

## Supplementary Information

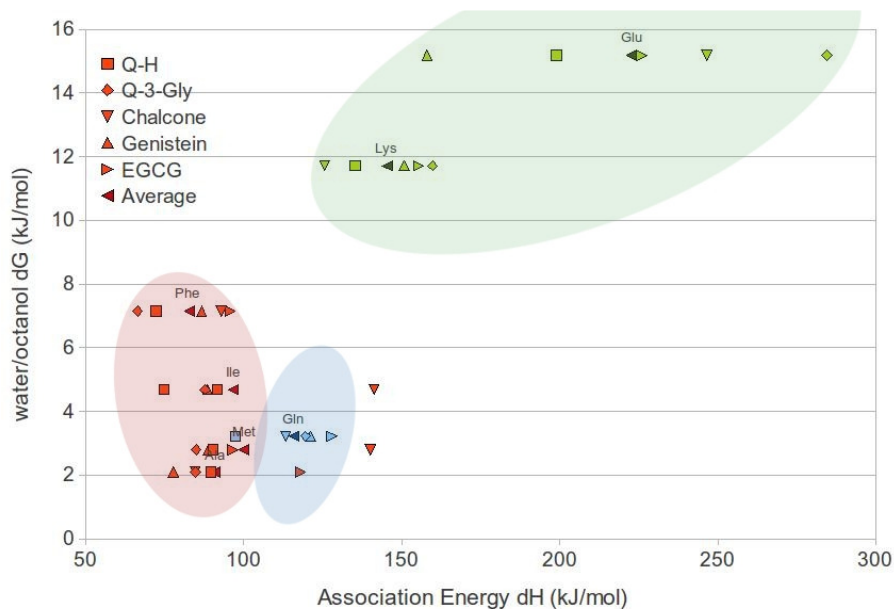
### Cross-talk between amino acid residues and flavonoid derivatives: insights into their chemical recognition

A. Daniel Boese<sup>1</sup> and Edelsys Codorniu-Hernández<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Humboldt-Universität zu Berlin, Unter den Linden 6, 10099 Berlin, Germany.

<sup>2</sup>Department of Chemistry, University of Calgary, 2500 University Drive NW, T2N1N4, Calgary, Alberta, Canada.

#### 1) Association enthalpies of flavonoids and flavonoids metabolites with amino acid residues plotted vs. absolute value of theoretical hydrophobicity index.



Coloured in green are the charges species, neutral AAs found to be more or less abundant in those proteins binding flavonoids in PDB are coloured red or blue, respectively.

## 2) Energies of optimized flavonoid-AA (kJ/mol)

### QH

| MP2   | MP2 (ghost) | SCS-MP2 (ghost) | SAPT+dHF | AA  | Best estimate |
|-------|-------------|-----------------|----------|-----|---------------|
| 93.0  | 57.4        | 44.1            | 45.2     | Phe | 72.4          |
| 131.2 | 72.4        | 49.7            | 50.1     | Met | 90.4          |
| 119.5 | 71.3        | 52.3            | 54.7     | Ala | 89.6          |
| 106.8 | 58.1        | 40.5            | 40.9     | Ile | 74.9          |
| 130.9 | 81.9        | 60.9            | 61.0     | Gln | 97.4          |
| 148.9 | 122.0       | 108.9           | 112.9    | Lys | 135.3         |
| 216.3 | 184.7       | 168.4           | 171.3    | Glu | 198.9         |

### Q-derivatives

| Q-derivative              | MP2   | MP2 (ghost) | ind/disp ratio | SCS-MP2 (cp-corr) | SAPT+dHF |
|---------------------------|-------|-------------|----------------|-------------------|----------|
| Quer-3'OMe                | 203.5 | 164.8       | 1.3            | 117.7             | 117      |
| Quer-4'OMe                | 168.0 | 132.4       | 1.6            | 148.5             | 150.5    |
| QH                        | 216.3 | 184.7       | 2.0            | 149.5             | 153.2    |
| Q- $\delta$ -Quin         | 207.8 | 166.8       | 1.3            | 168.4             | 171.3    |
| Quer-3'-sulf (Zwitterion) | 413.1 | 377.1       | 2.5            | 195.6             | 200.7    |
| Quer-3'-sulf              | 250.6 | 211.9       |                | 194.1             | 240.8    |
| Q-3-Gly                   | 308.3 | 253.0       | 2.0            | 230.3             | 236.6    |
| Q-7-Gluc                  | 258.6 | 215.4       | 1.4            | 359.1             | 363.9    |

| AA/Flav-Der | Q-3-Gly | Chalcone | EGCG  | Average |
|-------------|---------|----------|-------|---------|
| Phe         | 66.5    | 92.9     | 95.8  | 82.8    |
| Met         | 85.0    | 139.9    | 96.6  | 100.2   |
| Ala         | 84.9    | 84.7     | 117.9 | 90.9    |
| Ile         | 87.8    | 141.2    | 91.7  | 96.8    |
| Gln         | 119.6   | 113.3    | 127.8 | 115.8   |
| Lys         | 159.8   | 125.7    | 155.4 | 145.4   |
| Glu         | 284.5   | 246.5    | 225.9 | 222.8   |

### **Q-3-Gly**

| <b>AA</b> | <b>MP2</b> | <b>MP2<br/>(ghost)</b> | <b>Energy<br/>MP2/SAPT</b> | <b>SCS-MP2<br/>(ghost)</b> | <b>SAPT</b> | <b>SAPT+dHF</b> |
|-----------|------------|------------------------|----------------------------|----------------------------|-------------|-----------------|
| Ser       | 110.0      | 62.8                   | 44.7                       | 45.1                       | 32.7        | 47.1            |
| Pro       | 133.1      | 94.9                   | 50.3                       | 66.3                       | 39.5        | 50.5            |
| Thr       | 64.1       | 43.5                   | 52.8                       | 34.3                       | 35.9        | 47.4            |
| Val       | 81.2       | 55.2                   | 62.6                       | 43.9                       | 33.5        | 48.9            |
| Leu       | 120.5      | 70.6                   | 68.5                       | 52.5                       | 38.1        | 54.2            |
| Gly       | 123.1      | 81.1                   | 69.0                       | 62.4                       | 37.8        | 65.8            |
| Phe       | 82.8       | 64.9                   | 55.8                       | 48.3                       | 38.1        | 55.9            |
| Ala       | 103.8      | 69.1                   | 69.0                       | 53.8                       | 40.4        | 59.1            |
| Trp       | 121.8      | 67.2                   | 62.9                       | 46.7                       | 35.5        | 47.9            |
| Met       | 114.6      | 93.9                   | 67.9                       | 69.8                       | 48.0        | 69.7            |
| Tyr       | 109.4      | 74.7                   | 82.3                       | 58.8                       | 41.1        | 61.1            |
| Ile       | 104.1      | 72.4                   | 59.9                       | 58.8                       | 44.2        | 63.4            |
| Asn       | 129.8      | 91.2                   | 67.3                       | 73.1                       | 54.9        | 77.4            |
| Gln       | 135.5      | 95.8                   | 80.4                       | 77.4                       | 68.0        | 91.7            |
| Cys       | 122.3      | 80.0                   | 88.3                       | 62.1                       | 47.6        | 63.3            |
| Arg       | 174.1      | 124.4                  | 117.4                      | 103.4                      | 89.5        | 105.7           |
| Lys       | 180.8      | 154.7                  | 133.0                      | 133.7                      | 113.0       | 139.6           |
| His       | 256.9      | 247.5                  | 195.1                      | 223.5                      | 139.6       | 226.5           |
| Asp       | 255.7      | 230.6                  | 194.4                      | 216.1                      | 168.2       | 220.1           |
| Glu       | 308.3      | 253.0                  | 267.4                      | 230.3                      | 152.6       | 236.6           |

| <b>AA</b>  | <b>ind/disp<br/>ratio</b> |
|------------|---------------------------|
| <b>Thr</b> | 0.5                       |
| <b>Phe</b> | 0.6                       |
| <b>Val</b> | 0.8                       |
| <b>Pro</b> | 0.3                       |
| <b>Ser</b> | 0.5                       |
| <b>Ala</b> | 0.7                       |
| <b>Met</b> | 0.5                       |
| <b>Trp</b> | 0.3                       |
| <b>Tyr</b> | 0.7                       |
| <b>Ile</b> | 0.8                       |
| <b>Leu</b> | 0.5                       |
| <b>Cys</b> | 0.5                       |
| <b>Gly</b> | 0.8                       |
| <b>Asn</b> | 0.7                       |
| <b>Gln</b> | 0.6                       |

|            |     |
|------------|-----|
| <b>Arg</b> | 0.7 |
| <b>Lys</b> | 0.9 |
| <b>His</b> | 2.4 |
| <b>Asp</b> | 2.4 |
| <b>Glu</b> | 2.0 |

## **Genistein**

| <b>AA</b> | <b>SAPT</b> | <b>dHF</b> |
|-----------|-------------|------------|
| Phe       | 33.2        | 17.7       |
| Met       | 51.1        | 18.3       |
| Ala       | 34.0        | 15.9       |
| Ile       | 38.2        | 18.5       |
| Gln       | 53.3        | 27.5       |
| Lys       | 107.2       | 29.8       |
| Glu       | 95.9        | 34.9       |

| <b>MP2</b> | <b>MP2<br/>(ghost)</b> | <b>SCS-MP2<br/>(ghost)</b> | <b>SAPT+dHF</b> | <b>AA</b> | <b>Best<br/>estimate</b> |
|------------|------------------------|----------------------------|-----------------|-----------|--------------------------|
| 117.13     | 67.9                   | 49.7                       | 50.9            | Phe       | 86.7                     |
| 103.73     | 79.0                   | 66.0                       | 69.4            | Met       | 88.9                     |
| 101.01     | 63.0                   | 47.0                       | 49.9            | Ala       | 77.7                     |
| 112.03     | 69.5                   | 53.3                       | 56.7            | Ile       | 88.6                     |
| 154.94     | 100.4                  | 76.2                       | 80.8            | Gln       | 121.1                    |
| 160.86     | 143.6                  | 132.4                      | 136.9           | Lys       | 150.9                    |
| 173.86     | 143.3                  | 129.7                      | 130.8           | Glu       | 158.0                    |

## **Chalcone**

| <b>AA</b> | <b>SAPT</b> | <b>dHF</b> |
|-----------|-------------|------------|
| Phe       | 30.1        | 22.9       |
| Met       | 61.1        | 28.1       |
| Ala       | 43.4        | 16.4       |
| Ile       | 66.4        | 22.8       |
| Gln       | 54.3        | 20.8       |
| Lys       | 70.6        | 21.8       |
| Glu       | 153.7       | 51.5       |

| <b>MP2</b> | <b>MP2<br/>(ghost)</b> | <b>SCS-MP2 (ghost)</b> | <b>SAPT+dHF</b> | <b>AA</b> | <b>Best<br/>estimate</b> |
|------------|------------------------|------------------------|-----------------|-----------|--------------------------|
| 129.7      | 72.4                   | 50.9                   | 52.9            | Phe       | 92.9                     |
| 183.6      | 114.9                  | 85.9                   | 89.3            | Met       | 139.9                    |
| 102.7      | 70.1                   | 55.8                   | 59.8            | Ala       | 84.7                     |
| 180.4      | 111.7                  | 85.7                   | 89.1            | Ile       | 141.2                    |
| 145.3      | 94.8                   | 72.7                   | 75.1            | Gln       | 113.2                    |
| 147.2      | 105.3                  | 87.6                   | 92.3            | Lys       | 125.7                    |
| 267.6      | 220.1                  | 200.4                  | 205.4           | Glu       | 246.5                    |

## EGCG

| <b>AAs</b> | <b>SAPT</b> | <b>dHF</b> |
|------------|-------------|------------|
| Phe        | 39.1        | 14.1       |
| Met        | 31.3        | 21.6       |
| Ala        | 46.5        | 23.5       |
| Ile        | 29.4        | 16.3       |
| Gln        | 49.5        | 23.3       |
| Lys        | 80.9        | 17.2       |
| Glu        | 135.8       | 51.2       |

| <b>MP2</b> | <b>MP2<br/>(ghost)</b> | <b>SCS-MP2<br/>(ghost)</b> | <b>SAPT+dHF</b> | <b>AA</b> |
|------------|------------------------|----------------------------|-----------------|-----------|
| 138.6      | 76.5                   | 52.5                       | 53.2            | Phe       |
| 145.5      | 79.5                   | 52.7                       | 52.9            | Met       |
| 162.5      | 95.2                   | 68.1                       | 70.0            | Ala       |
| 137.7      | 68.1                   | 44.9                       | 45.7            | Ile       |
| 177.7      | 99.5                   | 70.3                       | 72.9            | Gln       |
| 201.1      | 129.7                  | 102.4                      | 98.1            | Lys       |
| 246.8      | 202.6                  | 184.1                      | 186.9           | Glu       |

| <b>AA</b> | <b>Best<br/>estimate</b> |
|-----------|--------------------------|
| Phe       | 95.8                     |
| Met       | 96.6                     |
| Ala       | 117.9                    |
| Ile       | 91.7                     |
| Gln       | 127.9                    |
| Lys       | 155.4                    |
| Glu       | 225.9                    |

### 3) MP2/aug<sup>2</sup>-cc-pVDZ Cartesian coordinates and charges

3o - glu + charge

|   |           |           |           |          |
|---|-----------|-----------|-----------|----------|
| C | 2.622352  | -2.349424 | -0.926890 | 0.36406  |
| C | 3.891544  | -2.404550 | -0.285032 | -0.34359 |
| C | 4.484172  | -1.236857 | 0.194909  | 0.35731  |
| C | 1.968930  | -1.123709 | -1.135701 | -0.38585 |
| C | 2.564727  | 0.021586  | -0.609151 | 0.35722  |
| C | 3.809052  | 0.016394  | 0.060483  | -0.28575 |
| O | 1.834971  | 1.172523  | -0.739310 | -0.40444 |
| C | 2.212127  | 2.332271  | -0.120274 | 0.29199  |
| C | 3.447079  | 2.408098  | 0.500897  | 0.14677  |
| C | 4.314711  | 1.247535  | 0.609326  | 0.41644  |
| C | 1.139114  | 3.329820  | -0.182310 | -0.11116 |
| C | 1.345875  | 4.703092  | 0.080406  | -0.18717 |
| C | -0.163179 | 2.855834  | -0.499652 | -0.25049 |
| C | -1.026938 | 5.130128  | -0.285347 | 0.26153  |
| O | 5.425869  | 1.369826  | 1.225571  | -0.69620 |
| O | 2.048616  | -3.514367 | -1.311672 | -0.67062 |
| O | 5.698574  | -1.290036 | 0.824329  | -0.66105 |
| O | 3.900249  | 3.545050  | 1.115184  | -0.66170 |
| H | 4.387662  | -3.368928 | -0.142671 | 0.22278  |
| H | 0.987217  | -1.052211 | -1.621041 | 0.28703  |
| H | 2.343423  | 5.071363  | 0.327383  | 0.23270  |
| H | -0.319408 | 1.796548  | -0.710200 | 0.25598  |
| H | 1.072041  | -3.323530 | -1.481278 | 0.51860  |
| H | 5.894950  | -0.363515 | 1.107858  | 0.50288  |
| H | 4.757384  | 3.253685  | 1.497769  | 0.49743  |
| C | 0.258433  | 5.594736  | 0.020678  | -0.26062 |
| O | -2.089427 | 6.002020  | -0.332312 | -0.65256 |
| C | -1.235848 | 3.751398  | -0.538776 | 0.22672  |
| O | -2.537949 | 3.417016  | -0.815817 | -0.49761 |
| H | 0.396367  | 6.662878  | 0.217261  | 0.21319  |
| H | -2.871638 | 5.455532  | -0.527687 | 0.48979  |
| C | -2.813889 | 1.992511  | -0.893494 | -0.27884 |
| H | -2.258618 | 1.526539  | -1.723224 | 0.20250  |
| H | -2.559602 | 1.499463  | 0.058744  | 0.21799  |
| H | -3.894209 | 1.924543  | -1.076402 | 0.18384  |
| C | -2.408709 | -4.273592 | 1.944349  | -0.40152 |
| H | -2.076260 | -5.320516 | 1.856785  | 0.18799  |
| H | -3.335960 | -4.260638 | 2.542820  | 0.17398  |
| H | -1.633648 | -3.705108 | 2.496968  | 0.16782  |
| C | -1.319790 | -2.095635 | -1.857816 | 0.76413  |
| C | -2.807297 | -2.451178 | -1.962890 | -0.50337 |
| H | -3.207386 | -2.004042 | -2.888129 | 0.21032  |
| C | -3.612389 | -1.900040 | -0.768572 | -0.35941 |
| C | -3.094675 | -2.342757 | 0.623641  | -0.12917 |

|   |           |           |           |          |
|---|-----------|-----------|-----------|----------|
| C | -2.088272 | -1.314190 | 1.192442  | 0.63592  |
| H | -3.940725 | -2.249268 | 1.329503  | 0.20449  |
| N | -2.697837 | -3.749670 | 0.607222  | -0.63570 |
| H | -3.626157 | -0.797358 | -0.800968 | 0.20731  |
| O | -2.520206 | -0.276736 | 1.739186  | -0.67222 |
| N | -0.762638 | -1.601669 | 1.123539  | -0.60804 |
| C | 0.201810  | -0.635654 | 1.637821  | -0.40389 |
| H | -4.656065 | -2.246209 | -0.867178 | 0.19382  |
| H | -1.887527 | -3.869445 | -0.010561 | 0.38835  |
| H | -0.460655 | -2.278328 | 0.416344  | 0.42928  |
| H | 0.231024  | 0.281627  | 1.026649  | 0.19343  |
| H | -0.084670 | -0.354809 | 2.662569  | 0.20200  |
| H | 1.198361  | -1.100093 | 1.642676  | 0.20196  |
| O | -0.546401 | -3.046316 | -1.421205 | -0.83967 |
| O | -0.971528 | -0.917906 | -2.131682 | -0.71506 |
| H | -2.927130 | -3.543732 | -2.016068 | 0.20814  |

4 o - glu + charge

|   |                          |                          |           |          |
|---|--------------------------|--------------------------|-----------|----------|
| C | 2.285355                 | -2.193745                | -1.939839 | 0.37383  |
| C | 3.582237                 | -2.399573                | -1.389186 | -0.34263 |
| C | 4.159145                 | -1.432189                | -0.572499 | 0.35593  |
| C | 1.581070                 | -0.993094                | -1.711336 | -0.38189 |
| C | 2.165308                 | -0.051504                | -0.862854 | 0.35783  |
| C | 3.441609                 | -0.231745                | -0.273920 | -0.28512 |
| O | 1.414784                 | 1.070005                 | -0.595943 | -0.40331 |
| C | 1.853426                 | 2.035675                 | 0.270274  | 0.28229  |
| C | <a href="#">3.100940</a> | 1.918548                 | 0.860425  | 0.15593  |
| C | 3.958273                 | 0.775057                 | 0.606785  | 0.41410  |
| C | 0.861106                 | <a href="#">3.103376</a> | 0.452472  | -0.09527 |
| C | 1.153461                 | 4.278219                 | 1.185003  | -0.19484 |
| C | -0.426418                | 2.943219                 | -0.124626 | -0.21752 |
| C | -1.094809                | 5.113825                 | 0.769953  | 0.21504  |
| O | 5.092962                 | 0.731429                 | 1.193050  | -0.69806 |
| O | 1.753007                 | -3.191092                | -2.671126 | -0.67131 |
| O | 5.399687                 | -1.637303                | -0.032758 | -0.66099 |
| O | 3.617670                 | 2.839037                 | 1.732377  | -0.66529 |
| H | 4.109318                 | -3.336894                | -1.588903 | 0.22407  |
| H | 0.599224                 | -0.816481                | -2.168992 | 0.28575  |
| H | 2.137427                 | 4.416505                 | 1.632848  | 0.24034  |
| H | -0.685496                | 2.046728                 | -0.694806 | 0.25439  |
| H | 0.730128                 | -3.086225                | -2.649792 | 0.51190  |
| H | 5.584593                 | -0.844104                | 0.528118  | 0.50240  |
| H | 4.485765                 | 2.435733                 | 1.964929  | 0.50043  |
| C | 0.175904                 | 5.278984                 | 1.342008  | -0.28756 |
| O | -2.146708                | 6.011002                 | 0.846155  | -0.48764 |
| C | -1.391200                | 3.940457                 | 0.034387  | 0.25594  |
| O | -2.632137                | 3.776441                 | -0.526760 | -0.63968 |
| H | 0.423591                 | 6.177956                 | 1.911954  | 0.20917  |
| H | -3.156661                | 4.558182                 | -0.286055 | 0.48305  |

C -1.901026 7.197674 1.606910 -0.24912  
H -2.833888 7.775092 1.568506 0.19003  
H -1.079579 7.785309 1.163035 0.17265  
H -1.657850 6.948504 2.653697 0.17495  
C -2.129243 -5.351144 0.723432 -0.40185  
H -1.903153 -6.308718 0.226883 0.18557  
H -2.941242 -5.525835 1.450294 0.17536  
H -1.229169 -5.029612 1.287854 0.16490  
C -1.572293 -2.111498 -2.553854 0.76287  
C -3.050340 -2.342177 -2.224735 -0.50123  
H -3.636570 -1.647183 -2.846920 0.21087  
C -3.427567 -2.083410 -0.748674 -0.36586  
C -2.850862 -3.070919 0.308096 -0.12602  
C -1.696346 -2.441325 1.116934 0.62700  
H -3.622603 -3.214024 1.085678 0.19881  
N -2.581974 -4.385127 -0.280104 -0.63411  
H -3.150452 -1.050913 -0.470423 0.20857  
O -1.913604 -1.954285 2.246447 -0.66105  
N -0.456016 -2.470458 0.564692 -0.61730  
C 0.676773 -1.925806 1.301514 -0.40224  
H -4.528278 -2.139316 -0.686037 0.19423  
H -1.867758 -4.274126 -1.010603 0.39252  
H -0.361177 -2.755507 -0.416126 0.43360  
H 0.657632 -0.822006 1.328273 0.18576  
H 0.637050 -2.288410 2.340586 0.20108  
H 1.608698 -2.262043 0.824924 0.20331  
O -0.767044 -3.095280 -2.251894 -0.83314  
O -1.224690 -1.019234 -3.061551 -0.69378  
H -3.329985 -3.374655 -2.488179 0.21232

chalc - ala

c 0.11638678328030E+01 -.46820176108595E+01 -.68955459993734E+00  
c 0.25491947602138E+01 -.45950326657935E+01 -.52523239534981E+00  
c 0.31197113285524E+01 -.33731251403505E+01 -.12421682552131E+00  
c 0.23107474877168E+01 -.22281477455404E+01 0.16430848887755E+00  
c 0.90587233182136E+00 -.23597048902694E+01 -.48889104084305E-01  
c 0.33603221127909E+00 -.35679264459158E+01 -.46576629713809E+00  
c 0.29757315538065E+01 -.98580210005751E+00 0.63591268426255E+00  
c 0.21583031242916E+01 0.10203620299915E+00 0.12005095723255E+01  
c 0.25414451023334E+01 0.14086535466305E+01 0.11140428598663E+01  
c 0.16660901520361E+01 0.25295766013023E+01 0.14667724967669E+01  
c 0.21876894447221E+01 0.38335244119440E+01 0.16372793785912E+01  
c 0.13379481325246E+01 0.49119039741586E+01 0.19402331547288E+01  
c -.46913429008888E-01 0.47070539572859E+01 0.20403942619003E+01  
c -.58171956509835E+00 0.34105165915673E+01 0.18447576990828E+01  
c 0.26601872873637E+00 0.23321308607920E+01 0.15769024041585E+01  
o 0.42271482294633E+01 -.87075916342357E+00 0.55829668994322E+00  
o 0.53251144666282E+00 -.58371566690415E+01 -.10905443503105E+01



o 0.99084675784794E-01 -.12577113987440E+01 0.12948716135331E+00  
o 0.44665063992181E+01 -.33362271681041E+01 -.15388438930279E-01  
h 0.32122228979076E+01 -.54447320175078E+01 -.71786003899818E+00  
h -.74298850398670E+00 -.36575233961713E+01 -.62799632169360E+00  
h 0.11895631798958E+01 -.15977060472167E+00 0.16227925089363E+01  
h 0.35318777135167E+01 0.16385389724605E+01 0.69813228862807E+00  
h 0.32662868881697E+01 0.40006295242669E+01 0.15420843504849E+01  
h -.17592070806721E+00 0.13471802129117E+01 0.14035760500645E+01  
h 0.12008989271155E+01 -.65278716565196E+01 -.12134903884796E+01  
h -.82304634016024E+00 -.14985713770356E+01 -.90867893916244E-01  
h 0.46873688278392E+01 -.23849134094649E+01 0.19340529326017E+00  
o -.19528922047666E+01 0.33198436928577E+01 0.19051431768817E+01  
o -.88257850462480E+00 0.57632643964247E+01 0.22973427066256E+01  
h 0.17309842748043E+01 0.59232833836374E+01 0.20832430579510E+01  
h -.22264080100494E+01 0.24311778138705E+01 0.15839289277801E+01  
h -.17878554437683E+01 0.54057495674046E+01 0.23086235964977E+01  
c -.24208351380621E+01 0.96018715090710E+00 -.15435576905346E+01  
c -.25808013613264E+01 0.22144076304462E+00 -.20678631933622E+00  
o -.25467642835402E+01 0.80268132743211E+00 0.89257881555484E+00  
c -.12622327255084E+01 0.19673287029189E+01 -.14718245487070E+01  
n -.23881304159402E+01 -.26392981376378E-02 -.26651060388754E+01  
h -.33663218310962E+01 0.15251797276815E+01 -.16453854698734E+01  
h -.11686427942459E+01 0.24958624578464E+01 -.24341851179589E+01  
h -.14561061017159E+01 0.27130623567684E+01 -.68830758842105E+00  
h -.30640769915075E+00 0.14719813285983E+01 -.12419770835499E+01  
h -.28618035025475E+01 0.41679284606559E+00 -.34649138585509E+01  
n -.27705517330772E+01 -.11291078627448E+01 -.30301172626665E+00  
c -.32171457430837E+01 -.18905080937960E+01 0.86713668837872E+00  
h -.32088566151823E+01 -.29601100571004E+01 0.61519678471579E+00  
h -.25302538937044E+01 -.17048907106692E+01 0.17046648711015E+01  
h -.42316818058985E+01 -.15918263811573E+01 0.11758895037819E+01  
c -.10429778812895E+01 -.43973921379755E+00 -.30860506135525E+01  
h -.30017107311208E+01 -.14281488116448E+01 -.12538462649636E+01  
h -.11566525220425E+01 -.11850961376179E+01 -.38877925766869E+01  
h -.40098318425956E+00 0.37944124089189E+00 -.34564112722929E+01  
h -.52392297889266E+00 -.91996158648230E+00 -.22436726485703E+01

chalc - gln

c 0.76535606009816E+00 -.28845057578630E+01 -.24888408502257E+01  
c 0.20447098118109E+01 -.31062796765366E+01 -.19630472289908E+01  
c 0.27044285890385E+01 -.20593590182121E+01 -.12868401975017E+01  
c 0.20796849900329E+01 -.79028435331302E+00 -.10893909646933E+01  
c 0.81625902763541E+00 -.58753351935114E+00 -.17210087085592E+01  
c 0.14333653294762E+00 -.16265259466744E+01 -.23763106834917E+01  
c 0.27937194003875E+01 0.25193947639708E+00 -.29531141363495E+00  
c 0.20211638321298E+01 0.14094599476758E+01 0.18838351538241E+00  
c 0.25233043940977E+01 0.26763267228723E+01 0.25922343620746E+00  
c 0.16292121358812E+01 0.38303305061175E+01 0.43576788219002E+00

c 0.20420367435112E+01 0.50647993272824E+01 0.98985706484277E+00  
c 0.11310784505830E+01 0.61312991490255E+01 0.11022221906145E+01  
c -.19449561491312E+00 0.59834634094280E+01 0.65867922038279E+00  
c -.60830510868074E+00 0.47577524523402E+01 0.87323962090803E-01  
c 0.29726889108520E+00 0.36998751003081E+01 -.31535560029839E-01  
o 0.40168326339825E+01 0.12099236312736E+00 -.42431655410034E-01  
o 0.45450324944127E-01 -.38584997437740E+01 -.31423622022800E+01  
o 0.27233331875480E+00 0.67167443564110E+00 -.16942816686803E+01  
o 0.39468266410359E+01 -.23181157241046E+01 -.82154924957418E+00  
h 0.25630926951581E+01 -.40646478511884E+01 -.20784245943704E+01  
h -.82646543115655E+00 -.14462859817135E+01 -.28530946223872E+01  
h 0.96192495630657E+00 0.12491500742300E+01 0.39010392402771E+00  
h 0.35916683882293E+01 0.28427172586946E+01 0.70095263939174E-01  
h 0.30699083998764E+01 0.51894832076649E+01 0.13483978811767E+01  
h -.12724166352862E-01 0.27880019154376E+01 -.54591719467136E+00  
h 0.60018986256557E+00 -.46458356520829E+01 -.32439163375019E+01  
h -.62390034858539E+00 0.65930764567543E+00 -.20710646367248E+01  
h 0.42792157419682E+01 -.14520460452049E+01 -.45780430324021E+00  
o -.19167469605793E+01 0.46953328091652E+01 -.34550074667743E+00  
o -.10733405412016E+01 0.70311414748087E+01 0.76085710921341E+00  
h 0.14401865831973E+01 0.70957807595159E+01 0.15183230632174E+01  
h -.20804265625725E+01 0.37914215685026E+01 -.72084251685651E+00  
h -.19045284409862E+01 0.67388799191450E+01 0.34971208862840E+00  
c -.45557263607285E+00 -.27920160273016E+01 0.17011529629066E+01  
c -.17340943012490E+01 -.22218209069351E+01 0.10501899276835E+01  
c -.15139454969335E+01 -.71080140366336E+00 0.84906621557899E+00  
c -.27798340121821E+01 -.20289606251181E-02 0.32806331496716E+00  
c -.25658831203721E+01 0.14931004802052E+01 0.20937308954145E+00  
n -.25969925828157E+01 0.21952682770696E+01 0.13712646116731E+01  
o -.23450609832196E+01 0.20422949136887E+01 -.89627050305109E+00  
n -.22246965091934E+01 -.28616800040831E+01 -.16925841906404E+00  
o -.27882853637913E+00 -.26857994104011E+01 0.29245351223174E+01  
n 0.44580827271865E+00 -.33833261724931E+01 0.86393498575157E+00  
c 0.17334390226367E+01 -.38681208457910E+01 0.13517011791237E+01  
h -.25192811117863E+01 -.23498335642086E+01 0.18182917320245E+01  
h -.12033579640065E+01 -.28359182827990E+00 0.18188730146774E+01  
h -.68045267024807E+00 -.55167513141388E+00 0.14711683831995E+00  
h -.30512553997400E+01 -.37475634732044E+00 -.66906319726073E+00  
h -.36306474083264E+01 -.21175680092705E+00 0.10032182751631E+01  
h -.23863647021764E+01 0.31903054519926E+01 0.13736041835606E+01  
h -.27395041748700E+01 0.17216302776469E+01 0.22540830820885E+01  
h -.15196829580073E+01 -.28266224607278E+01 -.90845929970762E+00  
h 0.33758727465498E+00 -.32654020397161E+01 -.13629648237714E+00  
h 0.24835512710477E+01 -.30640570577900E+01 0.14279426423812E+01  
h 0.15820957125546E+01 -.43071812121105E+01 0.23471550089015E+01  
h 0.21103706962387E+01 -.46444598379386E+01 0.66684839638218E+00  
c -.26486676575036E+01 -.42518312718663E+01 0.52403028032514E-01  
h -.30799706479400E+01 -.46485626706979E+01 -.87821168509156E+00  
h -.18356574429172E+01 -.49228402333567E+01 0.39078598177771E+00

h -.34413571641542E+01 -.42536454660302E+01 0.81848472728398E+00

chalc - glu

c 0.11076059984815E+01 -.36384598725775E+01 -.18212568516807E+01  
c 0.24188160789463E+01 -.37952117862600E+01 -.13513983562514E+01  
c 0.32269136434729E+01 -.26573188475368E+01 -.11887131337420E+01  
c 0.27195968665262E+01 -.13456760027866E+01 -.14443683111339E+01  
c 0.14009157608653E+01 -.12355061567997E+01 -.20014071057859E+01  
c 0.59817326609623E+00 -.23788845417464E+01 -.21687749450625E+01  
c 0.35130243130119E+01 -.19582891166898E+00 -.93448252672747E+00  
c 0.27538338386743E+01 0.98874984830416E+00 -.51681875666655E+00  
c 0.31884634930868E+01 0.19138304261879E+01 0.38928659764612E+00  
c 0.22924281478152E+01 0.29374244247167E+01 0.93749617411631E+00  
c 0.27541660114789E+01 0.38890252064288E+01 0.18780755696957E+01  
c 0.18710293825954E+01 0.48376114953385E+01 0.24295810037194E+01  
c 0.51855599404526E+00 0.48368742041157E+01 0.20563290206935E+01  
c 0.43470780759761E-01 0.38869990956052E+01 0.11170627578735E+01  
c 0.92394615164336E+00 0.29557219316321E+01 0.56266758439243E+00  
o 0.47491505087963E+01 -.31371236654315E+00 -.70592865193057E+00  
o 0.26503661724454E+00 -.47199454887832E+01 -.20057418638788E+01  
o 0.94565283677297E+00 -.23340611244836E-01 -.24007382259634E+01  
o 0.44921045021788E+01 -.28552109444000E+01 -.72871689882673E+00  
h 0.28362883859288E+01 -.47791429166712E+01 -.11111012688143E+01  
h -.40221140717962E+00 -.22877699695922E+01 -.26016318818297E+01  
h 0.17336216160700E+01 0.10390980288402E+01 -.88467307278375E+00  
h 0.42195016245633E+01 0.18656993727342E+01 0.76701834883151E+00  
h 0.38074326330631E+01 0.38837787310431E+01 0.21819808980495E+01  
h 0.50774050269691E+00 0.22474989155107E+01 -.15645444160993E+00  
h 0.73486458356886E+00 -.55157781887360E+01 -.17162661249611E+01  
h -.74634987426271E-01 0.67652002949708E-02 -.23111873475313E+01  
h 0.48954931152810E+01 -.19429678956922E+01 -.68968083549920E+00  
o -.12916952742173E+01 0.39529857957203E+01 0.82210940441914E+00  
o -.35816005212784E+00 0.57474906488880E+01 0.25990418160289E+01  
h 0.22151676192393E+01 0.55771901090668E+01 0.31600129239794E+01  
h -.15189526242703E+01 0.32145855119144E+01 0.19047918787223E+00  
h -.12264375269001E+01 0.55345882297519E+01 0.22111068787604E+01  
c -.27839801100169E+01 -.34187228976476E+01 -.13025242202799E+00  
h -.27526914270006E+01 -.40084429619266E+01 -.10600196733496E+01  
h -.34995093474798E+01 -.38995687157352E+01 0.55904539475933E+00  
h -.17778205670345E+01 -.34544943662925E+01 0.33390245202437E+00  
c -.21268862058740E+01 0.89729430520472E+00 -.13100468917286E+01  
c -.36147129792717E+01 0.74554871934373E+00 -.99406828519594E+00  
h -.40844529409647E+01 0.17404037839794E+01 -.10679662420758E+01  
c -.38956997483508E+01 0.18790957532572E+00 0.41896077140846E+00  
c -.32604263285858E+01 -.11919938498965E+01 0.74053108502256E+00  
c -.19299633223920E+01 -.99749024454813E+00 0.15021378768027E+01  
h -.38976210764792E+01 -.16743191329878E+01 0.15039462198057E+01  
n -.32553658123294E+01 -.20633683799080E+01 -.43411453144902E+00  
h -.35665074224505E+01 0.91125497484270E+00 0.11848745646878E+01

o -.19478115724416E+01 -.84070206530399E+00 0.27391835847771E+01  
n -.78148349632960E+00 -.10155146559952E+01 0.77911673985033E+00  
c 0.50502465625511E+00 -.77199376911803E+00 0.14190674253063E+01  
h -.49907058139974E+01 0.89548569586326E-01 0.51720191445808E+00  
h -.26809657544516E+01 -.16445216031454E+01 -.11726157019771E+01  
h -.84617477105177E+00 -.99691221096383E+00 -.23736435166995E+00  
h 0.69252966139764E+00 0.30600471173158E+00 0.15641600006820E+01  
h 0.50249847083524E+00 -.12600694332597E+01 0.24045970370122E+01  
h 0.12994761405348E+01 -.12003230417376E+01 0.79137717124856E+00  
o -.15857813640364E+01 -.75012344187264E-01 -.19669282491562E+01  
o -.15085646556251E+01 0.19217181442383E+01 -.90446664160719E+00  
h -.40733066136418E+01 0.82604213345541E-01 -.17431668130069E+01

chalc - ile

c 0.76763319196151E+00 -.42364119635815E+01 0.21882834616024E-01  
c 0.20186374940644E+01 -.41632546525830E+01 0.64151629425319E+00  
c 0.28777213819551E+01 -.30905597638392E+01 0.33898884648392E+00  
c 0.24882538442663E+01 -.20499976043790E+01 -.56756665131189E+00  
c 0.12009546843328E+01 -.21756851893332E+01 -.11855286546026E+01  
c 0.36032977484793E+00 -.32593063892185E+01 -.90224891368484E+00  
c 0.33800783694360E+01 -.86343696233315E+00 -.68867060859146E+00  
c 0.28403046601832E+01 0.35067199081230E+00 -.13356855319416E+01  
c 0.27579743733702E+01 0.15140350480256E+01 -.62520079104528E+00  
c 0.17837522069398E+01 0.25599487566076E+01 -.96548783435731E+00  
c 0.18637154556195E+01 0.38782099921828E+01 -.46034943386956E+00  
c 0.83937805863894E+00 0.48059359793087E+01 -.72566199768258E+00  
c -.29283176490818E+00 0.44214619781189E+01 -.14643919740389E+01  
c -.38853990337825E+00 0.30979873198472E+01 -.19498045716215E+01  
c 0.64369460058075E+00 0.21887285425056E+01 -.17188296149754E+01  
o 0.44982722595975E+01 -.83679216082343E+00 -.11431875418018E+00  
o -.12643836498433E+00 -.52543700538284E+01 0.26830806157439E+00  
o 0.79012117766169E+00 -.12397865335133E+01 -.21010009973503E+01  
o 0.40674598401912E+01 -.30737952681601E+01 0.98123147847854E+00  
h 0.23586795562493E+01 -.49172762908631E+01 0.13591944774271E+01  
h -.59474882297506E+00 -.33682084840885E+01 -.14250060610262E+01  
h 0.22975253616643E+01 0.24012754632807E+00 -.22713296438585E+01  
h 0.33189697256978E+01 0.16123135592295E+01 0.31353605640281E+00  
h 0.27301649702827E+01 0.41817589967036E+01 0.13761214267130E+00  
h 0.52449551393505E+00 0.11625947132699E+01 -.20718816014345E+01  
h 0.28582642243029E+00 -.58874294448757E+01 0.87546368895561E+00  
h -.17981124824683E+00 -.10687040658423E+01 -.20230967673256E+01  
h 0.45183766692336E+01 -.22338311626507E+01 0.68085901959603E+00  
o -.15505858327575E+01 0.27623739603047E+01 -.26162602345964E+01  
o -.13095180145938E+01 0.53197365706186E+01 -.16793634178660E+01  
h 0.89231285686865E+00 0.58318736166542E+01 -.34770425783454E+00  
h -.16178134657082E+01 0.17825840251928E+01 -.26117292877823E+01  
h -.19773217558441E+01 0.48648393195625E+01 -.22204472319965E+01  
c -.33552793484083E+01 -.19941135678875E+01 0.15074057622388E+01  
h -.40564373881167E+01 -.20586735807751E+01 0.23536403547612E+01

h -.27393747717281E+01 -.29141613988743E+01 0.14751785344867E+01  
h -.39451005040613E+01 -.19460735655113E+01 0.57742358085328E+00  
c -.15557424389134E+01 -.67035466138643E+00 0.54489048611678E+00  
c -.21786644858727E+01 0.43504843347664E-01 -.65717041474980E+00  
c -.24981311217877E+00 0.33260998128757E-01 0.99420234365364E+00  
c -.50085438191897E+00 0.14623027039362E+01 0.14954870607780E+01  
c 0.46911350387652E+00 -.85476541100344E+00 0.20308719921316E+01  
c 0.18426719151037E+01 -.33134577653339E+00 0.24677062383160E+01  
n -.25461561983065E+01 -.76922471062186E+00 0.16283389896591E+01  
h -.12687952466288E+01 -.16777639961047E+01 0.17844610077988E+00  
h 0.39444783915929E+00 0.90616512585270E-01 0.98576388653283E-01  
h 0.45313964919390E+00 0.19736670697786E+01 0.16961085800451E+01  
h -.15979201275441E+00 -.96465396009540E+00 0.29359814877607E+01  
h 0.58289246291728E+00 -.18670149476313E+01 0.16021393565082E+01  
h 0.23450503965190E+01 -.10680600922422E+01 0.31152698191749E+01  
h 0.24934967661686E+01 -.15385468786948E+00 0.15991786046356E+01  
h 0.17588839784713E+01 0.61062770316179E+00 0.30329623866889E+01  
h -.20581864408073E+01 -.78340532562670E+00 0.25233483057764E+01  
o -.16589446461338E+01 -.22818725290683E-01 -.18061382535469E+01  
n -.33020924728322E+01 0.72458375798340E+00 -.38790147270652E+00  
c -.41222209478866E+01 0.14001009547485E+01 -.13860501195999E+01  
h -.35785631353185E+01 0.66750459104978E+00 0.59559550439262E+00  
h -.39427698281064E+01 0.93424394263515E+00 -.23654637902185E+01  
h -.51812350441999E+01 0.12791668364678E+01 -.11163687748223E+01  
h -.38775195547521E+01 0.24703241178610E+01 -.14497346198984E+01  
h -.10345864181209E+01 0.20661184524474E+01 0.74285511343787E+00  
h -.10945914109759E+01 0.14639259979629E+01 0.24261923872088E+01

chalc - lys

c -.25649712152448E+01 -.41242444603632E+01 -.19008517442859E+01  
c -.11925617002467E+01 -.39467296412830E+01 -.21172483838671E+01  
c -.66912224643978E+00 -.26490005730032E+01 -.21490583362522E+01  
c -.14957622982552E+01 -.14960065463371E+01 -.19305429647131E+01  
c -.28964740584605E+01 -.17300820255490E+01 -.17467874541037E+01  
c -.34219518472773E+01 -.30196706830967E+01 -.17234028437952E+01  
c -.87874245994455E+00 -.17469661041813E+00 -.18885599056017E+01  
c -.15601550027173E+01 0.99260127182049E+00 -.13134491769059E+01  
c -.11131667674639E+01 0.22538554515053E+01 -.16113880254896E+01  
c -.15416657081092E+01 0.35011136422439E+01 -.99771145487275E+00  
c -.94212925634515E+00 0.47111859713952E+01 -.14299808654162E+01  
c -.12747718840596E+01 0.59373472128442E+01 -.83677891079723E+00  
c -.22216642220855E+01 0.59767738075931E+01 0.19940402858434E+00  
c -.28388747691159E+01 0.47726481530502E+01 0.63048854666479E+00  
c -.25018165770573E+01 0.35483994480144E+01 0.49270949013452E-01  
o 0.33286614608560E+00 -.22376365285332E-01 -.22752241341264E+01  
o -.31605487810350E+01 -.53495071056424E+01 -.18651649488321E+01  
o -.37223209235707E+01 -.63592122506894E+00 -.16222608046314E+01  
o 0.66833927708861E+00 -.25378697977500E+01 -.23624708783136E+01  
h -.51794819183786E+00 -.47922697446240E+01 -.22847381445659E+01

h -.44945130167756E+01 -.31955969769142E+01 -.15915323596917E+01  
h -.24022318149290E+01 0.82604114270607E+00 -.64069835192829E+00  
h -.33704554441310E+00 0.23400132432433E+01 -.23861960688903E+01  
h -.21596291861753E+00 0.46857349513785E+01 -.22506203268432E+01  
h -.29942724653573E+01 0.26338222152514E+01 0.40128910969601E+00  
h -.24977580914227E+01 -.60402221635701E+01 -.20212343173364E+01  
h -.46400912059017E+01 -.95114247550873E+00 -.15984920371657E+01  
h 0.84006953068524E+00 -.15652656993762E+01 -.24753244717036E+01  
o -.37532730652350E+01 0.49407605104364E+01 0.16462595199098E+01  
o -.25400802411090E+01 0.71676576475819E+01 0.77210985253531E+00  
h -.82034554558801E+00 0.68759932396058E+01 -.11672949735947E+01  
h -.42046632329814E+01 0.41045929369131E+01 0.18340377638910E+01  
h -.32282170019359E+01 0.70128395836142E+01 0.14426824722681E+01  
c 0.14333036081100E+01 -.21340324363919E+01 0.15646446585016E+01  
c 0.51737111172399E+00 -.93336846946827E+00 0.13171470558398E+01  
n 0.10300236318592E+01 -.32322452121804E+01 0.68063160496959E+00  
c 0.84762354855200E+00 0.29678050104010E+00 0.21873520527824E+01  
c 0.41725174445917E+00 0.16244543329002E+01 0.15348366240236E+01  
c 0.14626071806740E+01 0.22383165846371E+01 0.59975462266291E+00  
n 0.19528830652817E+01 0.13005020410226E+01 -.47019902709174E+00  
h 0.13228671726739E+01 -.24870271794581E+01 0.26085773278774E+01  
h 0.58097107798636E+00 -.69566937753360E+00 0.24235657813032E+00  
h -.52228742534171E+00 -.12579818519651E+01 0.14888773690198E+01  
h 0.11688892065225E+01 -.29478066679859E+01 -.29403074027548E+00  
h 0.34395637878695E+00 0.18962408467007E+00 0.31619704552005E+01  
h -.53675144601871E+00 0.14921439953333E+01 0.99910852957914E+00  
h 0.23823559362427E+00 0.23903972683213E+01 0.23089585667774E+01  
h 0.10556142875716E+01 0.31292128320152E+01 0.97272212473200E-01  
h 0.23531995929759E+01 0.25360227317628E+01 0.11755575461502E+01  
h 0.26739547489788E+01 0.17625982044414E+01 -.10342110052831E+01  
h 0.23955079069648E+01 0.42172757096377E+00 -.74588098593454E-01  
h 0.12110535298248E+01 0.98225429103986E+00 -.11389394097364E+01  
h 0.19296859555006E+01 0.34083313229219E+00 0.24126930190331E+01  
c 0.28897664628733E+01 -.17198494997127E+01 0.13251674948468E+01  
n 0.38315812487698E+01 -.23028036882194E+01 0.20883185702956E+01  
c 0.52602753662389E+01 -.20650821252637E+01 0.18691076076519E+01  
h 0.35349981190433E+01 -.29611068035706E+01 0.28005094279891E+01  
h 0.58266437323072E+01 -.26550467494607E+01 0.26008544383803E+01  
h 0.55438241000788E+01 -.23660641493854E+01 0.85021977758912E+00  
h 0.54903185395582E+01 -.99802858107560E+00 0.20000910603447E+01  
o 0.32118424476174E+01 -.91324145654372E+00 0.41210469181341E+00  
c 0.17163296440351E+01 -.45068246075761E+01 0.92361617771644E+00  
h 0.12894550387912E+01 -.52665420389355E+01 0.25139334180940E+00  
h 0.15187499096688E+01 -.48294235096335E+01 0.19595564821169E+01  
h 0.28120820199811E+01 -.44835015014872E+01 0.76276062856705E+00

chalc met

c -.68345961935356E+00 -.40094229265722E+01 0.68511192870556E+00  
c 0.56573471029602E+00 -.44025173237602E+01 0.17436326678250E+00

c 0.17059752751052E+01 -3.6432583047358E+01 0.50177580353369E+00  
c 0.15844329992268E+01 -2.4576831743434E+01 0.12682553412213E+01  
c 0.32330273032746E+00 -2.1378117347294E+01 0.18399891421077E+01  
c -8.1835517412835E+00 -2.8944808984419E+01 0.15369718606011E+01  
c 0.27095560904896E+01 -1.4842786832683E+01 0.12569521952456E+01  
c 0.22725149545653E+01 -9.9469462666952E-01 0.10325004915420E+01  
c 0.29900685598030E+01 0.10629570711749E+01 0.11069006525544E+01  
c 0.23189007229142E+01 0.22951262219894E+01 0.65919472598256E+00  
c 0.24087972618736E+01 0.35262141980751E+01 0.13476726365577E+01  
c 0.15901621069205E+01 0.46066774475290E+01 0.96674097968459E+00  
c 0.68716780552697E+00 0.44756299389202E+01 -1.0280653010992E+00  
c 0.62704211676615E+00 0.32614478220159E+01 -8.2676033778715E+00  
c 0.14481347795487E+01 0.21923735011931E+01 -4.5489035789151E+00  
o 0.39021589327140E+01 -1.8591747275358E+01 0.12270957928344E+01  
o -1.8421484578654E+01 -4.7010015197468E+01 0.40966700729434E+00  
o 0.30596754360197E+00 -1.0863097726506E+01 0.27090867709007E+01  
o 0.29035619459106E+01 -4.40409852312347E+01 -7.4586806991006E-02  
h 0.67776291121037E+00 -5.2957100940490E+01 -4.4971284199810E+00  
h -1.7898492463753E+01 -2.6714327736593E+01 0.19892524415732E+01  
h 0.12281385388270E+01 -1.6377615850333E-02 0.73460840290425E+00  
h 0.40103476791575E+01 0.10802003568416E+01 0.15100447159593E+01  
h 0.30835091942690E+01 0.36282974957184E+01 0.22043861099757E+01  
h 0.14299592064587E+01 0.12793932733925E+01 -1.0544134462590E+01  
h -1.6237890146767E+01 -5.4793245312354E+01 -1.2506852559061E+00  
h -6.1412543970201E+00 -7.5821140861583E+00 0.28603908552743E+01  
h 0.35868965628326E+01 -3.4558374551196E+01 0.39682607778856E+00  
o -2.6122499199312E+00 0.32200092262053E+01 -1.8750588796939E+01  
o -1.1688173504165E+00 0.55298172720345E+01 -4.5349716954442E+00  
h 0.16310135602720E+01 0.55623250356361E+01 0.14991969232703E+01  
h -2.4941935889488E+00 0.23128687869695E+01 -2.2663476145043E+01  
h -6.2494443214298E+00 0.52493665987981E+01 -1.2348917043320E+01  
c -3.2788763606867E+01 -3.7306899946084E+00 -3.1124274984341E+01  
h -4.0602291176880E+01 0.18914540590183E+00 -3.6453222818377E+01  
h -3.6930153590265E+01 -1.3575003644894E+01 -2.8415176159696E+01  
h -2.4229889058010E+01 -5.2448827936890E+00 -3.7990919179666E+01  
c -1.8548725079323E+01 -3.2373044481861E+00 -1.1506342044883E+01  
c -5.2626883374419E+00 -3.7725421566666E+00 -1.9190018071664E+01  
o -1.6607315629732E+00 0.56684686419978E+00 -2.6602042323007E+01  
c -1.5581888168747E+01 0.39999388425673E+00 0.17051817141993E+00  
c -2.7705079187491E+01 0.45668117345357E+00 0.11000142107342E+01  
s -2.2891410699236E+01 0.75658317755232E+00 0.28486362490948E+01  
c -1.1504303413739E+01 0.21724017776292E+01 0.26186672912834E+01  
n -2.9249402529406E+01 0.34455562803908E+00 -1.8780562972747E+01  
h -2.1864084107442E+01 -1.3569222907469E+01 -9.2625661425844E+00  
h -7.3345325790321E+00 -1.3048250769595E+00 0.67019938093518E+00  
h -1.1985976829144E+01 0.14191134594588E+01 -5.3191383562385E-01  
h -3.4873529871312E+01 0.12279192226132E+01 0.78134476014639E+00  
h -3.3021133296862E+01 -5.1081343078253E+00 0.11102249830006E+01  
h -9.0341571378268E+00 0.25403902310508E+01 0.36261518269643E+01

h -.22305532910284E+00 0.18726951947110E+01 0.21058271966231E+01  
h -.16555851853714E+01 0.29741953286731E+01 0.20565387890442E+01  
h -.25912092769691E+01 0.12805197022502E+01 -.21270512074703E+01  
n 0.25026015438138E+00 -.14587375296920E+01 -.16883266608286E+01  
c 0.16051184542238E+01 -.15811077161816E+01 -.22240964647041E+01  
h 0.16144864572037E+01 -.12215582198554E+01 -.32625407561022E+01  
h 0.23230698690024E+01 -.98584450337205E+00 -.16349077871704E+01  
h 0.19035042418302E+01 -.26374780084678E+01 -.21892640333558E+01  
h -.86624080441711E-01 -.21707110017345E+01 -.10423101302394E+01

chalc - phe

c 0.46676841507366E+00 -.32513149121091E+01 0.29142463034517E+01  
c 0.17277259524128E+01 -.35793028700502E+01 0.24012255514325E+01  
c 0.24894687301505E+01 -.25857190622439E+01 0.17616479622881E+01  
c 0.20162538584553E+01 -.12389435998105E+01 0.16629697794906E+01  
c 0.71563637509765E+00 -.95406035615826E+00 0.21840329903080E+01  
c -.49988785071655E-01 -.19484060067168E+01 0.28064852864425E+01  
c 0.28450082222092E+01 -.23854959712974E+00 0.95139668043594E+00  
c 0.24696839508078E+01 0.11901671238644E+01 0.10154366977484E+01  
c 0.25430510381943E+01 0.19712858718554E+01 -.99233128400127E-01  
c 0.20088926458208E+01 0.33300365370470E+01 -.21227153075805E+00  
c 0.22256835424464E+01 0.40696047660805E+01 -.13975099039533E+01  
c 0.16894812147104E+01 0.53574618720509E+01 -.15585593129425E+01  
c 0.91613952868924E+00 0.59265478442707E+01 -.53589363743292E+00  
c 0.68759171838835E+00 0.51913034140306E+01 0.65014286458603E+00  
c 0.12212198919195E+01 0.39106365336060E+01 0.81492765421563E+00  
o 0.38425615351726E+01 -.59875951221509E+00 0.27363501353364E+00  
o -.34463224894096E+00 -.41829242366535E+01 0.35236694008083E+01  
o 0.18870214345516E+00 0.30601279180297E+00 0.20341718218568E+01  
o 0.36787864286580E+01 -.29641225372547E+01 0.12377546424852E+01  
h 0.21307206367730E+01 -.45962750784264E+01 0.24543814864912E+01  
h -.10477869479821E+01 -.17193582115581E+01 0.31903486807898E+01  
h 0.20322637373748E+01 0.15588651426349E+01 0.19435446384066E+01  
h 0.29677912882014E+01 0.15282354237886E+01 -.10099594188623E+01  
h 0.28190372543545E+01 0.36247997492438E+01 -.22035634449377E+01  
h 0.10008004165051E+01 0.33525936386841E+01 0.17337389293407E+01  
h 0.13522233513693E+00 -.50234427581331E+01 0.35740107774861E+01  
h -.76996722611189E+00 0.19832819430819E+00 0.17803698984487E+01  
h 0.40070549210428E+01 -.21722373237411E+01 0.73031124254723E+00  
o -.10968441607470E+00 0.58337406898663E+01 0.15838104860750E+01  
o 0.38071932616653E+00 0.71781197208021E+01 -.69957044400002E+00  
h 0.18549246464835E+01 0.59340932502806E+01 -.24737254057068E+01  
h -.19070711914283E+00 0.52767003445251E+01 0.23718582166489E+01  
h -.10947950185069E+00 0.73948246507030E+01 0.11144093627228E+00  
c -.18454820747609E+01 0.25794356709889E+01 -.72613042347768E+00  
h -.14265634369708E+01 0.35604237691186E+01 -.45227264602973E+00  
h -.26089431566221E+01 0.22939875732319E+01 0.24880983544801E-01  
h -.23408051037335E+01 0.26843776398637E+01 -.17056431698131E+01  
c -.29758949263339E+00 -.20543517984205E+01 -.16576083556491E+01



c -.33649734180626E+00 -.30053931531123E+01 -.61529818081652E+00  
c -.81306801885047E+00 -.43079280500756E+01 -.85308576052282E+00  
c -.12581682907131E+01 -.46754368208982E+01 -.21379867345914E+01  
c -.12012497482490E+01 -.37392859860461E+01 -.31903627718678E+01  
c -.71995890401759E+00 -.24377375542541E+01 -.29498185011850E+01  
h -.16115660660842E-02 -.27201549322669E+01 0.38595301591599E+00  
h -.83786398295523E+00 -.50341683953955E+01 -.33204621416396E-01  
h -.15232340924525E+01 -.40257664223325E+01 -.41973570855161E+01  
c 0.78783630420863E-01 -.62314243159264E+00 -.13653224345289E+01  
c -.11731650218514E+01 0.28102141591242E+00 -.12208297116728E+01  
n -.74416547065960E+00 0.16191124383526E+01 -.85383276083044E+00  
h -.16724327422009E+01 0.34407105001733E+00 -.22085186188239E+01  
h -.20974632589626E+00 0.15700208913081E+01 0.17051584314330E-01  
h 0.65324333815545E+00 -.56842178835195E+00 -.42734243849347E+00  
h 0.69993632268661E+00 -.19192207121411E+00 -.21680480768184E+01  
c -.21721626254504E+01 -.37736366087169E+00 -.24985568698537E+00  
o -.21544580672143E+01 -.18768994233020E+00 0.98836851845756E+00  
n -.30929412038111E+01 -.11981056706381E+01 -.80885616804434E+00  
c -.38957221425339E+01 -.20833870182149E+01 0.33792864129727E-01  
h -.66837138615887E+00 -.17130698017680E+01 -.37726521779365E+01  
h -.29411442844908E+01 -.14645206174184E+01 -.17778357262419E+01  
h -.45745642224812E+01 -.26568760742999E+01 -.61162758195396E+00  
h -.32478312628820E+01 -.27749101132786E+01 0.59770174983469E+00  
h -.44818352924331E+01 -.14848624383437E+01 0.74449431719536E+00  
h -.16313315418940E+01 -.56878972049144E+01 -.23240251147733E+01

dglu - ala

c 0.15454707851505E+01 -.65810152883851E+01 0.99871883858206E+00  
c 0.29075361980953E+01 -.64477665065249E+01 0.66186999117253E+00  
c 0.34910186207460E+01 -.51785480693129E+01 0.63426466739891E+00  
c 0.74754558091647E+00 -.54703216999475E+01 0.13114598379973E+01  
c 0.13495130990010E+01 -.42050652068792E+01 0.12756554193239E+01  
c 0.27081223152134E+01 -.40216023013181E+01 0.94190556020107E+00  
o 0.54066617013978E+00 -.31411117987629E+01 0.16112018471480E+01  
c 0.10378708056143E+01 -.18688702618375E+01 0.15650353533436E+01  
c 0.23494472055312E+01 -.16082032914784E+01 0.12044144753325E+01  
c 0.32869589916616E+01 -.26850407881413E+01 0.91198443605398E+00  
c 0.31279545517950E-01 -.85215029948608E+00 0.18796317247827E+01  
c 0.36130900738394E+00 0.26693225030062E+00 0.26794294648311E+01  
o 0.44993958711563E+01 -.24708954090135E+01 0.63540626189154E+00  
o 0.10509998063675E+01 -.78631087470565E+01 0.10048319688696E+01  
o 0.48002531190856E+01 -.50586055955390E+01 0.30973012723401E+00  
h 0.35039034690383E+01 -.73326700605888E+01 0.42552514231726E+00  
h -.30815096286313E+00 -.55636080921151E+01 0.15842012920994E+01  
h 0.11546031602980E+00 -.78394063832263E+01 0.12557770179930E+01  
h 0.50064971607369E+01 -.40877146619249E+01 0.36022116994223E+00  
c -.52182205971173E+00 0.13529290640618E+01 0.27854190986127E+01  
c -.18055156550548E+01 0.12851263518867E+01 0.21792616789732E+01  
c -.21662783464143E+01 0.11540726032708E+00 0.14739960350310E+01

c -.12520502399078E+01 -.93511166576771E+00 0.12983575304335E+01  
o -.20913559767743E+00 0.25119829422337E+01 0.34508956582169E+01  
o -.26247981021118E+01 0.23537835575238E+01 0.23337939654305E+01  
h 0.13124308230435E+01 0.28853449644921E+00 0.32242531099753E+01  
h -.31719170520242E+01 0.57925952653587E-01 0.10478194337210E+01  
h -.15181820310024E+01 -.18008656488142E+01 0.68517685498001E+00  
h 0.75909662694672E+00 0.25728360043483E+01 0.35155375190314E+01  
h -.33572908197030E+01 0.22869984532761E+01 0.16691923364549E+01  
o 0.28004671966944E+01 -.29599638416831E+00 0.11712462953089E+01  
c 0.32380001114677E+01 0.13803779196206E+00 -.15163913528021E+00  
o 0.21666737815496E+01 0.17431232810038E+00 -.10650700511694E+01  
c 0.10962717437794E+01 0.10914051385814E+01 -.70187511577952E+00  
c 0.16194462706197E+01 0.25218439721911E+01 -.51559115141823E+00  
c 0.28082203199423E+01 0.25576977472125E+01 0.45457162848881E+00  
c 0.38650164972139E+01 0.15277252850338E+01 0.36204918044658E-01  
o 0.56223487988459E+00 0.33771615903419E+01 -.74344621715107E-01  
o 0.23597901188991E+01 0.23268456570493E+01 0.18049542383297E+01  
o 0.49817294352305E+01 0.14995293741464E+01 0.90962659698542E+00  
h 0.19525239566693E+01 0.29137999248696E+01 -.14941184836337E+01  
h 0.32535894471214E+01 0.35652226396596E+01 0.46181186493350E+00  
h 0.42580654309318E+01 0.18166373840763E+01 -.95339526060127E+00  
h 0.47859933007526E+00 0.32371550117738E+01 0.88646111566561E+00  
h 0.21612227846301E+01 0.13723242819625E+01 0.18526413004603E+01  
h 0.46452869037915E+01 0.13004129048274E+01 0.17973999445487E+01  
h 0.61289689294398E+00 0.74274286287738E+00 0.22604246261618E+00  
h 0.39644009425757E+01 -.58746985225131E+00 -.54125854572215E+00  
c 0.10759787771458E+00 0.10162188767116E+01 -.18485052978645E+01  
o -.42072606713321E+00 -.30639415063813E+00 -.20279602648510E+01  
h 0.34672935114782E+00 -.89601425175795E+00 -.21010080004874E+01  
h -.74195975219457E+00 0.16716495739441E+01 -.16251711538885E+01  
h 0.59844667910224E+00 0.13678503753582E+01 -.27762211239143E+01  
c -.34103353175115E+01 0.93148264591764E+00 -.17560925857646E+01  
c -.35436145049664E+01 0.21575748334267E+01 -.84014389296078E+00  
o -.42335019527936E+01 0.21089356746262E+01 0.20734055356117E+00  
c -.47051737057820E+01 0.10700414943759E+00 -.17521780062136E+01  
n -.28879829952278E+01 0.13306852573859E+01 -.30752580757373E+01  
h -.26134564721125E+01 0.32194380561449E+00 -.12919549484427E+01  
h -.45813246428831E+01 -.78608761089691E+00 -.23860421289501E+01  
h -.49404401060952E+01 -.21650883727237E+00 -.72824967895281E+00  
h -.55634546936385E+01 0.68930601652461E+00 -.21202603360746E+01  
h -.23450183101137E+01 0.55432576143662E+00 -.34562061654106E+01  
n -.28175832992686E+01 0.32260071870886E+01 -.12167947583774E+01  
c -.27147904768143E+01 0.44636763861271E+01 -.45170498007875E+00  
h -.34574715767693E+01 0.52036557315549E+01 -.79148577111240E+00  
h -.28838439101859E+01 0.42477326971781E+01 0.61067298008255E+00  
h -.17008832379342E+01 0.48680617473762E+01 -.57643339590441E+00  
c -.39138934510496E+01 0.17636996843562E+01 -.40342195749943E+01  
h -.23409694254918E+01 0.31105744155076E+01 -.21113827313356E+01  
h -.34171819761901E+01 0.21039861590767E+01 -.49560182258521E+01

h -.46474056263916E+01 0.98106362462432E+00 -.43018120136545E+01  
h -.44658331023429E+01 0.26194080321056E+01 -.36115462402587E+01

dglu - arg

c -.19840628606481E+01 -.27692785842799E+01 -.82896401741540E+00  
c -.62693921209133E+00 -.28962772987434E+01 -.15426783955246E+01  
o -.34279240025840E+00 -.22755245990340E+01 -.25931775332280E+01  
n -.27286424830034E+01 -.40237125553388E+01 -.10305275026775E+01  
h -.17832951631878E+01 -.26074338846766E+01 0.25189806770328E+00  
h -.21055484990146E+01 -.48124067200110E+01 -.84901390695927E+00  
c -.27854436032729E+01 -.15698094577501E+01 -.13611106776412E+01  
h -.35541746490835E+01 -.12939661015252E+01 -.61965042300648E+00  
h -.20926285380633E+01 -.71048240962195E+00 -.14206227245603E+01  
n 0.22023114372170E+00 -.37751287680986E+01 -.95666300501367E+00  
c 0.14794628227607E+01 -.42182922130782E+01 -.15546007138693E+01  
h 0.11096943168877E-01 -.40489416650345E+01 0.80622310417961E-03  
h 0.23270664604900E+01 -.39128735010499E+01 -.92556478947631E+00  
h 0.14730292851190E+01 -.53130558289202E+01 -.16654756992941E+01  
h 0.15687939615025E+01 -.37594183047215E+01 -.25477748133240E+01  
c -.38905906492283E+01 -.41205435931073E+01 -.13366371453298E+00  
h -.43170502462901E+01 -.51315717884661E+01 -.20953564473042E+00  
h -.36387011804765E+01 -.39157654037375E+01 0.92731303565717E+00  
h -.46673573769271E+01 -.34062997436830E+01 -.44749144809009E+00  
c -.34466688243526E+01 -.18360426279189E+01 -.27299596351285E+01  
c -.33960066967250E+01 -.61411967764189E+00 -.36526496571484E+01  
h -.29488433732695E+01 -.26814223354574E+01 -.32320268518381E+01  
h -.44986653859910E+01 -.21392214086188E+01 -.26025326693841E+01  
h -.39604931419093E+01 -.79483210968054E+00 -.45804625295251E+01  
h -.38269893407995E+01 0.27019854780473E+00 -.31580694872645E+01  
n -.19879910981228E+01 -.33616106123994E+00 -.39922044616380E+01  
c -.12940877498814E+01 0.70808378122567E+00 -.35089315129009E+01  
n 0.34235939421479E-01 0.61672896838709E+00 -.33707855124441E+01  
n -.19123701693962E+01 0.18691756970267E+01 -.31931654190739E+01  
h -.14158859362747E+01 -.11817727818330E+01 -.40532483256520E+01  
h 0.50413638385477E+00 0.14045093920497E+01 -.29232692553377E+01  
h -.13343752539095E+01 0.26227102190047E+01 -.28227854572273E+01  
h -.28044104787956E+01 0.20966109696785E+01 -.36131010535013E+01  
h 0.46143275546220E+00 -.30177157194787E+00 -.32606962799265E+01  
c -.18987395007452E+01 0.59489487943581E+01 0.16366426024451E+01  
c -.15273566547919E+01 0.62040199033976E+01 0.29777351196167E+00  
c -.88557259097644E+00 0.52158273064904E+01 -.44585047127324E+00  
c -.16448266505345E+01 0.47118375345592E+01 0.22499633902713E+01  
c -.99886154453861E+00 0.37311065146188E+01 0.14894556072963E+01  
c -.60310494857424E+00 0.39395043066351E+01 0.14521823598707E+00  
o -.79557938765335E+00 0.25196982179781E+01 0.21074201725714E+01  
c -.12475087902471E+00 0.15296052041722E+01 0.14642892767515E+01  
c 0.33585906745970E+00 0.16759781759870E+01 0.16349711669276E+00  
c 0.55563219085324E-01 0.28828719815804E+01 -.58654438451925E+00  
c 0.39192966204855E-01 0.33375876371368E+00 0.22993844950678E+01

c -.19448802278462E+00 -.95148570779672E+00 0.17539695761881E+01  
o 0.37975801451772E+00 0.30066346604476E+01 -.18205675199689E+01  
o -.25137009946521E+01 0.69799595463419E+01 0.22845535065737E+01  
o -.53187645756167E+00 0.54861073387728E+01 -.17280609529362E+01  
h -.17365128448778E+01 0.71786906051839E+01 -.15084196704145E+00  
h -.19348759432887E+01 0.44971490170289E+01 0.32827845546890E+01  
h -.27168454827129E+01 0.67228721518414E+01 0.31972352713660E+01  
h -.55840899259386E-01 0.46888205290227E+01 -.20615906960026E+01  
c 0.12435666892918E-02 -.20850518850989E+01 0.25558307785441E+01  
c 0.43483063045786E+00 -.19370278091927E+01 0.38940675954576E+01  
c 0.65440684079086E+00 -.65977972794085E+00 0.44348126761778E+01  
c 0.44608563185813E+00 0.48183297533518E+00 0.36442584643214E+01  
o -.24272598654586E+00 -.33436453870997E+01 0.20573671835472E+01  
o 0.60011947127410E+00 -.31248498660084E+01 0.45684427614591E+01  
h -.53757884081395E+00 -.10591720699201E+01 0.72225354037743E+00  
h 0.99648343619163E+00 -.55833511678089E+00 0.54711770160581E+01  
h 0.64999564057547E+00 0.14788717880636E+01 0.40432191467595E+01  
h -.82994543056246E-01 -.39745329731944E+01 0.27833804343402E+01  
h 0.86448526065265E+00 -.29597552453581E+01 0.54863430902812E+01  
o 0.10492237947192E+01 0.64193141882268E+00 -.42020583655754E+00  
c 0.24018529812991E+01 0.10686575389881E+01 -.81095548597326E+00  
o 0.30564114389541E+01 0.17162696063591E+01 0.24354500245328E+00  
c 0.32489412563446E+01 0.86388832304627E+00 0.14069526932473E+01  
c 0.41634923941666E+01 -.30591441649263E+00 0.10449584882009E+01  
c 0.35322589200856E+01 -.11004202296264E+01 -.11046520240321E+00  
c 0.31421429170596E+01 -.19117072184759E+00 -.12797933666369E+01  
o 0.43696975612854E+01 -.11520338723261E+01 0.21744703833945E+01  
o 0.23948891299427E+01 -.18516362162077E+01 0.36562242937346E+00  
o 0.23979240293234E+01 -.89040145186602E+00 -.22741337412220E+01  
h 0.51513609748844E+01 0.77190727509627E-01 0.73395071251272E+00  
h 0.42412134268885E+01 -.18665670826532E+01 -.46397870445781E+00  
h 0.40667232566512E+01 0.16792882006871E+00 -.17640369513466E+01  
h 0.36281742121310E+01 -.17819965920775E+01 0.21749964819562E+01  
h 0.16929744259790E+01 -.12188290249022E+01 0.60773957822597E+00  
h 0.17873261517624E+01 -.14874056204628E+01 -.18065312355338E+01  
h 0.22725808250034E+01 0.47197946588049E+00 0.17349503643966E+01  
h 0.23201680951202E+01 0.18123964978257E+01 -.16160607525267E+01  
c 0.37672373395873E+01 0.17759894794040E+01 0.25025264552591E+01  
o 0.27774528658681E+01 0.27606577039295E+01 0.28413357624608E+01  
h 0.27045326891228E+01 0.33545898514441E+01 0.20790581823774E+01  
h 0.39516493109590E+01 0.11829883740215E+01 0.34090021469828E+01  
h 0.47145090449682E+01 0.22495563140639E+01 0.21875543732425E+01

dglu - asn

n 0.19664076024488E+00 -.84815426867159E+00 0.36789025763431E+01  
h 0.11341092918645E+01 -.11956983546306E+01 0.35033015905151E+01  
h 0.12968344013236E-01 0.14723716937274E+00 0.35498758555506E+01  
c -.14201709792658E+01 -.41667886602046E+01 0.35764064497876E+01  
c -.14517409457856E+01 -.40130211561534E+01 0.20416059105537E+01

o -.65719205667095E+00 -.46739745310603E+01 0.13221382798344E+01  
c -.44710965204829E+00 -.31404868330685E+01 0.41856467732570E+01  
n -.26977661455733E+01 -.41351194448183E+01 0.42763751415445E+01  
h -.98113692505804E+00 -.51699212649547E+01 0.37238049407721E+01  
n -.23614366913347E+01 -.31703214840364E+01 0.15195305028536E+01  
h -.47546950959065E+00 -.32690948611044E+01 0.52816331556383E+01  
h 0.57877696646580E+00 -.33365814140413E+01 0.38406284529435E+01  
h -.30756487033586E+01 -.31862349613509E+01 0.42685954162066E+01  
c -.25338614679970E+01 -.30183661085303E+01 0.77436159912385E-01  
h -.28342000531523E+01 -.25329246062808E+01 0.21573146996962E+01  
h -.35320072773880E+01 -.26001251230175E+01 -.10988629114197E+00  
h -.17777574669211E+01 -.23437941987913E+01 -.34573103776367E+00  
h -.24521231642420E+01 -.40110647800993E+01 -.38854427794502E+00  
c -.83743758413198E+00 -.16983927334583E+01 0.38929327921477E+01  
o -.20281652520309E+01 -.13199203545149E+01 0.38957290838549E+01  
c -.36578800121464E+01 -.51270474577225E+01 0.37888376559492E+01  
h -.45869838370182E+01 -.50443729945914E+01 0.43731697751208E+01  
h -.39094670194307E+01 -.50308256922108E+01 0.27131039825281E+01  
h -.32426562306012E+01 -.61350129820224E+01 0.39536573001613E+01  
c 0.14887492444834E+01 0.13163763710754E+01 -.71895484194905E+01  
c 0.15248560398494E+01 0.27213358359814E+01 -.70713257990842E+01  
c 0.15139956004595E+01 0.33061618739834E+01 -.58039305616593E+01  
c 0.14438384766613E+01 0.47799423597675E+00 -.60658479857068E+01  
c 0.14313161377929E+01 0.10805289038717E+01 -.48002979424757E+01  
c 0.14598231467755E+01 0.24845382964097E+01 -.46348294649906E+01  
o 0.14225873835924E+01 0.22230429980590E+00 -.37228419907786E+01  
c 0.13652383842821E+01 0.72482691424227E+00 -.24525085485366E+01  
c 0.13158836651081E+01 0.20894627171289E+01 -.22282674281464E+01  
c 0.14306830473211E+01 0.30547515157574E+01 -.33012857595326E+01  
c 0.14037197704001E+01 -.30375495998756E+00 -.14126355944663E+01  
c 0.20617266596286E+01 -.42671094787150E-01 -.18553956414354E+00  
o 0.14856266120171E+01 0.43031057557027E+01 -.30700162011441E+01  
o 0.15058770691961E+01 0.82348444902836E+00 -.84709230143895E+01  
o 0.15468800276779E+01 0.46569684649461E+01 -.56952333466682E+01  
h 0.15625393722363E+01 0.33465036629081E+01 -.79670176236703E+01  
h 0.14298944865123E+01 -.61306634821661E+00 -.61488990267126E+01  
h 0.14831932846034E+01 -.14471050911719E+00 -.84387891275730E+01  
h 0.15441743673890E+01 0.48579732326628E+01 -.47246878852518E+01  
c 0.21066342248096E+01 -.10220278624401E+01 0.81172720390993E+00  
c 0.14929168444255E+01 -.22836204848014E+01 0.61310851232704E+00  
c 0.86452452463436E+00 -.25457706951469E+01 -.62209902652522E+00  
c 0.81770905944149E+00 -.15705565761851E+01 -.16301463503196E+01  
o 0.27396318725161E+01 -.81585645977046E+00 0.20222916536632E+01  
o 0.15776440887918E+01 -.31919683604959E+01 0.16210306468956E+01  
h 0.25401926624338E+01 0.92537291464237E+00 -.75052843113980E-02  
h 0.40885819046456E+00 -.35295978176912E+01 -.77191908609871E+00  
h 0.32382674510232E+00 -.17881695632869E+01 -.25819990866170E+01  
h 0.31433851128498E+01 0.66711787530344E-01 0.19999509574478E+01  
h 0.90756912597133E+00 -.39025617858070E+01 0.14565763382615E+01

o 0.12619846137901E+01 0.25705331075111E+01 -.94184758071476E+00  
c 0.46390865925009E-01 0.32942565416104E+01 -.67080428084465E+00  
o -.96701975111883E+00 0.24596979241334E+01 -.16991057040142E+00  
c -.64236056979064E+00 0.18122572504736E+01 0.10929015850105E+01  
c -.32973674465592E+00 0.28556673350354E+01 0.21694746879729E+01  
c 0.72880275687571E+00 0.38577599977771E+01 0.17038146851486E+01  
c 0.40569628971372E+00 0.44093176116986E+01 0.31206945343646E+00  
o 0.12038094218760E+00 0.21935194799596E+01 0.33655900646366E+01  
o 0.19838300790543E+01 0.31575364840808E+01 0.17105789548840E+01  
o 0.15383168906960E+01 0.51561767754698E+01 -.13070181685825E+00  
h -.12542359551717E+01 0.34031310526159E+01 0.24263400090742E+01  
h 0.77801928523597E+00 0.47007865064567E+01 0.24190629190884E+01  
h -.48624138396916E+00 0.50594637953311E+01 0.39613135056404E+00  
h 0.10922895068665E+01 0.22290028415942E+01 0.33304479348512E+01  
h 0.25693071575672E+01 0.36808413123295E+01 0.11350748878052E+01  
h 0.16409853736506E+01 0.50052757610782E+01 -.10920298566771E+01  
h 0.22352096197244E+00 0.11446579899524E+01 0.94372230189076E+00  
h -.35290876651757E+00 0.37087819868165E+01 -.16092242661747E+01  
c -.18904938495802E+01 0.10086745039266E+01 0.14209628596800E+01  
o -.21128304174716E+01 -.21068725292764E-01 0.44863884544396E+00  
h -.21038487495246E+01 0.42073224209325E+00 -.41518080809734E+00  
h -.18055618949029E+01 0.50365580167182E+00 0.23922816183672E+01  
h -.27500662571018E+01 0.17052808057186E+01 0.14595509393823E+01

dglu - asp

c 0.71789659022229E+01 -.16972002414055E+01 -.28535771630875E+01  
h 0.82726708526082E+01 -.17142838644358E+01 -.29829942243298E+01  
h 0.68669636522201E+01 -.64505645852429E+00 -.27488231708485E+01  
h 0.67118041324777E+01 -.21165086822453E+01 -.37663613496285E+01  
n 0.34344888895642E+01 -.31392665996518E+01 -.28230193835340E+01  
c 0.26573408385670E+01 -.40259761734385E+01 -.36806343524012E+01  
h 0.29577671829196E+01 -.25459674752813E+01 -.21385157280215E+01  
h 0.29433498084879E+01 -.50749918951865E+01 -.35057470659675E+01  
h 0.15935084566068E+01 -.38835895240087E+01 -.34454037574916E+01  
h 0.28305790423556E+01 -.37973668483610E+01 -.47449228653053E+01  
c 0.53680799132721E+01 -.24951142346792E+01 -.14594452400907E+01  
n 0.68248832792837E+01 -.24183659796450E+01 -.16221714648938E+01  
h 0.49616163911284E+01 -.14740141853082E+01 -.15655255316742E+01  
h 0.71461944566439E+01 -.33859639010669E+01 -.17374908244745E+01  
c 0.47359297969048E+01 -.34000910855500E+01 -.25391347522235E+01  
o 0.53944207546079E+01 -.43025062563276E+01 -.30930137176959E+01  
c 0.50176121461834E+01 -.30025786903516E+01 -.49427294642580E-01  
h 0.51015066578221E+01 -.41028589867535E+01 0.61149926914117E-02  
h 0.57645053151707E+01 -.25994604582241E+01 0.65374710962758E+00  
c 0.36298253740390E+01 -.26048633756699E+01 0.47939394338230E+00  
o 0.33933489980008E+01 -.29070373930035E+01 0.16893494474655E+01  
o 0.28294767556221E+01 -.19918740345937E+01 -.30985058414993E+00  
c -.34557602567106E+01 0.63127273245955E+01 0.36938862903453E+01  
c -.43508770656573E+01 0.64752023510797E+01 0.26164094344853E+01

c -.44227362935268E+01 0.54923025732374E+01 0.16260569737714E+01  
c -.26372803640425E+01 0.51829024716785E+01 0.38138377539719E+01  
c -.27238102396866E+01 0.42033018862921E+01 0.28122566937360E+01  
c -.35915052485514E+01 0.43305463631015E+01 0.17071492671523E+01  
o -.19095630109502E+01 0.31109620592117E+01 0.29633463994770E+01  
c -.19152594223646E+01 0.21102118449510E+01 0.20261643375211E+01  
c -.27683655419151E+01 0.21514459010205E+01 0.93112080705779E+00  
c -.36638889969673E+01 0.32684659268402E+01 0.71761802120275E+00  
c -.98194704477811E+00 0.10315729477749E+01 0.23419020519172E+01  
c -.99548931576986E+00 0.43938862198051E+00 0.36296019889401E+01  
o -.44860466037923E+01 0.33106063666283E+01 -.25218846358947E+00  
o -.34375121394877E+01 0.73304787935634E+01 0.46236438154300E+01  
o -.52867022921131E+01 0.56530533069955E+01 0.59288901764736E+00  
h -.49841260288883E+01 0.73638313368063E+01 0.25587272313559E+01  
h -.19423388011075E+01 0.50455572695976E+01 0.46479691990052E+01  
h -.27755954728398E+01 0.71180911113518E+01 0.52979388061551E+01  
h -.51968526161841E+01 0.48307630543231E+01 0.39920538930596E-01  
c -.97348299479467E-01 -.59373451074484E+00 0.39106154780865E+01  
c 0.84027871559000E+00 -.10326130755549E+01 0.29345156425063E+01  
c 0.86838668515956E+00 -.41373481670211E+00 0.16694226650002E+01  
c -.49433814309818E-01 0.60714413369823E+00 0.13709686095927E+01  
o -.10292779155842E+00 -.12101328198095E+01 0.51366818181168E+01  
o 0.16497022173253E+01 -.20380658421347E+01 0.33358507676557E+01  
h -.17168217708007E+01 0.75090701902954E+00 0.43922212376603E+01  
h 0.16079080170469E+01 -.75117750992318E+00 0.93646955701968E+00  
h -.35209494438610E-01 0.10954058704966E+01 0.39229697200745E+00  
h 0.58729447983795E+00 -.18981599729740E+01 0.50750122091757E+01  
h 0.22887648273530E+01 -.23479619766250E+01 0.25935282669991E+01  
o -.29131916379576E+01 0.10303093925335E+01 0.14982941422867E+00  
c -.26265627165803E+01 0.11823350975775E+01 -.12721482371869E+01  
o -.13575764395152E+01 0.67304970329370E+00 -.15822659716042E+01  
c -.12242215755651E+01 -.75826889452787E+00 -.13368730192118E+01  
c -.22603502358937E+01 -.15200871952738E+01 -.21694082221417E+01  
c -.36783326619281E+01 -.10527098540021E+01 -.18111002668393E+01  
c -.37408241115714E+01 0.46307356961457E+00 -.20475802592302E+01  
o -.21847266978931E+01 -.29291109125101E+01 -.19864926439081E+01  
o -.40480141356062E+01 -.14348690609270E+01 -.48902243027796E+00  
o -.50329187548914E+01 0.96284855155485E+00 -.17348400636251E+01  
h -.20809976528846E+01 -.12577030698933E+01 -.32357061104540E+01  
h -.43917126757974E+01 -.15477664452422E+01 -.24939458407562E+01  
h -.35097116400031E+01 0.64288507902926E+00 -.31162747428093E+01  
h -.12600599228185E+01 -.31395261355712E+01 -.17544326614140E+01  
h -.39240452856276E+01 -.66356863498495E+00 0.84558138887117E-01  
h -.49253631054143E+01 0.17938085081697E+01 -.12304390715526E+01  
h -.13651070062272E+01 -.96736712349195E+00 -.26280116556970E+00  
h -.25900783271152E+01 0.22557554258437E+01 -.15131642051902E+01  
c 0.20764165545835E+00 -.10870226734289E+01 -.17524798121466E+01  
o 0.49200179999776E+00 -.24584867787441E+01 -.14476631446831E+01  
h 0.12558685395458E+01 -.24502592453374E+01 -.82188309968013E+00

h 0.31362263928092E+00 -92198984791404E+00 -.28412459628940E+01  
h 0.91488433589959E+00 -.41968112184526E+00 -.12330010329842E+01

dglu - cys

c 0.27177825692741E+01 0.23363418527891E+01 0.48694937378356E+01  
h 0.30255842174801E+01 0.12895270352858E+01 0.50218616223938E+01  
h 0.31775336623871E+01 0.26919186470244E+01 0.39278957272265E+01  
h 0.31019571901845E+01 0.29346431342856E+01 0.57096129610132E+01  
c 0.69742863561662E+00 0.16760041297342E+01 0.37033182694462E+01  
c -.72890734095179E+00 0.21446862245187E+01 0.33788258685399E+01  
n 0.12447364972264E+01 0.24110574098792E+01 0.48472800426407E+01  
h 0.13178954213535E+01 0.17714722681545E+01 0.27952911056876E+01  
h -.11876768912165E+01 0.14580045764111E+01 0.26611497578642E+01  
h -.13479684747493E+01 0.21716435253170E+01 0.42894931427793E+01  
h 0.97754186373038E+00 0.33921638263838E+01 0.47331677431766E+01  
s -.74613898989275E+00 0.37966103706305E+01 0.25680238629094E+01  
h -.10627137530683E+01 0.45250769586321E+01 0.36612273984109E+01  
c 0.61001335617043E+00 0.18297628185823E+00 0.40112011567191E+01  
n 0.51325218909848E+00 -.12821877684381E+00 0.53145072421970E+01  
c 0.34130127357590E+00 -.14987680607571E+01 0.57815706553482E+01  
h 0.56817473925865E+00 0.66681851371953E+00 0.59513921985182E+01  
h 0.95330352488698E+00 -.21695683117527E+01 0.51621248757166E+01  
h 0.66924259134115E+00 -.15620339602501E+01 0.68279901901029E+01  
h -.71282429132905E+00 -.18134688372848E+01 0.57138551063986E+01  
o 0.56028865137753E+00 -.67664068744137E+00 0.30933419719105E+01  
c -.13533359298335E+01 -.36532475003544E+01 -.59346744795919E+01  
c 0.28203575298814E-01 -.39325239893757E+01 -.59514187478111E+01  
c 0.81991798467839E+00 -.35629128946884E+01 -.48616044364769E+01  
c -.19662092830892E+01 -.30132768475188E+01 -.48482836002329E+01  
c -.11553856330633E+01 -.26403081072438E+01 -.37683516089505E+01  
c 0.23400901832523E+00 -.28929965385568E+01 -.37408544218121E+01  
o -.17960670727774E+01 -.20363588075645E+01 -.27092899068618E+01  
c -.10467394797580E+01 -.15438200117737E+01 -.16827136926418E+01  
c 0.32584176789940E+00 -.16863219186248E+01 -.16185374791173E+01  
c 0.10474430024331E+01 -.24688743060480E+01 -.26074083488846E+01  
c -.18325748230058E+01 -.85614892146072E+00 -.65105534324534E+00  
c -.16177157189597E+01 -.11882860503078E+01 0.70598830868945E+00  
o 0.22794959573017E+01 -.27259496928826E+01 -.25140495919694E+01  
o -.20600325659678E+01 -.40497469997790E+01 -.70453395435938E+01  
o 0.21474792425569E+01 -.38351563861606E+01 -.48836032026522E+01  
h 0.47629018834663E+00 -.44376484418340E+01 -.68108589716317E+01  
h -.30382501503927E+01 -.27954112156493E+01 -.48237305861569E+01  
h -.29887946001385E+01 -.37980891883170E+01 -.69325987855884E+01  
h 0.25057379376776E+01 -.35100252078934E+01 -.40144791049534E+01  
c -.23330165744999E+01 -.53885637271830E+00 0.17244809115036E+01  
c -.32645850044026E+01 0.47306877348695E+00 0.13808062674282E+01  
c -.34831296292561E+01 0.79284573314611E+00 0.26783094234205E-01  
c -.27806342178692E+01 0.13124975745935E+00 -.99486260952849E+00  
o -.21708536938887E+01 -.84849123682841E+00 0.30466039888255E+01



o -.39116690641936E+01 0.10929511222453E+01 0.24204616710356E+01  
h -.89350655119955E+00 -.19644844421658E+01 0.97531811893217E+00  
h -.42057038513245E+01 0.15783112367302E+01 -.22593084877282E+00  
h -.29485530199657E+01 0.38919978788866E+00 -.20453182299759E+01  
h -.12415492452678E+01 -.11506432887344E+01 0.31431865321553E+01  
h -.44740416483951E+01 0.17941121583895E+01 0.20570899335780E+01  
o 0.98433749932016E+00 -.10407573380460E+01 -.58607445381564E+00  
c 0.21156010513715E+01 -.24727419229022E+00 -.10731067815651E+01  
o 0.18201511150802E+01 0.33655658020676E+00 -.23209855500587E+01  
c 0.70387225101806E+00 0.12681948448161E+01 -.22832943758945E+01  
c 0.10491273278978E+01 0.24489044461017E+01 -.13793497796999E+01  
c 0.13482581394282E+01 0.19140807989738E+01 0.30202551873881E-01  
c 0.24103995656550E+01 0.80763436613813E+00 0.11762925103812E-02  
o -.29141060382949E-01 0.33836545067507E+01 -.13290214563565E+01  
o 0.11597834054741E+00 0.14860007676621E+01 0.63651081883219E+00  
o 0.26457101258734E+01 0.22958011071534E+00 0.12758041036463E+01  
h 0.19297843627533E+01 0.29824758699469E+01 -.17789578391445E+01  
h 0.17046003311006E+01 0.27447951164704E+01 0.66390104240743E+00  
h 0.33630996795136E+01 0.12758707268393E+01 -.30422091149615E+00  
h -.63769993321454E+00 0.30336596717874E+01 -.65285455640464E+00  
h -.83507154433739E-01 0.57775779162145E+00 0.33910429455653E+00  
h 0.18096140683312E+01 -.14355443981585E+00 0.16241050642438E+01  
h -.19229847963546E+00 0.76211873317383E+00 -.18812762080402E+01  
h 0.29678662781310E+01 -.91806333482190E+00 -.12413243888762E+01  
c 0.42841768005597E+00 0.16294444279413E+01 -.37299431576534E+01  
o -.66078268562140E-01 0.49600051019899E+00 -.44581684830793E+01  
h 0.62881037489204E+00 -.18054308567981E+00 -.44305111443450E+01  
h -.35702166073213E+00 0.23969619644733E+01 -.37680259219313E+01  
h 0.13482408069685E+01 0.20340948336765E+01 -.41920690824775E+01

dglu - gln

c -.73363053965847E+00 0.11173865135135E+00 0.23077979377440E+00  
c 0.79186821740360E+00 0.26389410779540E+00 0.11592417024642E+00  
c 0.11494246141467E+01 0.17595736336154E+01 0.87763069688519E-01  
c 0.26434056125918E+01 0.19679041423607E+01 -.24445093381581E+00  
c 0.31201792694133E+01 0.32962972867794E+01 0.29695175850589E+00  
n 0.32620893711313E+01 0.43146070808535E+01 -.59077392838205E+00  
o 0.33438718368128E+01 0.34709745299258E+01 0.15136220088734E+01  
n 0.15762258432500E+01 -.41904629286354E+00 0.11402668209758E+01  
o -.14393973141309E+01 -.12983351492582E+00 -.75659486945980E+00  
n -.12732218462082E+01 0.30815242937259E+00 0.14835434902331E+01  
c -.26637531819633E+01 -.10339854561327E+00 0.16978221008656E+01  
h 0.10347453373908E+01 -.19296359013481E+00 -.86192534852603E+00  
h 0.50871268771293E+00 0.22780934127730E+01 -.64416958532896E+00  
h 0.92128068715075E+00 0.21948963977445E+01 0.10735813611525E+01  
h 0.32291799794280E+01 0.11792902134612E+01 0.25313944632159E+00  
h 0.28081948603446E+01 0.18900944719336E+01 -.13317538089576E+01  
h 0.35305507512169E+01 0.52316715766294E+01 -.25128459729965E+00  
h 0.30747838035523E+01 0.41864111459486E+01 -.15760113594522E+01

h 0.15145669061330E+01 0.63748542037270E-01 0.20403559150921E+01  
h -.64218164528953E+00 0.26911936523154E+00 0.22831455909503E+01  
h -.29385953065334E+01 0.11001163363562E+00 0.27374747193892E+01  
h -.33212979843764E+01 0.46743745793710E+00 0.10269790562597E+01  
h -.27989541707614E+01 -.11747514800284E+01 0.14728522115173E+01  
c 0.12613318629680E+01 -.18437174211643E+01 0.12613261049448E+01  
h 0.18873360556135E+01 -.22854439175322E+01 0.20514941347056E+01  
h 0.19791108386701E+00 -.20586200986076E+01 0.14961544350688E+01  
h 0.15033443775116E+01 -.23466247221846E+01 0.31069278805531E+00  
c -.89670468428732E+00 0.84695527905633E+01 0.98565016649712E+01  
c -.22867338370608E+01 0.86829954328935E+01 0.97638340621884E+01  
c -.30386579406573E+01 0.79467609218577E+01 0.88448688544259E+01  
c -.23603883027695E+00 0.75313244025013E+01 0.90496525413860E+01  
c -.10063780000208E+01 0.68034456883915E+01 0.81326025893993E+01  
c -.24000729124301E+01 0.69840452852886E+01 0.80012201281145E+01  
o -.32507885909818E+00 0.58751043248884E+01 0.73741809282042E+01  
c -.10004032119630E+01 0.51510059136178E+01 0.64337264661863E+01  
c -.23562488070238E+01 0.53021156006868E+01 0.62174486436594E+01  
c -.31588267574887E+01 0.62103680788833E+01 0.70269076894937E+01  
c -.13115143054040E+00 0.42476571586928E+01 0.56726032444842E+01  
c -.49518462350218E+00 0.28957008324715E+01 0.54679194751046E+01  
o -.44060145209201E+01 0.63269683419028E+01 0.68798193259332E+01  
o -.23238936323006E+00 0.92330991447878E+01 0.10785949194787E+02  
o -.43735215876948E+01 0.81588419532445E+01 0.87610792122217E+01  
h -.27733237779273E+01 0.94202234809572E+01 0.10407472114802E+02  
h 0.84130847981772E+00 0.73521588929511E+01 0.91185576992940E+01  
h 0.70933040729774E+00 0.90061319351751E+01 0.10765805016508E+02  
h -.47061342820010E+01 0.75372896859693E+01 0.80606006167153E+01  
c 0.27410271432898E+00 0.20821769836434E+01 0.46228282852884E+01  
c 0.14306972559503E+01 0.26027168603626E+01 0.39897987343270E+01  
c 0.18021526033258E+01 0.39420597509423E+01 0.42279590662790E+01  
c 0.10328942641259E+01 0.47614999397833E+01 0.50661559629548E+01  
o -.35636975388244E-01 0.76089771842552E+00 0.43571170352227E+01  
o 0.21462049638826E+01 0.17606322201709E+01 0.31957568662648E+01  
h -.13750243750322E+01 0.24814100513565E+01 0.59771132067595E+01  
h 0.26927489012920E+01 0.43357821858938E+01 0.37290616728061E+01  
h 0.13017391806833E+01 0.58114307542103E+01 0.52030312740102E+01  
h -.83338920553596E+00 0.53201140048937E+00 0.48600880459241E+01  
h 0.27337401795444E+01 0.23139652989091E+01 0.26127657736051E+01  
o -.29704066361183E+01 0.45388427964768E+01 0.52383540777921E+01  
c -.35216046265542E+01 0.53457083498552E+01 0.41538698177443E+01  
o -.25054426985941E+01 0.59793544739500E+01 0.34120954115414E+01  
c -.15946635942621E+01 0.50695431823136E+01 0.27274171640656E+01  
c -.23754865133770E+01 0.41655259820554E+01 0.17697791985563E+01  
c -.34493384305292E+01 0.33956454631902E+01 0.25454932883131E+01  
c -.43528348248686E+01 0.43834690620419E+01 0.32934659673058E+01  
o -.14868926160393E+01 0.32967469759924E+01 0.10724850555886E+01  
o -.28458221217609E+01 0.24378829322821E+01 0.34358335283887E+01  
o -.53698565104485E+01 0.37409252644945E+01 0.40443091570688E+01

h -.28762480305755E+01 0.48028249558630E+01 0.10160503673195E+01  
h -.40624902270782E+01 0.27993852529002E+01 0.18496553978849E+01  
h -.48717318008049E+01 0.50078633224138E+01 0.25468092966795E+01  
h -.14857478626888E+01 0.24264193380704E+01 0.15196754072627E+01  
h -.24126678524105E+01 0.29518840948943E+01 0.41416434964811E+01  
h -.49240606294925E+01 0.31955120043230E+01 0.47112495373809E+01  
h -.10540485878700E+01 0.44620928424214E+01 0.34718470818774E+01  
h -.41400781391526E+01 0.61434356963962E+01 0.45871866059619E+01  
c -.60597735687663E+00 0.59707688513342E+01 0.20024067963717E+01  
o 0.35168335280952E-01 0.68842288628800E+01 0.28995356928948E+01  
h -.68070320531237E+00 0.73431173850638E+01 0.33663651872569E+01  
h 0.18350792821154E+00 0.53498976177570E+01 0.15550083563216E+01  
h -.11335546270129E+01 0.65160584763149E+01 0.11961564030854E+01

dglu glu

c 0.42060281726569E+01 -.20755686585175E+00 0.17568877577192E+01  
h 0.51788260813700E+01 -.23669538260199E+00 0.12406197497777E+01  
h 0.40696007311894E+01 0.80098236695703E+00 0.21806210545545E+01  
h 0.34099954286078E+01 -.38074964288391E+00 0.10066182699204E+01  
c 0.17433887243377E+01 0.20195158635999E+00 0.57943477797309E+01  
c 0.29976587222553E+01 -.67976146067553E+00 0.59215162966281E+01  
h 0.38808533481299E+01 -.40577065848144E-01 0.57633345004798E+01  
c 0.29788310557930E+01 -.18404264226523E+01 0.49219934268838E+01  
c 0.28847344206464E+01 -.12945068970357E+01 0.34748124473994E+01  
c 0.18994793307672E+01 -.21281895734247E+01 0.26394745479237E+01  
h 0.24669428313527E+01 -.27074171062621E+00 0.35224658812384E+01  
n 0.42095205628589E+01 -.11792620802187E+01 0.28638901738836E+01  
h 0.38988926676907E+01 -.24453108205470E+01 0.49979349817343E+01  
o 0.22741900305793E+01 -.28845002118431E+01 0.17078838802650E+01  
n 0.61423608277086E+00 -.19854571452387E+01 0.30233093296211E+01  
c -.49821793426141E+00 -.26961830999106E+01 0.24121465390282E+01  
h 0.21223436652244E+01 -.24965399168913E+01 0.51465243515093E+01  
h 0.44423047502917E+01 -.20999140160368E+01 0.24799435527726E+01  
h 0.45619030107141E+00 -.14238912767731E+01 0.38749078722248E+01  
h -.11949319303683E+01 -.19870363527167E+01 0.19322608043829E+01  
h -.10010871978458E+00 -.33879834909817E+01 0.16567249896883E+01  
h -.10507157956001E+01 -.32669861928330E+01 0.31754446449171E+01  
o 0.62773761523542E+00 -.44138492371837E+00 0.55399019230881E+01  
o 0.18408124324197E+01 0.14386500478454E+01 0.59196846868027E+01  
h 0.30383643547229E+01 -.10623950417698E+01 0.69574526154505E+01  
c -.17396632919236E+01 0.10551464025371E+01 0.41908462555558E+01  
c -.30961007509857E+01 0.12777156831228E+01 0.38128129598291E+01  
c -.34695974325761E+01 0.13133255479208E+01 0.24730729298184E+01  
c -.74392817039489E+00 0.93384365743121E+00 0.31903829123493E+01  
c -.11468298496606E+01 0.91497388872782E+00 0.18573561668222E+01  
c -.24904318585745E+01 0.11097588060666E+01 0.14443402685327E+01  
o -.1521338886538E+00 0.66770670371718E+00 0.93237399382184E+00  
c -.45188879430975E+00 0.56815770168422E+00 -.39090788986996E+00  
c -.17330192137525E+01 0.77840476906715E+00 -.86313093737833E+00

c -.28357741868353E+01 0.10540886931131E+01 0.47992042519811E-01  
c 0.70033776948779E+00 0.96338826469436E-01 -.11666999746723E+01  
c 0.14172260228674E+01 -.10003549623137E+01 -.64203393773891E+00  
o -.40338847835126E+01 0.11916209313511E+01 -.37488536810478E+00  
o -.14503549648761E+01 0.95191975221508E+00 0.54859007109415E+01  
o -.47792914097694E+01 0.15161369344126E+01 0.21434832097135E+01  
h -.38569063712154E+01 0.13920010899997E+01 0.45901125471293E+01  
h 0.30770669600586E+00 0.83262659020299E+00 0.34607533993423E+01  
h -.50359749741583E+00 0.47368466254950E+00 0.55756487269437E+01  
h -.48218165225932E+01 0.14461169269225E+01 0.11576751625204E+01  
c 0.25557234499841E+01 -.14981946473213E+01 -.12969271179717E+01  
c 0.29628692641153E+01 -.88724730769597E+00 -.25111767100228E+01  
c 0.22429538400728E+01 0.20496096734948E+00 -.30297681993742E+01  
c 0.11119621591178E+01 0.70819081671486E+00 -.23632490892964E+01  
o 0.32898094376094E+01 -.25396612184549E+01 -.81914776982757E+00  
o 0.40811727299841E+01 -.14087266216776E+01 -.31265665535827E+01  
h 0.10907935564915E+01 -.14746508928538E+01 0.28563054352974E+00  
h 0.25781819743696E+01 0.68904011921010E+00 -.39559066971727E+01  
h 0.58292933566801E+00 0.15782187341127E+01 -.27523791363075E+01  
h 0.29894429073959E+01 -.27230617427897E+01 0.10333816901751E+00  
h 0.42472161317373E+01 -.88532618181899E+00 -.39247912468278E+01  
o -.20133526236936E+01 0.50479624238638E+00 -.21932369656835E+01  
c -.26110267026682E+01 0.15875774359468E+01 -.29412826020769E+01  
o -.16732659257511E+01 0.21924315772193E+01 -.38156567459586E+01  
c -.11584062320574E+01 0.13054302422189E+01 -.48469808133318E+01  
c -.22889986415439E+01 0.70788084376940E+00 -.56923127471797E+01  
c -.33348192890156E+01 0.33177749402369E-01 -.47965624133387E+01  
c -.38042854687243E+01 0.10179089180412E+01 -.37231839460732E+01  
o -.17528109689359E+01 -.23718216013121E+00 -.66219592444092E+01  
o -.27719429357109E+01 -.11802712509329E+01 -.42791512913566E+01  
o -.47724148204192E+01 0.40439839777407E+00 -.28965059902918E+01  
h -.27686950054206E+01 0.15073364403926E+01 -.62848396380285E+01  
h -.42013952667284E+01 -.26594741981126E+00 -.54128436510418E+01  
h -.42442950041027E+01 0.18857759614904E+01 -.42576965168591E+01  
h -.16615001006439E+01 -.10579612357966E+01 -.61045070299752E+01  
h -.24493355951485E+01 -.99947714450832E+00 -.33801432208946E+01  
h -.45741055326420E+01 0.64624143775256E+00 -.19593219778828E+01  
h -.58463999468514E+00 0.49070055858072E+00 -.43719196430311E+01  
h -.29230963601999E+01 0.23827786879937E+01 -.22475065014743E+01  
c -.25232040336534E+00 0.21752976104409E+01 -.57060102105037E+01  
o 0.83224700975728E+00 0.27574504653559E+01 -.49718019818617E+01  
h 0.42807508395094E+00 0.32846207061249E+01 -.42654808396281E+01  
h 0.19771057659655E+00 0.15531742010282E+01 -.64923701573579E+01  
h -.86738901645101E+00 0.29615726952072E+01 -.61835772996253E+01

dglu gly

c 0.95259104977206E+00 -.68997749347678E+01 0.48807822299141E+00  
c 0.23422550101375E+01 -.67466854614420E+01 0.29858680661929E+00  
c 0.28986180299753E+01 -.54673657856890E+01 0.26238927266413E+00

c 0.10023620586289E+00 -0.57976011794293E+01 0.64592299621897E+00  
c 0.67553899051084E+00 -0.45201181778067E+01 0.60230442177246E+00  
c 0.20576949406450E+01 -0.43177907893131E+01 0.40648851861456E+00  
o -0.17598272456915E+00 -0.34639167443272E+01 0.79855083985172E+00  
c 0.26575379163094E+00 -0.21701705632592E+01 0.71136799476328E+00  
c 0.16011020959379E+01 -0.19002931993233E+01 0.43809444624151E+00  
c 0.25820960479093E+01 -0.29694305143573E+01 0.36246845812493E+00  
c -0.81154704604578E+00 -0.12214373967689E+01 0.10153377032245E+01  
c -0.21498088039999E+01 -0.16710861935290E+01 0.87640446213315E+00  
o 0.38286257550071E+01 -0.27345621457675E+01 0.24863034603315E+00  
o 0.49235439468237E+00 -0.81924291149829E+01 0.51419670606147E+00  
o 0.42345326240509E+01 -0.53320903177710E+01 0.79661187082376E-01  
h 0.29797580513250E+01 -0.76269499366322E+01 0.18352553416324E+00  
h -0.97623306251358E+00 -0.59059328389606E+01 0.80960873285517E+00  
h -0.46670589943820E+00 -0.81854540991286E+01 0.65301803746630E+00  
h 0.44189440252516E+01 -0.43593361284696E+01 0.11069860822934E+00  
c -0.32084246889661E+01 -0.85353467518654E+00 0.12805674699573E+01  
c -0.29539362075284E+01 0.42219605053730E+00 0.18410020968325E+01  
c -0.16271863514936E+01 0.87277843098000E+00 0.19678156857047E+01  
c -0.55321351369418E+00 0.66441542226565E-01 0.15510373696713E+01  
o -0.44957139442050E+01 -0.12856213153538E+01 0.11268625830750E+01  
o -0.40627682361162E+01 0.11306605019467E+01 0.22257583581847E+01  
h -0.23762778432936E+01 -0.26543747584842E+01 0.45687203534474E+00  
h -0.14454287135904E+01 0.18522299802124E+01 0.24208436779738E+01  
h 0.47358859599521E+00 0.41272641970545E+00 0.16881403358250E+01  
h -0.50689114619994E+01 -0.56555472523506E+00 0.14478282571588E+01  
h -0.38928661319322E+01 0.20923774647413E+01 0.20315322658778E+01  
o 0.20448111389176E+01 -0.59843413178486E+00 0.36786100742447E+00  
c 0.27455625473672E+01 -0.29995868744562E+00 -0.86073742812624E+00  
o 0.19369270834235E+01 0.43237598849900E+00 -0.17561570071874E+01  
c 0.16226809709276E+01 0.17851189508431E+01 -0.13349881929765E+01  
c 0.29030684519248E+01 0.26018416470452E+01 -0.11305194167218E+01  
c 0.38095948111279E+01 0.19005271380443E+01 -0.12841265371751E+00  
c 0.40504924601864E+01 0.44600346214920E+00 -0.52619565986756E+00  
o 0.25857729837631E+01 0.39255210477837E+01 -0.68990013881422E+00  
o 0.31435433739283E+01 0.19893134914638E+01 0.11382980943458E+01  
o 0.47624405859261E+01 -0.14952981747773E+00 0.54920591678642E+00  
h 0.34293127152954E+01 0.27002697162470E+01 -0.20965677779337E+01  
h 0.47856018550188E+01 0.24192898350166E+01 -0.77308332066443E-01  
h 0.46500407085581E+01 0.44055057624745E+00 -0.14588198772474E+01  
h 0.25082977611640E+01 0.38691429971184E+01 0.27766012735671E+00  
h 0.35500846410330E+01 0.13022560597563E+01 0.16948611136090E+01  
h 0.45518218985145E+01 -0.11085826530451E+01 0.54400802120917E+00  
h 0.10428151155421E+01 0.17482066361806E+01 -0.39520379960078E+00  
h 0.29609414205573E+01 -0.12392567605385E+01 -0.13892535160181E+01  
c 0.78814457727459E+00 0.23531860909900E+01 -0.24681807793467E+01  
o -0.51001166335877E+00 0.17367141883343E+01 -0.25462116859735E+01  
h -0.36640337832310E+00 0.77689653392425E+00 -0.25301757313214E+01  
h 0.61897627564195E+00 0.34276164648450E+01 -0.23059002660056E+01

h 0.13376673599606E+01 0.22209256319504E+01 -.34172014938293E+01  
n -.16335415680510E+01 0.33066004582489E+01 -.35289865532977E+00  
c -.68464963950463E+00 0.40487565031491E+01 0.46999550027126E+00  
h -.13072970650550E+01 0.27925214151534E+01 -.11752644232482E+01  
h -.14887884867809E-01 0.46309708765466E+01 -.17771960490458E+00  
h -.12501855344339E+01 0.47249313126860E+01 0.11245965762148E+01  
h -.77850374600660E-01 0.33720665144909E+01 0.10962837545615E+01  
c -.28750300635553E+01 0.30140834414452E+01 0.81522797773824E-01  
c -.37117545178297E+01 0.21194046787001E+01 -.84625296539225E+00  
n -.51458969376490E+01 0.23635797298102E+01 -.78317969874292E+00  
h -.54433063949682E+01 0.22560445495630E+01 0.18845040781438E+00  
o -.33278474811915E+01 0.34350408993269E+01 0.11752559150011E+01  
h -.33684972125839E+01 0.22500022256981E+01 -.18871563987774E+01  
h -.35042296363144E+01 0.10709530669597E+01 -.56917520065598E+00  
c -.54850060251869E+01 0.37206445865784E+01 -.12352815396262E+01  
h -.65691823249750E+01 0.38759571043767E+01 -.11286596657364E+01  
h -.5233367381787E+01 0.38090363723755E+01 -.23045709513131E+01  
h -.49583692747337E+01 0.45215124643800E+01 -.67969980260423E+00

dglu his

c 0.11466828932475E+01 -.77588345673594E+01 0.11769320706189E+01  
c 0.25391485239037E+01 -.77194346250380E+01 0.13982697837163E+01  
c 0.31829586376398E+01 -.64887932888026E+01 0.15325549195806E+01  
c 0.37628063095748E+00 -.65871249816630E+01 0.10869428037251E+01  
c 0.10369709730728E+01 -.53612844257646E+01 0.12206947375153E+01  
c 0.24336290931170E+01 -.52728869793306E+01 0.14426159000827E+01  
o 0.23603834832166E+00 -.42333057634605E+01 0.11533668476896E+01  
c 0.81014829860029E+00 -.30028259044963E+01 0.12531805803014E+01  
c 0.21696573267534E+01 -.28459634828321E+01 0.14147613131404E+01  
c 0.30700448840237E+01 -.39774123556832E+01 0.15685848973270E+01  
c -.14707645414558E+00 -.18872382864676E+01 0.12031476333133E+01  
c 0.11045548691280E-01 -.80519731478640E+00 0.21015882837424E+01  
o 0.43058386067491E+01 -.38034381867951E+01 0.17828603063554E+01  
o 0.59968555281614E+00 -.90063413972995E+01 0.10605441645149E+01  
o 0.45196070843270E+01 -.64632740023268E+01 0.17433584237876E+01  
h 0.31088951863171E+01 -.86496438464499E+01 0.14676724373644E+01  
h -.70570428453140E+00 -.66095775461760E+01 0.92632056400385E+00  
h -.35658784228602E+00 -.89325938085230E+01 0.92033714992193E+00  
h 0.47810138001512E+01 -.55139270994106E+01 0.18216292912133E+01  
c -.85064975896438E+00 0.29597766264492E+00 0.20426987097607E+01  
c -.19209072192664E+01 0.32425906215029E+00 0.11116367751580E+01  
c -.20915378444262E+01 -.77093712609884E+00 0.23574382509465E+00  
c -.12097383205258E+01 -.18721697504307E+01 0.27445507581986E+00  
o -.68992026129127E+00 0.14152461582679E+01 0.28306342848346E+01  
o -.27099228933937E+01 0.14302337417172E+01 0.11190305488755E+01  
h 0.83525446562191E+00 -.81067998849307E+00 0.28228564668110E+01  
h -.29248109976097E+01 -.75042075358880E+00 -.47581543877958E+00  
h -.13473285758592E+01 -.27109879764442E+01 -.41468334208816E+00  
h 0.10840685074372E-01 0.12396493711038E+01 0.34797341907280E+01

h -3.1870475090417E+01 0.15295757720610E+01 0.25545882896552E+00  
o 0.27097632947976E+01 -1.5821064139663E+01 0.15159008046411E+01  
c 0.35638910348979E+01 -1.2714182547202E+01 0.40545308108939E+00  
o 0.28247314821273E+01 -7.3495009776803E+00 -6.7648743461888E+00  
c 0.21014039852847E+01 0.46065165860562E+00 -3.1727065678203E+00  
c 0.30928711076509E+01 0.15643118958084E+01 0.71883708075535E-01  
c 0.40254677781378E+01 0.10967727232442E+01 0.11920294676838E+01  
c 0.46216190617252E+01 -2.8771622152716E+00 0.90542531635818E+00  
o 0.23794553593275E+01 0.27422591059659E+01 0.52860938764575E+00  
o 0.32192713843599E+01 0.10839234132640E+01 0.23803189687410E+01  
o 0.52319209783816E+01 -7.3265615074498E+00 0.21126918238214E+01  
h 0.36868419556971E+01 0.18588182127612E+01 -8.1020561108616E+00  
h 0.48505216304371E+01 0.18233637673291E+01 0.13145890625288E+01  
h 0.53692879153888E+01 -1.8346517442988E+00 0.96029096502704E-01  
h 0.23704267790781E+01 0.26536148817501E+01 0.15014528324752E+01  
h 0.37074352018848E+01 0.52982297274910E+00 0.30162852465264E+01  
h 0.51243075163650E+01 -1.7014537552661E+01 0.21741128843455E+01  
h 0.14412127165896E+01 0.24915274746559E+00 0.54157090602864E+00  
h 0.40245980463262E+01 -2.1900569890002E+01 0.13198825383784E-01  
c 0.12503289324708E+01 0.78861188159405E+00 -1.5511245928727E+01  
o -1.3077488098350E+00 0.11024540733715E+01 -1.2263353870490E+01  
h -5.6473652430348E+00 0.31853859212650E+00 -8.2913202025404E+00  
h 0.16292414920293E+01 0.16708571607086E+01 -2.0908597389055E+01  
h 0.12726182899920E+01 -7.3284260115024E-01 -2.2347632806691E+01  
c -3.5733138044405E+01 0.39143354203147E+01 -2.8883148132655E+01  
c -4.1292507882418E+01 0.30524081070336E+01 -1.7387634941414E+01  
o -3.4728556349130E+01 0.20623147328689E+01 -1.3332334245435E+01  
n -2.6695540476553E+01 0.31547847019058E+01 -3.7426737649831E+01  
h -4.4025250555733E+01 0.42994237258075E+01 -3.5086504844933E+01  
h -2.0995668522762E+01 0.25732203680455E+01 -3.1196005275390E+01  
c -2.8212607641798E+01 0.51394986593812E+01 -2.2800935549702E+01  
h -2.3184980337774E+01 0.56563282078044E+01 -3.1105429683358E+01  
h -3.5235059393999E+01 0.58313885939430E+01 -1.7892169344622E+01  
c -1.8368809108343E+01 0.46450020270641E+01 -1.2723996095982E+01  
c -1.3074742585700E+01 0.38208193841808E+01 0.68574852945960E+00  
n -2.2492885460145E+01 0.44754156328426E+01 0.87449282100613E-01  
c -5.9241285281206E+00 0.41236988606154E+01 -1.4686375424606E+01  
n -2.2313060999306E+00 0.34647623968886E+01 -2.3091639103923E+00  
h -2.6925230364953E+00 0.23788731319963E+01 -4.8265923498732E+00  
h 0.75280978163960E+00 0.35631683248244E+01 0.12485099257107E+00  
n -5.2814753238670E+01 0.34435607359848E+01 -1.1670725978082E+01  
c -5.8029375681253E+01 0.28064445377306E+01 0.43999205468993E-01  
h -1.2726259244619E+01 0.34860604416386E+01 0.17210847194638E+01  
h -5.7461868009920E+01 0.42674198334565E+01 -1.5341584683957E+01  
h -6.7927869220296E+01 0.32280350238395E+01 0.26034779776277E+00  
h -5.8989100129002E+01 0.17229610733506E+01 -1.1706397202168E+00  
h -5.1306472666133E+01 0.29909921832126E+01 0.89605438235079E+00  
c -3.4133288671150E+01 0.22412944640818E+01 -4.6316896669400E+01  
h -2.6943647879324E+01 0.16282589202029E+01 -5.1943586210751E+01

h -4.1045262425609E+01 0.15658336235206E+01 -.40901653620931E+01  
h -.39922366966376E+01 0.28364682030384E+01 -.53542728043548E+01  
h 0.31773918219734E-01 0.40405346049966E+01 -.23555353943735E+01

dglu ile

c 0.16966509071149E+01 -.67789483531826E+01 0.20117821612693E+01  
c 0.30976076755412E+01 -.66784309290214E+01 0.18955457148823E+01  
c 0.37044693648484E+01 -.54203350381597E+01 0.19279177308893E+01  
c 0.88257312363456E+00 -.56463525444148E+01 0.21611675443838E+01  
c 0.15089805782119E+01 -.43928401404178E+01 0.21898416392958E+01  
c 0.29074791365922E+01 -.42419521917542E+01 0.20757648408912E+01  
o 0.67751144304222E+00 -.33060701810070E+01 0.23580880746172E+01  
c 0.12056506422284E+01 -.20467472017067E+01 0.23666712040091E+01  
c 0.25638690355476E+01 -.18191788222697E+01 0.22246556504145E+01  
c 0.35132837428281E+01 -.29169923311676E+01 0.21063191348054E+01  
c 0.19508734210271E+00 -.98981309006600E+00 0.24518267711275E+01  
c 0.38583138575608E+00 0.12610755225616E+00 0.33000503798505E+01  
o 0.47576897982861E+01 -.27295357568543E+01 0.20151720970463E+01  
o 0.11802657960111E+01 -.80519985927209E+01 0.19726417419202E+01  
o 0.50511327184788E+01 -.53314772349399E+01 0.18146217511767E+01  
h 0.37054065985072E+01 -.75796466142501E+01 0.17817574802746E+01  
h -.20524869051214E+00 -.57134294464279E+01 0.22597700209610E+01  
h 0.21719837013574E+00 -.80045651156812E+01 0.20674406616645E+01  
h 0.52665634331080E+01 -.43625770352240E+01 0.18676148316168E+01  
c -.40771010585866E+00 0.12735141430582E+01 0.31479783501483E+01  
c -.14657926898538E+01 0.12880574849879E+01 0.21987020348984E+01  
c -.17178247619715E+01 0.12472214498888E+00 0.14377527461889E+01  
c -.88647275333891E+00 -.10001711205901E+01 0.15462501902155E+01  
o -.19000660437570E+00 0.24370502651257E+01 0.38474946555561E+01  
o -.21755716071278E+01 0.24353120573019E+01 0.20779641610406E+01  
h 0.11738168932555E+01 0.10645743457990E+00 0.40625313548573E+01  
h -.25422610821037E+01 0.14111049633531E+00 0.71873903568610E+00  
h -.10344875458865E+01 -.18571999166968E+01 0.88351659990692E+00  
h 0.71664452153522E+00 0.24138656785358E+01 0.41980387119266E+01  
h -.27098705304425E+01 0.23854287684208E+01 0.12413134842142E+01  
o 0.30432465355370E+01 -.51717471764785E+00 0.22455740829715E+01  
c 0.36674835900165E+01 -.88283157603707E-01 0.99907561295429E+00  
o 0.27276339196009E+01 0.35916959323158E-01 -.43341223986376E-01  
c 0.16718213976691E+01 0.10092225100769E+01 0.20856748435014E+00  
c 0.22466312986588E+01 0.23976243531460E+01 0.51298108663231E+00  
c 0.32992037657023E+01 0.23331940902833E+01 0.16289903323621E+01  
c 0.43438626488764E+01 0.12566067283999E+01 0.13054685325508E+01  
o 0.11911359580815E+01 0.33028691635636E+01 0.84189432437967E+00  
o 0.26725927026438E+01 0.20906845492553E+01 0.29042880127759E+01  
o 0.53447869825040E+01 0.11400010088568E+01 0.23028731481280E+01  
h 0.27285248697683E+01 0.27971912833076E+01 -.39839025318504E+00  
h 0.37948352160449E+01 0.33121401589993E+01 0.17274825797755E+01  
h 0.48678463189778E+01 0.15495154819155E+01 0.37984729224992E+00  
h 0.95182251050414E+00 0.31321522374673E+01 0.17716072362056E+01



h 0.24434694533078E+01 0.11418666908578E+01 0.29053947619673E+01  
h 0.48971901596085E+01 0.91282766054957E+00 0.31328917740175E+01  
h 0.10592868345073E+01 0.66350382326836E+00 0.10539373940941E+01  
h 0.43935227961877E+01 -.85030023736543E+00 0.68434899658041E+00  
c 0.83529313575140E+00 0.10136182624823E+01 -.10589942808697E+01  
o 0.33248148618687E+00 -.29130975605824E+00 -.13741163262938E+01  
h 0.10946497111184E+01 -.89008865473647E+00 -.13165331503412E+01  
h -.32275794840758E-01 0.16719591323735E+01 -.91331017693041E+00  
h 0.14476124541690E+01 0.14084110479124E+01 -.18942076286010E+01  
c -.89122299283856E+00 0.10393565246826E+01 -.43108344394056E+01  
h -.30937942917294E+00 0.15757706161770E+01 -.50770147739392E+01  
h -.14219706582598E+01 0.20122413678556E+00 -.47979110904090E+01  
h -.19691550535741E+00 0.61667709854533E+00 -.35716627182979E+01  
c -.25585090894013E+01 0.14351661046446E+01 -.25152225634861E+01  
c -.26030865485277E+01 0.24149671080641E+01 -.13323853467522E+01  
c -.40093845778723E+01 0.10087415726179E+01 -.28495034457352E+01  
c -.48482884894637E+01 0.22112068540249E+01 -.33101673291347E+01  
c -.40343810490122E+01 -.14451947941659E+00 -.38652080711870E+01  
c -.54272008584299E+01 -.76280556647659E+00 -.40447470396970E+01  
n -.17799493179845E+01 0.20011665526210E+01 -.36328716416904E+01  
h -.20114314082996E+01 0.54783146629304E+00 -.21415471147748E+01  
h -.44343936584868E+01 0.64203737731330E+00 -.18975392521927E+01  
h -.59109635961809E+01 0.19398899817145E+01 -.34002132379504E+01  
h -.36641347231562E+01 0.21393354113000E+00 -.48435712316887E+01  
h -.33301389509511E+01 -.92693131894371E+00 -.35280454581949E+01  
h -.53831837626174E+01 -.16436968202465E+01 -.47050372751504E+01  
h -.58356414843741E+01 -.10880426539594E+01 -.30734095947117E+01  
h -.61373788673291E+01 -.49674210276155E-01 -.44910927246229E+01  
h -.24212848548865E+01 0.24070641883620E+01 -.43165492643412E+01  
o -.33004871538946E+01 0.21559157501810E+01 -.31965619170894E+00  
n -.18683501546549E+01 0.35293243239681E+01 -.14744363966147E+01  
c -.17786035635844E+01 0.45727753870054E+01 -.45712136575867E+00  
h -.13415342215416E+01 0.35624326445586E+01 -.23493338235448E+01  
h -.15790359001951E+01 0.55319525273150E+01 -.95552928030111E+00  
h -.27381055305428E+01 0.46322857664110E+01 0.75712093319435E-01  
h -.97433236264983E+00 0.43572979312019E+01 0.26109531780055E+00  
h -.47825367496690E+01 0.30440743811205E+01 -.25912183071025E+01  
h -.45232986265418E+01 0.25790652269170E+01 -.43002388002492E+01

dglu leu

c 0.10434901737839E+01 -.42882700223449E+01 0.10903766569550E+01  
c 0.24176583776578E+01 -.41953080444996E+01 0.76639111574481E+00  
c 0.30546324353690E+01 -.29525798925154E+01 0.75985578291659E+00  
c 0.30460780090196E+00 -.31502530441288E+01 0.14595363493159E+01  
c 0.95185985669630E+00 -.19138183670615E+01 0.14085689331055E+01  
c 0.23098948064563E+01 -.17649258759128E+01 0.10524531230861E+01  
o 0.17537017096484E+00 -.81909217565286E+00 0.17000816127786E+01  
c 0.63502383947515E+00 0.44161321892823E+00 0.14447475614659E+01  
c 0.19612163567630E+01 0.66926110359864E+00 0.11071480251078E+01

c 0.28930091767689E+01 -.44237065447727E+00 0.97771355454661E+00  
c -.44693898865432E+00 0.14236753531247E+01 0.15566272534354E+01  
c -.15113549060565E+01 0.11872299971062E+01 0.24603955960547E+01  
o 0.41363063746945E+01 -.26470653359465E+00 0.76563270047109E+00  
o 0.46973898952190E+00 -.55211462631893E+01 0.10213060517015E+01  
o 0.43727895540861E+01 -.28831771889352E+01 0.43918640206868E+00  
h 0.29777732129803E+01 -.50961858362108E+01 0.50170086221599E+00  
h -.75320179501437E+00 -.32163477620481E+01 0.17228118810060E+01  
h -.50969735838827E+00 -.54054303227862E+01 0.10381523976226E+01  
h 0.46207060980764E+01 -.19277389526989E+01 0.50436802184033E+00  
c -.26110290322378E+01 0.20551850400988E+01 0.25038054001695E+01  
c -.26683046727924E+01 0.31649741927498E+01 0.16248604240682E+01  
c -.16145913390080E+01 0.33892177139268E+01 0.72258574769547E+00  
c -.50575735074532E+00 0.25299907832524E+01 0.68573574178709E+00  
o -.36719469138846E+01 0.18937154212567E+01 0.33609080037752E+01  
o -.37805995659167E+01 0.39636547776633E+01 0.17116405732141E+01  
h -.14770781184644E+01 0.32260170773504E+00 0.31334708962682E+01  
h -.16561245450270E+01 0.42311005227405E+01 0.21259641892999E-01  
h 0.28663425803905E+00 0.26974300831000E+01 -.40431687005352E-01  
h -.34990420535449E+01 0.11201171964274E+01 0.39183879672753E+01  
h -.36855041872067E+01 0.46848462968088E+01 0.10707408040312E+01  
o 0.24306822182444E+01 0.19620363027101E+01 0.10273391615346E+01  
c 0.31192944462328E+01 0.22850431442651E+01 -.20263961222441E+00  
o 0.23333728948680E+01 0.31190618577949E+01 -.10337032551373E+01  
c 0.20969540590314E+01 0.44574249267371E+01 -.51095674278171E+00  
c 0.34215389157997E+01 0.51928025513110E+01 -.28861216622160E+00  
c 0.43277568889632E+01 0.43792713762687E+01 0.62692143529555E+00  
c 0.44728576527297E+01 0.29415816189173E+01 0.12881576209593E+00  
o 0.31806525923446E+01 0.64930010684248E+01 0.25481455226031E+00  
o 0.37267613970572E+01 0.44231551891943E+01 0.19247391186652E+01  
o 0.51918319966700E+01 0.22423420132886E+01 0.11350969809734E+01  
h 0.39218006685392E+01 0.53414818410921E+01 -.12618351997923E+01  
h 0.53336032438180E+01 0.48398842201026E+01 0.66160789209005E+00  
h 0.50359440039434E+01 0.29657102284243E+01 -.82623449928932E+00  
h 0.30681915154776E+01 0.63620444256618E+01 0.12118013250621E+01  
h 0.40758295558720E+01 0.36526665156476E+01 0.24047947317579E+01  
h 0.49349813745373E+01 0.12960539463612E+01 0.10761547919086E+01  
h 0.15511838482236E+01 0.43844653489794E+01 0.44596096962724E+00  
h 0.32638037265070E+01 0.13643806343507E+01 -.78657012955140E+00  
c 0.12625178563032E+01 0.51572758089573E+01 -.15746125454280E+01  
o 0.29961591487635E-01 0.44762300186928E+01 -.18494662777767E+01  
h 0.27346274720442E+00 0.36045617148177E+01 -.21956993076474E+01  
h 0.99854002532834E+00 0.61630158738398E+01 -.12208424364778E+01  
h 0.18666169207474E+01 0.52545640144597E+01 -.24961501119081E+01  
c -.52968938477389E+01 -.31981976443910E+01 -.12635148670435E+01  
h -.53657002016225E+01 -.41820045274483E+01 -.77159812446477E+00  
h -.55136375798388E+01 -.24199719253702E+01 -.50480272152527E+00  
h -.60645824559485E+01 -.31535160797961E+01 -.20506801202693E+01  
c -.29028101976251E+01 -.30634262214297E+01 -.84915696146529E+00

c -.25838253696262E+01 -.45034362658439E+01 -.44537446199745E+00  
n -.39628167162799E+01 -.30542287186344E+01 -.18656885439936E+01  
h -.32071185190297E+01 -.25474312976234E+01 0.87304151902520E-01  
h -.39184281327245E+01 -.21743804477333E+01 -.23802833871740E+01  
c -.16141776837012E+01 -.24073414952097E+01 -.13969055521685E+01  
c -.14646786939986E+01 -.91445725882610E+00 -.10524046504762E+01  
c -.14530297948656E+00 -.39454947466994E+00 -.16396060445872E+01  
h -.73269474581329E+00 -.29383781530199E+01 -.99702897559709E+00  
h -.16013005335477E+01 -.25542524848042E+01 -.24952491051766E+01  
h -.14186456192131E+01 -.83679401871496E+00 0.47323200570718E-01  
h 0.20682080641372E-01 0.66200845264109E+00 -.13716746128627E+01  
h 0.71484226920743E+00 -.98435489321363E+00 -.12773373293735E+01  
h -.16416549051396E+00 -.46753569144105E+00 -.27423020850095E+01  
c -.26412408704396E+01 -.50437208858276E-01 -.15248903487218E+01  
h -.24693604150807E+01 0.10036704439869E+01 -.12470839887494E+01  
h -.27525016885873E+01 -.97362064610189E-01 -.26241446803328E+01  
h -.35936958494510E+01 -.35805625332729E+00 -.10604476660440E+01  
o -.21409435275329E+01 -.47833351309218E+01 0.69251495669795E+00  
n -.27485330650370E+01 -.54194688479716E+01 -.14175155518141E+01  
c -.24109640234508E+01 -.68243594073299E+01 -.12154328229809E+01  
h -.31791184728054E+01 -.50753661051675E+01 -.22741894982688E+01  
h -.29322659723591E+01 -.72179985569021E+01 -.32967200789033E+00  
h -.27209327591855E+01 -.73904040122571E+01 -.21039351087466E+01  
h -.13268697344354E+01 -.69459518238722E+01 -.10669649240835E+01

dglu lys

c -.16682782050218E+01 0.55236102520995E+00 0.40405826344547E+01  
c -.26217043847384E+00 0.28266971588676E+00 0.46117522048363E+01  
n -.18451557533517E+01 0.19811119791930E+01 0.37750270982254E+01  
c 0.50426847201667E-01 -.12002136091679E+01 0.48825839864490E+01  
c 0.15600033600832E+01 -.15096173334945E+01 0.48526735072451E+01  
c 0.20444559452007E+01 -.19748866966130E+01 0.34850064971271E+01  
n 0.17114666878953E+01 -.10342718818973E+01 0.23766671749873E+01  
h -.24338221775284E+01 0.26989745755337E+00 0.47925234984583E+01  
h 0.47520994045861E+00 0.73033519848553E+00 0.39195937370990E+01  
h -.16821068153314E+00 0.85545481578464E+00 0.55488688458115E+01  
h -.11040432414107E+01 0.23054333325907E+01 0.31501164874316E+01  
h -.35760530958353E+00 -.14797260381973E+01 0.58686174104161E+01  
h 0.21370319776593E+01 -.62593857645127E+00 0.51828596993138E+01  
h 0.18079031607836E+01 -.23236104613738E+01 0.55553691126758E+01  
h 0.31366388623076E+01 -.21145074128777E+01 0.34798910013501E+01  
h 0.15761829387611E+01 -.29368685592499E+01 0.32189177530231E+01  
h 0.21359964616624E+01 -.13782735689954E+01 0.14554334335034E+01  
h 0.68889944356325E+00 -.87941492540834E+00 0.22453653352979E+01  
h 0.21121837677988E+01 -.98985359689794E-01 0.25260760144390E+01  
h -.46245646012235E+00 -.18540815902346E+01 0.41528756937617E+01  
c -.18832095743145E+01 -.32059170307876E+00 0.27995884154085E+01  
n -.30388717900106E+01 -.10047167425905E+01 0.27128388520831E+01  
c -.33773424403339E+01 -.19196324766049E+01 0.16228890672055E+01

h -3.7076509708833E+01 -8.7633286331841E+00 0.34661880401986E+01  
h -4.1449344768178E+01 -1.4778081348927E+01 0.96956082805322E+00  
h -2.4660324911071E+01 -2.1058137340427E+01 0.10400595943652E+01  
h -3.7438023209807E+01 -2.8678374852315E+01 0.20446313275497E+01  
o -9.8690244027463E+00 -3.7465714630886E+00 0.19099423097444E+01  
c -3.1574564380020E+01 0.23356751390163E+01 0.32118309678095E+01  
h -3.2136192993700E+01 0.34313316405031E+01 0.31210112387891E+01  
h -3.9444376407228E+01 0.20178216732834E+01 0.39175804521114E+01  
h -3.3617516823593E+01 0.18923309154430E+01 0.22171983179591E+01  
c 0.28453609445518E+01 -4.1881192346208E+01 -4.4881271843800E+01  
c 0.37945929456202E+01 -4.2034655670797E+01 -3.4427744657509E+01  
c 0.36147656139116E+01 -3.3881391745503E+01 -2.3269747249127E+01  
c 0.16969942157805E+01 -3.3826168374396E+01 -4.4331676696054E+01  
c 0.15250588345445E+01 -2.5788867660765E+01 -3.3029554147676E+01  
c 0.24542544595474E+01 -2.5482105770258E+01 -2.2310922977832E+01  
o 0.35601071902426E+00 -1.8534618006340E+01 -3.2640351572145E+01  
c 0.14454850997928E+00 -9.6508680740953E+00 -2.2607011580679E+01  
c 0.10563275908829E+01 -8.1128082859770E+00 -1.2246479097409E+01  
c 0.21997616397717E+01 -1.6910931062187E+01 -1.1008792344531E+01  
c -1.1321633999801E+01 -2.5046184632183E+00 -2.3697465799871E+01  
c -1.8996875231723E+01 -2.9106725142585E-01 -1.1999835878450E+01  
o 0.29473950250197E+01 -1.6715893396660E+01 -5.3877792830939E-01  
o 0.31226976435579E+01 -5.0004539555222E+01 -5.5481141744820E+01  
o 0.45894451163692E+01 -3.3506638205288E+01 -1.3850381944344E+01  
h 0.46551523841995E+01 -4.8751896513139E+01 -3.5003050110242E+01  
h 0.94889943690195E+00 -3.3702488589689E+01 -5.2315282872778E+01  
h 0.24261683859807E+01 -4.9178240560515E+01 -6.2178294688149E+01  
h 0.42931460910019E+01 -2.7151943657735E+01 -6.9197284816384E+00  
c -3.1215465367933E+01 0.65201925560695E+00 -1.2910362844673E+01  
c -3.5650902041226E+01 0.11425373547872E+01 -2.5421887459436E+01  
c -2.8051634746470E+01 0.91393523127649E+00 -3.7011715270971E+01  
c -1.5864812788552E+01 0.21676811473648E+00 -3.6233006867393E+01  
o -3.8839447107120E+01 0.81125376342123E+00 -1.6380212192849E+00  
o -4.7526348595709E+01 0.18351618525392E+01 -2.4942615684368E+01  
h -1.5556259842795E+01 -3.7337306037824E+00 -2.2047507060593E+00  
h -3.1681329847724E+01 0.12799826146073E+01 -4.6687409061882E+01  
h -9.5783530518778E+00 0.10073383732718E+00 -4.5101234373920E+01  
h -4.6826069042795E+01 0.13114478689452E+01 -4.1143108064417E+00  
h -5.0046742816032E+01 0.21342016467481E+01 -3.3814149588875E+01  
o 0.85456154198743E+00 0.18609030896266E+00 -2.8468606169730E+00  
c 0.19129082841491E+01 0.11992435722902E+01 -3.4611706208257E+00  
o 0.21440914057283E+01 0.17170161789879E+01 -1.6228511149117E+01  
c 0.98552251616729E+00 0.24013989330250E+01 -2.1786387113172E+01  
c 0.68617364896290E+00 0.36417826418987E+01 -1.3388905909087E+01  
c 0.37013123471088E+00 0.31922810074054E+01 0.96239384602096E-01  
c 0.14822431342308E+01 0.22801432054580E+01 0.64940559040012E+00  
o -4.0929654408401E+00 0.43706294421977E+01 -1.8840077136832E+01  
o -8.8385918930533E+00 0.24853591807613E+01 0.96132163529900E-01  
o 0.10560041132518E+01 0.16962200017927E+01 0.18817643734327E+01

h 0.15672772613967E+01 0.43107314796711E+01 -.13343807805615E+01  
h 0.21843400439168E+00 0.40624220578368E+01 0.75773505053146E+00  
h 0.23732732097705E+01 0.28905866173544E+01 0.87176693406866E+00  
h -.12116869198271E+01 0.39735572282990E+01 -.15017369385335E+01  
h -.78759043881780E+00 0.16801197072991E+01 -.44676559190590E+00  
h 0.17660187215764E+00 0.13102794255814E+01 0.16737658456486E+01  
h 0.11848261500560E+00 0.17205451487218E+01 -.21457719273014E+01  
h 0.28627306310338E+01 0.73009414412750E+00 -.44959275615907E-01  
c 0.13192811088793E+01 0.26681068116212E+01 -.36348242767204E+01  
o 0.15024233864260E+01 0.14306040906931E+01 -.43366440022270E+01  
h 0.23078078950668E+01 0.10273031478784E+01 -.39800391259421E+01  
h 0.47319853804839E+00 0.31864738483178E+01 -.41090622545256E+01  
h 0.22176490208264E+01 0.33088000659127E+01 -.37098569015963E+01

dglu met

c -.13176372886805E+01 -.62355679074105E+01 -.10866383479147E+01  
c 0.87931708058770E-01 -.62801064656008E+01 -.11809073216845E+01  
c 0.81907876172306E+00 -.50898222946549E+01 -.11722796378605E+01  
c -.20140059526996E+01 -.50230044837889E+01 -.98326879567769E+00  
c -.12620340840018E+01 -.38396324551356E+01 -.97109744478625E+00  
c 0.14484454497467E+00 -.38324105836610E+01 -.10598948391000E+01  
o -.19778015086199E+01 -.26690973369652E+01 -.86329037194306E+00  
c -.13163880167636E+01 -.14746260797222E+01 -.81565942230044E+00  
c 0.64415814280936E-01 -.13835587156230E+01 -.86931833141156E+00  
c 0.88426556567841E+00 -.25773508875213E+01 -.10390432810067E+01  
c -.22368611002188E+01 -.33024332952322E+00 -.77918668564817E+00  
c -.20965492887657E+01 0.68867124258809E+00 0.19084849322109E+00  
o 0.21364762320174E+01 -.25338491909722E+01 -.11861402513390E+01  
o -.19606713345363E+01 -.74510817514665E+01 -.11043350563028E+01  
o 0.21688324277682E+01 -.51408915705864E+01 -.12748476214954E+01  
h 0.60274701380644E+00 -.72405578264421E+01 -.12649003409095E+01  
h -.31049395618177E+01 -.49754397193038E+01 -.91150580282966E+00  
h -.29157886915396E+01 -.73017164766192E+01 -.10406095485664E+01  
h 0.24703485971150E+01 -.41928055181248E+01 -.12679401722877E+01  
c -.28956594100446E+01 0.18479970388530E+01 0.12524264389617E+00  
c -.38286361713368E+01 0.19842309175578E+01 -.93651638009358E+00  
c -.39905906054680E+01 0.94595520061243E+00 -.18700959369205E+01  
c -.32079799519617E+01 -.21782385351718E+00 -.17955407824061E+01  
o -.28268346478114E+01 0.28724268802160E+01 0.10145464800432E+01  
o -.45477445271179E+01 0.31528304232907E+01 -.96836199309932E+00  
h -.13850787956293E+01 0.57786055361824E+00 0.10153902847654E+01  
h -.47228448102721E+01 0.10613573939383E+01 -.26786519221322E+01  
h -.32969598504098E+01 -.99165690864191E+00 -.25614624831667E+01  
h -.21705249013907E+01 0.26461697405269E+01 0.17049149708198E+01  
h -.51211166608730E+01 0.31367165606925E+01 -.17496295167621E+01  
o 0.65202680797305E+00 -.13320364090351E+00 -.75409145082208E+00  
c 0.14902751865609E+01 0.23614391564084E+00 -.18873881706485E+01  
o 0.73967581396937E+00 0.30424285547903E+00 -.30803565055031E+01

c -3.1552782836177E+00 0.13048499973520E+01 -.30593677798013E+01  
c 0.27205725074042E+00 0.26998202206078E+01 -.28308996740771E+01  
c 0.10989050311229E+01 0.27146676697854E+01 -.15350361432931E+01  
c 0.21370571744894E+01 0.15876273400453E+01 -.15518196145844E+01  
o -.76785969374660E+00 0.36771476288818E+01 -.27775268661775E+01  
o 0.20694245352169E+00 0.26491382188807E+01 -.40410328559222E+00  
o 0.29679157520613E+01 0.15244275866408E+01 -.40599132220687E+00  
h 0.92310026026210E+00 0.29655243203582E+01 -.36829142626049E+01  
h 0.16122350783916E+01 0.36853404695098E+01 -.14341621728370E+01  
h 0.28081653899998E+01 0.17897011900282E+01 -.24074699769553E+01  
h -.10871484445029E+01 0.36762407135019E+01 -.18568702105615E+01  
h -.22420916412753E+00 0.17727888110038E+01 -.42502417084745E+00  
h 0.24563177177333E+01 0.16822028657380E+01 0.42142491593436E+00  
h -.10322630556833E+01 0.10628976017013E+01 -.22566870818883E+01  
h 0.22452519988566E+01 -.54407244883398E+00 -.20423322194293E+01  
c -.10162228961836E+01 0.11644069324552E+01 -.44008020596050E+01  
o -.15149810882788E+01 -.16518308917744E+00 -.45904326566150E+01  
h -.75631342346495E+00 -.75396377392339E+00 -.44530093662499E+01  
h -.18803180545292E+01 0.18425105354885E+01 -.44322888124009E+01  
h -.31424456490610E+00 0.14419140388732E+01 -.52104447358954E+01  
c 0.20153671184858E+01 0.35608153813405E+01 0.25983035494748E+01  
h 0.22166002808364E+01 0.42129848818494E+01 0.17352157607937E+01  
h 0.29280489373960E+01 0.35089356821792E+01 0.32131573439815E+01  
h 0.12055502183395E+01 0.40188138266896E+01 0.32002170898703E+01  
c 0.12768052729219E+01 0.13160318002970E+01 0.31924959749224E+01  
c -.13361206590653E+00 0.16381091565050E+01 0.36864480782574E+01  
o -.10082193134139E+01 0.20140871148669E+01 0.28828931044467E+01  
c 0.13311464235891E+01 -.14675991922933E+00 0.26971517708383E+01  
c 0.27665031743883E+01 -.66732309197328E+00 0.28139501296670E+01  
s 0.30187113679170E+01 -.22978516439655E+01 0.20109200326398E+01  
c 0.42196201261339E+01 -.17792338823179E+01 0.73376492411688E+00  
n 0.16812990951128E+01 0.22121878046523E+01 0.21084378145920E+01  
h 0.19905232616348E+01 0.14394046785168E+01 0.40310497281014E+01  
h 0.65215429212374E+00 -.78972309580189E+00 0.32863000916961E+01  
h 0.99435548986815E+00 -.17717630168637E+00 0.16471046866998E+01  
h 0.34584472820895E+01 0.46263248619740E-01 0.23358589211828E+01  
h 0.30471570525614E+01 -.75096356999644E+00 0.38783594889818E+01  
h 0.44013430043263E+01 -.26516361327553E+01 0.90132213158635E-01  
h 0.38025779619628E+01 -.96122985235726E+00 0.12922604291897E+00  
h 0.51631126994612E+01 -.14717432032895E+01 0.12109991565032E+01  
h 0.86142670319088E+00 0.23199137462488E+01 0.14971018991180E+01  
n -.37520638880576E+00 0.14431644309449E+01 0.50061891874574E+01  
c -.16969544976369E+01 0.15930320307094E+01 0.56101894545034E+01  
h -.23647578127734E+01 0.20146937090027E+01 0.48484577586158E+01  
h -.20905513988893E+01 0.61899017690881E+00 0.59394851753756E+01  
h -.16462041595707E+01 0.22768768634397E+01 0.64702341509704E+01  
h 0.40162466729531E+00 0.11411936048551E+01 0.55841295086766E+01

dglu phe

c 0.10751277351811E+01 0.62407987113244E+00 0.10224890425172E+01  
c 0.24381921844242E+01 0.97543907873704E+00 0.10966317849304E+01  
c 0.28226727566068E+01 0.23008216378487E+01 0.87930046820758E+00  
c 0.80025041977497E-01 0.15721781313950E+01 0.74297388758785E+00  
c 0.48514497538655E+00 0.28966141538952E+01 0.52802753367968E+00  
c 0.18375300027609E+01 0.32954056917735E+01 0.58297062220588E+00  
o -.52065304084530E+00 0.38060243243226E+01 0.29172392014814E+00  
c -.20515852192727E+00 0.51045588169641E+01 0.83614616000802E-02  
c 0.11025960845548E+01 0.55574130205192E+01 -.18285053590667E-01  
c 0.22113121497334E+01 0.46816334441057E+01 0.33718721775971E+00  
c -.13943133972595E+01 0.59218971861617E+01 -.24696321282088E+00  
c -.14932017582253E+01 0.72265092227308E+01 0.29492496071040E+00  
o 0.34049741888582E+01 0.50876684125676E+01 0.41163155565904E+00  
o 0.78256245707010E+00 -.69911065733251E+00 0.12520947818853E+01  
o 0.41349872880566E+01 0.26293165200605E+01 0.94988458617080E+00  
h 0.31903055833609E+01 0.21452279638010E+00 0.13195461162794E+01  
h -.98186690767962E+00 0.13128607333677E+01 0.69463022565485E+00  
h -.17496506963539E+00 -.82736221425524E+00 0.11810422219705E+01  
h 0.41796127409143E+01 0.36077771536339E+01 0.78230616474001E+00  
c -.26087352811409E+01 0.80280351526880E+01 0.80351186133631E-02  
c -.36722424513511E+01 0.75118480699220E+01 -.77698820277308E+00  
c -.35765640301487E+01 0.61997350289993E+01 -.12892826207884E+01  
c -.24478556355189E+01 0.54054113579146E+01 -.10332276462450E+01  
o -.27523546786406E+01 0.93144777379617E+01 0.47049657666308E+00  
o -.47351040181700E+01 0.83236473444592E+01 -.98934286722307E+00  
h -.70740506745094E+00 0.76082748180865E+01 0.95822635000435E+00  
h -.43944464440561E+01 0.58263400843654E+01 -.19169568243224E+01  
h -.23616383220943E+01 0.44052509289891E+01 -.14665307085432E+01  
h -.18802025067215E+01 0.96435175022670E+01 0.73767695565119E+00  
h -.52794195280030E+01 0.79666260798386E+01 -.17343219415246E+01  
o 0.13417955450513E+01 0.68785188955108E+01 -.37468030974903E+00  
c 0.22412918186819E+01 0.69698432980215E+01 -.15186829369702E+01  
o 0.17537219295957E+01 0.62135515974638E+01 -.26055629939055E+01  
c 0.45173557508657E+00 0.66554689647883E+01 -.30772046604215E+01  
c 0.57461442671824E+00 0.80805229123370E+01 -.36182619359846E+01  
c 0.10788851469866E+01 0.90056532161157E+01 -.24996809206314E+01  
c 0.23677990748441E+01 0.84553853402272E+01 -.18774933348794E+01  
o -.67220857433178E+00 0.85527089420549E+01 -.41308123335307E+01  
o 0.34049372992938E-01 0.91953131544747E+01 -.15216970964091E+01  
o 0.28256768979058E+01 0.92371048355223E+01 -.78528476051414E+00  
h 0.12933207455617E+01 0.80886865968705E+01 -.44574230249609E+01  
h 0.12704151551480E+01 0.10012777106935E+02 -.29037681338769E+01  
h 0.31605370433562E+01 0.85080083187741E+01 -.26432908334775E+01  
h -.11707162812330E+01 0.88833672823576E+01 -.33615953552831E+01  
h -.97935920763185E-01 0.83414991724068E+01 -.10673605670676E+01  
h 0.21043672508615E+01 0.92662493713875E+01 -.13795497528075E+00  
h -.27462620943358E+00 0.66231886663128E+01 -.22456781002285E+01  
h 0.32104671214270E+01 0.65347754394896E+01 -.12452727915332E+01  
c 0.31151496420403E-01 0.56212197541497E+01 -.41056012931809E+01

o -.89830725372638E-01 0.43268198110824E+01 -.35021988849505E+01  
h 0.76495705953924E+00 0.41449137373596E+01 -.30808172485278E+01  
h -.96016636540245E+00 0.58801898664007E+01 -.45026267661404E+01  
h 0.75834124911337E+00 0.56075118794716E+01 -.49393932773946E+01  
c -.87210294686117E+01 0.78216503075208E+01 -.52505868401422E+01  
h -.97531718101402E+01 0.75221198525492E+01 -.50154732804714E+01  
h -.80537107549243E+01 0.69565480957101E+01 -.50669606528641E+01  
h -.86782746250803E+01 0.80793259924570E+01 -.63207982961605E+01  
c -.52332193034301E+01 0.11076282976236E+02 -.39498419513728E+01  
c -.44160419016912E+01 0.10784098221781E+02 -.28367144912869E+01  
c -.30140131301756E+01 0.10899539048845E+02 -.29223886832632E+01  
c -.24137242802709E+01 0.11324181475203E+02 -.41242136497187E+01  
c -.32246930219199E+01 0.11660116944901E+02 -.52275486197245E+01  
c -.46248056580084E+01 0.11536803390238E+02 -.51398063417832E+01  
h -.48689836348211E+01 0.10443343458234E+02 -.19012778565209E+01  
h -.24056057573338E+01 0.10659044315430E+02 -.20427123446379E+01  
h -.27650548927590E+01 0.12015531236790E+02 -.61559429783699E+01  
c -.67107217208585E+01 0.10753865529650E+02 -.39191804146470E+01  
c -.69960747750631E+01 0.94262694271113E+01 -.46728392780961E+01  
n -.83760791136834E+01 0.90142578836906E+01 -.44612025002574E+01  
h -.68489368617095E+01 0.95950412664507E+01 -.57567679167698E+01  
h -.84702425838046E+01 0.87825659558146E+01 -.34681321326281E+01  
h -.70464780745794E+01 0.10633538966495E+02 -.28742852357963E+01  
h -.73234179212482E+01 0.11543637247755E+02 -.43831199068364E+01  
c -.59736933933271E+01 0.83840058832205E+01 -.41958357896327E+01  
o -.61787758069897E+01 0.77269609054684E+01 -.31476992176057E+01  
n -.48682823746837E+01 0.82266039660955E+01 -.49555195854076E+01  
c -.37050945781311E+01 0.74815865713318E+01 -.44758402473032E+01  
h -.52507022225156E+01 0.11798599917802E+02 -.60028453405600E+01  
h -.47164544189225E+01 0.89211139481322E+01 -.56810193336905E+01  
h -.39026492377206E+01 0.63989926354817E+01 -.45004656034080E+01  
h -.28487152475925E+01 0.77178824508636E+01 -.51199597749033E+01  
h -.34603701366202E+01 0.77781593933516E+01 -.34448067451637E+01  
h -.13255543861400E+01 0.11406689021963E+02 -.42001493469990E+01

dglu pro

c 0.65199985992518E+00 -.63670171614655E+01 0.10000071703847E+00  
c 0.14867464756349E+01 -.61166353247362E+01 0.12087024640870E+01  
c 0.18500024659510E+01 -.48062119874484E+01 0.15234248963516E+01  
c 0.16515854218265E+00 -.53287824343740E+01 -.70495530484623E+00  
c 0.55005229635728E+00 -.40209395878039E+01 -.38192796722536E+00  
c 0.13920423746518E+01 -.37185248303456E+01 0.70971392529566E+00  
o 0.48512953505042E-01 -.30303664485082E+01 -.11853063486514E+01  
c 0.40061508408611E+00 -.17258469491728E+01 -.98055455219652E+00  
c 0.12279022764296E+01 -.13471334257495E+01 0.68532346675989E-01  
c 0.17238706578632E+01 -.23397562551527E+01 0.10108582781846E+01  
c -.27667025483704E+00 -.83760482708752E+00 -.19212773780379E+01  
c -.16317618579092E+01 -.10898048636979E+01 -.22324205284619E+01  
o 0.23752356103362E+01 -.20264235574243E+01 0.20589773129184E+01



o 0.34906590839236E+00 -7.6837382008524E+01 -1.13647924709742E+00  
o 0.26451391540768E+01 -4.5897831897583E+01 0.25993085472644E+01  
c -.22842926202744E+01 -.28066396108414E+00 -.31642118451446E+01  
c -.16099953154901E+01 0.78671223562990E+00 -.38005232011332E+01  
c -.24636539382749E+00 0.10007582202713E+01 -.35270200438836E+01  
c 0.41619862123688E+00 0.19587220782962E+00 -.25842222486754E+01  
o -.35910532350868E+01 -.46413804578432E+00 -.35557195892891E+01  
o -.22926523519431E+01 0.15769233602783E+01 -.46861980956992E+01  
o 0.13337725398716E+01 -.65448367903222E-02 0.36281924279108E+00  
c 0.26782960207735E+01 0.50120837488751E+00 0.53567670488882E+00  
o 0.30724308274219E+01 0.12602557421280E+01 -.58396296481780E+00  
c 0.22891150416624E+01 0.24681433090970E+01 -.78898167447652E+00  
c 0.24142216628780E+01 0.34025727232867E+01 0.41272171853881E+00  
c 0.19946505263419E+01 0.26617739824814E+01 0.16772098273961E+01  
c 0.27356879462130E+01 0.13419196397894E+01 0.18271179857333E+01  
o 0.15899737549276E+01 0.45542485649713E+01 0.21095281845766E+00  
o 0.58607910495249E+00 0.24245586315363E+01 0.15861709527946E+01  
o 0.21052758932587E+01 0.68032603009323E+00 0.29163039263732E+01  
c 0.28506965993877E+01 0.31199367283315E+01 -.20406852838199E+01  
o 0.27647921130256E+01 0.22710353428150E+01 -.31886722308531E+01  
c -.26773955346080E+01 0.24160525904130E+00 0.79632022251545E+00  
c -.38711347077677E+01 0.43375166247330E+00 0.17490828187855E+01  
n -.14590009081047E+01 0.38302904972772E+00 0.16424461336541E+01  
c -.33192155798306E+01 0.15238434147749E+01 0.26780273757830E+01  
c -.18835658293032E+01 0.10395397901150E+01 0.29135106859695E+01  
o -.37488263864971E+01 0.13976547124883E+01 -.10604742452366E+01  
n -.16793955085242E+01 0.21223533125988E+01 -.35342902874343E+00  
c -.15600304115189E+01 0.32681926731558E+01 -.12357458816956E+01  
c -.78825581577983E+00 -.88409766724061E+00 0.19398563475363E+01  
h -.47854105542543E+01 0.71424559012092E+00 0.12078522250721E+01  
h -.40544403566603E+01 -.49328109943084E+00 0.23189271688766E+01  
h -.33297061208230E+01 0.24984587965405E+01 0.21640872842029E+01  
h -.38711855688127E+01 0.16251823053260E+01 0.36235769213819E+01  
h -.11929611968049E+01 0.18529409242796E+01 0.31874225716613E+01  
h -.18740068570594E+01 0.29251362864571E+00 0.37299511486568E+01  
h -.26818293212776E+01 -.74002667913552E+00 0.29734361545730E+00  
h 0.18548383204451E+01 -.69479129043971E+01 0.18150178484929E+01  
h -.50071108305333E+00 -.55050062826134E+01 -.15547591577902E+01  
h -.21648577761743E+01 -.19180808612775E+01 -.17548939096643E+01  
h -.21875774997644E+00 -.77435851578294E+01 -.91947438117359E+00  
h 0.27511422248815E+01 -.36083147958721E+01 0.26742441125679E+01  
h 0.29452207595383E+00 0.18037736589498E+01 -.40357262980040E+01  
h 0.1474577717960E+01 0.35597085264113E+00 -.23777370846745E+01  
h -.40872982663173E+01 -.83776230112001E+00 -.28125148137505E+01  
h -.32412255565708E+01 0.13972693073800E+01 -.45379800298614E+01  
h 0.33814236148906E+01 -.34149951347099E+00 0.57927460273391E+00  
h 0.12317145468015E+01 0.21909735286990E+01 -.93352092002205E+00  
h 0.34623249855670E+01 0.37530839160188E+01 0.50249621732791E+00  
h 0.22017011074067E+01 0.32857826085133E+01 0.25631866846197E+01

h 0.38050814498963E+01 0.15505333914194E+01 0.20377359974912E+01  
h 0.69897595098613E+00 0.42958823644794E+01 0.50274339579472E+00  
h 0.39803885233367E+00 0.15466793714202E+01 0.19764261972511E+01  
h 0.22436792144549E+01 -.27707380940326E+00 0.27790908801955E+01  
h 0.22631734767719E+01 0.40198824877793E+01 -.22677797762310E+01  
h 0.38971166872347E+01 0.34242710597774E+01 -.18510274791633E+01  
h 0.33233692506251E+01 0.15022824011431E+01 -.30030146818955E+01  
h -.18309218294399E+01 0.41970015623503E+01 -.70471092780475E+00  
h -.52776118413235E+00 0.33656537711034E+01 -.16069463604356E+01  
h -.22247321412280E+01 0.31333575038760E+01 -.20968877309811E+01  
h 0.13484215802883E+00 -.67240728223816E+00 0.25042657168028E+01  
h -.49749630943762E+00 -.13850458818735E+01 0.10162421856720E+01  
h -.14093348888412E+01 -.15757705378496E+01 0.25398404688378E+01  
c -.27539405319992E+01 0.13081150834517E+01 -.31269056246621E+00  
h -.94786699525142E+00 0.19397115792719E+01 0.33497128177304E+00

dglu ser

c 0.14065321643758E+01 -.19310701295302E+01 -.18456976352218E+01  
h 0.10167590022052E+01 -.19067300712959E+01 -.28753128133779E+01  
h 0.95514930006297E+00 -.10942614968353E+01 -.12764128266677E+01  
h 0.10892336520661E+01 -.28782611503809E+01 -.13781497453946E+01  
c 0.34625031664580E+01 -.19118345421041E+01 -.53254932541945E+00  
c 0.37569589468796E+01 -.33478615457854E+01 -.86226483806737E-01  
o 0.41001725111386E+01 -.36015506941614E+01 0.10927447599037E+01  
c 0.47508842970290E+01 -.10941568784491E+01 -.48198504320242E+00  
n 0.28793822685901E+01 -.18697984512646E+01 -.18793613480944E+01  
o 0.43613793583865E+01 0.25262971161281E+00 -.80806201964975E+00  
h 0.27790512247789E+01 -.14811923525138E+01 0.22435283512247E+00  
h 0.51813600758540E+01 -.11644322091544E+01 0.52961397828033E+00  
h 0.54789622791686E+01 -.14823639415105E+01 -.12189617196740E+01  
h 0.31561644672923E+01 -.98460636249056E+00 -.23089754829048E+01  
h 0.50524557746415E+01 0.86976832440902E+00 -.52942042337360E+00  
n 0.36310698268131E+01 -.42736416147677E+01 -.10541471398123E+01  
c 0.38932768065598E+01 -.56921831413124E+01 -.84185397447609E+00  
h 0.33713604586040E+01 -.38934972215066E+01 -.19657595480106E+01  
h 0.42584272429621E+01 -.61314800105939E+01 -.17807963800689E+01  
h 0.46629223119634E+01 -.57983024291384E+01 -.64366758684287E-01  
h 0.29847206820794E+01 -.62211316291805E+01 -.51506761764788E+00  
c 0.10627583833514E+01 -.43024591049655E+01 0.15198240531855E+01  
c -.13574002003781E+00 -.47589206676967E+01 0.92393536897142E+00  
c -.11081709991817E+01 -.38418662847428E+01 0.51687814951240E+00  
c 0.12831173979180E+01 -.29358235316862E+01 0.17552344599919E+01  
c 0.32482568827780E+00 -.20314372540427E+01 0.12909059613584E+01  
c -.88160680125147E+00 -.24364125930565E+01 0.67846992652813E+00  
o 0.65365372092441E+00 -.70176820424125E+00 0.14125507705567E+01  
c -.17811692529280E+00 0.25966617934606E+00 0.91816877260724E+00  
c -.13904399533322E+01 -.56609535197097E-01 0.32412425675061E+00  
c -.18001411069812E+01 -.14433960468510E+01 0.16217988715464E+00  
c 0.40888010128896E+00 0.15996591746876E+01 0.10252842902500E+01

c 0.17751719310587E+01 0.17734579648433E+01 0.70204710428046E+00  
o -.28735774528479E+01 -.17660984064989E+01 -.44242333695144E+00  
o 0.20001100963885E+01 -.52378442096716E+01 0.18477487044984E+01  
o -.22464974884658E+01 -.42994628792899E+01 -.64927967904608E-01  
h -.29459367009451E+00 -.58286740565199E+01 0.76234415239658E+00  
h 0.21985579310860E+01 -.25787482573468E+01 0.22310504470799E+01  
h 0.28738420108288E+01 -.47822865223360E+01 0.18620596254142E+01  
h -.27583852326997E+01 -.34956273699496E+01 -.33395841974497E+00  
c 0.23451987990485E+01 0.30472779189285E+01 0.80817919174960E+00  
c 0.15608148108540E+01 0.41389469652744E+01 0.12456569855983E+01  
c 0.20965344797849E+00 0.39608258724562E+01 0.15778541501148E+01  
c -.37083455622977E+00 0.26876587112273E+01 0.14641637801922E+01  
o 0.36701232642962E+01 0.32259309579403E+01 0.48606991952476E+00  
o 0.22333381365178E+01 0.53462994879370E+01 0.13153048287803E+01  
h 0.23994012207300E+01 0.94917145786453E+00 0.34699625049060E+00  
h -.39943955765609E+00 0.47990515293975E+01 0.19357699079538E+01  
h -.14152255311795E+01 0.25376902365952E+01 0.17357149936967E+01  
h 0.38741177823534E+01 0.41672350920777E+01 0.61900407762527E+00  
h 0.16227423278642E+01 0.60334489775047E+01 0.16203413283258E+01  
o -.21013274932137E+01 0.93637732627530E+00 -.31183722793202E+00  
c -.34810907877856E+01 0.10655668193905E+01 0.96066105395127E-01  
o -.36779748743413E+01 0.22085230396645E+01 0.90581906967846E+00  
c -.34489305726941E+01 0.34749605744197E+01 0.22558687141558E+00  
c -.43960654173043E+01 0.36251743512094E+01 -.96960421047200E+00  
c -.42564330933122E+01 0.24374719846792E+01 -.19140013659710E+01  
c -.43713858640423E+01 0.11129915266302E+01 -.11592442505047E+01  
o -.41380354680762E+01 0.48531254861744E+01 -.16555575128339E+01  
o -.29768902405903E+01 0.25722320378324E+01 -.25407213163020E+01  
o -.40572203216853E+01 0.89649768401891E-01 -.20951626789675E+01  
h -.54361175569453E+01 0.36783205625559E+01 -.60182374112658E+00  
h -.50549878814498E+01 0.24742261396198E+01 -.26796212021519E+01  
h -.54134075082004E+01 0.10161695994025E+01 -.79340405449241E+00  
h -.33898501208914E+01 0.46698997508559E+01 -.22490720069837E+01  
h -.27332072344694E+01 0.16788265889802E+01 -.28376332864789E+01  
h -.36765555195810E+01 -.66366330651635E+00 -.15935782772291E+01  
h -.24017549416553E+01 0.35166421620913E+01 -.12081673602231E+00  
h -.37500308685885E+01 0.21204317355325E+00 0.73636285089433E+00  
c -.37361091047246E+01 0.45509914054148E+01 0.12637813823112E+01  
o -.29007987296123E+01 0.44516955558961E+01 0.24251001780364E+01  
h -.31266903746983E+01 0.36131546820799E+01 0.28539315641574E+01  
h -.35435279825349E+01 0.55362104167266E+01 0.81771396992435E+00  
h -.48038716170269E+01 0.44964825886287E+01 0.15475589678481E+01  
dglu thr  
c -.15894189166096E+01 -.40824047782054E+01 0.36962906301160E+01  
c -.58507646287083E-01 -.41037403760637E+01 0.35499349595904E+01  
o 0.60535792022915E+00 -.30869514871660E+01 0.32629556206564E+01  
c -.23071060048882E+01 -.31315474618415E+01 0.26901692952208E+01  
n -.21161834536811E+01 -.54588276330814E+01 0.37924819381265E+01  
o -.23207528023694E+01 -.17950820996009E+01 0.32066502400243E+01

c -.18002489119593E+01 -.31750865082671E+01 0.12472835176878E+01  
h -.17631866621337E+01 -.36137310918398E+01 0.46816195152212E+01  
n 0.51127188488833E+00 -.53039114774255E+01 0.38091618041201E+01  
h -.33691869012841E+01 -.34395526319619E+01 0.27044574581607E+01  
h -.29763296738814E+01 -.54398013921574E+01 0.43405910715175E+01  
h -.15024811312500E+01 -.13506140261734E+01 0.29289188209319E+01  
h -.72070262754993E+00 -.29656133923321E+01 0.12090539618492E+01  
h -.19826575265228E+01 -.41563018043269E+01 0.78583655146309E+00  
h -.23328717348940E+01 -.24132537515513E+01 0.65801923048278E+00  
c 0.19516170209321E+01 -.55123406940473E+01 0.38402685625983E+01  
h -.14638976133979E+00 -.60232227047923E+01 0.41084207851535E+01  
h 0.22636585441349E+01 -.58766642535491E+01 0.48318668121388E+01  
h 0.22576080791815E+01 -.62432953477467E+01 0.30753288806132E+01  
h 0.24370904915817E+01 -.45487695074063E+01 0.36356575742571E+01  
c -.23750959371822E+01 -.61452062277461E+01 0.25155399399441E+01  
h -.14469972217628E+01 -.61765105041751E+01 0.19237803349006E+01  
h -.31651955131949E+01 -.56789898506174E+01 0.18994571825765E+01  
h -.26738021144723E+01 -.71828619484099E+01 0.27310892958083E+01  
c 0.66699495190163E+00 0.79400533597361E+01 -.14802907233901E+01  
c -.37767978302602E+00 0.78473597251016E+01 -.24237627170299E+01  
c -.94576103747574E+00 0.66006406167151E+01 -.27009741071268E+01  
c 0.11610374837914E+01 0.68124867497091E+01 -.80761371137244E+00  
c 0.57985884864772E+00 0.55705975735554E+01 -.10968214190016E+01  
c -.46654155793715E+00 0.54281277752789E+01 -.20350600231072E+01  
o 0.10748649978753E+01 0.44946713184562E+01 -.38876352821357E+00  
c 0.58425140194225E+00 0.32414817125627E+01 -.62977911650154E+00  
c -.39798752480299E+00 0.30213745617740E+01 -.15752331183589E+01  
c -.10264039056948E+01 0.41125587911945E+01 -.23055972364801E+01  
c 0.12041056402844E+01 0.22095535681157E+01 0.21160807200666E+00  
c 0.39445322223110E+00 0.12724297019897E+01 0.89335924802944E+00  
o -.19712298972633E+01 0.39108253779102E+01 -.31197317957940E+01  
o 0.11697772791478E+01 0.91991800955400E+01 -.12547299201106E+01  
o -.19480355712841E+01 0.65152395328059E+01 -.36097537570877E+01  
h -.74200206566898E+00 0.87454728456586E+01 -.29302548059429E+01  
h 0.19662025269993E+01 0.68780899305274E+01 -.69393104618764E-01  
h 0.18590755709378E+01 0.91436930592037E+01 -.57550600625023E+00  
h -.22040213988368E+01 0.55573315054852E+01 -.36498089230830E+01  
c 0.98492276292149E+00 0.25505105051021E+00 0.16585739071105E+01  
c 0.23972501313483E+01 0.18023181636800E+00 0.17471641421306E+01  
c 0.31988482652350E+01 0.11226518633746E+01 0.10825298875282E+01  
c 0.26094132018800E+01 0.21425849748519E+01 0.31814271195747E+00  
o 0.18518925798648E+00 -.63564098411538E+00 0.23054923116215E+01  
o 0.28861390995594E+01 -.85332758727085E+00 0.25145153821807E+01  
h -.69834349371006E+00 0.13353541039509E+01 0.85715935604286E+00  
h 0.42903545701185E+01 0.10427436043791E+01 0.11460143395056E+01  
h 0.32383764954146E+01 0.28547195174388E+01 -.22399051450401E+00  
h 0.68312246654001E+00 -.14028718764286E+01 0.26753722425788E+01  
h 0.38540236231636E+01 -.82298213695293E+00 0.25079418716326E+01  
o -.86036714027385E+00 0.17421047135642E+01 -.18198228365179E+01

c -.44271532762062E+00 0.12351411723555E+01 -.31261722312099E+01  
o 0.86440644462652E+00 0.72805288186318E+00 -.30882183346111E+01  
c 0.10440194553456E+01 -.40094520507002E+00 -.21800322324060E+01  
c 0.58723980561860E-01 -.15353810247598E+01 -.24972853187074E+01  
c -.13938145361899E+01 -.10271129677283E+01 -.25557005664824E+01  
c -.14743286960636E+01 0.17251419932800E+00 -.35084329141016E+01  
o 0.17621567614175E+00 -.25663653989190E+01 -.15158367732501E+01  
o -.18631943091393E+01 -.75976842741452E+00 -.12250581410205E+01  
o -.27792097021092E+01 0.72078520694623E+00 -.36258324710282E+01  
h 0.32456341597430E+00 -.19791632453410E+01 -.34746078669150E+01  
h -.20403406928015E+01 -.18367071123817E+01 -.29354122860842E+01  
h -.11791228440672E+01 -.19155633520664E+00 -.45096220908899E+01  
h -.40737357520227E+00 -.22803657325208E+01 -.78826953362213E+00  
h -.15960582606386E+01 0.14608705854955E+00 -.99656956897324E+00  
h -.28316199860970E+01 0.15009721953364E+01 -.30486177210018E+01  
h 0.89819172323765E+00 -.49134684726697E-01 -.11442090182863E+01  
h -.43784410253873E+00 0.20679057559682E+01 -.38456401397202E+01  
c 0.24875612871982E+01 -.83547311048554E+00 -.23894338831698E+01  
o 0.34198558564574E+01 0.21660533717384E+00 -.21166891154664E+01  
h 0.31255855205762E+01 0.97381426290919E+00 -.26460184435386E+01  
h 0.27196292306778E+01 -.16578791275061E+01 -.16987492515168E+01  
h 0.25974916200337E+01 -.11995316088752E+01 -.34294121889910E+01

dglu trp

c -.72488440756450E-02 0.12667612154082E-01 -.96404314842239E-01  
c 0.14030115050504E+01 -.40709849793325E-02 -.13034215799580E+00  
c 0.21082616324168E+01 0.12020923896919E+01 -.10936132417241E+00  
c -.73238900288001E+00 0.12116059263905E+01 -.31057405318484E-01  
c -.35860046925953E-02 0.24092037784720E+01 -.82168783330324E-02  
c 0.14032027336757E+01 0.24453788013499E+01 -.52025419696128E-01  
o -.74425753258645E+00 0.35678208287182E+01 0.61795726934686E-01  
c -.11493406643565E+00 0.47858128911658E+01 0.61812728979320E-01  
c 0.12635282228437E+01 0.49071343822680E+01 0.43443955099475E-01  
c 0.21113602757153E+01 0.37167658518486E+01 -.69245653303763E-02  
c -.10778112009876E+01 0.58903763577883E+01 0.14317524831332E+00  
c -.21711326393551E+01 0.58090390053366E+01 0.10383292293825E+01  
o 0.33693400568784E+01 0.37887654596619E+01 0.12517460483600E-01  
o -.62408508510206E+00 -.12162358577292E+01 -.12654064969362E+00  
o 0.34610207003949E+01 0.11773810450319E+01 -.13956079279696E+00  
h 0.19400760265588E+01 -.95490555304810E+00 -.17610910696669E+00  
h -.18260970584686E+01 0.12370566449137E+01 -.48402635653737E-02  
h -.15840365928637E+01 -.10877268050902E+01 -.10141803158160E+00  
h 0.37508055442239E+01 0.21279591092323E+01 -.86790066311994E-01  
c -.31090858796954E+01 0.68512257174191E+01 0.10952158174029E+01  
c -.29449387658289E+01 0.79889695268487E+01 0.27303024588082E+00  
c -.18761489324885E+01 0.80513565160319E+01 -.63320794742413E+00  
c -.94140655800293E+00 0.70090733731040E+01 -.70444329450322E+00  
o -.42113937767789E+01 0.68232373948598E+01 0.19219945929551E+01  
o -.38977175998579E+01 0.89784905583740E+01 0.38907686315055E+00

h -.22894380495814E+01 0.49305847037444E+01 0.16842410877081E+01  
h -.17662029879595E+01 0.89134953696695E+01 -.13022203820769E+01  
h -.13412270322650E+00 0.70422418392718E+01 -.14354146205201E+01  
h -.42109658994278E+01 0.59843927390991E+01 0.24056852838158E+01  
h -.36957085668739E+01 0.96627953299828E+01 -.26762188109662E+00  
o 0.18444855419608E+01 0.61407312758146E+01 0.26115214325490E+00  
c 0.28514261068786E+01 0.65752304941960E+01 -.69814445699035E+00  
o 0.22951626557061E+01 0.74852963537021E+01 -.16284147701098E+01  
c 0.18124174236028E+01 0.87317372380078E+01 -.10491217077429E+01  
c 0.29017775896421E+01 0.94609808661217E+01 -.25128168003278E+00  
c 0.35612371587230E+01 0.85289418590825E+01 0.77237564511978E+00  
c 0.39997810777974E+01 0.72293238679435E+01 0.90453168182004E-01  
o 0.23517167875326E+01 0.10623761978912E+02 0.36545678965206E+00  
o 0.27117530252889E+01 0.82750773830661E+01 0.18965601636578E+01  
o 0.46198858906729E+01 0.63441680640504E+01 0.10032373447687E+01  
h 0.36835184207168E+01 0.98162245529839E+01 -.94707879857533E+00  
h 0.44526213307329E+01 0.90196439222052E+01 0.11956442349250E+01  
h 0.47680354182289E+01 0.74782971822617E+01 -.66229851625465E+00  
h 0.17304301107582E+01 0.10293583922776E+02 0.10393707058535E+01  
h 0.18501508371090E+01 0.79651265478886E+01 0.15646605544044E+01  
h 0.39323043660413E+01 0.60681709733065E+01 0.16295651751464E+01  
h 0.96291126508382E+00 0.85182095953041E+01 -.38050284592830E+00  
h 0.32004146308090E+01 0.57112057118844E+01 -.12777531961863E+01  
c 0.13580217288541E+01 0.95762635957751E+01 -.22288302134210E+01  
o 0.28537830697266E+00 0.89710784850738E+01 -.29662683533083E+01  
h 0.64452905613194E+00 0.81608356952096E+01 -.33575220616176E+01  
h 0.98144128987377E+00 0.10537988217947E+02 -.18540916535823E+01  
h 0.22265660568012E+01 0.97685224008271E+01 -.28863436393794E+01  
c 0.44154860262793E+00 0.66251170191401E+01 0.33137189850669E+01  
h 0.11196014541376E+00 0.68032642552005E+01 0.22754401481875E+01  
h 0.14005747264876E+01 0.60842904456293E+01 0.32918503447476E+01  
h -.29619429261858E+00 0.59704033454221E+01 0.38077477760012E+01  
c -.46122995386710E+00 0.88265862927093E+01 0.40302926531732E+01  
c -.52442918623716E+00 0.96020293101763E+01 0.27015390480873E+01  
n 0.63260011544316E+00 0.78529031166165E+01 0.41049407514675E+01  
c -.18323833308363E+01 0.81627340408736E+01 0.43221862029073E+01  
c -.29132192773145E+01 0.91804417926966E+01 0.45446344614681E+01  
c -.40533827343204E+01 0.93927458506447E+01 0.37696849138491E+01  
c -.41278645459528E+01 0.10955712599077E+02 0.54099650372689E+01  
c -.29509620631268E+01 0.10158036390422E+02 0.56045267808310E+01  
c -.44748708343271E+01 0.12016279585766E+02 0.62722425293329E+01  
c -.24473791092238E+01 0.11492712778574E+02 0.75658120613442E+01  
c -.21055822636537E+01 0.10437619166932E+02 0.67117235008282E+01  
h -.27821997491463E+00 0.95791523449648E+01 0.48190672281381E+01  
n -.12055067899459E+01 0.10774121065323E+02 0.27553412178989E+01  
h 0.14908784079071E+01 0.83095416051077E+01 0.37828666535106E+01  
h -.16975864172195E+01 0.75328059005999E+01 0.52205238391557E+01  
h -.21102925121235E+01 0.75039360325461E+01 0.34828291310110E+01  
h -.43552155408555E+01 0.89124850223744E+01 0.28403771175777E+01

h -.18074354973133E+01 0.11719910160541E+02 0.84244777191653E+01  
c -.36136372915650E+01 0.12278345604605E+02 0.73452931678898E+01  
h -.53781298065967E+01 0.12615084259326E+02 0.61121505702771E+01  
h -.38488377975887E+01 0.13096418267496E+02 0.80339476304398E+01  
n -.47639055298699E+01 0.10466914063883E+02 0.42844523650452E+01  
o 0.36628048344027E-01 0.92102710273659E+01 0.16564407260638E+01  
c -.14324492845169E+01 0.11608916072310E+02 0.15833952627479E+01  
h -.17007694493125E+01 0.10987467285921E+02 0.36177038750479E+01  
h -.56438728722621E+01 0.10807555658942E+02 0.39142588485193E+01  
h -.67350362705177E+00 0.11364304694922E+02 0.82867178435686E+00  
h -.24373326951086E+01 0.11436344872057E+02 0.11620843218025E+01  
h -.13427886337168E+01 0.12666289608359E+02 0.18624430832325E+01  
h -.12130755950061E+01 0.98329265226821E+01 0.69067379024070E+01

dglu tyr

c -.32372026714946E+00 -.82642398027314E-01 0.10593499353789E+01  
c 0.10074045757053E+01 -.12454769831066E+00 0.58437524366794E+00  
c 0.16730382330417E+01 0.10562656133790E+01 0.25315574866191E+00  
c -.99448909992887E+00 0.11416227136511E+01 0.12485788465326E+01  
c -.30870748896119E+00 0.23157054829554E+01 0.91701002579448E+00  
c 0.10087383546374E+01 0.23171439304789E+01 0.39473021350449E+00  
o -.98465587896843E+00 0.34978303306840E+01 0.11398216919597E+01  
c -.42889356189752E+00 0.46808940011316E+01 0.75089396562347E+00  
c 0.83137922421066E+00 0.47574019523943E+01 0.18503117675894E+00  
c 0.16509421364593E+01 0.35650399816971E+01 0.35983999147959E-01  
c -.12842109279951E+01 0.58373830249722E+01 0.10487802864079E+01  
c -.18125511373517E+01 0.60099751562749E+01 0.23514345000609E+01  
o 0.28527085290059E+01 0.36211604647807E+01 -.37821443292625E+00  
o -.92296453379806E+00 -.12747063558155E+01 0.13173137360716E+01  
o 0.29433424483527E+01 0.98870283665038E+00 -.22148724902326E+00  
h 0.15045754637057E+01 -.10889898112130E+01 0.44400792132428E+00  
h -.20202949602274E+01 0.11877234895054E+01 0.16252217654952E+01  
h -.19021945018845E+01 -.11447057649747E+01 0.12587554856852E+01  
h 0.32290495965193E+01 0.19233090472739E+01 -.38016131780316E+00  
c -.26227097079969E+01 0.71224205729808E+01 0.26452699798004E+01  
c -.29099966410522E+01 0.80689090463175E+01 0.16278034121529E+01  
c -.23963729601097E+01 0.78787657100599E+01 0.33389319443025E+00  
c -.15828732559918E+01 0.67719433661458E+01 0.41303010247673E-01  
o -.31693139983493E+01 0.73636501114757E+01 0.38769672581797E+01  
o -.36905476128045E+01 0.91347154809214E+01 0.19865971290614E+01  
h -.15697061443781E+01 0.52879622732694E+01 0.31414165778719E+01  
h -.26266776367736E+01 0.85949741904364E+01 -.46380392102536E+00  
h -.11825640701034E+01 0.66371477661213E+01 -.96393275679081E+00  
h -.30090812901645E+01 0.65913067823000E+01 0.44407647128785E+01  
h -.37979464607712E+01 0.97085844430679E+01 0.12121906597943E+01  
o 0.13841985439438E+01 0.59966120198985E+01 -.37532307584918E-01  
c 0.18588108835015E+01 0.62199527382072E+01 -.13825109619606E+01  
o 0.98299385564469E+00 0.70535187024197E+01 -.21133271290670E+01  
c 0.86963883862998E+00 0.84020478881563E+01 -.15778033643734E+01

c 0.22345295823824E+01 0.91001207117308E+01 -.15690444830037E+01  
c 0.32729083459542E+01 0.82697282419927E+01 -.82169994615610E+00  
c 0.32723670990956E+01 0.68210592105315E+01 -.13155950390616E+01  
o 0.21173567901430E+01 0.10405491270871E+02 -.99781782151685E+00  
o 0.29327379204693E+01 0.83534743349962E+01 0.56244400147990E+00  
o 0.41329610087468E+01 0.60938959021730E+01 -.44983258222628E+00  
h 0.25701194667197E+01 0.92416206352800E+01 -.26117785813595E+01  
h 0.42810705564740E+01 0.86947411542818E+01 -.99089490117596E+00  
h 0.36514158332157E+01 0.68187467185115E+01 -.23573337037079E+01  
h 0.21354140992683E+01 0.10275903146023E+02 -.34100899517002E-01  
h 0.33563253221679E+01 0.75901805051597E+01 0.99122290037122E+00  
h 0.37995899226114E+01 0.51732791154871E+01 -.39199115927711E+00  
h 0.46754350771740E+00 0.83474711296749E+01 -.55149733821581E+00  
h 0.18671421882049E+01 0.52620758958404E+01 -.19253853557827E+01  
c -.78161755832793E-01 0.91344179563334E+01 -.25210018882651E+01  
o -.13505635592968E+01 0.84897226415470E+01 -.26632651112967E+01  
h -.11754388104156E+01 0.76318904860494E+01 -.30774421681099E+01  
h -.27217244350442E+00 0.10140399109514E+02 -.21249191400168E+01  
h 0.41397448658172E+00 0.92370901719309E+01 -.35064969070764E+01  
c -.57558590751238E+01 -.28145620599338E+01 0.15854838860872E+01  
h -.60746693983547E+01 -.30140309782140E+01 0.26196914431705E+01  
h -.62594671336484E+01 -.35430513420743E+01 0.92960866131158E+00  
h -.46623203748562E+01 -.29755407341033E+01 0.15210888180526E+01  
c -.58768541731257E+01 0.14157968594910E+01 0.24843583557127E+00  
c -.65035672830311E+01 0.17222621885699E+01 0.14764403526300E+01  
c -.60443846517804E+01 0.27785669614283E+01 0.22789991843601E+01  
c -.49454531546582E+01 0.35503519825338E+01 0.18582041180426E+01  
c -.43021284747031E+01 0.32610614842905E+01 0.63763749073444E+00  
c -.47732679749683E+01 0.21982448538998E+01 -.15490811040294E+00  
o -.45582737730200E+01 0.45859323646209E+01 0.26769478606038E+01  
h -.73700503300900E+01 0.11344588686827E+01 0.17993647528363E+01  
h -.65350871432463E+01 0.30303006118332E+01 0.32245066565179E+01  
h -.34519171507676E+01 0.38690723678733E+01 0.30894276660385E+00  
h -.38425073950243E+01 0.50786271250518E+01 0.22395833014942E+01  
c -.63439198686938E+01 0.24552776044580E+00 -.58429825351180E+00  
c -.57024229286925E+01 -.10900800773882E+01 -.11837307472161E+00  
n -.61794216209254E+01 -.14575292072859E+01 0.12054616327078E+01  
h -.60098536412879E+01 -.18888356542472E+01 -.82076003635370E+00  
h -.57663128697029E+01 -.79550155790326E+00 0.18693656466780E+01  
h -.60955423453262E+01 0.41815142471378E+00 -.16461113154359E+01  
h -.74370306275464E+01 0.12346067446683E+00 -.50739691306088E+00  
c -.41741475018933E+01 -.94359924152671E+00 -.18122808412425E+00  
o -.35035537333977E+01 -.72523450919981E+00 0.84965004082228E+00  
n -.36098369834753E+01 -.10168678094411E+01 -.14111120627718E+01  
c -.21926162025176E+01 -.72453751347071E+00 -.16421470019619E+01  
h -.42824734763430E+01 0.19875276692047E+01 -.11138111206366E+01  
h -.42167418112318E+01 -.11938462233961E+01 -.22032576004050E+01  
h -.19433865731912E+01 0.28135409419320E+00 -.12690377794443E+01  
h -.15504429749604E+01 -.14532268234604E+01 -.11271678955831E+01



h -.20059676805497E+01 -.77861451122450E+00 -.27232491933522E+01

dglu val

c 0.53408442937085E-01 0.50963783958008E-01 -.58636870187921E+00  
c 0.14602536108924E+01 0.58338735176460E-01 -.50219165534384E+00  
c 0.21319849621870E+01 0.12624935318867E+01 -.27674716013772E+00  
c -.70316541176721E+00 0.12240133905752E+01 -.44812510719645E+00  
c -.11732481302931E-01 0.24225873902083E+01 -.22448019182273E+00  
c 0.13951514599745E+01 0.24802183100286E+01 -.13524471685283E+00  
o -.78959626823151E+00 0.35492238045951E+01 -.70246482085792E-01  
c -.19292374288400E+00 0.47648726696470E+01 0.11243593149750E+00  
c 0.11831193074073E+01 0.49054916996622E+01 0.16692068881702E+00  
c 0.20695028582534E+01 0.37517866443039E+01 0.90330656078977E-01  
c -.11557509364937E+01 0.58663279185686E+01 0.18747555312926E+00  
c -.99579305517551E+00 0.69010734410414E+01 0.11385577845624E+01  
o 0.33233082160383E+01 0.38527601633692E+01 0.19079642442778E+00  
o -.52891027627748E+00 -.11742320162579E+01 -.80786274340298E+00  
o 0.34840611455940E+01 0.12622228003761E+01 -.19852190498764E+00  
h 0.20221038100839E+01 -.87260984007124E+00 -.61263433403316E+00  
h -.17960843573011E+01 0.12282623343440E+01 -.50331833227902E+00  
h -.14907035632965E+01 -.10635818747822E+01 -.84542847741340E+00  
h 0.37477263345042E+01 0.22057913913022E+01 -.30280253612516E-01  
c -.17855124509150E+01 0.80593084474372E+01 0.10692016062161E+01  
c -.28227679088991E+01 0.81507867473026E+01 0.10398286103451E+00  
c -.30176839382294E+01 0.70845289859793E+01 -.80039580994519E+00  
c -.21867660938076E+01 0.59543215985468E+01 -.77156318260868E+00  
o -.16134259157418E+01 0.91377349092468E+01 0.19028639664548E+01  
o -.35833170807616E+01 0.92774217025484E+01 0.10943141251887E+00  
h -.25466493478051E+00 0.67996027507576E+01 0.19404065031956E+01  
h -.38160095205431E+01 0.71717677832058E+01 -.15442506888206E+01  
h -.23014533350225E+01 0.51696229224101E+01 -.15236005935986E+01  
h -.70798234422970E+00 0.91062453586232E+01 0.22545712722646E+01  
h -.42740553940058E+01 0.91885188477240E+01 -.59189905548238E+00  
o 0.17346236708774E+01 0.61660245890958E+01 0.34524727103292E+00  
c 0.25594893490607E+01 0.65995098032884E+01 -.77932635807087E+00  
o 0.17925659792898E+01 0.67706646959569E+01 -.19471078951416E+01  
c 0.74046380572869E+00 0.77713803296122E+01 -.18308117224491E+01  
c 0.13202806279738E+01 0.91370727237839E+01 -.14471471854415E+01  
c 0.21836785032645E+01 0.90284596982979E+01 -.18214836072228E+00  
c 0.32236781355679E+01 0.79132627513181E+01 -.34239611421180E+00  
o 0.26881337754750E+00 0.10087353699171E+02 -.12691911696362E+01  
o 0.13480507015788E+01 0.88067598929437E+01 0.97276948613068E+00  
o 0.40378548087477E+01 0.77479584225363E+01 0.80728995887004E+00  
h 0.19485603912978E+01 0.95116724173530E+01 -.22759307931552E+01  
h 0.26926629789335E+01 0.99871937704804E+01 0.58446938063042E-02  
h 0.39063690045666E+01 0.81931556767040E+01 -.11626149343363E+01  
h -.86375152377776E-01 0.99360955608096E+01 -.37489715697140E+00  
h 0.10576320824611E+01 0.78770987237232E+01 0.91011131593163E+00  
h 0.34463567942674E+01 0.75411038302202E+01 0.15476887550663E+01

h 0.12631490313850E-01 0.74476285790065E+01 -.10697841409947E+01  
h 0.33013340709925E+01 0.58191576735073E+01 -.99598641322026E+00  
c 0.63011248870106E-01 0.77896660549904E+01 -.31901957876906E+01  
o -.47232975739910E+00 0.65088253307282E+01 -.35368556878457E+01  
h 0.26555532875610E+00 0.58825618012140E+01 -.34713301054691E+01  
h -.78162697608111E+00 0.84890394059760E+01 -.31554579326269E+01  
h 0.78684702701970E+00 0.81360997948800E+01 -.39537110610571E+01  
c -.67076138051509E+01 0.89435753460313E+01 -.49975331144355E+01  
h -.69008308834138E+01 0.98135381807734E+01 -.56458836213731E+01  
h -.71354751515183E+01 0.80557022193877E+01 -.54869075315644E+01  
h -.72340644529794E+01 0.90989465579751E+01 -.40339978002325E+01  
o -.52512456284667E+01 0.90888403598608E+01 -.19962925369590E+01  
c -.51658740506123E+01 0.10073525626123E+02 -.27671175234804E+01  
n -.55282968253123E+01 0.11316180078000E+02 -.23806878098929E+01  
c -.59291614462523E+01 0.11608189737025E+02 -.10041004892196E+01  
h -.53678784776582E+01 0.12079827588072E+02 -.30278581212734E+01  
h -.63859663837687E+01 0.12606529280534E+02 -.97634737172373E+00  
h -.66649978777825E+01 0.10860337041035E+02 -.67739854789014E+00  
h -.50649696609817E+01 0.11578325667320E+02 -.32135015521470E+00  
c -.46206872462624E+01 0.98931496248457E+01 -.41836471677947E+01  
n -.52548393582377E+01 0.87657999685079E+01 -.48641854661170E+01  
h -.50783479952920E+01 0.79342672184174E+01 -.42926993893120E+01  
c -.30909146560908E+01 0.96910458596932E+01 -.40929180319219E+01  
c -.24816838972149E+01 0.96046334594044E+01 -.54971488829571E+01  
c -.24283835987264E+01 0.10812212905143E+02 -.32777482851151E+01  
h -.29364046220164E+01 0.87270986879450E+01 -.35685820729022E+01  
h -.29566992977099E+01 0.88124711055329E+01 -.60921903108268E+01  
h -.26135436816874E+01 0.10565362664867E+02 -.60261682124380E+01  
h -.27403446668116E+01 0.10807930462375E+02 -.22209528969825E+01  
h -.13328388749591E+01 0.10709725244395E+02 -.32865229819289E+01  
h -.26746644120030E+01 0.11798247197707E+02 -.37132753651336E+01  
h -.14004854812635E+01 0.93999015344523E+01 -.54331181234674E+01  
h -.48232435916432E+01 0.10806071264012E+02 -.47802515780221E+01

egcg ala

c -.28271714766900E+01 -.57006997126121E+01 -.16893315395213E+01  
c -.14291228389420E+01 -.58155020717702E+01 -.17789439247261E+01  
c -.65913312158751E+00 -.46450431615726E+01 -.18559343702304E+01  
c -.12456655489567E+01 -.33615793685869E+01 -.18500077147915E+01  
c -.26511795136681E+01 -.32942603714625E+01 -.17374543192135E+01  
c -.34502089537175E+01 -.44450490976616E+01 -.16620477998393E+01  
o -.33345295934266E+01 -.20925823062167E+01 -.16949777247398E+01  
c -.25436571032325E+01 -.91698503006337E+00 -.14354278725049E+01  
c -.12787315661595E+01 -.93756023081977E+00 -.23191332280558E+01  
c -.39085119296390E+00 -.21168065844022E+01 -.19352530438445E+01  
c -.22100227393075E+01 -.71962444757601E+00 0.30896102289896E-01  
c -.18928624563742E+01 -.17962033810996E+01 0.88606177877347E+00  
c -.15297932110515E+01 -.15477501936931E+01 0.22210706765104E+01  
c -.14812859225267E+01 -.23236318512641E+00 0.27366063885368E+01  
c -.18159517031154E+01 0.83920803160169E+00 0.18720540742253E+01  
c -.21668065472373E+01 0.59456841889195E+00 0.53286502656657E+00

o -.69261439559782E+00 0.36621479633739E+00 -.20601655709688E+01  
o -.36527659512075E+01 -.68043163920884E+01 -.16110162689463E+01  
o 0.71004947661414E+00 -.48164244323461E+01 -.19274080327713E+01  
o -.12050499247166E+01 -.25609466847839E+01 0.31000052446499E+01  
o -.12173886867550E+01 -.52319984382880E-01 0.40719744428114E+01  
o -.18715509276002E+01 0.21367969424898E+01 0.23197428516897E+01  
c 0.54572817562458E+00 0.64290540074441E+00 -.25383077730335E+01  
c 0.98107200620913E+00 0.19959955382555E+01 -.20926484921046E+01  
c 0.39970808987502E-01 0.30053491245546E+01 -.18026772478944E+01  
c 0.49666762881342E+00 0.42817176672774E+01 -.14448098193454E+01  
c 0.18777371540870E+01 0.45227738892264E+01 -.13090110286458E+01  
c 0.28046656963143E+01 0.34986457835712E+01 -.15764348226900E+01  
c 0.23679276864404E+01 0.22357162420271E+01 -.19942591356785E+01  
o 0.12265257741890E+01 -.12064939733309E+00 -.32146879450897E+01  
o 0.41264046274721E+01 0.38653309803893E+01 -.13981373690503E+01  
o 0.22630592663127E+01 0.57823521411383E+01 -.91111912060783E+00  
o -.40656932924926E+00 0.52829332931435E+01 -.12094375062510E+01  
h -.92683118373356E+00 -.67884698716841E+01 -.17923206213094E+01  
h -.45358369802817E+01 -.43586620041262E+01 -.15720356794043E+01  
h -.31802211565479E+01 -.81594053334876E-01 -.17691333784262E+01  
h -.15656809261573E+01 -.99608705628710E+00 -.33836771811835E+01  
h 0.86241791163189E-01 -.19030838595355E+01 -.96245466582375E+00  
h 0.40104432352343E+00 -.22299220076820E+01 -.26922113881931E+01  
h -.19434208149459E+01 -.28321303092350E+01 0.53425920264870E+00  
h -.24279695244211E+01 0.14501598667386E+01 -.98073720373886E-01  
h -.31049812232919E+01 -.76023030994018E+01 -.16390004919964E+01  
h 0.11267819196652E+01 -.39479842692511E+01 -.20334069817388E+01  
h -.13580577912268E+01 -.34047622913166E+01 0.26478199391088E+01  
h -.52248104388427E+00 0.63852095364743E+00 0.41544464973333E+01  
h -.12568636994030E+01 0.22308231479104E+01 0.30744230266273E+01  
h -.10333142039633E+01 0.28200098015689E+01 -.18857412989641E+01  
h 0.30773141719348E+01 0.14374055560943E+01 -.22366958833059E+01  
h 0.46974664684936E+01 0.31119529550314E+01 -.16088214282122E+01  
h 0.32349981412344E+01 0.58127725399294E+01 -.90791674394276E+00  
h 0.89333341599802E-01 0.60935449787284E+01 -.10036080609751E+01  
c 0.23325721376724E+01 0.72801350400992E+00 0.25257709337669E+01  
c 0.12892196550610E+01 0.18479485615573E+01 0.26551131135791E+01  
o 0.56738424758795E+00 0.19607807082053E+01 0.36807512663224E+01  
c 0.19604598369265E+01 -.51270283097380E+00 0.33465874855973E+01  
n 0.26387477872265E+01 0.50237439593291E+00 0.10991717786521E+01  
h 0.32479781522398E+01 0.11687685732020E+01 0.29660782592352E+01  
h 0.27627976607869E+01 -.12636009694088E+01 0.32528933122887E+01  
h 0.18624284534268E+01 -.24688400211163E+00 0.44090132850283E+01  
h 0.10140812222901E+01 -.96724844851792E+00 0.30227244602673E+01  
h 0.35465314375785E+01 0.37081817563840E-01 0.10412477523173E+01  
n 0.12803456161928E+01 0.27401466209646E+01 0.16501995533983E+01  
c 0.52251716118653E+00 0.39868845298097E+01 0.17014468939707E+01  
h 0.11441429913325E+01 0.47987893027160E+01 0.12971899735721E+01  
h -.41552064120645E+00 0.39136260165690E+01 0.11351476042455E+01  
h 0.28847207840432E+00 0.42003213616786E+01 0.27538733701334E+01  
c 0.16339273855346E+01 -.32770383778884E+00 0.41159780038809E+00  
h 0.18768678608906E+01 0.25076809014038E+01 0.85386052501345E+00  
h 0.19436554086919E+01 -.44773153870276E+00 -.63771719065317E+00  
h 0.15036306094247E+01 -.13332422414466E+01 0.85510882066569E+00  
h 0.65534373201351E+00 0.18266438149147E+00 0.43144494483374E+00

egcg gln

c -.30779458508871E+01 -.50521688430619E+01 -.20088030179438E+01  
c -.16969558045245E+01 -.49808307009184E+01 -.22564891735005E+01  
c -.10332929057796E+01 -.37437714876273E+01 -.21543458079928E+01  
c -.17399271756972E+01 -.25725899430276E+01 -.17908947719101E+01  
c -.31235952991998E+01 -.26905311064797E+01 -.15365693038554E+01  
c -.38061831357279E+01 -.39125906318792E+01 -.16383106354167E+01  
o -.39144024379561E+01 -.16020746146566E+01 -.11791613891311E+01  
c -.32126999434519E+01 -.41095297075240E+00 -.76979749417187E+00  
c -.21070766547431E+01 -.13741795488607E+00 -.18063989007622E+01  
c -.10594157512336E+01 -.12308762123078E+01 -.17159156344059E+01  
c -.26690192302977E+01 -.52590131475500E+00 0.64258893907337E+00  
c -.24966474835665E+01 -.17798785362277E+01 0.12656218342342E+01  
c -.18865166720387E+01 -.18354857791791E+01 0.25271301925137E+01  
c -.14376743399454E+01 -.67170601944180E+00 0.31757961251540E+01  
c -.16582385520785E+01 0.58210450603236E+00 0.25727639649165E+01  
c -.22748948922588E+01 0.64835564170748E+00 0.13132943431673E+01  
o -.15085025632386E+01 0.11506530349003E+01 -.14798901821772E+01  
o -.37830953417362E+01 -.62385921596435E+01 -.20989104663879E+01  
o 0.29642756209737E+00 -.37496846906404E+01 -.24827948253411E+01  
o -.16561623959770E+01 -.30120361907782E+01 0.32319459467641E+01  
o -.80264985393939E+00 -.70774497385558E+00 0.43966998038843E+01  
o -.12941115117522E+01 0.17456123584176E+01 0.31931573654001E+01  
c -.63079566151325E+00 0.15939020309764E+01 -.24266486036511E+01  
c 0.11646922386220E+00 0.28079030572847E+01 -.19913479488247E+01  
c -.27993417813212E+00 0.35936129123625E+01 -.88862948458993E+00  
c 0.45476230104565E+00 0.47516282485926E+01 -.59467911415414E+00  
c 0.15841668241413E+01 0.51012543906222E+01 -.13562976749316E+01  
c 0.19761913907423E+01 0.42979322262768E+01 -.24413385267389E+01  
c 0.12411261090610E+01 0.31550729484039E+01 -.27718416673275E+01  
o -.46464935634341E+00 0.10472989351431E+01 -.35100222940876E+01  
o 0.30986370932291E+01 0.47461469323857E+01 -.31091518583818E+01  
o 0.22573084737287E+01 0.62441596928135E+01 -.99574523624401E+00  
o 0.89150750434632E+01 0.55542726095714E+01 0.46716742555816E+00  
h -.11168014424975E+01 -.58663870533928E+01 -.25383740269731E+01  
h -.48790795317740E+01 -.39694907589890E+01 -.14377062671215E+01  
h -.39689757528005E+01 0.38995483349706E+00 -.81816462446541E+00  
h -.25583494698654E+01 -.83332112374790E-01 -.28105887011027E+01  
h -.54822976413888E+00 -.11051416077761E+01 -.74807356865832E+00  
h -.31363083691470E+00 -.11309730540756E+01 -.25169311196571E+01  
h -.28434375335124E+01 -.27011834204903E+01 0.78749236713042E+00  
h -.24346409447158E+01 0.16324970587888E+01 0.86441120624745E+00  
h -.31764261316302E+01 -.69314090023292E+01 -.23983713556374E+01  
h 0.83580583070808E+00 -.30585890154607E+01 -.20315210427052E+01  
h -.21213584349750E+01 -.37362785380964E+01 0.27866149959220E+01  
h -.85986075842169E+00 -.16185345607112E+01 0.47316631371879E+01  
h -.61249155811988E+00 0.15553911568026E+01 0.38691369692624E+01  
h -.11499667087736E+01 0.33311364957241E+01 -.28176492459416E+00  
h 0.15121677636274E+01 0.25249524731870E+01 -.36259180496319E+01  
h 0.32984585504962E+01 0.41432353706877E+01 -.38406429623596E+01  
h 0.29981826824438E+01 0.63657620068405E+01 -.16135518660935E+01  
h 0.64477305182609E+00 0.63534451451172E+01 0.42983438256843E+00  
c 0.16913814895504E+01 -.13492232104132E+01 0.89569986411603E-02  
c 0.22806789715371E+01 0.26149230194946E-01 0.35012240669351E+00  
c 0.14021710796386E+01 0.83314340841269E+00 0.13138327378064E+01

c 0.19642949649089E+01 0.22310315979027E+01 0.16068839213245E+01  
c 0.14306179487470E+01 0.27533034912148E+01 0.29337557071197E+01  
n 0.10252239782646E+01 0.40552224331038E+01 0.29556967043494E+01  
o 0.14098177732151E+01 0.20389234008466E+01 0.39520370402755E+01  
n 0.36360243302463E+01 -.10600107253280E+00 0.90824799426187E+00  
o 0.18340836563011E+01 -.18443025760100E+01 -.11299449218175E+01  
n 0.11013826970282E+01 -.20308988094460E+01 0.10251047454749E+01  
c 0.63974315093697E+00 -.34077525007689E+01 0.87113474008773E+00  
h 0.23734814130210E+01 0.55374630796230E+00 -.61737678247896E+00  
h 0.37931174545731E+00 0.90271455324815E+00 0.90553665701810E+00  
h 0.13371357716048E+01 0.30942348074320E+00 0.22866026151723E+01  
h 0.30601575102870E+01 0.21564107209577E+01 0.17123882837453E+01  
h 0.17490591951884E+01 0.29264804060894E+01 0.77984027311204E+00  
h 0.57991444975962E+00 0.43691015626552E+01 0.38125635310557E+01  
h 0.76667867954934E+00 0.45296863235052E+01 0.20946766409251E+01  
h 0.35702921821913E+01 -.58566790912580E+00 0.18106388434854E+01  
h 0.88230675312694E+00 -.15335644882716E+01 0.18822058831755E+01  
h -.36235570935023E+00 -.34514171446487E+01 0.41361387258495E+00  
h 0.13446448390850E+01 -.39495645413788E+01 0.22525349617940E+00  
h 0.61035980142964E+00 -.38790285340393E+01 0.18629434904155E+01  
c 0.45768780106088E+01 -.82666974187086E+00 0.37025666829877E-01  
h 0.55687669916757E+01 -.82304394289221E+00 0.51501025274446E+00  
h 0.42895704211415E+01 -.18713383789069E+01 -.18662687585860E+00  
h 0.46523861575635E+01 -.28699487885340E+00 -.91985040037966E+00

egcg glu

c -.32167571156913E+01 -.38568119860188E+01 -.98850039456225E+00  
c -.18394547261740E+01 -.41148628214885E+01 -.10750110012338E+01  
c -.98337739608593E+00 -.31744209874068E+01 -.16823967271232E+01  
c -.15108767377598E+01 -.19788391320402E+01 -.22270497469113E+01  
c -.28924489114023E+01 -.17476920761788E+01 -.20970919933184E+01  
c -.37601698526716E+01 -.26623984263264E+01 -.14811365532501E+01  
o -.34738003133972E+01 -.60385484608172E+00 -.26287145345099E+01  
c -.26462534323544E+01 0.58261017475915E+00 -.25607178543170E+01  
c -.13084444376742E+01 0.32933049214112E+00 -.33133028347856E+01  
c -.61686742726710E+00 -.99174468073713E+00 -.29388190966963E+01  
c -.24329566947494E+01 0.11330053564538E+01 -.11658702713063E+01  
c -.15876984362052E+01 0.49397794915991E+00 -.23069052307464E+00  
c -.12861335963853E+01 0.11363074090450E+01 0.98066722370177E+00  
c -.18235445080591E+01 0.24090461642993E+01 0.12570596312298E+01  
c -.26958672747951E+01 0.30243225480046E+01 0.35125441041741E+00  
c -.30012286125588E+01 0.23919247032779E+01 -.86394868992568E+00  
o -.33984652032683E+00 0.13582067462957E+01 -.29363776547469E+01  
o -.40967223063550E+01 -.47536904244472E+01 -.39062997032513E+00  
o 0.33987431552981E+00 -.34994306148663E+01 -.17843068877809E+01  
o -.46311867547848E+00 0.63338133577895E+00 0.19495184130681E+01  
o -.15111373093599E+01 0.30736817177825E+01 0.24275690066469E+01  
o -.32187156986398E+01 0.42803731705209E+01 0.64963720240663E+00  
c -.79464483508431E+00 0.26421710674865E+01 -.29806452208699E+01  
c -.24627447382797E+00 0.34521684707616E+01 -.18577572435701E+01  
c 0.70279724640066E+00 0.29192725679478E+01 -.95738949749813E+00  
c 0.10430086600223E+01 0.36538665925273E+01 0.18843798182886E+00  
c 0.39298882254368E+00 0.48727919466598E+01 0.46190656236735E+00  
c -.57423910984015E+00 0.53695294937203E+01 -.42759328042283E+00  
c -.86877652016990E+00 0.46940985283001E+01 -.16128323972801E+01  
o -.16145088304612E+01 0.30474027993359E+01 -.37996193143370E+01

o -.12381272048123E+01 0.65309189399203E+01 -.20244904235831E-01  
o 0.70118382031156E+00 0.55220825904635E+01 0.16358979790502E+01  
o 0.19710423145001E+01 0.31590997349749E+01 0.10703468111082E+01  
h -.14037484129767E+01 -.50359537892960E+01 -.67075083229372E+00  
h -.48262585142450E+01 -.24417230496614E+01 -.13862224824318E+01  
h -.32278170136055E+01 0.13205801877523E+01 -.31311030588475E+01  
h -.15070513188462E+01 0.39662394178799E+00 -.43947604597379E+01  
h 0.24656492272467E+00 -.74849597041415E+00 -.23005985759699E+01  
h -.19598438157295E+00 -.14617434668832E+01 -.38449398634713E+01  
h -.11378190935847E+01 -.48091492939604E+00 -.42323953266137E+00  
h -.36388281718771E+01 0.29061825671229E+01 -.15910765028365E+01  
h -.35712477761710E+01 -.54908306107689E+01 -.47936993325914E-01  
h 0.92819007729245E+00 -.27099822844191E+01 -.15657079828655E+01  
h 0.40055111060874E-01 -.14961683400173E+00 0.15506539716302E+01  
h -.89212245740736E+00 0.24841149146237E+01 0.28985344365839E+01  
h -.29951514277830E+01 0.44450348353646E+01 0.15825502409291E+01  
h 0.11436946388893E+01 0.19326318946092E+01 -.11195459164885E+01  
h -.16425754712307E+01 0.50580053029367E+01 -.22946889233205E+01  
h -.21853651460155E+01 0.63134494850433E+01 -.51197098464632E-01  
h 0.79995641429020E+01 0.62689252097796E+01 0.16988424483126E+01  
h 0.19971382860691E+01 0.37598459937768E+01 0.18339801812684E+01  
c 0.23855867219337E+01 -.22392694935509E+01 0.43618060296483E+01  
h 0.14985115471431E+01 -.19012593019105E+01 0.49207253549620E+01  
h 0.32605734198515E+01 -.21556281760037E+01 0.50288568068359E+01  
h 0.22496449192999E+01 -.33088071082446E+01 0.41020640096688E+01  
c 0.17557359852564E+01 -.10397806338849E+01 0.12348217996060E-01  
c 0.27711345049082E+01 -.66978239676968E-01 0.60019990424219E+00  
h 0.31475010460317E+01 0.58368400936440E+00 -.20583059142116E+00  
c 0.39813414229514E+01 -.80200770009095E+00 0.12197888195156E+01  
c 0.36471290762694E+01 -.18455290392648E+01 0.23180388475837E+01  
c 0.34931906313323E+01 -.32574531382782E+01 0.17051802930050E+01  
h 0.45547860096861E+01 -.19606845102458E+01 0.29380695174422E+01  
n 0.25831835459917E+01 -.13656064813423E+01 0.32012944357286E+01  
h 0.45603553127302E+01 -.13043698484755E+01 0.42619855598209E+00  
o 0.45074407934134E+01 -.39622475972917E+01 0.15328832033107E+01  
n 0.22406574628852E+01 -.36891309551265E+01 0.13939074700221E+01  
c 0.20807510538023E+01 -.49434657141793E+01 0.66687765509587E+00  
h 0.46347145739873E+01 -.35384795941692E-01 0.16707979368906E+01  
h 0.17124138769728E+01 -.12938192102404E+01 0.26689193349448E+01  
h 0.14960986997601E+01 -.29922861425160E+01 0.13143485002447E+01  
h 0.25178410234442E+01 -.48803167074365E+01 -.34286534056035E+00  
h 0.25822937618176E+01 -.57511619605914E+01 0.12203368586181E+01  
h 0.10070837315519E+01 -.51583500155464E+01 0.57415978539902E+00  
o 0.71619761544171E+00 -.13269392140275E+01 0.73096204010287E+00  
o 0.20051337685634E+01 -.15632313379569E+01 -.11115353618314E+01  
h 0.22901257811041E+01 0.56806541047764E+00 0.13580260308204E+01

egcg ile

c -.32890861733604E+01 -.50919889012139E+01 -.18192880847059E+01  
c -.18847297422643E+01 -.50846238724984E+01 -.18574617593009E+01  
c -.11987317463227E+01 -.38554377798156E+01 -.18463320448227E+01  
c -.19046135810454E+01 -.26314552145644E+01 -.18065876288403E+01  
c -.33123242857311E+01 -.26863759049936E+01 -.17246518964365E+01  
c -.40195939004727E+01 -.38975036568199E+01 -.17356004738525E+01  
o -.40934350073512E+01 -.15410351176751E+01 -.16236661538493E+01  
c -.34107819902262E+01 -.33140751192846E+00 -.12301735895954E+01

c -.21451964266706E+01 -.17771256820729E+00 -.20899345585911E+01  
c -.11766641132669E+01 -.13135517722373E+01 -.18148161514659E+01  
c -.31195828734134E+01 -.25435965902463E+00 0.25576149907715E+00  
c -.26452803710680E+01 -.13583152273033E+01 0.99585322348235E+00  
c -.23346872789224E+01 -.11899393952808E+01 0.23517106418562E+01  
c -.24731990377851E+01 0.52535179945814E-01 0.29984392855082E+01  
c -.29705199423696E+01 0.11457548442658E+01 0.22640680390071E+01  
c -.32888370172018E+01 0.98639676398645E+00 0.90410446527177E+00  
o -.15653341207799E+01 0.10935697438909E+01 -.16833315108149E+01  
o -.40195261351059E+01 -.62672895881812E+01 -.18397822008090E+01  
o 0.16966005364344E+00 -.39287412737866E+01 -.18874547101873E+01  
o -.18639438522713E+01 -.22075455823424E+01 0.31691672874323E+01  
o -.21379727093864E+01 0.21762195875850E+00 0.43177748334126E+01  
o -.31104378063025E+01 0.23301512050209E+01 0.29505688115874E+01  
c -.46212602873370E+00 0.14811792696589E+01 -.23834860097056E+01  
c 0.18849802884203E+00 0.26601724086535E+01 -.17473499177191E+01  
c -.50514960748001E+00 0.34770270398171E+01 -.83272370569105E+00  
c 0.14580783458413E+00 0.45842496470295E+01 -.27169143281460E+00  
c 0.14862979934133E+01 0.48571884150119E+01 -.60582436007436E+00  
c 0.21668063846032E+01 0.40338370427059E+01 -.15216780852718E+01  
c 0.15259079222097E+01 0.29353191966331E+01 -.21063976083367E+01  
o -.49928575326190E-01 0.92066130329546E+00 -.33915496114220E+01  
o 0.34789097420962E+01 0.44077641565697E+01 -.17635263670601E+01  
o 0.20792328083488E+01 0.59448900155270E+01 -.72054922193958E-02  
o -.52667331305044E+00 0.53889490325666E+01 0.61128764924374E+00  
h -.13054544124213E+01 -.60137591874168E+01 -.18957969839792E+01  
h -.51104799845112E+01 -.39069431798306E+01 -.16719770161014E+01  
h -.41175069799709E+01 0.47329550545163E+00 -.14916277500527E+01  
h -.24253086160064E+01 -.12960466339280E+00 -.31555833892108E+01  
h -.69402547579504E+00 -.11239981021276E+01 -.84219561686075E+00  
h -.37974116610978E+00 -.13155198135537E+01 -.25703935070826E+01  
h -.25324220015270E+01 -.23450144891317E+01 0.53570758748203E+00  
h -.36741119421351E+01 0.18458893150812E+01 0.34072576413726E+00  
h -.34009696245024E+01 -.70078913926454E+01 -.19191202121243E+01  
h 0.61177307051418E+00 -.30709440660358E+01 -.16959055303637E+01  
h -.18480571706848E+01 -.30325678005464E+01 0.26614356265528E+01  
h -.18888913333774E+01 -.65965820241025E+00 0.46559946309126E+01  
h -.34071801769223E+01 0.30108812053844E+01 0.23280137479534E+01  
h -.15405786698417E+01 0.32616622435455E+01 -.56137360678698E+00  
h 0.20336152737269E+01 0.22889612512946E+01 -.28312880795566E+01  
h 0.38393585331071E+01 0.38542870132967E+01 -.24721493227253E+01  
h 0.29810690930544E+01 0.60262982414792E+01 -.36062094102548E+00  
h 0.75839970499863E-01 0.61015645338513E+01 0.88455353902999E+00  
c 0.48874102381644E+01 0.85370848748416E+00 0.57015717135355E-01  
h 0.58194829979987E+01 0.10242922881429E+01 0.61803727582231E+00  
h 0.45670636523875E+01 0.18091659845927E+01 -.40666766749692E+00  
h 0.51011016802215E+01 0.13315407437650E+00 -.74976794629983E+00  
c 0.25831083742207E+01 0.92649613878829E-01 0.25427950374298E+00  
c 0.24673571001171E+01 -.13415197966829E+01 -.26024876853312E+00  
c 0.13604029953970E+01 0.41292733102757E+00 0.11517549822925E+01  
c 0.1212138291418E+01 -.58419434670356E+00 0.23101100716897E+01  
c 0.14288911011077E+01 0.18704248876755E+01 0.16429599151613E+01  
c 0.10353605610059E+00 0.23589305120597E+01 0.22365159582796E+01  
n 0.38675134216090E+01 0.28511263007478E+00 0.95088960841741E+00  
h 0.25090184422971E+01 0.75089712883023E+00 -.63637647631357E+00  
h 0.47405265473390E+00 0.32470093592506E+00 0.49464594883138E+00

h 0.33366301371407E+00 -0.33609687757400E+00 0.29250144732287E+01  
h 0.22233257077202E+01 0.19813576014200E+01 0.24068055111196E+01  
h 0.17146592887429E+01 0.25153092533035E+01 0.79104963945572E+00  
h 0.14204066209367E+00 0.34364779731791E+01 0.24616817671904E+01  
h -0.71219766639078E+00 0.21879798244274E+01 0.15176469324589E+01  
h -0.15087615443126E+00 0.18330227048663E+01 0.31699582021015E+01  
h 0.37269251445281E+01 0.92965470192852E+00 0.17281455941574E+01  
o 0.15593987097705E+01 -0.16568600993912E+01 -0.10580469130502E+01  
n 0.33645347697738E+01 -0.22179577782115E+01 0.22866271953969E+00  
c 0.33214273468667E+01 -0.36303049773503E+01 -0.12887306163887E+00  
h 0.40292473634602E+01 -0.18275947173679E+01 0.89550342279198E+00  
h 0.32975044009259E+01 -0.37411272116974E+01 -0.12233666007071E+01  
h 0.42187211729983E+01 -0.41227401358282E+01 0.26947355999855E+00  
h 0.24227098938627E+01 -0.41163434145909E+01 0.28311332873791E+00  
h 0.10758589995815E+01 -0.16138858822852E+01 0.19403673467995E+01  
h 0.21023112843566E+01 -0.56806330526728E+00 0.29630946325964E+01

egcg lys

c -0.26327411835252E+01 -0.52594956340027E+01 -0.18468336860522E+01  
c -0.12279413569619E+01 -0.52821556259888E+01 -0.17698483063355E+01  
c -0.52348478319529E+00 -0.40833025172488E+01 -0.19461863310946E+01  
c -0.11797200407994E+01 -0.28544115634322E+01 -0.21767807666209E+01  
c -0.25865962495491E+01 -0.28813679952521E+01 -0.22627608092192E+01  
c -0.33235530731832E+01 -0.40628326814965E+01 -0.20956905690597E+01  
o -0.33375175383112E+01 -0.17433390027257E+01 -0.25236526042176E+01  
c -0.26917327911097E+01 -0.48220366368488E+00 -0.23004440345815E+01  
c -0.12835072012262E+01 -0.48483212369742E+00 -0.29278834242382E+01  
c -0.40660066379480E+00 -0.15649526261308E+01 -0.23055830287565E+01  
c -0.26759970107098E+01 -0.88584747796191E-01 -0.83287757824313E+00  
c -0.27284587514396E+01 -0.10495950305449E+01 0.19840309091991E+00  
c -0.27123908084833E+01 -0.62144687227874E+00 0.15343177758776E+01  
c -0.25985815547862E+01 0.74206783630881E+00 0.18520606053749E+01  
c -0.25981652815638E+01 0.16965430714677E+01 0.82143924655933E+00  
c -0.26416264570452E+00 0.12846010716826E+01 -0.51623172999377E+00  
o -0.75820273655479E+00 0.83448572000626E+00 -0.26299571359606E+01  
o -0.34011050621135E+01 -0.63882367773906E+01 -0.16858308970800E+01  
o 0.85520594861069E+00 -0.41557644705087E+01 -0.18479479195854E+01  
o -0.27796248063228E+01 -0.14634277968723E+01 0.26371298191116E+01  
o -0.25181533970520E+01 0.11969467269276E+01 0.31611925781728E+01  
o -0.25241195951848E+01 0.30505668430438E+01 0.11207290551420E+01  
c 0.47619586116471E+00 0.11204714218566E+01 -0.31278895457941E+01  
c 0.10322649751314E+01 0.23478111117098E+01 -0.24946046633978E+01  
c 0.44019574806847E+00 0.28893571425713E+01 -0.13335726539721E+01  
c 0.10153284293391E+01 0.40257482950622E+01 -0.75405838531349E+00  
c 0.21656326488981E+01 0.46134962791237E+01 -0.13096208711410E+01  
c 0.27421449083216E+01 0.40647038549591E+01 -0.24727200952560E+01  
c 0.21843205857883E+01 0.29261619596286E+01 -0.30691801244461E+01  
o 0.10547975701060E+01 0.43821141855477E+00 -0.39650591209458E+01  
o 0.38536099730402E+01 0.47412941252483E+01 -0.29213684213841E+01  
o 0.26664020032635E+01 0.57251029607649E+01 -0.68161196159254E+00  
o 0.44888781462274E+00 0.45769811809207E+01 0.38159658419995E+00  
h -0.67264482352268E+00 -0.62100531994459E+01 -0.15973914782263E+01  
h -0.44139593571727E+01 -0.40522184416108E+01 -0.21712317614998E+01  
h -0.33105085709686E+01 0.24515888437118E+00 -0.28509942322540E+01  
h -0.13672415902860E+01 -0.61680579488543E+00 -0.40193105885108E+01  
h -0.70100107219734E-01 -0.11996215194729E+01 -0.13165348366182E+01



h 0.48210360425940E+00 -.16904389984014E+01 -.29475284354795E+01  
h -.28161920982270E+01 -.21171187289297E+01 -.29190308047925E-01  
h -.26792032605234E+01 0.20453187308117E+01 -.13013165472311E+01  
h -.28211168334040E+01 -.71559584522623E+01 -.15720655857178E+01  
h 0.12318745641908E+01 -.33527918681763E+01 -.22385073361739E+01  
h -.31680162049298E+01 -.23129388647462E+01 0.23730340182102E+01  
h -.27625758722701E+01 0.45624523849669E+00 0.37457521786661E+01  
h -.30220794093248E+01 0.32072908272408E+01 0.19414934849004E+01  
h -.45001419063835E+00 0.24321707546201E+01 -.89884738686862E+00  
h 0.26188267630251E+01 0.24820460742984E+01 -.39716896055458E+01  
h 0.41548977952647E+01 0.43649568441795E+01 -.37622208485992E+01  
h 0.34056199095051E+01 0.60721393320137E+01 -.12111316980419E+01  
h 0.88632097731422E+00 0.54317691431547E+01 0.54530424123692E+00  
c 0.13222123106543E+01 -.15225130354859E+01 0.23060489550268E+01  
c 0.12008446669207E+01 -.48003628123021E+00 0.34237754603462E+01  
n 0.18077796556771E+00 -.24259173280176E+01 0.23844773646837E+01  
c 0.23521035833989E+01 0.54604801823153E+00 0.34597227919945E+01  
c 0.19147660594767E+01 0.19374924782838E+01 0.39549616473398E+01  
c 0.13702611321040E+01 0.28510476776335E+01 0.28557939710729E+01  
n 0.12178436841871E+00 0.23352856575208E+01 0.22015135824124E+01  
h 0.22448419314304E+01 -.21210022790466E+01 0.24454862230040E+01  
h 0.22561328725960E+00 0.19564079990226E-01 0.32803324025044E+01  
h 0.11287609382679E+01 -.10138452266703E+01 0.43852322363103E+01  
h -.67151150051088E+00 -.18783725677034E+01 0.25148754355684E+01  
h 0.31539443399663E+01 0.16198156754836E+00 0.41103629280738E+01  
h 0.11759330468349E+01 0.18404341064280E+01 0.47716598076090E+01  
h 0.27781332428363E+01 0.24723742652518E+01 0.43851524134158E+01  
h 0.11304187324656E+01 0.38465107686324E+01 0.32584057357115E+01  
h 0.21071786633802E+01 0.29775029522455E+01 0.20479796408469E+01  
h -.24686864403343E+00 0.30563840901938E+01 0.15610330793145E+01  
h 0.29492082656773E+00 0.14561049276911E+01 0.16397841046129E+01  
h -.61886339627961E+00 0.21240290846751E+01 0.28853067328752E+01  
h 0.28075119238949E+01 0.66042586491267E+00 0.24578404797772E+01  
c 0.14368819421829E+01 -.76364327363608E+00 0.97357193257566E+00  
n 0.24499807577018E+01 -.11280460814229E+01 0.16091771170563E+00  
c 0.27992412384961E+01 -.41385852498722E+00 -.10679630293618E+01  
h 0.30273375926869E+01 -.19088729981503E+01 0.45917096798166E+00  
h 0.24874170593311E+01 -.96579083649331E+00 -.19666597342531E+01  
h 0.22895513979485E+01 0.55848946554060E+00 -.10530950568561E+01  
h 0.38880518029753E+01 -.26036070359380E+00 -.11002187707415E+01  
o 0.64250993149832E+00 0.16424812656358E+00 0.66850870002585E+00  
c 0.24846876183470E-01 -.33009877808418E+01 0.12173135670409E+01  
h -.82255127908750E+00 -.39843347938469E+01 0.13866972535812E+01  
h 0.92816494414219E+00 -.39205662977682E+01 0.10942976947749E+01  
h -.15535316119530E+00 -.27575269744891E+01 0.27141640575170E+00

egcg met

c -.31109292040255E+01 -.55734996180818E+01 -.16107072928721E+01  
c -.17088426630988E+01 -.55814430943033E+01 -.15139795239372E+01  
c -.10170365698325E+01 -.43584019041407E+01 -.15167479260278E+01  
c -.16990267650466E+01 -.31268477588516E+01 -.16244097965690E+01  
c -.31085854888397E+01 -.31633143423020E+01 -.16725256906386E+01  
c -.38265636178272E+01 -.43692321955146E+01 -.16777226611374E+01  
o -.38801164425015E+01 -.20083686117335E+01 -.16918126213247E+01  
c -.31759016020341E+01 -.79575746875283E+00 -.13572159544731E+01  
c -.18956989986684E+01 -.75090335533005E+00 -.22124961307425E+01

c -.94056641858039E+00 -.18235439388574E+01 -.17114849746451E+01  
c -.28624589407908E+01 -.69094937700028E+00 0.12716383946214E+00  
c -.29465980508849E+01 -.18151360007768E+01 0.97523407282368E+00  
c -.25405993695215E+01 -.16962962929810E+01 0.23115498112477E+01  
c -.20579578726842E+01 -.48165764025780E+00 0.28331541161834E+01  
c -.19957291083162E+01 0.64703181962928E+00 0.19891451143644E+01  
c -.24002219042916E+01 0.53578024688389E+00 0.64703900146991E+00  
o -.13496027044056E+01 0.58266583281876E+00 -.20479048563986E+01  
o -.38549284508028E+01 -.67391793641968E+01 -.16173716183817E+01  
o 0.35390008024045E+00 -.44245109246379E+01 -.14296895904016E+01  
o -.25886003125525E+01 -.27357064365854E+01 0.32317397364583E+01  
o -.16813800233139E+01 -.36282395929585E+00 0.41475978887668E+01  
o -.15811385850901E+01 0.18692849502555E+01 0.24556617592891E+01  
c -.26835901631749E+00 0.87978939700481E+00 -.28194215375119E+01  
c 0.30335942388755E+00 0.22007430969212E+01 -.24541918260205E+01  
c -.46470920368674E+00 0.31767993313890E+01 -.17886292184254E+01  
c 0.13071090524259E+00 0.43994951194602E+01 -.14537469584727E+01  
c 0.14905384649761E+01 0.46238268031854E+01 -.17385367094273E+01  
c 0.22449128699196E+01 0.36398215359081E+01 -.24003864303174E+01  
c 0.16580971256703E+01 0.24276520524660E+01 -.27776517703514E+01  
o 0.19528794535192E+01 0.12362838939289E+00 -.36685515252442E+01  
o 0.35672066199135E+01 0.39882716075012E+01 -.26271979274869E+01  
o 0.20282884627914E+01 0.58283145725874E+01 -.13470012518822E+01  
o -.61112659610734E+00 0.53683480906916E+01 -.82813981075004E+00  
h -.11408639074165E+01 -.65144185811305E+01 -.14322652024412E+01  
h -.49186070210335E+01 -.43654269091435E+01 -.17207785547291E+01  
h -.38528440203806E+01 0.16444651761260E-01 -.16681604748516E+01  
h -.21555590261552E+01 -.91014640299731E+00 -.32729003714366E+01  
h -.55681443800396E+00 -.15155513905939E+01 -.72168856875416E+00  
h -.89991746671650E-01 -.19264623608949E+01 -.24006798601731E+01  
h -.33333153716181E+01 -.27722283039994E+01 0.61359825991421E+00  
h -.23423144290000E+01 0.14303234329598E+01 0.22550860776325E-01  
h -.32451917614000E+01 -.74906982907885E+01 -.15855688212567E+01  
h 0.72830620865752E+00 -.35523398353510E+01 -.11879637273350E+01  
h -.29239264341380E+01 -.35290699140431E+01 0.27886930966326E+01  
h -.18319132660280E+01 -.12279159551537E+01 0.45647641636598E+01  
h -.87521327673538E+00 0.17269766691747E+01 0.31323374476930E+01  
h -.15171707683121E+01 0.30087601034385E+01 -.15495855246745E+01  
h 0.22280045840163E+01 0.16520888545081E+01 -.33013278652972E+01  
h 0.39855842681562E+01 0.33045676258647E+01 -.31704550692795E+01  
h 0.29497710272833E+01 0.58575538111938E+01 -.16549738688859E+01  
h -.51339936590897E-01 0.61577422977412E+01 -.73377714084389E+00  
c 0.14795335685082E+01 0.36078144115724E+01 0.14753593096179E+01  
h 0.72107756973025E+00 0.42900837489481E+01 0.10678492378123E+01  
h 0.24671966048225E+01 0.39071799033224E+01 0.10851706547771E+01  
h 0.14849389861749E+01 0.37277456414678E+01 0.25778795539357E+01  
c 0.19891488925755E+01 0.12535988067406E+01 0.17358845019156E+01  
c 0.18274156539653E+01 0.12766812331874E+01 0.32659538311343E+01  
o 0.72835378563915E+00 0.14495145101227E+01 0.38226399574404E+01  
c 0.16767933674468E+01 -.16416009694121E+00 0.12243007374579E+01  
c 0.19711628472955E+01 -.26600238988503E+00 -.27946188831949E+00  
s 0.24488061210774E+01 -.19833234998707E+01 -.70952101869215E+00  
c 0.28669089757130E+01 -.17212638069681E+01 -.24688052498492E+01  
n 0.11776752443232E+01 0.22379622243955E+01 0.10362236849570E+01  
h 0.30516433966255E+01 0.14750132740489E+01 0.15024543486890E+01  
h 0.22970917044977E+01 -.88749405173729E+00 0.17841032228905E+01

h 0.61904170675242E+00 -.40758059532627E+00 0.14353595632774E+01  
h 0.11008060329599E+01 0.44123255275220E-01 -.87477974525026E+00  
h 0.28154313509456E+01 0.39282039318394E+00 -.55083700075292E+00  
h 0.31098541948411E+01 -.27071682872492E+01 -.28940813508320E+01  
h 0.20170196790811E+01 -.12816613636469E+01 -.30133640755429E+01  
h 0.37487283354866E+01 -.10653859891107E+01 -.25479612604151E+01  
h 0.19027105297078E+00 0.20452108215055E+01 0.12337331155565E+01  
n 0.29693350508347E+01 0.10508072159620E+01 0.39728135040910E+01  
c 0.29919263841546E+01 0.93188065839598E+00 0.54275301703137E+01  
h 0.19509046779952E+01 0.94471900056350E+00 0.57750901880048E+01  
h 0.34676853583602E+01 -.14342466973418E-01 0.57263531263402E+01  
h 0.35355899115668E+01 0.17734214793184E+01 0.58841605029367E+01  
h 0.38334348722534E+01 0.94572590465703E+00 0.34533718631619E+01

egcg phe

c -.26782352253017E+01 -.49518993786732E+01 -.17162445335297E+01  
c -.12839797802735E+01 -.48740014831424E+01 -.15465709193156E+01  
c -.65799616445883E+00 -.36215365162490E+01 -.16445471978446E+01  
c -.13922955271028E+01 -.24462429736749E+01 -.19060098205984E+01  
c -.27934223124365E+01 -.25603280163521E+01 -.20077837632474E+01  
c -.34485520706670E+01 -.37984789113305E+01 -.19271365850003E+01  
o -.36010412478432E+01 -.14464298094003E+01 -.21947713135599E+01  
c -.30008739704046E+01 -.21562050405428E+00 -.17146109947453E+01  
c -.16969214859586E+01 -.50589580655003E-01 -.25255674614925E+01  
c -.69586411665636E+00 -.11271562575085E+01 -.21280418379582E+01  
c -.28139263415783E+01 -.25863538669359E+00 -.20242232968545E+00  
c -.34701426051724E+01 -.12497941828767E+01 0.56164209890751E+00  
c -.32801699143786E+01 -.12912777663367E+01 0.19498181969005E+01  
c -.24420590578792E+01 -.37306027001694E+00 0.26123082967295E+01  
c -.18062877174277E+01 0.62314669485707E+00 0.18507215027905E+01  
c -.20187575332068E+01 0.69586928159570E+00 0.46235190622326E+00  
o -.99750486786454E+00 0.11838869555961E+01 -.22551397053035E+01  
o -.33627801003660E+01 -.61513874951243E+01 -.16473719736813E+01  
o 0.71780602464988E+00 -.35924198589596E+01 -.15063813432978E+01  
o -.38504799061186E+01 -.22480055979115E+01 0.27814761311956E+01  
o -.21951918035959E+01 -.47041686784519E+00 0.39600405316233E+01  
o -.94149012901021E+00 0.14795206373828E+01 0.24946987863582E+01  
c -.15281680153946E+01 0.23380676471120E+01 -.27466368946586E+01  
c -.72944631637093E+00 0.35016700630318E+01 -.22711920958932E+01  
c 0.34230631210851E+00 0.33139466561269E+01 -.13707860158162E+01  
c 0.10746844173843E+01 0.44293910043379E+01 -.94697085273608E+00  
c 0.74128313263582E+00 0.57168680117147E+01 -.14065312520737E+01  
c -.33437180753371E+00 0.58869955306053E+01 -.22983156703001E+01  
c -.10776560676551E+01 0.47860914503072E+01 -.27400307357047E+01  
o -.25179475856655E+01 0.23877771993603E+01 -.34664468265320E+01  
o -.55853858321258E+00 0.71997097543900E+01 -.26738754418132E+01  
o 0.14967265153450E+01 0.67711120589619E+01 -.94931353162368E+00  
o 0.21277152071660E+01 0.42515072532709E+01 -.79660564259820E-01  
h -.67668704078833E+00 -.57632702731297E+01 -.13459952739593E+01  
h -.45359345071808E+01 -.38608734006043E+01 -.20225234037687E+01  
h -.37178732639332E+01 0.56555527281797E+00 -.20110386410470E+01  
h -.19707133047283E+01 -.92560206913641E-01 -.35925584285051E+01  
h -.19483270881291E+00 -.76888742324405E+00 -.12119921082001E+01  
h 0.77629283142039E-01 -.12273670914439E+01 -.29103461231854E+01  
h -.41169915880324E+01 -.19889806455542E+01 0.79744871287493E-01  
h -.15039667726203E+01 0.14845884172123E+01 -.85188267631896E-01

h -.27203716802559E+01 -.68650046860716E+01 -.15221147601218E+01  
h 0.98776252096249E+00 -.27041840288151E+01 -.12080189582919E+01  
h -.43478474475143E+01 -.28767106596080E+01 0.22381302747882E+01  
h -.27425109922258E+01 -.12033883144818E+01 0.42902981113881E+01  
h -.23094978301537E+00 0.16538811615089E+01 0.18492173213296E+01  
h 0.60293976849818E+00 0.23277041333041E+01 -.98284024168582E+00  
h -.19178248742194E+01 0.48999243615839E+01 -.34337447931008E+01  
h -.13184886477333E+01 0.72338559201015E+01 -.32731004252907E+01  
h 0.11407545130750E+01 0.75864185853425E+01 -.13410989323928E+01  
h 0.25200419446156E+01 0.51232815751578E+01 0.99577881614139E-01  
c 0.29902847731574E+01 0.84332037820563E+00 -.20206218451248E+01  
h 0.31609075773544E+01 0.16794855559785E+01 -.27154326659545E+01  
h 0.19108897155576E+01 0.59001334015698E+00 -.20423786870185E+01  
h 0.35628833875212E+01 -.25149428415711E-01 -.23866682712425E+01  
c 0.33081982718790E+01 -.27105940366285E+00 0.27841683997407E+01  
c 0.21303860258263E+01 0.24411796028594E-02 0.35140056646342E+01  
c 0.16095889844127E+01 -.93859389802299E+00 0.44222159603338E+01  
c 0.22660477550392E+01 -.21703380923913E+01 0.46102361945156E+01  
c 0.34539324058542E+01 -.24465663506366E+01 0.39028796708116E+01  
c 0.39719740335729E+01 -.15001133565483E+01 0.29975729222117E+01  
h 0.16036350814323E+01 0.95033438230563E+00 0.33618761139958E+01  
h 0.68722446277711E+00 -.70890144570659E+00 0.49661418346564E+01  
h 0.39756466460152E+01 -.33973323248351E+01 0.40563812944344E+01  
c 0.37646614435194E+01 0.66904481051618E+00 0.16916191748625E+01  
c 0.32590417130371E+01 0.18225723081085E+00 0.30726552317923E+00  
n 0.34894907849828E+01 0.12165762198661E+01 -.68954583272621E+00  
h 0.38246500622426E+01 -.72314191674473E+00 0.11644571199223E-01  
h 0.30248091721566E+01 0.20756135151161E+01 -.37912689838296E+00  
h 0.33477506805663E+01 0.16771210570099E+01 0.18621563412812E+01  
h 0.48623601514101E+01 0.75458604362921E+00 0.16488595834194E+01  
c 0.17799248464956E+01 -.18788109573319E+00 0.48507320716760E+00  
o 0.90556558090711E+00 0.69465711696710E+00 0.50129845719854E+00  
n 0.14888498015239E+01 -.15198722706785E+01 0.63298248017956E+00  
c 0.21424189347022E+00 -.19380092243031E+01 0.12449224635437E+01  
h 0.48991131416425E+01 -.17155741401091E+01 0.24511613943177E+01  
h 0.22968539189633E+01 -.20950329206403E+01 0.86942530340438E+00  
h 0.19342310325516E+00 -.30368393792217E+01 0.12702708852029E+01  
h 0.12823713345801E+00 -.15375413645374E+01 0.22673725442813E+01  
h -.63249005808120E+00 -.15780661048800E+01 0.64590583933467E+00  
h 0.18613607350620E+01 -.29077001521063E+01 0.53112324832603E+01

geni ala

c -.22508567375684E+01 -.27165491308265E+01 -.90550243108573E+00  
c -.14127143449219E+01 -.28306092735965E+01 0.21965212325979E+00  
c -.26770691662792E+01 -.14662028076184E+01 -.13577646264397E+01  
c -.22329361940481E+01 -.33143175737192E+00 -.66403672612516E+00  
c -.13731536982924E+01 -.38386226978831E+00 0.46349398312740E+00  
c -.97990627814407E+00 -.16859598369420E+01 0.90717739701153E+00  
o -.26939139606480E+01 0.86357880335937E+00 -.11834635709456E+01  
c -.22605539777303E+01 0.20174807742425E+01 -.61421946961417E+00  
c -.13881523964589E+01 0.21046096478532E+01 0.43729687131913E+00  
c -.88988418302428E+00 0.87283970609851E+00 0.10867746114503E+01  
c -.95273172675394E+00 0.34389813436883E+01 0.90487460370792E+00  
c -.56750115775828E+00 0.44335776073655E+01 -.23904936578667E-01  
c -.19162414186618E+00 0.57180645862679E+01 0.39992483641925E+00  
c -.18365191358306E+00 0.60194626111029E+01 0.17728321863093E+01

c -.54914121812705E+00 0.50361441671568E+01 0.27120766413132E+01  
c -.92773545801541E+00 0.37543578532442E+01 0.22817535633846E+01  
o 0.20110324407651E+00 0.72948720813775E+01 0.21350789985691E+01  
o -.26823904405563E+01 -.38191054246645E+01 -.16089630569779E+01  
o -.18687970264910E+00 -.18072017900684E+01 0.20035229951439E+01  
o -.11776454836426E+00 0.92038599337621E+00 0.20599783004877E+01  
h -.10853855339057E+01 -.38132822534174E+01 0.57776870971635E+00  
h -.33383437479194E+01 -.13664360411444E+01 -.22217278284010E+01  
h -.27050576039441E+01 0.28886025278317E+01 -.11030517742664E+01  
h -.54053254856429E+00 0.41912108361385E+01 -.10925182220259E+01  
h 0.11196592976115E+00 0.64869766732975E+01 -.31706208040347E+00  
h -.53718810345974E+00 0.52701133216156E+01 0.37837390768415E+01  
h -.12029583097745E+01 0.29941494803328E+01 0.30171669602882E+01  
h 0.17866734580131E+00 0.73619975670211E+01 0.31009354509565E+01  
h -.23595957766892E+01 -.46173347612201E+01 -.11638828389242E+01  
h 0.37722940112916E+00 -.26071787548245E+01 0.18686942639619E+01  
c 0.21333789433822E+01 -.30416578453226E+01 -.14509385428142E+01  
c 0.20151806025116E+01 -.26731408230804E+01 0.40814934150359E-01  
o 0.15949718694873E+01 -.34984443975993E+01 0.88723705344558E+00  
c 0.11432324703899E+01 -.41442327571402E+01 -.18437366152618E+01  
n 0.21059427093116E+01 -.18136219236121E+01 -.22684149033570E+01  
h 0.31574846692617E+01 -.34497929395477E+01 -.15492937173370E+01  
h 0.13235910186155E+01 -.44522660177945E+01 -.28869688492173E+01  
h 0.12806591570165E+01 -.50166540884958E+01 -.11882770050428E+01  
h 0.10283073205403E+00 -.38020282840811E+01 -.17540974048539E+01  
h 0.25305977844826E+01 -.20123026196209E+01 -.31753117025842E+01  
n 0.24661366669392E+01 -.14405107451100E+01 0.34245669331247E+00  
c 0.26689615683820E+01 -.94292708397963E+00 0.17029586323881E+01  
h 0.18430951800538E+01 -.28987357703863E+00 0.20186951538881E+01  
h 0.27276485089378E+01 -.18063942332263E+01 0.23803174399437E+01  
h 0.36225434884274E+01 -.39458652271775E+00 0.17345461073882E+01  
c 0.75346412257612E+00 -.12632236451227E+01 -.24693630072395E+01  
h 0.27409563348309E+01 -.88729748828898E+00 -.46894585892961E+00  
h 0.83705372274858E+00 -.30691382054242E+00 -.30093910680073E+01  
h 0.70894009205491E-01 -.19258396693960E+01 -.30329442388829E+01  
h 0.30003338966382E+00 -.10605429981705E+01 -.14859871124690E+01

geni gln

c -.28778470779562E+01 -.33695649450459E+01 -.10440486734991E+01  
c -.21767792902396E+01 -.33782620195149E+01 0.17767542977373E+00  
c -.31752407924896E+01 -.21702889378884E+01 -.16969858001149E+01  
c -.27454170739979E+01 -.97850698083434E+00 -.11012868294808E+01  
c -.20426168884273E+01 -.92412531398337E+00 0.13104881994439E+00  
c -.17616795750383E+01 -.21752678871994E+01 0.77018577696855E+00  
o -.30367673583542E+01 0.16171988946926E+00 -.18271432113134E+01  
c -.25515585876166E+01 0.13461801522309E+01 -.13826497488261E+01  
c -.18085673040838E+01 0.15186556695078E+01 -.24391613118410E+00  
c -.15392622455958E+01 0.36770550563024E+00 0.63537625280205E+00  
c -.12691248641604E+01 0.28564911043646E+01 0.81663303274889E-01  
c -.58911082951393E+00 0.36124888634385E+01 -.90086234395421E+00  
c -.98006735068936E-01 0.48957803466850E+01 -.61454122382775E+00  
c -.27652202813847E+00 0.54361496476363E+01 0.67150354237602E+00  
c -.94366988184159E+00 0.46917405694026E+01 0.16640877922828E+01  
c -.14328476023388E+01 0.34076043620630E+01 0.13718599410945E+01  
o 0.23469071590211E+00 0.66967323443112E+01 0.89844439160034E+00  
o -.33022474238518E+01 -.45282012110757E+01 -.16493931231444E+01

o -.10806949038197E+01 -.21723209214336E+01 0.19388065375779E+01  
o -.87454630813683E+00 0.49789415679614E+00 0.16865206092123E+01  
h -.19513048116049E+01 -.43225320253181E+01 0.68728891553239E+00  
h -.37136451167096E+01 -.21573705698666E+01 -.26473274400108E+01  
h -.28290818694130E+01 0.21654676140126E+01 -.20513120258343E+01  
h -.42131892092841E+00 0.31796386656821E+01 -.18934690051909E+01  
h 0.43764166683626E+00 0.54803667473886E+01 -.13687728415699E+01  
h -.10797329915347E+01 0.51126675826603E+01 0.26678216013916E+01  
h -.19424224243661E+01 0.28303494138671E+01 0.21483106200015E+01  
h 0.59272181399622E-01 0.69436148898870E+01 0.18184642547208E+01  
h -.30400052835564E+01 -.52821254796955E+01 -.11001684854560E+01  
h -.63844611016131E+00 -.30549441031307E+01 0.20454252618527E+01  
c 0.25995523662843E+01 0.50703566482701E+00 -.20900248378776E+00  
c 0.20841186091493E+01 -.88021552410561E+00 -.63969824251016E+00  
c 0.19362847949704E+01 -.18184473555819E+01 0.56878805448046E+00  
c 0.15680270905716E+01 -.32461328681969E+01 0.10946781025222E+00  
c 0.14974567251707E+01 -.42037559231468E+01 0.12805062885891E+01  
n 0.26208625137256E+01 -.49320564082466E+01 0.15260887215338E+01  
o 0.48997491906765E+00 -.43300445338820E+01 0.20075070288390E+01  
o 0.83664580890021E+00 -.87003880881144E+00 -.14109585385505E+01  
o 0.37139582256281E+00 0.91749527417927E+00 -.58083417556335E+00  
n 0.17616765697768E+01 0.12585909825191E+01 0.55479718457786E+00  
c 0.21766657559818E+01 0.25795671345685E+01 0.10138783436762E+01  
h 0.28807686442011E+01 -.12633973361697E+01 -.13040961293155E+01  
h 0.28921364454032E+01 -.18304068946095E+01 0.11226600731091E+01  
h 0.11601779482606E+01 -.14380734599353E+01 0.12561873152713E+01  
h 0.58951537662725E+00 -.32324868591697E+01 -.39196722455956E+00  
h 0.23159754404526E+01 -.35958481732864E+01 -.62369134904323E+00  
h 0.26493376950086E+01 -.55279508267987E+01 0.23457075701104E+01  
h 0.34550866989241E+01 -.48234252072140E+01 0.96506445035760E+00  
h 0.58768338048783E-01 -.64440413636303E+00 -.78847847120430E+00  
h 0.90738105751632E+00 0.86559130803954E+00 0.94868561435244E+00  
h 0.30375908303668E+01 0.25095352052494E+01 0.16994265062256E+01  
h 0.24722562127888E+01 0.32007264824211E+01 0.15543780481124E+00  
h 0.13255423196355E+01 0.30452367937544E+01 0.15295674988404E+01  
c 0.85576941205732E+00 0.89107592269152E-01 -.25218287697954E+01  
h -.11272567251760E+00 0.46853514937474E-01 -.30458400489457E+01  
h 0.10492412911979E+01 0.11342815219023E+01 -.22070362442011E+01  
h 0.16448143176088E+01 -.20507428919629E+00 -.32329447545500E+01

geni glu

c -.16904121129950E+01 -.86900790999332E+00 0.16928747735106E+01  
c -.29959881328867E+00 -.75156927009940E+00 0.19105887974611E+01  
c -.24251086735567E+01 0.24718184603882E+00 0.12583231808234E+01  
c -.17379296392175E+01 0.14450151350746E+01 0.10276293107938E+01  
c -.33565379229232E+00 0.16062704799286E+01 0.11989251883817E+01  
c 0.36678432637186E+00 0.44555451338583E+00 0.16485292667026E+01  
o -.25465423970017E+01 0.24934014413803E+01 0.59751185746805E+00  
c -.19560178265921E+01 0.36747454617345E+01 0.30510399220696E+00  
c -.61723371839162E+00 0.39428624790139E+01 0.40538943211687E+00  
c 0.30882986309248E+00 0.29038789932496E+01 0.92127462686256E+00  
c -.12273078224362E+00 0.52802293240446E+01 0.11270725638444E-01  
c -.58265484801486E+00 0.58993304362297E+01 -.11748966565597E+01  
c -.15901753526429E+00 0.71882717338529E+01 -.15395168463853E+01  
c 0.75525194385200E+00 0.78720286085892E+01 -.72152460431976E+00  
c 0.12399330863005E+01 0.72653415019461E+01 0.45188448019406E+00

c 0.80698786017078E+00 0.59790656209131E+01 0.81467454675868E+00  
o 0.11506080827270E+01 0.91379745525930E+01 -.11269501880029E+01  
o -.23267540557759E+01 -.20475040688115E+01 0.18852883869707E+01  
o 0.17288089469994E+01 0.50989981236991E+00 0.18023642579691E+01  
o 0.15177039288476E+01 0.31452406114110E+01 0.10928065388735E+01  
h 0.27750479709854E+00 -.16249212542930E+01 0.22438375655241E+01  
h -.35016109752436E+01 0.18496409356324E+00 0.10799773748134E+01  
h -.26937619607988E+01 0.44166281032118E+01 -.14970735904895E-01  
h -.12643383350579E+01 0.53513698520884E+01 -.18353078922670E+01  
h -.51069069989242E+00 0.76619510545332E+01 -.24614612919493E+01  
h 0.19616158396809E+01 0.77966148920255E+01 0.10854995871986E+01  
h 0.11955725992932E+01 0.55073395944107E+01 0.17202793536234E+01  
h 0.18075425332077E+01 0.94631192682190E+01 -.49453338491542E+00  
h -.16211536804586E+01 -.27750565062411E+01 0.18727112603929E+01  
h 0.20171679810461E+01 -.39127321479254E+00 0.20352508352935E+01  
c -.14658896776898E+01 -.52585507908317E+01 -.21557844693624E+01  
h -.24406085891765E+01 -.56660300165546E+01 -.18420617761503E+01  
h -.11342573181351E+01 -.58156826886528E+01 -.30490424217900E+01  
h -.16084084605482E+01 -.41973393646041E+01 -.24469854877779E+01  
c 0.72819822920075E+00 -.40458697478136E+01 0.16851409556975E+01  
c 0.13341995568403E+01 -.53419606168609E+01 0.11372079269420E+01  
h 0.21824967361585E+01 -.56173734579848E+01 0.17847796531066E+01  
c 0.18647114832192E+01 -.52218552227293E+01 -.30869369244171E+00  
c 0.81467891752883E+00 -.48878533436721E+01 -.14056015863466E+01  
c 0.85625129262820E+00 -.33894223038154E+01 -.17816104322966E+01  
h 0.11547081981572E+01 -.53664493859774E+01 -.23418491707585E+01  
n -.49343683674669E+00 -.54563641332475E+01 -.10785181520289E+01  
h 0.26731087065458E+01 -.44706804132073E+01 -.34796496432959E+00  
o 0.15765693946019E+01 -.30095224676595E+01 -.27279154175844E+01  
n 0.79265846734641E-01 -.25340158994569E+01 -.10669576260972E+01  
c 0.11480865063239E+00 -.11049699709294E+01 -.13578619128295E+01  
h 0.23197799453428E+01 -.61936409151479E+01 -.56867075607571E+00  
h -.83399451452681E+00 -.50276326864152E+01 -.20954652673330E+00  
h -.34482367908182E+00 -.28739357521316E+01 -.19922463377316E+00  
h 0.85675914221787E-01 -.96593395765263E+00 -.24490365298961E+01  
h -.75884595879160E+00 -.62381037105707E+00 -.89554668981429E+00  
h 0.10346280231646E+01 -.62959382354069E+00 -.97618334870175E+00  
o -.54264298570570E+00 -.38847383704728E+01 0.14511319852141E+01  
o 0.14795782495005E+01 -.32314213243783E+01 0.22802275289781E+01  
h 0.58114693332211E+00 -.61443001607833E+01 0.11777338055760E+01

geni ile

c -.34971237892749E+01 -.19967010159276E+01 0.80138897382553E+00  
c -.25246784025061E+01 -.22621184214669E+01 -.18065110662623E+00  
c -.38190247154110E+01 -.68472902054658E+00 0.11574165131629E+01  
c -.31379442028165E+01 0.35515509390164E+00 0.50937281062563E+00  
c -.21446426759719E+01 0.15038400936008E+00 -.48142313999660E+00  
c -.18545603933690E+01 -.12078503818037E+01 -.82488749416890E+00  
o -.34835273864153E+01 0.16180746416027E+01 0.95341487766308E+00  
c -.28080111961998E+01 0.26806786717095E+01 0.44664540956435E+00  
c -.18332503058480E+01 0.26169743233482E+01 -.51211327606798E+00  
c -.14301815625924E+01 0.13076872681369E+01 -.10706746514453E+01  
c -.11921174799728E+01 0.38671389771961E+01 -.97469596253549E+00  
c -.19674432745543E+01 0.50100530972036E+01 -.12768471330362E+01  
c -.13636020451068E+01 0.62157503532832E+01 -.16677347785382E+01  
c 0.36086021642227E-01 0.62868863798751E+01 -.17748455090453E+01

c 0.82271937485100E+00 0.51537421710542E+01 -.14924701363366E+01  
c 0.21263228867689E+00 0.39515496732557E+01 -.10995097585574E+01  
o 0.57727696772465E+00 0.74946701605817E+01 -.21695706714823E+01  
o -.41694360204335E+01 -.30057048661724E+01 0.14544631471709E+01  
o -.90892481897265E+00 -.14648553185915E+01 -.17595460622422E+01  
o -.54798601463942E+00 0.12170576550330E+01 -.19420046913727E+01  
h -.22722671741337E+01 -.32930430974888E+01 -.45504826184260E+00  
h -.45701421751573E+01 -.46800008701445E+00 0.19204038982411E+01  
h -.31337348153306E+01 0.36135971824104E+01 0.91488477691305E+00  
h -.30604951026309E+01 0.49477514001877E+01 -.12272426166387E+01  
h -.19628135662419E+01 0.70990468258331E+01 -.19089242586921E+01  
h 0.19146456254736E+01 0.52082090728424E+01 -.15836139127025E+01  
h 0.82842436730239E+00 0.30726645143779E+01 -.89093703597476E+00  
h 0.15388361661916E+01 0.73971566723142E+01 -.22296772273451E+01  
h -.38606608661313E+01 -.38563389399598E+01 0.11084166510119E+01  
h -.56146671746911E+00 -.23812257617305E+01 -.15910365662442E+01  
c 0.38830873220191E+01 -.14615111878092E+01 -.11309200764535E+01  
h 0.49516253641378E+01 -.12912308845743E+01 -.92744467523022E+00  
h 0.34773682737492E+01 -.59744447652389E+00 -.16918693764662E+01  
h 0.37940228062419E+01 -.23540011677210E+01 -.17711211149462E+01  
c 0.17275673113527E+01 -.18771498872951E+01 -.87048430800292E-01  
c 0.14155761738161E+01 -.33387436446539E+01 -.41531426952230E+00  
c 0.88591880553570E+00 -.14442876118006E+01 0.11396583510139E+01  
c 0.13442338562252E+01 -.21256993449467E+01 0.24372024693472E+01  
c 0.85959099521646E+00 0.90804614516131E-01 0.12491246266075E+01  
c -.11985796663350E+00 0.60442012620914E+00 0.23147153755851E+01  
n 0.31723206750926E+01 -.17059181011192E+01 0.13639292085993E+00  
h 0.13740273529625E+01 -.12816625985004E+01 -.95270656142869E+00  
h -.14765313265403E+00 -.17708446177127E+01 0.92735115469809E+00  
h 0.64973158083501E+00 -.18929508018937E+01 0.32592715951423E+01  
h 0.18737278998811E+01 0.47504277946424E+00 0.14768579274922E+01  
h 0.58497330563680E+00 0.49687539118051E+00 0.26065231189294E+00  
h -.27495830954978E+00 0.16910367611769E+01 0.22101232774343E+01  
h -.11010402017168E+01 0.11060210730839E+00 0.22101025859619E+01  
h 0.25060691123512E+00 0.41592185405368E+00 0.33350993968866E+01  
h 0.33135850101706E+00 -.90186755763311E+00 0.74910981977935E+00  
o 0.32758519870580E+00 -.36891132036224E+01 -.93656388783972E+00  
n 0.23677743600376E+01 -.42268056426833E+01 -.76344201781858E-01  
c 0.21923220614394E+01 -.56584002481920E+01 -.28096346721300E+00  
h 0.31993864459029E+01 -.38223724758149E+01 0.35334608300643E+00  
h 0.31480356485510E+01 -.61622355388484E+01 -.83169912278924E-01  
h 0.14208909288409E+01 -.60617718726541E+01 0.39407300505839E+00  
h 0.18805906779870E+01 -.58529614575178E+01 -.13176832701827E+01  
h 0.13719145949637E+01 -.32221052673649E+01 0.23266799234165E+01  
h 0.23504599393347E+01 -.17892872778326E+01 0.27384356126739E+01

geni lys

c -.43474617774327E+01 -.22970860478037E+01 -.22263626305366E+00  
c -.29644716803125E+01 -.22791311015716E+01 0.72466398859492E-01  
c -.50381921036342E+01 -.11099836300197E+01 -.47181792991848E+00  
c -.43267815359522E+01 0.95613346713732E-01 -.40856041540040E+00  
c -.29430802085239E+01 0.17620835996971E+00 -.98200724054911E-01  
c -.22749974660480E+01 -.10664472977901E+01 0.12766039946805E+00  
o -.50761365018591E+01 0.12181831388088E+01 -.66668289092601E+00  
c -.44663889567866E+01 0.24248346077517E+01 -.63454282286805E+00  
c -.31383960996302E+01 0.26310092827364E+01 -.35361741549291E+00



c -.22870493276932E+01 0.14884573953427E+01 -.29350040870948E-01  
c -.25894816380409E+01 0.40052627070403E+01 -.40335471953766E+00  
c -.27846886154871E+01 0.48063663359003E+01 -.15511595273449E+01  
c -.23032479836076E+01 0.61233102423674E+01 -.16015248165827E+01  
c -.16125328477246E+01 0.66545356383242E+01 -.49659609126411E+00  
c -.14049924251708E+01 0.58642723920577E+01 0.65215180850833E+00  
c -.18877505975456E+01 0.45465349984856E+01 0.69543283842073E+00  
o -.11644562371450E+01 0.79483665339181E+01 -.60807675360969E+00  
o -.50696613291409E+01 -.34561162391880E+01 -.28494857353624E+00  
o -.93455196528448E+00 -.10162846600419E+01 0.38988365450650E+00  
o -.10780072795148E+01 0.16685367086386E+01 0.27599752948857E+00  
h -.24278872055446E+01 -.32161081109724E+01 0.26546884899853E+00  
h -.61052175864583E+01 -.11148561108972E+01 -.70610950766110E+00  
h -.51687470979423E+01 0.32331682485468E+01 -.85335553634852E+00  
h -.33070057001622E+01 0.43892037780170E+01 -.24197889917237E+01  
h -.24505620185008E+01 0.67485673479747E+01 -.24871725068575E+01  
h -.87490913368846E+00 0.62819479768821E+01 0.15165754061758E+01  
h -.17342440608085E+01 0.39426017921687E+01 0.15948380104518E+01  
h -.73939604202851E+00 0.82142458557420E+01 0.22093503936446E+00  
h -.45047275424124E+01 -.42114314939615E+01 -.63558891729676E-01  
h -.54138628182585E+00 -.19054024137893E+01 0.48806477912298E+00  
c 0.37216698290477E+01 -.27850171104800E+01 0.72388831692389E+00  
c 0.40035533865370E+01 -.12806178225616E+01 0.66462390056049E+00  
n 0.39548593881839E+01 -.32761282197788E+01 0.20826148380765E+01  
c 0.37761394342172E+01 -.66574374525855E+00 -.73129988740282E+00  
c 0.34207340119773E+01 0.83458616750686E+00 -.69983392720245E+00  
c 0.19201440309627E+01 0.11095944106730E+01 -.59596071043756E+00  
n 0.12900571448764E+01 0.56937145232167E+00 0.65321223560100E+00  
h 0.44165509525978E+01 -.33246798556528E+01 0.51735636230431E-01  
h 0.33647413819895E+01 -.80079189926066E+00 0.14268179851643E+01  
h 0.50414388738129E+01 -.11145308935737E+01 0.99443934756510E+00  
h 0.33199994245005E+01 -.27891588408595E+01 0.27204048978891E+01  
h 0.46865692811827E+01 -.81545562772997E+00 -.13339467565765E+01  
h 0.39625304271025E+01 0.13404723764495E+01 0.12047105926305E+00  
h 0.37541629562022E+01 0.13206798533822E+01 -.16316342533036E+01  
h 0.16999555483995E+01 0.21870709181491E+01 -.61524074865544E+00  
h 0.13763220717248E+01 0.64039715269871E+00 -.14301352830603E+01  
h 0.25643330033371E+00 0.80340111807644E+00 0.62154419046979E+00  
h 0.13827746880732E+01 -.46147863631672E+00 0.72921159882448E+00  
h 0.17017708911425E+01 0.99825977960868E+00 0.14870179555596E+01  
h 0.29704693484568E+01 -.12023835753777E+01 -.12681033750239E+01  
c 0.22814824956322E+01 -.30396142894983E+01 0.26949654230814E+00  
n 0.20657053633780E+01 -.40513847962031E+01 -.59035568932241E+00  
c 0.72208817324572E+00 -.44186356073421E+01 -.10369218070293E+01  
h 0.28621828109909E+01 -.46018444968840E+01 -.89371954392716E+00  
h 0.1100085608325E+00 -.47460201040310E+01 -.18212845910051E+00  
h 0.23701296099513E+00 -.35590087697244E+01 -.15238820259691E+01  
h 0.80597291184418E+00 -.52417253776464E+01 -.17580303197473E+01  
o 0.13308789601804E+01 -.23435401737784E+01 0.71506677410688E+00  
c 0.37909671604622E+01 -.47289954228546E+01 0.22361131182824E+01  
h 0.40147891822779E+01 -.50008637796473E+01 0.32777583648324E+01  
h 0.45252924280664E+01 -.52381973609518E+01 0.15914347859239E+01  
h 0.27791595714293E+01 -.51063964048062E+01 0.19869209445927E+01

geni met

c -.41131145294400E+01 -.25465003405399E+01 0.74305841017262E-01

c -.27113394377231E+01 -.26539922942749E+01 0.17940752462243E+00  
c -.47408177128672E+01 -.12990708545703E+01 0.51190486384928E-01  
c -.39324866667469E+01 -.15784752294423E+00 0.14216914340985E+00  
c -.25212503561903E+01 -.20456430215709E+00 0.27021798337795E+00  
c -.19191200679790E+01 -.15008064230461E+01 0.27534425869475E+00  
o -.46216304039441E+01 0.10382225177668E+01 0.10206679837448E+00  
c -.39087201451019E+01 0.21928368976965E+01 0.12758141463467E+00  
c -.25457895612994E+01 0.22783372697238E+01 0.23372723593054E+00  
c -.17503615995826E+01 0.10474263417633E+01 0.38840445011891E+00  
c -.18813760802221E+01 0.35987238551824E+01 0.17044235968371E+00  
c -.22274775614177E+01 0.45221031218310E+01 -.84335742799581E+00  
c -.16162107341959E+01 0.57836220294303E+01 -.91564198485430E+00  
c -.63333240284112E+00 0.61330454508536E+01 0.27188964263745E-01  
c -.26997960026716E+00 0.52211937589228E+01 0.10370649960132E+01  
c -.88749073796339E+00 0.39618439225292E+01 0.11070140403520E+01  
o -.59491267586185E-01 0.73810494458854E+01 -.97031827300444E-01  
o -.49235331588177E+01 -.36530566730893E+01 -.17215253382533E-01  
o -.56256503944418E+00 -.15825183548359E+01 0.35978611929165E+00  
o -.52204205853974E+00 0.10957771888649E+01 0.59605081984135E+00  
h -.22288682110326E+01 -.36380547228309E+01 0.18493208633988E+00  
h -.22288682110326E+01 -.36380547228309E+01 0.18493208633988E+00  
h -.5256691842044E+01 -.12095118746014E+01 -.39173805521267E-01  
h -.45657331314992E+01 0.30643154992700E+01 0.63420852848143E-01  
h -.29670740257313E+01 0.42382331529129E+01 -.16007890471042E+01  
h -.18767492528751E+01 0.64966544219863E+01 -.17037314886608E+01  
h 0.49821423940170E+00 0.54932778645684E+01 0.17713106521056E+01  
h -.59603474705067E+00 0.32578213256439E+01 0.18904586073433E+01  
h 0.61158915692734E+00 0.74852449707516E+01 0.59352373171251E+00  
h -.43724167900923E+01 -.44495972268687E+01 0.55045104247944E-02  
h -.29624619866755E+00 -.25347605019524E+01 0.32201631136891E+00  
c 0.43327415788639E+01 -.14967422038312E+01 0.12801142041113E+01  
h 0.52991804241930E+01 -.18777587061060E+01 0.16443814951256E+01  
h 0.36101644845996E+01 -.15488987216036E+01 0.21116231282657E+01  
h 0.44572037560045E+01 -.43390656791312E+00 0.99456502509127E+00  
c 0.26056935287232E+01 -.18361624610920E+01 -.38258236055680E+00  
c 0.28031483140321E+01 -.45517269536932E+00 -.10311179794371E+01  
o 0.38095005146581E+01 -.23423827207571E+00 -.17320392746334E+01  
c 0.20831651216141E+01 -.27915768099548E+01 -.14662437035047E+01  
c 0.19281291459952E+01 -.42436798123990E+01 -.10075515040369E+01  
s 0.66982269211222E+00 -.45226509728927E+01 0.30513072177525E+00  
c 0.16615952710287E+01 -.43146925714048E+01 0.18271314463486E+01  
n 0.38592268717779E+01 -.23501963479248E+01 0.17759285682897E+00  
h 0.18716997462339E+01 -.17488201302800E+01 0.43749388232099E+00  
h 0.11232201995796E+01 -.24069451196755E+01 -.18534905356098E+01  
h 0.28011682207911E+01 -.27717221830724E+01 -.23081837447836E+01  
h 0.15993127787467E+01 -.48734433902015E+01 -.18510317842471E+01  
h 0.28816024909067E+01 -.46420855047609E+01 -.62784755205519E+00  
h 0.10229032418139E+01 -.46494260184813E+01 0.26591882573627E+01  
h 0.25548289897299E+01 -.49534289747877E+01 0.17696686058935E+01  
h 0.19616447548579E+01 -.32705769908641E+01 0.19822581544525E+01  
h 0.45490480992808E+01 -.22778511208377E+01 -.57918080574521E+00  
n 0.18297388169143E+01 0.45605502996863E+00 -.80751712873192E+00  
c 0.18940270120552E+01 0.17841429148883E+01 -.14083242299381E+01  
h 0.28449452887482E+01 0.22743651144169E+01 -.11481961858067E+01  
h 0.18323554646666E+01 0.17218822501665E+01 -.25065675365101E+01  
h 0.10523627417276E+01 0.23736650040972E+01 -.10194069039914E+01  
h 0.10286877173392E+01 0.23041731811829E+00 -.21605490132344E+00

geni phe

c -.26119946022591E+01 -.29500710382628E+01 -.38767580725870E+00  
c -.16636485399125E+01 -.26405448092043E+01 -.13820759652663E+01  
c -.32542269994144E+01 -.19383216850206E+01 0.33066578228613E+00  
c -.29209365553323E+01 -.60828767103300E+00 0.33464667957515E-01  
c -.19839528426211E+01 -.23886629632602E+00 -.96414601903860E+00  
c -.13474834802953E+01 -.13040570144636E+01 -.16734026285995E+01  
o -.35524770128368E+01 0.32803191914879E+00 0.82716333659404E+00  
c -.31809302401718E+01 0.16292327550023E+01 0.69802999093324E+00  
c -.22930030473123E+01 0.21147226174531E+01 -.22450583364678E+00  
c -.16538392232073E+01 0.11911570157213E+01 -.11853113607973E+01  
c -.19942831176416E+01 0.35629159158363E+01 -.25956613724399E+00  
c -.30250050638560E+01 0.45219009839482E+01 -.13066933530331E+00  
c -.27404638578953E+01 0.58964826263742E+01 -.11409184918835E+00  
c -.14094788977612E+01 0.63302565161960E+01 -.24174669803463E+00  
c -.37256992053584E+00 0.53889809263369E+01 -.38809061489883E+00  
c -.66309433305826E+00 0.40154268981664E+01 -.40143556883830E+00  
o -.11868770664511E+01 0.76928931354476E+01 -.22601010203819E+00  
o -.29328560715368E+01 -.42500113343760E+01 -.62776342072685E-01  
o -.39595743445177E+00 -.10142883555338E+01 -.26036187469540E+01  
o -.89334638708153E+00 0.15977022027108E+01 -.20797352136339E+01  
h -.11425599103951E+01 -.34359722461869E+01 -.19267481573519E+01  
h -.39805915467967E+01 -.21678844058703E+01 0.11139399365544E+01  
h -.36833985597979E+01 0.22551732671344E+01 0.14402389050477E+01  
h -.40673128318805E+01 0.41892421012801E+01 -.67079403220239E-01  
h -.35377435951290E+01 0.66403438815979E+01 -.22326036131874E-01  
h 0.66487376491748E+00 0.57281415241210E+01 -.49808268276283E+00  
h 0.14635468347556E+00 0.32918499434418E+01 -.52879079846532E+00  
h -.23999541554579E+00 0.78524289439578E+01 -.35172782967717E+00  
h -.24481291305700E+01 -.48450195996155E+01 -.65431096019877E+00  
h 0.30503742177928E+00 -.17094719368035E+01 -.25095809524424E+01  
c 0.35518624952894E+01 -.48948865648398E+00 -.28754295512870E+01  
h 0.35550978873062E+01 0.96465722090107E-01 -.38068711545936E+01  
h 0.33699161430172E+01 -.15523960142546E+01 -.31283769079802E+01  
h 0.45528422528806E+01 -.40494223423649E+00 -.24202565380570E+01  
c 0.11576539167255E+01 -.65127167886988E+00 0.14838499829274E+01  
c 0.11616680388608E+00 -.15974197921005E+01 0.16035400495720E+01  
c -.30628987505483E-01 -.23599812052716E+01 0.27770379530227E+01  
c 0.86842928432791E+00 -.21882586989396E+01 0.38480091515702E+01  
c 0.19019712398781E+01 -.12353801938537E+01 0.37451581014727E+01  
c 0.20408625703443E+01 -.46975104014501E+00 0.25709650280074E+01  
h -.57216273520495E+00 -.17466371717473E+01 0.76765352564186E+00  
h -.84750002063560E+00 -.30864113269999E+01 0.28529525895555E+01  
h 0.25922444821595E+01 -.10827736338619E+01 0.45818290015627E+01  
c 0.13839454082523E+01 0.71177448886979E-01 0.17913989032291E+00  
c 0.24725713833075E+01 -.61255087959977E+00 -.68822679923830E+00  
n 0.25635351295335E+01 0.84952761012909E-01 -.19572293145800E+01  
h 0.34476012570056E+01 -.50817066992335E+00 -.17029559544151E+00  
h 0.16374255190467E+01 0.12978408035173E+00 -.23909938331202E+01  
h 0.45564073827418E+00 0.10105954514414E+00 -.40920914968504E+00  
h 0.17101877207784E+01 0.11114486718071E+01 0.34480284813922E+00  
c 0.21822174211786E+01 -.21240968812521E+01 -.78426500938525E+00  
o 0.14757884743369E+01 -.26386255997729E+01 -.16797556034787E+01  
n 0.27492910070102E+01 -.28927772181693E+01 0.18012636209783E+00  
c 0.23242533592684E+01 -.42789486239416E+01 0.35915761572170E+00

h 0.28404590359806E+01 0.27849993238541E+00 0.24970985026393E+01  
h 0.31379294549396E+01 -.24050193002647E+01 0.98265674657683E+00  
h 0.29293752268535E+01 -.47301018096742E+01 0.11571839498473E+01  
h 0.12569044767675E+01 -.43279695218431E+01 0.63431494076422E+00  
h 0.24785996073515E+01 -.48335090834516E+01 -.57652404580499E+00  
h 0.75740926122123E+00 -.27809937082004E+01 0.47619596869006E+01

gluquer glu

c 0.15815929329469E-01 -.97316437321635E-02 0.13114267330607E+00  
c 0.14300996044840E+01 0.13464428570585E-01 0.81481394572710E-01  
c 0.20975021343210E+01 0.12347014830283E+01 0.48122129003210E-01  
c 0.13507197879252E+01 0.24522553323827E+01 0.42862879412553E-01  
c -.60257288716257E-01 0.23816581716320E+01 0.75186511360060E-01  
c -.75562342360123E+00 0.11610927246404E+01 0.13424818285423E+00  
o -.83037246680889E+00 0.35182997779282E+01 0.14114733869615E-01  
c -.25776813626695E+00 0.47653601407540E+01 -.81010766059223E-01  
c 0.11243360120200E+01 0.48936881052539E+01 -.52568540153648E-01  
c 0.19939613540406E+01 0.37421230892628E+01 0.21734700280444E-02  
c -.12500318671760E+01 0.58339103677014E+01 -.23760256892680E+00  
c -.35823986292094E+01 0.65571705042475E+01 -.19854229225859E+00  
c -.31921973297731E+01 0.78387700181640E+01 -.65938324693795E+00  
c -.18396381432240E+01 0.81161343272371E+01 -.90281542559421E+00  
o 0.34602759345815E+01 0.12634652782269E+01 0.24844445367970E-01  
o -.51422987356313E+00 -.12850050249913E+01 0.14227139671994E+00  
o 0.32567186621710E+01 0.39219583508387E+01 -.41490701897221E-03  
h 0.19891676927878E+01 -.92604581576313E+00 0.79757756561320E-01  
h -.18463125504328E+01 0.11495284889257E+01 0.15170122376288E+00  
h 0.37103319872018E+01 0.22217294739699E+01 0.13213388305911E-01  
c -.26192440684998E+01 0.55652656732352E+01 0.27172230457084E-01  
o -.49280669865436E+01 0.63966664942974E+01 0.54600470824449E-01  
c -.87181131727250E+00 0.71206777885380E+01 -.70062090765286E+00  
o -.41500271368163E+01 0.87949706869518E+01 -.85705098570641E+00  
h -.15550193563872E+01 0.91090843614479E+01 -.12649294224545E+01  
h -.29378009260789E+01 0.45924821837376E+01 0.40956518294852E+00  
h -.53498516820749E+01 0.57977973871473E+01 -.63380381962717E+00  
h 0.17454686084509E+00 0.73401815171027E+01 -.91138762516776E+00  
h -.49879947743044E+01 0.83485785286535E+01 -.62088918776125E+00  
o 0.17642523814508E+01 0.61022415495291E+01 -.96405681799886E-01  
h 0.27131663065186E+01 0.58479964254272E+01 -.68619710200009E-01  
c -.1835599739413E+01 -.14556647179671E+01 0.61156771057175E+00  
c -.20568059746141E+01 -.29564398758382E+01 0.79458526724966E+00  
o -.27361808873269E+01 -.96674978950718E+00 -.39036001972228E+00  
c -.34995431161862E+01 -.31946160718135E+01 0.12595265978930E+01  
c -.45017112509210E+01 -.24735255146737E+01 0.35252183611340E+00  
c -.41004711116757E+01 -.10032420367744E+01 0.99530157262193E-01  
o -.17840560273342E+01 -.36656861802081E+01 -.41583179101692E+00  
o -.35855400939802E+01 -.27228013488590E+01 0.26068036939269E+01

o -.57791614115219E+01 -.26388586790092E+01 0.92965454050366E+00  
c -.42808792846973E+01 0.58540129631610E-01 0.11970531963845E+01  
o -.37580578255725E+01 0.11638741916655E+01 0.11027063307305E+01  
o -.50547130387132E+01 -.28853401772423E+00 0.22463616173298E+01  
h -.51536537299202E+01 0.53329116895757E+00 0.27621555935658E+01  
h -.20335528041572E+01 -.30778957777379E+01 -.11466497920325E+01  
h -.45269222398077E+01 -.25164187598401E+01 0.27468648200915E+01  
h -.64521407653952E+01 -.21321065260485E+01 0.38656134291139E+00  
h -.19869463754707E+01 -.90590825250675E+00 0.15600375455490E+01  
h -.13629988534301E+01 -.33366607683202E+01 0.15611547436772E+01  
h -.37060539465312E+01 -.42798966172642E+01 0.12103372988435E+01  
h -.44452215874526E+01 -.29572517031065E+01 -.64446495175207E+00  
h -.47153514027659E+01 -.61459711841606E+00 -.72298249545735E+00  
c -.76659362955027E+01 0.42161048099928E+01 0.12711571703149E+01  
h -.78797020139517E+01 0.40052809295536E+01 0.23311013924789E+01  
h -.82865219739038E+01 0.50749974636441E+01 0.96391723685467E+00  
h -.66036841496543E+01 0.45190178753075E+01 0.11805805111685E+01  
c -.75145667182347E+01 -.50555678163993E-01 -.55810424203253E+00  
c -.87040925458386E+01 0.75726367229438E+00 -.10966044193701E+01  
h -.92676671482409E+01 0.10420588060124E+00 -.17825445068471E+01  
c -.83624410772989E+01 0.20756266540446E+01 -.18249577435842E+01  
c -.78637163678738E+01 0.32844868905222E+01 -.96771916110421E+00  
c -.64349525978390E+01 0.37359250190639E+01 -.13465596242354E+01  
h -.84776558564847E+01 0.41686538159320E+01 -.12150468770667E+01  
n -.80437869728732E+01 0.30465007759679E+01 0.46977174525597E+00  
h -.76291527707137E+01 0.18692278868258E+01 -.26240116309067E+01  
o -.62179385337557E+01 0.49358505366182E+01 -.16879909485907E+01  
n -.54808557097151E+01 0.27980384545659E+01 -.12751428205689E+01  
c -.41031043170128E+01 0.29999168339015E+01 -.17017192405729E+01  
h -.92847518572892E+01 0.24028842074083E+01 -.23348779868748E+01  
h -.74554010337442E+01 0.22416659391838E+01 0.71611243701872E+00  
h -.57879621538601E+01 0.18799284682041E+01 -.89777628722180E+00  
h -.38710699562679E+01 0.23213239979416E+01 -.25401722677189E+01  
h -.39787767751942E+01 0.40396653840521E+01 -.20336941215387E+01  
h -.34108727930721E+01 0.27845360788382E+01 -.87582375453124E+00  
o -.65157237111724E+01 0.61722113450900E+00 -.10376583918393E+00  
o -.75938360476686E+01 -.13150319907584E+01 -.56148052381764E+00  
h -.93655384707343E+01 0.97595526860968E+00 -.24019522347915E+00

quer ala

c 0.28903103659631E+01 -.30208706952760E+01 -.16072969569979E+01  
c 0.35312669052816E+01 -.33853941249890E+01 -.40137144026286E+00  
c 0.35070168914488E+01 -.25072399529888E+01 0.68521158225270E+00  
c 0.22134467110052E+01 -.18033818588023E+01 -.17502648770995E+01  
c 0.21842716222527E+01 -.94226687598322E+00 -.64411893804956E+00  
c 0.28269155114240E+01 -.12583997457492E+01 0.57315622411184E+00  
o 0.14774176816859E+01 0.22159189342632E+00 -.79417061431761E+00  
c 0.13629326682434E+01 0.11205004791950E+01 0.24329403422425E+00  
c 0.20066603466204E+01 0.88414994815946E+00 0.14473946173819E+01

c 0.27645794194000E+01 -0.32578942883628E+00 0.16753316534147E+01  
c 0.46151414312931E+00 0.22268502570316E+01 -0.73862399663180E-01  
c -0.55204827540442E+00 0.20100091881777E+01 -0.10400359733092E+01  
c 0.56254443494058E+00 0.34852167522057E+01 0.56864017636940E+00  
c -0.33988380655955E+00 0.45117069256844E+01 0.24321247611721E+00  
c -0.13676865493751E+01 0.42822101383826E+01 -0.68505481090769E+00  
c -0.14817674673995E+01 0.30189232333346E+01 -0.13126001579926E+01  
o 0.32922493675172E+01 -0.52704686032537E+00 0.28144355440784E+01  
o 0.28936967262199E+01 -0.38494708722083E+01 -0.27045681956495E+01  
o 0.41249790651135E+01 -0.28551891786852E+01 0.18413421179755E+01  
o 0.18999230718027E+01 0.17380526605323E+01 0.25063717429884E+01  
o -0.22845684214624E+01 0.52602192443579E+01 -0.95624374099847E+00  
h 0.40556083408709E+01 -0.43418509939021E+01 -0.30109483990021E+00  
h 0.17233856839335E+01 -0.15372937779715E+01 -0.26897469719667E+01  
h -0.63875112913694E+00 0.10522802610522E+01 -0.15576804545298E+01  
h 0.13460105193648E+01 0.36641118337537E+01 0.13074530218219E+01  
o -0.25550609978986E+01 0.28571828578624E+01 -0.21548074011745E+01  
h 0.34042273316258E+01 -0.46459580834667E+01 -0.24956438658808E+01  
h 0.39818436878476E+01 -0.21004758990124E+01 0.24698147767791E+01  
h 0.24040069549530E+01 0.12888157516606E+01 0.32186416098355E+01  
h -0.29176728667336E+01 0.48692805170956E+01 -0.15866708298011E+01  
h -0.27136742527311E+00 0.54926933417785E+01 0.72354811644388E+00  
h -0.28832049930582E+01 0.19329035802950E+01 -0.20118030621700E+01  
c -0.24399302673792E+01 -0.17050390590023E+01 -0.31764596228970E+00  
c -0.27935297499567E+01 -0.20719729032355E+00 -0.29085124489703E+00  
o -0.31685376940936E+01 0.36737174073168E+00 -0.13388475320988E+01  
c -0.16178862118817E+01 -0.20198648426978E+01 -0.15774866578797E+01  
n -0.18499253413490E+01 -0.21282007538936E+01 0.96856991656004E+00  
h -0.34155740094827E+01 -0.22180537861307E+01 -0.39972730649264E+00  
h -0.13933113383401E+01 -0.30977485234886E+01 -0.16287808973405E+01  
h -0.21906764058352E+01 -0.17322716443633E+01 -0.24704357512871E+01  
h -0.66592624732795E+00 -0.14660574438986E+01 -0.15836663513102E+01  
h -0.20943634339280E+01 -0.31036105735758E+01 0.11394832743693E+01  
n -0.26931885302705E+01 0.37539182310074E+00 0.91820665567457E+00  
c -0.30442617965969E+01 0.17610268328284E+01 0.12036756550196E+01  
h -0.21413862074458E+01 0.23700197244114E+01 0.13700770744027E+01  
h -0.36043332272473E+01 0.21656785639140E+01 0.34984878905720E+00  
h -0.36801418854936E+01 0.17979775990093E+01 0.21015629987728E+01  
c -0.38775265677144E+00 -0.19707494931434E+01 0.10540382603920E+01  
h -0.24275951158522E+01 -0.27109644056302E+00 0.16626745141867E+01  
h -0.59181410707699E-01 -0.22402030635595E+01 0.20706160219280E+01  
h 0.17936113364203E+00 -0.25824523284578E+01 0.32832277531268E+00  
h -0.13465512202449E+00 -0.91099155668658E+00 0.88955360479678E+00

quer gln

c -0.14775955475303E+01 -0.21275266949816E+01 0.16134970845047E+01  
c -0.26671468901910E+00 -0.20375561743055E+01 0.23503473421127E+01  
c 0.39498699082759E+00 -0.81366975595756E+00 0.24422416456441E+01  
c -0.20506525782729E+01 -0.99426323583022E+00 0.10131856427845E+01

c -.13635501779114E+01 0.22311605722494E+00 0.11048242241100E+01  
c -.13681033968271E+00 0.34173624876076E+00 0.17984458686447E+01  
o -.19017455078321E+01 0.12908930301037E+01 0.43523273338659E+00  
c -.12514828255802E+01 0.25037301109395E+01 0.37610297357219E+00  
c -.47395783843860E-01 0.26769453084773E+01 0.10449700635877E+01  
c 0.55451832176116E+00 0.16065203263685E+01 0.18084483471536E+01  
c -.19794293430870E+01 0.34793240938766E+01 -.43819183704147E+00  
c -.32851483519347E+01 0.31529632472930E+01 -.89186891751810E+00  
c -.14187375479924E+01 0.47306716139876E+01 -.79851461309864E+00  
c -.21483643568623E+01 0.56270891307667E+01 -.15943497007415E+01  
c -.34377825608786E+01 0.53046718559486E+01 -.20409696743345E+01  
c -.39978413968553E+01 0.40587321808914E+01 -.16807553946828E+01  
o 0.16459526882601E+01 0.18214874555260E+01 0.24280948922348E+01  
o -.21154377925020E+01 -.33157243294797E+01 0.14559358045782E+01  
o 0.15891890842605E+01 -.73717446948544E+00 0.31044315719215E+01  
o 0.63769635689543E+00 0.38556324311020E+01 0.10403259437212E+01  
o -.41346483009849E+01 0.61926480936698E+01 -.28149673068193E+01  
h 0.15319944063347E+00 -.29233748049480E+01 0.28359454588154E+01  
h -.29705192969796E+01 -.10800760277023E+01 0.43010596779050E+00  
h -.37380241419475E+01 0.21930305072414E+01 -.62448674804609E+00  
h -.41668993257209E+00 0.50008463842982E+01 -.46680840514627E+00  
o -.52727852565064E+01 0.38350245109544E+01 -.21678969121001E+01  
h -.14533823128597E+01 -.40416918967871E+01 0.15889451295951E+01  
h 0.18465214883833E+01 0.22310236437211E+00 0.30872059011170E+01  
h 0.14154357962777E+01 0.36735754056220E+01 0.16116184779018E+01  
h -.49958549063161E+01 0.57912456974773E+01 -.30209378328504E+01  
h -.17222477890287E+01 0.65928882930943E+01 -.18822050796693E+01  
h -.55786984531136E+01 0.29627189365202E+01 -.18798110717878E+01  
c 0.30140715611421E+01 -.10671473425827E+01 -.94612938654781E+00  
c 0.17972504699536E+01 -.19757311426685E+01 -.11993774570159E+01  
c 0.18079466076835E+01 -.31966094604436E+01 -.26535478900353E+00  
c 0.64873586965646E+00 -.41662913856245E+01 -.58084826338485E+00  
c 0.57163801991465E+00 -.52518820293533E+01 0.47322406529868E+00  
n 0.13693308734161E+01 -.63366130699954E+01 0.27601455841162E+00  
o -.13351414831257E+00 -.51583499491803E+01 0.14984989316434E+01  
n 0.50523179172493E+00 -.12899024037284E+01 -.10934562446151E+01  
o 0.38504400292698E+01 -.84052244778303E+00 -.18349146231440E+01  
n 0.30739346153031E+01 -.47364089651263E+00 0.28285898155499E+00  
c 0.41890574702948E+01 0.40529850608627E+00 0.62248776201377E+00  
h 0.19195460412098E+01 -.23085525195823E+01 -.22464758971200E+01  
h 0.27799965311853E+01 -.37122235936841E+01 -.35932288041673E+00  
h 0.17196536200959E+01 -.28625935224710E+01 0.78401988707447E+00  
h -.30177731195332E+00 -.36151408855513E+01 -.58748017592839E+00  
h 0.79722119485343E+00 -.46049297760583E+01 -.15829788514829E+01  
h 0.13884300987663E+01 -.70677951742030E+01 0.97781413699383E+00  
h 0.19421897042378E+01 -.64309548927174E+01 -.55189964190011E+00  
h 0.32226180578429E+00 -.10947403874525E+01 -.10652473077160E+00  
h 0.24873235549175E+01 -.81591219194854E+00 0.10375454446071E+01  
h 0.51276410029345E+01 -.15879306738132E+00 0.75129548515558E+00

h 0.43338704159479E+01 0.11311449618027E+01 -.19019827888518E+00  
h 0.39417731218604E+01 0.93913928262908E+00 0.15501427403814E+01  
c 0.46168181364354E+00 -.23032758403975E-01 -.18365347116105E+01  
h -.54590129359942E+00 0.41252076071955E+00 -.17429669816122E+01  
h 0.12054556440930E+01 0.72490452509778E+00 -.14950298342753E+01  
h 0.65054991877077E+00 -.22918503404844E+00 -.29025508247607E+01

quer glu

c 0.28797436709986E+01 -.54746800139855E+01 0.92357473551744E+00  
c 0.41826486579765E+01 -.56236579167985E+01 0.39515401143310E+00  
c 0.46336377356484E+01 -.47341863737073E+01 -.58314193102150E+00  
c 0.20159230137368E+01 -.44606777975662E+01 0.49878776198915E+00  
c 0.24852298686668E+01 -.35758487521998E+01 -.48632646204826E+00  
c 0.37792744135125E+01 -.36880299634982E+01 -.10365291000176E+01  
o 0.16286542351012E+01 -.25910464797470E+01 -.88467198323129E+00  
c 0.19769098147760E+01 -.16691961293569E+01 -.18499412951709E+01  
c 0.32443597418405E+01 -.17363141230684E+01 -.24247081051799E+01  
c 0.41992012655439E+01 -.27426104914281E+01 -.20459792689371E+01  
c 0.90353659161681E+00 -.72454095655435E+00 -.21295673845349E+01  
c -.39506853265529E+00 -.97480606754607E+00 -.16120970837002E+01  
c 0.11142155278115E+01 0.44943172218072E+00 -.29005244336890E+01  
c 0.52703774380457E-01 0.13380526875685E+01 -.31031539979174E+01  
c -.12362479963985E+01 0.11096744753939E+01 -.25700590940692E+01  
c -.14656622611580E+01 -.93404220197885E-01 -.18311034141005E+01  
o 0.53461150164887E+01 -.27705341855211E+01 -.26099246802445E+01  
o 0.23977381227225E+01 -.63329843780037E+01 0.18924584600027E+01  
o 0.58843082296012E+01 -.48706222105329E+01 -.10991188281139E+01  
o 0.36606291845014E+01 -.86837152329913E+00 -.33963717832464E+01  
o -.21884351335820E+01 0.20271674634787E+01 -.28283939850994E+01  
h 0.48478864286753E+01 -.64243913820445E+01 0.73657955131720E+00  
h 0.10124129624472E+01 -.43568978157537E+01 0.91785938822475E+00  
h -.60733370471225E+00 -.18795391071770E+01 -.10365681458418E+01  
h 0.20969555656143E+01 0.67464188541493E+00 -.33153408573488E+01  
o -.27099667314521E+01 -.44321070553374E+00 -.13961323480618E+01  
h 0.30906043093438E+01 -.69760095652525E+01 0.21014982897867E+01  
h 0.59765015036753E+01 -.41378632053171E+01 -.17675303738708E+01  
h 0.45673921193403E+01 -.11839136375690E+01 -.36011405523021E+01  
h -.29533080186879E+01 0.20175972486439E+01 -.21695139953868E+01  
h 0.20318448216418E+00 0.22584298265658E+01 -.36773525248394E+01  
h -.30325347970743E+01 0.21786374508258E+00 -.69294092624197E+00  
c -.18779664030926E+01 0.17234856201591E+01 0.41591937987358E+01  
h -.22083734359593E+01 0.75668528297810E+00 0.45720166841589E+01  
h -.17544660218757E+01 0.24287038020087E+01 0.49988640677624E+01  
h -.88697078589135E+00 0.15802368988427E+01 0.36817742211696E+01  
c -.40130131601424E+01 0.22136934937631E+01 0.77758466086273E-01  
c -.46558839374223E+01 0.31052725587211E+01 0.11360544259377E+01  
h -.54549351708300E+01 0.36862089760395E+01 0.64888661032436E+00  
c -.36734133046826E+01 0.41036770931569E+01 0.17900624769368E+01  
c -.25072965174098E+01 0.34933806092781E+01 0.26186749866974E+01



c -.11870614437563E+01 0.34851328213470E+01 0.18144310082319E+01  
h -.22771677705491E+01 0.42073259483447E+01 0.34299888374925E+01  
n -.29082140623145E+01 0.22360170534122E+01 0.32517784908376E+01  
h -.32535753372130E+01 0.47741481465206E+01 0.10197338554157E+01  
o -.40937990390866E+00 0.44584028267575E+01 0.18908265535423E+01  
n -.91485226371715E+00 0.23870353067161E+01 0.10627376397153E+01  
c 0.27873073248253E+00 0.23555999010789E+01 0.22508299541204E+00  
h -.42687530043832E+01 0.47355886608132E+01 0.24716889495544E+01  
h -.31069702113579E+01 0.15459321296614E+01 0.25191114023601E+01  
h -.16817284951613E+01 0.17342267671515E+01 0.87685909378030E+00  
h 0.19825171165073E+00 0.30560743627644E+01 -.62308124982652E+00  
h 0.11515552007329E+01 0.26458487334984E+01 0.82943752019546E+00  
h 0.41386697298229E+00 0.13358786972359E+01 -.16258535595778E+00  
o -.34214641201457E+01 0.11435906413328E+01 0.50253495233658E+00  
o -.40706587192007E+01 0.25729769138847E+01 -.11312377401192E+01  
h -.51014696092989E+01 0.24753547018635E+01 0.19216276651645E+01

quer ile

c -.70786422969710E+00 -.14823984929786E+01 -.27085394200345E+01  
c 0.57554942615180E+00 -.12553472928091E+01 -.32618336577769E+01  
c 0.12003654185497E+01 -.20703446571672E-01 -.30780562965347E+01  
c -.13840541954863E+01 -.48820956232050E+00 -.19895907080082E+01  
c -.73113688644013E+00 0.73446612704777E+00 -.17836174998451E+01  
c 0.55137683561182E+00 0.99683935371850E+00 -.23145948379121E+01  
o -.13803775121474E+01 0.16500619436493E+01 -.99504734556100E+00  
c -.78095785280186E+00 0.28377499499448E+01 -.64335210459449E+00  
c 0.46071174975974E+00 0.31671565508632E+01 -.11649232741607E+01  
c 0.11759848983881E+01 0.22699927314906E+01 -.20492862737014E+01  
c -.15953563503144E+01 0.36125738191717E+01 0.29613165021683E+00  
c -.26784529840487E+01 0.29702028256809E+01 0.95129949071108E+00  
c -.13380062351483E+01 0.49790416665375E+01 0.56819384911789E+00  
c -.21490645952007E+01 0.56826471078772E+01 0.14722306163401E+01  
c -.32177404498978E+01 0.50471726795590E+01 0.21208654379001E+01  
c -.34741153236976E+01 0.36849585798755E+01 0.18499365300063E+01  
o 0.23117638137391E+01 0.26239101673506E+01 -.24949320611211E+01  
o -.13291089805465E+01 -.26970364177091E+01 -.28607761671181E+01  
o 0.24376858003081E+01 0.19534575949291E+00 -.36007476772506E+01  
o 0.11072874861389E+01 0.43280577445836E+01 -.85820924820091E+00  
o -.39972502068083E+01 0.57492525853982E+01 0.30015155186508E+01  
h 0.10847122647531E+01 -.20462511270134E+01 -.38193178067254E+01  
h -.23686977475731E+01 -.68173860906353E+00 -.15570355888438E+01  
h -.28912321064911E+01 0.19141747333375E+01 0.75501917385165E+00  
h -.51545842802963E+00 0.54924168029231E+01 0.70040364793481E-01  
o -.45478956476630E+01 0.31484988166745E+01 0.25393778102314E+01  
h -.65589530869865E+00 -.33726480424471E+01 -.26078536889207E+01  
h 0.26827018843841E+01 0.11245829096059E+01 -.33630721592220E+01  
h 0.19522597990570E+01 0.42544145453599E+01 -.13550796343405E+01  
h -.46806220545213E+01 0.51441847689484E+01 0.33360035992857E+01  
h -.19638337791593E+01 0.67399849428604E+01 0.16844665887693E+01

h -.46702669977969E+01 0.22259701551393E+01 0.22724837585487E+01  
c 0.19100321321436E+01 -.45606177872049E+01 0.23021083882346E+01  
h 0.18220679287438E+01 -.47589954161283E+01 0.33813102027121E+01  
h 0.29700377670770E+01 -.46721800820870E+01 0.20003052639170E+01  
h 0.13219910404879E+01 -.53214218886298E+01 0.17639859123947E+01  
c 0.15216707707997E+01 -.28903048044893E+01 0.57859174990838E+00  
c 0.43750361258901E+00 -.35815554270469E+01 -.25142273599049E+00  
c 0.14922983057583E+01 -.13580201118003E+01 0.34387463696903E+00  
c 0.27895249531755E+00 -.67950735166245E+00 0.10002271764427E+01  
c 0.28144670226114E+01 -.72567498332086E+00 0.82594100436386E+00  
c 0.30518312605190E+01 0.68175637630782E+00 0.26380849054190E+00  
n 0.13648954810373E+01 -.32274037442917E+01 0.19997222393531E+01  
h 0.24786424231068E+01 -.32709488696926E+01 0.16228366834465E+00  
h 0.14342879574636E+01 -.12243248003319E+01 -.75166221528209E+00  
h 0.26838581121880E+00 0.39827431472400E+00 0.77111009630509E+00  
h 0.28296518100804E+01 -.68794567636089E+00 0.19326015931634E+01  
h 0.36535332362422E+01 -.13765030911242E+01 0.51873451931518E+00  
h 0.40015010243259E+01 0.10981227820445E+01 0.63736492500701E+00  
h 0.31093574208139E+01 0.64968501490881E+00 -.83551038813153E+00  
h 0.22484043917734E+01 0.13811163883760E+01 0.54732761054888E+00  
h 0.18631582635039E+01 -.25333346991133E+01 0.25590022223993E+01  
o 0.62985305348579E+00 -.38662014150468E+01 -.14547078969957E+01  
n -.71307163602700E+00 -.38332170679123E+01 0.40840099047752E+00  
c -.18429491888779E+01 -.45287062190594E+01 -.19769614782322E+00  
h -.69316105258100E+00 -.36008674318165E+01 0.14005651059385E+01  
h -.24282352255858E+01 -.50126617177943E+01 0.59694832890349E+00  
h -.24863889648916E+01 -.38375873931273E+01 -.76285558091635E+00  
h -.14649033626970E+01 -.52968415833279E+01 -.88897969085047E+00  
h -.67038010377119E+00 -.11048691614353E+01 0.63939862953267E+00  
h 0.31355482065890E+00 -.78858842973404E+00 0.20975229626657E+01

quer lys

c -.18766115014768E+01 -.52971460083169E+01 -.24901940825371E+01  
c -.51800184281997E+00 -.54605441426828E+01 -.21347119952065E+01  
c 0.97133929483731E-01 -.45317253152004E+01 -.12958323532422E+01  
c -.26325397875974E+01 -.42094956755315E+01 -.20320380757693E+01  
c -.20013878374939E+01 -.32869982335907E+01 -.11931691765038E+01  
c -.64451716361125E+00 -.34117809906521E+01 -.79930415463230E+00  
o -.27659507574727E+01 -.22265131917173E+01 -.76854810565561E+00  
c -.22327738193982E+01 -.12899183442059E+01 0.65009751008558E-01  
c -.93045975113540E+00 -.13829838858626E+01 0.53365335705986E+00  
c -.59128816476860E-01 -.24438840544029E+01 0.96285519514033E-01  
c -.31745450359424E+01 -.22736104984066E+00 0.43048101574136E+00  
c -.45087670791713E+01 -.55921763499119E+00 0.76870114359009E+00  
c -.27603392281947E+01 0.11260187303003E+01 0.41835463619751E+00  
c -.36739412203171E+01 0.21385614909185E+01 0.75519441730088E+00  
c -.49945577593434E+01 0.18166295622483E+01 0.11029355071677E+01  
c -.54067270139038E+01 0.45982909045022E+00 0.11035111749167E+01  
o 0.11557051390378E+01 -.25226882904843E+01 0.49246955945182E+00

o -.25263835488692E+01 -.61850229638241E+01 -.32985125580925E+01  
o 0.13995972358872E+01 -.47122355435891E+01 -.95693489606239E+00  
o -.40108766471154E+00 -.51369904697600E+00 0.14602084668842E+01  
o -.58636788633880E+01 0.28122059812936E+01 0.14282078779450E+01  
h 0.66811182902996E-01 -.63108494898368E+01 -.25006137797257E+01  
h -.36787611612782E+01 -.40887049769301E+01 -.23212381765198E+01  
h -.48316339121654E+01 -.16065850313271E+01 0.77059352797752E+00  
h -.17537168606210E+01 0.14104383047246E+01 0.94477577575018E-01  
o -.67226700757090E+01 0.26707284027615E+00 0.14522242575001E+01  
h -.19280118727101E+01 -.69095443261506E+01 -.35375478319521E+01  
h 0.16199722497348E+01 -.39798563631685E+01 -.33160393141631E+00  
h -.11354680523938E+01 0.31660517369953E-01 0.18007307164004E+01  
h -.67281761616215E+01 0.24124255635300E+01 0.16278266218792E+01  
h -.33828090315554E+01 0.31932035460027E+01 0.72780291056963E+00  
h -.69422098523259E+01 -.67642209585303E+00 0.14334708715989E+01  
c 0.14228589514536E+01 0.25998812785104E+01 -.23928472647437E+00  
c 0.14653528356803E+01 0.11868078539506E+01 -.83426386075263E+00  
n 0.18170701424082E+00 0.27533299252541E+01 0.53430408130653E+00  
c 0.28025073648629E+01 0.82580535764144E+00 -.15187674171714E+01  
c 0.31926404826066E+01 -.65523412887783E+00 -.13532475113558E+01  
c 0.39003164459445E+01 -.99421977950959E+00 -.36753686407081E-01  
n 0.30482857377273E+01 -.74847881800954E+00 0.11786209370039E+01  
h 0.14141384683877E+01 0.33596191427509E+01 -.10436046834425E+01  
h 0.12297148868783E+01 0.48786237283655E+00 -.16776296399399E-01  
h 0.62884009661352E+00 0.10933480659013E+01 -.15465089699174E+01  
h 0.25125762134648E+00 0.21136162077690E+01 0.13319685934742E+01  
h 0.27354164582007E+01 0.10614738131927E+01 -.25934513900126E+01  
h 0.23092989734883E+01 -.13042772019333E+01 -.14809638427793E+01  
h 0.39059705532675E+01 -.93836991082327E+00 -.21456363838874E+01  
h 0.41792075642391E+01 -.20582862089903E+01 -.19803907017983E-01  
h 0.48141047401160E+01 -.39053165529193E+00 0.80038782045977E-01  
h 0.35269799604472E+01 -.10837061529324E+01 0.20203703985409E+01  
h 0.28690224540599E+01 0.27888705437931E+00 0.13133728249876E+01  
h 0.21527358369945E+01 -.12913047783854E+01 0.10806728432361E+01  
h 0.36260942240186E+01 0.14513428910749E+01 -.11265725605427E+01  
c 0.26390712716086E+01 0.28121204932020E+01 0.66343006600867E+00  
n 0.33091520324225E+01 0.39730293036225E+01 0.55322351304272E+00  
c 0.44320067469151E+01 0.43034580930951E+01 0.14343256366196E+01  
h 0.29911664295138E+01 0.46498446091522E+01 -.13201694118878E+00  
h 0.47897677215727E+01 0.53090643848441E+01 0.11789397374313E+01  
h 0.41078549618906E+01 0.42795177106861E+01 0.24845504778917E+01  
h 0.52469244952671E+01 0.35779739005227E+01 0.12987543190287E+01  
o 0.29667832489468E+01 0.19483144230715E+01 0.15175263429500E+01  
c -.39974780770358E-01 0.41200060047972E+01 0.10368311063953E+01  
h -.97148926166768E+00 0.41358880319810E+01 0.16223859821524E+01  
h -.16716678711710E+00 0.47994809923604E+01 0.17918305795293E+00  
h 0.77508918550176E+00 0.45088677521817E+01 0.16772636843266E+01

quer met

c 0.65689333585505E+00 -27018638837872E+01 -.34118045208374E+01  
c 0.17686399644980E+01 -.34422321380600E+01 -.29547711570607E+01  
c 0.26679655694050E+01 -.28515707654236E+01 -.20603832746523E+01  
c 0.40719881300368E+00 -.13932205565866E+01 -.29780132264338E+01  
c 0.12994798361451E+01 -.82935471083390E+00 -.20511272457107E+01  
c 0.24411039443984E+01 -.15217043762805E+01 -.15968997043606E+01  
o 0.10116188700373E+01 0.43479935082276E+00 -.16141531378647E+01  
c 0.18012012553784E+01 0.10510805605951E+01 -.66134340015702E+00  
c 0.29838259874676E+01 0.45969209259622E+00 -.24903408105449E+00  
c 0.33617201677017E+01 -.86375488298417E+00 -.69452448052496E+00  
c 0.11739141087679E+01 0.22555763310882E+01 -.12304960599843E+00  
c -.23961237952283E+00 0.23443384922784E+01 -.19559988393978E+00  
c 0.19063485090986E+01 0.32801976590281E+01 0.52367310453815E+00  
c 0.12244844726113E+01 0.43680403920965E+01 0.10946506908188E+01  
c -.17769181383347E+00 0.44354607021708E+01 0.10529411735191E+01  
c -.91211312306307E+00 0.34104742108614E+01 0.40906628874016E+00  
o 0.44290569458725E+01 -.13899776829878E+01 -.25850962981001E+00  
o -.24672044076633E+00 -.32269152085195E+01 -.43086271112676E+01  
o 0.37476987858885E+01 -.35510671986770E+01 -.16400965879428E+01  
o 0.38116740875437E+01 0.10438834716102E+01 0.66040911047417E+00  
o -.83288362159857E+00 0.54839499935206E+01 0.16389366872790E+01  
h 0.19536037786612E+01 -.44657311108669E+01 -.32979976207251E+01  
h -.42466096154344E+00 -.81579730874925E+00 -.33870038947200E+01  
h -.80801655373571E+00 0.15659095982203E+01 -.70267830976228E+00  
h 0.29953546994369E+01 0.32296860945684E+01 0.57835095149883E+00  
o -.22776457850270E+01 0.35529171693232E+01 0.42399999149053E+00  
h 0.43532116468918E-01 -.41156944784428E+01 -.45630948851662E+01  
h 0.42517037142819E+01 -.29460565704757E+01 -.10340079502172E+01  
h 0.45015788574457E+01 0.36203125788338E+00 0.81468693421169E+00  
h -.17854338827795E+01 0.53161828947834E+01 0.15235659146102E+01  
h 0.17723012803676E+01 0.51733883857435E+01 0.15938578605214E+01  
h -.26864062513313E+01 0.26661381980942E+01 0.29663047705097E+00  
c -.41072470994074E+01 -.15995439160117E+01 0.20707963063666E+01  
h -.46458951546263E+01 -.15183145265592E+01 0.30267883442248E+01  
h -.40678955623275E+01 -.26650896837960E+01 0.17931818030617E+01  
h -.46809678079364E+01 -.10512426781990E+01 0.12976752892297E+01  
c -.19863548475325E+01 -.11184896007253E+01 0.99820865842598E+00  
c -.25485549841781E+01 -.12210153333874E+00 -.27545123587395E-01  
o -.31038307266335E+01 0.93498211004423E+00 0.33952878304705E+00  
c -.50730323632063E+00 -.75584534818338E+00 0.12357622853014E+01  
c 0.17833278235603E+00 -.17247219645389E+01 0.21986510196484E+01  
s 0.19637542136785E+01 -.13728440703692E+01 0.24042264735230E+01  
c 0.18357061729861E+01 0.30241144316171E+00 0.31209770462819E+01  
n -.27327462595153E+01 -.11068807104756E+01 0.22497521164344E+01  
h -.20439667140626E+01 -.21422976192406E+01 0.57866718492036E+00  
h 0.29817817972466E-01 -.75954602451524E+00 0.27246610932921E+00  
h -.46416823768748E+00 0.27586991460246E+00 0.16272423266364E+01  
h -.31367045726241E+00 -.17130157602547E+01 0.31832331526111E+01  
h 0.12716222364390E+00 -.27561126389672E+01 0.18071265566107E+01

h 0.28372422383879E+01 0.57019105059423E+00 0.34896367013494E+01  
h 0.15292302864797E+01 0.10465854932150E+01 0.23701791931691E+01  
h 0.11305344729342E+01 0.29466144583702E+00 0.39685951334082E+01  
h -.27794144921435E+01 -.13088503809351E+00 0.25586248664164E+01  
n -.23622426994121E+01 -.43836948206535E+00 -.13317635757009E+01  
c -.27373378005385E+01 0.45888751656596E+00 -.24214106008645E+01  
h -.19367302626180E+01 0.11824267434881E+01 -.26497510835528E+01  
h -.29559381465633E+01 -.13801713588020E+00 -.33182383241423E+01  
h -.36394358778644E+01 0.10106532433182E+01 -.21246974813972E+01  
h -.18377941289424E+01 -.12821572122232E+01 -.15459626372978E+01

quer phe

c -.90017425593311E+00 -.92787664115413E+00 -.20189262891453E+01  
c 0.49406922247015E+00 -.79503617157028E+00 -.22335093724535E+01  
c 0.11146267916464E+01 0.43278998868210E+00 -.20053186661502E+01  
c -.16867142015465E+01 0.16131675390549E+00 -.16136083260392E+01  
c -.10461801876290E+01 0.13859433719705E+01 -.13788550195074E+01  
c 0.34851083161083E+00 0.15445115350811E+01 -.15449306056535E+01  
o -.18336955575052E+01 0.24239496449912E+01 -.94811351991939E+00  
c -.12947370406285E+01 0.36562363263348E+01 -.65318429094598E+00  
c 0.69411546438719E-01 0.38656711481740E+01 -.78536232684877E+00  
c 0.95561760738490E+00 0.28183336378175E+01 -.12492735890960E+01  
c -.23140998282054E+01 0.46191216135001E+01 -.22720301627309E+00  
c -.36821779871534E+01 0.43076080273220E+01 -.44201781430490E+00  
c -.19771505155867E+01 0.58446166971120E+01 0.39922065435258E+00  
c -.29873122159028E+01 0.67321901615229E+01 0.80149971552536E+00  
c -.43385163669586E+01 0.64250816282019E+01 0.58666123785129E+00  
c -.46746682922364E+01 0.52048460853861E+01 -.40235155901587E-01  
o 0.21975300671885E+01 0.30679343073085E+01 -.13675401666471E+01  
o -.15211409935703E+01 -.21297951386880E+01 -.21954517275721E+01  
o 0.24538832945630E+01 0.55802028774764E+00 -.22119348386505E+01  
o 0.66356700739696E+00 0.50638431328847E+01 -.51681991619644E+00  
o -.53105917630584E+01 0.73046187090466E+01 0.98306529206745E+00  
h 0.10812892499658E+01 -.16503963295888E+01 -.25792555358382E+01  
h -.27612220245734E+01 0.45525546712057E-01 -.14520467716206E+01  
h -.39625183860567E+01 0.33669266777711E+01 -.92702246874954E+00  
h -.93290531513710E+00 0.61007124002068E+01 0.57848831618003E+00  
o -.60319075177728E+01 0.49950723178657E+01 -.20971896284871E+00  
h -.86458438233272E+00 -.28277716632669E+01 -.19564739875210E+01  
h 0.26860073597527E+01 0.14937555650325E+01 -.19789600993306E+01  
h 0.16079274804764E+01 0.49042779752056E+01 -.73598948998416E+00  
h -.61706246149873E+01 0.69186520982807E+01 0.74547764719271E+00  
h -.27383355773123E+01 0.76786298139454E+01 0.12909764620290E+01  
h -.61721329166970E+01 0.41461669726500E+01 -.65364282428968E+00  
c 0.10766748317323E+01 -.68375846257276E+01 -.29539565106882E+00  
h 0.12110288522479E+01 -.76657156349791E+01 -.10072823250764E+01  
h 0.71036432759646E-01 -.63994936890680E+01 -.45152161821775E+00  
h 0.11252273788570E+01 -.72545586506338E+01 0.72321183223263E+00  
c 0.30560938783175E+01 -.25246866423037E+01 0.10829830719341E+01

c 0.26967173077123E+01 -.13303190839839E+01 0.42442351417713E+00  
c 0.23444930637801E+01 -.18129502031502E+00 0.11578674581593E+01  
c 0.23463988769386E+01 -.21767777127469E+00 0.25656652984425E+01  
c 0.27321664709954E+01 -.13977831741555E+01 0.32341872105553E+01  
c 0.30887429987989E+01 -.25427976661718E+01 0.24957689225107E+01  
h 0.27057137531725E+01 -.12931141168916E+01 -.66860983897085E+00  
h 0.20781699150950E+01 0.74130426438664E+00 0.63134062354748E+00  
h 0.27632910811896E+01 -.14223164255847E+01 0.43288520394263E+01  
c 0.32654213604833E+01 -.37970790475969E+01 0.29409882042593E+00  
c 0.20219331703093E+01 -.47158955822936E+01 0.40258136903947E+00  
n 0.21756906443278E+01 -.58745481380107E+01 -.46612253894563E+00  
h 0.19435300807339E+01 -.50796552063671E+01 0.14450127652284E+01  
h 0.21554652021040E+01 -.55304195878834E+01 -.14305490465747E+01  
h 0.34278493521040E+01 -.35586757561987E+01 -.77182585631379E+00  
h 0.41374877460247E+01 -.43687111571861E+01 0.65167127646700E+00  
c 0.77105105312578E+00 -.38821470111062E+01 0.78104775525468E-01  
o 0.40872484731058E+00 -.37297542492166E+01 -.11089673904060E+01  
n 0.12980868059541E+00 -.33378061668788E+01 0.11397898428780E+01  
c -.88151276288968E+00 -.22901094335989E+01 0.99673784762904E+00  
h 0.33960558959820E+01 -.34570859336221E+01 0.30197837513258E+01  
h 0.63290757544589E+00 -.33767863182234E+01 0.20222625325674E+01  
h -.13318805064999E+01 -.21109397007122E+01 0.19831294267584E+01  
h -.42869452956574E+00 -.13553072846327E+01 0.62699677293971E+00  
h -.16607787866793E+01 -.26173768675668E+01 0.29610246541108E+00  
h 0.20701356173810E+01 0.67285919740570E+00 0.31397081046806E+01

quin glu + charge

|   |           |           |           |          |
|---|-----------|-----------|-----------|----------|
| C | 2.177571  | -2.976001 | 0.847456  | 0.40573  |
| C | 3.406705  | -3.064300 | 0.132684  | -0.34050 |
| C | 4.030654  | -1.907166 | -0.327254 | 0.38618  |
| C | 1.612075  | -1.727566 | 1.161388  | -0.38059 |
| C | 2.226834  | -0.590036 | 0.650731  | 0.38741  |
| C | 3.430359  | -0.627582 | -0.096716 | -0.26407 |
| O | 1.556895  | 0.587867  | 0.871738  | -0.48966 |
| C | 1.985072  | 1.762947  | 0.317571  | 0.29104  |
| C | 3.176935  | 1.797490  | -0.395402 | 0.25663  |
| C | 3.965637  | 0.591009  | -0.625621 | 0.44226  |
| C | 1.049718  | 2.856897  | 0.574646  | -0.06351 |
| C | -0.245209 | 2.493762  | 1.199269  | -0.16686 |
| C | 1.339683  | 4.169865  | 0.252068  | -0.26668 |
| C | -0.964377 | 4.859036  | 1.215598  | 0.46222  |
| O | 5.038898  | 0.701543  | -1.304145 | -0.71908 |
| O | 1.556288  | -4.116667 | 1.196988  | -0.72901 |
| O | 5.200492  | -1.991643 | -1.029338 | -0.72233 |
| O | 3.676590  | 2.929526  | -0.957913 | -0.70325 |
| H | 3.837809  | -4.044672 | -0.088947 | 0.25189  |
| H | 0.654722  | -1.636446 | 1.685417  | 0.30044  |
| H | -0.440864 | 1.438433  | 1.413518  | 0.28383  |
| H | 2.287475  | 4.454362  | -0.208785 | 0.27219  |

|   |           |           |           |          |
|---|-----------|-----------|-----------|----------|
| H | 0.596108  | -3.879459 | 1.425658  | 0.55238  |
| H | 5.432660  | -1.068962 | -1.291409 | 0.53139  |
| H | 4.492986  | 2.603904  | -1.404800 | 0.52882  |
| C | -1.187613 | 3.431356  | 1.505896  | -0.27700 |
| O | -1.795133 | 5.734019  | 1.481204  | -0.51609 |
| C | 0.384707  | 5.242767  | 0.544636  | 0.44516  |
| O | 0.622234  | 6.432265  | 0.289163  | -0.52362 |
| H | -2.139044 | 3.151128  | 1.968384  | 0.25299  |
| C | -3.465741 | 1.262816  | -0.521025 | -0.44656 |
| H | -3.624587 | 2.022508  | 0.261032  | 0.21482  |
| H | -4.280384 | 1.363465  | -1.258533 | 0.21353  |
| H | -2.508453 | 1.486751  | -1.036797 | 0.19308  |
| C | -1.712614 | -2.492488 | 1.488431  | 0.83904  |
| C | -3.197143 | -2.711470 | 1.185276  | -0.54552 |
| H | -3.463510 | -3.738412 | 1.482210  | 0.24593  |
| C | -3.556806 | -2.541477 | -0.308070 | -0.44495 |
| C | -3.351251 | -1.126477 | -0.923306 | -0.13250 |
| C | -2.068416 | -1.065473 | -1.783320 | 0.70025  |
| H | -4.138448 | -0.984822 | -1.685250 | 0.24985  |
| N | -3.528467 | -0.073043 | 0.076746  | -0.76313 |
| H | -2.998554 | -3.279088 | -0.911381 | 0.24597  |
| O | -2.145881 | -1.268215 | -3.011274 | -0.69725 |
| N | -0.897776 | -0.769293 | -1.147791 | -0.72432 |
| C | 0.360816  | -0.774414 | -1.882995 | -0.45602 |
| H | -4.626426 | -2.793706 | -0.412110 | 0.23271  |
| H | -2.806861 | -0.183480 | 0.799879  | 0.42132  |
| H | -0.892753 | -0.814511 | -0.121856 | 0.45475  |
| H | 0.948681  | 0.127891  | -1.647881 | 0.20634  |
| H | 0.964407  | -1.667683 | -1.648918 | 0.22400  |
| H | 0.118383  | -0.776181 | -2.954785 | 0.25571  |
| O | -1.327709 | -1.279405 | 1.653160  | -0.82217 |
| O | -0.971495 | -3.528934 | 1.526202  | -0.79874 |
| H | -3.795880 | -2.002535 | 1.778675  | 0.24552  |

sulf glu

|   |                      |                      |                      |
|---|----------------------|----------------------|----------------------|
| c | -.38518054124494E+01 | -.13713868329475E+01 | -.14018486877070E+01 |
| c | -.25077431256585E+01 | -.15191553882753E+01 | -.98635572606533E+00 |
| c | -.17367828349856E+01 | -.35938779102270E+00 | -.72935126043517E+00 |
| c | -.22788167364295E+01 | 0.91830667483034E+00 | -.89280647031462E+00 |
| c | -.36236542272221E+01 | 0.10711357211870E+01 | -.13015252783096E+01 |
| c | -.43934914058020E+01 | -.82551505582491E-01 | -.15469442123250E+01 |
| c | -.18438683287089E+01 | -.28181631324570E+01 | -.84327412080659E+00 |
| o | -.64262746712956E+00 | -.26809243929686E+01 | -.19578260837379E+00 |
| c | 0.27223694773431E+00 | -.36919423107321E+01 | -.17699903305865E+00 |
| c | -.66594822825722E-02 | -.49849898604562E+01 | -.68113998466948E+00 |
| c | -.13380122625987E+01 | -.52349346861732E+01 | -.12308046272367E+01 |
| c | -.22192422199856E+01 | -.40637738451638E+01 | -.13009886289173E+01 |
| c | 0.15111421125459E+01 | -.33130765050002E+01 | 0.35203432395958E+00 |
| c | 0.25635105821927E+01 | -.42247421703295E+01 | 0.29773952985435E+00 |

c 0.23359269433125E+01 -.55409336667783E+01 -.17622455203224E+00  
c 0.10738854291062E+01 -.59189603085744E+01 -.64309655888254E+00  
o 0.38316834349152E+01 -.38835617453700E+01 0.66897188610716E+00  
o 0.82988848029882E+00 -.71911368996955E+01 -.11118040643431E+01  
o -.34167909480179E+01 -.42978681825114E+01 -.19148173822383E+01  
o -.17817792533896E+01 -.63166261016547E+01 -.16929624400898E+01  
o -.15193455665334E+01 0.20339596873097E+01 -.59936076987414E+00  
s -.42270429864265E+00 0.24949531594952E+01 -.18915393217463E+01  
o -.12620982288977E+01 0.25827408949735E+01 -.31109049443903E+01  
o -.41166634433200E+01 0.23483760280392E+01 -.14172154099480E+01  
o 0.72017128346160E-01 0.37804162741865E+01 -.12925860163715E+01  
o 0.60831592848757E+00 0.13917852174606E+01 -.19227039565839E+01  
o 0.36503097068467E+01 -.10057199365253E+01 0.80465045947735E+00  
c 0.29920402430145E+01 -.11915088809692E+00 0.25006554420469E+00  
o 0.21492992480963E+01 -.44195265424658E+00 -.74575589178884E+00  
c 0.30354636274950E+01 0.13343018145288E+01 0.66174299496091E+00  
c 0.17153487784417E+01 0.17295780825287E+01 0.13531717045706E+01  
c 0.17562160256112E+01 0.31718980933708E+01 0.18914555893901E+01  
n 0.22280232837397E+01 0.40930486433411E+01 0.85883254565306E+00  
c 0.22701958029163E+01 0.54819892266241E+01 0.13234272733297E+01  
c 0.37341533037140E+00 0.34639146689436E+01 0.25083374659730E+01  
n -.58363084503608E+00 0.38687326705920E+01 0.16338486640135E+01  
c -.19820955752207E+01 0.39050523441115E+01 0.20414269416700E+01  
o 0.15471320178823E+00 0.32862677193751E+01 0.37222879503000E+01  
h 0.87715866125784E+00 0.16335363184271E+01 0.64296560379497E+00  
h 0.15108233609688E+01 0.10517856301674E+01 0.22007555210876E+01  
h 0.31879427361082E+01 0.19704186176876E+01 -.22388486860898E+00  
h 0.38856944150153E+01 0.14710564313303E+01 0.13461920162684E+01  
h 0.24664531304625E+01 0.32212770559453E+01 0.27374021364155E+01  
h 0.31722752312666E+01 -.62492659754296E+01 -.19616745996686E+00  
h 0.16515779925899E+01 -.22934390369894E+01 0.70388474706487E+00  
h -.54383460940245E+01 0.30668543892433E-01 -.18632323337182E+01  
h 0.16601617704973E+01 -.76861760802184E+01 -.10410352969745E+01  
h 0.38626888546055E+01 -.29023232705676E+01 0.75088134434693E+00  
h -.69216064866282E+00 -.43520911631881E+00 -.42634045762278E+00  
h -.44674600813443E+01 -.22504638476722E+01 -.16034344810562E+01  
h -.50130987565864E+01 0.22894158508100E+01 -.17789555230261E+01  
h -.33389475122754E+01 -.52558003531432E+01 -.21404909284656E+01  
h 0.26115882014051E+01 0.61269171690986E+01 0.49849336185405E+00  
h 0.29995541944789E+01 0.55632492722536E+01 0.21472602169545E+01  
h 0.12945085757243E+01 0.58637931029211E+01 0.16865391038933E+01  
h -.25929424037269E+01 0.40996775573112E+01 0.11493048895435E+01  
h -.22846852461443E+01 0.29432906221903E+01 0.24878036830697E+01  
h -.21481941924826E+01 0.46969191396595E+01 0.27890689342128E+01  
h 0.16338882309515E+01 0.40212631995555E+01 0.26430597881660E-01  
h -.38343499972841E+00 0.38475010587409E+01 0.63283141387848E+00  
h 0.16491340066944E+01 0.34638999401228E+00 -.10874731477832E+01

sulf glu (zwitterion)



c 0.25128835911044E+01 -3.6583424476840E+01 0.11742470495245E+00  
c 0.38229911698920E+01 -3.6793731313003E+01 0.67505382993466E+00  
c 0.44509492075428E+01 -2.5105376088481E+01 0.10936120515326E+01  
c 0.37994109992739E+01 -.12443221120753E+01 0.97668229148343E+00  
c 0.24932109848043E+01 -.12615540815601E+01 0.41536185434958E+00  
c 0.18499908636629E+01 -.24252601374072E+01 -.17642133519152E-01  
o 0.17523064094907E+01 -.11432422305981E+00 0.25035133165174E+00  
c 0.22415028570895E+01 0.11105202050679E+01 0.63290085013755E+00  
c 0.35046031959337E+01 0.12001043193760E+01 0.11752276313103E+01  
c 0.43649736549304E+01 0.28591514583580E-01 0.13842615518852E+01  
c 0.12753007190924E+01 0.21870645492035E+01 0.38522535068532E+00  
c -.96656072172736E+00 0.28459344937234E+01 -.33001114766009E+00  
c -.63621406828794E+00 0.42121393658297E+01 -.20143633390673E+00  
c 0.65666964123310E+00 0.45472211636198E+01 0.23843061383108E+00  
o 0.57189577287444E+01 -.25257193589987E+01 0.16384942873654E+01  
o 0.19773012128066E+01 -.48257813047161E+01 -.25505199297045E+00  
o 0.54949047487341E+01 0.24880046801947E+00 0.18966587555817E+01  
c -.31289169811683E-01 0.18473589548866E+01 -.40813794620330E-01  
o -.22243266407227E+01 0.25026777511407E+01 -.81645307015143E+00  
c 0.16072870020603E+01 0.35559930861239E+01 0.53363227895548E+00  
o -.15902547108890E+01 0.51401979824661E+01 -.54517890908908E+00  
o 0.40758273733672E+01 0.23732036632435E+01 0.15807131886934E+01  
s -.33844308287520E+01 0.21380299236051E+01 0.44511145285597E+00  
o -.45829344285643E+01 0.18995729608413E+01 -.44628670010893E+00  
o -.28419128391255E+01 0.86062145641478E+00 0.10461718068003E+01  
o -.34218462490697E+01 0.33164783168026E+01 0.13355183860187E+01  
c -.53722057561264E+01 -.14009657932061E+01 -.19283615550245E+00  
c -.11397186872036E+01 -.39336589968595E+01 0.53453542942326E-01  
c -.24514981249676E+01 -.32131422350312E+01 -.33637398712184E+00  
c -.22224404504521E+01 -.21688751749973E+01 -.14357269083774E+01  
c -.35173484216437E+01 -.14924497304543E+01 -.19034362518562E+01  
c -.32839558809465E+01 -.60663593230126E+00 -.31335947930863E+01  
n -.41508656856814E+01 -.75459256933238E+00 -.74453590312795E+00  
o -.35540001492913E+01 -.10591980147081E+01 -.42597398340550E+01  
n -.27401009828567E+01 0.61667122794060E+00 -.29341717252425E+01  
c -.24166739081945E+01 0.14697778031257E+01 -.40715380229311E+01  
o -.88559411660457E+00 -.40773338784798E+01 0.12698726564560E+01  
o -.42193173392538E+00 -.43088066045320E+01 -.95318550064942E+00  
h -.15217815301409E+01 -.13859738643650E+01 -.10851879122141E+01  
h -.17509932262708E+01 -.26568867780374E+01 -.23035198990507E+01  
h -.28631806750941E+01 -.27635091545335E+01 0.58310008752320E+00  
h -.31652672387596E+01 -.39743835570542E+01 -.70453176992376E+00  
h -.42429995614308E+01 -.22526514714981E+01 -.22316080083307E+01  
h -.34623232761411E+01 -.60512970315887E+00 0.21081162821408E-01  
h 0.43189507348358E+01 -.46520480231492E+01 0.77647982153621E+00  
h 0.84941610655224E+00 -.23743265451704E+01 -.44688175712643E+00  
h 0.93035283011914E+00 0.56047881814565E+01 0.34225199357995E+00  
h 0.60020330746563E+01 -.34524799785064E+01 0.16585426198497E+01  
h 0.98386517912029E+00 -.46767795604818E+01 -.51811405016262E+00

h -.33305162037244E+00 0.80352556594249E+00 -.14577396773568E+00  
h 0.26049200156476E+01 0.38447624810448E+01 0.86678179320358E+00  
h -.12462344136703E+01 0.60164212018369E+01 -.31759623555878E+00  
h 0.49476704543136E+01 0.20426023046126E+01 0.19184124469106E+01  
h -.57122323195175E+01 -.80960907291423E+00 0.66809155760813E+00  
h -.51287913768416E+01 -.24254761730550E+01 0.11226734133770E+00  
h -.61433353976308E+01 -.14074662130440E+01 -.97487707389051E+00  
h -.19742316995461E+01 0.23966388969053E+01 -.36827009906917E+01  
h -.17031872171083E+01 0.96407785955018E+00 -.47400122997645E+01  
h -.33252812890469E+01 0.17076123855135E+01 -.46458287291754E+01  
h -.43912334896771E+01 0.24703207174992E+00 -.95268587055575E+00  
h -.24981541173137E+01 0.97837234821978E+00 -.20117373153183E+01