY*(2) C 32	0.47	1.93	0.038
50. BD (1) C 34 - H 51	/360. RY*(6) C 32	0.27	8.59	0.061

50.	BD	(1)	C	34	- H	51	/387.	RY*(1)	C	36			0.52	1.88	0.040
50.	BD	(1)	C	34	- H	51	/623.	BD*(1)	C	32	- C 33		3.06	0.93	0.068
50.	BD	(1)	C	34	- H	51	/624.	BD*(1)	C	32	- C 34		0.72	1.13	0.036
50.	BD	(1)	C	34	- H	51	/626.	BD*(1)	C	32	- O 50		0.84	0.79	0.032
50.	BD	(1)	C	34	- H	51	/634.	BD*(1)	C	36	- C 37		1.46	1.15	0.052
51.	BD	(1)	C	35	- C	37	/363.	RY*(1)	C	33			0.73	2.29	0.052
51.	BD	(1)	C	35	- C	37	/387.	RY*(1)	C	36			0.46	2.01	0.039
51.	BD	(1)	C	35	- C	37	/419.	RY*(1)	C	40			0.55	1.84	0.041
51.	BD	(1)	C	35	- C	37	/435.	RY*(1)	N	42			0.30	1.89	0.030
51.	BD	(1)	C	35	- C	37	/627.	BD*(1)	C	33	- C 35		1.94	1.27	0.063
51.	BD	(1)	C	35	- C	37	/629.	BD*(1)	C	33	- C 38		2.01	1.09	0.059
51.	BD	(1)	C	35	- C	37	/633.	BD*(1)	C	35	- C 40		0.88	1.10	0.039
51.	BD	(1)	C	35	- C	37	/634.	BD*(1)	C	36	- C 37		2.04	1.28	0.065
51.	BD	(1)	C	35	- C	37	/636.	BD*(1)	C	36	- H 61		1.57	1.09	0.053
51.	BD	(1)	C	35	- C	37	/637.	BD*(1)	C	37	- N 42		0.38	1.02	0.025
51.	BD	(1)	C	35	- C	37	/643.	BD*(1)	C	40	- C 41		0.69	1.30	0.038
52.	BD	(1)	C	35	- C	40	/363.	RY*(1)	C	33			0.38	2.28	0.037
52.	BD	(1)	C	35	- C	40	/395.	RY*(1)	C	37			0.68	1.76	0.044
52.	BD	(1)	C	35	- C	40	/427.	RY*(1)	C	41			0.38	1.83	0.034
52.	BD	(1)	C	35	- C	40	/428.	RY*(2)	C	41			0.77	1.96	0.049
52.	BD	(1)	C	35	- C	40	/623.	BD*(1)	C	32	- C 33		2.33	1.06	0.063
52.	BD	(1)	C	35	- C	40	/627.	BD*(1)	C	33	- C 35		2.12	1.26	0.065
52.	BD	(1)	C	35	- C	40	/632.	BD*(1)	C	35	- C 37		0.89	1.08	0.039
52.	BD	(1)	C	35	- C	40	/634.	BD*(1)	C	36	- C 37		0.98	1.27	0.045
52.	BD	(1)	C	35	- C	40	/643.	BD*(1)	C	40	- C 41		1.38	1.29	0.054
52.	BD	(1)	C	35	- C	40	/645.	BD*(1)	C	40	- H 54		0.34	1.09	0.024
52.	BD	(1)	C	35	- C	40	/646.	BD*(1)	C	41	- H 55		1.50	1.09	0.051
53.	BD	(1)	C	36	- C	37	/372.	RY*(2)	C	34			0.76	2.10	0.051
53.	BD	(1)	C	36	- C	37	/380.	RY*(2)	C	35			0.74	2.28	0.052
53.	BD	(1)	C	36	- C	37	/435.	RY*(1)	N	42			0.60	2.01	0.044
53.	BD	(1)	C	36	- C	37	/630.	BD*(1)	C	34	- C 36		1.38	1.23	0.052
53.	BD	(1)	C	36	- C	37	/631.	BD*(1)	C	34	- H 51		0.65	1.20	0.035
53.	BD	(1)	C	36	- C	37	/632.	BD*(1)	C	35	- C 37		2.05	1.21	0.063
53.	BD	(1)	C	36	- C	37	/633.	BD*(1)	C	35	- C 40		1.13	1.21	0.047
53.	BD	(1)	C	36	- C	37	/636.	BD*(1)	C	36	- H 61		1.01	1.21	0.044
53.	BD	(1)	C	36	- C	37	/637.	BD*(1)	C	37	- N 42		1.00	1.13	0.043
53.	BD	(1)	C	36	- C	37	/647.	BD*(1)	N	42	- N 43		0.74	1.25	0.038
54.	BD	(2)	C	36	- C	37	/373.	RY*(3)	C	34			0.60	0.79	0.029
54.	BD	(2)	C	36	- C	37	/382.	RY*(4)	C	35			0.44	0.90	0.026
54.	BD	(2)	C	36	- C	37	/625.	BD*(2)	C	32	- C 34		6.50	0.32	0.058
54.	BD	(2)	C	36	- C	37	/628.	BD*(2)	C	33	- C 35		5.74	0.32	0.057
54.	BD	(2)	C	36	- C	37	/647.	BD*(1)	N	42	- N 43		1.72	0.78	0.048
55.	BD	(1)	C	36	- H	61	/371.	RY*(1)	C	34			0.49	1.84	0.038
55.	BD	(1)	C	36	- H	61	/395.	RY*(1)	C	37			0.69	1.65	0.043
55.	BD	(1)	C	36	- H	61	/396.	RY*(2)	C	37			0.39	1.63	0.032
55.	BD	(1)	C	36	- H	61	/624.	BD*(1)	C	32	- C 34		1.33	1.15	0.049
55.	BD	(1)	C	36	- H	61	/632.	BD*(1)	C	35	- C 37		3.21	0.97	0.071
55.	BD	(1)	C	36	- H	61	/634.	BD*(1)	C	36	- C 37		0.88	1.16	0.040
55.	BD	(1)	C	36	- H	61	/637.	BD*(1)	C	37	- N 42		0.62	0.89	0.030
56.	BD	(1)	C	37	- N	42	/380.	RY*(2)	C	35			0.57	2.31	0.046
56.	BD	(1)	C	37	- N	42	/387.	RY*(1)	C	36			0.55	2.16	0.044
56.	BD	(1)	C	37	- N	42	/443.	RY*(1)	N	43			0.64	1.62	0.041
56.	BD	(1)	C	37	- N	42	/444.	RY*(2)	N	43			0.34	1.65	0.030
56.	BD	(1)	C	37	- N	42	/627.	BD*(1)	C	33	- C 35		0.71	1.41	0.040
56.	BD	(1)	C	37	- N	42	/630.	BD*(1)	C	34	- C 36		1.22	1.25	0.049
56.	BD	(1)	C	37	- N	42	/632.	BD*(1)	C	35	- C 37		0.62	1.24	0.035
56.	BD	(1)	C	37	- N	42	/634.	BD*(1)	C	36	- C 37		1.09	1.42	0.050
56.	BD	(1)	C	37	- N	42	/647.	BD*(1)	N	42	- N 43		0.68	1.28	0.037
56.	BD	(1)	C	37	- N	42	/648.	BD*(1)	N	43	- C 44		2.77	1.15	0.072
57.	BD	(1)	C	38	- C	39	/363.	RY*(1)	C	33			0.57	2.39	0.047
57.	BD	(1)	C	38	- C	39	/364.	RY*(2)	C	33			0.39	2.17	0.037
57.	BD	(1)	C	38	- C	39	/427.	RY*(1)	C	41			0.48	1.94	0.038
57.	BD	(1)	C	38	- C	39	/428.	RY*(2)	C	41			0.42	2.07	0.037
57.	BD	(1)	C	38	- C	39	/623.	BD*(1)	C	32	- C 33		1.34	1.17	0.050
57.	BD	(1)	C	38	- C	39	/629.	BD*(1)	C	33	- C 38		1.49	1.19	0.053
57.	BD	(1)	C	38	- C	39	/640.	BD*(1)	C	38	- H 52		0.88	1.19	0.041
57.	BD	(1)	C	38	- C	39	/641.	BD*(1)	C	39	- C 41		1.19	1.22	0.048
57.	BD	(1)	C	38	- C	39	/642.	BD*(1)	C	39	- H 53		0.80	1.19	0.039
57.	BD	(1)	C	38	- C	39	/646.	BD*(1)	C	41	- H 55		0.78	1.20	0.039
58.	BD	(2)	C	38	- C	39	/366.	RY*(4)	C	33			0.35	0.88	0.023
58.	BD	(2)	C	38	- C	39	/429.	RY*(3)	C	41			0.47	0.79	0.026

58. BD (	2) C	38 - C	39	/628. BD*(	2) C	33 - C	35	6.26	0.31	0.058
58. BD (	2) C	38 - C	39	/644. BD*(	2) C	40 - C	41	6.24	0.32	0.056
59. BD (	1) C	38 - H	52	/363. RY*(	1) C	33		0.70	2.17	0.050
59. BD (	1) C	38 - H	52	/411. RY*(	1) C	39		0.67	1.71	0.043
59. BD (	1) C	38 - H	52	/627. BD*(	1) C	33 - C	35	1.61	1.14	0.054
59. BD (	1) C	38 - H	52	/638. BD*(	1) C	38 - C	39	0.75	1.17	0.038
59. BD (	1) C	38 - H	52	/641. BD*(	1) C	39 - C	41	2.73	0.99	0.066
59. BD (	1) C	38 - H	52	/642. BD*(	1) C	39 - H	53	0.48	0.97	0.027
60. BD (	1) C	39 - C	41	/404. RY*(	2) C	38		0.92	1.77	0.051
60. BD (	1) C	39 - C	41	/420. RY*(	2) C	40		0.89	1.73	0.050
60. BD (	1) C	39 - C	41	/638. BD*(	1) C	38 - C	39	1.32	1.29	0.052
60. BD (	1) C	39 - C	41	/640. BD*(	1) C	38 - H	52	1.57	1.08	0.052
60. BD (	1) C	39 - C	41	/642. BD*(	1) C	39 - H	53	0.30	1.09	0.023
60. BD (	1) C	39 - C	41	/643. BD*(	1) C	40 - C	41	1.35	1.30	0.053
60. BD (	1) C	39 - C	41	/645. BD*(	1) C	40 - H	54	1.62	1.10	0.053
60. BD (	1) C	39 - C	41	/646. BD*(	1) C	41 - H	55	0.29	1.09	0.023
61. BD (	1) C	39 - H	53	/403. RY*(	1) C	38		0.74	1.71	0.045
61. BD (	1) C	39 - H	53	/427. RY*(	1) C	41		0.62	1.70	0.041
61. BD (	1) C	39 - H	53	/629. BD*(	1) C	33 - C	38	3.15	0.95	0.069
61. BD (	1) C	39 - H	53	/638. BD*(	1) C	38 - C	39	0.71	1.16	0.036
61. BD (	1) C	39 - H	53	/640. BD*(	1) C	38 - H	52	0.54	0.95	0.029
61. BD (	1) C	39 - H	53	/643. BD*(	1) C	40 - C	41	1.39	1.17	0.051
62. BD (	1) C	40 - C	41	/379. RY*(	1) C	35		0.76	2.29	0.053
62. BD (	1) C	40 - C	41	/380. RY*(	2) C	35		0.27	2.27	0.031
62. BD (	1) C	40 - C	41	/411. RY*(	1) C	39		0.44	1.93	0.037
62. BD (	1) C	40 - C	41	/412. RY*(	2) C	39		0.42	2.05	0.037
62. BD (	1) C	40 - C	41	/632. BD*(	1) C	35 - C	37	1.26	1.19	0.049
62. BD (	1) C	40 - C	41	/633. BD*(	1) C	35 - C	40	1.44	1.20	0.053
62. BD (	1) C	40 - C	41	/641. BD*(	1) C	39 - C	41	1.24	1.21	0.049
62. BD (	1) C	40 - C	41	/642. BD*(	1) C	39 - H	53	0.78	1.19	0.039
62. BD (	1) C	40 - C	41	/645. BD*(	1) C	40 - H	54	0.87	1.20	0.041
62. BD (	1) C	40 - C	41	/646. BD*(	1) C	41 - H	55	0.84	1.19	0.040
63. BD (	2) C	40 - C	41	/382. RY*(	4) C	35		0.34	0.88	0.023
63. BD (	2) C	40 - C	41	/413. RY*(	3) C	39		0.49	0.78	0.026
63. BD (	2) C	40 - C	41	/628. BD*(	2) C	33 - C	35	6.44	0.31	0.058
63. BD (	2) C	40 - C	41	/639. BD*(	2) C	38 - C	39	7.19	0.31	0.060
64. BD (	1) C	40 - H	54	/379. RY*(	1) C	35		0.69	2.05	0.048
64. BD (	1) C	40 - H	54	/427. RY*(	1) C	41		0.60	1.70	0.040
64. BD (	1) C	40 - H	54	/627. BD*(	1) C	33 - C	35	1.74	1.13	0.056
64. BD (	1) C	40 - H	54	/641. BD*(	1) C	39 - C	41	2.76	0.98	0.066
64. BD (	1) C	40 - H	54	/643. BD*(	1) C	40 - C	41	0.80	1.16	0.038
64. BD (	1) C	40 - H	54	/646. BD*(	1) C	41 - H	55	0.50	0.96	0.028
65. BD (	1) C	41 - H	55	/411. RY*(	1) C	39		0.60	1.69	0.040
65. BD (	1) C	41 - H	55	/419. RY*(	1) C	40		0.76	1.71	0.046
65. BD (	1) C	41 - H	55	/633. BD*(	1) C	35 - C	40	3.15	0.96	0.070
65. BD (	1) C	41 - H	55	/638. BD*(	1) C	38 - C	39	1.41	1.15	0.051
65. BD (	1) C	41 - H	55	/643. BD*(	1) C	40 - C	41	0.76	1.16	0.038
65. BD (	1) C	41 - H	55	/645. BD*(	1) C	40 - H	54	0.49	0.96	0.028
66. BD (	1) N	42 - N	43	/395. RY*(	1) C	37		0.58	2.11	0.044
66. BD (	1) N	42 - N	43	/437. RY*(	3) N	42		0.32	2.26	0.034
66. BD (	1) N	42 - N	43	/451. RY*(	1) C	44		0.51	2.12	0.042
66. BD (	1) N	42 - N	43	/452. RY*(	2) C	44		1.03	2.36	0.062
66. BD (	1) N	42 - N	43	/634. BD*(	1) C	36 - C	37	0.39	1.62	0.032
66. BD (	1) N	42 - N	43	/635. BD*(	2) C	36 - C	37	0.38	1.01	0.026
66. BD (	1) N	42 - N	43	/637. BD*(	1) C	37 - N	42	0.67	1.35	0.038
66. BD (	1) N	42 - N	43	/648. BD*(	1) N	43 - C	44	0.25	1.35	0.023
66. BD (	1) N	42 - N	43	/649. BD*(	1) C	44 - C	45	0.60	1.42	0.037
67. BD (	1) N	43 - C	44	/435. RY*(	1) N	42		0.28	2.03	0.030
67. BD (	1) N	43 - C	44	/436. RY*(	2) N	42		0.73	2.34	0.052
67. BD (	1) N	43 - C	44	/437. RY*(	3) N	42		0.57	2.06	0.043
67. BD (	1) N	43 - C	44	/459. RY*(	1) C	45		0.42	2.05	0.037
67. BD (	1) N	43 - C	44	/467. RY*(	1) C	46		0.46	1.94	0.038
67. BD (	1) N	43 - C	44	/637. BD*(	1) C	37 - N	42	2.52	1.15	0.068
67. BD (	1) N	43 - C	44	/649. BD*(	1) C	44 - C	45	0.37	1.22	0.027
67. BD (	1) N	43 - C	44	/650. BD*(	1) C	44 - C	46	0.97	1.37	0.046
67. BD (	1) N	43 - C	44	/652. BD*(	1) C	45 - C	47	0.48	1.41	0.033
67. BD (	1) N	43 - C	44	/655. BD*(	1) C	46 - C	48	1.41	1.22	0.052
68. BD (	1) C	44 - C	45	/443. RY*(	1) N	43		0.34	1.50	0.029
68. BD (	1) C	44 - C	45	/470. RY*(	4) C	46		0.36	1.68	0.031
68. BD (	1) C	44 - C	45	/475. RY*(	1) C	47		0.42	1.85	0.035
68. BD (	1) C	44 - C	45	/476. RY*(	2) C	47		0.71	1.99	0.048

68. BD (1) C 44 - C 45	/647. BD*(1) N 42 - N 43	1.50	1.16	0.053
68. BD (1) C 44 - C 45	/648. BD*(1) N 43 - C 44	0.52	1.03	0.029
68. BD (1) C 44 - C 45	/650. BD*(1) C 44 - C 46	1.77	1.25	0.060
68. BD (1) C 44 - C 45	/652. BD*(1) C 45 - C 47	1.16	1.30	0.049
68. BD (1) C 44 - C 45	/654. BD*(1) C 45 - H 56	0.31	1.10	0.023
68. BD (1) C 44 - C 45	/656. BD*(1) C 46 - O 65	2.69	0.96	0.064
68. BD (1) C 44 - C 45	/658. BD*(1) C 47 - H 57	1.37	1.11	0.049
69. BD (1) C 44 - C 46	/445. RY*(3) N 43	0.30	1.86	0.030
69. BD (1) C 44 - C 46	/459. RY*(1) C 45	0.53	2.06	0.042
69. BD (1) C 44 - C 46	/483. RY*(1) C 48	0.65	2.07	0.047
69. BD (1) C 44 - C 46	/648. BD*(1) N 43 - C 44	0.63	1.15	0.034
69. BD (1) C 44 - C 46	/649. BD*(1) C 44 - C 45	1.71	1.22	0.058
69. BD (1) C 44 - C 46	/654. BD*(1) C 45 - H 56	0.63	1.22	0.035
69. BD (1) C 44 - C 46	/655. BD*(1) C 46 - C 48	1.70	1.22	0.058
69. BD (1) C 44 - C 46	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.35	1.08	0.025
69. BD (1) C 44 - C 46	/661. BD*(1) C 48 - H 58	0.61	1.23	0.035
70. BD (2) C 44 - C 46	/444. RY*(2) N 43	0.36	1.17	0.027
70. BD (2) C 44 - C 46	/461. RY*(3) C 45	0.52	0.86	0.028
70. BD (2) C 44 - C 46	/485. RY*(3) C 48	0.27	1.08	0.023
70. BD (2) C 44 - C 46	/653. BD*(2) C 45 - C 47	5.90	0.34	0.056
70. BD (2) C 44 - C 46	/660. BD*(2) C 48 - C 49	6.90	0.34	0.062
71. BD (1) C 45 - C 47	/452. RY*(2) C 44	0.87	2.14	0.054
71. BD (1) C 45 - C 47	/491. RY*(1) C 49	0.52	1.96	0.041
71. BD (1) C 45 - C 47	/492. RY*(2) C 49	0.40	2.10	0.037
71. BD (1) C 45 - C 47	/648. BD*(1) N 43 - C 44	1.34	1.12	0.049
71. BD (1) C 45 - C 47	/649. BD*(1) C 44 - C 45	1.11	1.19	0.046
71. BD (1) C 45 - C 47	/654. BD*(1) C 45 - H 56	0.85	1.20	0.040
71. BD (1) C 45 - C 47	/657. BD*(1) C 47 - C 49	1.04	1.21	0.045
71. BD (1) C 45 - C 47	/658. BD*(1) C 47 - H 57	0.70	1.20	0.037
71. BD (1) C 45 - C 47	/662. BD*(1) C 49 - H 59	0.80	1.20	0.039
72. BD (2) C 45 - C 47	/493. RY*(3) C 49	0.54	0.79	0.027
72. BD (2) C 45 - C 47	/651. BD*(2) C 44 - C 46	6.18	0.29	0.057
72. BD (2) C 45 - C 47	/660. BD*(2) C 48 - C 49	6.05	0.32	0.057
73. BD (1) C 45 - H 56	/451. RY*(1) C 44	0.44	1.65	0.034
73. BD (1) C 45 - H 56	/475. RY*(1) C 47	0.61	1.71	0.041
73. BD (1) C 45 - H 56	/648. BD*(1) N 43 - C 44	0.31	0.88	0.021
73. BD (1) C 45 - H 56	/650. BD*(1) C 44 - C 46	1.67	1.11	0.055
73. BD (1) C 45 - H 56	/652. BD*(1) C 45 - C 47	0.74	1.15	0.037
73. BD (1) C 45 - H 56	/657. BD*(1) C 47 - C 49	2.68	0.97	0.064
73. BD (1) C 45 - H 56	/658. BD*(1) C 47 - H 57	0.50	0.96	0.028
74. BD (1) C 46 - C 48	/451. RY*(1) C 44	0.49	1.80	0.038
74. BD (1) C 46 - C 48	/491. RY*(1) C 49	0.35	1.87	0.032
74. BD (1) C 46 - C 48	/492. RY*(2) C 49	0.73	2.00	0.049
74. BD (1) C 46 - C 48	/648. BD*(1) N 43 - C 44	2.51	1.03	0.064
74. BD (1) C 46 - C 48	/650. BD*(1) C 44 - C 46	1.89	1.25	0.062
74. BD (1) C 46 - C 48	/659. BD*(1) C 48 - C 49	1.21	1.31	0.050
74. BD (1) C 46 - C 48	/661. BD*(1) C 48 - H 58	0.29	1.11	0.023
74. BD (1) C 46 - C 48	/662. BD*(1) C 49 - H 59	1.48	1.11	0.051
75. BD (1) C 46 - O 65	/451. RY*(1) C 44	0.38	2.01	0.035
75. BD (1) C 46 - O 65	/467. RY*(1) C 46	0.51	2.03	0.041
75. BD (1) C 46 - O 65	/483. RY*(1) C 48	0.27	2.16	0.031
75. BD (1) C 46 - O 65	/649. BD*(1) C 44 - C 45	1.26	1.31	0.051
75. BD (1) C 46 - O 65	/650. BD*(1) C 44 - C 46	0.68	1.46	0.040
75. BD (1) C 46 - O 65	/655. BD*(1) C 46 - C 48	0.30	1.31	0.025
75. BD (1) C 46 - O 65	/659. BD*(1) C 48 - C 49	0.48	1.52	0.034
76. BD (1) C 47 - C 49	/460. RY*(2) C 45	1.00	1.83	0.054
76. BD (1) C 47 - C 49	/483. RY*(1) C 48	0.26	1.94	0.028
76. BD (1) C 47 - C 49	/484. RY*(2) C 48	0.93	1.82	0.052
76. BD (1) C 47 - C 49	/652. BD*(1) C 45 - C 47	1.11	1.29	0.048
76. BD (1) C 47 - C 49	/654. BD*(1) C 45 - H 56	1.63	1.09	0.053
76. BD (1) C 47 - C 49	/658. BD*(1) C 47 - H 57	0.26	1.10	0.021
76. BD (1) C 47 - C 49	/659. BD*(1) C 48 - C 49	1.18	1.30	0.049
76. BD (1) C 47 - C 49	/661. BD*(1) C 48 - H 58	1.62	1.10	0.053
76. BD (1) C 47 - C 49	/662. BD*(1) C 49 - H 59	0.28	1.10	0.022
77. BD (1) C 47 - H 57	/459. RY*(1) C 45	0.80	1.79	0.048
77. BD (1) C 47 - H 57	/491. RY*(1) C 49	0.60	1.73	0.041
77. BD (1) C 47 - H 57	/649. BD*(1) C 44 - C 45	3.09	0.96	0.069
77. BD (1) C 47 - H 57	/652. BD*(1) C 45 - C 47	0.63	1.16	0.034
77. BD (1) C 47 - H 57	/654. BD*(1) C 45 - H 56	0.52	0.96	0.028
77. BD (1) C 47 - H 57	/659. BD*(1) C 48 - C 49	1.37	1.17	0.051
78. BD (1) C 48 - C 49	/467. RY*(1) C 46	0.46	1.91	0.038

78.	BD	(1)	C	48	-	C	49	/468.	RY*	(2)	C	46		0.53	2.15	0.043
78.	BD	(1)	C	48	-	C	49	/475.	RY*	(1)	C	47		0.50	1.94	0.039
78.	BD	(1)	C	48	-	C	49	/476.	RY*	(2)	C	47		0.41	2.08	0.037
78.	BD	(1)	C	48	-	C	49	/521.	RY*	(1)	H	58		0.26	1.20	0.022
78.	BD	(1)	C	48	-	C	49	/655.	BD*	(1)	C	46	- C 48	0.95	1.19	0.043
78.	BD	(1)	C	48	-	C	49	/656.	BD*	(1)	C	46	- O 65	1.28	1.05	0.046
78.	BD	(1)	C	48	-	C	49	/657.	BD*	(1)	C	47	- C 49	1.10	1.21	0.046
78.	BD	(1)	C	48	-	C	49	/658.	BD*	(1)	C	47	- H 57	0.78	1.19	0.038
78.	BD	(1)	C	48	-	C	49	/661.	BD*	(1)	C	48	- H 58	0.90	1.20	0.041
78.	BD	(1)	C	48	-	C	49	/662.	BD*	(1)	C	49	- H 59	0.80	1.20	0.039
79.	BD	(2)	C	48	-	C	49	/477.	RY*	(3)	C	47		0.49	0.79	0.026
79.	BD	(2)	C	48	-	C	49	/651.	BD*	(2)	C	44	- C 46	5.73	0.28	0.054
79.	BD	(2)	C	48	-	C	49	/653.	BD*	(2)	C	45	- C 47	7.18	0.30	0.060
80.	BD	(1)	C	48	-	H	58	/467.	RY*	(1)	C	46		0.36	1.68	0.031
80.	BD	(1)	C	48	-	H	58	/491.	RY*	(1)	C	49		0.59	1.72	0.040
80.	BD	(1)	C	48	-	H	58	/650.	BD*	(1)	C	44	- C 46	1.57	1.11	0.053
80.	BD	(1)	C	48	-	H	58	/656.	BD*	(1)	C	46	- O 65	0.47	0.81	0.025
80.	BD	(1)	C	48	-	H	58	/657.	BD*	(1)	C	47	- C 49	2.76	0.97	0.065
80.	BD	(1)	C	48	-	H	58	/659.	BD*	(1)	C	48	- C 49	0.82	1.16	0.039
80.	BD	(1)	C	48	-	H	58	/662.	BD*	(1)	C	49	- H 59	0.49	0.96	0.027
81.	BD	(1)	C	49	-	H	59	/475.	RY*	(1)	C	47		0.57	1.70	0.040
81.	BD	(1)	C	49	-	H	59	/483.	RY*	(1)	C	48		0.80	1.80	0.048
81.	BD	(1)	C	49	-	H	59	/652.	BD*	(1)	C	45	- C 47	1.35	1.15	0.050
81.	BD	(1)	C	49	-	H	59	/655.	BD*	(1)	C	46	- C 48	2.98	0.95	0.067
81.	BD	(1)	C	49	-	H	59	/659.	BD*	(1)	C	48	- C 49	0.74	1.16	0.037
81.	BD	(1)	C	49	-	H	59	/661.	BD*	(1)	C	48	- H 58	0.47	0.96	0.027
82.	BD	(1)	O	50	-	H	60	/355.	RY*	(1)	C	32		1.34	1.80	0.062
82.	BD	(1)	O	50	-	H	60	/624.	BD*	(1)	C	32	- C 34	1.72	1.34	0.061
105.	CR	(1)	C	32				/363.	RY*	(1)	C	33		0.63	11.77	0.108
105.	CR	(1)	C	32				/372.	RY*	(2)	C	34		1.14	11.47	0.145
105.	CR	(1)	C	32				/624.	BD*	(1)	C	32	- C 34	1.03	10.75	0.133
105.	CR	(1)	C	32				/626.	BD*	(1)	C	32	- O 50	0.66	10.40	0.105
105.	CR	(1)	C	32				/627.	BD*	(1)	C	33	- C 35	0.31	10.75	0.073
105.	CR	(1)	C	32				/629.	BD*	(1)	C	33	- C 38	0.34	10.57	0.076
105.	CR	(1)	C	32				/630.	BD*	(1)	C	34	- C 36	0.49	10.60	0.092
106.	CR	(1)	C	33				/355.	RY*	(1)	C	32		0.50	11.15	0.095
106.	CR	(1)	C	33				/379.	RY*	(1)	C	35		0.32	11.61	0.077
106.	CR	(1)	C	33				/380.	RY*	(2)	C	35		1.04	11.59	0.138
106.	CR	(1)	C	33				/404.	RY*	(2)	C	38		0.51	11.19	0.095
106.	CR	(1)	C	33				/624.	BD*	(1)	C	32	- C 34	0.30	10.69	0.072
106.	CR	(1)	C	33				/626.	BD*	(1)	C	32	- O 50	0.26	10.34	0.066
106.	CR	(1)	C	33				/627.	BD*	(1)	C	33	- C 35	0.66	10.69	0.106
106.	CR	(1)	C	33				/632.	BD*	(1)	C	35	- C 37	0.58	10.52	0.100
106.	CR	(1)	C	33				/633.	BD*	(1)	C	35	- C 40	0.52	10.52	0.094
106.	CR	(1)	C	33				/638.	BD*	(1)	C	38	- C 39	0.27	10.71	0.068
107.	CR	(1)	C	34				/356.	RY*	(2)	C	32		1.65	11.46	0.174
107.	CR	(1)	C	34				/508.	RY*	(2)	H	51		0.29	12.29	0.076
107.	CR	(1)	C	34				/623.	BD*	(1)	C	32	- C 33	0.67	10.46	0.107
107.	CR	(1)	C	34				/624.	BD*	(1)	C	32	- C 34	0.34	10.66	0.076
107.	CR	(1)	C	34				/626.	BD*	(1)	C	32	- O 50	0.40	10.31	0.081
107.	CR	(1)	C	34				/634.	BD*	(1)	C	36	- C 37	0.36	10.67	0.079
108.	CR	(1)	C	35				/364.	RY*	(2)	C	33		1.17	11.48	0.146
108.	CR	(1)	C	35				/396.	RY*	(2)	C	37		0.42	11.16	0.086
108.	CR	(1)	C	35				/397.	RY*	(3)	C	37		0.41	11.12	0.085
108.	CR	(1)	C	35				/420.	RY*	(2)	C	40		0.57	11.15	0.101
108.	CR	(1)	C	35				/623.	BD*	(1)	C	32	- C 33	0.56	10.48	0.098
108.	CR	(1)	C	35				/627.	BD*	(1)	C	33	- C 35	0.58	10.68	0.100
108.	CR	(1)	C	35				/629.	BD*	(1)	C	33	- C 38	0.51	10.50	0.093
108.	CR	(1)	C	35				/634.	BD*	(1)	C	36	- C 37	0.35	10.70	0.078
108.	CR	(1)	C	35				/637.	BD*	(1)	C	37	- N 42	0.27	10.43	0.067
108.	CR	(1)	C	35				/643.	BD*	(1)	C	40	- C 41	0.28	10.72	0.070
109.	CR	(1)	C	36				/372.	RY*	(2)	C	34		0.26	11.38	0.069
109.	CR	(1)	C	36				/395.	RY*	(1)	C	37		0.32	11.17	0.075
109.	CR	(1)	C	36				/397.	RY*	(3)	C	37		1.23	11.11	0.148
109.	CR	(1)	C	36				/398.	RY*	(4)	C	37		0.33	10.99	0.077
109.	CR	(1)	C	36				/624.	BD*	(1)	C	32	- C 34	0.33	10.67	0.075
109.	CR	(1)	C	36				/632.	BD*	(1)	C	35	- C 37	0.67	10.49	0.107
109.	CR	(1)	C	36				/634.	BD*	(1)	C	36	- C 37	0.47	10.68	0.090
109.	CR	(1)	C	36				/637.	BD*	(1)	C	37	- N 42	0.51	10.41	0.093
110.	CR	(1)	C	37				/379.	RY*	(1)	C	35		0.66	11.63	0.111
110.	CR	(1)	C	37				/388.	RY*	(2)	C	36		1.01	11.20	0.134

110. CR (1) C 37	/627. BD*(1) C 33 - C 35	0.36	10.71	0.079
110. CR (1) C 37	/630. BD*(1) C 34 - C 36	0.49	10.55	0.091
110. CR (1) C 37	/633. BD*(1) C 35 - C 40	0.33	10.54	0.075
110. CR (1) C 37	/634. BD*(1) C 36 - C 37	0.75	10.72	0.114
110. CR (1) C 37	/636. BD*(1) C 36 - H 61	0.27	10.54	0.067
110. CR (1) C 37	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.40	10.58	0.083
111. CR (1) C 38	/363. RY*(1) C 33	0.25	11.69	0.069
111. CR (1) C 38	/364. RY*(2) C 33	0.34	11.47	0.079
111. CR (1) C 38	/412. RY*(2) C 39	1.15	11.35	0.144
111. CR (1) C 38	/510. RY*(2) H 52	0.27	12.26	0.073
111. CR (1) C 38	/623. BD*(1) C 32 - C 33	0.34	10.46	0.077
111. CR (1) C 38	/627. BD*(1) C 33 - C 35	0.37	10.66	0.079
111. CR (1) C 38	/638. BD*(1) C 38 - C 39	0.44	10.69	0.087
111. CR (1) C 38	/641. BD*(1) C 39 - C 41	0.53	10.51	0.095
112. CR (1) C 39	/403. RY*(1) C 38	0.37	11.23	0.082
112. CR (1) C 39	/404. RY*(2) C 38	0.63	11.16	0.106
112. CR (1) C 39	/406. RY*(4) C 38	0.40	11.09	0.085
112. CR (1) C 39	/428. RY*(2) C 41	0.44	11.37	0.089
112. CR (1) C 39	/512. RY*(2) H 53	0.32	11.98	0.078
112. CR (1) C 39	/629. BD*(1) C 33 - C 38	0.62	10.48	0.102
112. CR (1) C 39	/638. BD*(1) C 38 - C 39	0.38	10.68	0.081
112. CR (1) C 39	/643. BD*(1) C 40 - C 41	0.31	10.69	0.073
113. CR (1) C 40	/380. RY*(2) C 35	0.50	11.56	0.096
113. CR (1) C 40	/428. RY*(2) C 41	1.11	11.36	0.142
113. CR (1) C 40	/514. RY*(2) H 54	0.26	12.35	0.071
113. CR (1) C 40	/627. BD*(1) C 33 - C 35	0.42	10.65	0.085
113. CR (1) C 40	/632. BD*(1) C 35 - C 37	0.34	10.48	0.077
113. CR (1) C 40	/641. BD*(1) C 39 - C 41	0.54	10.51	0.095
113. CR (1) C 40	/643. BD*(1) C 40 - C 41	0.43	10.69	0.085
114. CR (1) C 41	/412. RY*(2) C 39	0.42	11.34	0.087
114. CR (1) C 41	/419. RY*(1) C 40	0.35	11.23	0.079
114. CR (1) C 41	/420. RY*(2) C 40	0.57	11.12	0.101
114. CR (1) C 41	/422. RY*(4) C 40	0.51	11.13	0.095
114. CR (1) C 41	/516. RY*(2) H 55	0.32	11.98	0.078
114. CR (1) C 41	/633. BD*(1) C 35 - C 40	0.61	10.49	0.102
114. CR (1) C 41	/638. BD*(1) C 38 - C 39	0.32	10.68	0.074
114. CR (1) C 41	/643. BD*(1) C 40 - C 41	0.41	10.69	0.084
115. CR (1) N 42	/395. RY*(1) C 37	0.85	15.34	0.144
115. CR (1) N 42	/396. RY*(2) C 37	0.33	15.31	0.089
115. CR (1) N 42	/445. RY*(3) N 43	0.86	15.29	0.145
115. CR (1) N 42	/632. BD*(1) C 35 - C 37	0.29	14.66	0.084
115. CR (1) N 42	/634. BD*(1) C 36 - C 37	0.27	14.85	0.080
115. CR (1) N 42	/648. BD*(1) N 43 - C 44	0.67	14.57	0.126
116. CR (1) N 43	/437. RY*(3) N 42	1.00	15.48	0.157
116. CR (1) N 43	/451. RY*(1) C 44	0.80	15.34	0.140
116. CR (1) N 43	/452. RY*(2) C 44	0.25	15.58	0.080
116. CR (1) N 43	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.63	14.58	0.122
116. CR (1) N 43	/650. BD*(1) C 44 - C 46	0.36	14.80	0.093
117. CR (1) C 44	/460. RY*(2) C 45	0.50	11.29	0.095
117. CR (1) C 44	/467. RY*(1) C 46	0.44	11.28	0.089
117. CR (1) C 44	/468. RY*(2) C 46	1.17	11.52	0.147
117. CR (1) C 44	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.45	10.61	0.088
117. CR (1) C 44	/650. BD*(1) C 44 - C 46	0.61	10.71	0.103
117. CR (1) C 44	/652. BD*(1) C 45 - C 47	0.28	10.75	0.069
117. CR (1) C 44	/655. BD*(1) C 46 - C 48	0.51	10.55	0.093
117. CR (1) C 44	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.40	10.41	0.083
118. CR (1) C 45	/451. RY*(1) C 44	0.31	11.19	0.075
118. CR (1) C 45	/453. RY*(3) C 44	0.31	10.95	0.073
118. CR (1) C 45	/476. RY*(2) C 47	1.02	11.37	0.136
118. CR (1) C 45	/518. RY*(2) H 56	0.31	12.30	0.078
118. CR (1) C 45	/648. BD*(1) N 43 - C 44	0.27	10.41	0.068
118. CR (1) C 45	/650. BD*(1) C 44 - C 46	0.41	10.64	0.084
118. CR (1) C 45	/652. BD*(1) C 45 - C 47	0.41	10.68	0.084
118. CR (1) C 45	/657. BD*(1) C 47 - C 49	0.51	10.51	0.093
119. CR (1) C 46	/452. RY*(2) C 44	1.56	11.51	0.169
119. CR (1) C 46	/484. RY*(2) C 48	0.57	11.29	0.101
119. CR (1) C 46	/648. BD*(1) N 43 - C 44	0.41	10.49	0.084
119. CR (1) C 46	/649. BD*(1) C 44 - C 45	0.49	10.56	0.091
119. CR (1) C 46	/650. BD*(1) C 44 - C 46	0.80	10.72	0.118
119. CR (1) C 46	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.47	10.42	0.089
119. CR (1) C 46	/659. BD*(1) C 48 - C 49	0.29	10.77	0.071

120. CR (1) C 47	/459. RY*(1) C 45	0.41	11.33	0.086
120. CR (1) C 47	/460. RY*(2) C 45	0.80	11.23	0.119
120. CR (1) C 47	/492. RY*(2) C 49	0.47	11.40	0.093
120. CR (1) C 47	/520. RY*(2) H 57	0.33	12.00	0.079
120. CR (1) C 47	/649. BD*(1) C 44 - C 45	0.56	10.49	0.097
120. CR (1) C 47	/652. BD*(1) C 45 - C 47	0.36	10.69	0.079
120. CR (1) C 47	/659. BD*(1) C 48 - C 49	0.29	10.70	0.071
121. CR (1) C 48	/470. RY*(4) C 46	0.48	11.06	0.092
121. CR (1) C 48	/492. RY*(2) C 49	1.02	11.39	0.136
121. CR (1) C 48	/522. RY*(2) H 58	0.28	12.41	0.075
121. CR (1) C 48	/650. BD*(1) C 44 - C 46	0.43	10.64	0.086
121. CR (1) C 48	/657. BD*(1) C 47 - C 49	0.53	10.50	0.094
121. CR (1) C 48	/659. BD*(1) C 48 - C 49	0.44	10.69	0.087
122. CR (1) C 49	/476. RY*(2) C 47	0.48	11.37	0.093
122. CR (1) C 49	/483. RY*(1) C 48	0.40	11.32	0.085
122. CR (1) C 49	/484. RY*(2) C 48	0.81	11.21	0.120
122. CR (1) C 49	/524. RY*(2) H 59	0.31	11.98	0.077
122. CR (1) C 49	/652. BD*(1) C 45 - C 47	0.29	10.68	0.071
122. CR (1) C 49	/655. BD*(1) C 46 - C 48	0.53	10.48	0.095
122. CR (1) C 49	/659. BD*(1) C 48 - C 49	0.39	10.69	0.081
123. CR (1) O 50	/355. RY*(1) C 32	1.16	20.04	0.192
123. CR (1) O 50	/623. BD*(1) C 32 - C 33	0.28	19.38	0.094
125. CR (1) O 65	/467. RY*(1) C 46	1.38	20.11	0.211
125. CR (1) O 65	/650. BD*(1) C 44 - C 46	0.29	19.54	0.096
149. LP (1) N 42	/395. RY*(1) C 37	0.63	1.58	0.041
149. LP (1) N 42	/435. RY*(1) N 42	0.31	1.70	0.030
149. LP (1) N 42	/436. RY*(2) N 42	0.94	2.02	0.056
149. LP (1) N 42	/437. RY*(3) N 42	0.77	1.73	0.047
149. LP (1) N 42	/444. RY*(2) N 43	0.79	1.32	0.042
149. LP (1) N 42	/541. RY*(1) O 65	0.34	2.54	0.038
149. LP (1) N 42	/632. BD*(1) C 35 - C 37	3.16	0.90	0.068
149. LP (1) N 42	/635. BD*(2) C 36 - C 37	1.25	0.49	0.033
150. LP (2) N 42	/397. RY*(3) C 37	0.31	1.40	0.027
150. LP (2) N 42	/443. RY*(1) N 43	1.13	1.17	0.047
150. LP (2) N 42	/444. RY*(2) N 43	0.39	1.20	0.028
150. LP (2) N 42	/632. BD*(1) C 35 - C 37	1.32	0.78	0.041
150. LP (2) N 42	/634. BD*(1) C 36 - C 37	2.17	0.97	0.059
150. LP (2) N 42	/635. BD*(2) C 36 - C 37	4.66	0.37	0.054
151. LP (1) N 43	/436. RY*(2) N 42	0.37	1.96	0.034
151. LP (1) N 43	/437. RY*(3) N 42	0.47	1.68	0.036
151. LP (1) N 43	/451. RY*(1) C 44	0.93	1.53	0.048
151. LP (1) N 43	/649. BD*(1) C 44 - C 45	0.52	0.83	0.026
151. LP (1) N 43	/650. BD*(1) C 44 - C 46	3.80	0.99	0.077
152. LP (2) N 43	/435. RY*(1) N 42	0.79	1.51	0.047
152. LP (2) N 43	/649. BD*(1) C 44 - C 45	0.29	0.70	0.019
152. LP (2) N 43	/651. BD*(2) C 44 - C 46	18.06	0.27	0.093
153. LP (1) O 50	/355. RY*(1) C 32	1.44	1.67	0.062
153. LP (1) O 50	/623. BD*(1) C 32 - C 33	3.54	1.01	0.076
154. LP (2) O 50	/625. BD*(2) C 32 - C 34	12.11	0.35	0.086
157. LP (1) O 65	/467. RY*(1) C 46	1.13	1.77	0.057
157. LP (1) O 65	/650. BD*(1) C 44 - C 46	3.08	1.20	0.077
158. LP (2) O 65	/467. RY*(1) C 46	0.56	1.66	0.039
158. LP (2) O 65	/541. RY*(1) O 65	0.44	2.59	0.043
158. LP (2) O 65	/650. BD*(1) C 44 - C 46	0.50	1.09	0.030
158. LP (2) O 65	/651. BD*(2) C 44 - C 46	0.69	0.51	0.026
158. LP (2) O 65	/655. BD*(1) C 46 - C 48	3.46	0.94	0.072
159. LP (3) O 65	/469. RY*(3) C 46	0.39	1.11	0.027
159. LP (3) O 65	/541. RY*(1) O 65	0.37	2.48	0.039
159. LP (3) O 65	/651. BD*(2) C 44 - C 46	8.54	0.40	0.081
159. LP (3) O 65	/655. BD*(1) C 46 - C 48	0.45	0.83	0.025
625. BD*(2) C 32 - C 34	/358. RY*(4) C 32	0.52	0.53	0.058
625. BD*(2) C 32 - C 34	/373. RY*(3) C 34	1.16	0.48	0.082
628. BD*(2) C 33 - C 35	/366. RY*(4) C 33	1.12	0.57	0.075
628. BD*(2) C 33 - C 35	/382. RY*(4) C 35	1.11	0.57	0.075
635. BD*(2) C 36 - C 37	/389. RY*(3) C 36	0.45	0.75	0.064
635. BD*(2) C 36 - C 37	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.51	0.46	0.051
639. BD*(2) C 38 - C 39	/405. RY*(3) C 38	0.71	0.46	0.074
639. BD*(2) C 38 - C 39	/413. RY*(3) C 39	0.76	0.47	0.078
644. BD*(2) C 40 - C 41	/421. RY*(3) C 40	0.57	0.53	0.074
644. BD*(2) C 40 - C 41	/429. RY*(3) C 41	0.69	0.47	0.077
651. BD*(2) C 44 - C 46	/454. RY*(4) C 44	0.80	0.67	0.061

651. BD*(2) C 44 - C 46	/469. RY*(3) C 46	0.65	0.71	0.056
651. BD*(2) C 44 - C 46	/653. BD*(2) C 45 - C 47	44.13	0.03	0.072
651. BD*(2) C 44 - C 46	/660. BD*(2) C 48 - C 49	38.44	0.03	0.072
653. BD*(2) C 45 - C 47	/461. RY*(3) C 45	0.77	0.52	0.075
653. BD*(2) C 45 - C 47	/477. RY*(3) C 47	0.77	0.48	0.072
660. BD*(2) C 48 - C 49	/485. RY*(3) C 48	0.47	0.74	0.065
660. BD*(2) C 48 - C 49	/493. RY*(3) C 49	0.95	0.47	0.074

from unit 2 to unit 3

54. BD (2) C 36 - C 37	/664. BD*(1) O 62 - H 63	0.07	0.59	0.008
54. BD (2) C 36 - C 37	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.07	0.60	0.009
66. BD (1) N 42 - N 43	/529. RY*(1) O 62	0.10	2.74	0.021
66. BD (1) N 42 - N 43	/530. RY*(2) O 62	0.03	2.35	0.010
67. BD (1) N 43 - C 44	/529. RY*(1) O 62	0.04	2.54	0.012
75. BD (1) C 46 - O 65	/529. RY*(1) O 62	0.05	2.64	0.015
149. LP (1) N 42	/529. RY*(1) O 62	0.67	2.22	0.050
149. LP (1) N 42	/530. RY*(2) O 62	0.15	1.83	0.021
149. LP (1) N 42	/531. RY*(3) O 62	0.08	1.52	0.014
149. LP (1) N 42	/532. RY*(4) O 62	0.08	1.68	0.015
149. LP (1) N 42	/537. RY*(1) H 63	0.15	0.98	0.016
149. LP (1) N 42	/539. RY*(1) H 64	0.21	1.08	0.020
149. LP (1) N 42	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.03	0.77	0.007
150. LP (2) N 42	/529. RY*(1) O 62	0.11	2.10	0.019
150. LP (2) N 42	/530. RY*(2) O 62	0.03	1.71	0.009
150. LP (2) N 42	/537. RY*(1) H 63	0.03	0.86	0.006
150. LP (2) N 42	/539. RY*(1) H 64	0.03	0.95	0.007
157. LP (1) O 65	/529. RY*(1) O 62	0.10	2.37	0.019
157. LP (1) O 65	/537. RY*(1) H 63	0.03	1.14	0.008
157. LP (1) O 65	/539. RY*(1) H 64	0.04	1.23	0.008
158. LP (2) O 65	/529. RY*(1) O 62	0.15	2.26	0.024
158. LP (2) O 65	/530. RY*(2) O 62	0.07	1.87	0.014
158. LP (2) O 65	/532. RY*(4) O 62	0.05	1.73	0.012
158. LP (2) O 65	/537. RY*(1) H 63	0.04	1.03	0.008
158. LP (2) O 65	/539. RY*(1) H 64	0.05	1.12	0.009
159. LP (3) O 65	/529. RY*(1) O 62	0.19	2.15	0.026
159. LP (3) O 65	/530. RY*(2) O 62	0.09	1.76	0.016
159. LP (3) O 65	/531. RY*(3) O 62	0.03	1.46	0.008
159. LP (3) O 65	/532. RY*(4) O 62	0.05	1.62	0.012
159. LP (3) O 65	/537. RY*(1) H 63	0.04	0.92	0.008
159. LP (3) O 65	/539. RY*(1) H 64	0.06	1.01	0.010
159. LP (3) O 65	/664. BD*(1) O 62 - H 63	0.04	0.70	0.007
635. BD*(2) C 36 - C 37	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.05	0.28	0.013

from unit 2 to unit 4

66. BD (1) N 42 - N 43	/551. RY*(3)Cl 66	0.03	2.36	0.011
67. BD (1) N 43 - C 44	/551. RY*(3)Cl 66	0.03	2.16	0.010
149. LP (1) N 42	/549. RY*(1)Cl 66	0.15	1.04	0.016
149. LP (1) N 42	/550. RY*(2)Cl 66	0.18	1.09	0.018
149. LP (1) N 42	/551. RY*(3)Cl 66	0.42	1.84	0.036
150. LP (2) N 42	/549. RY*(1)Cl 66	0.05	0.92	0.009
150. LP (2) N 42	/551. RY*(3)Cl 66	0.03	1.72	0.009
157. LP (1) O 65	/550. RY*(2)Cl 66	0.05	1.24	0.010
157. LP (1) O 65	/551. RY*(3)Cl 66	0.08	1.99	0.016
158. LP (2) O 65	/549. RY*(1)Cl 66	0.10	1.09	0.014
158. LP (2) O 65	/551. RY*(3)Cl 66	0.17	1.88	0.023
159. LP (3) O 65	/549. RY*(1)Cl 66	0.07	0.97	0.010
159. LP (3) O 65	/550. RY*(2)Cl 66	0.03	1.02	0.007
159. LP (3) O 65	/551. RY*(3)Cl 66	0.17	1.77	0.022

from unit 2 to unit 5

51. BD (1) C 35 - C 37	/169. LP*(6)Fe 67	0.08	1.17	0.013
53. BD (1) C 36 - C 37	/172. LP*(9)Fe 67	0.05	2.44	0.015
53. BD (1) C 36 - C 37	/561. RY*(1)Fe 67	0.03	1.40	0.008
53. BD (1) C 36 - C 37	/571. RY*(11)Fe 67	0.03	10.30	0.022
55. BD (1) C 36 - H 61	/169. LP*(6)Fe 67	0.04	1.05	0.008
55. BD (1) C 36 - H 61	/563. RY*(3)Fe 67	0.03	4.68	0.015
56. BD (1) C 37 - N 42	/169. LP*(6)Fe 67	0.85	1.31	0.045
56. BD (1) C 37 - N 42	/171. LP*(8)Fe 67	0.09	2.54	0.019
56. BD (1) C 37 - N 42	/567. RY*(7)Fe 67	0.09	2.85	0.020
56. BD (1) C 37 - N 42	/568. RY*(8)Fe 67	0.03	9.61	0.022
66. BD (1) N 42 - N 43	/169. LP*(6)Fe 67	1.39	1.51	0.062

66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/171.	LP*(8)	Fe	67		0.06	2.73	0.016
66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/172.	LP*(9)	Fe	67		0.05	2.66	0.015
66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/561.	RY*(1)	Fe	67		0.03	1.62	0.009
66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/562.	RY*(2)	Fe	67		0.04	2.59	0.013
66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/563.	RY*(3)	Fe	67		0.43	5.13	0.059
66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/568.	RY*(8)	Fe	67		0.08	9.80	0.035
66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/573.	RY*(13)	Fe	67		0.03	7.66	0.018
66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/575.	RY*(15)	Fe	67		0.10	166.36	0.165
66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/579.	RY*(19)	Fe	67		0.06	730.90	0.255
66.	BD	(1)	N	42	- N	43	/580.	RY*(20)	Fe	67		0.19	49.00	0.123
67.	BD	(1)	N	43	- C	44	/169.	LP*(6)	Fe	67		0.18	1.31	0.021
67.	BD	(1)	N	43	- C	44	/172.	LP*(9)	Fe	67		0.07	2.47	0.017
67.	BD	(1)	N	43	- C	44	/563.	RY*(3)	Fe	67		0.17	4.94	0.036
67.	BD	(1)	N	43	- C	44	/567.	RY*(7)	Fe	67		0.04	2.84	0.014
67.	BD	(1)	N	43	- C	44	/571.	RY*(11)	Fe	67		0.08	10.32	0.037
67.	BD	(1)	N	43	- C	44	/575.	RY*(15)	Fe	67		0.08	166.16	0.148
67.	BD	(1)	N	43	- C	44	/579.	RY*(19)	Fe	67		0.04	730.71	0.217
67.	BD	(1)	N	43	- C	44	/580.	RY*(20)	Fe	67		0.17	48.80	0.116
68.	BD	(1)	C	44	- C	45	/169.	LP*(6)	Fe	67		0.04	1.19	0.009
69.	BD	(1)	C	44	- C	46	/169.	LP*(6)	Fe	67		0.14	1.31	0.018
69.	BD	(1)	C	44	- C	46	/170.	LP*(7)	Fe	67		0.03	2.28	0.010
69.	BD	(1)	C	44	- C	46	/563.	RY*(3)	Fe	67		0.03	4.94	0.016
70.	BD	(2)	C	44	- C	46	/169.	LP*(6)	Fe	67		0.07	0.84	0.010
70.	BD	(2)	C	44	- C	46	/171.	LP*(8)	Fe	67		0.03	2.06	0.010
74.	BD	(1)	C	46	- C	48	/169.	LP*(6)	Fe	67		0.19	1.19	0.020
74.	BD	(1)	C	46	- C	48	/171.	LP*(8)	Fe	67		0.05	2.41	0.013
74.	BD	(1)	C	46	- C	48	/563.	RY*(3)	Fe	67		0.03	4.82	0.015
74.	BD	(1)	C	46	- C	48	/580.	RY*(20)	Fe	67		0.03	48.68	0.046
75.	BD	(1)	C	46	- O	65	/169.	LP*(6)	Fe	67		1.17	1.40	0.055
75.	BD	(1)	C	46	- O	65	/171.	LP*(8)	Fe	67		0.27	2.62	0.034
75.	BD	(1)	C	46	- O	65	/562.	RY*(2)	Fe	67		0.04	2.49	0.013
75.	BD	(1)	C	46	- O	65	/563.	RY*(3)	Fe	67		0.10	5.03	0.028
75.	BD	(1)	C	46	- O	65	/568.	RY*(8)	Fe	67		0.07	9.69	0.033
75.	BD	(1)	C	46	- O	65	/569.	RY*(9)	Fe	67		0.10	10.05	0.039
75.	BD	(1)	C	46	- O	65	/572.	RY*(12)	Fe	67		0.09	7.59	0.032
75.	BD	(1)	C	46	- O	65	/578.	RY*(18)	Fe	67		0.04	30.73	0.047
110.	CR	(1)	C	37			/169.	LP*(6)	Fe	67		0.03	10.61	0.024
115.	CR	(1)	N	42			/169.	LP*(6)	Fe	67		1.22	14.74	0.184
116.	CR	(1)	N	43			/169.	LP*(6)	Fe	67		0.05	14.73	0.036
119.	CR	(1)	C	46			/169.	LP*(6)	Fe	67		0.07	10.65	0.037
125.	CR	(1)	O	65			/169.	LP*(6)	Fe	67		1.41	19.47	0.227
149.	LP	(1)	N	42			/169.	LP*(6)	Fe	67		19.24	0.98	0.183
149.	LP	(1)	N	42			/170.	LP*(7)	Fe	67		0.06	1.95	0.014
149.	LP	(1)	N	42			/171.	LP*(8)	Fe	67		0.15	2.20	0.023
149.	LP	(1)	N	42			/172.	LP*(9)	Fe	67		1.49	2.14	0.073
149.	LP	(1)	N	42			/562.	RY*(2)	Fe	67		0.31	2.07	0.033
149.	LP	(1)	N	42			/563.	RY*(3)	Fe	67		2.96	4.61	0.151
149.	LP	(1)	N	42			/567.	RY*(7)	Fe	67		0.82	2.52	0.059
149.	LP	(1)	N	42			/570.	RY*(10)	Fe	67		0.13	6.32	0.037
149.	LP	(1)	N	42			/571.	RY*(11)	Fe	67		0.09	10.00	0.039
149.	LP	(1)	N	42			/572.	RY*(12)	Fe	67		0.03	7.17	0.018
149.	LP	(1)	N	42			/573.	RY*(13)	Fe	67		0.23	7.14	0.053
149.	LP	(1)	N	42			/574.	RY*(14)	Fe	67		0.06	6.98	0.027
149.	LP	(1)	N	42			/575.	RY*(15)	Fe	67		1.11	165.83	0.554
149.	LP	(1)	N	42			/579.	RY*(19)	Fe	67		0.51	730.38	0.787
149.	LP	(1)	N	42			/580.	RY*(20)	Fe	67		2.23	48.47	0.425
150.	LP	(2)	N	42			/169.	LP*(6)	Fe	67		4.86	0.86	0.086
150.	LP	(2)	N	42			/171.	LP*(8)	Fe	67		0.11	2.08	0.020
150.	LP	(2)	N	42			/172.	LP*(9)	Fe	67		0.41	2.02	0.037
150.	LP	(2)	N	42			/562.	RY*(2)	Fe	67		0.03	1.94	0.010
150.	LP	(2)	N	42			/563.	RY*(3)	Fe	67		0.46	4.49	0.059
150.	LP	(2)	N	42			/567.	RY*(7)	Fe	67		0.20	2.40	0.029
150.	LP	(2)	N	42			/570.	RY*(10)	Fe	67		0.06	6.20	0.024
150.	LP	(2)	N	42			/571.	RY*(11)	Fe	67		0.04	9.88	0.025
150.	LP	(2)	N	42			/575.	RY*(15)	Fe	67		0.16	165.71	0.214
150.	LP	(2)	N	42			/579.	RY*(19)	Fe	67		0.07	730.26	0.302
150.	LP	(2)	N	42			/580.	RY*(20)	Fe	67		0.33	48.35	0.165
151.	LP	(1)	N	43			/169.	LP*(6)	Fe	67		0.28	0.92	0.022
151.	LP	(1)	N	43			/172.	LP*(9)	Fe	67		0.12	2.08	0.020
151.	LP	(1)	N	43			/561.	RY*(1)	Fe	67		0.04	1.04	0.008
151.	LP	(1)	N	43			/563.	RY*(3)	Fe	67		0.03	4.55	0.015

157. LP (1) O 65	/169. LP*(6)Fe 67	4.72	1.13	0.099
157. LP (1) O 65	/171. LP*(8)Fe 67	0.11	2.35	0.021
157. LP (1) O 65	/172. LP*(9)Fe 67	0.03	2.29	0.010
157. LP (1) O 65	/561. RY*(1)Fe 67	0.03	1.24	0.008
157. LP (1) O 65	/562. RY*(2)Fe 67	0.03	2.22	0.011
157. LP (1) O 65	/563. RY*(3)Fe 67	0.76	4.76	0.076
157. LP (1) O 65	/565. RY*(5)Fe 67	0.09	2.08	0.018
157. LP (1) O 65	/566. RY*(6)Fe 67	0.08	2.38	0.018
157. LP (1) O 65	/567. RY*(7)Fe 67	0.17	2.67	0.027
157. LP (1) O 65	/570. RY*(10)Fe 67	0.04	6.47	0.021
157. LP (1) O 65	/573. RY*(13)Fe 67	0.05	7.29	0.025
157. LP (1) O 65	/575. RY*(15)Fe 67	0.21	165.98	0.238
157. LP (1) O 65	/579. RY*(19)Fe 67	0.12	730.53	0.371
157. LP (1) O 65	/580. RY*(20)Fe 67	0.42	48.62	0.182
158. LP (2) O 65	/169. LP*(6)Fe 67	10.86	1.03	0.143
158. LP (2) O 65	/170. LP*(7)Fe 67	0.06	2.00	0.014
158. LP (2) O 65	/171. LP*(8)Fe 67	1.11	2.25	0.064
158. LP (2) O 65	/561. RY*(1)Fe 67	0.12	1.14	0.015
158. LP (2) O 65	/563. RY*(3)Fe 67	1.15	4.66	0.094
158. LP (2) O 65	/565. RY*(5)Fe 67	0.12	1.97	0.020
158. LP (2) O 65	/566. RY*(6)Fe 67	0.03	2.28	0.010
158. LP (2) O 65	/567. RY*(7)Fe 67	0.54	2.56	0.048
158. LP (2) O 65	/570. RY*(10)Fe 67	0.06	6.37	0.025
158. LP (2) O 65	/573. RY*(13)Fe 67	0.10	7.18	0.034
158. LP (2) O 65	/575. RY*(15)Fe 67	0.44	165.88	0.347
158. LP (2) O 65	/579. RY*(19)Fe 67	0.21	730.43	0.502
158. LP (2) O 65	/580. RY*(20)Fe 67	0.90	48.52	0.267
159. LP (3) O 65	/169. LP*(6)Fe 67	9.47	0.92	0.124
159. LP (3) O 65	/171. LP*(8)Fe 67	0.98	2.14	0.059
159. LP (3) O 65	/172. LP*(9)Fe 67	0.10	2.08	0.019
159. LP (3) O 65	/561. RY*(1)Fe 67	0.26	1.03	0.021
159. LP (3) O 65	/563. RY*(3)Fe 67	1.09	4.55	0.091
159. LP (3) O 65	/565. RY*(5)Fe 67	0.07	1.86	0.015
159. LP (3) O 65	/567. RY*(7)Fe 67	0.26	2.45	0.033
159. LP (3) O 65	/569. RY*(9)Fe 67	0.03	9.57	0.024
159. LP (3) O 65	/570. RY*(10)Fe 67	0.03	6.26	0.017
159. LP (3) O 65	/573. RY*(13)Fe 67	0.06	7.07	0.026
159. LP (3) O 65	/575. RY*(15)Fe 67	0.41	165.77	0.339
159. LP (3) O 65	/579. RY*(19)Fe 67	0.18	730.32	0.474
159. LP (3) O 65	/580. RY*(20)Fe 67	0.85	48.41	0.263
from unit 3 to unit 1				
83. BD (1) O 62 - H 63	/253. RY*(1) N 11	0.13	1.90	0.020
83. BD (1) O 62 - H 63	/254. RY*(2) N 11	0.13	2.55	0.023
83. BD (1) O 62 - H 63	/255. RY*(3) N 11	0.09	2.03	0.017
83. BD (1) O 62 - H 63	/256. RY*(4) N 11	0.04	2.33	0.012
83. BD (1) O 62 - H 63	/264. RY*(4) N 12	0.03	2.43	0.011
83. BD (1) O 62 - H 63	/285. RY*(1) C 15	0.04	1.92	0.011
83. BD (1) O 62 - H 63	/288. RY*(4) C 15	0.03	1.47	0.008
83. BD (1) O 62 - H 63	/289. RY*(5) C 15	0.03	3.80	0.013
83. BD (1) O 62 - H 63	/610. BD*(2) C 13 - C 15	0.04	0.83	0.008
84. BD (1) O 62 - H 64	/253. RY*(1) N 11	0.05	1.90	0.013
84. BD (1) O 62 - H 64	/254. RY*(2) N 11	0.05	2.55	0.014
84. BD (1) O 62 - H 64	/255. RY*(3) N 11	0.04	2.03	0.011
84. BD (1) O 62 - H 64	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.03	1.12	0.007
155. LP (1) O 62	/253. RY*(1) N 11	0.03	1.62	0.008
155. LP (1) O 62	/269. RY*(1) C 13	0.03	1.64	0.008
155. LP (1) O 62	/271. RY*(3) C 13	0.03	1.45	0.008
155. LP (1) O 62	/286. RY*(2) C 15	0.03	1.94	0.009
155. LP (1) O 62	/288. RY*(4) C 15	0.04	1.19	0.009
155. LP (1) O 62	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.04	0.90	0.008
155. LP (1) O 62	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.04	0.84	0.007
156. LP (2) O 62	/208. RY*(4) C 5	0.03	1.54	0.008
156. LP (2) O 62	/213. RY*(1) C 6	0.06	1.79	0.014
156. LP (2) O 62	/253. RY*(1) N 11	0.38	1.75	0.033
156. LP (2) O 62	/254. RY*(2) N 11	0.41	2.39	0.040
156. LP (2) O 62	/255. RY*(3) N 11	0.20	1.88	0.024
156. LP (2) O 62	/256. RY*(4) N 11	0.09	2.17	0.018
156. LP (2) O 62	/262. RY*(2) N 12	0.03	1.51	0.009
156. LP (2) O 62	/263. RY*(3) N 12	0.03	1.71	0.008
156. LP (2) O 62	/271. RY*(3) C 13	0.03	1.58	0.008

156. LP (2) O 62	/285. RY*(1) C 15	0.13	1.77	0.019
156. LP (2) O 62	/286. RY*(2) C 15	0.09	2.07	0.017
156. LP (2) O 62	/288. RY*(4) C 15	0.09	1.31	0.014
156. LP (2) O 62	/289. RY*(5) C 15	0.09	3.64	0.023
156. LP (2) O 62	/317. RY*(1) O 19	0.09	2.82	0.020
156. LP (2) O 62	/320. RY*(4) O 19	0.05	2.48	0.014
156. LP (2) O 62	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.06	1.03	0.010
from unit 3 to unit 2				
83. BD (1) O 62 - H 63	/396. RY*(2) C 37	0.04	1.90	0.010
83. BD (1) O 62 - H 63	/398. RY*(4) C 37	0.03	1.75	0.009
83. BD (1) O 62 - H 63	/436. RY*(2) N 42	0.03	2.36	0.011
83. BD (1) O 62 - H 63	/437. RY*(3) N 42	0.05	2.08	0.013
84. BD (1) O 62 - H 64	/396. RY*(2) C 37	0.04	1.90	0.010
84. BD (1) O 62 - H 64	/436. RY*(2) N 42	0.03	2.36	0.011
84. BD (1) O 62 - H 64	/437. RY*(3) N 42	0.05	2.08	0.013
156. LP (2) O 62	/395. RY*(1) C 37	0.04	1.77	0.011
156. LP (2) O 62	/396. RY*(2) C 37	0.09	1.75	0.016
156. LP (2) O 62	/398. RY*(4) C 37	0.04	1.59	0.010
156. LP (2) O 62	/399. RY*(5) C 37	0.04	3.61	0.014
156. LP (2) O 62	/400. RY*(6) C 37	0.03	3.77	0.015
156. LP (2) O 62	/435. RY*(1) N 42	0.04	1.89	0.011
156. LP (2) O 62	/436. RY*(2) N 42	0.15	2.21	0.023
156. LP (2) O 62	/437. RY*(3) N 42	0.39	1.92	0.035
156. LP (2) O 62	/443. RY*(1) N 43	0.03	1.48	0.009
156. LP (2) O 62	/445. RY*(3) N 43	0.11	1.72	0.018
156. LP (2) O 62	/467. RY*(1) C 46	0.08	1.80	0.016
156. LP (2) O 62	/468. RY*(2) C 46	0.06	2.05	0.014
156. LP (2) O 62	/469. RY*(3) C 46	0.08	1.36	0.013
156. LP (2) O 62	/471. RY*(5) C 46	0.06	3.64	0.019
156. LP (2) O 62	/541. RY*(1) O 65	0.03	2.73	0.011
156. LP (2) O 62	/544. RY*(4) O 65	0.03	2.18	0.011
156. LP (2) O 62	/635. BD*(2) C 36 - C 37	0.03	0.68	0.006
156. LP (2) O 62	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.03	1.02	0.007
156. LP (2) O 62	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.16	1.14	0.017
within unit 3				
124. CR (1) O 62	/538. RY*(2) H 63	0.46	21.17	0.125
124. CR (1) O 62	/540. RY*(2) H 64	0.36	21.17	0.110
155. LP (1) O 62	/538. RY*(2) H 63	0.27	2.71	0.034
155. LP (1) O 62	/540. RY*(2) H 64	0.28	2.71	0.035
156. LP (2) O 62	/529. RY*(1) O 62	2.11	2.41	0.091
156. LP (2) O 62	/530. RY*(2) O 62	0.34	2.02	0.033
156. LP (2) O 62	/532. RY*(4) O 62	0.33	1.87	0.032
156. LP (2) O 62	/537. RY*(1) H 63	0.76	1.17	0.038
156. LP (2) O 62	/539. RY*(1) H 64	0.61	1.27	0.036
156. LP (2) O 62	/540. RY*(2) H 64	0.29	2.83	0.037
from unit 3 to unit 4				
83. BD (1) O 62 - H 63	/550. RY*(2)Cl 66	0.03	1.43	0.008
83. BD (1) O 62 - H 63	/551. RY*(3)Cl 66	0.08	2.18	0.017
84. BD (1) O 62 - H 64	/551. RY*(3)Cl 66	0.05	2.18	0.013
156. LP (2) O 62	/549. RY*(1)Cl 66	0.27	1.23	0.023
156. LP (2) O 62	/550. RY*(2)Cl 66	0.30	1.28	0.025
156. LP (2) O 62	/551. RY*(3)Cl 66	0.61	2.03	0.045
from unit 3 to unit 5				
83. BD (1) O 62 - H 63	/169. LP*(6)Fe 67	2.99	1.33	0.086
83. BD (1) O 62 - H 63	/171. LP*(8)Fe 67	0.03	2.55	0.011
83. BD (1) O 62 - H 63	/561. RY*(1)Fe 67	0.03	1.44	0.008
83. BD (1) O 62 - H 63	/562. RY*(2)Fe 67	0.24	2.41	0.031
83. BD (1) O 62 - H 63	/563. RY*(3)Fe 67	0.82	4.95	0.081
83. BD (1) O 62 - H 63	/564. RY*(4)Fe 67	0.03	2.19	0.010
83. BD (1) O 62 - H 63	/565. RY*(5)Fe 67	0.03	2.27	0.010
83. BD (1) O 62 - H 63	/567. RY*(7)Fe 67	0.04	2.86	0.013
83. BD (1) O 62 - H 63	/568. RY*(8)Fe 67	0.09	9.62	0.038
83. BD (1) O 62 - H 63	/570. RY*(10)Fe 67	0.04	6.67	0.021
83. BD (1) O 62 - H 63	/573. RY*(13)Fe 67	0.07	7.48	0.028
83. BD (1) O 62 - H 63	/575. RY*(15)Fe 67	0.23	166.18	0.245
83. BD (1) O 62 - H 63	/579. RY*(19)Fe 67	0.12	730.72	0.372
83. BD (1) O 62 - H 63	/580. RY*(20)Fe 67	0.44	48.82	0.185

84. BD (1) O 62 - H 64	/169. LP*(6)Fe 67	2.87	1.33	0.085
84. BD (1) O 62 - H 64	/562. RY*(2)Fe 67	0.29	2.41	0.033
84. BD (1) O 62 - H 64	/563. RY*(3)Fe 67	0.62	4.95	0.070
84. BD (1) O 62 - H 64	/566. RY*(6)Fe 67	0.03	2.57	0.011
84. BD (1) O 62 - H 64	/567. RY*(7)Fe 67	0.13	2.86	0.024
84. BD (1) O 62 - H 64	/569. RY*(9)Fe 67	0.07	9.98	0.034
84. BD (1) O 62 - H 64	/573. RY*(13)Fe 67	0.04	7.48	0.021
84. BD (1) O 62 - H 64	/574. RY*(14)Fe 67	0.07	7.32	0.028
84. BD (1) O 62 - H 64	/575. RY*(15)Fe 67	0.18	166.18	0.220
84. BD (1) O 62 - H 64	/579. RY*(19)Fe 67	0.10	730.72	0.333
84. BD (1) O 62 - H 64	/580. RY*(20)Fe 67	0.36	48.82	0.166
124. CR (1) O 62	/169. LP*(6)Fe 67	1.59	19.51	0.241
155. LP (1) O 62	/169. LP*(6)Fe 67	1.18	1.05	0.048
155. LP (1) O 62	/172. LP*(9)Fe 67	0.05	2.21	0.013
155. LP (1) O 62	/561. RY*(1)Fe 67	0.03	1.16	0.007
155. LP (1) O 62	/563. RY*(3)Fe 67	0.22	4.68	0.040
155. LP (1) O 62	/566. RY*(6)Fe 67	0.03	2.30	0.011
155. LP (1) O 62	/575. RY*(15)Fe 67	0.04	165.90	0.109
155. LP (1) O 62	/579. RY*(19)Fe 67	0.03	730.45	0.179
155. LP (1) O 62	/580. RY*(20)Fe 67	0.08	48.54	0.081
156. LP (2) O 62	/169. LP*(6)Fe 67	22.76	1.17	0.221
156. LP (2) O 62	/171. LP*(8)Fe 67	2.46	2.39	0.098
156. LP (2) O 62	/172. LP*(9)Fe 67	0.07	2.33	0.016
156. LP (2) O 62	/561. RY*(1)Fe 67	0.22	1.28	0.021
156. LP (2) O 62	/562. RY*(2)Fe 67	0.05	2.26	0.014
156. LP (2) O 62	/563. RY*(3)Fe 67	3.73	4.80	0.171
156. LP (2) O 62	/564. RY*(4)Fe 67	0.05	2.03	0.013
156. LP (2) O 62	/565. RY*(5)Fe 67	0.31	2.12	0.032
156. LP (2) O 62	/566. RY*(6)Fe 67	0.11	2.42	0.021
156. LP (2) O 62	/567. RY*(7)Fe 67	0.55	2.71	0.049
156. LP (2) O 62	/568. RY*(8)Fe 67	0.41	9.46	0.080
156. LP (2) O 62	/569. RY*(9)Fe 67	0.30	9.82	0.070
156. LP (2) O 62	/570. RY*(10)Fe 67	0.17	6.51	0.043
156. LP (2) O 62	/572. RY*(12)Fe 67	0.36	7.37	0.066
156. LP (2) O 62	/573. RY*(13)Fe 67	0.30	7.33	0.060
156. LP (2) O 62	/574. RY*(14)Fe 67	0.18	7.17	0.045
156. LP (2) O 62	/575. RY*(15)Fe 67	1.36	166.02	0.608
156. LP (2) O 62	/576. RY*(16)Fe 67	0.03	30.73	0.038
156. LP (2) O 62	/577. RY*(17)Fe 67	0.22	7.23	0.051
156. LP (2) O 62	/578. RY*(18)Fe 67	0.10	30.50	0.071
156. LP (2) O 62	/579. RY*(19)Fe 67	0.64	730.57	0.874
156. LP (2) O 62	/580. RY*(20)Fe 67	2.64	48.66	0.458
156. LP (2) O 62	/581. RY*(21)Fe 67	0.04	30.42	0.044
from unit 4 to unit 1				
160. LP (1)Cl 66	/254. RY*(2) N 11	0.04	2.48	0.013
160. LP (1)Cl 66	/317. RY*(1) O 19	0.04	2.91	0.014
160. LP (1)Cl 66	/594. BD*(2) C 5 - C 6	0.03	0.78	0.007
161. LP (2)Cl 66	/589. BD*(1) C 3 - C 5	0.03	0.76	0.006
161. LP (2)Cl 66	/594. BD*(2) C 5 - C 6	0.16	0.34	0.010
161. LP (2)Cl 66	/595. BD*(1) C 5 - H 31	0.05	0.73	0.008
162. LP (3)Cl 66	/595. BD*(1) C 5 - H 31	0.06	0.72	0.009
163. LP (4)Cl 66	/206. RY*(2) C 5	0.03	1.72	0.009
163. LP (4)Cl 66	/208. RY*(4) C 5	0.07	1.41	0.013
163. LP (4)Cl 66	/213. RY*(1) C 6	0.11	1.65	0.018
163. LP (4)Cl 66	/215. RY*(3) C 6	0.07	1.63	0.013
163. LP (4)Cl 66	/216. RY*(4) C 6	0.05	1.50	0.011
163. LP (4)Cl 66	/218. RY*(6) C 6	0.05	3.75	0.017
163. LP (4)Cl 66	/253. RY*(1) N 11	0.65	1.61	0.042
163. LP (4)Cl 66	/254. RY*(2) N 11	1.04	2.25	0.062
163. LP (4)Cl 66	/255. RY*(3) N 11	0.79	1.74	0.048
163. LP (4)Cl 66	/256. RY*(4) N 11	0.08	2.04	0.016
163. LP (4)Cl 66	/262. RY*(2) N 12	0.09	1.37	0.014
163. LP (4)Cl 66	/263. RY*(3) N 12	0.14	1.57	0.019
163. LP (4)Cl 66	/271. RY*(3) C 13	0.04	1.44	0.010
163. LP (4)Cl 66	/285. RY*(1) C 15	0.39	1.63	0.033
163. LP (4)Cl 66	/286. RY*(2) C 15	0.16	1.93	0.023
163. LP (4)Cl 66	/288. RY*(4) C 15	0.16	1.17	0.018
163. LP (4)Cl 66	/289. RY*(5) C 15	0.09	3.51	0.023
163. LP (4)Cl 66	/317. RY*(1) O 19	0.25	2.68	0.033
163. LP (4)Cl 66	/320. RY*(4) O 19	0.05	2.34	0.014

163. LP (4)Cl 66	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.06	1.01	0.010

from unit 4 to unit 2

160. LP (1)Cl 66	/437. RY*(3) N 42	0.03	2.01	0.010
160. LP (1)Cl 66	/644. BD*(2) C 40 - C 41	0.03	0.78	0.006
161. LP (2)Cl 66	/628. BD*(2) C 33 - C 35	0.03	0.33	0.005
161. LP (2)Cl 66	/635. BD*(2) C 36 - C 37	0.14	0.32	0.009
161. LP (2)Cl 66	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.05	0.66	0.008
161. LP (2)Cl 66	/644. BD*(2) C 40 - C 41	0.21	0.34	0.011
161. LP (2)Cl 66	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.05	0.79	0.008
161. LP (2)Cl 66	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.07	0.59	0.008
162. LP (3)Cl 66	/543. RY*(3) O 65	0.07	1.76	0.014
162. LP (3)Cl 66	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.81	0.58	0.027
163. LP (4)Cl 66	/395. RY*(1) C 37	0.14	1.63	0.019
163. LP (4)Cl 66	/396. RY*(2) C 37	0.22	1.61	0.024
163. LP (4)Cl 66	/398. RY*(4) C 37	0.18	1.46	0.021
163. LP (4)Cl 66	/399. RY*(5) C 37	0.04	3.47	0.015
163. LP (4)Cl 66	/400. RY*(6) C 37	0.05	3.63	0.018
163. LP (4)Cl 66	/402. RY*(8) C 37	0.05	3.28	0.016
163. LP (4)Cl 66	/435. RY*(1) N 42	0.24	1.76	0.026
163. LP (4)Cl 66	/436. RY*(2) N 42	1.11	2.07	0.062
163. LP (4)Cl 66	/437. RY*(3) N 42	1.02	1.79	0.055
163. LP (4)Cl 66	/438. RY*(4) N 42	0.05	1.98	0.013
163. LP (4)Cl 66	/443. RY*(1) N 43	0.12	1.34	0.016
163. LP (4)Cl 66	/444. RY*(2) N 43	0.05	1.37	0.010
163. LP (4)Cl 66	/445. RY*(3) N 43	0.17	1.58	0.021
163. LP (4)Cl 66	/453. RY*(3) C 44	0.08	1.41	0.014
163. LP (4)Cl 66	/467. RY*(1) C 46	0.56	1.67	0.039
163. LP (4)Cl 66	/468. RY*(2) C 46	0.15	1.91	0.022
163. LP (4)Cl 66	/469. RY*(3) C 46	0.17	1.22	0.019
163. LP (4)Cl 66	/470. RY*(4) C 46	0.04	1.52	0.010
163. LP (4)Cl 66	/471. RY*(5) C 46	0.07	3.50	0.020
163. LP (4)Cl 66	/541. RY*(1) O 65	1.15	2.59	0.070
163. LP (4)Cl 66	/543. RY*(3) O 65	0.23	1.98	0.028
163. LP (4)Cl 66	/544. RY*(4) O 65	0.31	2.04	0.032
163. LP (4)Cl 66	/635. BD*(2) C 36 - C 37	0.04	0.54	0.006
163. LP (4)Cl 66	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.07	0.88	0.010
163. LP (4)Cl 66	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.11	1.00	0.014
163. LP (4)Cl 66	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.85	0.80	0.033

from unit 4 to unit 3

160. LP (1)Cl 66	/529. RY*(1) O 62	0.03	2.50	0.010
160. LP (1)Cl 66	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.03	1.05	0.007
162. LP (3)Cl 66	/530. RY*(2) O 62	0.06	1.65	0.013
162. LP (3)Cl 66	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.77	0.59	0.027
163. LP (4)Cl 66	/529. RY*(1) O 62	2.38	2.27	0.095
163. LP (4)Cl 66	/530. RY*(2) O 62	0.72	1.88	0.048
163. LP (4)Cl 66	/531. RY*(3) O 62	0.46	1.58	0.035
163. LP (4)Cl 66	/532. RY*(4) O 62	0.14	1.73	0.020
163. LP (4)Cl 66	/537. RY*(1) H 63	0.67	1.04	0.034
163. LP (4)Cl 66	/539. RY*(1) H 64	0.88	1.13	0.041
163. LP (4)Cl 66	/664. BD*(1) O 62 - H 63	0.03	0.81	0.007
163. LP (4)Cl 66	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.61	0.82	0.029

within unit 4

163. LP (4)Cl 66	/550. RY*(2)Cl 66	0.55	1.14	0.032
163. LP (4)Cl 66	/551. RY*(3)Cl 66	1.38	1.89	0.066

from unit 4 to unit 5

126. CR (1)Cl 66	/169. LP*(6)Fe 67	0.28	100.54	0.229
127. CR (2)Cl 66	/169. LP*(6)Fe 67	2.20	11.14	0.215
129. CR (4)Cl 66	/169. LP*(6)Fe 67	0.13	7.67	0.043
130. CR (5)Cl 66	/169. LP*(6)Fe 67	0.11	7.68	0.039
160. LP (1)Cl 66	/169. LP*(6)Fe 67	2.70	1.26	0.080
160. LP (1)Cl 66	/170. LP*(7)Fe 67	0.13	2.23	0.022
160. LP (1)Cl 66	/562. RY*(2)Fe 67	0.03	2.34	0.011
160. LP (1)Cl 66	/563. RY*(3)Fe 67	0.30	4.89	0.049
160. LP (1)Cl 66	/567. RY*(7)Fe 67	0.08	2.80	0.018
160. LP (1)Cl 66	/575. RY*(15)Fe 67	0.08	166.11	0.148
160. LP (1)Cl 66	/579. RY*(19)Fe 67	0.05	730.66	0.246
160. LP (1)Cl 66	/580. RY*(20)Fe 67	0.16	48.75	0.113

161. LP (2)Cl 66	/169. LP*(6)Fe 67	0.37	0.82	0.024
161. LP (2)Cl 66	/172. LP*(9)Fe 67	0.11	1.97	0.019
161. LP (2)Cl 66	/563. RY*(3)Fe 67	0.05	4.44	0.020
161. LP (2)Cl 66	/564. RY*(4)Fe 67	0.17	1.68	0.021
161. LP (2)Cl 66	/580. RY*(20)Fe 67	0.03	48.31	0.052
162. LP (3)Cl 66	/169. LP*(6)Fe 67	0.09	0.81	0.012
162. LP (3)Cl 66	/566. RY*(6)Fe 67	0.03	2.05	0.010
162. LP (3)Cl 66	/567. RY*(7)Fe 67	0.04	2.34	0.012
163. LP (4)Cl 66	/169. LP*(6)Fe 67	33.84	1.03	0.251
163. LP (4)Cl 66	/170. LP*(7)Fe 67	2.77	2.00	0.096
163. LP (4)Cl 66	/172. LP*(9)Fe 67	0.08	2.19	0.016
163. LP (4)Cl 66	/561. RY*(1)Fe 67	0.29	1.14	0.023
163. LP (4)Cl 66	/562. RY*(2)Fe 67	1.84	2.12	0.080
163. LP (4)Cl 66	/563. RY*(3)Fe 67	6.54	4.66	0.225
163. LP (4)Cl 66	/564. RY*(4)Fe 67	0.03	1.89	0.009
163. LP (4)Cl 66	/565. RY*(5)Fe 67	0.38	1.98	0.035
163. LP (4)Cl 66	/567. RY*(7)Fe 67	1.55	2.57	0.081
163. LP (4)Cl 66	/569. RY*(9)Fe 67	0.61	9.68	0.099
163. LP (4)Cl 66	/570. RY*(10)Fe 67	0.35	6.37	0.061
163. LP (4)Cl 66	/571. RY*(11)Fe 67	0.11	10.05	0.044
163. LP (4)Cl 66	/572. RY*(12)Fe 67	0.19	7.23	0.048
163. LP (4)Cl 66	/573. RY*(13)Fe 67	0.90	7.19	0.104
163. LP (4)Cl 66	/574. RY*(14)Fe 67	0.04	7.03	0.022
163. LP (4)Cl 66	/575. RY*(15)Fe 67	2.57	165.88	0.840
163. LP (4)Cl 66	/578. RY*(18)Fe 67	0.05	30.36	0.051
163. LP (4)Cl 66	/579. RY*(19)Fe 67	1.22	730.43	1.215
163. LP (4)Cl 66	/580. RY*(20)Fe 67	5.07	48.52	0.639
163. LP (4)Cl 66	/581. RY*(21)Fe 67	0.07	30.28	0.059

from unit 5 to unit 1

131. CR (1)Fe 67	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.03	256.20	0.108
131. CR (1)Fe 67	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.03	256.14	0.115
132. CR (2)Fe 67	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.15	29.53	0.086
132. CR (2)Fe 67	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.10	29.65	0.068
132. CR (2)Fe 67	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.17	29.47	0.091
133. CR (3)Fe 67	/255. RY*(3) N 11	0.09	5.99	0.030
133. CR (3)Fe 67	/285. RY*(1) C 15	0.04	5.88	0.019
133. CR (3)Fe 67	/317. RY*(1) O 19	0.03	6.93	0.018
133. CR (3)Fe 67	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.75	5.14	0.079
133. CR (3)Fe 67	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.48	5.25	0.063
133. CR (3)Fe 67	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.03	5.13	0.015
133. CR (3)Fe 67	/614. BD*(1) C 15 - C 17	0.05	5.20	0.020
133. CR (3)Fe 67	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.93	5.07	0.087
135. CR (5)Fe 67	/255. RY*(3) N 11	0.05	3.67	0.017
135. CR (5)Fe 67	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.16	2.82	0.027
135. CR (5)Fe 67	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.20	2.94	0.031
137. CR (7)Fe 67	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.11	2.82	0.022
137. CR (7)Fe 67	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.15	2.76	0.026
139. CR (9)Fe 67	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.26	2.77	0.034
164. LP (1)Fe 67	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.04	0.79	0.007
164. LP (1)Fe 67	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.05	0.91	0.009
164. LP (1)Fe 67	/614. BD*(1) C 15 - C 17	0.03	0.85	0.006
164. LP (1)Fe 67	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.03	0.73	0.006
165. LP (2)Fe 67	/254. RY*(2) N 11	0.07	2.15	0.016
165. LP (2)Fe 67	/317. RY*(1) O 19	0.34	2.58	0.038
165. LP (2)Fe 67	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.07	0.79	0.010
165. LP (2)Fe 67	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.07	0.91	0.010
166. LP (3)Fe 67	/254. RY*(2) N 11	0.03	2.15	0.009
166. LP (3)Fe 67	/255. RY*(3) N 11	0.03	1.64	0.009
166. LP (3)Fe 67	/256. RY*(4) N 11	0.03	1.93	0.010
166. LP (3)Fe 67	/257. RY*(5) N 11	0.03	4.35	0.015
166. LP (3)Fe 67	/285. RY*(1) C 15	0.04	1.53	0.010
166. LP (3)Fe 67	/317. RY*(1) O 19	0.44	2.58	0.042
166. LP (3)Fe 67	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.11	0.79	0.012
166. LP (3)Fe 67	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.31	0.90	0.021
167. LP (4)Fe 67	/253. RY*(1) N 11	0.03	1.51	0.009
167. LP (4)Fe 67	/254. RY*(2) N 11	0.19	2.15	0.025
167. LP (4)Fe 67	/255. RY*(3) N 11	0.15	1.64	0.020
167. LP (4)Fe 67	/256. RY*(4) N 11	0.06	1.93	0.013
167. LP (4)Fe 67	/263. RY*(3) N 12	0.03	1.47	0.008
167. LP (4)Fe 67	/317. RY*(1) O 19	0.46	2.58	0.043

167. LP (4)Fe 67	/606. BD*(1) N 11 - N 12	0.09	0.90	0.012
167. LP (4)Fe 67	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.17	0.72	0.014
168. LP (5)Fe 67	/253. RY*(1) N 11	0.56	1.49	0.036
168. LP (5)Fe 67	/254. RY*(2) N 11	1.30	2.14	0.067
168. LP (5)Fe 67	/255. RY*(3) N 11	0.33	1.62	0.029
168. LP (5)Fe 67	/259. RY*(7) N 11	0.04	35.57	0.045
168. LP (5)Fe 67	/262. RY*(2) N 12	0.03	1.26	0.007
168. LP (5)Fe 67	/264. RY*(4) N 12	0.04	2.02	0.011
168. LP (5)Fe 67	/285. RY*(1) C 15	0.03	1.52	0.009
168. LP (5)Fe 67	/288. RY*(4) C 15	0.03	1.06	0.007
168. LP (5)Fe 67	/289. RY*(5) C 15	0.03	3.39	0.012
168. LP (5)Fe 67	/317. RY*(1) O 19	0.05	2.57	0.015
168. LP (5)Fe 67	/596. BD*(1) C 6 - N 11	0.09	0.77	0.010
168. LP (5)Fe 67	/607. BD*(1) N 12 - C 13	0.04	0.77	0.007
168. LP (5)Fe 67	/615. BD*(1) C 15 - O 19	0.04	0.71	0.007
169. LP*(6)Fe 67	/176. RY*(4) C 1	0.07	0.05	0.006
169. LP*(6)Fe 67	/182. RY*(2) C 2	0.03	0.91	0.018
169. LP*(6)Fe 67	/200. RY*(4) C 4	0.03	0.15	0.007
169. LP*(6)Fe 67	/205. RY*(1) C 5	0.08	0.78	0.026
169. LP*(6)Fe 67	/206. RY*(2) C 5	0.35	0.69	0.050
169. LP*(6)Fe 67	/207. RY*(3) C 5	0.57	0.20	0.034
169. LP*(6)Fe 67	/208. RY*(4) C 5	1.23	0.37	0.069
169. LP*(6)Fe 67	/213. RY*(1) C 6	1.46	0.62	0.095
169. LP*(6)Fe 67	/214. RY*(2) C 6	0.19	0.45	0.030
169. LP*(6)Fe 67	/215. RY*(3) C 6	0.54	0.60	0.058
169. LP*(6)Fe 67	/216. RY*(4) C 6	0.60	0.47	0.054
169. LP*(6)Fe 67	/217. RY*(5) C 6	0.05	2.45	0.034
169. LP*(6)Fe 67	/218. RY*(6) C 6	0.17	2.72	0.069
169. LP*(6)Fe 67	/220. RY*(8) C 6	0.08	2.29	0.043
169. LP*(6)Fe 67	/237. RY*(1) C 9	0.03	0.68	0.015
169. LP*(6)Fe 67	/238. RY*(2) C 9	0.05	0.53	0.017
169. LP*(6)Fe 67	/247. RY*(3) C 10	0.32	0.03	0.010
169. LP*(6)Fe 67	/248. RY*(4) C 10	0.04	0.38	0.012
169. LP*(6)Fe 67	/253. RY*(1) N 11	9.61	0.57	0.237
169. LP*(6)Fe 67	/254. RY*(2) N 11	11.33	1.22	0.375
169. LP*(6)Fe 67	/255. RY*(3) N 11	9.85	0.70	0.269
169. LP*(6)Fe 67	/256. RY*(4) N 11	1.30	1.00	0.117
169. LP*(6)Fe 67	/258. RY*(6) N 11	0.13	3.48	0.070
169. LP*(6)Fe 67	/261. RY*(1) N 12	0.70	0.30	0.046
169. LP*(6)Fe 67	/262. RY*(2) N 12	1.67	0.34	0.076
169. LP*(6)Fe 67	/263. RY*(3) N 12	1.72	0.54	0.098
169. LP*(6)Fe 67	/264. RY*(4) N 12	0.20	1.10	0.048
169. LP*(6)Fe 67	/265. RY*(5) N 12	0.04	3.63	0.038
169. LP*(6)Fe 67	/269. RY*(1) C 13	0.06	0.59	0.019
169. LP*(6)Fe 67	/270. RY*(2) C 13	0.07	0.91	0.026
169. LP*(6)Fe 67	/271. RY*(3) C 13	1.18	0.41	0.071
169. LP*(6)Fe 67	/273. RY*(5) C 13	0.05	2.18	0.033
169. LP*(6)Fe 67	/274. RY*(6) C 13	0.03	2.93	0.032
169. LP*(6)Fe 67	/279. RY*(3) C 14	2.55	0.02	0.021
169. LP*(6)Fe 67	/280. RY*(4) C 14	0.14	0.39	0.024
169. LP*(6)Fe 67	/282. RY*(6) C 14	0.03	2.05	0.024
169. LP*(6)Fe 67	/285. RY*(1) C 15	7.44	0.60	0.212
169. LP*(6)Fe 67	/286. RY*(2) C 15	1.34	0.90	0.112
169. LP*(6)Fe 67	/288. RY*(4) C 15	6.46	0.14	0.097
169. LP*(6)Fe 67	/289. RY*(5) C 15	0.72	2.47	0.137
169. LP*(6)Fe 67	/293. RY*(1) C 16	0.08	0.67	0.023
169. LP*(6)Fe 67	/296. RY*(4) C 16	0.05	0.39	0.015
169. LP*(6)Fe 67	/301. RY*(1) C 17	0.26	0.78	0.046
169. LP*(6)Fe 67	/303. RY*(3) C 17	1.77	0.05	0.030
169. LP*(6)Fe 67	/304. RY*(4) C 17	0.09	0.41	0.019
169. LP*(6)Fe 67	/309. RY*(1) C 18	0.03	0.67	0.013
169. LP*(6)Fe 67	/317. RY*(1) O 19	4.65	1.65	0.282
169. LP*(6)Fe 67	/318. RY*(2) O 19	0.23	0.74	0.042
169. LP*(6)Fe 67	/319. RY*(3) O 19	0.17	0.57	0.032
169. LP*(6)Fe 67	/320. RY*(4) O 19	1.13	1.31	0.124
169. LP*(6)Fe 67	/321. RY*(5) O 19	0.11	4.51	0.073
169. LP*(6)Fe 67	/340. RY*(2) H 24	0.07	1.84	0.036
169. LP*(6)Fe 67	/609. BD*(1) C 13 - C 15	0.18	0.09	0.012
from unit 5 to unit 2				
131. CR (1)Fe 67	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.03	256.19	0.114

131. CR (1)Fe 67	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.03	256.12	0.115
132. CR (2)Fe 67	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.17	29.52	0.091
132. CR (2)Fe 67	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.10	29.64	0.067
132. CR (2)Fe 67	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.18	29.44	0.092
133. CR (3)Fe 67	/437. RY*(3) N 42	0.10	6.03	0.032
133. CR (3)Fe 67	/467. RY*(1) C 46	0.04	5.91	0.019
133. CR (3)Fe 67	/541. RY*(1) O 65	0.04	6.84	0.021
133. CR (3)Fe 67	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.82	5.12	0.082
133. CR (3)Fe 67	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.47	5.25	0.063
133. CR (3)Fe 67	/648. BD*(1) N 43 - C 44	0.03	5.12	0.016
133. CR (3)Fe 67	/655. BD*(1) C 46 - C 48	0.05	5.19	0.021
133. CR (3)Fe 67	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.93	5.05	0.087
135. CR (5)Fe 67	/437. RY*(3) N 42	0.06	3.72	0.018
135. CR (5)Fe 67	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.10	2.81	0.022
135. CR (5)Fe 67	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.22	2.94	0.033
135. CR (5)Fe 67	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.11	2.74	0.022
137. CR (7)Fe 67	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.04	2.81	0.013
137. CR (7)Fe 67	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.26	2.74	0.034
139. CR (9)Fe 67	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.16	2.82	0.027
164. LP (1)Fe 67	/436. RY*(2) N 42	0.09	1.97	0.017
164. LP (1)Fe 67	/438. RY*(4) N 42	0.04	1.88	0.010
164. LP (1)Fe 67	/467. RY*(1) C 46	0.04	1.57	0.010
164. LP (1)Fe 67	/470. RY*(4) C 46	0.03	1.42	0.008
164. LP (1)Fe 67	/541. RY*(1) O 65	0.47	2.49	0.043
164. LP (1)Fe 67	/543. RY*(3) O 65	0.05	1.88	0.012
164. LP (1)Fe 67	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.05	0.90	0.008
164. LP (1)Fe 67	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.09	0.70	0.010
165. LP (2)Fe 67	/435. RY*(1) N 42	0.14	1.66	0.019
165. LP (2)Fe 67	/436. RY*(2) N 42	0.09	1.97	0.017
165. LP (2)Fe 67	/446. RY*(4) N 43	0.03	2.05	0.009
165. LP (2)Fe 67	/541. RY*(1) O 65	0.04	2.49	0.012
165. LP (2)Fe 67	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.13	0.78	0.013
165. LP (2)Fe 67	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.08	0.90	0.011
166. LP (3)Fe 67	/435. RY*(1) N 42	0.27	1.65	0.026
166. LP (3)Fe 67	/436. RY*(2) N 42	0.14	1.97	0.021
166. LP (3)Fe 67	/437. RY*(3) N 42	0.09	1.68	0.015
166. LP (3)Fe 67	/471. RY*(5) C 46	0.03	3.40	0.014
166. LP (3)Fe 67	/541. RY*(1) O 65	0.06	2.49	0.015
166. LP (3)Fe 67	/544. RY*(4) O 65	0.03	1.94	0.009
166. LP (3)Fe 67	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.09	0.90	0.011
166. LP (3)Fe 67	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.05	0.70	0.008
167. LP (4)Fe 67	/438. RY*(4) N 42	0.07	1.88	0.015
167. LP (4)Fe 67	/439. RY*(5) N 42	0.05	4.29	0.018
167. LP (4)Fe 67	/467. RY*(1) C 46	0.04	1.56	0.010
167. LP (4)Fe 67	/541. RY*(1) O 65	0.58	2.49	0.048
167. LP (4)Fe 67	/543. RY*(3) O 65	0.09	1.88	0.016
167. LP (4)Fe 67	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.13	0.77	0.013
167. LP (4)Fe 67	/647. BD*(1) N 42 - N 43	0.37	0.90	0.023
167. LP (4)Fe 67	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.03	0.70	0.006
168. LP (5)Fe 67	/435. RY*(1) N 42	0.44	1.64	0.034
168. LP (5)Fe 67	/436. RY*(2) N 42	1.19	1.96	0.061
168. LP (5)Fe 67	/437. RY*(3) N 42	0.39	1.67	0.032
168. LP (5)Fe 67	/441. RY*(7) N 42	0.04	35.62	0.050
168. LP (5)Fe 67	/443. RY*(1) N 43	0.03	1.23	0.008
168. LP (5)Fe 67	/445. RY*(3) N 43	0.05	1.47	0.011
168. LP (5)Fe 67	/446. RY*(4) N 43	0.03	2.04	0.010
168. LP (5)Fe 67	/541. RY*(1) O 65	0.13	2.48	0.023
168. LP (5)Fe 67	/544. RY*(4) O 65	0.05	1.93	0.012
168. LP (5)Fe 67	/637. BD*(1) C 37 - N 42	0.04	0.76	0.007
168. LP (5)Fe 67	/648. BD*(1) N 43 - C 44	0.04	0.76	0.007
168. LP (5)Fe 67	/656. BD*(1) C 46 - O 65	0.11	0.69	0.011
169. LP*(6)Fe 67	/379. RY*(1) C 35	0.03	1.02	0.017
169. LP*(6)Fe 67	/380. RY*(2) C 35	0.06	1.00	0.025
169. LP*(6)Fe 67	/381. RY*(3) C 35	0.07	0.43	0.018
169. LP*(6)Fe 67	/382. RY*(4) C 35	0.03	0.09	0.005
169. LP*(6)Fe 67	/387. RY*(1) C 36	0.05	0.84	0.021
169. LP*(6)Fe 67	/388. RY*(2) C 36	0.06	0.59	0.018
169. LP*(6)Fe 67	/389. RY*(3) C 36	0.10	0.25	0.016
169. LP*(6)Fe 67	/390. RY*(4) C 36	0.15	0.48	0.027
169. LP*(6)Fe 67	/391. RY*(5) C 36	0.03	2.04	0.024
169. LP*(6)Fe 67	/395. RY*(1) C 37	1.62	0.60	0.099

169. LP*(6)Fe 67	/396. RY*(2) C 37	2.13	0.57	0.113
169. LP*(6)Fe 67	/397. RY*(3) C 37	0.06	0.54	0.019
169. LP*(6)Fe 67	/398. RY*(4) C 37	2.33	0.42	0.101
169. LP*(6)Fe 67	/399. RY*(5) C 37	0.27	2.43	0.083
169. LP*(6)Fe 67	/400. RY*(6) C 37	0.20	2.60	0.073
169. LP*(6)Fe 67	/402. RY*(8) C 37	0.20	2.25	0.068
169. LP*(6)Fe 67	/421. RY*(3) C 40	0.19	0.05	0.010
169. LP*(6)Fe 67	/422. RY*(4) C 40	0.06	0.57	0.018
169. LP*(6)Fe 67	/435. RY*(1) N 42	3.54	0.72	0.161
169. LP*(6)Fe 67	/436. RY*(2) N 42	9.00	1.04	0.309
169. LP*(6)Fe 67	/437. RY*(3) N 42	12.12	0.75	0.308
169. LP*(6)Fe 67	/438. RY*(4) N 42	0.87	0.94	0.093
169. LP*(6)Fe 67	/440. RY*(6) N 42	0.03	3.47	0.034
169. LP*(6)Fe 67	/443. RY*(1) N 43	1.87	0.31	0.076
169. LP*(6)Fe 67	/444. RY*(2) N 43	1.24	0.34	0.065
169. LP*(6)Fe 67	/445. RY*(3) N 43	2.26	0.55	0.114
169. LP*(6)Fe 67	/446. RY*(4) N 43	0.13	1.12	0.039
169. LP*(6)Fe 67	/447. RY*(5) N 43	0.03	3.45	0.035
169. LP*(6)Fe 67	/451. RY*(1) C 44	0.05	0.61	0.018
169. LP*(6)Fe 67	/452. RY*(2) C 44	0.07	0.85	0.025
169. LP*(6)Fe 67	/453. RY*(3) C 44	1.24	0.38	0.070
169. LP*(6)Fe 67	/454. RY*(4) C 44	0.05	0.15	0.009
169. LP*(6)Fe 67	/455. RY*(5) C 44	0.03	2.22	0.025
169. LP*(6)Fe 67	/461. RY*(3) C 45	1.38	0.02	0.018
169. LP*(6)Fe 67	/462. RY*(4) C 45	0.08	0.40	0.018
169. LP*(6)Fe 67	/467. RY*(1) C 46	6.27	0.63	0.201
169. LP*(6)Fe 67	/468. RY*(2) C 46	1.18	0.87	0.103
169. LP*(6)Fe 67	/469. RY*(3) C 46	5.01	0.19	0.100
169. LP*(6)Fe 67	/470. RY*(4) C 46	0.50	0.49	0.051
169. LP*(6)Fe 67	/471. RY*(5) C 46	0.59	2.46	0.124
169. LP*(6)Fe 67	/474. RY*(8) C 46	0.03	2.18	0.028
169. LP*(6)Fe 67	/475. RY*(1) C 47	0.05	0.66	0.019
169. LP*(6)Fe 67	/478. RY*(4) C 47	0.03	0.43	0.011
169. LP*(6)Fe 67	/483. RY*(1) C 48	0.17	0.76	0.036
169. LP*(6)Fe 67	/486. RY*(4) C 48	0.41	0.26	0.033
169. LP*(6)Fe 67	/491. RY*(1) C 49	0.03	0.68	0.014
169. LP*(6)Fe 67	/515. RY*(1) H 55	0.14	0.02	0.006
169. LP*(6)Fe 67	/523. RY*(1) H 59	0.06	0.02	0.004
169. LP*(6)Fe 67	/528. RY*(2) H 61	0.05	1.79	0.030
169. LP*(6)Fe 67	/541. RY*(1) O 65	6.41	1.56	0.322
169. LP*(6)Fe 67	/543. RY*(3) O 65	0.25	0.95	0.050
169. LP*(6)Fe 67	/544. RY*(4) O 65	1.99	1.01	0.145
169. LP*(6)Fe 67	/545. RY*(5) O 65	0.09	4.51	0.064
169. LP*(6)Fe 67	/634. BD*(1) C 36 - C 37	0.15	0.11	0.013
169. LP*(6)Fe 67	/650. BD*(1) C 44 - C 46	0.24	0.06	0.012
from unit 5 to unit 3				
135. CR (5)Fe 67	/664. BD*(1) O 62 - H 63	0.07	2.75	0.017
139. CR (9)Fe 67	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.05	2.76	0.015
164. LP (1)Fe 67	/529. RY*(1) O 62	0.15	2.17	0.023
164. LP (1)Fe 67	/539. RY*(1) H 64	0.04	1.03	0.008
164. LP (1)Fe 67	/664. BD*(1) O 62 - H 63	0.06	0.71	0.008
164. LP (1)Fe 67	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.07	0.72	0.009
165. LP (2)Fe 67	/529. RY*(1) O 62	0.15	2.17	0.023
166. LP (3)Fe 67	/529. RY*(1) O 62	0.09	2.17	0.018
167. LP (4)Fe 67	/664. BD*(1) O 62 - H 63	0.25	0.71	0.017
167. LP (4)Fe 67	/665. BD*(1) O 62 - H 64	0.14	0.72	0.013
168. LP (5)Fe 67	/530. RY*(2) O 62	0.03	1.77	0.009
168. LP (5)Fe 67	/537. RY*(1) H 63	0.06	0.92	0.009
168. LP (5)Fe 67	/539. RY*(1) H 64	0.04	1.01	0.008
168. LP (5)Fe 67	/664. BD*(1) O 62 - H 63	0.04	0.70	0.007
169. LP*(6)Fe 67	/529. RY*(1) O 62	15.14	1.24	0.441
169. LP*(6)Fe 67	/530. RY*(2) O 62	3.21	0.85	0.168
169. LP*(6)Fe 67	/531. RY*(3) O 62	1.99	0.54	0.106
169. LP*(6)Fe 67	/532. RY*(4) O 62	2.17	0.70	0.126
169. LP*(6)Fe 67	/535. RY*(7) O 62	0.04	4.34	0.043
169. LP*(6)Fe 67	/536. RY*(8) O 62	0.15	4.32	0.084
169. LP*(6)Fe 67	/539. RY*(1) H 64	38.14	0.09	0.193
from unit 5 to unit 4				
165. LP (2)Fe 67	/549. RY*(1)Cl 66	0.06	0.99	0.009

168. LP (5)Fe 67	/550. RY*(2)Cl 66	0.04	1.03	0.008
168. LP (5)Fe 67	/551. RY*(3)Cl 66	0.07	1.78	0.014
169. LP*(6)Fe 67	/549. RY*(1)Cl 66	9.20	0.06	0.074
169. LP*(6)Fe 67	/550. RY*(2)Cl 66	18.89	0.11	0.144
169. LP*(6)Fe 67	/551. RY*(3)Cl 66	8.74	0.86	0.280
169. LP*(6)Fe 67	/552. RY*(4)Cl 66	0.31	0.22	0.027
169. LP*(6)Fe 67	/553. RY*(5)Cl 66	0.07	1.78	0.036
169. LP*(6)Fe 67	/556. RY*(8)Cl 66	0.08	1.73	0.037
169. LP*(6)Fe 67	/559. RY*(11)Cl 66	0.23	1.75	0.065
within unit 5				
132. CR (2)Fe 67	/169. LP*(6)Fe 67	1.15	29.67	0.253
133. CR (3)Fe 67	/169. LP*(6)Fe 67	4.34	5.28	0.207
168. LP (5)Fe 67	/169. LP*(6)Fe 67	0.25	0.92	0.021
168. LP (5)Fe 67	/563. RY*(3)Fe 67	0.31	4.55	0.048
168. LP (5)Fe 67	/580. RY*(20)Fe 67	0.34	48.41	0.162
169. LP*(6)Fe 67	/172. LP*(9)Fe 67	0.37	1.16	0.066
169. LP*(6)Fe 67	/561. RY*(1)Fe 67	15.40	0.11	0.133
169. LP*(6)Fe 67	/562. RY*(2)Fe 67	8.07	1.08	0.301
169. LP*(6)Fe 67	/563. RY*(3)Fe 67	32.10	3.63	1.101
169. LP*(6)Fe 67	/564. RY*(4)Fe 67	0.26	0.86	0.049
169. LP*(6)Fe 67	/565. RY*(5)Fe 67	1.41	0.94	0.118
169. LP*(6)Fe 67	/567. RY*(7)Fe 67	10.96	1.54	0.420
169. LP*(6)Fe 67	/569. RY*(9)Fe 67	0.33	8.65	0.174
169. LP*(6)Fe 67	/570. RY*(10)Fe 67	1.58	5.34	0.297
169. LP*(6)Fe 67	/572. RY*(12)Fe 67	0.47	6.19	0.174
169. LP*(6)Fe 67	/573. RY*(13)Fe 67	2.11	6.16	0.368
169. LP*(6)Fe 67	/574. RY*(14)Fe 67	1.05	5.99	0.257
169. LP*(6)Fe 67	/575. RY*(15)Fe 67	10.89	164.85	4.335
169. LP*(6)Fe 67	/579. RY*(19)Fe 67	5.07	729.40	6.221
169. LP*(6)Fe 67	/580. RY*(20)Fe 67	22.26	47.49	3.327