

Supporting Information

Spectroscopic studies of the interaction of 3-(2-thienyl)- [1,2,3]triazolo[1,5-a]pyridine with 2,6-dimethyl- β -cyclodextrin and ctDNA.

T. Cifuentes¹, J. Cayupi¹, C. Celis-Barros², G. Zapata-Torres², Rafael Ballesteros³, Rafael Ballesteros-Garrido³, B. Abarca³ and C. Jullian^{1*}

¹Departamento Química Orgánica y Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas. Universidad de Chile. Chile.

²Departamento Química Analítica e Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas. Universidad de Chile. Chile.

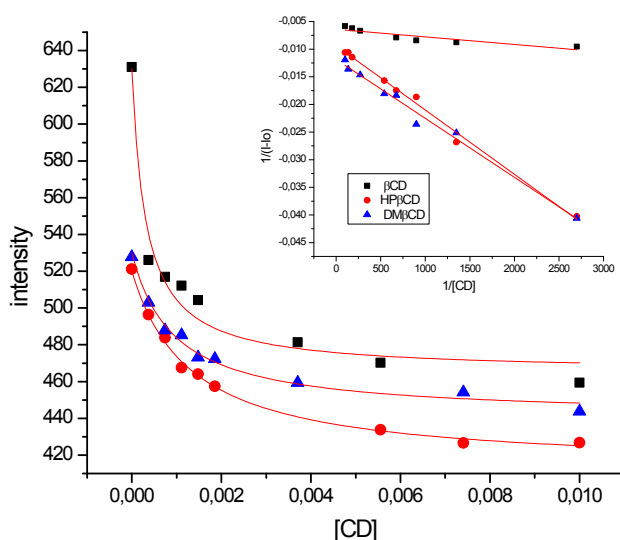
³Departamento de Química Orgánica, Facultad de Farmacia, Universidad de Valencia, Spain

* to whom correspondence should be addressed: cjullian@ciq.uchile.cl

Fluorescence titration of TTP with cyclodextrin

6×10^{-6} M concentration of TTP. $\lambda_{\text{excitation}} = 333$ nm, $\text{slit}_{\text{ex}} = 15$ and $\text{slit}_{\text{em}} = 4$.

Cyclodextrin concentration from 0 – 10 mM



Synthesis of 3-(2-Thienyl)-[1,2,3]triazolo[1,5-a]pyridine TTP, (according to Abarca, B.; Ballesteros, R.; Elmasnaouy, M., Tetrahedron, 1998, 54, 15287-15292)

A mixture of 2-pyridyl-2-thienylmethanone (4.65g, 200mmol) and hydrazine (35% solution in water) (12ml, 200mmol) was heated for 1h under reflux. Then a solution of sodium hydroxide (30ml, 10% in water) was added and extracted with ether. The organic layer was dried and evaporated to give the corresponding hydrazone (4.27g, 85%), which was dissolved in chloroform without purification, and heated to reflux for 2h with manganese oxide (3.65g, 400mmol). Then was filtered and the solvent evaporated to give almost pure TTP as a solid, crystallised from hexane (3.5g, 83%). m.p. 114-115°C.

HRMS found for M^+ 201.0353; $C_{10}H_7N_3S$ requires 201.0361. NMR 1H ($CDCl_3$) δ 8.70(d, $J=7.0$ Hz, 1H); 7.96(d, $J=9.1$ Hz, 1H); 7.55(d, $J=3.6$ Hz, 1H); 7.38(d, $J=5.1$ Hz, 1H); 7.34(dd, $J_1=7.0$ Hz, $J_2=9.1$ Hz, 1H); 7.16(dd, $J_1=5.1$ Hz, $J_2=3.6$ Hz, 1H); 7.05(d, $J=7.0$ Hz, 1H). NMR ^{13}C ($CDCl_3$) δ , 133.28(C); 132.72(C); 129.68(C); 127.75(CH); 125.90(CH); 125.41(CH); 125.11(CH); 124.03(CH); 118.21(CH); 115.85(CH). ν_{max} 3081, 1622, 1520, 1378, 1210, 722 cm^{-1} .

Ground State Energy of TTP = -947.68183484 hartrees

Frequencies of TTP (cm⁻¹)

15.5063	85.9945	107.1948
196.0441	219.0553	279.5202
323.2504	350.7038	429.6047
493.5822	498.8477	573.5828
579.4551	593.9085	634.1884
678.7845	694.4123	702.3520
745.7941	746.4697	766.5413
792.3488	848.5609	852.6547
854.3839	915.4015	922.1551
948.3160	971.2979	982.4559
1034.8797	1069.3679	1107.6796
1139.5161	1140.9071	1180.3170
1198.2082	1243.1265	1275.0830
1307.4872	1352.5708	1380.0112
1400.5760	1442.5979	1486.7604
1508.5858	1554.8833	1580.4995
1611.0914	1683.6027	3208.7822
3221.3939	3226.5646	3234.8272
3246.3521	3256.4040	3270.5470

Cartesian Coordinates

TTP

C	-1.06552	-0.10851	-0.00002
C	-3.42235	0.49132	0.00003
C	-3.76079	-0.83031	0.00019
C	-2.74451	-1.83213	0.00039
C	-1.41694	-1.48068	0.00031
C	0.08957	0.69286	-0.00017
H	-4.11348	1.32394	-0.00004
H	-4.80833	-1.10755	0.00041
H	-3.02878	-2.87884	0.00006
H	-0.63674	-2.2322	0.00073
N	-2.09365	0.8252	-0.00015
N	-1.60858	2.09525	-0.00025
N	-0.3046	1.99558	-0.00029
C	1.49862	0.34579	-0.00017
C	2.56247	1.21928	0.00048
S	2.07075	-1.31112	-0.00063
C	3.82778	0.56697	0.00065
H	2.42052	2.29259	0.00076
C	3.72956	-0.79664	0.00018
H	4.77521	1.09361	0.00137
H	4.52002	-1.5335	-0.00002

2, 5-dimethoxy- β -cyclodextrin complexed with TTP

C1	-0.088000	-0.048000	0.627000
C2	1.170000	0.398000	2.668000
C3	0.363000	1.468000	2.934000
C4	-0.699000	1.803000	2.039000
C5	-0.921000	1.058000	0.904000
C6	0.039000	-1.036000	-0.366000
N11	0.934000	-0.334000	1.532000
N12	1.092000	-1.854000	-0.042000
N13	1.683000	-1.478000	1.108000
C14	-0.727000	-1.270000	-1.564000
C15	-2.059000	-1.041000	-1.838000
C17	-2.428000	-1.418000	-3.166000
C19	-1.373000	-1.925000	-3.882000
S16	0.088000	-1.956000	-2.954000
C1	4.972500	-3.871900	-0.437700
C2	4.421000	-4.427300	-1.769600
O3	4.876200	-3.624800	-2.851200
C4	2.892900	-4.524200	-1.760800
O5	2.498600	-5.185100	-2.943200
C6	2.410800	-5.287300	-0.508600
O7	0.984800	-5.099800	-0.406200
C8	3.105800	-4.770500	0.770800
O9	4.536600	-4.752000	0.590600
C10	2.837800	-5.656400	1.984600
O11	3.222300	-5.055700	3.213100
C12	0.095000	-6.199100	-0.462900

C13	-0.900800	-6.020200	-1.620900
014	-0.162400	-5.916000	-2.831400
C15	-1.813100	-4.809200	-1.389800
016	-2.809200	-4.782500	-2.400300
C17	-2.445500	-4.884100	0.023400
018	-3.130800	-3.642900	0.298800
C19	-1.374600	-5.146400	1.091300
020	-0.650300	-6.337000	0.735800
C21	-1.925200	-5.341100	2.494200
022	-2.957200	-6.312700	2.486400
C23	-4.389600	-3.723300	0.971700
C24	-5.531100	-3.660200	-0.054500
025	-5.325000	-4.727400	-0.978600
C26	-5.572000	-2.298900	-0.752500
027	-6.747800	-2.163500	-1.557100
C28	-5.448400	-1.120800	0.233500
029	-5.095600	0.037400	-0.530500
C30	-4.411600	-1.356300	1.352800
031	-4.546300	-2.674000	1.904500
C32	-4.584600	-0.412600	2.534100
033	-5.927300	-0.476800	2.981600
C34	-5.899000	1.179800	-0.367600
C35	-5.955000	1.992400	-1.676800
036	-6.236700	1.240800	-2.842900
C37	-4.647800	2.730600	-1.963700
038	-4.827900	3.595900	-3.072800
C39	-4.244100	3.563200	-0.751600
040	-2.945300	4.097600	-0.987200
C41	-4.227700	2.712300	0.527400

042	-5.466100	2.014200	0.686200
C43	-4.064200	3.531500	1.800100
044	-5.009100	4.588300	1.792100
C45	-2.749900	5.457500	-0.707800
C46	-1.785600	6.032900	-1.746200
047	-2.163700	5.807500	-3.091300
C48	-0.398400	5.399300	-1.602100
049	0.457000	5.950100	-2.578800
C50	0.158200	5.656200	-0.197300
051	1.367000	4.909400	0.016600
C52	-0.891900	5.185700	0.843600
053	-2.221900	5.691000	0.584700
C54	-0.508000	5.634300	2.243300
055	-1.291500	4.942500	3.201800
C56	2.567000	5.568100	0.409200
C57	3.627400	5.518300	-0.698400
058	3.142900	6.258300	-1.789300
C59	3.964700	4.055200	-1.011300
060	4.977700	4.036100	-1.996200
C61	4.466100	3.381400	0.288800
062	4.660800	1.966000	0.073100
C63	3.480000	3.583400	1.452500
064	3.120400	4.976900	1.578900
C65	4.056700	3.138400	2.795900
066	5.321600	3.697700	3.104500
C67	5.961800	1.411100	0.205400
C68	6.348900	0.671200	-1.083800
069	6.222000	1.571000	-2.178700
C70	5.518300	-0.601000	-1.299900

071	6.094400	-1.262800	-2.407500
072	5.532600	-1.483600	-0.049300
073	4.552300	-2.538100	-0.218700
074	5.197700	-0.645700	1.201900
075	6.079000	0.503200	1.290100
076	5.322100	-1.450900	2.485500
077	6.550100	-2.150500	2.506200
H78	6.065300	-3.930600	-0.430200
H79	4.832000	-5.441600	-1.874200
H80	2.484800	-3.503700	-1.709600
H81	1.526900	-5.287700	-2.924800
H82	2.635600	-6.354300	-0.648500
H83	2.749500	-3.751000	0.962300
H84	3.439300	-6.566300	1.885000
H85	1.775700	-5.939000	2.005100
H86	0.650300	-7.135800	-0.580900
H87	-1.526200	-6.923800	-1.651800
H88	-1.198000	-3.899700	-1.447000
H89	-3.672500	-4.612000	-1.983600
H90	-3.159500	-5.713000	0.035200
H91	-0.685800	-4.293000	1.124600
H92	-2.302800	-4.376300	2.867200
H93	-1.100100	-5.662000	3.148600
H94	-4.446400	-4.652200	1.545200
H95	-6.472000	-3.825300	0.495300
H96	-4.734400	-2.246600	-1.452900
H97	-7.510800	-2.224700	-0.964000
H98	-6.420200	-0.967600	0.721300
H99	-3.405400	-1.229300	0.935100

H100	-4.326600	0.604800	2.227200
H101	-3.893900	-0.726200	3.332600
H102	-6.909700	0.878400	-0.067900
H103	-6.738500	2.753600	-1.524800
H104	-3.859200	1.990900	-2.167700
H105	-5.205700	3.039800	-3.770100
H106	-4.970500	4.373100	-0.622700
H107	-3.396000	1.995500	0.457400
H108	-4.237900	2.868600	2.663200
H109	-3.048300	3.921300	1.877400
H110	-3.708700	5.986300	-0.703700
H111	-1.703800	7.116300	-1.555800
H112	-0.502000	4.311300	-1.733200
H113	-0.055000	5.911300	-3.401000
H114	0.358600	6.730900	-0.088300
H115	-0.906700	4.088500	0.813800
H116	-0.663000	6.722500	2.330000
H117	0.558700	5.419500	2.400800
H118	2.353500	6.609000	0.675400
H119	4.533900	5.996700	-0.289600
H120	3.053100	3.548200	-1.358000
H121	5.273300	3.111500	-2.106200
H122	5.423900	3.840700	0.560100
H123	2.574900	2.992000	1.255000
H124	3.325600	3.359500	3.588500
H125	4.210100	2.056500	2.751100
H126	6.684200	2.204700	0.419200
H127	7.401000	0.371700	-0.976600
H128	4.478000	-0.302500	-1.501100

H129	5. 559900	-2. 058000	-2. 601800
H130	6. 526700	-1. 922600	0. 079500
H131	4. 161300	-0. 290200	1. 125200
H132	5. 239400	-0. 772300	3. 349600
H133	4. 480700	-2. 158900	2. 523300
C134	-6. 243400	0. 529800	3. 924000
H135	-6. 151200	1. 532700	3. 485400
H136	-7. 279900	0. 368600	4. 230700
H137	-5. 600800	0. 469800	4. 816200
C138	-3. 409700	-6. 636500	3. 787500
H139	-3. 819100	-5. 757800	4. 309000
H140	-4. 198000	-7. 384600	3. 678800
H141	-2. 600400	-7. 058700	4. 401900
C142	2. 235700	-4. 210000	3. 769500
H143	1. 304600	-4. 759900	3. 979600
H144	2. 637000	-3. 825900	4. 710300
H145	1. 991400	-3. 355700	3. 120700
C146	6. 588500	-3. 143000	3. 516300
H147	5. 781300	-3. 878000	3. 386000
H148	7. 554200	-3. 647500	3. 433500
H149	6. 508800	-2. 702000	4. 522600
C150	5. 285400	4. 965900	3. 739900
H151	4. 907100	5. 753300	3. 079800
H152	4. 658700	4. 940300	4. 645100
H153	6. 312800	5. 197000	4. 033900
C154	-0. 925200	5. 257200	4. 529500
H155	-1. 570800	4. 675400	5. 191600
H156	0. 124700	4. 996400	4. 734300
H157	-1. 062400	6. 327200	4. 750400

C158	-4. 846800	5. 463500	2. 892100
H159	-5. 040800	4. 951100	3. 848600
H160	-3. 835100	5. 885800	2. 920500
H161	-5. 578300	6. 267200	2. 773900
C162	4. 124700	6. 830000	-2. 637900
H163	4. 839700	7. 445200	-2. 067400
H164	4. 681500	6. 067500	-3. 189100
H165	3. 584700	7. 475700	-3. 335300
C166	-3. 321400	6. 504600	-3. 524700
H167	-4. 236500	6. 055100	-3. 124800
H168	-3. 273600	7. 569800	-3. 252000
H169	-3. 347300	6. 420900	-4. 613800
C170	-7. 576700	0. 791400	-2. 964900
H171	-7. 793200	-0. 023000	-2. 265700
H172	-8. 291800	1. 614100	-2. 813000
H173	-7. 688000	0. 406800	-3. 981300
C174	-6. 488600	-5. 237900	-1. 627200
H175	-7. 227800	-5. 575300	-0. 887100
H176	-6. 942800	-4. 489400	-2. 281600
H177	-6. 160300	-6. 097300	-2. 215600
C178	-0. 816000	-6. 385600	-4. 011700
H179	-1. 128200	-7. 432200	-3. 890700
H180	-1. 687600	-5. 773300	-4. 251400
H181	-0. 077200	-6. 326000	-4. 813800
C182	5. 173900	-4. 315900	-4. 064300
H183	5. 938600	-5. 087200	-3. 897100
H184	4. 274500	-4. 774800	-4. 480000
H185	5. 570200	-3. 567300	-4. 753800
C186	7. 188700	1. 433300	-3. 218000

H187	8.208600	1.545800	-2.823500
H188	7.094500	0.464100	-3.712200
H189	6.993600	2.241200	-3.927200

1bna complexed with TTP

O1	18.9350	34.1950	25.6170
H2	18.4120	34.9840	25.6920
C3	19.1300	33.9210	24.2190
H4	18.1710	33.8570	23.6540
H5	19.5710	34.7840	23.6680
C6	19.9610	32.6680	24.1000
H7	20.9630	32.8780	24.5410
O8	19.3600	31.5830	24.8520
C9	20.1720	32.1220	22.6940
H10	20.1670	32.9140	21.9090
O11	21.3500	31.3250	22.6810
C12	18.9480	31.2230	22.6470
H13	17.9540	31.7180	22.5470
H14	18.8000	30.6080	21.7290
C15	19.2310	30.4820	23.9440
H16	20.1680	29.8800	23.8840
N17	18.0700	29.6610	24.3800
C18	18.2240	28.4540	25.0150
O19	19.3600	28.0140	25.2140
N20	17.1430	27.7610	25.3770
H21	17.2540	26.8670	25.8550
C22	15.9170	28.2260	25.1200
N23	14.8280	27.4770	25.4440

H24	14. 9730	26. 5860	25. 9190
H25	13. 8920	27. 8320	25. 2480
C26	15. 7190	29. 4420	24. 4710
H27	14. 7030	29. 8150	24. 2570
C28	16. 8430	30. 1710	24. 1010
H29	16. 7400	31. 1440	23. 5910
P30	22. 4090	31. 2860	21. 4830
O31	23. 5360	32. 1570	21. 8510
O32	21. 8220	31. 4590	20. 1390
O33	22. 8400	29. 7510	21. 4980
C34	23. 5430	29. 1750	22. 5940
H35	24. 5670	29. 5840	22. 7610
H36	23. 1490	29. 4510	23. 6000
C37	23. 4940	27. 7090	22. 2790
H38	24. 2610	27. 1840	22. 8940
O39	22. 1930	27. 2520	22. 6740
C40	23. 6930	27. 3250	20. 8070
H41	23. 9720	28. 2330	20. 2230
O42	24. 7230	26. 3200	20. 6530
C43	22. 2730	26. 8850	20. 4160
H44	21. 6460	27. 6880	19. 9630
H45	22. 2240	26. 1950	19. 5410
C46	21. 7210	26. 3040	21. 7160
H47	22. 0610	25. 2610	21. 9170
N48	20. 2370	26. 4700	21. 7800
C49	19. 5260	27. 5840	21. 4290
H50	19. 9900	28. 4960	21. 0170
N51	18. 2070	27. 4550	21. 6360
H52	17. 4710	28. 1370	21. 4530

C53	18. 0830	26. 2120	22. 1420
C54	16. 9040	25. 5250	22. 5450
O55	15. 7390	25. 9160	22. 5180
N56	17. 1970	24. 2790	23. 0370
H57	16. 4070	23. 7130	23. 3470
C58	18. 4340	23. 7170	23. 1550
N59	18. 5080	22. 4560	23. 6680
H60	19. 4330	22. 0360	23. 7560
H61	17. 6640	21. 9640	23. 9620
N62	19. 5370	24. 3600	22. 7700
H63	20. 4730	23. 9610	22. 8420
C64	19. 2900	25. 5940	22. 2740
P65	25. 0640	25. 6210	19. 2520
O66	26. 5060	25. 3160	19. 2200
O67	24. 5590	26. 4120	18. 1150
O68	24. 2600	24. 2460	19. 3270
C69	24. 5840	23. 2850	20. 3350
H70	25. 6210	22. 8830	20. 2530
H71	24. 6930	23. 7250	21. 3540
C72	23. 5230	22. 2330	20. 2450
H73	23. 6970	21. 4650	21. 0340
O74	22. 2560	22. 8440	20. 4530
C75	23. 4240	21. 5570	18. 9030
H76	23. 8650	22. 2160	18. 1190
O77	24. 1210	20. 3090	18. 9280
C78	21. 9300	21. 4060	18. 6610
H79	21. 6140	20. 3660	18. 4120
H80	21. 5740	21. 8760	17. 7140
C81	21. 2780	21. 9660	19. 9090

H82	20. 9480	21. 1770	20. 6250
N83	20. 1960	22. 8890	19. 5210
C84	18. 9090	22. 5840	19. 8160
O85	18. 6850	21. 5120	20. 3820
N86	17. 9350	23. 4470	19. 5020
H87	16. 9670	23. 2190	19. 7280
C88	18. 2170	24. 6030	18. 8970
N89	17. 2210	25. 4990	18. 6290
H90	17. 4360	26. 3820	18. 1670
H91	16. 2620	25. 2480	18. 8680
C92	19. 5260	24. 9450	18. 5710
H93	19. 7550	25. 8990	18. 0670
C94	20. 5370	24. 0480	18. 8990
H95	21. 5900	24. 2720	18. 6600
P96	24. 2490	19. 4120	17. 6170
O97	25. 4200	18. 5350	17. 7650
O98	24. 2080	20. 2960	16. 4400
O99	22. 9310	18. 5370	17. 6700
C100	22. 7140	17. 6250	18. 7530
H101	23. 5510	16. 9010	18. 8910
H102	22. 7800	18. 1100	19. 7550
C103	21. 3930	16. 9600	18. 5050
H104	21. 1940	16. 2390	19. 3320
O105	20. 3530	17. 9520	18. 4960
C106	21. 2640	16. 2290	17. 1760
H107	22. 2460	15. 8260	16. 8350
O108	20. 2840	15. 2140	17. 2380
C109	20. 7930	17. 3680	16. 2880
H110	21. 5660	18. 0930	15. 9420

H111	20.4810	17.1050	15.2510
C112	19.7160	17.9010	17.2180
H113	18.8350	17.2170	17.2400
N114	19.3050	19.2810	16.8690
C115	20.0170	20.2630	16.2320
H116	21.0560	20.1370	15.8840
N117	19.3130	21.3940	16.0770
H118	19.6090	22.2680	15.6410
C119	18.1210	21.1000	16.6350
C120	16.9520	21.9040	16.7490
O121	16.7690	23.0570	16.3680
N122	15.9330	21.2140	17.3520
H123	15.0510	21.7130	17.4670
C124	15.9720	19.9300	17.8160
N125	14.8310	19.4160	18.3530
H126	13.9920	19.9910	18.4290
H127	14.8600	18.4570	18.7000
N128	17.0680	19.1790	17.7170
H129	17.1290	18.2190	18.0560
C130	18.0840	19.8250	17.1210
P131	20.3560	13.9690	16.2450
O132	21.1160	12.8910	16.8920
O133	20.8370	14.4230	14.9100
O134	18.8100	13.5810	16.1610
C135	18.0150	13.5690	17.3620
H136	18.4750	14.1290	18.2100
H137	17.9780	12.5750	17.8650
C138	16.6720	14.0880	16.9570
H139	15.9820	14.0430	17.8310

O140	16. 8420	15. 4470	16. 5610
C141	16. 0190	13. 3930	15. 7640
H142	16. 7030	12. 5910	15. 4020
O143	14. 7620	12. 7960	16. 1200
C144	15. 9520	14. 4980	14. 6960
H145	15. 1460	14. 3810	13. 9340
H146	16. 7850	14. 5010	13. 9550
C147	15. 8510	15. 7320	15. 5690
H148	14. 8320	15. 8940	15. 9930
N149	16. 3910	16. 9160	14. 8670
C150	17. 6580	17. 1030	14. 3820
H151	18. 4300	16. 3150	14. 3770
N152	17. 8630	18. 3460	13. 9130
H153	18. 7160	18. 7370	13. 5130
C154	16. 6730	18. 9530	14. 0980
C155	16. 2300	20. 2790	13. 8190
N156	17. 0450	21. 2220	13. 2680
H157	16. 7280	22. 1710	13. 0680
H158	18. 0120	20. 9930	13. 0390
N159	14. 9660	20. 5780	14. 1180
H160	14. 6020	21. 5110	13. 9260
C161	14. 1780	19. 6520	14. 6690
H162	13. 1480	19. 9770	14. 8940
N163	14. 4630	18. 3920	14. 9840
H164	13. 8090	17. 7330	15. 4070
C165	15. 7500	18. 1100	14. 6610
P166	13. 8660	12. 0060	15. 0630
O167	13. 0280	11. 0390	15. 8000
O168	14. 7150	11. 4990	13. 9680

0169	12. 8790	13. 1110	14. 4800
C170	11. 8020	13. 5970	15. 2900
H171	12. 1220	13. 9890	16. 2830
H172	11. 1310	12. 7970	15. 6810
C173	11. 1110	14. 6030	14. 4350
H174	10. 3880	15. 1890	15. 0490
0175	12. 1520	15. 4600	13. 9620
C176	10. 4170	14. 0700	13. 1870
H177	10. 5460	12. 9630	13. 1530
0178	9. 0070	14. 3690	13. 1810
C179	11. 2400	14. 6920	12. 0610
H180	12. 0500	14. 0480	11. 6460
H181	10. 7080	14. 8150	11. 0890
C182	11. 6990	15. 9740	12. 7190
H183	10. 8830	16. 7260	12. 8280
N184	12. 9180	16. 5260	12. 0780
C185	14. 1150	15. 8990	11. 8680
H186	14. 2940	14. 8350	12. 0960
N187	15. 0490	16. 7140	11. 3560
H188	16. 0120	16. 4890	11. 1080
C189	14. 4160	17. 9010	11. 2460
C190	14. 8730	19. 1870	10. 8150
N191	16. 1610	19. 4180	10. 4270
H192	16. 8300	18. 6490	10. 3990
H193	16. 4870	20. 3350	10. 1200
N194	13. 9990	20. 1910	10. 8520
H195	14. 2800	21. 1280	10. 5620
C196	12. 7530	19. 9620	11. 2720
H197	12. 0810	20. 8360	11. 2650

N198	12. 2100	18. 8240	11. 6980
H199	11. 2450	18. 7220	12. 0120
C200	13. 1160	17. 8230	11. 6570
P201	8. 0810	14. 0500	11. 9150
0202	6. 6680	13. 9600	12. 3420
0203	8. 6000	12. 8940	11. 1370
0204	8. 2390	15. 3870	11. 0760
C205	7. 9070	16. 6350	11. 6860
H206	8. 4470	16. 8430	12. 6390
H207	6. 8820	16. 6790	12. 1230
C208	8. 1620	17. 6280	10. 5980
H209	7. 8770	18. 6520	10. 9330
0210	9. 5430	17. 5800	10. 2790
C211	7. 4610	17. 2840	9. 2960
H212	7. 2070	16. 1980	9. 3050
0213	6. 2510	18. 0340	9. 1620
C214	8. 5320	17. 5270	8. 2230
H215	8. 8470	16. 6180	7. 6600
H216	8. 1810	18. 0920	7. 3280
C217	9. 6440	18. 2090	9. 0190
H218	9. 4750	19. 3080	9. 0970
N219	11. 0210	17. 9030	8. 5650
C220	11. 8220	18. 9230	8. 1760
0221	11. 3830	20. 0770	8. 1430
N222	13. 1190	18. 6410	7. 8520
H223	13. 7310	19. 4090	7. 5760
C224	13. 6330	17. 3720	7. 8820
0225	14. 8300	17. 2220	7. 6190
C226	12. 7810	16. 3250	8. 2350

G227	13. 2690	14. 9020	8. 2360
H228	14. 3210	14. 6690	7. 9490
H229	12. 5880	14. 2970	7. 5940
H230	13. 0750	14. 4650	9. 2430
G231	11. 4650	16. 6160	8. 5940
H232	10. 7840	15. 8040	8. 9010
P233	5. 3840	17. 9900	7. 8240
O234	4. 0250	18. 4440	8. 1800
O235	5. 4580	16. 6680	7. 1600
O236	6. 0860	19. 1180	6. 9270
G237	6. 1460	20. 4780	7. 4180
H238	5. 1430	20. 9370	7. 5830
H239	6. 5040	20. 5570	8. 4710
G240	6. 9950	21. 2290	6. 4380
H241	7. 2370	22. 2430	6. 8330
O242	8. 1880	20. 4580	6. 2840
G243	6. 4180	21. 3320	5. 0290
H244	5. 5310	20. 6580	4. 9810
O245	5. 9670	22. 6670	4. 6960
G246	7. 5130	20. 7180	4. 1390
H247	7. 3050	19. 6870	3. 7700
H248	7. 6120	21. 1690	3. 1240
G249	8. 7360	20. 8550	5. 0340
H250	9. 1170	21. 9030	5. 0610
N251	9. 8230	19. 8760	4. 7590
G252	11. 0860	20. 3160	4. 4940
O253	11. 3240	21. 5160	4. 3890
N254	12. 0940	19. 4030	4. 4120
H255	13. 0440	19. 7320	4. 2410

C256	11. 8760	18. 0600	4. 5510
0257	12. 8580	17. 3170	4. 5030
C258	10. 5690	17. 6110	4. 7650
C259	10. 2610	16. 1400	4. 8960
H260	11. 0790	15. 3910	4. 7850
H261	9. 4470	15. 8840	4. 1790
H262	9. 7560	15. 9700	5. 8750
C263	9. 5450	18. 5480	4. 9040
H264	8. 5170	18. 2180	5. 1300
P265	5. 5310	23. 0710	3. 2090
0266	4. 6480	24. 2440	3. 2690
0267	5. 0100	21. 9050	2. 4700
0268	6. 9260	23. 5470	2. 6110
C269	7. 6360	24. 6270	3. 2490
H270	7. 8260	24. 4470	4. 3330
H271	7. 0200	25. 5490	3. 3640
C272	8. 8970	24. 8530	2. 4570
H273	9. 5050	25. 6370	2. 9650
0274	9. 6380	23. 6270	2. 4480
C275	8. 7170	25. 2400	0. 9980
H276	7. 6360	25. 4390	0. 8080
0277	9. 4700	26. 4140	0. 6670
C278	9. 1260	23. 9650	0. 2530
H279	8. 3090	23. 2330	0. 0550
H280	9. 3920	24. 0930	-0. 8220
C281	10. 2410	23. 4830	1. 1570
H282	11. 1630	24. 1010	1. 0530
N283	10. 5240	22. 0220	1. 0150
C284	11. 8140	21. 6030	0. 8400

0285	12. 6910	22. 4470	0. 6700
N286	12. 1060	20. 2970	0. 8730
H287	13. 0730	19. 9910	0. 7650
C288	11. 1410	19. 3950	1. 0460
N289	11. 4610	18. 0750	1. 0890
H290	12. 4380	17. 7980	0. 9930
H291	10. 7220	17. 3840	1. 2210
C292	9. 8030	19. 7750	1. 1770
H293	9. 0080	19. 0180	1. 2860
C294	9. 4990	21. 1330	1. 1670
H295	8. 4590	21. 4820	1. 2790
P296	9. 0550	27. 3330	-0. 5810
0297	9. 4960	28. 7170	-0. 2580
0298	7. 6320	27. 1060	-0. 9470
0299	9. 9540	26. 7650	-1. 7710
C300	11. 3820	26. 9400	-1. 7200
H301	11. 8120	26. 7260	-0. 7140
H302	11. 6930	28. 0090	-1. 7860
C303	11. 9720	26. 0900	-2. 8020
H304	13. 0610	26. 3130	-2. 8900
0305	11. 8020	24. 7240	-2. 4040
C306	11. 3270	26. 1780	-4. 1880
H307	10. 7330	27. 1160	-4. 2870
0308	12. 3110	26. 0960	-5. 2140
C309	10. 4140	24. 9620	-4. 1860
H310	9. 4270	25. 0540	-3. 6750
H311	9. 9410	24. 6660	-5. 1510
C312	11. 4290	24. 0280	-3. 5870
H313	12. 3050	23. 9100	-4. 2670

N314	10. 8900	22. 7130	-3. 2000
C315	9. 6160	22. 3150	-2. 9100
H316	8. 7450	22. 9920	-2. 9190
N317	9. 5410	21. 0090	-2. 6130
H318	8. 7150	20. 4640	-2. 3660
C319	10. 8180	20. 5880	-2. 7180
C320	11. 3760	19. 2920	-2. 5110
O321	10. 8130	18. 2520	-2. 1790
N322	12. 7290	19. 2990	-2. 7200
H323	13. 2140	18. 4110	-2. 5910
C324	13. 4980	20. 3650	-3. 0820
N325	14. 8340	20. 1690	-3. 2370
H326	15. 2310	19. 2400	-3. 0950
H327	15. 4090	20. 9670	-3. 5080
N328	12. 9820	21. 5730	-3. 2670
H329	13. 5310	22. 3890	-3. 5360
C330	11. 6560	21. 6010	-3. 0610
P331	12. 7630	27. 4210	-5. 9800
O332	12. 7960	28. 5720	-5. 0490
O333	11. 8860	27. 5420	-7. 1640
O334	14. 2720	27. 0860	-6. 3660
C335	15. 2750	27. 1080	-5. 3180
H336	14. 8220	27. 1200	-4. 2990
H337	15. 8100	28. 0850	-5. 2650
C338	16. 2220	25. 9460	-5. 5100
H339	16. 9800	25. 9600	-4. 6930
O340	15. 4430	24. 7540	-5. 3970
C341	16. 9420	25. 8270	-6. 8480
H342	16. 8480	26. 7950	-7. 3940

0343	18.3400	25.5110	-6.7010
C344	16.1180	24.7670	-7.5780
H345	15.2210	25.1320	-8.1310
H346	16.5870	24.3110	-8.4810
C347	15.8560	23.8360	-6.4140
H348	16.7600	23.2520	-6.1220
N349	14.6720	22.9750	-6.6370
C350	14.8020	21.6280	-6.5290
0351	15.9240	21.1780	-6.3140
N352	13.7230	20.8420	-6.6270
H353	13.8240	19.8310	-6.5420
C354	12.5150	21.3730	-6.8360
N355	11.4100	20.5740	-6.8720
H356	10.4880	20.9790	-7.0320
H357	11.5330	19.5670	-6.7680
C358	12.3480	22.7440	-6.9780
H359	11.3520	23.1760	-7.1720
C360	13.4700	23.5580	-6.8690
H361	13.3840	24.6530	-6.9690
P362	19.3310	25.7740	-7.9250
0363	20.7040	25.9760	-7.4080
0364	18.7630	26.8510	-8.7580
0365	19.3020	24.4120	-8.7630
C366	20.1090	23.2840	-8.3590
H367	21.2010	23.5050	-8.3270
H368	19.9950	23.0160	-7.2830
C369	19.7480	22.1670	-9.2990
H370	20.2920	21.2400	-9.0020
0371	18.3500	21.9690	-9.1390

C372	19. 9210	22. 4040	-10. 8150
H373	20. 1230	23. 4870	-10. 9890
0374	20. 9850	21. 6350	-11. 4010
H375	21. 0910	21. 7810	-12. 3340
C376	18. 5350	22. 0620	-11. 3810
H377	17. 9100	22. 9370	-11. 6740
H378	18. 5350	21. 5960	-12. 3940
C379	17. 9650	21. 2000	-10. 2690
H380	18. 3870	20. 1680	-10. 2580
N381	16. 4930	21. 2200	-10. 2650
C382	15. 6630	22. 2890	-10. 4780
H383	16. 0210	23. 3090	-10. 6980
N384	14. 3680	21. 9580	-10. 3900
H385	13. 5550	22. 5620	-10. 5120
C386	14. 3880	20. 6400	-10. 1020
C387	13. 3010	19. 7420	-9. 8560
0388	12. 0910	19. 9670	-9. 8570
N389	13. 7500	18. 4660	-9. 6250
H390	13. 0370	17. 7580	-9. 4490
C391	15. 0420	18. 0430	-9. 6050
N392	15. 2590	16. 7170	-9. 4060
H393	14. 4800	16. 0740	-9. 2630
H394	16. 2280	16. 4000	-9. 3910
N395	16. 0610	18. 8850	-9. 7920
H396	17. 0400	18. 6000	-9. 7610
C397	15. 6600	20. 1560	-10. 0270
0398	7. 4580	11. 8840	-9. 0700
H399	6. 5390	11. 7750	-9. 2850
G400	8. 2520	10. 9680	-9. 8540

H401	8.0610	11.0760	-10.9470
H402	7.9150	9.9120	-9.7350
C403	9.7140	11.1410	-9.5120
H404	10.2960	10.3960	-10.1030
O405	10.1440	12.4550	-9.9080
C406	10.1030	10.9890	-8.0550
H407	9.2700	10.5060	-7.4920
O408	11.2930	10.2210	-7.9040
C409	10.2540	12.4370	-7.6070
H410	10.8060	12.5900	-6.6500
H411	9.3190	12.9330	-7.2570
C412	10.8960	13.0440	-8.8370
H413	11.9890	12.8350	-8.9060
N414	10.5750	14.4870	-8.9440
C415	11.5590	15.4300	-9.0060
O416	12.7250	15.0660	-8.9320
N417	11.2460	16.7140	-9.1930
H418	11.9870	17.4150	-9.2280
C419	9.9800	17.0880	-9.3340
N420	9.6980	18.3950	-9.5890
H421	8.7250	18.6820	-9.6970
H422	10.4590	19.0720	-9.6330
C423	8.9390	16.1620	-9.2740
H424	7.8880	16.4810	-9.3770
C425	9.2650	14.8240	-9.0800
H426	8.4780	14.0530	-9.0370
P427	11.6020	9.5100	-6.5020
O428	11.6660	8.0320	-6.6640
O429	10.6440	10.0100	-5.4940

0430	13.0510	10.0940	-6.1770
G431	14.1000	10.0210	-7.1560
H432	13.7660	10.2010	-8.2040
H433	14.4940	8.9930	-7.3340
G434	15.1130	10.9920	-6.6570
H435	16.0420	10.9250	-7.2700
0436	14.5560	12.3000	-6.7550
G437	15.4450	10.8060	-5.1890
H438	14.8670	9.9400	-4.7900
0439	16.8360	10.5600	-5.0130
G440	14.9370	12.1000	-4.5290
H441	13.9260	12.0320	-4.0630
H442	15.4610	12.3930	-3.5890
G443	15.0580	13.0860	-5.6710
H444	16.0920	13.4730	-5.8300
N445	14.0360	14.1400	-5.5360
G446	12.7100	13.9570	-5.2590
H447	12.2600	12.9720	-5.0500
N448	12.0160	15.1030	-5.2690
H449	11.0190	15.2340	-5.0970
G450	12.9370	16.0410	-5.5580
G451	12.7610	17.4510	-5.7100
0452	11.7230	18.1110	-5.6300
N453	13.9520	18.0790	-5.9730
H454	13.9220	19.0930	-6.0790
G455	15.1710	17.4850	-6.1070
N456	16.2440	18.2920	-6.3250
H457	16.1240	19.3010	-6.4170
H458	17.1560	17.8470	-6.4250

N459	15.3290	16.1610	-5.9860
H460	16.2310	15.6950	-6.0840
C461	14.1790	15.4990	-5.7210
P462	17.4780	10.3800	-3.5690
0463	18.6650	9.5160	-3.7290
0464	16.4270	9.9400	-2.6330
0465	17.9570	11.8650	-3.2080
C466	18.9630	12.5310	-3.9960
H467	18.8290	12.4090	-5.0960
H468	19.9700	12.0570	-3.9360
C469	18.9360	13.9580	-3.5360
H470	19.6060	14.5890	-4.1660
0471	17.5920	14.4090	-3.6220
C472	19.2530	14.1390	-2.0660
H473	18.8290	13.2910	-1.4790
0474	20.6590	14.2190	-1.8580
C475	18.5200	15.4170	-1.7280
H476	18.0460	15.4180	-0.7190
H477	19.1870	16.2930	-1.5500
C478	17.5450	15.6020	-2.8720
H479	17.8260	16.4800	-3.4990
N480	16.1450	15.6960	-2.4280
C481	15.5070	16.8860	-2.5580
0482	16.1620	17.8460	-2.9570
N483	14.2090	16.9830	-2.2640
H484	13.7290	17.8760	-2.3760
C485	13.5360	15.9190	-1.8250
N486	12.2050	16.0170	-1.5530
H487	11.7450	16.9180	-1.6800

H488	11. 6900	15. 2030	-1. 2170
C489	14. 1640	14. 6890	-1. 6520
H490	13. 6070	13. 8190	-1. 2650
C491	15. 5090	14. 5840	-1. 9790
H492	16. 0450	13. 6250	-1. 8770
P493	21. 3040	14. 5290	-0. 4360
0494	22. 6960	14. 0870	-0. 5240
0495	20. 4880	13. 9540	0. 6500
0496	21. 3060	16. 1170	-0. 3630
C497	22. 1770	16. 8760	-1. 2120
H498	22. 1840	16. 5400	-2. 2750
H499	23. 2620	16. 7050	-1. 0220
C500	21. 7390	18. 2920	-1. 0210
H501	22. 1020	18. 9150	-1. 8710
0502	20. 3050	18. 2250	-1. 0480
C503	22. 1010	18. 9590	0. 2930
H504	22. 9010	18. 3580	0. 7850
0505	22. 5920	20. 2930	0. 0970
C506	20. 8200	18. 8290	1. 1210
H507	20. 7330	19. 5310	1. 9830
H508	20. 7410	17. 9050	1. 7400
C509	19. 7650	18. 9850	0. 0460
H510	19. 5920	20. 0530	-0. 2250
N511	18. 5130	18. 2990	0. 4680
C512	18. 3630	17. 0620	1. 0390
H513	19. 2090	16. 3950	1. 2760
N514	17. 0800	16. 7440	1. 2810
H515	16. 7090	15. 8830	1. 6820
C516	16. 4000	17. 8320	0. 8680

C517	14.9960	18.0900	0.8820
0518	14.0820	17.3780	1.2800
N519	14.7120	19.3490	0.4180
H520	13.7290	19.6220	0.4060
C521	15.6060	20.2680	-0.0270
N522	15.1340	21.4930	-0.3820
H523	14.1330	21.6850	-0.3480
H524	15.8060	22.1840	-0.7160
N525	16.9120	20.0170	-0.0720
H526	17.6000	20.6860	-0.4180
C527	17.2360	18.7940	0.3840
P528	22.9040	21.2380	1.3390
0529	23.9940	22.1830	1.0250
0530	23.1040	20.3900	2.5380
0531	21.5770	22.1070	1.3900
C532	21.2160	22.8330	0.2000
H533	20.9690	22.1480	-0.6440
H534	22.0950	23.3470	-0.2540
C535	20.1010	23.7880	0.4840
H536	19.9030	24.3850	-0.4370
0537	18.9130	23.0540	0.8160
C538	20.3470	24.7430	1.6330
H539	21.4430	24.8760	1.7880
0540	19.7320	26.0100	1.4110
C541	19.7520	23.9450	2.7910
H542	19.5940	24.5160	3.7360
H543	20.4290	23.1870	3.2490
C544	18.4970	23.3930	2.1450
H545	17.6680	24.1380	2.1440

N546	18.0790	22.0950	2.7580
C547	18.8470	21.0200	3.1330
H548	19.9480	21.0060	3.0710
N549	18.1140	19.9840	3.5840
H550	18.4430	19.0790	3.9200
C551	16.8420	20.4240	3.4880
C552	15.5770	19.8170	3.7860
N553	15.4480	18.5370	4.2420
H554	16.2840	17.9720	4.3890
H555	14.5480	18.1050	4.4540
N556	14.4820	20.5570	3.5930
H557	13.5610	20.1740	3.8070
C558	14.5970	21.8010	3.1180
H559	13.6490	22.3480	2.9850
N560	15.7000	22.4720	2.7830
H561	15.7170	23.4230	2.4160
C562	16.7910	21.7060	3.0020
P563	19.8030	27.1410	2.5260
O564	19.7960	28.4780	1.8880
O565	20.9530	26.8580	3.4260
O566	18.3960	26.9390	3.2410
C567	17.2030	27.0280	2.4520
H568	17.1590	26.2610	1.6440
H569	17.1820	27.9310	1.7980
C570	16.0350	26.9580	3.3880
H571	15.1240	27.2400	2.8110
O572	15.8560	25.6120	3.8500
C573	16.1010	27.8610	4.6150
H574	16.9670	28.5580	4.5250

0575	14. 8900	28. 6080	4. 7570
C576	16. 3680	26. 8440	5. 7240
H577	16. 1320	27. 1930	6. 7560
H578	17. 4440	26. 6370	5. 9310
C579	15. 5610	25. 6550	5. 2430
H580	14. 4700	25. 7690	5. 4460
N581	16. 1040	24. 3730	5. 7550
C582	17. 4110	23. 9670	5. 8300
H583	18. 2660	24. 6070	5. 5540
N584	17. 5390	22. 7060	6. 2760
H585	18. 3970	22. 1740	6. 4250
C586	16. 2660	22. 3090	6. 4800
C587	15. 7150	21. 0730	6. 9330
N588	16. 4830	19. 9940	7. 2430
H589	16. 0890	19. 1110	7. 5670
H590	17. 4980	20. 0540	7. 1640
N591	14. 3890	20. 9940	7. 0360
H592	13. 9520	20. 1330	7. 3650
C593	13. 6360	22. 0410	6. 7080
H594	12. 5480	21. 9000	6. 8190
N595	14. 0190	23. 2340	6. 2650
H596	13. 3860	23. 9980	6. 0270
C597	15. 3670	23. 2910	6. 1740
P598	14. 6040	29. 5450	6. 0200
0599	13. 7920	30. 6960	5. 5820
0600	15. 8520	29. 8360	6. 7490
0601	13. 6330	28. 6280	6. 8850
C602	12. 3980	28. 1710	6. 3030
H603	11. 7080	28. 9970	6. 0120

H604	12. 5180	27. 7340	5. 2840
C605	11. 8090	27. 2170	7. 3020
H606	10. 8760	26. 7710	6. 8850
O607	12. 7670	26. 1840	7. 5340
C608	11. 5150	27. 8220	8. 6690
H609	11. 9750	28. 8370	8. 7140
O610	10. 1030	27. 9520	8. 8910
C611	12. 2670	26. 9060	9. 6300
H612	11. 7810	26. 7600	10. 6230
H613	13. 2150	27. 3260	10. 0390
C614	12. 4260	25. 6450	8. 7990
H615	11. 4930	25. 0350	8. 7660
N616	13. 6090	24. 8500	9. 2050
C617	13. 4420	23. 5750	9. 6560
O618	12. 3110	23. 1010	9. 8020
N619	14. 5510	22. 8250	9. 9130
H620	14. 4320	21. 8590	10. 2180
C621	15. 8150	23. 3210	9. 7770
O622	16. 7550	22. 5700	10. 0290
C623	15. 9720	24. 6470	9. 3620
C624	17. 3450	25. 2390	9. 2340
H625	17. 4700	26. 2960	8. 9030
H626	17. 9480	24. 5860	8. 5610
H627	17. 8760	25. 1090	10. 2060
C628	14. 8440	25. 4050	9. 0480
H629	14. 9500	26. 4390	8. 6780
P630	9. 5130	28. 5330	10. 2600
O631	8. 1450	29. 0070	9. 9980
O632	10. 4550	29. 5130	10. 8410

0633	9. 3950	27. 2230	11. 1530
C634	8. 5760	26. 1480	10. 6640
H635	7. 5310	26. 4600	10. 4320
H636	8. 8530	25. 8150	9. 6370
C637	8. 6550	25. 0600	11. 6780
H638	8. 0090	24. 2110	11. 3550
0639	10. 0030	24. 6150	11. 7640
C640	8. 2720	25. 4710	13. 0870
H641	7. 9620	26. 5420	13. 0950
0642	7. 1990	24. 6570	13. 5530
C643	9. 5860	25. 3070	13. 8600
H644	9. 4910	25. 1650	14. 9620
H645	10. 2200	26. 2200	13. 9460
C646	10. 1900	24. 1480	13. 0890
H647	9. 6820	23. 1760	13. 2880
N648	11. 6600	24. 0700	13. 2050
C649	12. 2570	22. 8800	13. 4860
0650	11. 5830	21. 8660	13. 6910
N651	13. 6200	22. 8290	13. 4970
H652	14. 0740	21. 9430	13. 7180
C653	14. 4020	23. 9140	13. 2250
0654	15. 6250	23. 7640	13. 2520
C655	13. 7740	25. 1260	12. 9330
C656	14. 5630	26. 3580	12. 6120
H657	14. 0610	27. 3260	12. 3790
H658	15. 2500	26. 1150	11. 7680
H659	15. 2790	26. 5350	13. 4490
C660	12. 3850	25. 1870	12. 9260
H661	11. 8730	26. 1360	12. 6950

P662	6. 5940	24. 8230	15. 0160
0663	5. 1690	24. 4240	14. 9870
0664	6. 8700	26. 1890	15. 5110
0665	7. 4090	23. 7310	15. 8390
C666	7. 3310	22. 3520	15. 4330
H667	6. 2890	21. 9830	15. 2900
H668	7. 6770	22. 1700	14. 3890
C669	8. 1000	21. 5980	16. 4610
H670	7. 9250	20. 5020	16. 3490
0671	9. 4780	21. 9020	16. 2630
C672	7. 7660	22. 0450	17. 8790
H673	7. 1410	22. 9670	17. 8220
0674	7. 0360	21. 0410	18. 6110
C675	9. 1230	22. 4140	18. 4690
H676	9. 2520	22. 1410	19. 5420
H677	9. 2860	23. 5080	18. 6090
C678	10. 1070	21. 7430	17. 5230
H679	10. 3180	20. 6790	17. 7830
N680	11. 3280	22. 5560	17. 3310
C681	12. 5340	21. 9390	17. 3290
0682	12. 5600	20. 7310	17. 5790
N683	13. 6390	22. 6390	17. 0350
H684	14. 5470	22. 1750	17. 0380
C685	13. 5600	23. 9380	16. 7390
N686	14. 6850	24. 6280	16. 4040
H687	14. 6250	25. 6210	16. 1780
H688	15. 5790	24. 1370	16. 4060
C689	12. 3380	24. 6090	16. 7360
H690	12. 2810	25. 6860	16. 5040

C691	11. 1930	23. 8780	17. 0350
H692	10. 2000	24. 3580	17. 0320
P693	6. 5090	21. 3240	20. 0990
0694	5. 3870	20. 3970	20. 3960
0695	6. 2350	22. 7740	20. 3060
0696	7. 7670	20. 9240	20. 9930
C697	8. 2160	19. 5590	21. 0730
H698	7. 4190	18. 8510	21. 3990
H699	8. 4110	19. 0990	20. 0760
C700	9. 4220	19. 5570	21. 9770
H701	9. 7380	18. 5030	22. 1570
0702	10. 4930	20. 2600	21. 3190
C703	9. 2670	20. 2670	23. 3250
H704	8. 2010	20. 2780	23. 6520
0705	10. 0880	19. 6570	24. 2930
C706	9. 7510	21. 6700	22. 9900
H707	9. 8790	22. 3880	23. 8330
H708	9. 0460	22. 3460	22. 4530
C709	10. 9880	21. 2260	22. 2560
H710	11. 7180	20. 7590	22. 9570
N711	11. 5990	22. 3570	21. 5430
C712	11. 0370	23. 5450	21. 1590
H713	9. 9760	23. 8020	21. 3190
N714	11. 9210	24. 3620	20. 5660
H715	11. 7620	25. 2980	20. 1930
C716	13. 0720	23. 6530	20. 5800
C717	14. 3700	24. 0030	20. 1020
0718	14. 7470	25. 0570	19. 5850
N719	15. 2680	22. 9830	20. 3080

H720	16. 2230	23. 1480	19. 9890
C721	15. 0230	21. 7760	20. 8910
N722	16. 0660	20. 9140	21. 0380
H723	15. 8830	20. 0100	21. 4740
H724	16. 9910	21. 1620	20. 6870
N725	13. 8150	21. 4520	21. 3500
H726	13. 6020	20. 5630	21. 8030
C727	12. 9020	22. 4290	21. 1510
P728	9. 4770	18. 6270	25. 3400
0729	8. 7670	17. 5340	24. 6270
0730	8. 6700	19. 4090	26. 3120
0731	10. 8070	18. 0670	26. 0340
C732	11. 6880	17. 1700	25. 3100
H733	11. 4610	17. 1340	24. 2190
H734	11. 4920	16. 0970	25. 5410
C735	13. 1150	17. 5730	25. 5930
H736	13. 8180	16. 8040	25. 1950
0737	13. 2840	18. 8040	24. 8930
C738	13. 4410	17. 8790	27. 0590
H739	12. 4840	17. 8580	27. 6300
0740	14. 3410	16. 9380	27. 6770
C741	13. 9280	19. 3220	27. 0250
H742	14. 7350	19. 5610	27. 7560
H743	13. 2010	20. 0710	27. 4170
C744	14. 3120	19. 5080	25. 5680
H745	15. 3290	19. 1130	25. 3360
N746	14. 1440	20. 9320	25. 1700
C747	15. 1990	21. 5950	24. 6300
0748	16. 2570	20. 9840	24. 5040

N749	15. 0670	22. 8770	24. 2570
H750	15. 8640	23. 3730	23. 8580
C751	13. 8980	23. 5100	24. 4040
N752	13. 7710	24. 8130	24. 0180
H753	14. 5770	25. 2840	23. 6070
H754	12. 8790	25. 2960	24. 1300
C755	12. 7950	22. 8660	24. 9670
H756	11. 8370	23. 3960	25. 0970
C757	12. 9350	21. 5400	25. 3590
H758	12. 0910	20. 9920	25. 8110
P759	14. 6580	17. 0640	29. 2470
0760	14. 8630	15. 7170	29. 8250
0761	13. 6330	17. 9120	29. 9200
0762	16. 0330	17. 8800	29. 2840
C763	17. 2430	17. 3200	28. 7420
H764	17. 1190	16. 8380	27. 7440
H765	17. 6040	16. 4080	29. 2720
C766	18. 2080	18. 4640	28. 7580
H767	19. 2330	18. 1260	28. 4770
0768	17. 7160	19. 4280	27. 8290
C769	18. 2300	19. 2360	30. 0580
H770	17. 1900	19. 4390	30. 4060
0771	18. 9780	18. 5830	31. 0840
H772	18. 9920	19. 0680	31. 9010
C773	18. 8850	20. 5190	29. 5780
H774	20. 0000	20. 5180	29. 6070
H775	18. 7620	21. 3940	30. 2590
C776	18. 2760	20. 6930	28. 1880
H777	19. 0670	20. 9830	27. 4570

N778	17. 1640	21. 6590	28. 1390
C779	15. 8740	21. 5360	28. 5800
H780	15. 4900	20. 6440	29. 1030
N781	15. 1290	22. 6140	28. 3080
H782	14. 1460	22. 7750	28. 5280
C783	15. 9900	23. 4360	27. 6730
C784	15. 7650	24. 7290	27. 1170
O785	14. 7190	25. 3730	27. 0670
N786	16. 9260	25. 2570	26. 6040
H787	16. 8610	26. 1910	26. 1980
C788	18. 1570	24. 6660	26. 5790
N789	19. 2080	25. 3860	26. 0960
H790	19. 0600	26. 3280	25. 7330
H791	20. 1270	24. 9450	26. 0770
N792	18. 3500	23. 4380	27. 0530
H793	19. 2500	22. 9590	27. 0280
C794	17. 2310	22. 8930	27. 5700
C795	11. 0030	26. 2350	4. 3070
C796	12. 4670	27. 0300	2. 5370
H797	13. 3480	26. 7910	1. 9550
C798	11. 7100	28. 1580	2. 4150
H799	11. 9830	28. 9010	1. 6750
C800	10. 5750	28. 3560	3. 2570
H801	9. 9910	29. 2650	3. 1590
C802	10. 2260	27. 4110	4. 1900
H803	9. 3760	27. 5550	4. 8470
C804	11. 0410	25. 0590	5. 0750
N805	12. 1080	26. 1000	3. 4760
N806	12. 7760	24. 9420	3. 7230

N807	12. 1230	24. 3360	4. 6820
C808	10. 1590	24. 5960	6. 1290
C809	8. 9310	25. 0800	6. 5230
H810	8. 4310	25. 9080	6. 0350
C811	8. 3650	24. 3570	7. 6130
H812	7. 4020	24. 5910	8. 0540
C813	9. 1600	23. 3290	8. 0340
S814	10. 6230	23. 2200	7. 1090
H815	8. 9730	22. 6200	8. 8290