

Optimised geometries

Tyrosyl radical

(Hydrogens optimised at PM3, ring plus methylene hydrogens optimised at B3LYP/6-31G\*)

### Catalase+PAA

Charge = 0 Multiplicity = 2

N							
C	1	B1					
C	2	B2	1	A1			
O	3	B3	2	A2	1	D1	0
C	2	B4	1	A3	3	D2	0
H	1	B5	2	A4	5	D3	0
H	1	B6	2	A5	5	D4	0
H	2	B7	3	A6	4	D5	0
H	3	B8	2	A7	1	D6	0
H	5	B9	2	A8	1	D7	0
H	5	B10	2	A9	1	D8	0
H	5	B11	2	A10	1	D9	0
N	3	B12	2	A11	1	D10	0
C	13	B13	3	A12	2	D11	0
C	14	B14	13	A13	3	D12	0
O	15	B15	14	A14	13	D13	0
C	14	B16	13	A15	3	D14	0
C	17	B17	14	A16	13	D15	0
O	18	B18	17	A17	14	D16	0
O	18	B19	17	A18	14	D17	0
H	13	B20	14	A19	15	D18	0
H	13	B21	14	A20	15	D19	0
H	14	B22	15	A21	16	D20	0
H	15	B23	14	A22	13	D21	0
H	17	B24	14	A23	13	D22	0
H	17	B25	14	A24	13	D23	0
H	20	B26	18	A25	17	D24	0
N	19	B27	18	A26	17	D25	0
C	28	B28	19	A27	18	D26	0
C	29	B29	28	A28	19	D27	0
O	30	B30	29	A29	28	D28	0
C	29	B31	28	A30	19	D29	0
C	32	B32	29	A31	28	D30	0
C	33	B33	32	A32	29	D31	0
C	33	B34	32	A33	29	D32	0
C	34	B35	33	A34	32	D33	0
C	35	B36	33	A35	32	D34	0
C	37	B37	35	A36	33	D35	0
O	38	B38	37	A37	35	D36	0
H	28	B39	29	A38	30	D37	0
H	28	B40	29	A39	30	D38	0
H	29	B41	32	A40	33	D39	0
H	32	B42	29	A41	28	D40	0
H	32	B43	29	A42	28	D41	0
H	34	B44	33	A43	32	D42	0
H	35	B45	33	A44	32	D43	0
H	36	B46	34	A45	33	D44	0
H	37	B47	35	A46	33	D45	0
H	39	B48	38	A47	37	D46	0
N	30	B49	29	A48	28	D47	0
C	50	B50	30	A49	29	D48	0
C	51	B51	50	A50	30	D49	0
O	52	B52	51	A51	50	D50	0
C	51	B53	50	A52	30	D51	0
C	54	B54	51	A53	50	D52	0
C	50	B55	30	A54	29	D53	0
H	51	B56	50	A55	30	D54	0
H	52	B57	51	A56	50	D55	0
H	54	B58	51	A57	50	D56	0
H	54	B59	51	A58	50	D57	0
H	55	B60	54	A59	51	D58	0
H	55	B61	54	A60	51	D59	0
H	56	B62	50	A61	30	D60	0
H	56	B63	50	A62	30	D61	0
N	31	B64	30	A63	29	D62	0
C	65	B65	31	A64	30	D63	0
C	66	B66	65	A65	31	D64	0
O	67	B67	66	A66	65	D65	0

C	66	B68	65	A67	31	D66	0
C	69	B69	66	A68	65	D67	0
N	70	B70	69	A69	66	D68	0
C	70	B71	69	A70	66	D69	0
C	71	B72	70	A71	69	D70	0
N	73	B73	71	A72	70	D71	0
H	65	B74	66	A73	67	D72	0
H	65	B75	66	A74	67	D73	0
H	66	B76	67	A75	68	D74	0
H	69	B77	66	A76	65	D75	0
H	69	B78	66	A77	65	D76	0
H	71	B79	70	A78	69	D77	0
H	72	B80	70	A79	69	D78	0
H	73	B81	71	A80	70	D79	0
N	67	B82	66	A81	65	D80	0
C	83	B83	67	A82	66	D81	0
C	84	B84	83	A83	67	D82	0
O	85	B85	84	A84	83	D83	0
C	84	B86	83	A85	67	D84	0
C	87	B87	84	A86	83	D85	0
C	88	B88	87	A87	84	D86	0
N	89	B89	88	A88	87	D87	0
C	90	B90	89	A89	88	D88	0
N	91	B91	90	A90	89	D89	0
N	91	B92	90	A91	89	D90	0
H	83	B93	67	A92	66	D91	0
H	84	B94	83	A93	67	D92	0
H	85	B95	84	A94	83	D93	0
H	87	B96	84	A95	83	D94	0
H	87	B97	84	A96	83	D95	0
H	88	B98	87	A97	84	D96	0
H	88	B99	87	A98	84	D97	0
H	89	B100	88	A99	87	D98	0
H	89	B101	88	A100	87	D99	0
H	90	B102	89	A101	88	D100	0
H	92	B103	91	A102	90	D101	0
H	92	B104	91	A103	90	D102	0
H	93	B105	91	A104	90	D103	0
N	68	B106	67	A105	66	D104	0
C	107	B107	68	A106	67	D105	0
C	108	B108	107	A107	68	D106	0
O	109	B109	108	A108	107	D107	0
C	108	B110	107	A109	68	D108	0
C	111	B111	108	A110	107	D109	0
C	112	B112	111	A111	108	D110	0
C	112	B113	111	A112	108	D111	0
H	107	B114	108	A113	109	D112	0
H	107	B115	108	A114	109	D113	0
H	108	B116	109	A115	110	D114	0
H	111	B117	108	A116	107	D115	0
H	111	B118	108	A117	107	D116	0
H	112	B119	111	A118	108	D117	0
H	113	B120	112	A119	111	D118	0
H	113	B121	112	A120	111	D119	0
H	113	B122	112	A121	111	D120	0
H	114	B123	112	A122	111	D121	0
H	114	B124	112	A123	111	D122	0
H	114	B125	112	A124	111	D123	0
N	109	B126	108	A125	107	D124	0
C	127	B127	109	A126	108	D125	0
C	128	B128	127	A127	109	D126	0
O	129	B129	128	A128	127	D127	0
H	127	B130	109	A129	108	D128	0
H	128	B131	127	A130	109	D129	0
H	128	B132	127	A131	109	D130	0
N	129	B133	128	A132	127	D131	0
C	134	B134	129	A133	128	D132	0
C	135	B135	134	A134	129	D133	0
O	136	B136	135	A135	134	D134	0
C	135	B137	134	A136	129	D135	0
C	138	B138	135	A137	134	D136	0
C	134	B139	129	A138	128	D137	0
H	135	B140	134	A139	129	D138	0
H	136	B141	135	A140	134	D139	0
H	138	B142	135	A141	134	D140	0
H	138	B143	135	A142	134	D141	0
H	139	B144	138	A143	135	D142	0
H	139	B145	138	A144	135	D143	0
H	140	B146	134	A145	129	D144	0
H	140	B147	134	A146	129	D145	0

N	130	B148	129	A147	128	D146	0
C	149	B149	130	A148	129	D147	0
C	150	B150	149	A149	130	D148	0
O	151	B151	150	A150	149	D149	0
C	150	B152	149	A151	130	D150	0
C	153	B153	150	A152	149	D151	0
C	154	B154	153	A153	150	D152	0
C	154	B155	153	A154	150	D153	0
C	155	B156	154	A155	153	D154	0
C	156	B157	154	A156	153	D155	0
C	158	B158	156	A157	154	D156	0
O	159	B159	158	A158	156	D157	0
H	149	B160	150	A159	151	D158	0
H	149	B161	150	A160	151	D159	0
H	150	B162	151	A161	152	D160	0
H	153	B163	150	A162	149	D161	0
H	153	B164	150	A163	149	D162	0
H	155	B165	154	A164	153	D163	0
H	156	B166	154	A165	153	D164	0
H	157	B167	155	A166	154	D165	0
H	158	B168	156	A167	154	D166	0
N	151	B169	150	A168	149	D167	0
C	170	B170	151	A169	150	D168	0
C	171	B171	170	A170	151	D169	0
O	172	B172	171	A171	170	D170	0
C	171	B173	170	A172	151	D171	0
C	174	B174	171	A173	170	D172	0
C	175	B175	174	A174	171	D173	0
C	175	B176	174	A175	171	D174	0
H	170	B177	151	A176	150	D175	0
H	171	B178	170	A177	151	D176	0
H	172	B179	171	A178	170	D177	0
H	174	B180	171	A179	170	D178	0
H	174	B181	171	A180	170	D179	0
H	175	B182	174	A181	171	D180	0
H	176	B183	175	A182	174	D181	0
H	176	B184	175	A183	174	D182	0
H	176	B185	175	A184	174	D183	0
H	177	B186	175	A185	174	D184	0
H	177	B187	175	A186	174	D185	0
H	177	B188	175	A187	174	D186	0

Variables:

A152	113.8425
A153	118.1598
A154	122.4663
A155	121.0081
A156	120.729
A157	120.3027
A158	121.0947
A162	107.8968
A163	108.1101
A164	118.6503
A165	118.8153
A166	120.9523
A167	122.5892
B153	1.4958
B154	1.4206
B155	1.4205
B156	1.3669
B157	1.3756
B158	1.445
B159	1.2681
B163	1.0901
B164	1.095
B165	1.0852
B166	1.0855
B167	1.0846
B168	1.0857
D151	77.9497
D152	89.2768
D153	-89.0939
D154	180.2247
D155	-180.8563
D156	1.2614
D157	-183.9249
D161	-45.5031
D162	-162.4088
D163	0.0123
D164	-1.9696
D165	180.824

D166	179.4431
A1	109.6032
A10	111.7015
A100	110.3455
A101	115.4068
A102	116.8227
A103	116.1348
A104	115.8717
A105	132.8194
A106	99.6481
A107	114.3284
A108	120.4632
A109	109.8813
A11	142.6513
A110	113.6781
A111	109.4407
A112	109.9314
A113	111.7945
A114	110.3113
A115	108.1811
A116	110.2219
A117	109.139
A118	109.5919
A119	112.0588
A12	144.0164
A120	111.816
A121	111.508
A122	111.3818
A123	111.8612
A124	111.2938
A125	116.7894
A126	120.4697
A127	109.8846
A128	120.3029
A129	120.4619
A13	114.2989
A130	109.2827
A131	111.6539
A132	117.677
A133	122.7851
A134	114.88
A135	120.1649
A136	103.2516
A137	103.7796
A138	125.6764
A139	107.5093
A14	121.1463
A140	118.5938
A141	111.7103
A142	111.3145
A143	111.563
A144	112.341
A145	110.3512
A146	110.1494
A147	123.9584
A148	102.1528
A149	114.4785
A15	110.821
A150	120.2125
A151	109.9319
A159	110.5029
A16	112.9832
A160	109.1613
A161	106.4611
A168	117.6938
A169	120.2263
A17	119.3798
A170	108.0327
A171	120.7868
A172	111.4904
A173	117.5338
A174	109.4431
A175	110.2756
A176	122.164
A177	109.6742
A178	119.2767
A179	107.747
A18	117.9329
A180	109.8202
A181	108.9581

A182	111.6937
A183	111.5163
A184	110.8366
A185	111.6053
A186	110.0435
A187	111.8592
A19	109.8558
A2	120.0247
A20	110.9914
A21	107.8367
A22	118.1937
A23	110.1511
A24	110.4013
A25	115.0553
A26	145.516
A27	32.2015
A28	113.9788
A29	119.7183
A3	110.3364
A30	110.4936
A31	112.3145
A32	120.8158
A33	120.929
A34	121.0897
A35	121.2139
A36	119.5582
A37	119.5683
A38	111.6838
A39	109.6421
A4	109.295
A40	108.0247
A41	109.9378
A42	112.1522
A43	120.5261
A44	119.5399
A45	120.1827
A46	119.0491
A47	107.6012
A48	118.5865
A49	115.2542
A5	110.6737
A50	110.5942
A51	120.8175
A52	103.6707
A53	104.5318
A54	132.5899
A55	109.9163
A56	118.9278
A57	111.658
A58	111.3738
A59	111.2059
A6	109.0869
A60	111.8541
A61	110.3938
A62	111.4175
A63	166.0577
A64	113.3034
A65	110.8103
A66	121.1253
A67	110.5773
A68	113.3263
A69	122.7222
A7	118.9009
A70	131.0116
A71	109.2961
A72	108.3639
A73	111.7881
A74	109.5442
A75	107.4599
A76	109.2819
A77	111.0323
A78	125.8742
A79	130.7364
A8	111.6397
A80	126.9641
A81	115.7572
A82	120.8757
A83	108.9541
A84	121.7591
A85	108.9161

A86	113.0296
A87	112.5592
A88	109.9279
A89	124.322
A9	112.7574
A90	119.8112
A91	119.808
A92	121.3233
A93	109.1955
A94	118.51
A95	109.1958
A96	110.7863
A97	109.667
A98	109.5429
A99	109.9046
B1	1.4648
B10	1.1012
B100	1.1128
B101	1.1156
B102	0.9994
B103	1.004
B104	0.9994
B105	0.9923
B106	3.0397
B107	1.4552
B108	1.5248
B109	1.2337
B11	1.1033
B110	1.5286
B111	1.5268
B112	1.5119
B113	1.5181
B114	1.0053
B115	0.9981
B116	1.1223
B117	1.1137
B118	1.1112
B119	1.1178
B12	4.1069
B120	1.1007
B121	1.1009
B122	1.0992
B123	1.0985
B124	1.0988
B125	1.0981
B126	1.3299
B127	1.4499
B128	1.5134
B129	1.2399
B13	1.4572
B130	1.0025
B131	1.1172
B132	1.1145
B133	1.3415
B134	1.4646
B135	1.53
B136	1.2355
B137	1.5239
B138	1.4825
B139	1.4715
B14	1.5152
B140	1.1251
B141	1.1005
B142	1.1067
B143	1.11
B144	1.1103
B145	1.1079
B146	1.1103
B147	1.1122
B148	3.0458
B149	1.4581
B15	1.2307
B150	1.5331
B151	1.229
B152	1.5308
B16	1.5406
B160	1.0023
B161	0.9994
B162	1.1205
B169	1.3289

B17	1.5321
B170	1.4616
B171	1.5288
B172	1.2332
B173	1.5306
B174	1.5355
B175	1.5238
B176	1.5238
B177	0.9979
B178	1.1283
B179	1.1006
B18	1.2552
B180	1.1118
B181	1.1117
B182	1.1179
B183	1.0984
B184	1.0977
B185	1.0975
B186	1.0978
B187	1.1038
B188	1.0977
B19	1.2497
B2	1.5298
B20	0.9992
B21	0.9985
B22	1.1228
B23	1.0993
B24	1.1104
B25	1.1112
B26	0.9779
B27	5.4224
B28	1.4498
B29	1.5172
B3	1.2296
B30	1.2326
B31	1.522
B32	1.516
B33	1.3994
B34	1.3966
B35	1.3943
B36	1.3948
B37	1.3887
B38	1.3771
B39	1.0013
B4	1.5143
B40	0.9987
B41	1.1239
B42	1.1126
B43	1.1149
B44	1.096
B45	1.098
B46	1.0959
B47	1.0975
B48	0.9493
B49	1.3442
B5	0.999
B50	1.4687
B51	1.5422
B52	1.2308
B53	1.5352
B54	1.5128
B55	1.4723
B56	1.1255
B57	1.1004
B58	1.1065
B59	1.1083
B6	0.9995
B60	1.1113
B61	1.1066
B62	1.11
B63	1.1121
B64	3.12
B65	1.4572
B66	1.5098
B67	1.2228
B68	1.5187
B69	1.4899
B7	1.1187
B70	1.3785
B71	1.3532

B72	1.3205
B73	1.322
B74	1.0029
B75	0.9981
B76	1.1252
B77	1.1146
B78	1.1145
B79	1.007
B8	1.0991
B80	1.0911
B81	1.0965
B82	1.3219
B83	1.4429
B84	1.5236
B85	1.2265
B86	1.5219
B87	1.5193
B88	1.5208
B89	1.4564
B9	1.0997
B90	1.3268
B91	1.3303
B92	1.3328
B93	1.0024
B94	1.1275
B95	1.1017
B96	1.1102
B97	1.1139
B98	1.111
B99	1.1148
D1	-55.2698
D10	-176.2381
D100	-42.8536
D101	-24.7202
D102	200.8717
D103	-183.8491
D104	-68.887
D105	170.5746
D106	73.3134
D107	130.7307
D108	-50.3408
D109	-66.9803
D11	10.6156
D110	153.0958
D111	-84.993
D112	76.0071
D113	-46.5431
D114	13.2295
D115	56.0487
D116	170.6511
D117	34.3358
D118	54.1074
D119	-66.2654
D12	-176.2257
D120	-185.956
D121	56.7907
D122	-63.452
D123	-183.382
D124	-49.3195
D125	-178.9682
D126	143.0399
D127	-19.3555
D128	-14.3277
D129	-95.1493
D13	-76.4368
D130	21.5836
D131	160.5412
D132	-179.7215
D133	-48.4731
D134	129.6494
D135	-171.4932
D136	-28.0983
D137	-0.1256
D138	72.2541
D139	-52.4629
D14	60.5262
D140	-150.0101
D141	92.6531
D142	-83.4546
D143	159.2658



D144	73.3746
D145	-43.5245
D146	-102.5969
D147	124.8293
D148	148.408
D149	161.8258
D15	-65.8855
D150	23.6734
D158	84.7073
D159	-155.3308
D16	-52.4144
D160	43.7173
D167	-18.8421
D168	178.0733
D169	-80.3625
D17	127.7414
D170	177.5671
D171	159.2076
D172	-72.9358
D173	175.666
D174	-62.1044
D175	11.1637
D176	40.2387
D177	-1.9376
D178	165.4925
D179	51.5026
D18	-179.8044
D180	56.8582
D181	58.9381
D182	-61.4739
D183	-181.2633
D184	-194.7298
D185	45.4177
D186	-73.9229
D19	58.4414
D2	-120.8936
D20	165.9516
D21	103.7736
D22	175.4845
D23	59.2781
D24	-199.5089
D25	-29.7998
D26	142.669
D27	55.6728
D28	119.1445
D29	-70.8217
D3	59.8915
D30	-72.4097
D31	76.1933
D32	-104.1194
D33	179.6783
D34	-179.6528
D35	0.0235
D36	179.4893
D37	85.3127
D38	-153.3164
D39	43.1387
D4	-60.4627
D40	166.5557
D41	50.2752
D42	2.078
D43	0.5503
D44	180.2653
D45	-179.9765
D46	1.3068
D47	-61.1921
D48	179.6621
D49	-60.0044
D5	-172.9591
D50	154.8961
D51	178.3793
D52	-20.0618
D53	-1.4539
D54	60.3833
D55	-26.1489
D56	-142.0086
D57	100.0818
D58	-87.1861
D59	155.526
D6	125.8807

D60	82.0206
D61	-36.4501
D62	-124.0771
D63	-119.0866
D64	130.1405
D65	150.1591
D66	9.2063
D67	-75.2988
D68	132.6305
D69	-45.9134
D7	177.5453
D70	-178.8198
D71	-0.0297
D72	131.9572
D73	-107.0745
D74	29.0951
D75	165.34
D76	49.9763
D77	4.4965
D78	-2.0611
D79	179.0752
D8	57.4083
D80	-30.3372
D81	179.8303
D82	-70.0381
D83	144.1699
D84	169.0209
D85	-87.2485
D86	149.027
D87	-164.959
D88	155.1189
D89	0.0563
D9	-63.4318
D90	179.857
D91	1.3467
D92	49.0701
D93	-35.9874
D94	151.3853
D95	37.1369
D96	-87.3554
D97	27.0901
D98	72.3876
D99	-43.4683

## Mouse RNR:

Charge = 0 Multiplicity = 2

N						
C	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
O	3	B3	2	A2	1	D1
C	2	B4	1	A3	3	D2
C	5	B5	2	A4	1	D3
C	6	B6	5	A5	2	D4
C	6	B7	5	A6	2	D5
H	1	B8	2	A7	5	D6
H	1	B9	2	A8	5	D7
H	2	B10	1	A9	5	D8
H	3	B11	2	A10	1	D9
H	5	B12	2	A11	1	D10
H	5	B13	2	A12	1	D11
H	6	B14	5	A13	2	D12
H	7	B15	6	A14	5	D13
H	7	B16	6	A15	5	D14
H	7	B17	6	A16	5	D15
H	8	B18	6	A17	5	D16
H	8	B19	6	A18	5	D17
H	8	B20	6	A19	5	D18
N	4	B21	3	A20	2	D19
C	22	B22	4	A21	3	D20
C	23	B23	22	A22	4	D21
O	24	B24	23	A23	22	D22
C	23	B25	22	A24	4	D23
C	26	B26	23	A25	22	D24
C	27	B27	26	A26	23	D25
C	27	B28	26	A27	23	D26
C	28	B29	27	A28	26	D27
C	29	B30	27	A29	26	D28

C	31	B31	29	A30	27	D29	0
H	22	B32	4	A31	3	D30	0
H	22	B33	4	A32	3	D31	0
H	23	B34	22	A33	4	D32	0
H	26	B35	23	A34	22	D33	0
H	26	B36	23	A35	22	D34	0
H	28	B37	27	A36	26	D35	0
H	29	B38	27	A37	26	D36	0
H	30	B39	28	A38	27	D37	0
H	31	B40	29	A39	27	D38	0
H	32	B41	31	A40	29	D39	0
N	24	B42	23	A41	22	D40	0
C	43	B43	24	A42	23	D41	0
C	44	B44	43	A43	24	D42	0
O	45	B45	44	A44	43	D43	0
C	44	B46	43	A45	24	D44	0
H	43	B47	24	A46	23	D45	0
H	44	B48	43	A47	24	D46	0
H	45	B49	44	A48	43	D47	0
H	47	B50	44	A49	43	D48	0
H	47	B51	44	A50	43	D49	0
H	47	B52	44	A51	43	D50	0
N	25	B53	24	A52	23	D51	0
C	54	B54	25	A53	24	D52	0
C	55	B55	54	A54	25	D53	0
O	56	B56	55	A55	54	D54	0
C	55	B57	54	A56	25	D55	0
C	58	B58	55	A57	54	D56	0
O	59	B59	58	A58	55	D57	0
O	59	B60	58	A59	55	D58	0
H	54	B61	25	A60	24	D59	0
H	54	B62	25	A61	24	D60	0
H	55	B63	54	A62	25	D61	0
H	56	B64	55	A63	54	D62	0
H	58	B65	55	A64	54	D63	0
H	58	B66	55	A65	54	D64	0
H	61	B67	59	A66	58	D65	0
N	61	B68	59	A67	58	D66	0
C	69	B69	61	A68	59	D67	0
C	70	B70	69	A69	61	D68	0
O	71	B71	70	A70	69	D69	0
C	70	B72	69	A71	61	D70	0
C	73	B73	70	A72	69	D71	0
N	74	B74	73	A73	70	D72	0
C	74	B75	73	A74	70	D73	0
C	75	B76	74	A75	73	D74	0
N	77	B77	75	A76	74	D75	0
H	69	B78	61	A77	59	D76	0
H	69	B79	61	A78	59	D77	0
H	70	B80	69	A79	61	D78	0
H	71	B81	70	A80	69	D79	0
H	73	B82	70	A81	69	D80	0
H	73	B83	70	A82	69	D81	0
H	75	B84	74	A83	73	D82	0
H	76	B85	74	A84	73	D83	0
H	77	B86	75	A85	74	D84	0
N	72	B87	71	A86	70	D85	0
C	88	B88	72	A87	71	D86	0
C	89	B89	88	A88	72	D87	0
O	90	B90	89	A89	88	D88	0
C	89	B91	88	A90	72	D89	0
C	92	B92	89	A91	88	D90	0
C	93	B93	92	A92	89	D91	0
C	93	B94	92	A93	89	D92	0
C	94	B95	93	A94	92	D93	0
C	95	B96	93	A95	92	D94	0
C	96	B97	94	A96	93	D95	0
O	98	B98	96	A97	94	D96	0
H	88	B99	72	A98	71	D97	0
H	88	B100	72	A99	71	D98	0
H	89	B101	88	A100	72	D99	0
H	90	B102	89	A101	88	D100	0
H	92	B103	89	A102	88	D101	0
H	92	B104	89	A103	88	D102	0
H	94	B105	93	A104	92	D103	0
H	95	B106	93	A105	92	D104	0
H	96	B107	94	A106	93	D105	0
H	97	B108	95	A107	93	D106	0
N	91	B109	90	A108	89	D107	0
C	110	B110	91	A109	90	D108	0

C	111	B111	110	A110	91	D109	0
O	112	B112	111	A111	110	D110	0
C	111	B113	110	A112	91	D111	0
C	114	B114	111	A113	110	D112	0
C	115	B115	114	A114	111	D113	0
C	115	B116	114	A115	111	D114	0
H	110	B117	91	A116	90	D115	0
H	110	B118	91	A117	90	D116	0
H	111	B119	110	A118	91	D117	0
H	112	B120	111	A119	110	D118	0
H	114	B121	111	A120	110	D119	0
H	114	B122	111	A121	110	D120	0
H	115	B123	114	A122	111	D121	0
H	116	B124	115	A123	114	D122	0
H	116	B125	115	A124	114	D123	0
H	116	B126	115	A125	114	D124	0
H	117	B127	115	A126	114	D125	0
H	117	B128	115	A127	114	D126	0
H	117	B129	115	A128	114	D127	0
N	32	B130	31	A129	29	D128	0
C	131	B131	32	A130	31	D129	0
C	132	B132	131	A131	32	D130	0
O	133	B133	132	A132	131	D131	0
C	132	B134	131	A133	32	D132	0
C	135	B135	132	A134	131	D133	0
C	136	B136	135	A135	132	D134	0
C	136	B137	135	A136	132	D135	0
C	137	B138	136	A137	135	D136	0
C	138	B139	136	A138	135	D137	0
C	139	B140	137	A139	136	D138	0
H	131	B141	32	A140	31	D139	0
H	131	B142	32	A141	31	D140	0
H	132	B143	131	A142	32	D141	0
H	133	B144	132	A143	131	D142	0
H	135	B145	132	A144	131	D143	0
H	135	B146	132	A145	131	D144	0
H	137	B147	136	A146	135	D145	0
H	138	B148	136	A147	135	D146	0
H	139	B149	137	A148	136	D147	0
H	140	B150	138	A149	136	D148	0
H	141	B151	139	A150	137	D149	0
N	78	B152	77	A151	75	D150	0
C	153	B153	78	A152	77	D151	0
C	154	B154	153	A153	78	D152	0
O	155	B155	154	A154	153	D153	0
C	154	B156	153	A155	78	D154	0
C	157	B157	154	A156	153	D155	0
C	157	B158	154	A157	153	D156	0
C	158	B159	157	A158	154	D157	0
H	153	B160	78	A159	77	D158	0
H	153	B161	78	A160	77	D159	0
H	154	B162	153	A161	78	D160	0
H	155	B163	154	A162	153	D161	0
H	157	B164	154	A163	153	D162	0
H	158	B165	157	A164	154	D163	0
H	158	B166	157	A165	154	D164	0
H	159	B167	157	A166	154	D165	0
H	159	B168	157	A167	154	D166	0
H	159	B169	157	A168	154	D167	0
H	160	B170	158	A169	157	D168	0
H	160	B171	158	A170	157	D169	0
H	160	B172	158	A171	157	D170	0

Variables:

B1	1.4404
B2	1.5341
B3	1.2289
B4	1.495
B5	1.492
B6	1.5129
B7	1.5012
B8	0.9992
B9	1.0004
B10	1.1335
B11	1.1019
B12	1.113
B13	1.1111
B14	1.1175
B15	1.1
B16	1.1037
B17	1.0986

B18	1.1047
B19	1.1025
B20	1.105
B21	3.3036
B22	1.4221
B23	1.5028
B24	1.2043
B25	1.4595
B26	1.4536
B27	1.3861
B28	1.3844
B29	1.3934
B30	1.3919
B31	1.3976
B32	1.0013
B33	1.0002
B34	1.1304
B35	1.1184
B36	1.1215
B37	1.1007
B38	1.099
B39	1.094
B40	1.0938
B41	1.0975
B42	1.3149
B43	1.4525
B44	1.5373
B45	1.2366
B46	1.5176
B47	1.0173
B48	1.1252
B49	1.1009
B50	1.0999
B51	1.1008
B52	1.0993
B53	3.1256
B54	1.4329
B55	1.5059
B56	1.223
B57	1.5462
B58	1.5025
B59	1.2205
B60	1.3161
B61	0.9987
B62	1.0011
B63	1.124
B64	1.1028
B65	1.1098
B66	1.1164
B67	0.9571
B68	5.8421
B69	1.4477
B70	1.4968
B71	1.2203
B72	1.5176
B73	1.5182
B74	1.3977
B75	1.3588
B76	1.3393
B77	1.3196
B78	0.9998
B79	1.0004
B80	1.1181
B81	1.1041
B82	1.1127
B83	1.1124
B84	0.9897
B85	1.0898
B86	1.0968
B87	3.0655
B88	1.4241
B89	1.4921
B90	1.2478
B91	1.5351
B92	1.5149
B93	1.42044
B94	1.40976
B95	1.37234
B96	1.38142
B97	1.45027

B98	1.25741
B99	0.9993
B100	1.0001
B101	1.1324
B102	1.1002
B103	1.10166
B104	1.09549
B105	1.08473
B106	1.08449
B107	1.08538
B108	1.08351
B109	3.1693
B110	1.457
B111	1.4897
B112	1.2122
B113	1.5263
B114	1.5399
B115	1.5092
B116	1.5149
B117	1.0001
B118	0.999
B119	1.1259
B120	1.106
B121	1.1135
B122	1.1124
B123	1.1207
B124	1.1014
B125	1.0998
B126	1.0998
B127	1.0979
B128	1.1013
B129	1.0995
B130	4.4437
B131	1.4295
B132	1.4898
B133	1.195
B134	1.5284
B135	1.5211
B136	1.3909
B137	1.3932
B138	1.3949
B139	1.3947
B140	1.3887
B141	1.0003
B142	1.0006
B143	1.1262
B144	1.1053
B145	1.1093
B146	1.11
B147	1.1008
B148	1.0972
B149	1.0971
B150	1.094
B151	1.0979
B152	5.1671
B153	1.4345
B154	1.5187
B155	1.2259
B156	1.4868
B157	1.509
B158	1.5051
B159	1.5361
B160	1.0006
B161	0.9983
B162	1.1268
B163	1.1035
B164	1.1227
B165	1.1091
B166	1.111
B167	1.1002
B168	1.1018
B169	1.1031
B170	1.0968
B171	1.0961
B172	1.1009
A1	110.21108
A2	123.2705
A3	105.59992
A4	106.61156
A5	109.69858

A6	106.5866
A7	110.1255
A8	111.16919
A9	113.75241
A10	117.60172
A11	110.2065
A12	112.80621
A13	111.85521
A14	111.18262
A15	112.78501
A16	111.29601
A17	110.11701
A18	115.0433
A19	113.53945
A20	99.31811
A21	97.81901
A22	112.98909
A23	120.25672
A24	103.76596
A25	109.31712
A26	119.3793
A27	120.27197
A28	120.45807
A29	120.71125
A30	118.56522
A31	107.99635
A32	120.90013
A33	114.45008
A34	114.13712
A35	113.33537
A36	120.60791
A37	119.93412
A38	120.81376
A39	120.87305
A40	119.36142
A41	116.8199
A42	121.65862
A43	112.10162
A44	123.47454
A45	106.38725
A46	120.91746
A47	108.55118
A48	117.13397
A49	112.9091
A50	111.74079
A51	110.62227
A52	149.92707
A53	115.74661
A54	107.76921
A55	121.86527
A56	113.2774
A57	114.39476
A58	124.25981
A59	111.55317
A60	55.91879
A61	55.40392
A62	106.59933
A63	118.50141
A64	108.41012
A65	109.49329
A66	110.17551
A67	91.36121
A68	36.2928
A69	108.04857
A70	122.87855
A71	109.43479
A72	113.1841
A73	120.68251
A74	132.42393
A75	107.99103
A76	110.42919
A77	125.17398
A78	75.02831
A79	109.77709
A80	118.23743
A81	109.89034
A82	111.44034
A83	124.40281
A84	131.71237
A85	126.11631

A86	161.80231
A87	122.038
A88	114.97629
A89	120.16222
A90	110.11342
A91	110.82028
A92	118.70277
A93	123.02476
A94	122.08043
A95	121.17424
A96	120.66844
A97	121.72541
A98	53.84179
A99	56.41318
A100	106.72467
A101	119.99161
A102	110.5405
A103	109.44296
A104	118.47922
A105	118.86958
A106	121.92501
A107	121.10056
A108	98.44491
A109	98.25899
A110	105.66666
A111	124.42922
A112	106.85025
A113	114.01659
A114	113.82491
A115	113.45253
A116	95.73349
A117	132.2744
A118	114.15363
A119	116.79576
A120	109.71651
A121	111.37426
A122	105.8627
A123	112.53423
A124	110.76416
A125	112.26504
A126	111.3922
A127	111.46177
A128	111.77065
A129	111.1914
A130	104.40984
A131	110.69494
A132	122.22811
A133	110.53731
A134	112.15831
A135	120.92116
A136	121.44052
A137	120.97007
A138	122.63793
A139	119.92624
A140	24.0738
A141	130.98379
A142	107.47187
A143	117.81548
A144	110.42462
A145	111.71797
A146	120.12921
A147	118.73113
A148	120.1183
A149	120.66843
A150	119.27698
A151	100.46427
A152	45.67267
A153	114.9068
A154	123.21067
A155	108.00656
A156	108.40779
A157	109.64486
A158	113.81287
A159	156.36708
A160	87.58374
A161	105.80345
A162	117.53563
A163	111.00463
A164	110.93246
A165	109.91741



A166	112.52928
A167	112.41054
A168	110.31666
A169	111.74142
A170	110.9661
A171	110.11033
D1	139.8078
D2	-115.54548
D3	-78.82142
D4	-152.16521
D5	-34.53163
D6	175.48449
D7	54.60683
D8	-125.07984
D9	-41.31902
D10	161.14192
D11	44.68874
D12	86.55303
D13	-173.8923
D14	65.94279
D15	-54.61682
D16	-163.4579
D17	79.05476
D18	-46.13067
D19	-96.212
D20	146.57011
D21	57.64692
D22	150.80895
D23	-50.98831
D24	-91.06032
D25	-42.54265
D26	140.24781
D27	-178.53702
D28	177.35503
D29	0.54691
D30	32.22759
D31	-93.4153
D32	-177.06849
D33	33.76453
D34	151.86059
D35	0.76106
D36	-1.98227
D37	-179.78709
D38	-179.19069
D39	-179.07453
D40	-33.18393
D41	-178.04887
D42	-59.11877
D43	133.00528
D44	176.79881
D45	-9.02682
D46	60.09862
D47	-47.68636
D48	57.25609
D49	-64.57884
D50	176.73989
D51	-87.24043
D52	-167.91904
D53	129.60899
D54	140.67121
D55	3.57091
D56	-74.34298
D57	-49.78345
D58	129.2585
D59	93.57017
D60	-69.0005
D61	-114.07407
D62	-38.89698
D63	165.16327
D64	50.94527
D65	-18.37566
D66	90.97755
D67	149.93136
D68	69.39978
D69	139.2249
D70	-43.98551
D71	-70.16861
D72	-178.75826
D73	3.80941
D74	178.7603

D75	3.7006
D76	74.41091
D77	-29.06677
D78	-167.18891
D79	-41.68579
D80	169.50491
D81	52.9212
D82	5.85732
D83	-1.99852
D84	-177.41111
D85	-91.79335
D86	-152.85576
D87	122.88993
D88	149.18918
D89	1.99702
D90	-75.74386
D91	-58.34386
D92	120.54911
D93	178.71734
D94	-179.55221
D95	0.62749
D96	-179.51133
D97	114.5268
D98	-57.13067
D99	-115.79588
D100	-31.4877
D101	165.23046
D102	46.86052
D103	-0.59895
D104	-0.71349
D105	-179.17927
D106	-177.93719
D107	-99.53471
D108	143.72694
D109	72.72002
D110	124.9898
D111	-41.33286
D112	-101.32051
D113	2.82886
D114	128.97787
D115	32.70903
D116	-89.37223
D117	-166.33916
D118	-55.49024
D119	137.55774
D120	22.93436
D121	-114.21703
D122	-54.0497
D123	-173.32199
D124	67.78219
D125	174.84652
D126	54.8904
D127	-64.92038
D128	168.38752
D129	75.92658
D130	-149.83939
D131	137.38817
D132	91.35447
D133	-77.00273
D134	-28.12295
D135	150.09232
D136	178.6357
D137	179.04018
D138	1.19006
D139	-177.38693
D140	-147.93742
D141	-29.21516
D142	-43.52981
D143	163.83924
D144	46.79224
D145	-1.57519
D146	0.50132
D147	-179.1703
D148	-177.69844
D149	178.4057
D150	-106.6019
D151	5.72559
D152	-129.65456
D153	134.49568
D154	106.02911

D155	-62.73286
D156	175.01456
D157	174.50672
D158	19.24286
D159	-116.68448
D160	-10.50207
D161	-45.63708
D162	56.10112
D163	52.72249
D164	-63.65676
D165	42.00422
D166	-79.39443
D167	160.91085
D168	-60.09307
D169	179.32654
D170	59.68803

## ***E. coli* RNR:**

Charge = 0 Multiplicity = 2

N							
C	1	B1					
C	2	B2	1	A1			
O	3	B3	2	A2	1	D1	0
C	2	B4	1	A3	3	D2	0
C	5	B5	2	A4	1	D3	0
C	6	B6	5	A5	2	D4	0
C	6	B7	5	A6	2	D5	0
N	4	B8	3	A7	2	D6	0
C	9	B9	4	A8	3	D7	0
C	10	B10	9	A9	4	D8	0
O	11	B11	10	A10	9	D9	0
C	10	B12	9	A11	4	D10	0
C	13	B13	10	A12	9	D11	0
C	14	B14	13	A13	10	D12	0
O	15	B15	14	A14	13	D13	0
N	15	B16	14	A15	13	D14	0
N	11	B17	10	A16	9	D15	0
C	18	B18	11	A17	10	D16	0
C	19	B19	18	A18	11	D17	0
O	20	B20	19	A19	18	D18	0
C	19	B21	18	A20	11	D19	0
O	22	B22	19	A21	18	D20	0
C	22	B23	19	A22	18	D21	0
N	12	B24	11	A23	10	D22	0
C	25	B25	12	A24	11	D23	0
C	26	B26	25	A25	12	D24	0
O	27	B27	26	A26	25	D25	0
C	26	B28	25	A27	12	D26	0
C	29	B29	26	A28	25	D27	0
O	30	B30	29	A29	26	D28	0
O	30	B31	29	A30	26	D29	0
N	32	B32	30	A31	29	D30	0
C	33	B33	32	A32	30	D31	0
C	34	B34	33	A33	32	D32	0
O	35	B35	34	A34	33	D33	0
C	34	B36	33	A35	32	D34	0
C	37	B37	34	A36	33	D35	0
N	38	B38	37	A37	34	D36	0
C	38	B39	37	A38	34	D37	0
C	39	B40	38	A39	37	D38	0
N	40	B41	38	A40	37	D39	0
N	35	B42	34	A41	33	D40	0
C	43	B43	35	A42	34	D41	0
C	44	B44	43	A43	35	D42	0
O	45	B45	44	A44	43	D43	0
C	44	B46	43	A45	35	D44	0
O	47	B47	44	A46	43	D45	0
N	36	B48	35	A47	34	D46	0
C	49	B49	36	A48	35	D47	0
C	50	B50	49	A49	36	D48	0
O	51	B51	50	A50	49	D49	0
C	50	B52	49	A51	36	D50	0
O	53	B53	50	A52	49	D51	0
N	51	B54	50	A53	49	D52	0
C	55	B55	51	A54	50	D53	0
C	56	B56	55	A55	51	D54	0
O	57	B57	56	A56	55	D55	0

C	56	B58	55	A57	51	D56	0
C	59	B59	56	A58	55	D57	0
C	60	B60	59	A59	56	D58	0
C	60	B61	59	A60	56	D59	0
C	61	B62	60	A61	59	D60	0
C	62	B63	60	A62	59	D61	0
C	63	B64	61	A63	60	D62	0
O	65	B65	63	A64	61	D63	0
N	14	B66	13	A65	10	D64	0
C	67	B67	14	A66	13	D65	0
C	68	B68	67	A67	14	D66	0
O	69	B69	68	A68	67	D67	0
C	68	B70	67	A69	14	D68	0
C	71	B71	68	A70	67	D69	0
C	72	B72	71	A71	68	D70	0
C	72	B73	71	A72	68	D71	0
C	73	B74	72	A73	71	D72	0
C	74	B75	72	A74	71	D73	0
C	75	B76	73	A75	72	D74	0
N	54	B77	53	A76	50	D75	0
C	78	B78	54	A77	53	D76	0
C	79	B79	78	A78	54	D77	0
O	80	B80	79	A79	78	D78	0
C	79	B81	78	A80	54	D79	0
C	82	B82	79	A81	78	D80	0
C	82	B83	79	A82	78	D81	0
C	83	B84	82	A83	79	D82	0
N	81	B85	80	A84	79	D83	0
C	86	B86	81	A85	80	D84	0
C	87	B87	86	A86	81	D85	0
O	88	B88	87	A87	86	D86	0
C	87	B89	86	A88	81	D87	0
C	90	B90	87	A89	86	D88	0
C	90	B91	87	A90	86	D89	0
C	91	B92	90	A91	87	D90	0
H	71	B93	68	A92	67	D91	0
H	71	B94	68	A93	67	D92	0
H	67	B95	14	A94	13	D93	0
H	67	B96	14	A95	13	D94	0
H	68	B97	67	A96	14	D95	0
H	69	B98	68	A97	67	D96	0
H	73	B99	72	A98	71	D97	0
H	75	B100	73	A99	72	D98	0
H	77	B101	75	A100	73	D99	0
H	76	B102	74	A101	72	D100	0
H	74	B103	72	A102	71	D101	0
H	7	B104	6	A103	5	D102	0
H	7	B105	6	A104	5	D103	0
H	7	B106	6	A105	5	D104	0
H	8	B107	6	A106	5	D105	0
H	8	B108	6	A107	5	D106	0
H	8	B109	6	A108	5	D107	0
H	6	B110	5	A109	2	D108	0
H	5	B111	2	A110	1	D109	0
H	5	B112	2	A111	1	D110	0
H	1	B113	2	A112	3	D111	0
H	1	B114	2	A113	3	D112	0
H	2	B115	1	A114	5	D113	0
H	3	B116	2	A115	1	D114	0
H	31	B117	30	A116	29	D115	0
H	29	B118	26	A117	25	D116	0
H	29	B119	26	A118	25	D117	0
H	27	B120	26	A119	25	D118	0
H	25	B121	12	A120	11	D119	0
H	25	B122	12	A121	11	D120	0
H	26	B123	25	A122	12	D121	0
H	85	B124	83	A123	82	D122	0
H	85	B125	83	A124	82	D123	0
H	85	B126	83	A125	82	D124	0
H	83	B127	82	A126	79	D125	0
H	83	B128	82	A127	79	D126	0
H	84	B129	82	A128	79	D127	0
H	84	B130	82	A129	79	D128	0
H	84	B131	82	A130	79	D129	0
H	82	B132	79	A131	78	D130	0
H	80	B133	79	A132	78	D131	0
H	78	B134	54	A133	53	D132	0
H	78	B135	54	A134	53	D133	0
H	79	B136	78	A135	54	D134	0
H	93	B137	91	A136	90	D135	0

H	93	B138	91	A137	90	D136	0
H	93	B139	91	A138	90	D137	0
H	92	B140	90	A139	87	D138	0
H	92	B141	90	A140	87	D139	0
H	92	B142	90	A141	87	D140	0
H	91	B143	90	A142	87	D141	0
H	91	B144	90	A143	87	D142	0
H	90	B145	87	A144	86	D143	0
H	86	B146	81	A145	80	D144	0
H	86	B147	81	A146	80	D145	0
H	87	B148	86	A147	81	D146	0
H	88	B149	87	A148	86	D147	0
H	17	B150	15	A149	14	D148	0
H	17	B151	15	A150	14	D149	0
H	14	B152	13	A151	10	D150	0
H	14	B153	13	A152	10	D151	0
H	13	B154	10	A153	9	D152	0
H	13	B155	10	A154	9	D153	0
H	9	B156	4	A155	3	D154	0
H	9	B157	4	A156	3	D155	0
H	10	B158	9	A157	4	D156	0
H	18	B159	11	A158	10	D157	0
H	19	B160	18	A159	11	D158	0
H	20	B161	19	A160	18	D159	0
H	23	B162	22	A161	19	D160	0
H	24	B163	22	A162	19	D161	0
H	24	B164	22	A163	19	D162	0
H	24	B165	22	A164	19	D163	0
H	22	B166	19	A165	18	D164	0
H	55	B167	51	A166	50	D165	0
H	57	B168	56	A167	55	D166	0
H	49	B169	36	A168	35	D167	0
H	49	B170	36	A169	35	D168	0
H	54	B171	53	A170	50	D169	0
H	53	B172	50	A171	49	D170	0
H	53	B173	50	A172	49	D171	0
H	50	B174	49	A173	36	D172	0
H	56	B175	55	A174	51	D173	0
H	59	B176	56	A175	55	D174	0
H	59	B177	56	A176	55	D175	0
H	62	B178	60	A177	59	D176	0
H	64	B179	62	A178	60	D177	0
H	61	B180	60	A179	59	D178	0
H	63	B181	61	A180	60	D179	0
H	43	B182	35	A181	34	D180	0
H	48	B183	47	A182	44	D181	0
H	45	B184	44	A183	43	D182	0
H	47	B185	44	A184	43	D183	0
H	47	B186	44	A185	43	D184	0
H	44	B187	43	A186	35	D185	0
H	33	B188	32	A187	30	D186	0
H	33	B189	32	A188	30	D187	0
H	34	B190	33	A189	32	D188	0
H	37	B191	34	A190	33	D189	0
H	37	B192	34	A191	33	D190	0
H	42	B193	40	A192	38	D191	0
H	41	B194	39	A193	38	D192	0
H	40	B195	38	A194	37	D193	0

Variables:

B1	1.4466
B2	1.5147
B3	1.2584
B4	1.521
B5	1.5311
B6	1.533
B7	1.5267
B8	3.155
B9	1.4627
B10	1.5402
B11	1.2407
B12	1.5345
B13	1.5332
B14	1.5431
B15	1.2404
B16	1.3299
B17	1.3368
B18	1.439
B19	1.5334
B20	1.2584
B21	1.5343

B22	1.4027
B23	1.5099
B24	3.1069
B25	1.4592
B26	1.5023
B27	1.2584
B28	1.5101
B29	1.5312
B30	1.2391
B31	1.22
B32	5.2706
B33	1.4608
B34	1.5265
B35	1.23
B36	1.5295
B37	1.526
B38	1.3317
B39	1.3823
B40	1.3113
B41	1.311
B42	1.315
B43	1.4443
B44	1.5258
B45	1.2584
B46	1.5302
B47	1.409
B48	2.976
B49	1.4394
B50	1.5302
B51	1.2408
B52	1.5353
B53	1.4051
B54	1.339
B55	1.4447
B56	1.5306
B57	1.2584
B58	1.5243
B59	1.5252
B60	1.41886
B61	1.41545
B62	1.37369
B63	1.37917
B64	1.449
B65	1.26014
B66	7.4103
B67	1.4317
B68	1.4981
B69	1.2584
B70	1.5245
B71	1.5367
B72	1.3892
B73	1.3894
B74	1.3817
B75	1.3861
B76	1.377
B77	6.4613
B78	1.4495
B79	1.5075
B80	1.2584
B81	1.5599
B82	1.5451
B83	1.5274
B84	1.5592
B85	3.2258
B86	1.4469
B87	1.5172
B88	1.2584
B89	1.5399
B90	1.51
B91	1.5233
B92	1.5432
B93	1.108
B94	1.1086
B95	0.9993
B96	0.9987
B97	1.1314
B98	1.0994
B99	1.097
B100	1.0983
B101	1.0989

B102	1.0964
B103	1.096
B104	1.0988
B105	1.0989
B106	1.098
B107	1.0983
B108	1.0989
B109	1.0981
B110	1.1143
B111	1.1154
B112	1.1129
B113	0.9994
B114	0.9988
B115	1.1302
B116	1.0986
B117	0.9581
B118	1.11
B119	1.1154
B120	1.1007
B121	0.999
B122	0.9985
B123	1.1234
B124	1.0965
B125	1.0971
B126	1.0988
B127	1.1117
B128	1.1074
B129	1.0988
B130	1.0981
B131	1.0976
B132	1.1164
B133	1.0995
B134	0.9983
B135	1.0035
B136	1.1333
B137	1.0949
B138	1.0984
B139	1.103
B140	1.0985
B141	1.1028
B142	1.097
B143	1.1127
B144	1.113
B145	1.1255
B146	1.0045
B147	0.9996
B148	1.1205
B149	1.0999
B150	0.996
B151	0.9932
B152	1.1114
B153	1.1122
B154	1.1122
B155	1.1106
B156	0.9978
B157	1.003
B158	1.1262
B159	1.0191
B160	1.1298
B161	1.098
B162	0.9556
B163	1.101
B164	1.099
B165	1.0986
B166	1.1142
B167	1.0035
B168	1.0984
B169	0.9994
B170	1.0098
B171	0.9637
B172	1.1063
B173	1.1096
B174	1.1197
B175	1.1307
B176	1.09719
B177	1.1001
B178	1.08661
B179	1.0856
B180	1.08361
B181	1.08449

B182	0.9995
B183	0.9479
B184	1.1001
B185	1.1097
B186	1.1078
B187	1.1292
B188	0.9981
B189	1.0002
B190	1.126
B191	1.1114
B192	1.1121
B193	0.9884
B194	1.0968
B195	1.0922
A1	109.73849
A2	120.
A3	109.30737
A4	122.42275
A5	114.17871
A6	105.75791
A7	109.70701
A8	95.15229
A9	110.9432
A10	121.46373
A11	109.31383
A12	113.6285
A13	115.71992
A14	121.68008
A15	120.42832
A16	117.98187
A17	122.71857
A18	111.42829
A19	119.99994
A20	107.87316
A21	107.68423
A22	113.11248
A23	166.11041
A24	124.79452
A25	114.5364
A26	119.99994
A27	111.99395
A28	110.84906
A29	121.28345
A30	118.46144
A31	117.43797
A32	48.83839
A33	110.72563
A34	121.5146
A35	111.06423
A36	116.54557
A37	127.58668
A38	124.08284
A39	107.00142
A40	105.33361
A41	116.9039
A42	121.04181
A43	110.6916
A44	120.
A45	109.1999
A46	105.09202
A47	115.00352
A48	100.6726
A49	112.04702
A50	118.51513
A51	109.37953
A52	120.8916
A53	120.39517
A54	120.49617
A55	110.05826
A56	120.
A57	108.77357
A58	111.9659
A59	120.93559
A60	120.84029
A61	121.56646
A62	121.78983
A63	120.96423
A64	121.47331
A65	116.37681
A66	40.34231



A67	111.19642
A68	120.00001
A69	111.15071
A70	108.12442
A71	120.09469
A72	120.47558
A73	120.17739
A74	119.89816
A75	120.63239
A76	107.94899
A77	100.715
A78	108.93063
A79	120.00004
A80	110.2467
A81	109.7936
A82	109.68832
A83	118.29659
A84	99.10208
A85	96.51598
A86	108.68548
A87	120.00001
A88	109.2709
A89	105.25168
A90	114.1639
A91	115.9382
A92	111.41061
A93	112.99083
A94	94.1374
A95	82.29961
A96	109.94809
A97	120.20621
A98	119.73061
A99	119.89619
A100	120.29162
A101	119.84137
A102	120.07001
A103	111.12641
A104	111.50178
A105	111.52599
A106	111.02639
A107	111.94219
A108	111.79011
A109	109.85765
A110	106.304
A111	108.50948
A112	110.56088
A113	109.37886
A114	111.8905
A115	119.91548
A116	113.27309
A117	111.77649
A118	112.78683
A119	120.39731
A120	31.90982
A121	120.20175
A122	104.76115
A123	110.29619
A124	111.1154
A125	112.05641
A126	108.60989
A127	107.80079
A128	111.92271
A129	110.77912
A130	111.64207
A131	109.43883
A132	120.12826
A133	38.77989
A134	78.25059
A135	111.66743
A136	110.41381
A137	111.57794
A138	110.73364
A139	111.78979
A140	110.71444
A141	111.41116
A142	109.45432
A143	110.08666
A144	110.29596
A145	108.97291
A146	16.81579

A147	107.60068
A148	119.89591
A149	119.33855
A150	119.08457
A151	108.57322
A152	108.86328
A153	111.11705
A154	108.58493
A155	135.06324
A156	95.7933
A157	111.87708
A158	118.36662
A159	108.7721
A160	119.57081
A161	109.87902
A162	112.35844
A163	111.36681
A164	111.56871
A165	112.57951
A166	119.40064
A167	119.35454
A168	112.07751
A169	11.42076
A170	109.47797
A171	109.53623
A172	109.02038
A173	107.45944
A174	109.64901
A175	110.16812
A176	106.71719
A177	118.68975
A178	122.57029
A179	119.57024
A180	121.75839
A181	120.73425
A182	107.62875
A183	119.62157
A184	112.52052
A185	110.3305
A186	108.53961
A187	150.11664
A188	70.04347
A189	110.56239
A190	110.43182
A191	109.00259
A192	124.96802
A193	123.40674
A194	129.52099
D1	133.96846
D2	-121.14031
D3	-179.11342
D4	44.86753
D5	162.6751
D6	-94.16888
D7	146.8285
D8	66.75323
D9	133.27089
D10	-55.06952
D11	-68.263
D12	178.73596
D13	-31.76375
D14	145.98611
D15	-43.56156
D16	-179.76918
D17	-60.80111
D18	134.97901
D19	176.6191
D20	-57.2674
D21	-175.223
D22	-109.35486
D23	-138.84623
D24	103.38884
D25	162.49761
D26	-20.36227
D27	-86.14009
D28	-11.48513
D29	169.03148
D30	55.73384
D31	-132.52138
D32	102.03882

D33	133.39546
D34	-19.15291
D35	-58.73084
D36	167.72738
D37	-9.75221
D38	-177.05264
D39	177.08474
D40	-42.9549
D41	173.59109
D42	-55.8892
D43	138.73091
D44	-177.46812
D45	-70.08478
D46	-86.80789
D47	145.21981
D48	66.23771
D49	149.71321
D50	-58.15409
D51	70.86906
D52	-26.91963
D53	173.26986
D54	-70.99605
D55	137.96081
D56	165.50332
D57	-64.01426
D58	-46.83147
D59	132.27763
D60	178.61683
D61	-177.45955
D62	-1.19181
D63	-179.63448
D64	-46.50471
D65	-105.00772
D66	-116.29311
D67	140.18148
D68	120.53669
D69	-111.60119
D70	-65.30102
D71	111.2763
D72	176.16479
D73	-176.21017
D74	0.05197
D75	137.40654
D76	178.7823
D77	-122.92729
D78	148.39531
D79	114.63431
D80	-61.42011
D81	176.60692
D82	-60.43418
D83	-86.6438
D84	136.12606
D85	60.8729
D86	135.98993
D87	-61.19368
D88	-71.41856
D89	167.01284
D90	-174.63701
D91	129.18259
D92	10.756
D93	11.98068
D94	120.92605
D95	1.61859
D96	-40.7899
D97	-3.8843
D98	179.66294
D99	-179.36053
D100	179.9191
D101	3.61658
D102	175.8252
D103	-64.42084
D104	55.57875
D105	175.70571
D106	-64.62738
D107	56.11555
D108	-77.78898
D109	-56.11684
D110	56.29764
D111	166.66018
D112	-73.25261

D113	-118.84065
D114	-47.09563
D115	178.43341
D116	154.25743
D117	35.23917
D118	-17.39724
D119	-65.58002
D120	12.7672
D121	-140.45831
D122	-175.03463
D123	-55.43055
D124	64.8624
D125	62.87517
D126	176.98942
D127	51.57585
D128	171.4076
D129	-69.04008
D130	56.98158
D131	-32.23507
D132	70.61427
D133	-72.28125
D134	-4.1677
D135	166.75074
D136	-72.55871
D137	46.94846
D138	48.01892
D139	167.31707
D140	-72.35801
D141	-53.83236
D142	61.70716
D143	46.24668
D144	23.00139
D145	-70.39644
D146	179.37896
D147	-44.91518
D148	-166.40789
D149	-15.07177
D150	-57.3678
D151	57.39664
D152	55.09702
D153	170.59409
D154	-87.99377
D155	37.15278
D156	-174.33566
D157	-10.62632
D158	58.14393
D159	-45.27359
D160	-67.85348
D161	53.60232
D162	174.12493
D163	-66.30599
D164	56.44475
D165	-29.29345
D166	-41.86396
D167	-96.64945
D168	-16.3686
D169	-36.10746
D170	-170.79781
D171	-53.80387
D172	-174.71701
D173	48.37857
D174	58.73198
D175	175.20153
D176	1.57933
D177	177.53399
D178	-1.65045
D179	177.32758
D180	-7.479
D181	172.26652
D182	-43.14737
D183	51.50159
D184	171.12049
D185	63.30466
D186	175.94748
D187	81.82836
D188	-138.96167
D189	64.49581
D190	-179.88
D191	178.57477
D192	-179.14175

***S. typhimurium* RNR:**

Charge = 0 Multiplicity = 2

N							
C	1	B1					
C	2	B2	1	A1			
O	3	B3	2	A2	1	D1	0
C	2	B4	1	A3	3	D2	0
C	5	B5	2	A4	1	D3	0
C	6	B6	5	A5	2	D4	0
C	6	B7	5	A6	2	D5	0
C	7	B8	6	A7	5	D6	0
C	8	B9	6	A8	5	D7	0
C	9	B10	7	A9	6	D8	0
N	4	B11	3	A10	2	D9	0
C	12	B12	4	A11	3	D10	0
C	13	B13	12	A12	4	D11	0
O	14	B14	13	A13	12	D12	0
C	13	B15	12	A14	4	D13	0
C	16	B16	13	A15	12	D14	0
C	17	B17	16	A16	13	D15	0
C	17	B18	16	A17	13	D16	0
N	14	B19	13	A18	12	D17	0
C	20	B20	14	A19	13	D18	0
C	21	B21	20	A20	14	D19	0
O	22	B22	21	A21	20	D20	0
C	21	B23	20	A22	14	D21	0
O	24	B24	21	A23	20	D22	0
C	24	B25	21	A24	20	D23	0
N	15	B26	14	A25	13	D24	0
C	27	B27	15	A26	14	D25	0
C	28	B28	27	A27	15	D26	0
O	29	B29	28	A28	27	D27	0
C	28	B30	27	A29	15	D28	0
C	31	B31	28	A30	27	D29	0
O	32	B32	31	A31	28	D30	0
O	32	B33	31	A32	28	D31	0
N	32	B34	31	A33	28	D32	0
C	35	B35	32	A34	31	D33	0
C	36	B36	35	A35	32	D34	0
O	37	B37	36	A36	35	D35	0
C	36	B38	35	A37	32	D36	0
C	39	B39	36	A38	35	D37	0
N	40	B40	39	A39	36	D38	0
C	40	B41	39	A40	36	D39	0
C	41	B42	40	A41	39	D40	0
N	43	B43	41	A42	40	D41	0
N	37	B44	36	A43	35	D42	0
C	45	B45	37	A44	36	D43	0
C	46	B46	45	A45	37	D44	0
O	47	B47	46	A46	45	D45	0
C	46	B48	45	A47	37	D46	0
N	38	B49	37	A48	36	D47	0
C	50	B50	38	A49	37	D48	0
C	51	B51	50	A50	38	D49	0
O	52	B52	51	A51	50	D50	0
C	51	B53	50	A52	38	D51	0
O	54	B54	51	A53	50	D52	0
N	52	B55	51	A54	50	D53	0
C	56	B56	52	A55	51	D54	0
C	57	B57	56	A56	52	D55	0
O	58	B58	57	A57	56	D56	0
C	57	B59	56	A58	52	D57	0
C	60	B60	57	A59	56	D58	0
C	61	B61	60	A60	57	D59	0
C	61	B62	60	A61	57	D60	0
C	62	B63	61	A62	60	D61	0
C	63	B64	61	A63	60	D62	0
C	65	B65	63	A64	61	D63	0
O	66	B66	65	A65	63	D64	0
N	53	B67	52	A66	51	D65	0
C	68	B68	53	A67	52	D66	0
C	69	B69	68	A68	53	D67	0
O	70	B70	69	A69	68	D68	0
C	69	B71	68	A70	53	D69	0
C	72	B72	69	A71	68	D70	0

C	72	B73	69	A72	68	D71	0
C	73	B74	72	A73	69	D72	0
N	18	B75	17	A74	16	D73	0
C	76	B76	18	A75	17	D74	0
C	77	B77	76	A76	18	D75	0
O	78	B78	77	A77	76	D76	0
C	77	B79	76	A78	18	D77	0
C	80	B80	77	A79	76	D78	0
C	81	B81	80	A80	77	D79	0
C	81	B82	80	A81	77	D80	0
C	82	B83	81	A82	80	D81	0
C	83	B84	81	A83	80	D82	0
C	84	B85	82	A84	81	D83	0
N	75	B86	73	A85	72	D84	0
C	87	B87	75	A86	73	D85	0
C	88	B88	87	A87	75	D86	0
O	89	B89	88	A88	87	D87	0
C	88	B90	87	A89	75	D88	0
C	91	B91	88	A90	87	D89	0
C	92	B92	91	A91	88	D90	0
C	92	B93	91	A92	88	D91	0
N	89	B94	88	A93	87	D92	0
C	95	B95	89	A94	88	D93	0
C	96	B96	95	A95	89	D94	0
O	97	B97	96	A96	95	D95	0
C	96	B98	95	A97	89	D96	0
C	99	B99	96	A98	95	D97	0
C	99	B100	96	A99	95	D98	0
C	100	B101	99	A100	96	D99	0
N	90	B102	89	A101	88	D100	0
C	103	B103	90	A102	89	D101	0
C	104	B104	103	A103	90	D102	0
O	105	B105	104	A104	103	D103	0
C	104	B106	103	A105	90	D104	0
C	107	B107	104	A106	103	D105	0
C	107	B108	104	A107	103	D106	0
C	108	B109	107	A108	104	D107	0
H	95	B110	89	A109	88	D108	0
H	45	B111	37	A110	36	D109	0
H	20	B112	14	A111	13	D110	0
H	56	B113	52	A112	51	D111	0
H	35	B114	32	A113	31	D112	0
H	35	B115	32	A114	31	D113	0
H	103	B116	90	A115	89	D114	0
H	103	B117	90	A116	89	D115	0
H	27	B118	15	A117	14	D116	0
H	27	B119	15	A118	14	D117	0
H	12	B120	4	A119	3	D118	0
H	12	B121	4	A120	3	D119	0
H	1	B122	2	A121	3	D120	0
H	1	B123	2	A122	3	D121	0
H	87	B124	75	A123	73	D122	0
H	87	B125	75	A124	73	D123	0
H	76	B126	18	A125	17	D124	0
H	76	B127	18	A126	17	D125	0
H	55	B128	54	A127	51	D126	0
H	50	B129	38	A128	37	D127	0
H	50	B130	38	A129	37	D128	0
H	68	B131	53	A130	52	D129	0
H	68	B132	53	A131	52	D130	0
H	70	B133	69	A132	68	D131	0
H	97	B134	96	A133	95	D132	0
H	78	B135	77	A134	76	D133	0
H	105	B136	104	A135	103	D134	0
H	58	B137	57	A136	56	D135	0
H	29	B138	28	A137	27	D136	0
H	34	B139	32	A138	31	D137	0
H	47	B140	46	A139	45	D138	0
H	46	B141	45	A140	37	D139	0
H	49	B142	46	A141	45	D140	0
H	49	B143	46	A142	45	D141	0
H	49	B144	46	A143	45	D142	0
H	36	B145	35	A144	32	D143	0
H	39	B146	36	A145	35	D144	0
H	39	B147	36	A146	35	D145	0
H	43	B148	41	A147	40	D146	0
H	42	B149	40	A148	39	D147	0
H	41	B150	40	A149	39	D148	0
H	54	B151	51	A150	50	D149	0
H	54	B152	51	A151	50	D150	0

H	51	B153	50	A152	38	D151	0
H	57	B154	56	A153	52	D152	0
H	60	B155	57	A154	56	D153	0
H	60	B156	57	A155	56	D154	0
H	63	B157	61	A156	60	D155	0
H	65	B158	63	A157	61	D156	0
H	64	B159	62	A158	61	D157	0
H	62	B160	61	A159	60	D158	0
H	3	B161	2	A160	1	D159	0
H	2	B162	1	A161	5	D160	0
H	5	B163	2	A162	1	D161	0
H	5	B164	2	A163	1	D162	0
H	8	B165	6	A164	5	D163	0
H	10	B166	8	A165	6	D164	0
H	11	B167	9	A166	7	D165	0
H	9	B168	7	A167	6	D166	0
H	7	B169	6	A168	5	D167	0
H	69	B170	68	A169	53	D168	0
H	72	B171	69	A170	68	D169	0
H	74	B172	72	A171	69	D170	0
H	74	B173	72	A172	69	D171	0
H	74	B174	72	A173	69	D172	0
H	75	B175	73	A174	72	D173	0
H	75	B176	73	A175	72	D174	0
H	75	B177	73	A176	72	D175	0
H	73	B178	72	A177	69	D176	0
H	73	B179	72	A178	69	D177	0
H	86	B180	84	A179	82	D178	0
H	84	B181	82	A180	81	D179	0
H	85	B182	83	A181	81	D180	0
H	83	B183	81	A182	80	D181	0
H	82	B184	81	A183	80	D182	0
H	80	B185	77	A184	76	D183	0
H	80	B186	77	A185	76	D184	0
H	77	B187	76	A186	18	D185	0
H	28	B188	27	A187	15	D186	0
H	31	B189	28	A188	27	D187	0
H	31	B190	28	A189	27	D188	0
H	19	B191	17	A190	16	D189	0
H	19	B192	17	A191	16	D190	0
H	19	B193	17	A192	16	D191	0
H	18	B194	17	A193	16	D192	0
H	18	B195	17	A194	16	D193	0
H	18	B196	17	A195	16	D194	0
H	17	B197	16	A196	13	D195	0
H	16	B198	13	A197	12	D196	0
H	16	B199	13	A198	12	D197	0
H	13	B200	12	A199	4	D198	0
H	21	B201	20	A200	14	D199	0
H	24	B202	21	A201	20	D200	0
H	25	B203	24	A202	21	D201	0
H	26	B204	24	A203	21	D202	0
H	26	B205	24	A204	21	D203	0
H	26	B206	24	A205	21	D204	0
H	22	B207	21	A206	20	D205	0
H	93	B208	92	A207	91	D206	0
H	93	B209	92	A208	91	D207	0
H	93	B210	92	A209	91	D208	0
H	94	B211	92	A210	91	D209	0
H	94	B212	92	A211	91	D210	0
H	94	B213	92	A212	91	D211	0
H	92	B214	91	A213	88	D212	0
H	91	B215	88	A214	87	D213	0
H	91	B216	88	A215	87	D214	0
H	88	B217	87	A216	75	D215	0
H	96	B218	95	A217	89	D216	0
H	102	B219	100	A218	99	D217	0
H	102	B220	100	A219	99	D218	0
H	102	B221	100	A220	99	D219	0
H	100	B222	99	A221	96	D220	0
H	100	B223	99	A222	96	D221	0
H	101	B224	99	A223	96	D222	0
H	101	B225	99	A224	96	D223	0
H	101	B226	99	A225	96	D224	0
H	99	B227	96	A226	95	D225	0
H	104	B228	103	A227	90	D226	0
H	107	B229	104	A228	103	D227	0
H	109	B230	107	A229	104	D228	0
H	109	B231	107	A230	104	D229	0
H	109	B232	107	A231	104	D230	0

H	110	B233	108	A232	107	D231	0
H	110	B234	108	A233	107	D232	0
H	110	B235	108	A234	107	D233	0
H	108	B236	107	A235	104	D234	0
H	108	B237	107	A236	104	D235	0

Variables:

B1	1.45718
B2	1.5234
B3	1.2584
B4	1.53954
B5	1.51747
B6	1.3874
B7	1.39341
B8	1.40057
B9	1.39715
B10	1.38482
B11	3.33356
B12	1.46238
B13	1.5173
B14	1.23333
B15	1.53964
B16	1.5385
B17	1.52646
B18	1.52615
B19	1.33602
B20	1.4573
B21	1.52328
B22	1.2584
B23	1.55222
B24	1.43
B25	1.54
B26	3.00576
B27	1.46905
B28	1.52202
B29	1.2584
B30	1.53822
B31	1.50498
B32	1.24837
B33	1.25085
B34	5.55117
B35	1.46355
B36	1.52545
B37	1.23254
B38	1.53408
B39	1.49313
B40	1.37677
B41	1.35474
B42	1.32184
B43	1.32055
B44	1.32651
B45	1.46111
B46	1.52571
B47	1.2584
B48	1.54
B49	3.16432
B50	1.45844
B51	1.5167
B52	1.23111
B53	1.52986
B54	1.40758
B55	1.32998
B56	1.45147
B57	1.5247
B58	1.2584
B59	1.52284
B60	1.50712
B61	1.42033
B62	1.408
B63	1.37662
B64	1.37168
B65	1.44542
B66	1.26384
B67	3.01563
B68	1.45435
B69	1.52728
B70	1.2584
B71	1.54345
B72	1.53736
B73	1.54
B74	1.51344



B75	4.42789
B76	1.46555
B77	1.52815
B78	1.2584
B79	1.53137
B80	1.51079
B81	1.39185
B82	1.39527
B83	1.39074
B84	1.39407
B85	1.39173
B86	7.04104
B87	1.45123
B88	1.53245
B89	1.23718
B90	1.53145
B91	1.53024
B92	1.52274
B93	1.52898
B94	1.33635
B95	1.46185
B96	1.52887
B97	1.2584
B98	1.55956
B99	1.52874
B100	1.52814
B101	1.5142
B102	3.02799
B103	1.46224
B104	1.53684
B105	1.2584
B106	1.55455
B107	1.5369
B108	1.54
B109	1.52595
B110	1.0018
B111	1.0001
B112	1.0139
B113	1.0017
B114	0.9985
B115	1.
B116	1.0018
B117	0.9991
B118	0.9977
B119	0.998
B120	1.0046
B121	0.9982
B122	0.998
B123	0.9986
B124	0.9989
B125	0.9995
B126	0.9996
B127	1.0003
B128	0.9493
B129	1.0002
B130	0.9988
B131	1.009
B132	0.9976
B133	1.0985
B134	1.0985
B135	1.0983
B136	1.0984
B137	1.0984
B138	1.0992
B139	0.9584
B140	1.1004
B141	1.1245
B142	1.1
B143	1.0983
B144	1.0989
B145	1.1269
B146	1.1122
B147	1.1127
B148	1.0968
B149	1.0902
B150	0.9899
B151	1.119
B152	1.107
B153	1.1227
B154	1.1318

B155	1.09758
B156	1.0933
B157	1.08353
B158	1.07827
B159	1.08525
B160	1.0877
B161	1.0996
B162	1.1295
B163	1.109
B164	1.1115
B165	1.0966
B166	1.0964
B167	1.0951
B168	1.0951
B169	1.1077
B170	1.1252
B171	1.1177
B172	1.0998
B173	1.0977
B174	1.0977
B175	1.0997
B176	1.1008
B177	1.0992
B178	1.1097
B179	1.1122
B180	1.096
B181	1.0971
B182	1.0946
B183	1.0962
B184	1.1023
B185	1.1103
B186	1.11
B187	1.1251
B188	1.1212
B189	1.1118
B190	1.1144
B191	1.0987
B192	1.1027
B193	1.0969
B194	1.099
B195	1.1059
B196	1.0993
B197	1.1217
B198	1.1115
B199	1.1102
B200	1.1318
B201	1.1277
B202	1.118
B203	0.954
B204	1.0998
B205	1.0975
B206	1.0967
B207	1.0985
B208	1.1002
B209	1.1011
B210	1.0974
B211	1.0998
B212	1.1091
B213	1.0997
B214	1.1175
B215	1.1138
B216	1.1125
B217	1.1257
B218	1.1274
B219	1.1045
B220	1.1005
B221	1.0985
B222	1.1121
B223	1.1087
B224	1.0963
B225	1.1045
B226	1.0992
B227	1.1177
B228	1.1198
B229	1.1164
B230	1.0981
B231	1.0962
B232	1.1028
B233	1.1002
B234	1.1027

B235	1.099
B236	1.111
B237	1.1121
A1	113.14448
A2	119.99999
A3	110.54688
A4	114.13151
A5	121.14568
A6	120.51118
A7	121.13938
A8	120.96732
A9	119.95705
A10	96.3831
A11	95.2742
A12	110.10936
A13	120.39892
A14	110.50907
A15	114.05235
A16	111.05368
A17	109.09076
A18	115.77875
A19	122.29116
A20	110.97729
A21	120.00002
A22	112.0059
A23	109.47121
A24	109.47125
A25	157.3473
A26	120.43567
A27	110.68285
A28	120.
A29	112.79234
A30	113.15655
A31	118.42904
A32	118.2661
A33	90.14815
A34	45.59473
A35	109.93668
A36	121.11466
A37	110.73692
A38	113.64276
A39	122.75466
A40	130.97966
A41	109.33406
A42	108.33677
A43	116.14473
A44	121.24558
A45	110.60125
A46	120.00003
A47	109.24314
A48	110.02488
A49	98.48715
A50	114.44096
A51	120.15331
A52	110.33494
A53	110.1601
A54	117.39159
A55	119.12824
A56	111.22173
A57	120.00001
A58	110.39248
A59	111.2805
A60	121.90508
A61	118.94527
A62	121.10933
A63	121.0324
A64	121.46393
A65	120.84733
A66	152.35287
A67	123.68525
A68	109.85664
A69	120.
A70	110.18592
A71	108.77938
A72	109.60883
A73	114.70039
A74	109.47572
A75	106.73188
A76	111.45635
A77	120.

A78	110.3199
A79	114.2759
A80	120.96474
A81	120.26522
A82	120.81525
A83	120.95712
A84	120.14434
A85	108.18221
A86	60.69013
A87	109.00701
A88	120.46034
A89	109.60187
A90	118.01306
A91	109.70866
A92	109.79048
A93	116.57308
A94	121.63553
A95	110.19795
A96	120.00002
A97	111.6365
A98	110.18613
A99	110.23164
A100	113.9668
A101	158.43643
A102	127.34546
A103	108.45505
A104	120.
A105	110.91927
A106	109.34175
A107	109.49712
A108	114.72853
A109	121.26782
A110	120.27215
A111	119.31247
A112	121.45489
A113	151.94454
A114	94.23248
A115	58.48323
A116	51.39452
A117	55.98799
A118	54.57012
A119	93.96143
A120	137.1032
A121	110.24009
A122	111.26572
A123	162.19396
A124	88.70979
A125	137.00445
A126	35.49549
A127	107.51241
A128	13.73399
A129	119.54585
A130	12.77689
A131	106.23023
A132	119.34223
A133	119.73592
A134	119.63072
A135	119.45027
A136	119.61763
A137	119.60877
A138	114.12182
A139	119.33434
A140	108.34175
A141	111.47275
A142	112.3378
A143	110.05021
A144	111.48117
A145	110.8654
A146	108.46691
A147	127.68887
A148	131.97302
A149	123.77845
A150	112.22903
A151	114.45883
A152	105.38384
A153	108.3689
A154	107.12051
A155	111.23239
A156	118.28973
A157	120.33945

A158	121.4371
A159	119.47708
A160	120.3147
A161	105.53016
A162	110.92868
A163	109.02539
A164	119.7604
A165	119.56844
A166	120.29487
A167	119.5769
A168	120.78366
A169	110.76904
A170	110.38921
A171	110.99299
A172	111.3022
A173	111.6337
A174	111.03864
A175	111.54131
A176	112.10888
A177	109.26893
A178	109.62949
A179	120.09669
A180	119.64068
A181	120.10422
A182	119.52852
A183	119.85842
A184	110.80908
A185	109.44517
A186	106.81134
A187	106.95411
A188	109.46258
A189	110.24678
A190	111.31758
A191	110.88593
A192	111.58511
A193	110.6595
A194	111.67769
A195	111.91614
A196	108.26878
A197	110.6292
A198	108.63707
A199	110.98369
A200	108.21339
A201	110.09819
A202	106.79827
A203	111.87799
A204	110.7736
A205	110.83695
A206	119.75929
A207	111.86028
A208	110.81926
A209	111.69489
A210	113.08068
A211	109.81799
A212	112.51583
A213	108.94339
A214	107.64008
A215	110.1207
A216	112.21861
A217	108.71826
A218	110.50066
A219	112.59178
A220	111.52744
A221	109.38589
A222	108.37987
A223	112.73195
A224	110.70807
A225	110.65263
A226	108.86742
A227	108.14211
A228	111.16052
A229	111.31622
A230	111.48108
A231	110.59522
A232	111.35421
A233	111.08869
A234	111.02022
A235	108.98111
A236	110.1475
D1	148.28616

D2	-124.01771
D3	-73.45283
D4	-11.03985
D5	169.94555
D6	-179.09419
D7	179.17436
D8	-0.00512
D9	-92.73681
D10	142.95758
D11	65.88926
D12	140.41178
D13	-55.87356
D14	-62.24575
D15	176.42493
D16	-61.79383
D17	-38.84561
D18	-179.08875
D19	-62.97499
D20	139.1607
D21	175.58202
D22	-56.42779
D23	-176.42778
D24	-136.5975
D25	-113.12392
D26	128.52592
D27	141.40579
D28	8.37607
D29	-75.14392
D30	-48.58718
D31	132.87909
D32	-143.24041
D33	-137.61686
D34	76.65338
D35	130.77051
D36	-43.991
D37	-63.60241
D38	177.84445
D39	-1.38002
D40	-179.32221
D41	-0.03014
D42	-49.66543
D43	-179.86888
D44	-58.1573
D45	133.14869
D46	-178.43224
D47	-97.00507
D48	142.49821
D49	84.18914
D50	145.65568
D51	-38.9422
D52	-65.19995
D53	-34.75493
D54	179.18619
D55	-66.8427
D56	143.42084
D57	168.79975
D58	-62.50066
D59	-69.66846
D60	106.71279
D61	176.74702
D62	-176.17851
D63	-1.18545
D64	-177.84871
D65	-128.27126
D66	-117.29815
D67	136.63068
D68	131.07977
D69	14.27001
D70	-65.43981
D71	174.73029
D72	169.30769
D73	152.87292
D74	-156.30801
D75	-136.04555
D76	150.82957
D77	102.67218
D78	-69.75793
D79	-19.69008
D80	161.76561
D81	-178.55632

D82	178.66224
D83	-0.02619
D84	158.37861
D85	98.08025
D86	93.94972
D87	131.72749
D88	-28.13199
D89	-175.33697
D90	162.06379
D91	-74.61301
D92	-47.3524
D93	179.40577
D94	-55.31418
D95	141.06212
D96	-176.1142
D97	-60.04338
D98	178.15319
D99	-59.0785
D100	-157.25939
D101	-82.1524
D102	134.43011
D103	130.29176
D104	13.6479
D105	-68.165
D106	171.86669
D107	-176.9739
D108	-11.87728
D109	13.86014
D110	-16.52267
D111	-18.6961
D112	-105.24869
D113	106.86132
D114	10.57316
D115	-168.03495
D116	152.77321
D117	-17.84998
D118	33.74573
D119	-90.34255
D120	-53.52782
D121	68.53532
D122	159.35595
D123	-16.22243
D124	-7.54121
D125	-55.90863
D126	-62.21069
D127	-48.3368
D128	-97.56526
D129	-139.11335
D130	115.14512
D131	-48.83892
D132	-39.99405
D133	-29.56842
D134	-49.53302
D135	-36.7203
D136	-38.65351
D137	-178.34563
D138	-49.73214
D139	62.73035
D140	-57.35672
D141	64.00104
D142	-176.05676
D143	-163.92083
D144	59.62432
D145	175.54739
D146	-178.38359
D147	-3.51443
D148	0.64428
D149	172.05946
D150	50.29754
D151	-157.45466
D152	51.04903
D153	176.88618
D154	60.30975
D155	2.89671
D156	178.97268
D157	179.81611
D158	-2.98802
D159	-31.57155
D160	-117.1295
D161	50.04217

D162	166.54158
D163	-0.66716
D164	-179.41432
D165	-179.98771
D166	179.70112
D167	-2.4368
D168	-104.22019
D169	54.69899
D170	178.01432
D171	-62.5318
D172	57.872
D173	-176.73737
D174	-56.98858
D175	62.97663
D176	-67.79092
D177	47.34629
D178	179.0174
D179	179.66597
D180	-179.68956
D181	-1.13688
D182	-0.9787
D183	54.34031
D184	170.28636
D185	-16.04152
D186	-112.44499
D187	166.13859
D188	50.52806
D189	-72.21946
D190	47.08186
D191	167.713
D192	172.25342
D193	-68.43162
D194	52.79089
D195	56.62309
D196	60.38351
D197	175.81921
D198	-173.31705
D199	56.70034
D200	63.52086
D201	78.17942
D202	52.6179
D203	172.21462
D204	-68.12873
D205	-41.55482
D206	58.16248
D207	177.44072
D208	-62.60242
D209	81.57453
D210	-159.97813
D211	-41.49979
D212	43.75956
D213	-54.05236
D214	59.29852
D215	-147.38954
D216	63.86881
D217	-42.48548
D218	77.30797
D219	-162.22812
D220	64.22476
D221	178.68219
D222	-57.20278
D223	64.3715
D224	-177.19871
D225	59.04887
D226	-106.70737
D227	52.21328
D228	-74.63115
D229	45.77452
D230	165.6107
D231	-69.95367
D232	49.70447
D233	170.1223
D234	-55.0581
D235	60.67533