

Supplementary data for the article:

Fitzpatrick, A. J.; Stepanovic, S.; Müller-Bunz, H.; Gruden-Pavlović, M. A.; García-Fernández, P.; Morgan, G. G. Challenges in Assignment of Orbital Populations in a High Spin Manganese(III) Complex. *Dalton Transactions* **2016**, 45 (15), 6702–6708.
<https://doi.org/10.1039/c5dt03914b>

Supporting Information

Challenges in Assignment of Orbital Populations in a High Spin Manganese(III) Complex

A. J. Fitzpatrick^a, S. Stepanovic,^b H. Müller-Bunz,^a M. A. Gruden-Pavlović,^b P. García-Fernández,^c and G. G. Morgan^a *

^a*School of Chemistry, University College Dublin, Belfield, Dublin 4, Ireland.*

^b*Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Beograd, Republic of Serbia.*

^c*Departamento de Ciencias de la Tierra y Física de la Materia Condensada, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain.*

1. Synthesis
2. Magnetometry
3. Single Crystal X-ray Diffraction
4. Computational Studies

1. Synthesis

Synthesis of [Mn(5F-Salk₂323)]CF₃SO₃, (**1**)

To a well stirred solution of N,N-bis(aminopropyl)ethylenediamine (1 mmol, 0.183 mL) in 50:50 acetonitrile/ethanol (20 mL), 5-fluoro-2-hydroxyacetophenone (2 mmol, 0.308 g) was added, forming a yellow solution; this was allowed to stir for 30 min. Manganese(II) nitrate hexahydrate (1 mmol, 0.178 g) was added to ammonium trifluoromethanesulfonate (1 mmol, 167 g) in 50:50 acetonitrile/ethanol (5-10 mL). The two solutions were then mixed and allowed to stir for one hour resulting in a dark brown solution which was then gravity filtered. Dark brown crystals of suitable quality for X-ray crystallography were formed upon slow evaporation of the solvent. Yield: 24% 155 mg

Elemental: Theory: C, 46.30%, H, 4.66%, N, 8.64% Found: C, 46.02%, H, 4.58%, N, 8.57%

Mass Spec: 499.46 (Found 499.17)

I.R. (cm⁻¹) = 1594, 1442, 1297, 1222, 665.

Synthesis of [Mn(5F-Salk₂323)]PF₆, (**2**)

To a well stirred solution of N,N-bis(aminopropyl)ethylenediamine (1 mmol, 0.183 mL) in 50:50 acetonitrile/ethanol (20 mL), 5-fluoro-2-hydroxyacetophenone (2 mmol, 0.308 g) was added, forming a yellow solution; this was allowed to stir for 30 min. Manganese(II) nitrate hexahydrate (1 mmol, 0.178 g) was added to ammonium hexafluorophosphate (1 mmol, 0.163 g) in 50:50 acetonitrile/ethanol (5-10 mL). The two solutions were then mixed and allowed to stir for one hour resulting in a dark brown solution which was then gravity filtered. Dark brown crystals of suitable quality for X-ray crystallography were formed upon slow evaporation of the solvent. Yield: 18% 115 mg

Elemental: Theory: C, 44.73%, H, 4.69%, N, 8.69% Found: C, 44.62%, H, 4.44%, N, 8.67%

Mass Spec: 499.46 (Found 499.17)

I.R. (cm^{-1}) = 1593, 1442, 1298, 1220, 832.

Synthesis of $[\text{Mn}(\text{5F-Salk}_2\text{323})]\text{SbF}_6$, (**3**)

To a well stirred solution of N,N-bis(aminopropyl)ethylenediamine (1 mmol, 0.183 mL) in 50:50 acetonitrile/ethanol (20 mL), 5-fluoro-2-hydroxyacetophenone (2 mmol, 0.308 g) was added, forming a yellow solution; this was allowed to stir for 30 min. Manganese(II) nitrate hexahydrate (1 mmol, 0.178 g) was added to silver hexafluoroantimonate (1 mmol, 0.343 g) in 50:50 acetonitrile/ethanol (5-10 mL). The two solutions were then mixed and allowed to stir for one hour resulting in a dark brown solution which was then gravity filtered. Dark brown crystals of suitable quality for X-ray crystallography were formed upon slow evaporation of the solvent. Yield: 47% 345 mg

Elemental: Theory: C, 39.21%, H, 4.11%, N, 7.62% Found: C, 39.25%, H, 4.14%, N, 7.67%

Mass Spec: 499.46 (Found 499.17)

I.R. (cm^{-1}) = 1594, 1442, 1297, 1222, 856.

Synthesis of $[\text{Mn}(\text{5F-Salk}_2\text{323})]\text{BPh}_4$, (**4**)

To a well stirred solution of N,N-bis(aminopropyl)ethylenediamine (1 mmol, 0.183 mL) in 50:50 acetonitrile/ethanol (20 mL), 5-fluoro-2-hydroxyacetophenone (2 mmol, 0.308 g) was added, forming a yellow solution, this was allowed to stir for 30 min. Manganese(II) nitrate hexahydrate (1 mmol, 0.178 g) was added to sodium tetraphenylborate (1 mmol, 0.248 g) in 50:50

acetonitrile/ethanol (5-10 mL). The two solutions were then mixed and allowed to stir for one hour resulting in a dark brown solution, which was then gravity filtered. Dark brown crystals of suitable quality for X-ray crystallography were formed upon slow evaporation of the solvent. Yield: 37% 302 mg

Elemental: Theory: C, 70.42%, H, 6.16%, N, 6.84% Found: C, 70.72%, H, 6.10%, N, 7.07%

Mass Spec: 499.46 (Found 499.17)

I.R. (cm⁻¹) = 3052, 2842, 1595, 1440, 1298, 736.

2. Magnetometry

Variable temperature magnetic susceptibility data for poly-crystalline samples of **(1)** – **(4)** were recorded on a Quantum Design MPMS[®] XL-7 SQUID magnetometer at 0.5 T in the range of 300 – 20 K for complexes **(1)** and **(2)**, and in the range 300 – 10 K for complexes **(3)** and **(4)** in cooling mode. Corrections were made for the diamagnetic contributions of the sample and sample holder, Table S1.

Table S1: $\chi_M T$ v T for full measurement of **1-4**

[Mn(5F-Salk ₂ 323)]CF ₃ SO ₃ (1)		[Mn(5F-Salk ₂ 323)]PF ₆ (2)		[Mn(5F-Salk ₂ 323)]SbF ₆ (3)		[Mn(5F-Salk ₂ 323)]BPh ₄ (4)	
Temperature (K)	$\chi_M T$ (cm ³ mol ⁻¹ K)	Temperature (K)	$\chi_M T$ (cm ³ mol ⁻¹ K)	Temperature (K)	$\chi_M T$ (cm ³ mol ⁻¹ K)	Temperature (K)	$\chi_M T$ (cm ³ mol ⁻¹ K)
300.0016	2.86876	300	2.92405	300.0016	2.94933	299.997	2.83922
292.9434	2.86825	293	2.92405	295.0384	2.95492	294.9708	2.84646
285.5728	2.86277	286	2.92405	289.8974	2.95407	289.9391	2.83619
278.376	2.85772	278	2.92405	284.9002	2.95142	284.8321	2.8441
271.2443	2.85346	271	2.92405	279.8687	2.95559	279.8919	2.84152
264.0325	2.85158	264	2.92405	274.8887	2.95699	274.8466	2.84525
256.8845	2.85128	257	2.92405	269.8716	2.95821	269.893	2.84534
249.7135	2.84951	250	2.92405	264.8566	2.95903	264.8704	2.84753
242.5284	2.84856	243	2.92405	260.0258	2.96207	259.9803	2.84738
235.3724	2.84817	235	2.92405	254.8675	2.96141	254.8456	2.84915
228.2013	2.84931	228	2.92405	249.8777	2.96206	249.9211	2.85105
221.0212	2.84943	221	2.92405	244.8741	2.96286	244.8597	2.85342
213.888	2.85003	214	2.92405	239.8723	2.96458	239.901	2.85345
206.6646	2.84926	207	2.92405	234.8709	2.96507	234.8718	2.85526
199.5078	2.84984	200	2.92405	229.8809	2.96635	229.8826	2.85605
192.3311	2.8502	192	2.92405	224.8788	2.9672	224.8707	2.85791
185.1489	2.85039	185	2.92405	219.8814	2.96784	219.8906	2.85876

177.9816	2.85163	178	2.92405	214.8864	2.96851	214.8799	2.86037
170.7924	2.85142	171	2.92405	209.8871	2.96969	209.8989	2.86146
163.6494	2.85175	164	2.92405	204.8902	2.97036	204.8864	2.86409
156.4465	2.85318	156	2.92454	199.8974	2.97104	199.8998	2.86508
149.2533	2.85478	149	2.9252	194.8942	2.97144	194.9148	2.86747
142.0812	2.85673	142	2.92622	189.901	2.97233	189.8958	2.86831
134.9191	2.85858	135	2.92714	184.9129	2.97257	184.9091	2.86998
127.7286	2.8597	128	2.92731	179.9108	2.97261	179.9207	2.8683
120.5494	2.86226	121	2.92895	174.9272	2.97166	174.9242	2.87122
113.3792	2.86285	113	2.92859	169.922	2.97387	169.9266	2.87106
106.1974	2.86344	106	2.92822	164.9256	2.97471	164.9499	2.87325
99.02168	2.86463	99	2.92847	159.9547	2.97738	159.9295	2.87469
91.84274	2.86616	91.8	2.92905	154.9418	2.97624	154.941	2.87526
84.65553	2.86705	84.7	2.92899	149.9643	2.97747	149.9778	2.87688
77.48472	2.86586	77.5	2.92682	144.9657	2.97776	144.9597	2.87672
70.30566	2.86542	70.3	2.92541	139.9781	2.97617	139.9787	2.87849
63.1148	2.86516	63.1	2.92418	134.98	2.97738	134.9851	2.87905
55.92103	2.86361	55.9	2.92163	129.9819	2.97759	129.9818	2.87953
48.72712	2.86446	48.7	2.92152	124.9988	2.97681	124.9973	2.88099
41.54202	2.86455	41.5	2.92064	120.0012	2.97655	120.0007	2.8824
34.35855	2.86092	34.4	2.91598	115.0105	2.97545	114.9974	2.8831
27.17919	2.85285	27.2	2.9068	110.0154	2.97385	110.0142	2.88299
20.00079	2.82435	20	2.87684	105.0163	2.97231	105.0191	2.88321
				100.0223	2.96863	100.0207	2.88295
				95.02598	2.96672	95.02597	2.88338
				90.03074	2.96413	90.02889	2.88311
				85.04758	2.96127	85.03862	2.88319
				80.03262	2.95717	80.0276	2.88113
				75.04024	2.95383	75.03729	2.8796
				70.03788	2.94906	70.03403	2.87738
				65.03693	2.94361	65.02331	2.87416
				60.03061	2.93735	60.03346	2.87213
				55.02135	2.93105	55.02295	2.86859
				50.0245	2.9233	50.01952	2.86412
				45.01981	2.91249	45.02251	2.85769
				40.00404	2.90046	40.00618	2.84981
				35.00447	2.8839	35.00098	2.83928
				29.99801	2.86173	29.9968	2.82424
				29.99802	2.86079	30.0015	2.82458
				28.00181	2.84919	28.0026	2.81637
				26.00311	2.83497	26.00391	2.80658
				23.9979	2.81921	23.998	2.79546
				22.0058	2.80014	22.00752	2.7826
				19.99683	2.77497	19.9986	2.76511
				17.99812	2.7454	18.00163	2.75133
				15.99634	2.70949	15.99754	2.73023

		14.0037	2.66263	14.00351	2.69566
		12.00113	2.59626	12.00158	2.63816
		9.99789	2.51626	10.00402	2.57046
		8.0016	2.39886	8.00058	2.45504
		6.00545	2.21371	6.00073	2.26521
		4.00067	1.86064	3.99354	1.9234

3. Single Crystal X-ray Diffraction

Crystal data for **(1)** - **(4)** were collected at 100K using a Rigaku (former Agilent, former Oxford Diffraction) SuperNova A diffractometer fitted with an Atlas detector. All datasets were measured with Mo-K α radiation (0.71073 Å). A complete **(1)** or 5-fold redundant **(2)**, **(3)**, **(4)** dataset was collected, assuming that the Friedel pairs are not equivalent. An analytical absorption correction based on the shape of the crystal was performed¹. The structures were solved by direct methods using SHELXS-97² and refined by full matrix least-squares on F² for all data using SHELXL-97². Hydrogen atoms attached to nitrogen were located in the difference Fourier map and allowed to refine freely. All other hydrogen atoms were added at calculated positions and refined using a riding model. Their isotropic temperature factors were fixed to 1.2 times the equivalent isotropic displacement parameters of the parent atom. In **3** the minor disorder part of the anion could only be refined with isotropic displacement parameters. Anisotropic displacement parameters were used for all other non-hydrogen atoms.

Structures of **(1)** (CCDC no. 1417930), **(2)** (CCDC no. 1417931), **(3)** (CCDC no. 1417930) and **(4)** (CCDC no. 1417929) deposited at the Cambridge Crystallographic Data Centre.

Table S2. Crystal data for (1)-100K.

Empirical formula	C ₂₅ H ₃₀ N ₄ O ₅ F ₅ S Mn
Molecular formula	[C ₂₄ H ₃₀ N ₄ O ₂ F ₂ Mn] ⁺ [C O ₃ F ₃ S] ⁻
Formula weight	648.53
Temperature	100(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	P2 ₁ /n (#14)
Unit cell dimensions	a = 10.9926(2) Å α = 90°. b = 17.3651(3) Å β = 97.061(1)°. c = 14.5485(2) Å γ = 90°.
Volume	2756.07(8) Å ³
Z	4
Density (calculated)	1.563 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.632 mm ⁻¹
F(000)	1336
Crystal size	0.2401 x 0.2192 x 0.1622 mm ³
Theta range for data collection	3.00 to 29.38°.
Index ranges	-13<=h<=14, -23<=k<=23, -20<=l<=19
Reflections collected	34285
Independent reflections	6961 [R(int) = 0.0292]
Completeness to theta = 27.00°	99.3 %
Absorption correction	Analytical
Max. and min. transmission	0.937 and 0.909
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	6961 / 0 / 380
Goodness-of-fit on F ²	1.053
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0316, wR2 = 0.0731
R indices (all data)	R1 = 0.0389, wR2 = 0.0778
Largest diff. peak and hole	0.473 and -0.475 e.Å ⁻³

Table S3. Crystal data for (2)-100K.

Empirical formula	C ₂₄ H ₃₀ N ₄ O ₂ F ₈ P Mn
Molecular formula	[C ₂₄ H ₃₀ N ₄ O ₂ F ₂ Mn] ⁺ [F ₆ P] ⁻
Formula weight	644.43
Temperature	100(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	P2 ₁ /n (#14)
Unit cell dimensions	a = 10.5191(1) Å α = 90°. b = 17.2551(2) Å β = 95.3305(9)°. c = 14.5888(2) Å γ = 90°.
Volume	2636.53(5) Å ³
Z	4
Density (calculated)	1.623 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.649 mm ⁻¹
F(000)	1320
Crystal size	0.3763 x 0.3125 x 0.2438 mm ³
Theta range for data collection	2.80 to 32.99°.
Index ranges	-15 ≤ h ≤ 16, -25 ≤ k ≤ 26, -22 ≤ l ≤ 21
Reflections collected	82385
Independent reflections	9396 [R(int) = 0.0286]
Completeness to theta = 32.00°	99.0 %
Absorption correction	Analytical
Max. and min. transmission	0.894 and 0.849
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	9396 / 0 / 396
Goodness-of-fit on F ²	1.024
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0331, wR2 = 0.0871
R indices (all data)	R1 = 0.0367, wR2 = 0.0896
Largest diff. peak and hole	0.887 and -0.489 e.Å ⁻³

Table S4. Crystal data for **(3)**-100K.

Empirical formula	C ₂₄ H ₃₀ N ₄ O ₂ F ₈ Mn Sb
Molecular formula	[C ₂₄ H ₃₀ N ₄ O ₂ F ₂ Mn] ⁺ [F ₆ Sb] ⁻
Formula weight	735.21
Temperature	100(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	C2/c (#15)
Unit cell dimensions	a = 26.4731(3) Å α = 90°. b = 10.7771(1) Å β = 109.193(1)°. c = 19.8816(2) Å γ = 90°.
Volume	5357.00(10) Å ³
Z	8
Density (calculated)	1.823 Mg/m ³
Absorption coefficient	1.567 mm ⁻¹
F(000)	2928
Crystal size	0.4484 x 0.4408 x 0.3554 mm ³
Theta range for data collection	3.00 to 33.04°.
Index ranges	-39 ≤ h ≤ 39, -16 ≤ k ≤ 15, -30 ≤ l ≤ 30
Reflections collected	80553
Independent reflections	9597 [R(int) = 0.0300]
Completeness to theta = 32.00°	99.3 %
Absorption correction	Analytical
Max. and min. transmission	0.680 and 0.597
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	9597 / 0 / 375
Goodness-of-fit on F ²	1.063
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0188, wR2 = 0.0462
R indices (all data)	R1 = 0.0212, wR2 = 0.0473
Extinction coefficient	0.00034(2)
Largest diff. peak and hole	0.590 and -0.477 e.Å ⁻³

Table S5. Crystal data for (4)-100K.

Empirical formula	C ₄₈ H ₅₀ B N ₄ O ₂ F ₂ Mn
Molecular formula	[C ₂₄ H ₃₀ N ₄ O ₂ F ₂ Mn] ⁺ [C ₂₄ H ₂₀ B] ⁻
Formula weight	818.67
Temperature	100(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	P2 ₁ /c (#14)
Unit cell dimensions	a = 12.1375(1) Å α = 90°. b = 17.1630(1) Å β = 97.0378(8)°. c = 19.5734(2) Å γ = 90°.
Volume	4046.73(6) Å ³
Z	4
Density (calculated)	1.344 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.381 mm ⁻¹
F(000)	1720
Crystal size	0.2815 x 0.1995 x 0.1482 mm ³
Theta range for data collection	3.36 to 29.44°.
Index ranges	-16 ≤ h ≤ 16, -23 ≤ k ≤ 23, -26 ≤ l ≤ 26
Reflections collected	89026
Independent reflections	10531 [R(int) = 0.0337]
Completeness to theta = 28.00°	99.3 %
Absorption correction	Analytical
Max. and min. transmission	0.966 and 0.932
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	10531 / 0 / 533
Goodness-of-fit on F ²	1.050
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0355, wR2 = 0.0865
R indices (all data)	R1 = 0.0434, wR2 = 0.0914
Largest diff. peak and hole	0.376 and -0.441 e.Å ⁻³

a) The two disorder part were restrained to have the same shape using SAME.

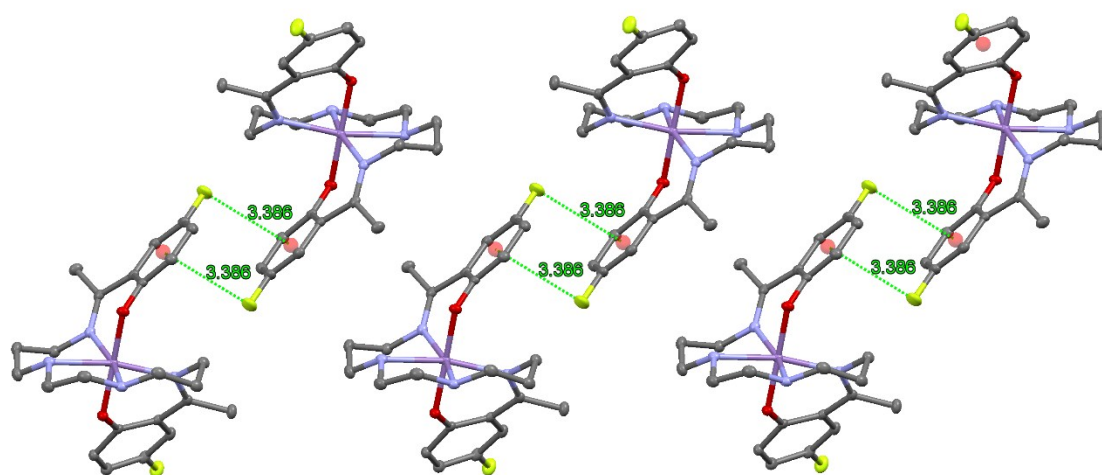
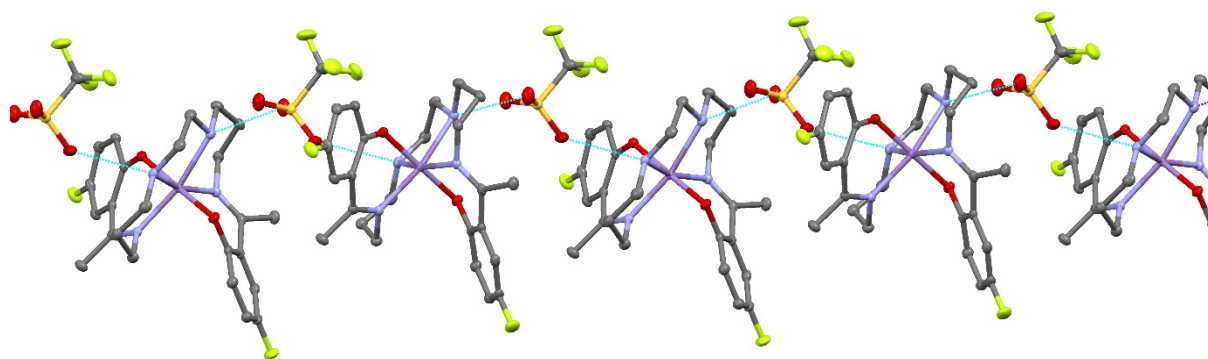


Fig. S1: Intermolecular H-bonding (top) forming a 1-D chain, and F- π_{aryl} non-covalent bonding (bottom) forming dimers in complex (1).

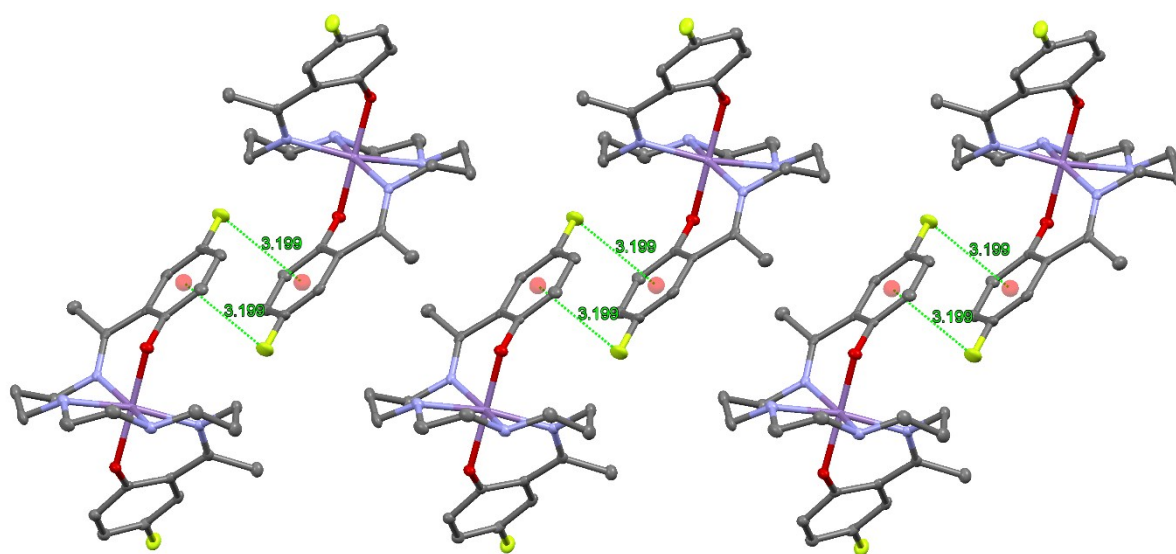


Fig. S2: Intermolecular F- π_{aryl} non-covalent bonding forming dimers in complex (2).

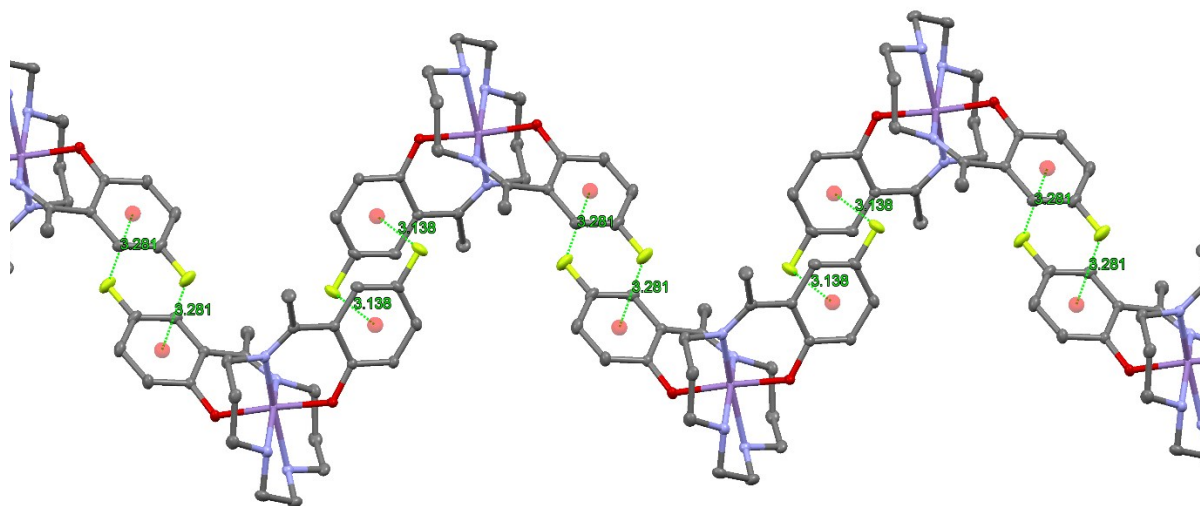


Fig. S3: Intermolecular F- π_{aryl} non-covalent bonding forming a one dimensional chain in complex (3).

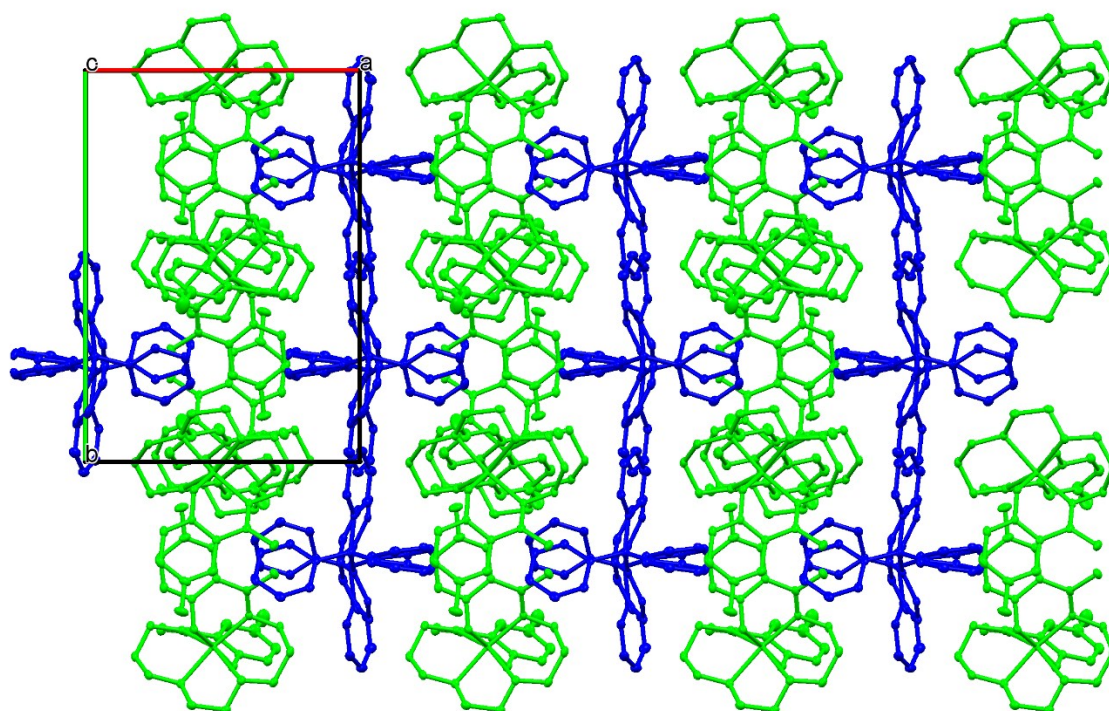


Fig. S4: Packing diagram of complex (4) exhibiting channels of Cations and anions. Complex cation in green, tetraphenylborate anion in blue.

4. Computational Studies

Density Functional calculations were carried out for the in vacuo complex using the Amsterdam Density Functional (ADF) package. We performed simulations using the BP86 generalized gradient approximation (GGA) functional and the hybrid B3LYP, resulting in comparable results. The orbitals in this simulations were represented with standard Slater-type triple-zeta plus polarization (TZP) basis set included with the code. Geometries were relaxed under an stringent geometry cutoff (0.0001) due to the softness of some vibrational modes that produced significant variations of the final geometry under less restrictive conditions.

Geometries

We include below the final geometries obtained from the geometry optimization starting from the geometries of each of the experimental complexes.

Complex 1

Atom	X	Y	Z (Angstrom)
1.Mn	0.001284	-0.973879	0.003387
2.O	1.880013	-1.018735	-0.161297
3.C	2.628453	0.086192	-0.064666
4.C	3.765807	0.179485	-0.900982
5.H	3.994990	-0.669386	-1.544261
6.C	4.569162	1.312029	-0.916838
7.H	5.436343	1.388484	-1.571629
8.C	4.237084	2.373373	-0.073748
9.F	4.991046	3.509752	-0.113030
10.C	3.178639	2.300409	0.810002
11.H	2.986690	3.159741	1.448529
12.C	2.356480	1.147932	0.856171
13.C	1.333572	1.009510	1.902906
14.C	1.495848	1.833427	3.167211
15.H	0.672916	2.555313	3.272773
16.H	2.440768	2.378162	3.179058
17.H	1.485209	1.186737	4.054018
18.N	0.344265	0.162625	1.765344
19.C	-0.582787	-0.094177	2.879063
20.H	-1.603127	-0.065583	2.474434
21.H	-0.520359	0.688694	3.642910
22.C	-0.335651	-1.465660	3.534200
23.H	0.722801	-1.552085	3.832086
24.H	-0.921192	-1.499780	4.465901
25.C	-0.750146	-2.673272	2.694396
26.H	-0.662646	-3.589621	3.306248
27.H	-1.804567	-2.575881	2.396938
28.N	0.034798	-2.812445	1.444725
29.H	1.033087	-2.862093	1.683230

30.C	-0.335624	-4.028313	0.689231
31.H	-1.429192	-4.015287	0.563380
32.H	-0.080309	-4.950578	1.239048
33.C	0.346366	-4.029622	-0.672173
34.H	1.439893	-4.013150	-0.546353
35.H	0.093623	-4.954409	-1.218930
36.N	-0.027392	-2.817308	-1.431699
37.H	-1.025566	-2.870408	-1.669935
38.C	0.757088	-2.680273	-2.681902
39.H	0.671840	-3.598864	-3.290691
40.H	1.811285	-2.579256	-2.384858
41.C	0.339518	-1.476480	-3.525656
42.H	-0.718731	-1.566543	-3.823190
43.H	0.925089	-1.512196	-4.457275
44.C	0.583223	-0.102209	-2.875101
45.H	1.603498	-0.069662	-2.470612
46.H	0.518762	0.677928	-3.641572
47.N	-0.344480	0.155906	-1.762250
48.C	-1.335854	0.999915	-1.902520
49.C	-1.499931	1.819506	-3.169398
50.H	-0.678562	2.542836	-3.277207
51.H	-2.446022	2.362141	-3.182976
52.H	-1.487879	1.170071	-4.054181
53.C	-2.359252	1.139005	-0.856351
54.C	-3.184414	2.289468	-0.814035
55.H	-2.994492	3.147280	-1.455183
56.C	-4.243323	2.362471	0.069134
57.F	-5.000319	3.496966	0.104374
58.C	-4.572805	1.302989	0.915579
59.H	-5.440368	1.379241	1.569888
60.C	-3.766447	0.172520	0.903603
61.H	-3.993583	-0.674877	1.549558
62.C	-2.628657	0.079494	0.067823
63.O	-1.877404	-1.023202	0.168036

Complex 2

Atom	X	Y	Z (Angstrom)
1.Mn	0.000335	0.972906	-0.014095
2.O	-1.877980	1.015812	-0.182883
3.C	-2.628273	-0.086256	-0.069418
4.C	-3.764814	-0.191216	-0.905499
5.H	-3.990994	0.646890	-1.563788
6.C	-4.571743	-1.321376	-0.901959
7.H	-5.438683	-1.406579	-1.555997
8.C	-4.244030	-2.368365	-0.039442
9.F	-5.002368	-3.502377	-0.057447
10.C	-3.185276	-2.283493	0.842794
11.H	-2.996308	-3.132294	1.496050
12.C	-2.359480	-1.133027	0.869312
13.C	-1.336518	-0.980185	1.913897
14.C	-1.500012	-1.784795	3.190435
15.H	-0.679339	-2.507835	3.305414
16.H	-2.446678	-2.326156	3.211489
17.H	-1.486042	-1.125317	4.067676
18.N	-0.345619	-0.137262	1.763689
19.C	0.581435	0.134661	2.873839
20.H	1.601811	0.100227	2.469870
21.H	0.518764	-0.637596	3.648377
22.C	0.334326	1.515127	3.509710
23.H	-0.724272	1.605950	3.805757
24.H	0.919379	1.562180	4.441155
25.C	0.749558	2.710731	2.653255
26.H	0.661601	3.635655	3.251969
27.H	1.804214	2.609054	2.358091
28.N	-0.034231	2.832245	1.400992
29.H	-1.032719	2.885641	1.637818
30.C	0.337379	4.037070	0.628622
31.H	1.431121	4.022114	0.504476
32.H	0.081438	4.967190	1.164741
33.C	-0.342655	4.018833	-0.733632
34.H	-1.436368	4.004296	-0.609222
35.H	-0.088963	4.935594	-1.293311
36.N	0.032086	2.795642	-1.475081
37.H	1.030729	2.845057	-1.712156
38.C	-0.750033	2.641082	-2.724712
39.H	-0.663486	3.550983	-3.346219
40.H	-1.804809	2.544350	-2.428311
41.C	-0.330875	1.425525	-3.550618

42.H	0.728017	1.511285	-3.847137
43.H	-0.914435	1.448255	-4.483906
44.C	-0.576152	0.060491	-2.881386
45.H	-1.597384	0.033713	-2.478832
46.H	-0.509909	-0.730263	-3.636757
47.N	0.348794	-0.182186	-1.762783
48.C	1.339662	-1.029082	-1.888372
49.C	1.506322	-1.866891	-3.142929
50.H	0.683497	-2.589534	-3.243864
51.H	2.451071	-2.412058	-3.145249
52.H	1.499385	-1.229775	-4.036727
53.C	2.360422	-1.153638	-0.837775
54.C	3.183213	-2.304886	-0.775042
55.H	2.993162	-3.172431	-1.402964
56.C	4.239411	-2.365875	0.112338
57.F	4.993422	-3.501481	0.168985
58.C	4.569380	-1.293233	0.941854
59.H	5.435290	-1.360589	1.599312
60.C	3.765500	-0.161439	0.909426
61.H	3.992826	0.695930	1.542006
62.C	2.629397	-0.080128	0.070181
63.O	1.878898	1.024563	0.152323

Complex 3

Atom	X	Y	Z (Angstrom)
1.Mn	-0.012139	0.965291	0.022077
2.O	-1.896866	1.015151	0.057908
3.C	-2.643511	-0.083098	-0.102546
4.C	-3.839801	-0.176743	0.647256
5.H	-4.107923	0.664810	1.285121
6.C	-4.654656	-1.299520	0.583663
7.H	-5.569411	-1.375061	1.170352
8.C	-4.273222	-2.351227	-0.250955
9.F	-5.043572	-3.476297	-0.293863
10.C	-3.148476	-2.279141	-1.048189
11.H	-2.918236	-3.131332	-1.683536
12.C	-2.311962	-1.136721	-1.012701
13.C	-1.209517	-0.997457	-1.973958
14.C	-1.282506	-1.803330	-3.257887
15.H	-1.186062	-1.147453	-4.132530
16.H	-2.233514	-2.328793	-3.353873
17.H	-0.467632	-2.540578	-3.304389
18.N	-0.222615	-0.165483	-1.749839
19.C	0.789812	0.089248	-2.788604
20.H	0.794344	-0.704390	-3.543662
21.H	1.774264	0.074525	-2.303346
22.C	0.585139	1.450558	-3.479105
23.H	1.235068	1.474763	-4.367363
24.H	-0.449898	1.529065	-3.852062
25.C	0.935532	2.669628	-2.626612
26.H	1.968328	2.580440	-2.258698
27.H	0.885647	3.579334	-3.252589
28.N	0.068105	2.812682	-1.434235
29.H	-0.910949	2.870230	-1.740528
30.C	0.392783	4.019839	-0.646404
31.H	0.177616	4.949812	-1.200603
32.H	1.475484	4.000968	-0.448082
33.C	-0.378339	4.008191	0.666598
34.H	-0.156156	4.922049	1.243628
35.H	-1.461210	4.001084	0.468915
36.N	-0.063705	2.783078	1.434644
37.H	0.917742	2.824576	1.736850
38.C	-0.927266	2.641844	2.632088
39.H	-1.960587	2.546390	2.267796
40.H	-0.876342	3.558352	3.247359
41.C	-0.566128	1.434825	3.496051

42.H	-1.202390	1.477021	4.393614
43.H	0.474107	1.515395	3.853074
44.C	-0.781794	0.056438	2.844016
45.H	-0.770931	-0.703669	3.631887
46.H	-1.776973	0.023158	2.380108
47.N	0.215154	-0.211209	1.798453
48.C	1.135939	-1.135517	1.916745
49.C	1.147988	-2.171641	3.021521
50.H	0.338526	-2.056952	3.742988
51.H	2.103154	-2.148987	3.561354
52.H	1.046186	-3.171422	2.576946
53.C	2.267581	-1.193538	0.974173
54.C	3.135459	-2.313843	0.993559
55.H	2.911113	-3.194834	1.589406
56.C	4.301929	-2.317638	0.255313
57.F	5.102139	-3.422537	0.289159
58.C	4.694922	-1.219177	-0.509867
59.H	5.636612	-1.244451	-1.056879
60.C	3.855126	-0.114411	-0.555076
61.H	4.128324	0.763735	-1.139192
62.C	2.625062	-0.083433	0.143890
63.O	1.870502	1.011975	-0.002000

Complex 4

Atom	X	Y	Z (Angstrom)
1.Mn	0.046292	0.968143	-0.005436
2.O	1.918348	0.957955	0.220159
3.C	2.640463	-0.165764	0.145380
4.C	3.750842	-0.285533	1.013893
5.H	3.982134	0.558568	1.662656
6.C	4.525573	-1.437098	1.053506
7.H	5.371939	-1.533673	1.732431
8.C	4.191502	-2.491231	0.202188
9.F	4.917675	-3.644652	0.262859
10.C	3.159848	-2.394429	-0.710487
11.H	2.964917	-3.250439	-1.352517
12.C	2.367566	-1.222176	-0.781499
13.C	1.379129	-1.059257	-1.857517
14.C	1.551646	-1.894551	-3.112989
15.H	0.707449	-2.587571	-3.241293
16.H	2.476616	-2.472159	-3.093906
17.H	1.591248	-1.252103	-4.002103
18.N	0.412494	-0.181663	-1.753114
19.C	-0.472173	0.098712	-2.895345
20.H	-1.505037	0.099300	-2.522652
21.H	-0.408071	-0.686730	-3.656342
22.C	-0.166793	1.461612	-3.543977
23.H	0.902149	1.517477	-3.810025
24.H	-0.722868	1.510350	-4.492922
25.C	-0.571874	2.682329	-2.718601
26.H	-0.440197	3.594415	-3.328918
27.H	-1.636977	2.615517	-2.452505
28.N	0.179161	2.802064	-1.446306
29.H	1.185134	2.822478	-1.654838
30.C	-0.178721	4.029521	-0.703667
31.H	-1.275567	4.048748	-0.611853
32.H	0.120517	4.943032	-1.245889
33.C	0.460405	4.012978	0.678261
34.H	1.556368	3.964529	0.586437
35.H	0.217891	4.945515	1.216403
36.N	0.028174	2.813103	1.426585
37.H	-0.974834	2.895924	1.634059
38.C	0.769625	2.654966	2.700350
39.H	0.693341	3.576797	3.305413
40.H	1.828884	2.521946	2.435752
41.C	0.290784	1.465752	3.532371

42.H	-0.772589	1.588670	3.798252
43.H	0.849266	1.485402	4.480947
44.C	0.511446	0.083398	2.890682
45.H	1.542160	0.018375	2.517902
46.H	0.398873	-0.693113	3.655285
47.N	-0.389035	-0.147562	1.749705
48.C	-1.413006	-0.956049	1.861727
49.C	-1.645636	-1.763433	3.125732
50.H	-0.854606	-2.515274	3.261746
51.H	-2.610687	-2.271679	3.111379
52.H	-1.637760	-1.110761	4.008188
53.C	-2.406335	-1.066080	0.783617
54.C	-3.264166	-2.191070	0.716496
55.H	-3.122003	-3.051959	1.365859
56.C	-4.293496	-2.235549	-0.202843
57.F	-5.080544	-3.348345	-0.262941
58.C	-4.562460	-1.169272	-1.062069
59.H	-5.409175	-1.221576	-1.745410
60.C	-3.723642	-0.063167	-1.024713
61.H	-3.903424	0.788814	-1.679510
62.C	-2.612136	-0.002060	-0.151460
63.O	-1.824178	1.076621	-0.229151

Orbitals

The HOMO and LUMO in all simulations have very similar character. The HOMO has predominant x^2-y^2 character with very little $3z^2-r^2$ mix (<1%) as shown in Fig. S5 while the the LUMO (Fig. S6) has a reciprocal $3z^2-r^2$ character with very little x^2-y^2 mix.

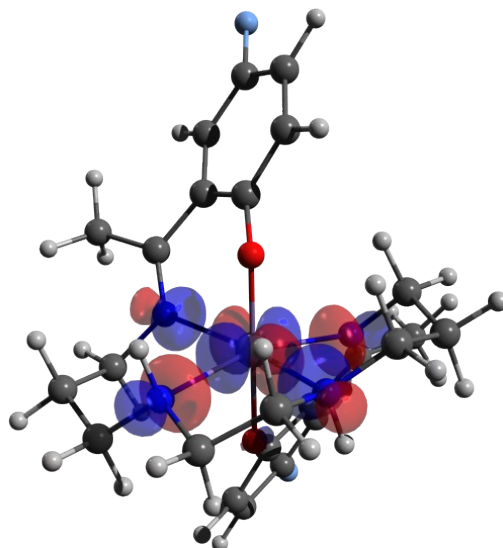


Fig. S5 - Graphical representation of the HOMO as obtained in DFT simulations.

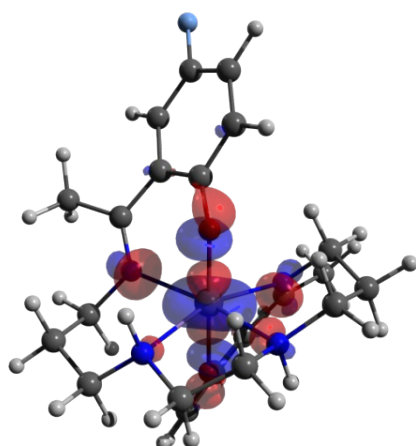


Fig. S6 - Graphical representation of the LUMO as obtained in DFT simulations.

Frequencies

The vibrational frequencies of the complex were obtained at the relaxed geometries. We find that b1-like vibrations (see Fig. S7) present low frequency as consistent with a pseudo Jahn-Teller model associated to the HOMO-LUMO mixing.

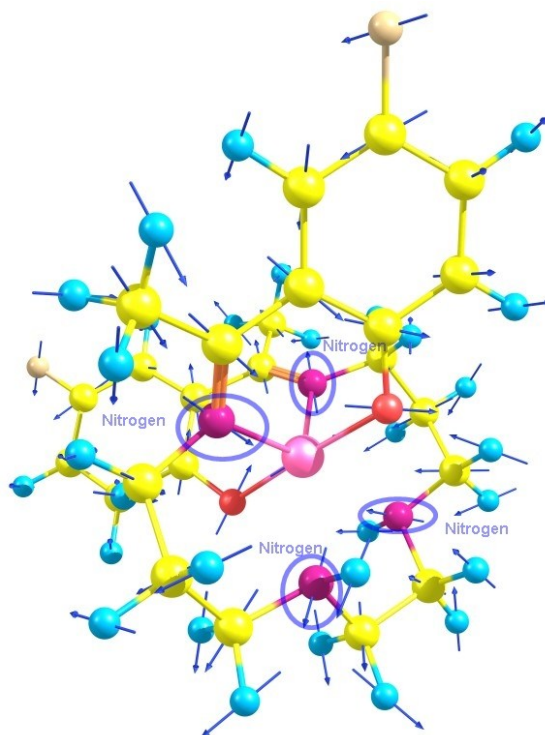


Fig. S7.- Graphical representation of the vibrational mode with $\hbar\omega_7 = 78.6 \text{ cm}^{-1}$ showing a b1-like distortion where two nitrogen ions move inwards towards Mn and two move outwards from Mn.

The full frequency listing is:

	19.206	38.321	40.778
1.Mn	-0.001 -0.054 0.001	-0.017 0.022 0.023	0.030 0.012 -0.046
2.O	0.006 -0.026 -0.041	-0.021 0.060 0.066	0.030 -0.020 -0.030
3.C	-0.048 0.015 -0.016	-0.016 0.053 0.025	0.017 -0.008 -0.014
4.C	-0.053 0.058 -0.014	-0.031 0.091 0.042	-0.016 0.030 0.027
5.H	-0.003 0.054 -0.037	-0.054 0.129 0.098	-0.014 0.040 0.040
6.C	-0.120 0.107 0.018	-0.011 0.076 -0.018	-0.056 0.059 0.056
7.H	-0.129 0.141 0.024	-0.021 0.102 -0.009	-0.088 0.093 0.094
8.C	-0.181 0.112 0.047	0.025 0.023 -0.096	-0.056 0.045 0.040
9.F	-0.254 0.160 0.084	0.053 0.006 -0.169	-0.104 0.076 0.077
10.C	-0.170 0.070 0.038	0.035 -0.013 -0.104	-0.010 0.002 -0.011

11.H	-0.217	0.073	0.056	0.061	-0.051	-0.160	-0.011	-0.012	-0.029
12.C	-0.102	0.022	0.008	0.014	0.000	-0.040	0.029	-0.025	-0.034
13.C	-0.089	-0.011	0.000	0.020	-0.037	-0.038	0.071	-0.063	-0.069
14.C	-0.117	0.011	0.011	0.049	-0.107	-0.079	0.124	-0.106	-0.089
15.H	-0.148	-0.024	0.013	0.111	-0.037	-0.081	0.152	-0.080	-0.127
16.H	-0.140	0.053	0.025	0.098	-0.193	-0.131	0.144	-0.140	-0.080
17.H	-0.080	0.020	0.003	-0.041	-0.140	-0.052	0.119	-0.130	-0.071
18.N	-0.052	-0.056	-0.012	-0.004	-0.002	0.001	0.065	-0.055	-0.072
19.C	-0.045	-0.078	-0.011	-0.010	-0.012	0.008	0.089	-0.079	-0.085
20.H	-0.047	-0.081	-0.015	-0.005	-0.041	0.021	0.081	-0.053	-0.107
21.H	-0.049	-0.085	-0.019	-0.039	0.002	0.019	0.119	-0.102	-0.106
22.C	-0.035	-0.081	0.002	0.014	0.001	-0.008	0.082	-0.102	-0.037
23.H	-0.034	-0.078	0.004	0.014	0.024	-0.016	0.092	-0.137	0.008
24.H	-0.034	-0.092	0.002	0.008	-0.006	-0.004	0.119	-0.114	-0.059
25.C	-0.029	-0.074	0.013	0.045	-0.008	-0.008	0.015	-0.064	-0.018
26.H	-0.035	-0.079	0.020	0.078	-0.008	-0.004	0.003	-0.085	0.012
27.H	-0.027	-0.071	0.021	0.039	-0.040	-0.017	0.008	-0.020	-0.058
28.N	-0.018	-0.064	0.007	0.039	0.019	-0.001	-0.034	-0.054	0.013
29.H	-0.020	-0.060	-0.004	0.043	0.060	0.006	-0.030	-0.128	0.047
30.C	-0.003	-0.066	0.010	0.081	-0.006	-0.021	-0.138	0.002	0.050
31.H	-0.002	-0.072	0.024	0.079	-0.055	-0.032	-0.138	0.096	0.041
32.H	-0.005	-0.064	0.005	0.125	0.012	-0.033	-0.210	-0.037	0.083
33.C	0.015	-0.064	0.000	0.067	0.001	-0.016	-0.148	-0.009	0.054
34.H	0.013	-0.062	-0.014	0.067	0.049	-0.005	-0.146	-0.105	0.062
35.H	0.024	-0.063	0.005	0.100	-0.019	-0.033	-0.227	0.030	0.082
36.N	0.021	-0.063	0.002	0.009	-0.027	0.001	-0.052	0.044	0.013
37.H	0.022	-0.064	0.009	0.004	-0.065	-0.028	-0.054	0.122	0.024
38.C	0.027	-0.072	-0.001	-0.032	-0.047	0.028	-0.030	0.024	0.002
39.H	0.029	-0.076	-0.006	-0.041	-0.061	0.006	-0.064	0.036	0.014
40.H	0.026	-0.071	-0.004	-0.024	-0.031	0.063	-0.029	-0.028	-0.012
41.C	0.030	-0.077	0.007	-0.066	-0.068	0.041	0.036	0.052	-0.008
42.H	0.029	-0.073	0.003	-0.072	-0.083	0.015	0.042	0.091	0.026
43.H	0.027	-0.086	0.009	-0.086	-0.077	0.054	0.064	0.054	-0.026
44.C	0.043	-0.076	0.015	-0.062	-0.059	0.061	0.057	0.027	-0.051
45.H	0.044	-0.085	0.016	-0.061	-0.056	0.065	0.047	-0.013	-0.076
46.H	0.052	-0.080	0.019	-0.066	-0.065	0.067	0.099	0.052	-0.073
47.N	0.048	-0.057	0.016	-0.053	-0.042	0.057	0.036	0.021	-0.036
48.C	0.078	-0.023	0.009	-0.082	-0.082	0.084	0.012	-0.013	0.008
49.C	0.092	-0.014	0.005	-0.154	-0.170	0.134	0.001	-0.068	0.044

50.H	0.106	-0.030	0.004	-0.224	-0.094	0.168	-0.053	-0.004	0.028
51.H	0.103	0.005	-0.002	-0.208	-0.262	0.164	-0.043	-0.144	0.103
52.H	0.076	-0.010	0.008	-0.084	-0.216	0.099	0.095	-0.094	0.024
53.C	0.095	0.015	-0.004	-0.041	-0.028	0.053	0.000	0.009	0.022
54.C	0.165	0.062	-0.034	-0.018	-0.012	0.068	-0.035	-0.012	0.094
55.H	0.205	0.058	-0.042	-0.037	-0.047	0.123	-0.063	-0.044	0.147
56.C	0.188	0.114	-0.059	0.035	0.050	0.008	-0.042	0.010	0.104
57.F	0.264	0.162	-0.097	0.061	0.067	0.017	-0.089	-0.017	0.194
58.C	0.139	0.120	-0.047	0.065	0.095	-0.062	-0.002	0.058	0.027
59.H	0.158	0.163	-0.068	0.105	0.143	-0.110	-0.002	0.073	0.029
60.C	0.067	0.069	-0.010	0.040	0.077	-0.067	0.033	0.081	-0.045
61.H	0.024	0.072	0.002	0.057	0.110	-0.118	0.060	0.115	-0.101
62.C	0.049	0.015	0.010	-0.007	0.018	-0.009	0.027	0.054	-0.038
63.O	-0.008	-0.027	0.040	-0.015	0.011	-0.014	0.034	0.062	-0.082

49.631

59.759

65.424

1.Mn	-0.002	-0.001	-0.016	0.011	-0.003	-0.002	-0.042	-0.001	-0.013
2.O	0.001	-0.005	-0.036	0.008	0.028	0.014	-0.037	-0.046	-0.037
3.C	0.010	-0.013	-0.038	0.003	0.030	-0.007	-0.027	-0.053	-0.027
4.C	0.055	-0.065	-0.092	0.036	0.017	-0.050	-0.023	-0.080	-0.029
5.H	0.077	-0.098	-0.142	0.055	0.010	-0.066	-0.026	-0.098	-0.051
6.C	0.065	-0.073	-0.079	0.047	0.009	-0.075	-0.023	-0.081	0.001
7.H	0.101	-0.115	-0.120	0.075	-0.007	-0.111	-0.022	-0.098	0.001
8.C	0.026	-0.026	-0.006	0.019	0.020	-0.051	-0.028	-0.056	0.034
9.F	0.035	-0.031	0.015	0.035	0.011	-0.081	-0.035	-0.052	0.075
10.C	-0.020	0.028	0.045	-0.022	0.040	-0.001	-0.026	-0.033	0.028
11.H	-0.045	0.065	0.101	-0.041	0.051	0.020	-0.027	-0.016	0.050
12.C	-0.027	0.031	0.019	-0.028	0.043	0.012	-0.025	-0.033	-0.006
13.C	-0.048	0.063	0.035	-0.042	0.045	0.027	-0.017	-0.017	-0.019
14.C	-0.118	0.146	0.079	-0.107	0.092	0.049	-0.014	0.006	-0.004
15.H	-0.232	0.014	0.069	-0.192	-0.006	0.045	-0.042	-0.028	-0.018
16.H	-0.208	0.303	0.139	-0.173	0.208	0.077	-0.037	0.047	0.028
17.H	0.035	0.176	0.053	-0.004	0.106	0.037	0.039	0.015	-0.012
18.N	-0.004	0.002	-0.002	-0.001	-0.009	0.008	-0.010	-0.028	-0.039
19.C	0.021	-0.022	-0.016	0.034	-0.054	-0.009	0.007	-0.044	-0.049
20.H	0.010	-0.007	-0.045	0.024	-0.131	-0.027	0.000	-0.024	-0.067
21.H	0.045	-0.047	-0.039	-0.004	-0.041	0.001	0.030	-0.068	-0.072

22.C	0.034	-0.040	0.024	0.146	-0.032	-0.015	0.007	-0.064	-0.008
23.H	0.042	-0.048	0.055	0.169	0.025	0.051	0.001	-0.059	-0.031
24.H	0.060	-0.055	0.009	0.205	-0.052	-0.051	-0.014	-0.099	0.007
25.C	0.005	-0.024	0.033	0.147	-0.057	-0.050	0.050	-0.048	0.036
26.H	0.000	-0.032	0.044	0.230	-0.050	-0.048	0.074	-0.063	0.062
27.H	0.004	-0.006	0.019	0.120	-0.107	-0.128	0.051	-0.074	0.049
28.N	-0.012	-0.022	0.043	0.060	-0.030	0.008	0.079	0.017	0.024
29.H	-0.010	-0.052	0.056	0.076	-0.033	0.076	0.083	0.150	0.013
30.C	-0.052	0.005	0.067	0.005	-0.024	-0.009	0.249	-0.048	0.006
31.H	-0.050	0.050	0.075	-0.002	-0.013	-0.073	0.245	-0.216	-0.004
32.H	-0.090	-0.014	0.083	0.027	-0.028	0.009	0.393	-0.001	-0.008
33.C	-0.040	0.006	0.062	-0.076	-0.031	0.030	0.239	0.033	0.009
34.H	-0.041	-0.035	0.051	-0.068	-0.065	0.096	0.237	0.197	0.011
35.H	-0.067	0.026	0.081	-0.135	-0.021	0.021	0.372	-0.013	-0.006
36.N	0.010	0.033	0.043	-0.085	-0.017	0.002	0.061	-0.030	0.022
37.H	0.018	0.058	0.079	-0.106	0.021	-0.078	0.061	-0.158	-0.006
38.C	0.058	0.052	0.011	-0.182	-0.067	0.069	0.006	0.027	0.050
39.H	0.086	0.060	0.026	-0.297	-0.059	0.065	0.005	0.043	0.074
40.H	0.046	0.053	-0.031	-0.148	-0.144	0.161	0.015	0.040	0.086
41.C	0.082	0.060	0.011	-0.159	-0.033	0.031	-0.039	0.046	-0.004
42.H	0.097	0.049	0.061	-0.183	0.039	-0.035	-0.052	0.055	-0.048
43.H	0.126	0.084	-0.016	-0.217	-0.059	0.066	-0.079	0.076	0.021
44.C	0.030	0.050	-0.027	-0.028	-0.062	0.017	-0.007	0.021	-0.043
45.H	0.017	0.064	-0.058	-0.018	-0.156	0.037	-0.010	-0.019	-0.053
46.H	0.036	0.067	-0.044	0.021	-0.042	0.000	0.024	0.046	-0.068
47.N	-0.005	0.010	-0.007	0.010	-0.015	-0.003	-0.013	0.020	-0.041
48.C	-0.054	-0.055	0.029	0.036	0.018	-0.017	-0.005	0.030	-0.028
49.C	-0.124	-0.130	0.070	0.073	0.042	-0.028	0.020	0.026	-0.022
50.H	-0.228	-0.009	0.062	0.123	-0.016	-0.021	0.023	0.025	-0.036
51.H	-0.207	-0.271	0.125	0.112	0.110	-0.046	0.021	0.026	-0.001
52.H	0.012	-0.160	0.046	0.012	0.049	-0.022	0.037	0.023	-0.024
53.C	-0.037	-0.037	0.014	0.031	0.021	-0.011	-0.016	0.046	-0.013
54.C	-0.032	-0.034	0.028	0.023	0.016	0.002	-0.024	0.044	0.027
55.H	-0.060	-0.063	0.076	0.031	0.021	-0.007	-0.023	0.029	0.047
56.C	0.014	0.006	-0.026	-0.004	0.004	0.034	-0.038	0.061	0.046
57.F	0.020	0.011	-0.018	-0.020	-0.005	0.060	-0.056	0.052	0.104
58.C	0.056	0.044	-0.091	-0.015	0.001	0.043	-0.032	0.086	0.012
59.H	0.091	0.076	-0.134	-0.033	-0.009	0.066	-0.037	0.099	0.020
60.C	0.047	0.037	-0.092	-0.004	0.009	0.023	-0.025	0.089	-0.028

61.H	0.074	0.062	-0.136	-0.011	0.006	0.029	-0.028	0.107	-0.051
62.C	0.003	-0.002	-0.036	0.016	0.016	-0.002	-0.023	0.064	-0.032
63.O	0.000	-0.006	-0.026	0.012	0.014	-0.017	-0.035	0.056	-0.048

78.564	92.286	96.135
--------	--------	--------

1.Mn	-0.035	-0.001	0.019	-0.002	0.026	-0.003	-0.069	-0.001	-0.030
2.O	-0.036	-0.005	0.035	0.009	-0.054	-0.098	-0.070	0.055	-0.042
3.C	-0.033	-0.009	0.033	0.019	-0.059	-0.082	-0.073	0.063	-0.003
4.C	-0.028	-0.011	0.026	0.041	-0.090	-0.110	-0.129	0.060	0.073
5.H	-0.029	-0.007	0.032	0.068	-0.117	-0.154	-0.196	0.069	0.108
6.C	-0.018	-0.019	0.009	0.012	-0.069	-0.064	-0.084	0.027	0.084
7.H	-0.011	-0.020	-0.001	0.019	-0.081	-0.072	-0.117	0.016	0.129
8.C	-0.014	-0.024	-0.001	-0.033	-0.025	0.006	0.016	0.000	0.016
9.F	0.004	-0.037	-0.025	-0.093	0.013	0.098	0.094	-0.051	-0.014
10.C	-0.025	-0.020	0.012	-0.024	-0.015	-0.007	0.043	0.023	-0.022
11.H	-0.022	-0.025	0.004	-0.053	0.004	0.025	0.114	0.013	-0.055
12.C	-0.034	-0.013	0.030	0.004	-0.032	-0.044	-0.008	0.059	-0.027
13.C	-0.033	-0.028	0.034	0.002	-0.015	-0.043	0.012	0.074	-0.053
14.C	-0.023	-0.063	0.014	0.074	-0.093	-0.083	0.044	0.071	-0.054
15.H	-0.024	-0.068	-0.012	0.136	-0.028	-0.125	0.011	0.023	-0.113
16.H	-0.024	-0.062	0.008	0.123	-0.176	-0.099	0.014	0.124	-0.011
17.H	-0.016	-0.087	0.031	0.018	-0.136	-0.050	0.133	0.057	-0.046
18.N	-0.039	-0.019	0.044	-0.049	0.057	-0.001	0.007	0.080	-0.065
19.C	-0.002	-0.062	0.022	-0.042	0.038	0.000	0.059	0.041	-0.093
20.H	-0.008	-0.202	0.017	-0.041	-0.047	0.012	0.036	0.062	-0.145
21.H	-0.081	-0.007	0.071	-0.100	0.071	0.027	0.099	-0.010	-0.142
22.C	0.162	-0.003	-0.045	0.062	0.070	-0.031	0.106	-0.001	0.014
23.H	0.195	0.093	0.044	0.075	0.147	-0.008	0.123	-0.007	0.078
24.H	0.245	-0.001	-0.097	0.084	0.044	-0.043	0.156	-0.074	-0.014
25.C	0.174	-0.069	-0.131	0.119	0.030	-0.057	0.068	0.047	0.064
26.H	0.318	-0.045	-0.148	0.218	0.042	-0.062	0.090	0.018	0.114
27.H	0.129	-0.168	-0.255	0.095	-0.053	-0.114	0.058	0.065	0.017
28.N	0.039	-0.029	-0.046	0.057	0.068	-0.012	0.012	0.071	0.109
29.H	0.064	-0.029	0.060	0.072	0.093	0.047	0.025	0.075	0.155
30.C	-0.030	-0.001	-0.043	0.040	0.070	-0.015	-0.022	0.046	0.068
31.H	-0.031	0.049	-0.058	0.034	0.059	-0.064	-0.021	0.077	0.067
32.H	-0.060	-0.024	-0.019	0.074	0.069	0.004	-0.050	0.071	0.012

33.C	-0.040	-0.006	-0.038	-0.022	0.074	0.018	-0.023	-0.048	0.070
34.H	-0.039	-0.058	-0.036	-0.017	0.076	0.066	-0.022	-0.079	0.071
35.H	-0.080	0.018	-0.019	-0.046	0.069	-0.001	-0.051	-0.076	0.014
36.N	0.022	0.023	-0.046	-0.051	0.068	0.015	0.010	-0.072	0.111
37.H	0.043	0.029	0.045	-0.066	0.082	-0.045	0.022	-0.075	0.153
38.C	0.141	0.055	-0.121	-0.115	0.036	0.061	0.061	-0.052	0.068
39.H	0.269	0.032	-0.139	-0.215	0.051	0.070	0.076	-0.021	0.118
40.H	0.101	0.142	-0.233	-0.090	-0.048	0.121	0.052	-0.075	0.027
41.C	0.132	-0.003	-0.040	-0.057	0.080	0.028	0.098	-0.004	0.016
42.H	0.160	-0.082	0.037	-0.070	0.157	0.004	0.114	0.006	0.075
43.H	0.203	-0.011	-0.085	-0.079	0.059	0.041	0.145	0.067	-0.012
44.C	-0.006	0.050	0.022	0.047	0.044	-0.009	0.058	-0.049	-0.089
45.H	-0.011	0.171	0.016	0.045	-0.044	-0.020	0.036	-0.075	-0.140
46.H	-0.074	0.002	0.067	0.106	0.079	-0.039	0.099	0.000	-0.138
47.N	-0.036	0.017	0.041	0.052	0.061	-0.007	0.008	-0.084	-0.062
48.C	-0.023	0.032	0.029	-0.002	-0.014	0.040	0.016	-0.073	-0.052
49.C	-0.004	0.073	0.005	-0.078	-0.099	0.087	0.054	-0.066	-0.054
50.H	0.005	0.067	-0.023	-0.140	-0.034	0.135	0.031	-0.032	-0.110
51.H	0.003	0.084	-0.003	-0.127	-0.181	0.106	0.032	-0.103	-0.015
52.H	-0.006	0.100	0.024	-0.026	-0.151	0.050	0.128	-0.052	-0.046
53.C	-0.027	0.019	0.028	-0.006	-0.027	0.043	-0.003	-0.056	-0.026
54.C	-0.017	0.025	0.013	0.023	-0.011	0.010	0.046	-0.022	-0.020
55.H	-0.012	0.030	0.005	0.054	0.006	-0.021	0.115	-0.013	-0.053
56.C	-0.012	0.029	0.007	0.030	-0.019	0.000	0.018	0.003	0.018
57.F	0.004	0.040	-0.010	0.091	0.016	-0.089	0.094	0.052	-0.009
58.C	-0.019	0.025	0.016	-0.019	-0.060	0.071	-0.082	-0.020	0.084
59.H	-0.015	0.026	0.011	-0.028	-0.070	0.082	-0.115	-0.008	0.129
60.C	-0.027	0.018	0.030	-0.048	-0.079	0.112	-0.125	-0.052	0.072
61.H	-0.031	0.015	0.035	-0.078	-0.105	0.158	-0.190	-0.059	0.105
62.C	-0.030	0.014	0.032	-0.023	-0.052	0.080	-0.069	-0.059	-0.003
63.O	-0.035	0.008	0.032	-0.012	-0.046	0.092	-0.069	-0.054	-0.043

117.562

121.165

142.668

1.Mn	-0.039	-0.003	0.040	-0.004	0.038	0.004	0.000	-0.027	-0.001
2.O	-0.024	0.011	-0.013	0.000	0.057	0.055	0.004	0.001	0.066
3.C	0.001	-0.007	-0.036	0.048	0.016	-0.009	0.013	-0.006	0.041
4.C	0.063	-0.049	-0.114	0.133	-0.034	-0.114	0.048	-0.001	-0.004

5.H	0.109	-0.077	-0.164	0.188	-0.062	-0.169	0.085	0.001	-0.015
6.C	0.057	-0.044	-0.112	0.126	-0.028	-0.122	0.042	0.007	-0.034
7.H	0.098	-0.074	-0.162	0.179	-0.061	-0.187	0.070	0.005	-0.071
8.C	-0.013	0.009	-0.024	0.029	0.035	-0.011	-0.003	0.015	-0.009
9.F	-0.058	0.038	0.030	-0.033	0.077	0.057	-0.022	0.028	-0.034
10.C	-0.040	0.028	0.008	-0.008	0.052	0.033	-0.029	0.003	0.026
11.H	-0.083	0.044	0.041	-0.062	0.078	0.082	-0.061	-0.006	0.023
12.C	-0.019	0.016	-0.001	0.022	0.030	0.014	-0.010	-0.009	0.048
13.C	-0.011	0.017	-0.004	0.047	-0.005	-0.002	0.003	-0.017	0.040
14.C	0.100	-0.097	-0.064	0.084	-0.033	-0.016	0.036	0.003	0.056
15.H	0.164	-0.039	-0.162	0.023	-0.122	-0.130	0.270	0.308	0.281
16.H	0.147	-0.177	-0.064	0.032	0.061	0.053	0.228	-0.336	-0.079
17.H	0.081	-0.169	-0.010	0.240	-0.075	0.011	-0.380	0.086	0.006
18.N	-0.062	0.089	0.035	0.064	-0.032	-0.026	-0.001	-0.009	0.030
19.C	-0.029	0.075	0.017	0.092	-0.043	-0.050	-0.024	0.014	0.044
20.H	-0.040	0.043	-0.011	0.079	0.027	-0.085	-0.013	-0.003	0.069
21.H	-0.032	0.078	0.019	0.161	-0.079	-0.081	-0.054	0.038	0.066
22.C	0.045	0.081	0.038	0.027	-0.078	0.003	-0.022	0.029	0.015
23.H	0.059	0.117	0.079	0.029	-0.152	0.029	-0.029	0.052	-0.015
24.H	0.080	0.041	0.018	0.046	-0.070	-0.009	-0.047	0.033	0.031
25.C	0.055	0.077	0.038	-0.059	-0.021	0.035	0.018	0.004	0.003
26.H	0.098	0.077	0.046	-0.129	-0.047	0.064	0.034	0.018	-0.015
27.H	0.043	0.050	0.002	-0.048	0.063	0.045	0.019	-0.024	0.014
28.N	0.009	0.078	0.071	-0.046	-0.026	0.023	0.026	-0.009	0.000
29.H	0.020	0.081	0.110	-0.051	-0.036	0.002	0.025	-0.012	-0.003
30.C	-0.025	0.052	0.023	-0.033	-0.029	0.019	0.018	-0.013	-0.006
31.H	-0.025	0.082	0.021	-0.028	-0.017	0.067	0.015	-0.020	-0.034
32.H	-0.053	0.074	-0.028	-0.068	-0.025	-0.005	0.038	-0.011	0.001
33.C	-0.029	-0.042	0.027	0.028	-0.039	-0.016	-0.018	-0.015	0.014
34.H	-0.028	-0.070	0.032	0.023	-0.033	-0.064	-0.015	-0.025	0.043
35.H	-0.060	-0.067	-0.027	0.057	-0.039	-0.002	-0.041	-0.014	0.006
36.N	0.001	-0.067	0.077	0.047	-0.040	-0.010	-0.023	-0.011	0.008
37.H	0.010	-0.068	0.109	0.055	-0.051	0.021	-0.021	-0.014	0.016
38.C	0.040	-0.069	0.048	0.073	-0.033	-0.031	-0.011	0.006	0.001
39.H	0.066	-0.063	0.062	0.154	-0.060	-0.058	-0.020	0.022	0.022
40.H	0.031	-0.061	0.018	0.058	0.059	-0.053	-0.013	-0.018	-0.013
41.C	0.046	-0.061	0.041	-0.016	-0.091	0.004	0.025	0.032	-0.016
42.H	0.060	-0.080	0.084	-0.015	-0.174	-0.011	0.032	0.051	0.014
43.H	0.083	-0.023	0.018	-0.027	-0.076	0.011	0.050	0.041	-0.031

44.C	-0.011	-0.064	0.008	-0.096	-0.053	0.054	0.022	0.015	-0.048
45.H	-0.025	-0.050	-0.029	-0.085	0.025	0.082	0.014	0.001	-0.067
46.H	0.002	-0.058	0.002	-0.167	-0.089	0.085	0.044	0.037	-0.068
47.N	-0.051	-0.081	0.032	-0.075	-0.046	0.033	0.004	-0.008	-0.037
48.C	-0.005	-0.017	-0.003	-0.049	-0.007	0.001	-0.002	-0.018	-0.043
49.C	0.111	0.102	-0.070	-0.065	-0.012	0.003	-0.036	-0.021	-0.046
50.H	0.150	0.077	-0.204	0.002	-0.102	0.094	-0.197	0.186	-0.188
51.H	0.136	0.143	-0.050	-0.007	0.087	-0.066	-0.171	-0.252	0.053
52.H	0.149	0.190	-0.008	-0.213	-0.036	-0.012	0.244	0.024	-0.020
53.C	-0.019	-0.024	0.004	-0.025	0.025	-0.014	0.009	-0.007	-0.049
54.C	-0.042	-0.039	0.016	0.001	0.045	-0.031	0.027	0.005	-0.029
55.H	-0.094	-0.059	0.058	0.049	0.067	-0.076	0.058	-0.002	-0.028
56.C	-0.008	-0.017	-0.025	-0.031	0.034	0.007	0.000	0.017	0.007
57.F	-0.061	-0.049	0.039	0.025	0.069	-0.054	0.019	0.031	0.031
58.C	0.076	0.041	-0.131	-0.116	-0.018	0.104	-0.045	0.010	0.032
59.H	0.126	0.075	-0.193	-0.161	-0.043	0.161	-0.073	0.008	0.069
60.C	0.082	0.047	-0.130	-0.122	-0.023	0.095	-0.050	0.003	0.002
61.H	0.135	0.077	-0.190	-0.169	-0.045	0.142	-0.085	0.004	0.013
62.C	0.007	-0.001	-0.034	-0.049	0.016	0.003	-0.013	-0.003	-0.044
63.O	-0.024	-0.023	-0.001	-0.006	0.051	-0.056	-0.004	0.003	-0.069

151.252

154.811

156.754

1.Mn	0.003	0.000	0.003	0.008	-0.034	0.002	-0.035	-0.008	-0.002
2.O	0.003	-0.019	-0.016	0.008	-0.016	-0.013	-0.034	0.029	0.050
3.C	0.000	-0.016	-0.015	-0.025	0.011	0.028	-0.046	0.038	0.068
4.C	-0.008	-0.009	-0.005	-0.012	0.007	0.010	0.009	0.010	0.001
5.H	-0.011	-0.006	0.000	0.008	-0.003	-0.009	0.054	-0.012	-0.042
6.C	-0.014	-0.004	0.000	-0.001	0.000	-0.008	0.036	-0.008	-0.045
7.H	-0.022	0.003	0.010	0.026	-0.018	-0.042	0.106	-0.054	-0.132
8.C	-0.009	-0.010	-0.008	-0.016	0.008	0.007	-0.017	0.025	0.013
9.F	-0.019	-0.004	-0.003	0.026	-0.020	-0.050	0.050	-0.018	-0.075
10.C	0.002	-0.018	-0.020	-0.060	0.033	0.058	-0.102	0.073	0.113
11.H	0.005	-0.025	-0.030	-0.078	0.042	0.076	-0.138	0.082	0.136
12.C	0.004	-0.018	-0.018	-0.056	0.032	0.059	-0.088	0.063	0.113
13.C	0.000	-0.001	-0.016	-0.041	0.017	0.048	-0.009	0.011	0.043
14.C	-0.009	0.046	0.011	0.039	-0.113	-0.022	0.126	-0.027	0.035
15.H	0.149	0.260	0.213	-0.129	-0.361	-0.350	0.247	0.110	0.022

16.H	0.123	-0.186	-0.093	-0.105	0.143	0.112	0.218	-0.186	0.045
17.H	-0.320	0.131	-0.044	0.437	-0.273	0.085	0.023	-0.027	0.038
18.N	-0.001	0.004	-0.013	-0.069	0.055	0.060	0.007	-0.018	-0.028
19.C	-0.015	0.004	0.001	-0.029	0.040	0.032	0.067	-0.022	-0.080
20.H	-0.009	-0.019	0.016	-0.044	0.038	-0.009	0.045	0.044	-0.133
21.H	-0.046	0.012	0.006	0.003	0.034	0.027	0.142	-0.046	-0.098
22.C	0.014	0.008	0.005	0.003	0.043	0.040	0.012	-0.052	-0.036
23.H	0.016	0.030	0.010	0.011	0.054	0.066	0.013	-0.117	-0.015
24.H	0.016	-0.013	0.004	0.029	0.041	0.024	0.027	-0.044	-0.046
25.C	0.033	0.004	0.010	-0.004	0.031	0.020	-0.060	-0.004	-0.007
26.H	0.065	0.002	0.017	-0.025	0.044	-0.002	-0.130	-0.026	0.017
27.H	0.024	-0.021	-0.012	0.002	0.041	0.037	-0.047	0.071	0.015
28.N	0.006	0.017	0.030	0.012	-0.008	0.006	-0.031	-0.008	-0.027
29.H	0.012	0.012	0.053	0.008	-0.022	-0.008	-0.037	0.012	-0.056
30.C	-0.017	0.016	0.022	0.001	-0.010	0.000	0.020	-0.021	-0.025
31.H	-0.016	0.043	0.027	0.000	-0.003	-0.005	0.019	-0.072	-0.024
32.H	-0.043	0.018	0.008	-0.002	-0.009	-0.001	0.063	-0.011	-0.022
33.C	-0.011	-0.017	0.019	-0.006	-0.015	0.005	0.024	0.017	-0.027
34.H	-0.012	-0.039	0.016	-0.005	-0.025	0.012	0.022	0.070	-0.033
35.H	-0.030	-0.018	0.008	-0.018	-0.011	0.006	0.071	0.008	-0.022
36.N	0.014	-0.017	0.028	0.000	-0.009	-0.001	-0.028	0.004	-0.029
37.H	0.019	-0.013	0.052	0.004	-0.013	0.018	-0.031	-0.023	-0.049
38.C	0.039	-0.001	0.007	0.019	0.022	-0.017	-0.049	0.019	-0.017
39.H	0.082	-0.003	0.010	0.057	0.023	-0.010	-0.097	0.041	0.010
40.H	0.030	0.036	-0.015	0.011	0.054	-0.037	-0.040	-0.036	-0.001
41.C	0.002	-0.014	0.004	-0.010	0.013	-0.019	0.001	0.060	-0.051
42.H	0.001	-0.043	-0.009	-0.017	0.000	-0.047	-0.005	0.119	-0.057
43.H	-0.011	0.004	0.012	-0.035	0.010	-0.003	-0.007	0.047	-0.046
44.C	-0.020	-0.004	0.014	-0.001	0.024	0.006	0.069	0.036	-0.074
45.H	-0.008	0.026	0.045	0.018	0.045	0.056	0.062	-0.019	-0.089
46.H	-0.067	-0.020	0.026	-0.049	0.012	0.015	0.112	0.049	-0.083
47.N	0.010	0.007	-0.013	0.052	0.035	-0.035	0.047	0.049	-0.050
48.C	0.011	0.011	-0.017	0.037	0.016	-0.058	0.020	0.007	0.014
49.C	-0.014	-0.058	0.025	-0.090	-0.087	-0.006	0.082	-0.029	0.044
50.H	0.197	-0.344	0.322	-0.084	-0.120	0.176	0.260	-0.259	0.210
51.H	0.167	0.254	-0.132	-0.076	-0.063	-0.073	0.229	0.223	-0.025
52.H	-0.449	-0.181	-0.053	-0.221	-0.181	-0.070	-0.205	-0.111	-0.007
53.C	0.020	0.031	-0.025	0.086	0.045	-0.102	-0.036	-0.029	0.064
54.C	0.014	0.028	-0.032	0.098	0.051	-0.097	-0.047	-0.037	0.060

55.H	0.015	0.039	-0.047	0.130	0.059	-0.117	-0.069	-0.038	0.068
56.C	-0.005	0.008	-0.012	0.024	0.015	-0.009	-0.001	-0.020	0.006
57.F	-0.033	-0.010	0.004	-0.038	-0.021	0.081	0.020	-0.009	-0.033
58.C	-0.004	0.001	-0.003	-0.014	-0.003	0.028	0.039	0.000	-0.035
59.H	-0.015	-0.012	0.010	-0.068	-0.033	0.096	0.082	0.024	-0.090
60.C	0.008	0.010	-0.007	0.005	0.009	-0.010	0.024	-0.008	-0.003
61.H	0.007	0.003	0.003	-0.033	-0.007	0.024	0.054	0.001	-0.026
62.C	0.012	0.021	-0.012	0.041	0.020	-0.055	-0.019	-0.025	0.049
63.O	0.004	0.016	0.004	0.008	-0.006	-0.013	-0.033	-0.037	0.068

167.242

179.600

180.451

	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1.Mn	0.002	0.032	-0.002	-0.063	0.008	0.103	-0.012	-0.014	0.022
2.O	-0.010	-0.030	-0.046	-0.057	0.038	0.207	-0.003	0.023	-0.093
3.C	-0.044	-0.005	0.000	0.023	-0.031	0.046	-0.012	0.036	-0.052
4.C	-0.043	-0.019	-0.003	0.051	-0.006	0.011	-0.026	0.012	-0.033
5.H	-0.036	-0.036	-0.026	0.049	0.027	0.054	-0.041	-0.003	-0.047
6.C	-0.032	-0.030	-0.008	0.048	0.001	-0.023	-0.016	0.003	-0.002
7.H	-0.008	-0.050	-0.038	0.038	0.030	-0.013	-0.026	-0.015	0.013
8.C	-0.040	-0.019	0.008	0.015	-0.021	-0.034	0.017	0.019	0.005
9.F	0.018	-0.058	-0.046	-0.110	0.063	0.003	0.053	-0.004	0.048
10.C	-0.077	0.019	0.051	0.053	-0.093	-0.066	0.027	0.047	-0.016
11.H	-0.083	0.027	0.061	0.047	-0.103	-0.073	0.050	0.050	-0.021
12.C	-0.070	0.017	0.034	0.060	-0.094	-0.042	0.007	0.057	-0.031
13.C	-0.021	0.007	-0.014	0.039	-0.060	-0.027	0.010	0.047	-0.033
14.C	0.045	0.037	0.011	-0.066	0.066	0.036	0.038	0.032	-0.044
15.H	0.190	0.224	0.129	-0.243	-0.140	0.024	0.162	0.189	0.050
16.H	0.162	-0.168	-0.028	-0.208	0.311	0.115	0.139	-0.144	-0.108
17.H	-0.175	0.103	-0.032	0.167	0.112	-0.005	-0.165	0.060	-0.059
18.N	-0.008	-0.015	-0.064	0.070	-0.099	-0.063	0.009	0.051	-0.008
19.C	0.040	-0.030	-0.105	0.069	-0.011	-0.083	0.023	-0.005	-0.002
20.H	0.022	-0.008	-0.146	0.063	0.010	-0.093	0.017	0.004	-0.012
21.H	0.078	-0.041	-0.112	0.101	0.005	-0.063	0.016	-0.038	-0.037
22.C	0.038	-0.048	-0.068	0.024	-0.001	-0.102	0.044	-0.034	0.062
23.H	0.048	-0.083	-0.020	0.018	-0.037	-0.112	0.059	-0.051	0.122
24.H	0.074	-0.059	-0.089	0.006	-0.002	-0.090	0.095	-0.056	0.031
25.C	-0.027	-0.001	-0.035	-0.005	0.058	-0.046	-0.010	-0.015	0.062
26.H	-0.041	-0.033	0.012	0.020	0.012	0.029	-0.053	-0.014	0.055

27.H	-0.030	0.045	-0.063	-0.017	0.077	-0.093	-0.005	0.028	0.067
28.N	-0.049	0.040	-0.018	-0.051	0.131	-0.003	-0.008	-0.057	0.053
29.H	-0.048	0.018	-0.008	-0.040	0.176	0.029	-0.006	-0.014	0.048
30.C	-0.059	0.078	0.030	-0.021	0.088	-0.057	0.031	-0.124	-0.027
31.H	-0.048	0.142	0.121	-0.019	0.070	-0.034	0.024	-0.204	-0.081
32.H	-0.153	0.053	0.028	-0.024	0.125	-0.123	0.119	-0.077	-0.065
33.C	0.057	0.080	-0.029	0.009	0.003	-0.069	-0.035	-0.142	0.004
34.H	0.047	0.136	-0.122	0.005	0.076	-0.095	-0.028	-0.203	0.060
35.H	0.149	0.059	-0.022	0.073	-0.064	-0.150	-0.113	-0.116	0.011
36.N	0.052	0.047	0.016	-0.043	-0.077	0.034	-0.011	-0.102	-0.044
37.H	0.050	0.029	0.006	-0.033	-0.145	0.058	-0.009	-0.080	-0.028
38.C	0.030	0.004	0.034	-0.010	-0.045	0.006	0.008	-0.039	-0.070
39.H	0.048	-0.033	-0.018	-0.023	-0.004	0.065	0.055	-0.021	-0.037
40.H	0.033	0.058	0.061	-0.016	-0.092	-0.025	-0.001	-0.008	-0.093
41.C	-0.041	-0.050	0.075	0.047	0.018	-0.047	-0.029	-0.035	-0.091
42.H	-0.051	-0.092	0.026	0.051	0.062	-0.021	-0.045	-0.038	-0.147
43.H	-0.078	-0.062	0.097	0.062	0.034	-0.055	-0.082	-0.054	-0.059
44.C	-0.047	-0.028	0.115	0.074	0.007	-0.072	0.005	-0.004	-0.028
45.H	-0.029	-0.001	0.159	0.065	-0.020	-0.089	0.007	-0.003	-0.025
46.H	-0.089	-0.039	0.122	0.102	0.016	-0.078	0.025	-0.038	0.011
47.N	0.003	-0.019	0.072	0.066	0.052	-0.059	0.017	0.080	-0.017
48.C	0.018	0.005	0.015	0.041	0.022	-0.045	0.006	0.064	0.017
49.C	-0.053	0.041	-0.016	-0.035	-0.073	0.004	-0.062	0.006	0.049
50.H	-0.224	0.261	-0.171	-0.130	0.032	0.028	-0.261	0.253	-0.071
51.H	-0.194	-0.200	0.041	-0.111	-0.202	0.047	-0.227	-0.274	0.159
52.H	0.213	0.122	0.034	0.075	-0.125	-0.035	0.252	0.023	0.055
53.C	0.072	0.014	-0.038	0.060	0.047	-0.059	0.019	0.088	0.007
54.C	0.082	0.017	-0.054	0.067	0.051	-0.071	-0.001	0.079	-0.015
55.H	0.090	0.023	-0.064	0.074	0.057	-0.081	-0.022	0.084	-0.013
56.C	0.042	-0.018	-0.006	0.025	0.005	-0.027	-0.008	0.024	-0.018
57.F	-0.013	-0.054	0.052	-0.064	-0.053	0.034	-0.089	-0.030	-0.042
58.C	0.029	-0.030	0.013	0.033	-0.004	-0.021	0.033	0.000	-0.005
59.H	0.002	-0.049	0.048	0.016	-0.018	-0.001	0.036	-0.028	-0.011
60.C	0.041	-0.019	0.004	0.029	-0.003	-0.010	0.042	0.012	0.035
61.H	0.031	-0.035	0.028	0.017	-0.023	0.021	0.053	-0.014	0.067
62.C	0.045	-0.006	-0.005	0.014	0.005	0.007	0.021	0.046	0.061
63.O	0.014	-0.027	0.037	-0.051	-0.044	0.125	-0.018	0.011	0.160

194.568

203.151

215.263

	194.568			203.151			215.263		
1.Mn	0.076	0.000	0.033	0.001	0.018	0.002	0.000	-0.156	0.002
2.O	0.100	-0.174	-0.064	-0.015	-0.007	0.019	0.046	-0.078	-0.050
3.C	0.026	-0.105	0.018	-0.018	-0.008	0.004	0.037	-0.057	-0.024
4.C	-0.012	-0.015	0.057	-0.014	-0.011	-0.003	0.019	0.006	-0.001
5.H	0.031	0.005	0.068	-0.014	-0.014	-0.007	0.037	0.035	0.030
6.C	-0.054	0.025	0.043	-0.007	-0.017	-0.011	-0.004	0.036	-0.002
7.H	-0.050	0.059	0.034	0.004	-0.024	-0.025	-0.029	0.061	0.029
8.C	-0.081	-0.018	0.004	-0.020	-0.014	-0.001	0.002	0.010	-0.034
9.F	-0.065	-0.030	-0.202	-0.017	-0.017	-0.023	-0.069	0.059	-0.088
10.C	-0.126	-0.048	0.075	-0.031	-0.007	0.014	0.023	-0.046	-0.039
11.H	-0.174	-0.050	0.091	-0.035	0.000	0.025	0.000	-0.053	-0.038
12.C	-0.049	-0.081	0.062	-0.022	-0.011	0.000	0.052	-0.055	-0.028
13.C	-0.017	-0.025	0.030	0.004	-0.002	-0.027	0.046	0.013	-0.010
14.C	0.021	0.017	0.061	0.024	0.036	-0.004	0.048	0.087	0.029
15.H	-0.067	-0.100	-0.035	0.000	0.005	-0.021	0.013	0.047	0.036
16.H	-0.053	0.147	0.159	0.003	0.074	0.044	0.018	0.137	0.080
17.H	0.216	0.012	0.060	0.088	0.055	-0.020	0.121	0.132	-0.006
18.N	-0.021	-0.009	-0.018	0.014	-0.018	-0.064	0.033	0.035	-0.015
19.C	0.025	0.045	-0.061	0.018	0.018	-0.080	0.094	0.074	-0.064
20.H	0.004	0.065	-0.115	0.012	0.110	-0.100	0.061	0.119	-0.144
21.H	0.095	0.043	-0.056	0.095	-0.013	-0.105	0.181	0.047	-0.083
22.C	0.046	0.040	-0.022	-0.078	-0.014	-0.039	0.116	0.046	0.014
23.H	0.054	0.030	0.011	-0.118	-0.041	-0.173	0.147	-0.009	0.142
24.H	0.067	-0.003	-0.032	-0.200	-0.047	0.038	0.220	0.019	-0.049
25.C	0.020	0.094	0.034	0.010	0.026	0.054	-0.031	0.113	0.038
26.H	-0.009	0.063	0.079	-0.053	0.007	0.073	-0.180	0.092	0.052
27.H	0.023	0.140	0.029	0.038	0.042	0.149	-0.004	0.271	0.080
28.N	0.009	0.096	0.046	0.101	0.032	0.003	0.006	0.013	0.009
29.H	0.013	0.094	0.057	0.093	0.087	-0.038	-0.003	-0.008	-0.027
30.C	-0.015	0.064	-0.012	0.135	-0.026	-0.067	-0.003	0.005	-0.002
31.H	-0.013	0.098	0.008	0.111	-0.167	-0.273	-0.003	0.011	-0.001
32.H	-0.063	0.093	-0.085	0.344	0.016	-0.041	-0.005	0.012	-0.011
33.C	0.002	-0.058	-0.018	-0.135	-0.028	0.066	0.002	0.002	0.003
34.H	0.001	-0.073	-0.024	-0.110	-0.165	0.278	0.002	0.007	0.002
35.H	-0.018	-0.096	-0.088	-0.346	0.012	0.037	0.002	0.008	0.008
36.N	0.022	-0.097	0.052	-0.100	0.026	-0.001	-0.006	0.009	-0.007
37.H	0.024	-0.102	0.058	-0.092	0.081	0.040	0.004	-0.012	0.031

38.C	0.021	-0.098	0.047	-0.008	0.020	-0.053	0.032	0.113	-0.041
39.H	-0.020	-0.063	0.093	0.058	0.002	-0.070	0.187	0.091	-0.053
40.H	0.028	-0.150	0.055	-0.036	0.035	-0.149	0.004	0.276	-0.088
41.C	0.042	-0.040	-0.020	0.078	-0.016	0.038	-0.122	0.046	-0.019
42.H	0.047	-0.026	0.004	0.117	-0.040	0.171	-0.156	-0.013	-0.157
43.H	0.055	0.009	-0.027	0.198	-0.047	-0.037	-0.236	0.020	0.051
44.C	0.028	-0.049	-0.067	-0.018	0.016	0.076	-0.093	0.074	0.058
45.H	0.006	-0.079	-0.124	-0.012	0.105	0.092	-0.060	0.115	0.139
46.H	0.106	-0.044	-0.065	-0.090	-0.013	0.100	-0.177	0.050	0.076
47.N	-0.020	0.008	-0.024	-0.014	-0.017	0.063	-0.029	0.039	0.009
48.C	-0.016	0.024	0.027	-0.004	-0.001	0.027	-0.044	0.014	0.009
49.C	0.023	-0.021	0.061	-0.022	0.034	0.005	-0.047	0.083	-0.029
50.H	-0.068	0.098	-0.041	-0.002	0.008	0.020	-0.016	0.047	-0.037
51.H	-0.056	-0.154	0.169	-0.004	0.065	-0.040	-0.020	0.125	-0.079
52.H	0.227	-0.019	0.059	-0.078	0.052	0.019	-0.112	0.127	0.003
53.C	-0.050	0.084	0.058	0.021	-0.006	0.001	-0.053	-0.053	0.031
54.C	-0.127	0.053	0.074	0.027	-0.004	-0.012	-0.024	-0.043	0.042
55.H	-0.176	0.054	0.091	0.029	0.002	-0.022	-0.002	-0.050	0.041
56.C	-0.082	0.020	0.003	0.017	-0.013	0.001	-0.003	0.011	0.034
57.F	-0.066	0.025	-0.205	0.013	-0.016	0.015	0.068	0.061	0.083
58.C	-0.054	-0.023	0.044	0.006	-0.017	0.012	0.004	0.034	0.002
59.H	-0.051	-0.056	0.036	-0.005	-0.025	0.026	0.029	0.058	-0.030
60.C	-0.012	0.018	0.055	0.015	-0.010	0.005	-0.019	0.006	0.003
61.H	0.030	-0.001	0.066	0.016	-0.014	0.010	-0.036	0.033	-0.029
62.C	0.026	0.108	0.012	0.020	-0.003	-0.004	-0.037	-0.055	0.028
63.O	0.100	0.174	-0.072	0.018	-0.001	-0.018	-0.045	-0.075	0.055

234.623

241.740

252.920

1.Mn	0.000	-0.160	0.004	0.007	-0.004	-0.029	-0.052	-0.023	-0.263
2.O	0.036	0.009	-0.086	-0.007	0.018	0.041	-0.087	0.048	0.183
3.C	0.009	0.044	-0.033	-0.009	0.015	0.023	-0.010	-0.032	0.098
4.C	0.008	0.038	-0.030	0.005	0.002	0.007	0.031	-0.018	0.059
5.H	0.020	0.023	-0.053	0.009	-0.007	-0.005	0.029	0.019	0.107
6.C	0.013	0.035	-0.011	0.018	-0.010	-0.007	0.056	-0.027	-0.014
7.H	0.023	0.007	-0.020	0.039	-0.024	-0.034	0.056	-0.007	-0.016
8.C	0.028	0.063	0.018	-0.003	0.001	0.015	0.027	-0.052	-0.042
9.F	0.100	0.020	0.038	0.017	-0.012	0.008	-0.140	0.057	-0.054

10.C	0.006	0.091	0.029	-0.024	0.016	0.035	0.057	-0.118	-0.045
11.H	0.003	0.095	0.033	-0.028	0.022	0.043	0.045	-0.123	-0.044
12.C	0.012	0.071	-0.001	-0.016	0.008	0.017	0.030	-0.086	0.026
13.C	0.034	0.002	-0.020	0.007	-0.015	-0.014	0.013	0.006	0.055
14.C	0.026	-0.003	-0.027	0.011	-0.005	-0.007	0.057	0.031	0.082
15.H	0.012	-0.021	-0.044	-0.026	-0.053	-0.043	0.020	-0.021	0.024
16.H	0.013	0.021	-0.014	-0.020	0.050	0.026	0.025	0.081	0.137
17.H	0.052	-0.011	-0.022	0.081	-0.014	-0.002	0.160	0.029	0.079
18.N	0.085	-0.064	-0.027	0.025	-0.043	-0.045	-0.068	0.087	0.017
19.C	0.021	-0.013	0.007	-0.033	0.004	-0.012	-0.016	0.085	-0.022
20.H	0.049	0.007	0.080	-0.010	0.045	0.045	-0.046	0.130	-0.096
21.H	-0.011	0.020	0.036	-0.039	0.010	-0.008	0.065	0.047	-0.054
22.C	-0.105	0.015	-0.107	-0.130	0.010	-0.056	0.043	0.050	0.065
23.H	-0.162	0.017	-0.308	-0.196	0.054	-0.303	0.069	0.066	0.150
24.H	-0.278	0.076	-0.003	-0.343	-0.007	0.077	0.123	0.011	0.018
25.C	0.024	-0.042	-0.114	0.091	-0.031	-0.003	0.008	0.027	0.039
26.H	0.123	-0.026	-0.123	0.211	-0.022	0.002	-0.100	0.062	-0.029
27.H	0.011	-0.156	-0.120	0.078	-0.185	0.004	0.035	0.089	0.114
28.N	0.020	0.008	-0.090	0.079	0.037	0.021	0.077	-0.101	-0.017
29.H	0.022	-0.007	-0.077	0.085	-0.016	0.059	0.058	-0.196	-0.071
30.C	-0.003	0.063	-0.007	-0.037	0.069	0.027	0.016	-0.035	0.072
31.H	-0.001	0.106	0.000	-0.033	0.215	0.048	0.019	0.037	0.082
32.H	-0.039	0.023	0.045	-0.176	0.048	-0.002	-0.037	-0.088	0.140
33.C	0.007	0.070	0.002	-0.036	-0.062	0.029	0.026	0.041	0.068
34.H	0.005	0.127	-0.010	-0.032	-0.203	0.052	0.026	-0.005	0.063
35.H	0.058	0.027	-0.046	-0.170	-0.045	-0.004	0.001	0.084	0.129
36.N	-0.027	0.014	0.087	0.076	-0.035	0.028	0.069	0.090	-0.005
37.H	-0.030	-0.007	0.069	0.082	0.017	0.064	0.055	0.155	-0.045
38.C	-0.033	-0.044	0.115	0.088	0.028	0.003	0.015	-0.013	0.044
39.H	-0.149	-0.026	0.125	0.201	0.020	0.008	-0.064	-0.050	-0.020
40.H	-0.018	-0.177	0.127	0.075	0.174	0.005	0.035	-0.048	0.106
41.C	0.121	0.019	0.113	-0.124	-0.011	-0.050	0.033	-0.041	0.074
42.H	0.185	0.030	0.344	-0.187	-0.058	-0.285	0.052	-0.056	0.136
43.H	0.319	0.077	-0.008	-0.329	0.011	0.076	0.092	-0.012	0.038
44.C	-0.020	-0.011	-0.003	-0.031	-0.007	-0.014	-0.010	-0.073	0.003
45.H	-0.050	0.015	-0.081	-0.010	-0.049	0.038	-0.033	-0.121	-0.054
46.H	0.009	0.020	-0.031	-0.032	-0.010	-0.013	0.062	-0.041	-0.025
47.N	-0.088	-0.068	0.035	0.023	0.037	-0.046	-0.048	-0.069	0.029
48.C	-0.036	0.001	0.020	0.007	0.014	-0.013	0.032	0.010	0.070

49.C	-0.029	0.000	0.025	0.012	0.001	-0.004	0.065	-0.026	0.107
50.H	-0.009	-0.026	0.050	-0.025	0.050	-0.043	0.012	0.044	0.048
51.H	-0.011	0.033	0.004	-0.020	-0.055	0.033	0.019	-0.098	0.173
52.H	-0.070	-0.008	0.020	0.086	0.009	0.000	0.188	-0.032	0.100
53.C	-0.010	0.071	-0.004	-0.016	-0.003	0.017	0.049	0.099	0.036
54.C	-0.002	0.090	-0.036	-0.024	-0.009	0.033	0.049	0.114	-0.024
55.H	0.003	0.095	-0.042	-0.029	-0.015	0.043	0.025	0.119	-0.019
56.C	-0.027	0.062	-0.021	-0.005	0.002	0.014	0.025	0.037	-0.028
57.F	-0.100	0.019	-0.037	0.011	0.012	0.003	-0.136	-0.071	-0.090
58.C	-0.015	0.034	0.011	0.017	0.011	-0.006	0.055	0.006	0.012
59.H	-0.028	0.006	0.024	0.037	0.022	-0.032	0.048	-0.025	0.019
60.C	-0.010	0.038	0.029	0.005	0.001	0.008	0.053	0.021	0.069
61.H	-0.023	0.023	0.053	0.008	0.007	-0.002	0.066	-0.019	0.119
62.C	-0.008	0.045	0.029	-0.008	-0.010	0.024	0.025	0.060	0.087
63.O	-0.036	0.012	0.080	-0.007	-0.014	0.042	-0.051	-0.011	0.120

254.029

290.411

291.292

1.Mn	0.006	-0.130	0.033	-0.043	-0.019	-0.006	0.051	-0.016	0.006
2.O	-0.116	0.114	0.199	0.010	-0.012	-0.061	0.017	0.022	0.047
3.C	-0.123	0.096	0.019	0.021	-0.008	-0.010	-0.015	0.032	0.011
4.C	-0.085	0.008	-0.041	0.023	0.007	-0.009	-0.010	0.007	-0.001
5.H	-0.144	-0.013	-0.048	0.051	0.010	-0.015	-0.022	-0.004	-0.011
6.C	-0.004	-0.073	-0.085	0.000	0.030	0.008	-0.005	-0.011	-0.016
7.H	0.021	-0.114	-0.114	-0.005	0.031	0.015	0.007	-0.006	-0.034
8.C	0.005	-0.047	-0.048	0.010	0.036	0.010	-0.013	-0.010	-0.008
9.F	0.000	-0.050	0.141	0.037	0.024	0.000	0.033	-0.044	0.067
10.C	0.024	-0.001	-0.085	0.007	0.026	0.010	-0.017	0.015	-0.017
11.H	0.073	0.001	-0.099	-0.003	0.015	-0.002	-0.006	0.007	-0.033
12.C	-0.069	0.051	-0.054	0.022	0.009	0.013	-0.037	0.017	-0.001
13.C	-0.070	0.048	-0.065	0.018	-0.031	0.027	-0.046	-0.036	0.006
14.C	-0.042	0.001	-0.104	-0.036	-0.044	0.020	-0.109	-0.085	-0.027
15.H	0.024	0.080	-0.091	-0.041	-0.044	0.054	-0.068	-0.026	0.042
16.H	0.010	-0.089	-0.148	-0.037	-0.043	-0.024	-0.071	-0.151	-0.127
17.H	-0.137	-0.018	-0.087	-0.077	-0.048	0.024	-0.245	-0.101	-0.010
18.N	-0.066	0.051	-0.038	0.039	-0.055	0.035	-0.025	-0.057	0.011
19.C	-0.022	0.030	-0.074	0.017	-0.040	0.053	0.008	-0.058	-0.019
20.H	-0.040	0.012	-0.121	0.030	-0.082	0.086	0.001	-0.143	-0.029

21.H	-0.005	0.018	-0.083	-0.033	-0.013	0.079	-0.039	-0.018	0.022
22.C	0.039	0.020	-0.029	0.020	-0.017	0.013	0.081	-0.035	-0.014
23.H	0.062	0.016	0.053	0.029	-0.031	0.048	0.111	-0.081	0.105
24.H	0.108	-0.013	-0.071	0.046	0.004	-0.004	0.165	-0.064	-0.063
25.C	-0.025	0.049	-0.016	-0.019	0.007	0.012	-0.053	0.108	0.086
26.H	-0.128	0.040	-0.015	0.050	-0.020	0.065	-0.350	0.030	0.165
27.H	-0.002	0.143	0.031	-0.040	-0.010	-0.055	0.016	0.379	0.243
28.N	0.024	-0.025	-0.044	-0.073	0.099	0.051	0.101	0.062	-0.022
29.H	0.006	-0.106	-0.097	-0.058	0.213	0.083	0.071	-0.009	-0.128
30.C	-0.027	0.015	0.000	0.049	0.033	-0.003	0.032	0.090	-0.031
31.H	-0.022	0.088	0.041	0.038	-0.146	-0.089	0.029	0.168	-0.064
32.H	-0.107	-0.016	0.016	0.242	0.090	-0.009	-0.027	0.077	-0.035
33.C	0.024	0.009	-0.016	-0.039	0.098	0.029	-0.040	0.015	-0.002
34.H	0.017	0.101	-0.061	-0.034	0.148	0.077	-0.029	-0.173	0.081
35.H	0.119	-0.033	-0.044	-0.012	0.092	0.032	-0.241	0.073	0.002
36.N	-0.044	-0.042	0.046	-0.090	0.078	0.013	0.090	0.084	-0.057
37.H	-0.022	-0.142	0.111	-0.063	0.029	0.112	0.070	0.206	-0.111
38.C	0.019	0.055	0.004	0.053	0.105	-0.088	0.009	-0.013	0.005
39.H	0.142	0.054	0.017	0.334	0.021	-0.174	-0.115	-0.026	-0.031
40.H	-0.010	0.158	-0.062	-0.012	0.365	-0.239	0.042	-0.081	0.102
41.C	-0.045	0.032	0.015	-0.082	-0.037	0.014	-0.003	-0.010	-0.015
42.H	-0.072	0.030	-0.079	-0.111	-0.086	-0.104	-0.006	-0.016	-0.027
43.H	-0.126	-0.010	0.064	-0.166	-0.061	0.064	-0.013	0.015	-0.008
44.C	0.025	0.050	0.076	-0.009	-0.066	0.009	-0.015	-0.029	-0.054
45.H	0.048	0.044	0.136	-0.005	-0.158	0.014	-0.028	-0.052	-0.086
46.H	-0.007	0.032	0.090	0.050	-0.022	-0.037	0.023	-0.011	-0.070
47.N	0.077	0.068	0.033	0.018	-0.068	-0.017	-0.042	-0.042	-0.030
48.C	0.063	0.047	0.050	0.043	-0.042	-0.010	-0.025	-0.023	-0.024
49.C	0.029	0.008	0.082	0.116	-0.094	0.026	0.014	-0.027	-0.023
50.H	-0.026	0.071	0.081	0.077	-0.038	-0.049	0.026	-0.038	-0.042
51.H	-0.014	-0.065	0.115	0.078	-0.156	0.137	0.022	-0.013	0.000
52.H	0.096	-0.011	0.067	0.258	-0.112	0.010	0.028	-0.028	-0.024
53.C	0.059	0.030	0.046	0.032	0.019	-0.002	-0.027	0.005	-0.013
54.C	-0.035	-0.024	0.093	0.016	0.021	0.014	-0.010	0.022	-0.013
55.H	-0.080	-0.023	0.107	0.006	0.011	0.032	0.001	0.013	-0.004
56.C	-0.010	-0.055	0.057	0.010	-0.002	0.006	-0.012	0.036	-0.012
57.F	0.032	-0.040	-0.123	-0.042	-0.041	-0.066	-0.029	0.031	0.012
58.C	-0.007	-0.074	0.086	0.005	-0.005	0.015	-0.001	0.030	-0.012
59.H	-0.031	-0.107	0.116	-0.007	0.002	0.031	0.006	0.030	-0.021

60.C	0.078	0.005	0.023	0.005	0.009	0.002	-0.024	0.006	0.009
61.H	0.136	-0.006	0.018	0.012	-0.001	0.014	-0.054	0.010	0.013
62.C	0.123	0.084	-0.044	0.010	0.031	-0.010	-0.023	-0.014	0.012
63.O	0.131	0.113	-0.237	-0.019	0.018	-0.036	-0.006	-0.014	0.067

307.739

323.630

330.745

1.Mn	-0.002	-0.001	-0.139	-0.001	-0.007	0.001	0.000	-0.055	0.001
2.O	0.015	0.006	-0.004	0.003	0.005	0.009	-0.017	0.003	0.046
3.C	0.022	0.002	0.020	0.000	0.005	0.011	-0.030	0.009	0.005
4.C	0.038	0.011	0.006	0.003	0.007	0.011	-0.030	-0.002	-0.002
5.H	0.064	0.013	-0.001	-0.002	0.009	0.017	-0.041	-0.006	-0.003
6.C	0.013	0.027	0.001	0.013	-0.001	0.000	-0.004	-0.023	-0.021
7.H	0.023	0.035	-0.012	0.012	0.001	0.002	0.016	-0.043	-0.044
8.C	0.004	0.037	0.012	0.014	-0.006	-0.008	-0.017	-0.011	0.001
9.F	0.058	0.006	0.030	-0.004	0.007	0.007	-0.017	-0.015	-0.009
10.C	-0.009	0.032	0.018	0.015	-0.010	-0.008	-0.025	0.007	0.014
11.H	-0.023	0.015	-0.003	0.016	-0.009	-0.006	-0.026	0.013	0.024
12.C	0.004	0.006	0.027	-0.002	-0.001	0.006	-0.008	0.002	-0.011
13.C	0.001	-0.061	0.035	-0.012	0.002	0.010	0.027	0.012	-0.037
14.C	-0.106	-0.105	0.013	0.006	-0.002	0.011	0.030	0.037	-0.030
15.H	-0.108	-0.095	0.084	0.011	0.001	-0.003	0.011	0.012	-0.041
16.H	-0.100	-0.116	-0.096	0.008	-0.007	0.019	0.014	0.067	0.000
17.H	-0.212	-0.128	0.033	0.014	-0.006	0.014	0.071	0.046	-0.039
18.N	0.019	-0.089	0.017	-0.024	0.010	-0.001	0.051	-0.007	-0.019
19.C	-0.014	-0.063	0.037	-0.012	0.012	-0.021	-0.001	0.001	0.036
20.H	0.008	-0.172	0.100	-0.016	-0.010	-0.032	0.017	0.037	0.077
21.H	-0.122	0.003	0.100	-0.012	0.028	-0.004	-0.008	-0.025	0.007
22.C	0.046	-0.014	-0.019	0.017	0.022	-0.047	-0.031	-0.010	0.063
23.H	0.067	-0.021	0.061	0.046	0.014	0.057	-0.048	0.021	-0.008
24.H	0.102	-0.020	-0.052	0.112	0.061	-0.108	-0.090	-0.051	0.102
25.C	-0.026	0.058	0.024	-0.068	-0.012	-0.113	0.073	-0.027	0.073
26.H	0.016	-0.004	0.130	0.053	0.001	-0.113	0.340	-0.032	0.120
27.H	-0.043	0.091	-0.049	-0.106	-0.062	-0.235	0.010	-0.227	-0.086
28.N	-0.085	0.164	0.078	-0.154	0.033	-0.028	-0.094	0.121	0.175
29.H	-0.074	0.242	0.096	-0.137	0.194	-0.001	-0.056	0.229	0.294
30.C	0.016	0.058	-0.033	0.060	-0.062	-0.050	-0.026	0.014	0.029
31.H	0.015	-0.050	-0.035	0.045	-0.336	-0.163	-0.024	-0.068	0.057

32.H	0.097	0.157	-0.164	0.339	0.007	-0.039	0.031	0.098	-0.086
33.C	0.014	-0.063	-0.030	-0.061	-0.060	0.053	0.025	0.014	-0.030
34.H	0.014	0.037	-0.030	-0.045	-0.332	0.174	0.024	-0.070	-0.056
35.H	0.087	-0.163	-0.158	-0.341	0.011	0.044	-0.034	0.101	0.085
36.N	-0.082	-0.163	0.081	0.155	0.037	0.027	0.094	0.118	-0.178
37.H	-0.070	-0.236	0.100	0.138	0.197	-0.004	0.056	0.221	-0.299
38.C	-0.025	-0.056	0.026	0.069	-0.008	0.112	-0.072	-0.027	-0.074
39.H	0.014	0.010	0.132	-0.051	0.003	0.111	-0.335	-0.035	-0.121
40.H	-0.041	-0.092	-0.043	0.108	-0.056	0.235	-0.009	-0.221	0.090
41.C	0.045	0.016	-0.019	-0.019	0.022	0.046	0.030	-0.011	-0.062
42.H	0.066	0.023	0.061	-0.049	0.011	-0.063	0.047	0.021	0.007
43.H	0.101	0.022	-0.052	-0.118	0.060	0.108	0.089	-0.055	-0.100
44.C	-0.016	0.066	0.036	0.012	0.011	0.021	0.001	0.001	-0.033
45.H	0.006	0.177	0.096	0.017	-0.011	0.034	-0.016	0.036	-0.073
46.H	-0.124	0.002	0.099	0.012	0.027	0.005	0.007	-0.025	-0.004
47.N	0.017	0.089	0.017	0.025	0.010	0.001	-0.049	-0.007	0.019
48.C	-0.001	0.062	0.035	0.013	0.001	-0.010	-0.025	0.012	0.035
49.C	-0.107	0.108	0.011	-0.004	-0.003	-0.011	-0.029	0.036	0.028
50.H	-0.110	0.099	0.081	-0.010	0.001	0.002	-0.011	0.013	0.040
51.H	-0.101	0.116	-0.100	-0.007	-0.009	-0.017	-0.013	0.064	-0.002
52.H	-0.214	0.132	0.030	-0.010	-0.007	-0.013	-0.068	0.045	0.035
53.C	0.005	-0.006	0.028	0.003	-0.002	-0.006	0.009	0.003	0.010
54.C	-0.007	-0.032	0.020	-0.014	-0.010	0.008	0.024	0.006	-0.013
55.H	-0.022	-0.015	-0.002	-0.016	-0.009	0.006	0.025	0.012	-0.022
56.C	0.006	-0.038	0.014	-0.014	-0.006	0.008	0.016	-0.011	0.000
57.F	0.060	-0.007	0.032	0.004	0.007	-0.008	0.016	-0.014	0.008
58.C	0.015	-0.029	0.003	-0.014	-0.001	0.000	0.003	-0.022	0.022
59.H	0.025	-0.037	-0.010	-0.012	0.002	-0.002	-0.015	-0.040	0.045
60.C	0.040	-0.012	0.006	-0.003	0.007	-0.012	0.029	-0.001	0.001
61.H	0.068	-0.014	0.000	0.002	0.009	-0.018	0.041	-0.005	0.003
62.C	0.024	-0.001	0.021	0.000	0.005	-0.012	0.029	0.009	-0.005
63.O	0.018	-0.005	-0.006	-0.004	0.005	-0.011	0.016	0.001	-0.046

337.702

342.269

347.306

1.Mn	0.109	-0.001	-0.009	-0.007	-0.024	0.002	-0.054	0.002	0.028
2.O	0.075	-0.020	0.132	0.058	-0.021	-0.079	0.022	0.001	-0.089
3.C	0.018	0.018	0.040	0.023	0.017	0.044	0.056	-0.017	-0.014

4.C	0.021	0.035	0.042	0.028	0.053	0.062	0.063	0.010	-0.002
5.H	-0.007	0.038	0.056	0.016	0.079	0.100	0.082	0.022	0.008
6.C	0.056	-0.002	0.005	0.080	0.024	0.002	0.011	0.056	0.052
7.H	0.071	0.007	-0.016	0.050	0.045	0.040	-0.048	0.100	0.126
8.C	0.021	-0.025	-0.001	0.118	-0.014	-0.063	0.059	0.021	-0.014
9.F	0.012	-0.021	0.048	0.003	0.073	0.060	0.034	0.050	0.024
10.C	-0.002	-0.027	0.013	0.114	-0.057	-0.067	0.082	-0.032	-0.048
11.H	-0.002	-0.015	0.027	0.113	-0.053	-0.062	0.091	-0.042	-0.064
12.C	-0.040	-0.013	-0.003	-0.014	0.007	0.048	0.008	-0.003	0.030
13.C	-0.073	0.052	-0.047	-0.101	0.011	0.087	-0.080	-0.019	0.092
14.C	0.010	0.034	-0.065	0.011	-0.037	0.087	-0.013	-0.057	0.097
15.H	0.037	0.053	-0.128	0.074	0.025	0.024	0.044	0.003	0.072
16.H	0.030	0.002	-0.041	0.055	-0.119	0.103	0.028	-0.133	0.094
17.H	0.026	0.002	-0.043	0.003	-0.061	0.106	-0.043	-0.066	0.106
18.N	-0.123	0.103	-0.073	-0.170	0.059	0.011	-0.138	0.022	0.028
19.C	-0.109	0.010	-0.096	-0.037	-0.026	-0.133	-0.007	-0.005	-0.122
20.H	-0.117	-0.006	-0.113	-0.097	0.083	-0.287	-0.066	0.090	-0.277
21.H	-0.110	-0.031	-0.140	0.126	-0.107	-0.200	0.160	-0.053	-0.151
22.C	-0.010	-0.026	-0.018	-0.052	-0.096	-0.027	-0.032	-0.051	-0.059
23.H	0.023	0.024	0.084	-0.072	-0.101	-0.099	-0.051	-0.074	-0.120
24.H	0.087	-0.084	-0.076	-0.113	-0.156	0.014	-0.087	-0.078	-0.025
25.C	-0.003	-0.061	-0.047	0.033	-0.062	0.045	0.003	-0.019	0.001
26.H	0.207	-0.053	-0.030	0.109	-0.092	0.102	-0.020	-0.040	0.029
27.H	-0.058	-0.202	-0.196	0.024	-0.133	0.035	0.013	-0.009	0.032
28.N	-0.125	0.038	0.049	0.021	0.054	0.049	0.032	0.012	-0.014
29.H	-0.109	0.105	0.092	0.029	0.059	0.076	0.032	0.007	-0.014
30.C	0.010	-0.039	0.019	-0.007	0.052	0.015	-0.006	0.030	-0.010
31.H	0.006	-0.220	-0.008	-0.005	0.091	0.030	-0.004	0.098	0.007
32.H	0.185	0.021	-0.001	-0.048	0.060	-0.017	-0.080	0.018	-0.024
33.C	0.010	0.041	0.018	0.005	0.042	-0.020	-0.007	-0.039	-0.006
34.H	0.005	0.218	-0.012	0.003	0.063	-0.032	-0.004	-0.113	0.016
35.H	0.180	-0.018	0.000	0.026	0.053	0.006	-0.088	-0.027	-0.024
36.N	-0.122	-0.033	0.048	-0.012	0.046	-0.052	0.037	-0.020	-0.007
37.H	-0.107	-0.095	0.088	-0.020	0.053	-0.079	0.037	-0.014	-0.002
38.C	-0.005	0.058	-0.047	-0.032	-0.060	-0.042	0.008	0.031	0.008
39.H	0.198	0.049	-0.032	-0.114	-0.086	-0.089	-0.003	0.058	0.046
40.H	-0.058	0.191	-0.196	-0.019	-0.135	-0.021	0.016	0.034	0.039
41.C	-0.009	0.023	-0.017	0.046	-0.083	0.017	-0.042	0.067	-0.066
42.H	0.024	-0.023	0.087	0.061	-0.082	0.076	-0.064	0.090	-0.139

43.H	0.090	0.080	-0.078	0.095	-0.138	-0.014	-0.107	0.105	-0.026
44.C	-0.107	-0.014	-0.094	0.037	-0.019	0.109	-0.014	0.006	-0.147
45.H	-0.114	0.002	-0.111	0.083	0.071	0.229	-0.084	-0.112	-0.328
46.H	-0.110	0.024	-0.139	-0.092	-0.089	0.171	0.181	0.067	-0.189
47.N	-0.119	-0.103	-0.072	0.141	0.058	-0.004	-0.171	-0.035	0.029
48.C	-0.070	-0.053	-0.048	0.084	0.015	-0.065	-0.099	0.018	0.105
49.C	0.011	-0.038	-0.066	-0.015	-0.023	-0.062	-0.011	0.065	0.108
50.H	0.035	-0.056	-0.126	-0.067	0.028	-0.007	0.058	-0.010	0.075
51.H	0.029	-0.007	-0.042	-0.052	-0.090	-0.079	0.040	0.157	0.104
52.H	0.027	-0.006	-0.045	-0.013	-0.045	-0.078	-0.046	0.078	0.119
53.C	-0.039	0.014	-0.005	0.016	0.005	-0.041	0.006	0.004	0.038
54.C	-0.005	0.026	0.013	-0.095	-0.048	0.057	0.103	0.041	-0.059
55.H	-0.006	0.015	0.027	-0.091	-0.042	0.047	0.111	0.050	-0.074
56.C	0.019	0.024	-0.001	-0.104	-0.017	0.060	0.081	-0.020	-0.023
57.F	0.014	0.025	0.047	0.005	0.059	-0.057	0.035	-0.062	0.036
58.C	0.053	0.002	0.004	-0.078	0.012	0.009	0.027	-0.059	0.056
59.H	0.068	-0.008	-0.017	-0.060	0.023	-0.014	-0.037	-0.104	0.137
60.C	0.019	-0.033	0.042	-0.014	0.049	-0.065	0.070	-0.020	0.010
61.H	-0.008	-0.036	0.055	0.004	0.073	-0.104	0.086	-0.036	0.028
62.C	0.017	-0.016	0.039	-0.011	0.019	-0.048	0.062	0.015	-0.006
63.O	0.073	0.023	0.133	-0.054	-0.021	0.057	0.034	0.001	-0.099

360.037

360.682

390.328

1.Mn	0.020	-0.022	0.001	0.051	0.009	0.001	-0.001	-0.032	0.000
2.O	0.048	-0.025	0.084	0.002	-0.019	-0.179	-0.031	0.038	0.025
3.C	0.070	-0.039	-0.023	-0.141	0.106	0.102	0.002	0.009	-0.029
4.C	0.093	-0.003	-0.040	-0.204	0.083	0.165	0.032	-0.055	-0.054
5.H	0.134	-0.008	-0.060	-0.314	0.120	0.248	0.018	-0.106	-0.114
6.C	-0.011	0.070	0.065	0.113	-0.141	-0.174	-0.001	-0.020	0.102
7.H	-0.037	0.107	0.095	0.178	-0.219	-0.252	-0.039	-0.048	0.155
8.C	-0.021	0.055	0.055	0.132	-0.134	-0.176	0.013	-0.026	0.078
9.F	0.083	-0.004	0.015	-0.157	0.041	0.046	-0.056	0.021	-0.082
10.C	-0.010	0.003	0.027	0.061	-0.036	-0.079	0.065	-0.038	0.027
11.H	-0.014	-0.016	0.002	0.040	0.018	-0.001	0.160	-0.031	0.007
12.C	0.012	-0.035	-0.020	-0.061	0.075	0.069	-0.007	0.036	0.001
13.C	-0.041	-0.003	-0.026	0.005	0.026	0.061	-0.021	0.098	-0.008
14.C	-0.027	-0.003	-0.033	0.054	0.003	0.068	0.068	0.062	-0.038

15.H	-0.011	0.016	-0.025	0.056	-0.005	0.008	0.092	0.074	-0.131
16.H	-0.013	-0.027	-0.045	0.049	0.009	0.109	0.084	0.037	0.005
17.H	-0.054	-0.006	-0.031	0.107	-0.012	0.079	0.107	0.016	-0.006
18.N	-0.091	0.046	-0.049	0.072	-0.045	0.051	-0.008	0.083	0.029
19.C	-0.063	0.014	-0.099	0.064	-0.046	0.078	-0.028	-0.106	0.083
20.H	-0.080	0.031	-0.141	0.078	-0.063	0.115	-0.004	-0.207	0.148
21.H	-0.015	-0.021	-0.130	0.036	-0.016	0.105	-0.159	-0.113	0.059
22.C	-0.008	-0.020	-0.020	-0.006	-0.020	-0.001	-0.005	-0.110	0.036
23.H	0.003	0.007	0.008	-0.028	-0.057	-0.068	0.014	-0.140	0.113
24.H	0.017	-0.092	-0.033	-0.067	0.052	0.034	0.066	-0.034	-0.010
25.C	0.018	-0.008	0.014	-0.013	-0.009	-0.008	-0.064	-0.086	-0.006
26.H	0.078	-0.017	0.037	0.011	-0.026	0.021	-0.087	-0.123	0.046
27.H	0.005	-0.044	-0.025	-0.017	-0.014	-0.022	-0.048	-0.060	0.043
28.N	-0.022	0.020	0.044	-0.018	0.050	-0.002	0.029	0.053	-0.069
29.H	-0.015	0.026	0.068	-0.016	0.073	-0.004	0.012	0.057	-0.143
30.C	-0.017	-0.013	0.002	0.007	0.034	-0.025	0.053	0.108	-0.017
31.H	-0.014	-0.017	0.024	0.006	0.013	-0.032	0.045	0.088	-0.086
32.H	-0.023	0.012	-0.044	0.022	0.054	-0.053	0.096	0.090	0.035
33.C	0.016	-0.033	-0.018	-0.007	-0.015	-0.016	-0.053	0.107	0.013
34.H	0.014	-0.022	-0.039	-0.006	0.003	-0.005	-0.045	0.085	0.084
35.H	0.031	-0.030	-0.006	-0.002	-0.048	-0.067	-0.100	0.088	-0.039
36.N	0.003	-0.022	-0.031	-0.028	-0.048	0.031	-0.028	0.054	0.066
37.H	-0.001	-0.034	-0.049	-0.022	-0.068	0.046	-0.011	0.060	0.140
38.C	-0.021	0.000	-0.016	0.003	0.011	0.004	0.063	-0.085	0.009
39.H	-0.047	0.005	-0.012	0.062	0.030	0.039	0.084	-0.123	-0.041
40.H	-0.015	-0.023	0.001	-0.009	0.040	-0.034	0.048	-0.064	-0.038
41.C	0.002	-0.001	0.012	-0.009	0.026	-0.015	0.006	-0.109	-0.033
42.H	-0.021	0.043	-0.054	-0.018	0.033	-0.043	-0.013	-0.140	-0.108
43.H	-0.058	-0.100	0.048	-0.036	0.025	0.002	-0.065	-0.033	0.011
44.C	0.089	0.044	0.121	0.002	0.022	-0.012	0.028	-0.106	-0.079
45.H	0.109	0.067	0.174	0.001	0.022	-0.015	0.005	-0.205	-0.140
46.H	0.038	0.001	0.162	0.017	0.025	-0.014	0.155	-0.113	-0.054
47.N	0.113	0.066	0.069	-0.010	0.001	0.002	0.008	0.081	-0.031
48.C	0.033	-0.015	0.063	-0.024	-0.015	0.025	0.021	0.097	0.004
49.C	0.055	0.001	0.072	0.019	0.001	0.025	-0.071	0.064	0.031
50.H	0.046	0.017	0.028	0.030	-0.007	-0.010	-0.095	0.077	0.126
51.H	0.042	-0.018	0.106	0.025	0.014	0.043	-0.086	0.040	-0.013
52.H	0.106	0.009	0.078	0.037	0.013	0.034	-0.113	0.019	0.002
53.C	-0.049	-0.075	0.064	-0.035	-0.028	0.036	0.007	0.035	-0.002

54.C	0.051	0.024	-0.077	0.036	0.022	-0.039	-0.063	-0.037	-0.020
55.H	0.040	-0.022	-0.006	0.016	-0.002	0.000	-0.154	-0.030	-0.002
56.C	0.107	0.126	-0.165	0.081	0.056	-0.092	-0.011	-0.028	-0.071
57.F	-0.167	-0.031	0.023	-0.056	-0.025	0.045	0.055	0.021	0.076
58.C	0.085	0.140	-0.168	0.074	0.050	-0.083	0.005	-0.022	-0.096
59.H	0.146	0.214	-0.242	0.103	0.078	-0.119	0.042	-0.050	-0.147
60.C	-0.207	-0.055	0.146	-0.084	-0.056	0.095	-0.029	-0.051	0.055
61.H	-0.310	-0.082	0.219	-0.135	-0.079	0.145	-0.016	-0.099	0.114
62.C	-0.146	-0.098	0.091	-0.053	-0.048	0.059	0.000	0.010	0.028
63.O	-0.032	-0.010	-0.186	0.036	0.030	-0.073	0.030	0.036	-0.029

396.832

400.838

409.725

1.Mn	-0.012	-0.001	-0.002	0.000	-0.003	-0.001	0.057	0.000	-0.025
2.O	0.017	-0.060	0.025	0.060	-0.058	0.000	-0.003	-0.002	0.080
3.C	-0.012	-0.034	0.010	0.015	-0.004	0.048	-0.023	-0.008	-0.042
4.C	-0.038	0.054	0.015	-0.027	0.070	0.128	-0.002	-0.035	-0.108
5.H	0.002	0.123	0.088	-0.076	0.101	0.187	0.038	-0.037	-0.128
6.C	-0.056	0.050	-0.125	0.143	-0.038	-0.030	-0.152	0.044	-0.022
7.H	-0.042	0.106	-0.151	0.217	-0.104	-0.119	-0.218	0.131	0.053
8.C	-0.037	0.051	-0.111	0.062	-0.014	0.028	-0.073	0.009	-0.079
9.F	0.086	-0.031	0.106	0.001	0.036	-0.001	0.010	-0.065	0.042
10.C	-0.071	0.042	-0.072	-0.044	0.010	0.129	0.010	-0.004	-0.148
11.H	-0.193	0.021	-0.061	-0.109	0.050	0.196	0.023	-0.033	-0.182
12.C	0.007	-0.047	-0.009	0.024	-0.037	-0.018	-0.039	0.021	0.001
13.C	0.018	-0.084	0.023	0.030	-0.006	-0.101	-0.030	0.048	0.064
14.C	-0.016	-0.033	0.069	-0.050	0.025	-0.121	0.125	0.052	0.098
15.H	-0.040	-0.052	0.116	-0.081	0.006	-0.032	0.146	0.050	-0.053
16.H	-0.035	-0.005	0.081	-0.064	0.057	-0.167	0.128	0.040	0.229
17.H	0.005	0.019	0.030	-0.111	0.045	-0.135	0.272	0.041	0.102
18.N	0.003	-0.063	-0.003	-0.006	0.039	-0.073	0.006	0.006	0.068
19.C	0.036	0.101	-0.057	-0.080	-0.011	-0.010	0.039	-0.052	0.065
20.H	0.004	0.228	-0.145	-0.044	-0.114	0.085	0.028	-0.028	0.036
21.H	0.199	0.088	-0.052	-0.218	0.004	-0.009	0.075	-0.055	0.061
22.C	0.004	0.093	-0.007	0.014	-0.006	0.002	-0.012	-0.048	0.023
23.H	-0.003	0.112	-0.042	0.044	0.031	0.099	-0.023	-0.082	-0.006
24.H	-0.023	0.049	0.011	0.097	-0.045	-0.047	-0.034	0.020	0.034
25.C	0.040	0.047	-0.010	-0.013	0.004	0.004	-0.015	-0.042	-0.003

26.H	0.067	0.095	-0.080	-0.057	-0.002	0.007	0.051	-0.060	0.034
27.H	0.027	0.012	-0.045	-0.003	0.043	0.027	-0.025	-0.087	-0.024
28.N	-0.018	-0.069	0.028	0.011	-0.014	-0.012	-0.014	0.067	-0.003
29.H	-0.007	-0.058	0.076	0.006	-0.028	-0.030	-0.017	0.072	-0.022
30.C	-0.002	-0.073	0.057	0.003	-0.004	0.003	0.006	0.050	-0.039
31.H	-0.006	-0.151	0.019	0.003	0.002	-0.004	0.007	0.057	-0.025
32.H	0.100	-0.089	0.133	0.004	-0.011	0.016	-0.017	0.078	-0.099
33.C	-0.003	0.080	0.055	-0.004	0.007	0.005	0.001	-0.044	-0.036
34.H	-0.007	0.156	0.016	-0.004	0.025	0.006	0.004	-0.052	-0.016
35.H	0.098	0.098	0.130	0.011	0.001	0.002	-0.025	-0.076	-0.101
36.N	-0.018	0.074	0.026	-0.015	-0.005	0.016	-0.016	-0.065	0.005
37.H	-0.007	0.066	0.074	-0.008	-0.020	0.042	-0.018	-0.070	-0.009
38.C	0.040	-0.052	-0.009	0.019	-0.004	-0.006	-0.011	0.035	-0.003
39.H	0.060	-0.103	-0.079	0.067	-0.017	-0.018	0.055	0.054	0.033
40.H	0.028	-0.023	-0.042	0.007	0.041	-0.036	-0.022	0.079	-0.028
41.C	0.007	-0.097	-0.007	-0.013	-0.020	-0.004	-0.012	0.042	0.016
42.H	0.003	-0.122	-0.030	-0.045	0.013	-0.109	-0.026	0.075	-0.025
43.H	-0.012	-0.045	0.005	-0.103	-0.053	0.051	-0.045	-0.020	0.036
44.C	0.027	-0.104	-0.058	0.088	-0.026	0.002	0.043	0.047	0.056
45.H	-0.001	-0.220	-0.131	0.046	-0.152	-0.106	0.030	0.016	0.022
46.H	0.173	-0.095	-0.051	0.253	-0.009	0.003	0.088	0.050	0.054
47.N	0.003	0.060	-0.016	0.005	0.050	0.073	0.006	0.001	0.066
48.C	0.022	0.087	0.006	-0.029	0.008	0.105	-0.031	-0.043	0.067
49.C	-0.029	0.034	0.049	0.044	0.036	0.129	0.113	-0.040	0.096
50.H	-0.056	0.056	0.112	0.076	0.013	0.050	0.139	-0.049	-0.044
51.H	-0.050	0.003	0.050	0.058	0.070	0.170	0.120	-0.018	0.212
52.H	-0.022	-0.022	0.010	0.101	0.050	0.139	0.242	-0.026	0.104
53.C	0.009	0.052	-0.012	-0.024	-0.031	0.018	-0.039	-0.026	0.003
54.C	-0.078	-0.044	-0.050	0.035	0.000	-0.138	0.015	0.001	-0.143
55.H	-0.208	-0.029	-0.030	0.086	0.040	-0.205	0.039	0.028	-0.181
56.C	-0.027	-0.052	-0.104	-0.066	-0.020	-0.043	-0.069	-0.006	-0.072
57.F	0.085	0.028	0.104	0.008	0.041	0.012	0.003	0.063	0.032
58.C	-0.032	-0.048	-0.127	-0.149	-0.042	0.016	-0.146	-0.040	-0.012
59.H	-0.007	-0.094	-0.166	-0.223	-0.114	0.104	-0.212	-0.120	0.066
60.C	-0.041	-0.064	0.037	0.023	0.060	-0.127	0.001	0.035	-0.108
61.H	-0.009	-0.134	0.120	0.075	0.081	-0.176	0.037	0.043	-0.133
62.C	-0.010	0.035	0.017	-0.016	-0.003	-0.047	-0.022	0.000	-0.040
63.O	0.026	0.069	0.021	-0.057	-0.051	0.006	-0.005	-0.004	0.074

	412.657	421.274	447.902						
	-----			-----			-----		
1.Mn	0.000	0.013	0.001	-0.057	0.001	0.002	-0.034	-0.002	-0.014
2.O	0.031	-0.088	0.061	0.007	-0.079	0.010	0.021	-0.173	0.081
3.C	0.001	-0.060	-0.012	0.010	-0.068	-0.007	-0.071	-0.081	0.032
4.C	-0.039	0.055	0.014	-0.026	0.055	0.042	-0.031	-0.003	-0.032
5.H	-0.021	0.136	0.110	-0.026	0.128	0.135	0.042	0.004	-0.045
6.C	-0.052	0.050	-0.108	0.020	0.030	-0.066	-0.022	0.009	-0.021
7.H	-0.057	0.104	-0.109	0.030	0.024	-0.077	-0.028	-0.054	-0.003
8.C	-0.024	0.044	-0.104	0.028	0.049	-0.039	0.046	0.043	-0.006
9.F	0.073	-0.021	0.084	0.070	0.040	0.040	0.036	0.074	0.006
10.C	-0.066	0.027	-0.050	-0.042	0.018	0.035	0.040	-0.029	0.003
11.H	-0.206	0.032	0.001	-0.173	0.040	0.102	0.037	-0.098	-0.088
12.C	0.017	-0.061	-0.031	0.044	-0.072	-0.035	-0.039	0.014	0.065
13.C	0.014	-0.011	-0.014	0.022	-0.021	-0.047	-0.006	0.124	0.018
14.C	0.103	0.075	0.047	0.079	0.073	0.007	-0.080	-0.013	-0.108
15.H	0.075	0.034	-0.005	0.044	0.031	-0.003	-0.051	0.016	-0.130
16.H	0.076	0.119	0.184	0.050	0.124	0.124	-0.048	-0.068	-0.292
17.H	0.239	0.131	0.000	0.179	0.138	-0.047	-0.210	-0.150	-0.001
18.N	-0.017	0.027	0.014	-0.034	0.038	-0.017	0.048	0.073	0.033
19.C	-0.044	-0.041	0.056	-0.094	-0.069	0.048	0.109	0.005	0.016
20.H	-0.032	-0.082	0.085	-0.063	-0.196	0.131	0.091	0.081	-0.031
21.H	-0.085	-0.043	0.044	-0.232	-0.053	0.044	0.148	-0.050	-0.030
22.C	0.002	-0.041	0.047	0.005	-0.062	0.032	-0.013	-0.024	0.012
23.H	0.035	-0.031	0.161	0.044	-0.035	0.166	-0.055	-0.096	-0.118
24.H	0.107	-0.013	-0.019	0.121	-0.065	-0.039	-0.123	0.048	0.077
25.C	-0.037	-0.047	-0.005	-0.033	-0.035	0.017	0.002	-0.027	-0.001
26.H	-0.036	-0.052	0.001	-0.098	-0.062	0.049	0.007	-0.025	-0.005
27.H	-0.030	-0.052	0.021	-0.012	0.012	0.078	0.002	-0.046	0.012
28.N	0.018	0.014	-0.044	0.047	0.025	-0.044	0.015	0.003	-0.019
29.H	0.007	0.015	-0.086	0.036	0.015	-0.087	0.017	0.010	-0.014
30.C	0.029	0.052	-0.007	0.005	0.060	-0.040	-0.003	0.016	-0.019
31.H	0.024	0.043	-0.046	0.010	0.171	0.000	-0.001	0.058	-0.005
32.H	0.053	0.036	0.032	-0.124	0.046	-0.076	-0.052	0.010	-0.033
33.C	-0.029	0.060	0.010	0.003	-0.057	-0.037	0.000	-0.022	-0.020
34.H	-0.025	0.060	0.046	0.008	-0.167	0.009	0.001	-0.062	-0.008
35.H	-0.043	0.043	-0.022	-0.129	-0.045	-0.077	-0.045	-0.015	-0.029
36.N	-0.021	0.021	0.046	0.046	-0.024	-0.038	0.015	-0.004	-0.025

37.H	-0.009	0.023	0.092	0.035	-0.015	-0.078	0.016	-0.014	-0.021
38.C	0.039	-0.051	0.005	-0.029	0.031	0.017	-0.002	0.036	-0.005
39.H	0.040	-0.059	-0.005	-0.095	0.059	0.049	0.017	0.031	-0.013
40.H	0.031	-0.056	-0.023	-0.009	-0.017	0.077	-0.002	0.069	0.005
41.C	-0.001	-0.048	-0.050	0.005	0.058	0.026	-0.016	0.028	0.020
42.H	-0.037	-0.040	-0.172	0.041	0.034	0.151	-0.062	0.109	-0.125
43.H	-0.114	-0.016	0.020	0.111	0.064	-0.038	-0.135	-0.058	0.091
44.C	0.049	-0.050	-0.063	-0.092	0.067	0.042	0.130	-0.008	0.019
45.H	0.036	-0.100	-0.094	-0.062	0.193	0.121	0.106	-0.113	-0.042
46.H	0.096	-0.050	-0.052	-0.228	0.050	0.041	0.192	0.060	-0.040
47.N	0.019	0.026	-0.018	-0.033	-0.034	-0.017	0.054	-0.084	0.044
48.C	-0.013	-0.013	0.012	0.021	0.021	-0.044	-0.004	-0.137	0.024
49.C	-0.121	0.083	-0.062	0.075	-0.067	0.011	-0.092	0.012	-0.123
50.H	-0.094	0.041	0.004	0.042	-0.028	0.000	-0.060	-0.022	-0.141
51.H	-0.092	0.125	-0.223	0.047	-0.113	0.123	-0.055	0.068	-0.332
52.H	-0.278	0.148	-0.012	0.168	-0.131	-0.039	-0.239	0.166	-0.010
53.C	-0.017	-0.065	0.037	0.041	0.066	-0.035	-0.040	-0.012	0.070
54.C	0.070	0.031	0.060	-0.038	-0.015	0.037	0.041	0.030	0.002
55.H	0.223	0.034	0.005	-0.157	-0.034	0.100	0.034	0.102	-0.099
56.C	0.029	0.052	0.114	0.028	-0.047	-0.030	0.048	-0.047	-0.008
57.F	-0.080	-0.027	-0.092	0.065	-0.039	0.036	0.038	-0.078	0.010
58.C	0.063	0.060	0.115	0.022	-0.028	-0.057	-0.026	-0.009	-0.026
59.H	0.074	0.122	0.108	0.031	-0.020	-0.067	-0.034	0.057	-0.007
60.C	0.042	0.057	-0.010	-0.023	-0.049	0.039	-0.037	0.002	-0.034
61.H	0.022	0.142	-0.117	-0.025	-0.112	0.127	0.040	-0.010	-0.043
62.C	0.000	-0.065	0.019	0.010	0.062	-0.010	-0.076	0.093	0.030
63.O	-0.031	-0.096	-0.065	0.002	0.070	0.002	0.025	0.196	0.085

449.054

466.627

468.682

1.Mn	0.002	-0.019	0.001	-0.002	0.000	0.007	0.000	-0.019	0.000
2.O	-0.036	0.139	-0.063	0.000	-0.052	-0.003	-0.022	0.103	-0.032
3.C	0.037	0.066	-0.022	-0.058	0.000	0.022	0.065	0.023	-0.026
4.C	0.024	0.009	0.013	0.004	-0.010	-0.060	0.008	0.003	0.056
5.H	-0.021	-0.009	0.006	0.063	-0.051	-0.132	-0.060	0.032	0.116
6.C	0.027	-0.002	0.029	-0.014	0.014	0.023	0.021	-0.017	-0.012
7.H	0.030	0.020	0.023	-0.028	-0.035	0.049	0.043	0.030	-0.048
8.C	-0.013	-0.023	0.017	0.038	0.025	0.012	-0.047	-0.023	0.006

9.F	-0.014	-0.029	-0.008	0.026	0.055	0.001	-0.027	-0.057	-0.009
10.C	-0.009	0.009	0.005	0.065	-0.042	-0.024	-0.062	0.048	0.027
11.H	0.009	0.063	0.072	0.133	-0.080	-0.094	-0.113	0.094	0.102
12.C	0.018	-0.011	-0.046	-0.067	0.030	0.055	0.080	-0.033	-0.069
13.C	-0.007	-0.110	-0.025	-0.034	0.012	0.000	0.037	-0.059	-0.004
14.C	0.098	0.027	0.102	0.047	0.020	0.019	-0.038	-0.030	0.016
15.H	0.072	-0.005	0.089	0.049	0.007	-0.071	-0.050	-0.025	0.128
16.H	0.066	0.084	0.309	0.039	0.033	0.084	-0.041	-0.025	-0.012
17.H	0.254	0.152	0.002	0.124	-0.003	0.032	-0.091	0.036	-0.031
18.N	-0.048	-0.082	-0.060	0.020	-0.064	-0.070	-0.036	0.038	0.056
19.C	-0.146	-0.028	-0.013	-0.082	-0.025	0.002	0.049	0.045	-0.017
20.H	-0.105	-0.194	0.098	-0.023	-0.246	0.165	-0.008	0.279	-0.178
21.H	-0.280	0.061	0.056	-0.307	0.095	0.097	0.293	-0.075	-0.112
22.C	0.020	0.019	-0.033	0.026	0.042	-0.081	-0.023	-0.024	0.089
23.H	0.060	0.109	0.088	0.024	0.096	-0.096	0.005	-0.053	0.189
24.H	0.114	-0.080	-0.086	-0.006	-0.017	-0.058	0.087	0.008	0.019
25.C	0.012	0.049	0.020	0.013	0.072	0.000	-0.020	-0.074	-0.011
26.H	-0.060	0.029	0.044	-0.121	0.051	0.017	0.107	-0.038	-0.052
27.H	0.021	0.122	0.033	0.032	0.206	0.024	-0.037	-0.213	-0.025
28.N	0.005	-0.003	0.029	-0.002	-0.039	0.025	0.013	0.015	-0.043
29.H	0.005	-0.021	0.031	0.002	-0.051	0.044	0.006	0.026	-0.076
30.C	-0.012	-0.024	0.004	0.001	-0.046	0.057	0.027	0.060	-0.008
31.H	-0.010	-0.010	0.023	-0.002	-0.094	0.032	0.023	0.059	-0.039
32.H	-0.031	-0.016	-0.017	0.066	-0.057	0.108	0.038	0.040	0.030
33.C	0.013	-0.025	-0.003	0.000	0.050	0.055	-0.027	0.059	0.003
34.H	0.011	-0.012	-0.020	-0.003	0.099	0.030	-0.023	0.058	0.034
35.H	0.031	-0.017	0.017	0.067	0.062	0.106	-0.039	0.037	-0.037
36.N	-0.006	-0.005	-0.028	-0.003	0.040	0.024	-0.013	0.015	0.042
37.H	-0.006	-0.023	-0.032	0.000	0.051	0.045	-0.006	0.026	0.076
38.C	-0.013	0.048	-0.021	0.014	-0.074	0.001	0.021	-0.071	0.013
39.H	0.059	0.027	-0.043	-0.123	-0.051	0.018	-0.102	-0.034	0.053
40.H	-0.024	0.120	-0.036	0.033	-0.213	0.028	0.037	-0.206	0.029
41.C	-0.019	0.019	0.034	0.027	-0.044	-0.083	0.023	-0.024	-0.085
42.H	-0.052	0.099	-0.069	0.023	-0.099	-0.104	-0.006	-0.053	-0.186
43.H	-0.095	-0.073	0.079	-0.011	0.013	-0.059	-0.087	0.007	-0.016
44.C	0.132	-0.026	0.014	-0.081	0.026	0.001	-0.045	0.045	0.016
45.H	0.094	-0.186	-0.089	-0.022	0.255	0.162	0.009	0.273	0.167
46.H	0.264	0.056	-0.053	-0.312	-0.094	0.101	-0.283	-0.068	0.109
47.N	0.042	-0.073	0.059	0.021	0.062	-0.072	0.036	0.034	-0.053

48.C	0.009	-0.095	0.024	-0.035	-0.016	0.002	-0.036	-0.060	0.006
49.C	-0.087	0.021	-0.090	0.047	-0.019	0.018	0.037	-0.030	-0.016
50.H	-0.066	-0.006	-0.073	0.050	-0.009	-0.076	0.049	-0.027	-0.125
51.H	-0.058	0.066	-0.273	0.040	-0.028	0.079	0.040	-0.023	0.007
52.H	-0.224	0.130	-0.009	0.121	0.010	0.036	0.084	0.038	0.031
53.C	-0.012	-0.007	0.036	-0.069	-0.030	0.058	-0.078	-0.030	0.068
54.C	0.002	0.004	-0.005	0.067	0.042	-0.027	0.061	0.046	-0.028
55.H	-0.017	0.047	-0.059	0.137	0.080	-0.101	0.110	0.089	-0.102
56.C	0.008	-0.019	-0.016	0.041	-0.025	0.012	0.047	-0.022	-0.007
57.F	0.011	-0.020	0.008	0.026	-0.057	0.003	0.025	-0.055	0.011
58.C	-0.025	-0.002	-0.028	-0.016	-0.014	0.024	-0.022	-0.016	0.011
59.H	-0.027	0.014	-0.023	-0.033	0.037	0.051	-0.045	0.031	0.047
60.C	-0.021	0.007	-0.009	0.003	0.009	-0.063	-0.010	0.001	-0.054
61.H	0.012	-0.011	0.003	0.063	0.047	-0.136	0.056	0.027	-0.112
62.C	-0.029	0.058	0.015	-0.060	0.003	0.022	-0.063	0.025	0.024
63.O	0.033	0.121	0.051	0.000	0.057	-0.003	0.022	0.103	0.030

495.939

500.941

509.747

	495.939			500.941			509.747		
	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1.Mn	0.000	0.008	0.000	-0.013	0.000	-0.007	0.002	0.001	0.000
2.O	-0.095	-0.041	-0.021	0.006	0.019	0.027	-0.091	0.014	0.041
3.C	-0.118	-0.015	0.027	0.068	-0.037	-0.068	0.011	-0.076	-0.134
4.C	-0.070	-0.017	-0.063	-0.004	0.007	0.030	-0.101	-0.003	-0.023
5.H	0.017	-0.070	-0.159	-0.114	0.083	0.164	-0.262	0.090	0.150
6.C	-0.015	-0.026	-0.021	-0.001	-0.001	0.006	-0.020	-0.044	-0.002
7.H	0.045	-0.213	-0.075	-0.078	0.078	0.097	-0.127	-0.101	0.148
8.C	0.028	0.090	0.081	0.027	-0.040	-0.052	0.095	0.006	-0.014
9.F	0.066	0.116	-0.023	-0.020	-0.020	0.003	0.027	0.088	-0.024
10.C	0.058	-0.031	0.030	-0.038	0.032	0.028	-0.012	0.035	0.099
11.H	0.117	-0.097	-0.074	-0.150	0.103	0.152	-0.174	0.126	0.260
12.C	-0.003	-0.022	0.013	0.038	-0.012	-0.039	0.074	-0.046	-0.082
13.C	0.038	-0.092	-0.027	-0.028	0.064	0.026	-0.034	0.010	0.031
14.C	-0.007	-0.024	0.037	0.005	0.009	-0.013	-0.002	-0.028	0.038
15.H	-0.048	-0.053	0.145	0.042	0.038	-0.087	0.045	0.020	-0.001
16.H	-0.041	0.034	0.061	0.036	-0.043	-0.021	0.035	-0.089	0.070
17.H	-0.001	0.071	-0.034	-0.006	-0.054	0.034	-0.012	-0.038	0.046
18.N	-0.008	-0.042	-0.029	-0.011	0.042	0.046	-0.040	0.016	0.063
19.C	-0.045	0.042	-0.024	0.041	-0.048	0.021	0.033	-0.030	0.004

20.H	-0.055	0.177	-0.061	0.044	-0.209	0.041	0.014	-0.093	-0.038
21.H	0.075	-0.016	-0.071	-0.087	0.028	0.086	0.021	0.007	0.041
22.C	-0.016	0.011	0.079	0.022	-0.008	-0.102	0.013	-0.012	-0.065
23.H	0.049	0.051	0.292	-0.054	-0.048	-0.353	-0.038	-0.043	-0.232
24.H	0.186	-0.037	-0.044	-0.218	0.043	0.044	-0.145	0.021	0.031
25.C	-0.013	-0.033	0.002	0.015	0.043	-0.005	0.013	0.026	0.000
26.H	0.087	0.005	-0.044	-0.117	-0.002	0.047	-0.060	-0.006	0.041
27.H	-0.026	-0.148	-0.010	0.033	0.193	0.010	0.021	0.112	0.001
28.N	0.012	0.003	-0.023	-0.015	-0.012	0.026	-0.015	0.006	0.023
29.H	0.006	0.009	-0.046	-0.008	-0.020	0.057	-0.009	0.004	0.046
30.C	0.016	0.033	-0.003	-0.007	-0.034	0.032	-0.011	-0.021	0.003
31.H	0.013	0.036	-0.022	-0.011	-0.098	-0.001	-0.009	-0.033	0.017
32.H	0.020	0.018	0.023	0.073	-0.026	0.057	-0.006	-0.007	-0.019
33.C	-0.017	0.036	0.002	-0.006	0.034	0.031	0.012	-0.023	0.000
34.H	-0.015	0.045	0.017	-0.010	0.097	-0.006	0.011	-0.039	-0.009
35.H	-0.013	0.019	-0.022	0.076	0.026	0.057	0.002	-0.007	0.021
36.N	-0.013	0.004	0.024	-0.015	0.012	0.024	0.014	0.004	-0.024
37.H	-0.007	0.013	0.051	-0.009	0.020	0.054	0.008	0.001	-0.049
38.C	0.014	-0.035	-0.001	0.015	-0.042	-0.005	-0.014	0.027	-0.002
39.H	-0.093	0.007	0.048	-0.113	0.003	0.044	0.062	-0.007	-0.043
40.H	0.030	-0.159	0.015	0.032	-0.186	0.013	-0.023	0.116	-0.006
41.C	0.018	0.010	-0.084	0.021	0.005	-0.098	-0.014	-0.011	0.065
42.H	-0.052	0.047	-0.315	-0.051	0.037	-0.340	0.039	-0.038	0.240
43.H	-0.201	-0.039	0.049	-0.209	-0.043	0.042	0.151	0.021	-0.035
44.C	0.048	0.046	0.024	0.039	0.047	0.020	-0.034	-0.032	-0.004
45.H	0.058	0.189	0.059	0.042	0.201	0.035	-0.016	-0.097	0.038
46.H	-0.080	-0.013	0.075	-0.084	-0.024	0.084	-0.017	0.004	-0.042
47.N	0.007	-0.044	0.033	-0.011	-0.039	0.046	0.040	0.016	-0.063
48.C	-0.040	-0.096	0.031	-0.026	-0.059	0.026	0.033	0.011	-0.030
49.C	0.007	-0.026	-0.038	0.004	-0.008	-0.012	0.002	-0.027	-0.035
50.H	0.050	-0.060	-0.148	0.039	-0.038	-0.079	-0.043	0.020	0.001
51.H	0.043	0.035	-0.067	0.034	0.040	-0.022	-0.034	-0.087	-0.062
52.H	-0.003	0.076	0.034	-0.008	0.051	0.030	0.013	-0.039	-0.043
53.C	0.005	-0.022	-0.015	0.037	0.011	-0.038	-0.073	-0.043	0.082
54.C	-0.061	-0.034	-0.027	-0.036	-0.030	0.030	0.014	0.031	-0.097
55.H	-0.128	-0.101	0.087	-0.145	-0.094	0.151	0.176	0.116	-0.259
56.C	-0.025	0.090	-0.087	0.027	0.035	-0.049	-0.090	0.005	0.014
57.F	-0.067	0.118	0.019	-0.018	0.017	0.001	-0.024	0.083	0.020
58.C	0.014	-0.025	0.023	0.000	0.003	0.005	0.016	-0.041	0.004

59.H	-0.051	-0.215	0.088	-0.074	-0.066	0.095	0.119	-0.099	-0.138
60.C	0.069	-0.014	0.066	-0.006	-0.006	0.028	0.096	0.000	0.020
61.H	-0.025	-0.069	0.172	-0.112	-0.075	0.160	0.253	0.086	-0.155
62.C	0.122	-0.013	-0.031	0.063	0.035	-0.067	-0.014	-0.071	0.132
63.O	0.096	-0.041	0.025	0.003	-0.017	0.026	0.089	0.015	-0.039

522.569	523.846	532.899
---------	---------	---------

	522.569			523.846			532.899		
	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1.Mn	0.070	0.000	-0.009	0.026	0.000	0.005	-0.013	-0.005	0.000
2.O	-0.060	-0.003	0.060	-0.025	0.001	0.016	-0.020	0.008	-0.020
3.C	-0.051	-0.025	-0.122	-0.014	-0.011	-0.039	-0.012	0.005	0.045
4.C	-0.127	0.002	-0.079	-0.045	-0.005	-0.022	0.009	-0.006	0.023
5.H	-0.262	0.019	-0.011	-0.087	0.004	0.004	0.078	-0.024	-0.022
6.C	-0.019	-0.062	0.011	-0.014	-0.023	-0.003	0.000	0.001	-0.028
7.H	-0.091	-0.214	0.126	-0.034	-0.070	0.030	0.075	-0.019	-0.124
8.C	0.093	0.022	0.037	0.024	0.008	0.009	-0.053	0.030	0.031
9.F	0.034	0.108	-0.033	0.008	0.032	-0.012	0.007	-0.012	-0.002
10.C	0.030	0.013	0.088	0.007	0.012	0.026	-0.002	-0.004	-0.019
11.H	-0.029	0.078	0.186	-0.017	0.030	0.055	0.025	-0.044	-0.078
12.C	0.024	-0.018	-0.079	0.020	-0.005	-0.024	0.032	-0.023	-0.003
13.C	-0.039	-0.046	0.002	-0.002	-0.009	0.010	0.039	-0.014	-0.005
14.C	0.005	-0.036	0.056	-0.006	-0.018	0.021	0.001	0.007	0.003
15.H	0.050	0.014	0.052	0.002	-0.008	0.026	-0.038	-0.027	0.064
16.H	0.034	-0.083	0.152	0.000	-0.027	0.027	-0.025	0.051	-0.024
17.H	0.031	0.021	0.013	-0.011	-0.011	0.016	-0.012	0.036	-0.018
18.N	-0.031	-0.057	0.026	-0.001	-0.008	0.020	-0.028	0.068	0.034
19.C	-0.005	0.005	-0.018	0.010	0.026	-0.006	0.017	-0.028	0.014
20.H	-0.036	0.121	-0.106	0.003	0.035	-0.027	0.014	-0.121	0.012
21.H	0.148	-0.024	-0.033	0.040	0.050	0.022	-0.062	-0.008	0.026
22.C	-0.008	-0.002	0.042	0.005	0.033	-0.053	0.011	-0.021	-0.042
23.H	-0.006	0.021	0.040	0.035	0.011	0.060	-0.030	-0.047	-0.176
24.H	-0.006	-0.047	0.044	0.109	0.094	-0.121	-0.117	0.013	0.035
25.C	0.041	0.008	0.044	-0.075	-0.018	-0.098	0.006	0.007	0.001
26.H	0.077	0.017	0.033	-0.016	-0.008	-0.100	-0.055	-0.020	0.035
27.H	0.034	-0.036	0.037	-0.085	-0.040	-0.134	0.013	0.078	0.006
28.N	0.005	-0.004	0.031	-0.028	0.036	-0.046	-0.009	0.003	0.011
29.H	0.010	-0.034	0.059	-0.047	0.057	-0.131	-0.005	0.008	0.027
30.C	-0.044	-0.038	-0.084	0.097	0.085	0.170	-0.009	-0.013	-0.005

31.H	-0.056	-0.131	-0.198	0.123	0.243	0.406	-0.007	-0.012	0.011
32.H	0.105	-0.004	-0.076	-0.176	0.034	0.136	-0.018	-0.004	-0.026
33.C	-0.045	0.037	-0.084	0.097	-0.079	0.172	0.011	-0.024	-0.008
34.H	-0.057	0.128	-0.200	0.124	-0.231	0.412	0.011	-0.057	-0.009
35.H	0.104	0.002	-0.078	-0.175	-0.030	0.138	-0.020	-0.004	0.009
36.N	0.004	0.005	0.032	-0.028	-0.038	-0.044	0.021	0.007	-0.023
37.H	0.010	0.035	0.060	-0.047	-0.061	-0.127	0.015	0.000	-0.048
38.C	0.041	-0.008	0.045	-0.075	0.013	-0.098	-0.011	0.016	0.006
39.H	0.073	-0.015	0.036	-0.019	0.004	-0.099	0.114	-0.045	-0.068
40.H	0.035	0.030	0.036	-0.085	0.031	-0.134	-0.027	0.168	-0.007
41.C	-0.008	0.004	0.038	0.006	-0.035	-0.055	-0.025	-0.041	0.100
42.H	-0.009	-0.017	0.024	0.035	-0.009	0.055	0.064	-0.093	0.394
43.H	-0.018	0.046	0.045	0.107	-0.097	-0.119	0.252	0.032	-0.067
44.C	-0.003	-0.003	-0.017	0.010	-0.025	-0.005	-0.041	-0.055	-0.015
45.H	-0.036	-0.116	-0.106	0.003	-0.030	-0.026	-0.023	-0.223	0.025
46.H	0.150	0.024	-0.030	0.038	-0.050	0.026	0.072	-0.018	-0.043
47.N	-0.035	0.054	0.029	-0.002	0.009	0.021	0.080	0.148	-0.094
48.C	-0.038	0.048	0.001	-0.003	0.009	0.011	-0.093	-0.059	0.026
49.C	0.006	0.038	0.057	-0.006	0.019	0.021	-0.005	0.011	-0.019
50.H	0.050	-0.013	0.058	0.004	0.008	0.025	0.089	-0.070	-0.191
51.H	0.034	0.087	0.154	0.001	0.031	0.029	0.061	0.121	0.006
52.H	0.030	-0.023	0.014	-0.010	0.012	0.017	0.012	0.124	0.060
53.C	0.029	0.020	-0.084	0.021	0.005	-0.027	-0.072	-0.050	0.026
54.C	0.029	-0.010	0.092	0.006	-0.012	0.029	-0.014	-0.011	0.039
55.H	-0.033	-0.073	0.194	-0.023	-0.032	0.064	-0.118	-0.109	0.202
56.C	0.093	-0.023	0.042	0.027	-0.007	0.009	0.126	0.087	-0.112
57.F	0.035	-0.111	-0.031	0.008	-0.033	-0.012	-0.025	-0.006	0.014
58.C	-0.018	0.064	0.007	-0.013	0.024	-0.004	-0.001	-0.015	0.071
59.H	-0.086	0.229	0.113	-0.037	0.072	0.033	-0.202	-0.125	0.324
60.C	-0.132	-0.006	-0.078	-0.047	0.004	-0.022	0.014	-0.011	-0.029
61.H	-0.267	-0.021	-0.009	-0.094	-0.007	0.009	-0.145	-0.077	0.117
62.C	-0.052	0.023	-0.125	-0.013	0.011	-0.043	0.059	0.022	-0.095
63.O	-0.064	0.003	0.059	-0.026	-0.001	0.017	0.039	0.005	0.036

533.598

583.149

596.639

1.Mn	-0.033	0.002	0.000	0.000	-0.019	0.001	0.083	0.000	0.025
2.O	0.040	0.001	0.031	-0.164	0.057	-0.069	-0.157	0.055	-0.046

3.C	0.072	-0.029	-0.086	0.033	-0.080	0.079	0.014	-0.067	0.065
4.C	0.032	0.009	-0.017	0.071	-0.107	0.055	0.029	-0.136	0.031
5.H	-0.122	0.090	0.138	0.142	-0.002	0.167	0.079	-0.046	0.130
6.C	0.000	0.027	0.071	-0.077	0.030	-0.017	-0.112	-0.005	-0.025
7.H	-0.207	0.179	0.325	-0.181	0.193	0.100	-0.222	0.106	0.107
8.C	0.121	-0.098	-0.124	0.047	-0.006	-0.121	0.058	0.004	-0.110
9.F	-0.029	-0.006	0.019	0.017	0.033	0.016	0.021	0.058	0.002
10.C	-0.023	0.014	0.032	-0.044	0.013	-0.001	-0.031	0.034	0.005
11.H	-0.138	0.117	0.196	-0.209	-0.023	0.002	-0.193	0.000	0.008
12.C	-0.072	0.050	0.033	0.028	-0.020	0.123	0.046	-0.010	0.113
13.C	-0.092	0.073	0.030	0.074	0.038	0.030	0.098	0.011	0.029
14.C	-0.006	-0.008	-0.025	-0.021	-0.006	-0.017	-0.020	-0.026	0.016
15.H	0.087	0.066	-0.215	-0.100	-0.090	0.015	-0.126	-0.132	0.106
16.H	0.060	-0.120	-0.012	-0.063	0.063	-0.218	-0.080	0.072	-0.197
17.H	0.008	-0.140	0.072	-0.114	-0.112	0.064	-0.129	-0.100	0.073
18.N	0.086	-0.145	-0.093	0.042	0.068	-0.085	0.025	0.092	-0.075
19.C	-0.040	0.050	-0.008	-0.039	0.012	-0.030	-0.041	0.018	-0.046
20.H	-0.018	0.197	0.040	0.016	-0.096	0.117	0.011	-0.082	0.092
21.H	0.040	0.016	-0.034	-0.238	0.010	-0.051	-0.218	0.003	-0.077
22.C	-0.024	0.042	0.098	-0.004	-0.017	-0.006	-0.006	-0.025	-0.008
23.H	0.062	0.098	0.379	0.009	-0.010	0.043	0.005	-0.021	0.030
24.H	0.241	-0.029	-0.061	0.040	-0.058	-0.031	0.030	-0.069	-0.027
25.C	-0.011	-0.015	0.007	-0.005	-0.016	0.009	-0.003	-0.021	0.010
26.H	0.106	0.041	-0.065	0.005	-0.020	0.017	0.021	-0.027	0.021
27.H	-0.026	-0.159	-0.001	-0.008	-0.029	0.007	-0.003	-0.039	0.009
28.N	0.020	-0.007	-0.023	-0.001	0.004	0.004	0.002	0.002	0.004
29.H	0.016	0.008	-0.042	-0.003	0.002	-0.006	-0.005	-0.037	-0.020
30.C	0.009	0.022	-0.014	0.002	0.004	0.002	-0.008	-0.006	-0.014
31.H	0.011	0.072	0.004	0.002	0.002	0.000	-0.010	-0.027	-0.041
32.H	-0.049	0.003	-0.009	0.003	0.005	0.000	0.027	0.004	-0.016
33.C	0.000	-0.006	-0.012	-0.002	0.004	-0.002	-0.008	0.006	-0.015
34.H	0.003	-0.042	0.014	-0.002	0.001	0.000	-0.010	0.026	-0.041
35.H	-0.049	0.000	-0.025	-0.004	0.006	0.000	0.027	-0.005	-0.016
36.N	0.007	0.002	-0.007	0.001	0.004	-0.004	0.002	-0.002	0.005
37.H	0.007	-0.012	-0.009	0.003	0.001	0.006	-0.006	0.036	-0.021
38.C	-0.004	0.005	0.004	0.005	-0.016	-0.008	-0.002	0.021	0.009
39.H	0.031	-0.013	-0.018	-0.005	-0.021	-0.017	0.019	0.028	0.021
40.H	-0.009	0.050	0.002	0.007	-0.028	-0.006	-0.003	0.036	0.008
41.C	-0.008	-0.012	0.036	0.004	-0.017	0.007	-0.005	0.026	-0.009

42.H	0.020	-0.028	0.128	-0.008	-0.013	-0.036	0.004	0.024	0.021
43.H	0.078	0.010	-0.017	-0.035	-0.056	0.030	0.024	0.067	-0.026
44.C	-0.014	-0.013	0.005	0.037	0.013	0.029	-0.039	-0.019	-0.045
45.H	-0.001	-0.043	0.039	-0.016	-0.096	-0.111	0.011	0.085	0.086
46.H	-0.020	-0.006	-0.004	0.232	0.010	0.051	-0.215	-0.004	-0.078
47.N	0.039	0.046	-0.040	-0.039	0.072	0.080	0.021	-0.100	-0.068
48.C	-0.033	-0.040	0.017	-0.077	0.033	-0.029	0.106	0.000	0.025
49.C	-0.003	0.000	-0.016	0.021	-0.005	0.017	-0.020	0.028	0.015
50.H	0.030	-0.026	-0.098	0.103	-0.093	-0.023	-0.135	0.142	0.125
51.H	0.022	0.042	-0.030	0.065	0.073	0.212	-0.087	-0.088	-0.191
52.H	-0.005	0.070	0.034	0.113	-0.104	-0.053	-0.130	0.084	0.057
53.C	-0.025	-0.017	0.022	-0.025	-0.022	-0.122	0.042	0.011	0.116
54.C	-0.018	-0.007	0.008	0.044	0.014	0.000	-0.033	-0.037	0.007
55.H	-0.077	-0.045	0.077	0.207	-0.021	-0.003	-0.197	-0.005	0.015
56.C	0.043	0.042	-0.064	-0.049	-0.002	0.122	0.063	-0.005	-0.116
57.F	-0.015	0.013	0.012	-0.017	0.033	-0.017	0.021	-0.060	0.005
58.C	0.000	-0.019	0.028	0.077	0.030	0.015	-0.115	0.004	-0.023
59.H	-0.086	-0.105	0.133	0.182	0.189	-0.109	-0.233	-0.107	0.124
60.C	0.029	-0.001	0.006	-0.070	-0.108	-0.050	0.030	0.138	0.023
61.H	-0.024	-0.041	0.080	-0.138	-0.007	-0.165	0.075	0.050	0.128
62.C	0.041	0.016	-0.025	-0.032	-0.082	-0.075	0.012	0.069	0.062
63.O	0.012	-0.007	0.005	0.163	0.057	0.065	-0.157	-0.055	-0.042

606.145

606.906

640.845

	606.145			606.906			640.845		
	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1.Mn	0.020	0.000	0.009	0.000	-0.002	0.000	-0.004	0.003	0.000
2.O	-0.048	0.020	-0.020	-0.046	0.020	-0.025	-0.104	0.040	-0.070
3.C	0.034	-0.037	-0.008	0.041	-0.043	-0.011	-0.022	-0.018	0.036
4.C	-0.024	-0.005	0.065	-0.024	0.011	0.081	0.066	0.065	-0.014
5.H	0.004	0.022	0.090	0.013	0.036	0.101	0.131	0.079	-0.015
6.C	0.012	-0.021	-0.062	0.031	-0.019	-0.071	0.069	0.087	0.030
7.H	0.126	-0.073	-0.206	0.180	-0.084	-0.260	0.064	0.125	0.034
8.C	-0.087	0.064	0.079	-0.110	0.076	0.103	0.017	0.000	-0.013
9.F	0.016	0.001	-0.008	0.018	-0.006	-0.008	0.038	0.002	0.034
10.C	0.012	-0.016	-0.029	0.016	-0.028	-0.036	-0.049	-0.143	0.041
11.H	0.026	-0.071	-0.103	0.048	-0.092	-0.127	-0.122	-0.159	0.044
12.C	0.082	-0.055	-0.040	0.088	-0.067	-0.055	-0.081	-0.097	-0.006
13.C	-0.085	0.128	0.087	-0.115	0.158	0.099	-0.091	-0.011	-0.048

14.C	-0.008	0.000	0.029	-0.007	0.010	0.022	0.003	0.063	-0.101
15.H	0.085	0.055	-0.255	0.119	0.090	-0.336	0.087	0.148	-0.164
16.H	0.064	-0.129	-0.055	0.088	-0.160	-0.055	0.052	-0.012	0.070
17.H	0.002	-0.244	0.210	0.019	-0.281	0.236	0.094	0.129	-0.153
18.N	0.048	-0.045	-0.051	0.059	-0.070	-0.057	-0.026	-0.059	0.061
19.C	-0.021	0.011	-0.020	-0.023	0.012	-0.020	0.068	-0.027	0.065
20.H	0.004	-0.002	0.045	0.003	0.014	0.045	0.014	0.066	-0.076
21.H	-0.069	0.015	-0.019	-0.059	0.022	-0.013	0.235	-0.033	0.074
22.C	-0.007	-0.002	0.005	-0.008	0.003	0.004	0.014	0.020	0.027
23.H	0.012	0.008	0.068	0.018	0.017	0.091	-0.020	-0.001	-0.091
24.H	0.052	-0.035	-0.030	0.071	-0.036	-0.042	-0.090	0.101	0.088
25.C	-0.001	-0.006	0.007	-0.002	-0.004	0.006	0.009	0.019	-0.009
26.H	0.020	-0.001	0.001	0.022	0.003	-0.002	-0.005	0.027	-0.025
27.H	-0.002	-0.030	0.008	-0.005	-0.034	0.006	0.007	0.040	-0.022
28.N	0.005	-0.003	0.001	0.005	-0.001	0.001	-0.011	0.001	-0.005
29.H	0.004	-0.008	-0.004	0.004	0.002	-0.003	-0.007	0.010	0.008
30.C	-0.003	-0.002	-0.008	0.002	0.002	0.000	-0.002	0.003	-0.004
31.H	-0.004	-0.001	-0.016	0.002	0.009	-0.001	-0.002	-0.013	-0.008
32.H	0.001	-0.002	-0.007	-0.004	-0.001	0.002	0.013	0.003	0.002
33.C	-0.003	0.001	-0.008	-0.002	0.003	-0.001	0.000	0.004	0.002
34.H	-0.004	-0.002	-0.016	-0.002	0.008	-0.001	0.001	-0.012	0.003
35.H	0.000	0.002	-0.007	0.004	0.000	-0.003	-0.013	0.004	-0.003
36.N	0.006	0.003	0.001	-0.004	0.000	-0.001	0.012	0.002	0.006
37.H	0.004	0.007	-0.006	-0.003	0.002	0.003	0.009	0.009	-0.007
38.C	-0.001	0.007	0.008	0.002	-0.004	-0.004	-0.009	0.021	0.010
39.H	0.025	0.000	0.001	-0.018	0.002	0.002	0.005	0.031	0.027
40.H	-0.004	0.038	0.008	0.005	-0.029	-0.003	-0.007	0.044	0.024
41.C	-0.008	0.001	0.005	0.007	0.002	-0.003	-0.017	0.022	-0.030
42.H	0.016	-0.009	0.086	-0.015	0.012	-0.075	0.022	0.001	0.102
43.H	0.066	0.042	-0.039	-0.060	-0.030	0.037	0.101	0.114	-0.101
44.C	-0.025	-0.014	-0.024	0.019	0.011	0.018	-0.077	-0.032	-0.072
45.H	0.005	0.002	0.056	-0.003	0.010	-0.039	-0.018	0.072	0.079
46.H	-0.084	-0.021	-0.023	0.052	0.019	0.012	-0.260	-0.038	-0.084
47.N	0.061	0.056	-0.065	-0.049	-0.054	0.050	0.028	-0.066	-0.065
48.C	-0.106	-0.156	0.111	0.091	0.126	-0.084	0.101	-0.009	0.055
49.C	-0.010	-0.001	0.033	0.006	0.008	-0.016	-0.004	0.074	0.111
50.H	0.107	-0.079	-0.315	-0.095	0.079	0.269	-0.097	0.170	0.180
51.H	0.081	0.157	-0.076	-0.071	-0.126	0.055	-0.058	-0.015	-0.075
52.H	0.001	0.307	0.248	-0.011	-0.233	-0.185	-0.104	0.146	0.165

53.C	0.099	0.066	-0.050	-0.071	-0.053	0.042	0.092	-0.113	0.008
54.C	0.015	0.020	-0.037	-0.013	-0.021	0.030	0.057	-0.168	-0.043
55.H	0.031	0.084	-0.129	-0.035	-0.072	0.105	0.140	-0.189	-0.042
56.C	-0.107	-0.075	0.098	0.088	0.058	-0.082	-0.020	0.001	0.016
57.F	0.020	-0.001	-0.009	-0.015	-0.004	0.006	-0.044	0.002	-0.039
58.C	0.017	0.021	-0.077	-0.023	-0.013	0.058	-0.076	0.099	-0.037
59.H	0.156	0.074	-0.254	-0.141	-0.055	0.209	-0.068	0.141	-0.044
60.C	-0.026	0.008	0.082	0.017	0.003	-0.068	-0.075	0.073	0.016
61.H	0.010	-0.026	0.116	-0.015	0.026	-0.088	-0.150	0.090	0.017
62.C	0.043	0.048	-0.009	-0.034	-0.037	0.007	0.026	-0.021	-0.041
63.O	-0.061	-0.026	-0.026	0.042	0.017	0.021	0.123	0.051	0.080

646.816

699.190

700.137

	646.816	699.190	700.137						
1.Mn	0.059	0.000	-0.006	0.003	0.005	0.004	-0.007	0.002	-0.008
2.O	-0.152	0.061	-0.089	0.017	0.000	0.004	0.046	-0.003	0.009
3.C	-0.029	-0.025	0.052	0.013	0.003	0.041	0.051	-0.006	0.105
4.C	0.073	0.053	-0.016	0.014	-0.088	0.059	0.040	-0.246	0.182
5.H	0.161	0.080	-0.009	0.040	-0.102	0.034	0.100	-0.265	0.140
6.C	0.059	0.098	0.027	-0.040	-0.041	0.001	-0.103	-0.120	-0.006
7.H	0.043	0.141	0.044	-0.025	-0.022	-0.020	-0.060	-0.055	-0.066
8.C	0.026	0.008	-0.024	0.003	0.006	-0.011	-0.003	0.023	-0.022
9.F	0.053	0.018	0.039	0.014	0.039	-0.009	0.040	0.109	-0.026
10.C	-0.064	-0.176	0.053	0.003	0.053	-0.028	0.014	0.148	-0.086
11.H	-0.185	-0.206	0.053	-0.001	0.072	-0.004	0.031	0.190	-0.046
12.C	-0.085	-0.129	0.003	0.016	0.017	-0.011	0.029	0.061	-0.016
13.C	-0.101	-0.007	-0.049	-0.035	-0.014	-0.013	-0.100	-0.043	-0.039
14.C	0.000	0.070	-0.112	0.003	0.031	-0.050	0.008	0.095	-0.155
15.H	0.091	0.160	-0.189	0.045	0.076	-0.077	0.132	0.226	-0.227
16.H	0.054	-0.014	0.060	0.026	-0.004	0.043	0.074	-0.006	0.121
17.H	0.096	0.126	-0.158	0.056	0.076	-0.086	0.166	0.231	-0.262
18.N	-0.025	-0.060	0.061	-0.025	-0.039	0.034	-0.067	-0.124	0.097
19.C	0.075	-0.026	0.066	-0.008	-0.018	0.011	-0.024	-0.046	0.024
20.H	0.022	0.070	-0.074	-0.035	0.042	-0.064	-0.102	0.144	-0.191
21.H	0.257	-0.030	0.079	0.096	-0.016	0.023	0.310	-0.040	0.062
22.C	0.017	0.023	0.026	-0.002	0.006	-0.001	-0.007	0.021	-0.008
23.H	-0.020	-0.004	-0.098	0.001	0.026	0.006	0.009	0.084	0.028
24.H	-0.092	0.117	0.089	0.003	0.009	-0.004	0.021	0.022	-0.026

25.C	0.004	0.019	-0.014	0.005	0.011	-0.004	0.012	0.030	-0.013
26.H	0.008	0.028	-0.027	-0.008	0.008	-0.001	-0.014	0.024	-0.006
27.H	0.001	0.034	-0.034	0.007	0.022	-0.001	0.016	0.060	-0.010
28.N	-0.013	0.009	-0.002	0.000	0.001	0.001	0.001	0.004	0.006
29.H	-0.016	-0.006	-0.014	0.001	-0.002	0.005	0.004	0.002	0.020
30.C	0.008	0.006	0.011	-0.004	-0.006	-0.006	-0.002	-0.005	0.007
31.H	0.011	0.001	0.031	-0.004	-0.001	-0.001	-0.002	-0.011	0.006
32.H	0.003	0.009	0.003	-0.011	-0.003	-0.014	0.005	-0.003	0.008
33.C	0.008	-0.005	0.012	0.004	-0.007	-0.001	0.002	-0.001	0.009
34.H	0.011	-0.002	0.032	0.004	-0.009	-0.005	0.002	0.007	0.004
35.H	0.002	-0.009	0.003	0.003	-0.004	0.003	0.012	0.000	0.016
36.N	-0.011	-0.009	-0.001	-0.001	0.004	-0.006	0.000	-0.002	0.003
37.H	-0.015	0.006	-0.015	-0.004	0.000	-0.019	0.001	-0.002	0.009
38.C	0.003	-0.016	-0.012	-0.013	0.031	0.012	0.004	-0.010	-0.005
39.H	0.009	-0.025	-0.023	0.015	0.026	0.006	-0.002	-0.009	-0.003
40.H	0.000	-0.028	-0.030	-0.016	0.061	0.008	0.004	-0.020	-0.005
41.C	0.015	-0.019	0.022	0.007	0.021	0.005	-0.002	-0.008	-0.004
42.H	-0.017	0.002	-0.085	-0.007	0.083	-0.027	0.004	-0.031	0.013
43.H	-0.078	-0.100	0.078	-0.017	0.027	0.021	0.010	-0.007	-0.012
44.C	0.064	0.023	0.056	0.023	-0.049	-0.026	-0.008	0.015	0.006
45.H	0.022	-0.057	-0.057	0.102	0.144	0.188	-0.035	-0.056	-0.065
46.H	0.215	0.027	0.067	-0.308	-0.044	-0.065	0.115	0.013	0.021
47.N	-0.020	0.051	0.048	0.070	-0.126	-0.095	-0.022	0.047	0.032
48.C	-0.086	0.003	-0.042	0.102	-0.043	0.043	-0.035	0.015	-0.015
49.C	0.000	-0.062	-0.094	-0.008	0.100	0.153	0.003	-0.036	-0.055
50.H	0.077	-0.140	-0.160	-0.134	0.234	0.222	0.046	-0.082	-0.077
51.H	0.046	0.014	0.047	-0.075	-0.010	-0.124	0.025	0.001	0.041
52.H	0.080	-0.106	-0.127	-0.168	0.240	0.257	0.058	-0.086	-0.092
53.C	-0.074	0.114	0.002	-0.029	0.059	0.017	0.004	-0.024	-0.001
54.C	-0.056	0.158	0.042	-0.013	0.150	0.080	0.006	-0.050	-0.029
55.H	-0.162	0.187	0.037	-0.021	0.193	0.032	0.019	-0.061	-0.021
56.C	0.024	-0.008	-0.022	0.001	0.023	0.023	-0.004	-0.009	-0.004
57.F	0.047	-0.015	0.035	-0.041	0.112	0.023	0.014	-0.037	-0.008
58.C	0.049	-0.085	0.025	0.103	-0.119	0.008	-0.031	0.041	-0.005
59.H	0.034	-0.120	0.043	0.062	-0.051	0.062	-0.016	0.015	-0.024
60.C	0.063	-0.046	-0.014	-0.042	-0.253	-0.174	0.014	0.083	0.063
61.H	0.141	-0.070	-0.008	-0.101	-0.273	-0.130	0.030	0.084	0.057
62.C	-0.026	0.023	0.046	-0.049	-0.009	-0.107	0.021	0.007	0.031
63.O	-0.137	-0.058	-0.077	-0.043	-0.004	-0.009	0.014	0.002	0.002

722.938

723.202

782.354

	722.938			723.202			782.354		
1.Mn	-0.001	-0.003	0.000	0.006	-0.001	0.000	-0.006	0.000	0.001
2.O	-0.022	0.017	0.011	-0.035	0.030	0.016	0.039	0.029	0.005
3.C	0.092	-0.072	-0.101	0.135	-0.109	-0.154	0.014	0.017	-0.004
4.C	-0.009	-0.002	0.037	-0.017	0.004	0.047	-0.010	-0.027	0.024
5.H	-0.186	0.145	0.284	-0.287	0.228	0.424	0.007	-0.085	-0.056
6.C	0.039	-0.029	-0.052	0.058	-0.041	-0.080	-0.024	-0.023	0.009
7.H	-0.033	0.040	0.035	-0.055	0.058	0.057	0.019	-0.061	-0.043
8.C	-0.044	0.030	0.049	-0.066	0.046	0.073	-0.001	-0.001	-0.008
9.F	0.008	0.008	-0.001	0.013	0.012	0.000	0.020	0.031	0.001
10.C	0.017	-0.015	-0.025	0.022	-0.035	-0.032	-0.014	-0.021	-0.009
11.H	0.179	-0.104	-0.186	0.260	-0.174	-0.280	-0.056	-0.011	0.015
12.C	-0.096	0.064	0.090	-0.147	0.089	0.137	-0.022	-0.017	-0.013
13.C	0.014	-0.037	-0.021	0.026	-0.051	-0.030	-0.020	-0.005	-0.015
14.C	0.010	0.002	-0.019	0.015	0.003	-0.024	-0.004	-0.019	0.034
15.H	-0.022	-0.018	0.073	-0.039	-0.034	0.112	-0.002	-0.019	0.017
16.H	-0.022	0.057	0.004	-0.035	0.087	-0.005	-0.001	-0.028	0.040
17.H	0.012	0.084	-0.078	0.009	0.114	-0.105	-0.001	-0.026	0.039
18.N	-0.013	0.004	0.004	-0.014	0.009	0.001	-0.017	0.014	-0.072
19.C	0.007	-0.007	0.007	0.011	-0.011	0.013	0.035	-0.024	-0.004
20.H	0.005	0.007	0.002	0.005	-0.005	-0.002	0.040	-0.139	0.023
21.H	0.025	-0.012	0.003	0.021	-0.017	0.007	-0.091	-0.064	-0.059
22.C	0.001	0.004	0.007	0.002	0.009	0.017	0.047	0.016	0.109
23.H	-0.003	0.006	-0.009	-0.007	0.008	-0.014	-0.048	-0.029	-0.208
24.H	-0.012	0.011	0.015	-0.024	0.025	0.032	-0.230	0.028	0.279
25.C	0.003	0.006	-0.001	0.001	0.008	-0.002	0.024	0.034	0.018
26.H	-0.001	0.009	-0.006	0.011	0.017	-0.016	0.038	0.100	-0.087
27.H	0.002	0.007	-0.002	-0.002	0.003	-0.012	-0.004	0.038	-0.075
28.N	-0.002	0.000	-0.002	-0.004	0.000	-0.003	-0.069	-0.045	-0.031
29.H	-0.001	0.000	0.002	-0.005	-0.004	-0.006	-0.042	0.173	0.045
30.C	-0.001	0.000	-0.001	0.002	0.001	0.001	0.049	0.006	-0.037
31.H	-0.001	-0.004	-0.004	0.003	0.002	0.009	0.075	0.161	0.218
32.H	0.005	0.001	0.002	-0.002	0.001	0.000	-0.230	-0.048	-0.081
33.C	0.000	0.001	0.001	0.002	-0.001	0.002	0.050	-0.009	-0.036
34.H	0.000	-0.003	0.000	0.003	-0.002	0.009	0.076	-0.154	0.220
35.H	-0.003	0.001	-0.001	-0.004	-0.001	-0.001	-0.225	0.045	-0.077

36.N	0.003	0.000	0.003	-0.003	-0.001	-0.002	-0.071	0.045	-0.034
37.H	0.003	-0.002	0.001	-0.004	0.004	-0.007	-0.043	-0.170	0.049
38.C	-0.003	0.008	0.001	0.000	-0.005	-0.002	0.025	-0.035	0.020
39.H	-0.004	0.015	0.012	0.011	-0.013	-0.011	0.041	-0.107	-0.090
40.H	-0.001	0.007	0.006	-0.003	0.000	-0.010	-0.004	-0.041	-0.078
41.C	-0.002	0.007	-0.013	0.001	-0.007	0.012	0.049	-0.014	0.115
42.H	0.005	0.009	0.013	-0.005	-0.005	-0.009	-0.050	0.027	-0.217
43.H	0.020	0.019	-0.027	-0.017	-0.019	0.024	-0.241	-0.024	0.293
44.C	-0.011	-0.011	-0.011	0.007	0.007	0.009	0.037	0.025	-0.005
45.H	-0.007	0.004	-0.001	0.002	0.008	-0.002	0.042	0.145	0.021
46.H	-0.030	-0.017	-0.005	0.009	0.011	0.005	-0.097	0.066	-0.064
47.N	0.018	0.007	-0.004	-0.008	-0.007	-0.001	-0.018	-0.017	-0.076
48.C	-0.023	-0.053	0.033	0.019	0.032	-0.020	-0.020	0.005	-0.016
49.C	-0.015	0.004	0.025	0.010	-0.002	-0.014	-0.005	0.021	0.035
50.H	0.036	-0.032	-0.111	-0.028	0.027	0.075	-0.002	0.022	0.018
51.H	0.035	0.086	-0.007	-0.024	-0.059	-0.004	-0.001	0.030	0.040
52.H	-0.015	0.125	0.110	0.004	-0.074	-0.064	-0.002	0.030	0.041
53.C	0.146	0.090	-0.138	-0.098	-0.055	0.093	-0.024	0.018	-0.014
54.C	-0.025	-0.027	0.036	0.015	0.026	-0.020	-0.016	0.023	-0.010
55.H	-0.272	-0.155	0.286	0.174	0.115	-0.190	-0.059	0.015	0.014
56.C	0.066	0.043	-0.075	-0.043	-0.028	0.049	-0.001	0.001	-0.009
57.F	-0.011	0.011	0.000	0.008	-0.007	0.001	0.022	-0.033	0.002
58.C	-0.060	-0.039	0.080	0.039	0.024	-0.055	-0.026	0.025	0.008
59.H	0.052	0.058	-0.058	-0.038	-0.037	0.041	0.018	0.063	-0.046
60.C	0.015	0.001	-0.050	-0.012	-0.005	0.027	-0.011	0.030	0.024
61.H	0.283	0.212	-0.432	-0.193	-0.147	0.284	0.004	0.088	-0.060
62.C	-0.137	-0.104	0.156	0.088	0.069	-0.105	0.015	-0.019	-0.003
63.O	0.033	0.027	-0.017	-0.024	-0.021	0.011	0.043	-0.031	0.006

788.657

801.553

804.634

1.Mn	0.000	-0.004	0.000	0.028	0.000	0.000	-0.001	-0.002	0.000
2.O	0.054	0.042	0.007	-0.101	-0.094	-0.004	0.147	0.132	-0.003
3.C	0.027	0.021	-0.014	-0.051	-0.013	0.049	0.046	0.053	-0.027
4.C	-0.019	-0.032	0.036	0.060	0.013	-0.041	-0.057	-0.040	0.008
5.H	0.024	-0.125	-0.098	-0.070	0.200	0.244	-0.085	-0.147	-0.125
6.C	-0.035	-0.028	0.012	0.078	0.030	-0.010	-0.093	-0.056	-0.022
7.H	0.038	-0.093	-0.076	-0.096	0.204	0.199	-0.040	-0.177	-0.080

8.C	0.000	-0.001	-0.013	-0.003	0.005	0.030	-0.009	0.007	-0.023
9.F	0.027	0.042	0.002	-0.038	-0.055	-0.009	0.057	0.075	0.010
10.C	-0.020	-0.037	-0.011	0.034	0.111	-0.010	-0.056	-0.167	0.031
11.H	-0.087	-0.028	0.020	0.180	0.132	-0.029	-0.234	-0.238	0.000
12.C	-0.035	-0.024	-0.011	0.061	0.046	-0.021	-0.070	-0.079	0.024
13.C	-0.022	-0.003	-0.019	-0.012	-0.004	-0.001	0.021	0.010	0.008
14.C	-0.005	-0.025	0.045	-0.002	0.000	-0.006	0.006	0.011	-0.003
15.H	-0.008	-0.031	0.026	0.021	0.025	-0.013	-0.027	-0.027	-0.002
16.H	-0.003	-0.033	0.038	0.009	-0.018	0.046	-0.010	0.035	-0.091
17.H	-0.009	-0.043	0.059	0.026	0.029	-0.029	-0.035	-0.044	0.040
18.N	-0.015	0.019	-0.100	-0.011	-0.022	0.005	0.020	0.028	0.021
19.C	0.038	-0.034	-0.004	-0.030	-0.022	-0.019	0.032	0.043	0.018
20.H	0.044	-0.138	0.026	-0.045	0.014	-0.059	0.051	-0.001	0.068
21.H	-0.093	-0.108	-0.093	0.038	-0.046	-0.037	-0.038	0.109	0.080
22.C	0.055	0.018	0.146	0.015	0.000	0.032	-0.028	-0.006	-0.084
23.H	-0.060	-0.019	-0.242	-0.012	0.044	-0.075	0.031	-0.072	0.139
24.H	-0.279	0.041	0.352	-0.079	-0.047	0.093	0.163	0.040	-0.204
25.C	0.035	0.038	0.011	0.027	0.021	0.012	-0.047	-0.034	-0.008
26.H	0.012	0.117	-0.121	-0.014	0.038	-0.024	0.049	-0.072	0.071
27.H	0.014	0.074	-0.070	0.020	0.072	-0.026	-0.042	-0.134	0.034
28.N	-0.059	-0.048	-0.059	-0.042	-0.033	-0.009	0.055	0.045	0.043
29.H	-0.041	0.065	0.005	-0.014	0.140	0.077	0.020	-0.111	-0.083
30.C	0.013	0.058	0.000	0.034	-0.005	-0.029	-0.009	-0.047	0.000
31.H	0.008	-0.035	-0.023	0.053	0.117	0.158	-0.005	0.032	0.011
32.H	0.099	0.016	0.107	-0.176	-0.045	-0.063	-0.078	-0.008	-0.093
33.C	-0.010	0.057	-0.004	0.035	-0.002	-0.029	0.004	-0.047	0.005
34.H	-0.004	-0.044	0.039	0.053	-0.107	0.158	-0.002	0.048	-0.034
35.H	-0.113	0.016	-0.112	-0.162	0.042	-0.050	0.102	-0.012	0.101
36.N	0.055	-0.043	0.059	-0.050	0.038	-0.016	-0.049	0.039	-0.043
37.H	0.039	0.052	-0.003	-0.017	-0.148	0.090	-0.019	-0.087	0.072
38.C	-0.033	0.035	-0.011	0.033	-0.026	0.014	0.042	-0.031	0.007
39.H	-0.012	0.114	0.114	-0.018	-0.050	-0.033	-0.043	-0.071	-0.067
40.H	-0.014	0.071	0.064	0.025	-0.090	-0.030	0.039	-0.120	-0.027
41.C	-0.052	0.014	-0.140	0.019	0.000	0.045	0.025	-0.005	0.081
42.H	0.057	-0.015	0.229	-0.017	-0.054	-0.093	-0.030	-0.067	-0.125
43.H	0.266	0.033	-0.335	-0.103	0.053	0.121	-0.152	0.035	0.190
44.C	-0.037	-0.032	0.004	-0.033	0.027	-0.022	-0.026	0.040	-0.016
45.H	-0.042	-0.132	-0.023	-0.051	-0.013	-0.066	-0.041	0.003	-0.058
46.H	0.091	-0.099	0.090	0.041	0.060	-0.049	0.029	0.099	-0.075

47.N	0.014	0.021	0.096	-0.014	0.026	0.000	-0.020	0.024	-0.023
48.C	0.020	-0.002	0.018	-0.014	0.006	-0.003	-0.020	0.011	-0.010
49.C	0.005	-0.025	-0.043	-0.003	0.002	-0.005	-0.005	0.013	0.003
50.H	0.008	-0.032	-0.025	0.024	-0.027	-0.009	0.023	-0.021	0.012
51.H	0.003	-0.032	-0.035	0.010	0.023	0.057	0.007	0.032	0.088
52.H	0.009	-0.043	-0.056	0.029	-0.036	-0.033	0.031	-0.048	-0.040
53.C	0.034	-0.023	0.010	0.068	-0.058	-0.021	0.056	-0.079	-0.013
54.C	0.020	-0.037	0.012	0.042	-0.131	-0.011	0.055	-0.154	-0.029
55.H	0.084	-0.031	-0.016	0.198	-0.167	-0.014	0.193	-0.235	0.032
56.C	0.000	-0.001	0.013	0.000	-0.002	0.032	0.015	0.011	0.012
57.F	-0.027	0.041	-0.004	-0.045	0.064	-0.012	-0.054	0.069	-0.010
58.C	0.035	-0.029	-0.011	0.088	-0.039	-0.003	0.077	-0.059	0.039
59.H	-0.037	-0.089	0.077	-0.075	-0.208	0.196	0.117	-0.110	-0.017
60.C	0.019	-0.032	-0.034	0.064	-0.022	-0.038	0.040	-0.048	0.014
61.H	-0.022	-0.119	0.099	-0.041	-0.198	0.242	0.162	-0.076	0.015
62.C	-0.027	0.021	0.014	-0.054	0.023	0.047	-0.028	0.063	0.002
63.O	-0.053	0.041	-0.008	-0.120	0.109	-0.006	-0.142	0.119	0.003

807.838

809.125

839.564

1.Mn	0.003	0.001	0.000	-0.014	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.004
2.O	0.014	-0.010	-0.010	0.081	0.031	-0.018	-0.020	-0.030	0.000
3.C	-0.042	0.037	0.058	-0.054	0.080	0.087	-0.014	-0.001	0.011
4.C	0.037	-0.031	-0.052	0.039	-0.062	-0.082	0.024	-0.016	0.017
5.H	-0.218	0.151	0.267	-0.385	0.192	0.384	-0.005	0.000	0.051
6.C	0.029	-0.023	-0.039	0.014	-0.058	-0.072	0.033	-0.003	0.016
7.H	-0.210	0.145	0.255	-0.355	0.173	0.386	0.002	0.058	0.051
8.C	-0.019	0.013	0.025	-0.035	0.021	0.032	-0.011	0.000	0.011
9.F	0.004	-0.001	-0.005	0.026	0.024	-0.004	0.005	0.005	-0.003
10.C	-0.008	0.006	0.010	-0.034	-0.049	0.029	0.004	0.030	-0.035
11.H	0.044	-0.023	-0.042	-0.004	-0.126	-0.075	-0.012	0.098	0.054
12.C	0.020	-0.014	-0.023	0.011	-0.051	-0.030	-0.011	0.011	-0.032
13.C	-0.006	0.005	0.001	0.000	0.011	0.007	-0.030	-0.002	-0.028
14.C	-0.002	0.001	0.007	-0.001	0.007	0.008	-0.010	-0.030	0.036
15.H	0.008	0.006	-0.019	0.002	0.002	-0.035	0.008	-0.009	0.039
16.H	0.006	-0.013	0.004	0.007	-0.008	-0.033	-0.001	-0.046	0.104
17.H	0.006	-0.016	0.019	-0.005	-0.043	0.045	0.015	0.010	0.007
18.N	-0.003	-0.003	-0.011	0.005	0.005	-0.003	-0.018	0.018	-0.060

19.C	0.000	-0.007	-0.003	0.006	0.009	0.003	0.056	-0.039	0.007
20.H	0.001	-0.022	-0.002	0.007	-0.004	0.009	0.059	-0.127	0.027
21.H	-0.016	-0.014	-0.012	-0.013	0.012	0.004	-0.055	-0.066	-0.033
22.C	0.007	0.002	0.020	0.001	-0.003	-0.005	0.005	0.024	0.063
23.H	-0.008	0.002	-0.032	0.002	-0.015	0.001	-0.029	-0.082	-0.021
24.H	-0.038	-0.002	0.047	0.005	0.006	-0.009	-0.063	0.125	0.100
25.C	0.006	0.007	0.003	-0.005	-0.007	-0.002	-0.031	0.034	-0.027
26.H	0.000	0.019	-0.018	-0.003	-0.013	0.007	0.126	0.091	-0.090
27.H	0.003	0.011	-0.007	-0.004	-0.007	0.003	-0.052	-0.108	-0.068
28.N	-0.010	-0.009	-0.009	0.005	0.003	0.002	0.046	0.056	-0.025
29.H	-0.006	0.012	0.004	0.003	-0.008	-0.006	-0.018	-0.266	-0.230
30.C	0.002	0.009	0.001	-0.003	0.001	0.002	-0.039	0.021	0.064
31.H	0.001	-0.006	-0.001	-0.005	-0.009	-0.017	-0.065	-0.170	-0.189
32.H	0.016	0.002	0.019	0.015	0.004	0.005	0.262	0.081	0.113
33.C	-0.001	0.009	-0.001	-0.004	-0.001	0.002	-0.040	-0.014	0.061
34.H	0.000	-0.009	0.007	-0.006	0.009	-0.017	-0.065	0.158	-0.193
35.H	-0.020	0.003	-0.020	0.014	-0.004	0.005	0.248	-0.075	0.100
36.N	0.008	-0.008	0.009	0.004	-0.002	0.002	0.050	-0.061	-0.023
37.H	0.005	0.011	-0.004	0.003	0.004	0.000	-0.020	0.273	-0.260
38.C	-0.005	0.004	-0.002	-0.003	0.007	-0.002	-0.036	-0.040	-0.025
39.H	0.003	0.014	0.015	-0.008	0.015	0.009	0.156	-0.108	-0.095
40.H	-0.003	0.011	0.006	-0.001	-0.001	0.003	-0.063	0.135	-0.079
41.C	-0.007	0.001	-0.018	0.000	0.003	-0.007	0.004	-0.025	0.065
42.H	0.007	0.000	0.032	0.003	0.008	0.004	-0.030	0.101	-0.018
43.H	0.035	-0.002	-0.044	0.008	-0.003	-0.012	-0.062	-0.131	0.103
44.C	-0.001	-0.004	0.003	0.002	-0.007	0.003	0.062	0.042	0.004
45.H	-0.002	-0.020	0.002	0.001	-0.006	0.003	0.066	0.151	0.028
46.H	0.017	-0.011	0.012	-0.002	-0.007	0.003	-0.068	0.061	-0.031
47.N	0.001	-0.001	0.011	0.004	-0.003	0.000	-0.020	-0.021	-0.061
48.C	0.006	0.008	-0.004	0.001	-0.007	0.005	-0.032	0.002	-0.030
49.C	0.002	0.003	-0.009	0.000	-0.005	0.005	-0.010	0.033	0.037
50.H	-0.009	0.008	0.030	0.001	-0.001	-0.022	0.009	0.010	0.042
51.H	-0.008	-0.016	0.008	0.004	0.003	-0.024	-0.002	0.051	0.110
52.H	-0.004	-0.031	-0.032	-0.005	0.029	0.028	0.016	-0.013	0.005
53.C	-0.025	-0.029	0.034	0.006	0.032	-0.019	-0.012	-0.013	-0.033
54.C	0.019	-0.010	-0.019	-0.022	0.033	0.018	0.006	-0.032	-0.036
55.H	-0.044	-0.059	0.066	-0.005	0.080	-0.050	-0.019	-0.105	0.066
56.C	0.031	0.019	-0.037	-0.022	-0.012	0.019	-0.012	0.001	0.012
57.F	-0.012	0.007	0.006	0.017	-0.016	-0.002	0.005	-0.005	-0.003

58.C	-0.035	-0.040	0.065	0.007	0.035	-0.046	0.035	0.004	0.017
59.H	0.333	0.194	-0.395	-0.220	-0.096	0.238	0.003	-0.059	0.055
60.C	-0.051	-0.049	0.082	0.022	0.037	-0.052	0.026	0.017	0.017
61.H	0.347	0.207	-0.406	-0.237	-0.108	0.236	-0.004	0.002	0.052
62.C	0.061	0.061	-0.090	-0.032	-0.049	0.054	-0.015	0.001	0.011
63.O	-0.040	-0.001	0.016	0.054	-0.021	-0.011	-0.022	0.032	-0.001

845.420 855.503 856.445

1.Mn	0.000	-0.002	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.021	0.023	0.000	-0.006	-0.006	0.000	-0.003	-0.004	0.000
3.C	0.011	0.004	-0.006	-0.008	0.002	0.003	-0.005	0.002	0.002
4.C	-0.019	0.011	-0.018	0.002	0.000	0.007	0.002	-0.001	0.006
5.H	-0.008	0.005	-0.031	-0.010	-0.001	0.011	-0.006	-0.005	0.004
6.C	-0.029	0.003	-0.015	0.026	-0.014	-0.011	0.017	-0.009	-0.005
7.H	-0.012	-0.043	-0.033	-0.056	0.050	0.091	-0.031	0.030	0.056
8.C	0.016	-0.003	-0.016	-0.046	0.029	0.053	-0.030	0.018	0.033
9.F	-0.006	-0.004	0.003	0.010	-0.003	-0.010	0.007	-0.001	-0.006
10.C	-0.016	-0.014	0.044	0.081	-0.049	-0.097	0.050	-0.030	-0.064
11.H	0.092	-0.126	-0.129	-0.494	0.299	0.515	-0.316	0.193	0.328
12.C	0.016	-0.011	0.023	-0.029	0.018	0.021	-0.021	0.012	0.013
13.C	0.024	0.002	0.022	0.003	-0.003	-0.001	0.001	-0.003	-0.002
14.C	0.007	0.024	-0.021	-0.003	-0.010	-0.016	-0.004	-0.007	-0.008
15.H	-0.006	0.005	-0.042	-0.011	-0.007	0.041	-0.005	-0.003	0.022
16.H	0.004	0.030	-0.096	-0.009	0.006	0.032	-0.005	-0.001	0.025
17.H	-0.012	-0.029	0.018	-0.018	0.037	-0.050	-0.010	0.021	-0.028
18.N	0.018	-0.018	0.033	0.005	0.002	0.006	0.005	-0.001	-0.001
19.C	-0.071	0.037	0.010	0.010	0.033	-0.003	0.000	0.036	0.005
20.H	-0.085	0.203	-0.045	0.024	-0.023	0.037	0.008	0.018	0.026
21.H	0.104	-0.006	-0.018	-0.046	0.082	0.041	-0.020	0.058	0.025
22.C	0.016	-0.023	-0.025	0.001	-0.002	-0.025	0.010	-0.002	-0.016
23.H	0.022	0.171	-0.061	0.010	-0.027	0.013	0.010	0.019	-0.024
24.H	-0.009	-0.096	-0.007	0.029	-0.019	-0.042	0.003	-0.009	-0.010
25.C	0.054	-0.058	0.000	-0.005	-0.019	0.018	0.004	-0.034	0.008
26.H	-0.281	-0.138	0.072	0.002	-0.026	0.029	-0.075	-0.057	0.031
27.H	0.103	0.266	0.086	-0.004	-0.036	0.029	0.018	0.039	0.037
28.N	-0.045	-0.058	-0.006	-0.006	-0.019	0.013	-0.010	-0.022	0.005
29.H	0.020	0.170	0.231	0.004	0.039	0.042	0.004	0.028	0.058

30.C	0.018	0.062	0.031	0.010	0.000	-0.013	0.011	0.030	0.024
31.H	0.012	-0.052	0.009	0.015	0.033	0.033	0.007	-0.028	0.001
32.H	0.124	0.016	0.153	-0.043	-0.018	-0.009	0.072	0.013	0.080
33.C	-0.015	0.064	-0.038	0.005	0.013	-0.022	-0.013	0.027	-0.019
34.H	-0.006	-0.067	0.011	0.010	-0.042	0.032	-0.011	-0.016	-0.010
35.H	-0.148	0.020	-0.163	-0.072	0.021	-0.045	-0.054	0.005	-0.071
36.N	0.042	-0.053	0.010	0.000	0.008	0.010	0.011	-0.026	-0.008
37.H	-0.020	0.148	-0.220	0.001	-0.020	0.012	-0.006	0.040	-0.072
38.C	-0.052	-0.058	0.005	-0.007	0.003	0.013	-0.003	-0.040	-0.011
39.H	0.279	-0.136	-0.063	0.036	0.000	0.014	0.076	-0.066	-0.038
40.H	-0.102	0.261	-0.089	-0.013	0.053	0.008	-0.018	0.028	-0.046
41.C	-0.017	-0.020	0.020	-0.004	0.000	-0.017	-0.010	-0.002	0.023
42.H	-0.020	0.169	0.060	0.004	0.034	0.023	-0.013	0.013	0.018
43.H	0.016	-0.083	-0.001	0.027	0.011	-0.035	-0.012	-0.013	0.024
44.C	0.065	0.035	-0.012	0.010	-0.015	-0.004	-0.003	0.045	-0.006
45.H	0.079	0.198	0.036	0.020	0.031	0.024	-0.015	0.013	-0.039
46.H	-0.102	-0.012	0.021	-0.035	-0.050	0.029	0.032	0.078	-0.037
47.N	-0.017	-0.017	-0.026	0.003	-0.003	0.006	-0.007	0.001	0.000
48.C	-0.021	0.002	-0.018	0.002	0.001	0.000	-0.002	-0.004	0.003
49.C	-0.006	0.021	0.016	-0.001	0.006	-0.012	0.005	-0.010	0.014
50.H	0.005	0.005	0.037	-0.009	0.006	0.029	0.010	-0.007	-0.037
51.H	-0.004	0.026	0.082	-0.007	-0.006	0.019	0.009	0.000	-0.035
52.H	0.010	-0.027	-0.017	-0.012	-0.026	-0.034	0.016	0.034	0.044
53.C	-0.014	-0.010	-0.019	-0.019	-0.011	0.015	0.032	0.017	-0.022
54.C	0.015	-0.013	-0.038	0.055	0.032	-0.066	-0.080	-0.046	0.100
55.H	-0.084	-0.107	0.120	-0.334	-0.187	0.351	0.497	0.282	-0.522
56.C	-0.014	-0.002	0.014	-0.031	-0.018	0.036	0.046	0.026	-0.053
57.F	0.005	-0.003	-0.003	0.006	0.002	-0.007	-0.010	-0.002	0.010
58.C	0.025	0.003	0.013	0.017	0.009	-0.008	-0.027	-0.014	0.009
59.H	0.012	-0.035	0.028	-0.039	-0.032	0.063	0.053	0.045	-0.091
60.C	0.016	0.009	0.014	0.001	0.000	0.004	-0.002	-0.001	-0.008
61.H	0.008	0.005	0.025	-0.005	0.000	0.006	0.008	-0.006	-0.005
62.C	-0.010	0.004	0.005	-0.005	-0.001	0.002	0.007	0.002	-0.002
63.O	-0.018	0.020	-0.001	-0.004	0.003	0.000	0.005	-0.006	0.000

863.919

866.056

877.851

1.Mn 0.001 0.001 0.000 0.003 0.000 -0.002 0.005 0.000 0.001

2.O	-0.022	-0.025	0.002	-0.011	-0.010	0.001	-0.019	-0.019	0.004
3.C	-0.005	0.002	0.000	-0.004	-0.002	0.000	-0.004	0.005	-0.006
4.C	0.028	-0.028	0.031	0.012	-0.011	0.013	0.021	-0.025	0.030
5.H	-0.005	-0.039	0.032	-0.002	-0.013	0.018	-0.016	-0.049	0.015
6.C	0.032	-0.002	0.040	0.015	0.000	0.015	0.039	-0.009	0.035
7.H	0.069	0.029	-0.010	0.022	0.021	0.005	0.043	0.043	0.027
8.C	0.006	-0.021	-0.021	0.003	-0.009	-0.009	-0.012	-0.012	-0.004
9.F	0.014	0.025	0.005	0.005	0.010	0.002	0.018	0.024	0.002
10.C	-0.057	0.044	-0.002	-0.026	0.020	0.003	-0.032	0.018	-0.035
11.H	0.226	-0.059	-0.220	0.113	-0.033	-0.107	0.023	0.030	-0.038
12.C	-0.033	0.003	-0.056	-0.013	0.001	-0.026	-0.042	0.006	-0.040
13.C	-0.044	-0.017	-0.036	-0.020	-0.010	-0.012	-0.022	0.001	-0.042
14.C	-0.023	-0.024	0.024	-0.009	-0.007	0.002	-0.018	-0.034	0.047
15.H	0.051	0.051	-0.022	0.026	0.031	-0.012	0.017	0.000	0.018
16.H	0.006	-0.075	0.191	0.002	-0.026	0.092	0.000	-0.070	0.122
17.H	0.080	0.047	-0.031	0.042	0.038	-0.033	0.028	-0.010	0.028
18.N	-0.012	0.001	-0.012	-0.010	0.001	0.016	0.010	0.016	-0.050
19.C	0.081	0.138	0.001	0.057	0.058	-0.017	0.006	0.096	0.062
20.H	0.125	-0.207	0.142	0.086	-0.191	0.077	0.013	0.160	0.076
21.H	-0.222	0.343	0.179	-0.156	0.215	0.122	0.030	0.051	0.015
22.C	0.040	0.012	-0.056	-0.001	0.005	-0.045	0.042	-0.017	-0.009
23.H	0.021	-0.180	-0.064	0.008	-0.184	0.042	0.023	0.112	-0.114
24.H	0.015	0.051	-0.042	0.056	-0.005	-0.078	-0.036	0.074	0.035
25.C	-0.050	-0.089	0.058	-0.040	-0.009	0.053	0.020	-0.123	-0.026
26.H	0.042	-0.091	0.071	0.180	0.027	0.027	-0.350	-0.246	0.109
27.H	-0.056	-0.196	0.068	-0.070	-0.249	0.019	0.089	0.251	0.111
28.N	0.000	-0.045	0.039	0.007	-0.022	0.030	-0.008	0.005	-0.005
29.H	-0.013	-0.060	-0.007	-0.008	-0.019	-0.033	0.032	0.123	0.141
30.C	0.036	0.051	0.040	0.010	-0.029	-0.055	-0.011	0.039	0.010
31.H	0.033	-0.015	0.030	0.022	0.092	0.055	-0.024	-0.040	-0.097
32.H	0.100	0.014	0.131	-0.154	-0.052	-0.097	0.102	0.072	0.005
33.C	-0.029	0.058	-0.061	0.021	0.008	-0.037	-0.012	-0.033	0.007
34.H	-0.022	-0.051	-0.004	0.031	-0.073	0.063	-0.025	0.029	-0.098
35.H	-0.154	0.029	-0.161	-0.104	0.040	-0.046	0.086	-0.070	-0.009
36.N	0.004	-0.034	-0.023	0.006	0.036	0.040	-0.006	-0.010	-0.005
37.H	0.009	-0.046	-0.007	-0.013	0.045	-0.035	0.035	-0.126	0.142
38.C	0.030	-0.080	-0.030	-0.053	0.039	0.067	0.018	0.122	-0.032
39.H	0.037	-0.098	-0.054	0.176	0.009	0.051	-0.351	0.249	0.102
40.H	0.023	-0.078	-0.053	-0.083	0.290	0.031	0.089	-0.248	0.116

41.C	-0.037	0.010	0.034	0.013	-0.010	-0.061	0.041	0.016	-0.008
42.H	-0.017	-0.087	0.079	0.015	0.224	0.010	0.023	-0.113	-0.107
43.H	0.008	0.048	0.006	0.058	-0.012	-0.088	-0.035	-0.082	0.037
44.C	-0.051	0.104	-0.012	0.077	-0.099	-0.012	0.009	-0.093	0.067
45.H	-0.079	-0.113	-0.098	0.117	0.241	0.112	0.016	-0.160	0.084
46.H	0.141	0.225	-0.119	-0.214	-0.303	0.176	0.031	-0.045	0.014
47.N	0.007	0.001	0.018	-0.013	0.000	0.012	0.010	-0.019	-0.053
48.C	0.033	-0.011	0.029	-0.032	0.014	-0.023	-0.024	-0.003	-0.045
49.C	0.017	-0.020	-0.021	-0.015	0.014	0.009	-0.019	0.038	0.049
50.H	-0.036	0.034	0.014	0.040	-0.045	-0.016	0.018	0.002	0.021
51.H	-0.004	-0.061	-0.137	0.004	0.050	0.142	0.000	0.076	0.126
52.H	-0.055	0.027	0.013	0.062	-0.050	-0.038	0.028	0.011	0.030
53.C	0.025	0.003	0.042	-0.023	-0.003	-0.041	-0.044	-0.008	-0.043
54.C	0.042	0.033	0.002	-0.040	-0.031	0.001	-0.033	-0.020	-0.035
55.H	-0.160	-0.034	0.157	0.164	0.037	-0.157	0.028	-0.031	-0.042
56.C	-0.004	-0.016	0.016	0.003	0.014	-0.014	-0.013	0.013	-0.005
57.F	-0.011	0.019	-0.004	0.009	-0.017	0.004	0.019	-0.025	0.003
58.C	-0.024	-0.003	-0.031	0.025	0.002	0.026	0.041	0.010	0.037
59.H	-0.054	0.019	0.008	0.040	-0.030	0.006	0.046	-0.044	0.030
60.C	-0.021	-0.022	-0.022	0.020	0.020	0.021	0.023	0.027	0.030
61.H	0.005	-0.031	-0.022	-0.005	0.025	0.026	-0.018	0.052	0.015
62.C	0.003	0.003	0.000	-0.006	0.001	0.000	-0.004	-0.006	-0.006
63.O	0.016	-0.020	-0.001	-0.017	0.018	0.001	-0.020	0.020	0.003

891.731

912.407

919.951

1.Mn	0.000	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.005	0.000	0.001
2.O	-0.017	-0.020	0.003	0.003	0.005	0.002	0.018	0.017	-0.002
3.C	-0.011	0.007	-0.005	0.006	0.002	0.003	0.017	-0.010	0.013
4.C	0.024	-0.028	0.032	-0.003	0.003	-0.011	-0.026	0.029	-0.023
5.H	-0.031	-0.060	0.014	-0.006	0.027	0.019	0.100	0.059	-0.033
6.C	0.047	-0.011	0.041	-0.018	0.005	-0.009	-0.058	0.010	-0.067
7.H	0.049	0.053	0.036	0.003	-0.030	-0.035	-0.111	-0.026	0.001
8.C	-0.017	-0.014	-0.006	0.007	0.005	0.001	0.026	0.021	0.013
9.F	0.022	0.029	0.003	-0.006	-0.007	-0.001	-0.029	-0.036	-0.005
10.C	-0.041	0.013	-0.039	0.012	-0.004	0.011	0.060	-0.003	0.050
11.H	0.006	0.020	-0.047	0.003	-0.005	0.013	0.050	0.007	0.067
12.C	-0.046	0.001	-0.050	0.011	-0.001	0.013	0.050	0.005	0.056

13.C	-0.012	0.021	-0.050	-0.003	-0.011	0.013	-0.011	-0.042	0.036
14.C	-0.009	-0.039	0.065	-0.002	0.009	-0.021	-0.019	0.023	-0.059
15.H	-0.006	-0.038	0.056	0.012	0.024	-0.022	0.051	0.095	-0.105
16.H	-0.003	-0.057	0.079	0.001	0.007	0.011	0.012	-0.020	0.054
17.H	-0.002	-0.040	0.066	0.015	0.028	-0.036	0.059	0.064	-0.093
18.N	0.016	0.037	-0.059	-0.010	-0.011	0.018	-0.023	-0.050	0.000
19.C	0.007	0.007	0.069	0.017	0.018	-0.029	-0.018	0.102	-0.031
20.H	0.004	0.201	0.046	0.029	-0.126	0.015	-0.014	-0.113	0.000
21.H	0.111	-0.119	-0.052	-0.092	0.098	0.044	-0.133	0.197	0.054
22.C	-0.005	-0.013	-0.001	-0.004	0.000	0.007	0.089	-0.008	0.045
23.H	0.011	0.117	0.012	-0.009	-0.118	0.021	0.001	-0.037	-0.248
24.H	0.027	0.115	-0.025	0.005	-0.033	0.004	-0.173	-0.045	0.206
25.C	0.014	-0.050	-0.058	-0.012	0.007	0.020	-0.008	-0.077	0.031
26.H	-0.255	-0.147	0.057	0.024	0.062	-0.064	-0.052	-0.096	0.045
27.H	0.071	0.219	0.067	-0.016	-0.083	0.047	-0.017	0.016	-0.034
28.N	0.017	0.048	-0.002	-0.008	-0.031	-0.031	-0.020	0.018	-0.034
29.H	0.066	0.257	0.149	0.071	0.498	0.200	-0.071	-0.187	-0.200
30.C	-0.010	-0.062	-0.044	0.037	-0.020	-0.037	-0.006	0.061	0.016
31.H	-0.005	0.130	0.005	0.040	0.238	0.007	-0.017	-0.083	-0.087
32.H	-0.209	-0.034	-0.182	-0.227	-0.103	-0.021	0.141	0.128	-0.031
33.C	0.010	-0.062	0.045	-0.038	-0.021	0.040	-0.004	-0.062	0.019
34.H	0.004	0.130	-0.010	-0.043	0.241	-0.021	-0.016	0.081	-0.088
35.H	0.209	-0.030	0.181	0.234	-0.104	0.029	0.145	-0.127	-0.020
36.N	-0.017	0.048	0.002	0.009	-0.031	0.030	-0.020	-0.016	-0.033
37.H	-0.064	0.246	-0.146	-0.069	0.485	-0.208	-0.070	0.178	-0.201
38.C	-0.013	-0.045	0.058	0.012	0.007	-0.022	-0.008	0.076	0.030
39.H	0.240	-0.139	-0.049	-0.029	0.064	0.059	-0.047	0.092	0.041
40.H	-0.067	0.204	-0.067	0.017	-0.088	-0.043	-0.018	-0.012	-0.032
41.C	0.005	-0.012	-0.001	0.004	0.000	-0.004	0.088	0.008	0.044
42.H	-0.010	0.110	-0.017	0.009	-0.118	-0.018	0.001	0.035	-0.246
43.H	-0.025	0.114	0.019	-0.006	-0.035	0.000	-0.171	0.053	0.202
44.C	-0.008	0.003	-0.066	-0.017	0.019	0.028	-0.018	-0.102	-0.030
45.H	-0.005	0.188	-0.048	-0.030	-0.126	-0.014	-0.014	0.117	-0.004
46.H	-0.106	-0.115	0.053	0.093	0.099	-0.047	-0.136	-0.197	0.059
47.N	-0.014	0.038	0.057	0.010	-0.011	-0.018	-0.023	0.051	0.001
48.C	0.012	0.021	0.047	0.003	-0.011	-0.012	-0.011	0.043	0.036
49.C	0.009	-0.040	-0.061	0.001	0.009	0.020	-0.018	-0.026	-0.060
50.H	0.006	-0.038	-0.054	-0.011	0.024	0.021	0.051	-0.098	-0.103
51.H	0.004	-0.056	-0.075	-0.001	0.007	-0.011	0.012	0.018	0.050

52.H	0.002	-0.039	-0.061	-0.014	0.027	0.033	0.058	-0.066	-0.091
53.C	0.043	0.003	0.048	-0.010	-0.001	-0.012	0.049	-0.003	0.056
54.C	0.039	0.014	0.036	-0.010	-0.004	-0.011	0.060	0.004	0.049
55.H	-0.009	0.020	0.045	-0.004	-0.006	-0.011	0.042	-0.008	0.073
56.C	0.016	-0.013	0.006	-0.006	0.004	-0.001	0.027	-0.020	0.013
57.F	-0.021	0.027	-0.004	0.005	-0.006	0.001	-0.029	0.036	-0.006
58.C	-0.046	-0.011	-0.039	0.017	0.004	0.009	-0.064	-0.016	-0.059
59.H	-0.043	0.052	-0.040	0.000	-0.025	0.029	-0.077	0.050	-0.042
60.C	-0.023	-0.027	-0.029	0.003	0.004	0.009	-0.021	-0.027	-0.028
61.H	0.028	-0.058	-0.009	0.004	0.023	-0.016	0.072	-0.081	0.006
62.C	0.011	0.007	0.005	-0.006	0.002	-0.003	0.017	0.010	0.014
63.O	0.017	-0.019	-0.002	-0.003	0.005	-0.002	0.019	-0.017	-0.002

923.725

923.898

936.252

1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.003	-0.005	-0.005	-0.002	0.002	0.002	0.015	0.014	-0.002
3.C	-0.008	0.008	0.015	0.002	-0.003	-0.006	0.017	-0.009	0.020
4.C	0.058	-0.040	-0.073	-0.021	0.015	0.028	-0.007	0.013	-0.023
5.H	-0.344	0.257	0.443	0.130	-0.099	-0.168	0.077	0.106	0.062
6.C	-0.062	0.043	0.082	0.025	-0.017	-0.030	-0.073	0.019	-0.060
7.H	0.387	-0.287	-0.470	-0.145	0.110	0.179	-0.056	-0.050	-0.080
8.C	0.009	-0.006	-0.012	-0.004	0.002	0.004	0.030	0.021	0.012
9.F	-0.002	0.002	0.003	0.001	0.000	-0.001	-0.028	-0.034	-0.004
10.C	0.010	-0.006	-0.017	-0.005	0.003	0.006	0.063	-0.005	0.053
11.H	-0.073	0.043	0.070	0.027	-0.016	-0.028	0.074	0.024	0.088
12.C	-0.006	0.004	0.004	0.001	-0.002	-0.003	0.039	0.008	0.043
13.C	0.000	0.001	0.002	0.000	0.001	-0.002	-0.025	-0.028	0.006
14.C	0.003	-0.002	-0.002	0.000	0.000	0.003	-0.035	-0.009	-0.031
15.H	-0.006	-0.008	0.016	0.000	-0.001	-0.003	0.064	0.097	-0.070
16.H	-0.004	0.010	-0.004	0.001	-0.003	-0.002	0.008	-0.074	0.163
17.H	-0.008	0.007	-0.008	0.000	-0.005	0.007	0.079	0.078	-0.098
18.N	0.001	0.000	-0.002	0.000	0.002	0.000	-0.020	-0.023	-0.047
19.C	0.000	-0.001	0.001	0.000	-0.005	0.001	-0.007	0.085	0.017
20.H	0.002	0.006	0.004	0.002	0.008	0.003	-0.008	0.003	0.026
21.H	0.001	-0.005	-0.003	0.004	-0.011	-0.004	-0.044	0.087	0.013
22.C	-0.001	0.001	0.000	-0.003	0.000	-0.001	0.077	-0.013	0.041
23.H	0.000	0.011	0.002	0.000	0.008	0.007	0.007	0.025	-0.212

24.H	0.001	0.000	-0.001	0.005	-0.001	-0.006	-0.138	0.070	0.168
25.C	0.002	-0.001	-0.001	0.002	0.003	-0.001	-0.013	-0.088	-0.011
26.H	-0.007	-0.003	0.001	-0.003	0.003	-0.002	-0.120	-0.170	0.100
27.H	0.003	0.007	0.002	0.004	0.004	0.003	-0.001	0.097	-0.031
28.N	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.006	0.075	-0.011
29.H	-0.003	-0.027	-0.004	0.000	-0.004	0.004	-0.046	-0.127	-0.200
30.C	-0.003	0.006	0.005	-0.001	-0.001	0.002	-0.021	-0.044	-0.052
31.H	-0.004	-0.022	-0.004	0.000	-0.005	0.004	-0.017	0.052	-0.034
32.H	0.026	0.010	0.011	0.004	0.000	0.004	-0.121	0.045	-0.248
33.C	0.002	0.000	-0.004	0.001	0.002	-0.001	0.020	-0.042	0.054
34.H	0.002	-0.016	-0.005	0.002	-0.006	0.004	0.017	0.053	0.031
35.H	-0.015	0.000	-0.012	-0.008	0.004	-0.003	0.121	0.053	0.248
36.N	0.000	-0.001	-0.003	0.000	-0.001	-0.001	-0.005	0.075	0.009
37.H	-0.001	-0.015	-0.009	0.000	-0.007	-0.001	0.048	-0.129	0.208
38.C	-0.004	0.006	0.003	0.000	-0.002	0.001	0.014	-0.088	0.012
39.H	0.003	0.006	0.003	0.004	-0.004	-0.002	0.119	-0.173	-0.097
40.H	-0.006	0.006	-0.005	-0.001	0.003	-0.001	0.002	0.097	0.031
41.C	0.008	0.001	0.003	0.000	0.001	0.000	-0.079	-0.014	-0.041
42.H	0.000	0.016	-0.021	0.000	0.003	-0.001	-0.008	0.029	0.214
43.H	-0.014	0.002	0.016	-0.001	0.003	0.000	0.140	0.064	-0.172
44.C	-0.001	-0.011	-0.003	-0.001	0.001	-0.001	0.008	0.085	-0.019
45.H	-0.004	0.017	-0.006	-0.001	0.001	-0.002	0.009	0.001	-0.024
46.H	-0.011	-0.022	0.009	0.000	0.001	0.000	0.045	0.089	-0.015
47.N	-0.002	0.004	0.001	-0.001	0.000	0.003	0.021	-0.023	0.046
48.C	-0.001	0.004	0.002	0.000	0.000	-0.001	0.024	-0.029	-0.006
49.C	-0.002	-0.003	-0.004	-0.002	-0.002	0.003	0.034	-0.006	0.031
50.H	0.006	-0.011	-0.014	0.005	-0.006	-0.016	-0.064	0.100	0.070
51.H	0.002	0.005	0.006	0.004	0.008	-0.001	-0.008	-0.076	-0.155
52.H	0.007	-0.003	-0.004	0.006	0.009	0.010	-0.078	0.078	0.093
53.C	0.006	0.001	0.002	0.006	0.004	-0.005	-0.040	0.007	-0.044
54.C	0.000	-0.002	0.010	-0.010	-0.006	0.017	-0.063	-0.006	-0.053
55.H	0.031	0.015	-0.022	0.074	0.041	-0.073	-0.073	0.021	-0.087
56.C	-0.001	-0.003	0.005	-0.009	-0.006	0.012	-0.030	0.021	-0.013
57.F	-0.001	0.003	-0.002	0.002	0.002	-0.003	0.028	-0.034	0.006
58.C	0.019	0.014	-0.036	0.063	0.040	-0.083	0.072	0.020	0.061
59.H	-0.152	-0.099	0.178	-0.387	-0.273	0.479	0.063	-0.044	0.074
60.C	-0.023	-0.016	0.026	-0.058	-0.038	0.074	0.009	0.014	0.021
61.H	0.134	0.087	-0.170	0.342	0.245	-0.453	-0.084	0.100	-0.057
62.C	0.005	0.003	-0.005	0.008	0.008	-0.015	-0.017	-0.010	-0.019

63.O 0.000 -0.003 0.002 -0.003 -0.005 0.005 -0.015 0.014 0.002

949.233

953.037

965.525

1.Mn 0.003 0.000 -0.001 0.000 -0.002 0.000 0.007 0.000 -0.002
2.O 0.010 0.014 0.000 0.011 0.013 -0.001 -0.008 -0.004 0.002
3.C 0.016 -0.006 0.021 0.013 -0.007 0.019 -0.002 0.006 -0.008
4.C 0.000 0.002 -0.002 0.003 0.001 0.004 -0.007 0.004 -0.007
5.H 0.121 0.083 0.056 0.133 0.072 0.047 -0.065 -0.036 -0.036
6.C -0.070 0.019 -0.067 -0.066 0.018 -0.065 0.029 -0.009 0.028
7.H -0.076 0.002 -0.064 -0.075 0.014 -0.058 0.025 -0.018 0.037
8.C 0.027 0.020 0.010 0.025 0.018 0.009 -0.009 -0.006 -0.003
9.F -0.022 -0.028 -0.003 -0.020 -0.025 -0.003 0.007 0.009 0.001
10.C 0.055 -0.016 0.060 0.051 -0.017 0.059 -0.022 0.011 -0.026
11.H 0.107 0.013 0.081 0.108 0.013 0.080 -0.053 -0.012 -0.046
12.C 0.027 0.007 0.015 0.023 0.006 0.007 -0.001 -0.006 0.003
13.C -0.037 0.009 -0.023 -0.035 0.023 -0.031 0.012 -0.021 0.028
14.C -0.035 -0.048 -0.005 -0.028 -0.055 0.008 0.019 0.035 -0.016
15.H 0.055 0.064 0.043 0.038 0.034 0.079 -0.021 -0.015 -0.044
16.H -0.011 -0.081 0.254 -0.016 -0.070 0.230 0.007 0.053 -0.134
17.H 0.077 0.124 -0.133 0.054 0.109 -0.113 -0.030 -0.043 0.042
18.N -0.020 0.024 -0.051 -0.016 0.034 -0.066 -0.008 -0.021 0.038
19.C 0.056 -0.029 0.021 0.052 -0.077 0.034 0.008 0.019 -0.048
20.H 0.068 -0.052 0.055 0.048 0.002 0.020 0.022 -0.142 0.001
21.H -0.009 -0.041 0.000 0.069 -0.145 -0.036 -0.112 0.103 0.029
22.C -0.040 0.028 -0.002 -0.047 0.059 -0.019 -0.009 -0.006 0.030
23.H -0.009 -0.040 0.124 -0.003 0.066 0.135 -0.021 -0.146 0.030
24.H 0.082 0.169 -0.083 0.104 0.259 -0.121 -0.008 -0.073 0.033
25.C -0.016 -0.003 -0.032 -0.028 0.005 -0.046 0.003 0.008 0.004
26.H -0.075 0.016 -0.064 -0.057 0.013 -0.052 -0.024 0.087 -0.127
27.H 0.022 -0.020 0.116 0.003 -0.007 0.068 0.019 -0.048 0.089
28.N 0.029 -0.013 0.011 0.032 -0.030 0.065 0.006 -0.010 -0.066
29.H 0.107 0.329 0.266 0.068 0.065 0.192 0.089 0.419 0.206
30.C -0.014 -0.012 0.009 0.033 0.020 0.077 -0.028 0.035 0.046
31.H -0.025 0.045 -0.094 0.034 -0.029 0.082 -0.056 -0.006 -0.214
32.H 0.007 -0.055 0.090 0.089 -0.034 0.197 0.144 0.011 0.167
33.C -0.015 0.015 0.003 -0.032 0.018 -0.078 -0.028 -0.033 0.045
34.H -0.026 -0.055 -0.097 -0.030 -0.028 -0.069 -0.056 -0.003 -0.216

35.H	-0.004	0.056	0.075	-0.092	-0.044	-0.205	0.140	-0.006	0.164
36.N	0.028	0.011	0.006	-0.035	-0.033	-0.064	0.005	0.009	-0.068
37.H	0.104	-0.326	0.263	-0.078	0.093	-0.218	0.090	-0.420	0.217
38.C	-0.015	0.003	-0.029	0.029	0.006	0.048	0.004	-0.009	0.006
39.H	-0.071	-0.016	-0.062	0.063	0.018	0.060	-0.020	-0.093	-0.126
40.H	0.020	0.026	0.110	-0.005	-0.012	-0.078	0.018	0.053	0.087
41.C	-0.036	-0.024	0.000	0.051	0.062	0.017	-0.009	0.008	0.030
42.H	-0.009	0.051	0.112	0.004	0.056	-0.148	-0.022	0.151	0.025
43.H	0.074	-0.157	-0.069	-0.110	0.275	0.120	-0.008	0.081	0.031
44.C	0.054	0.024	0.018	-0.057	-0.080	-0.033	0.008	-0.022	-0.048
45.H	0.065	0.059	0.053	-0.055	-0.007	-0.025	0.022	0.144	-0.001
46.H	-0.018	0.027	0.005	-0.065	-0.143	0.037	-0.116	-0.107	0.033
47.N	-0.020	-0.022	-0.047	0.019	0.038	0.069	-0.008	0.022	0.039
48.C	-0.036	-0.007	-0.021	0.038	0.024	0.032	0.012	0.022	0.027
49.C	-0.033	0.043	-0.007	0.030	-0.058	-0.006	0.018	-0.036	-0.016
50.H	0.053	-0.062	0.037	-0.041	0.037	-0.082	-0.020	0.012	-0.046
51.H	-0.010	0.082	0.236	0.018	-0.081	-0.244	0.008	-0.055	-0.129
52.H	0.073	-0.119	-0.121	-0.059	0.120	0.117	-0.028	0.043	0.039
53.C	0.027	-0.006	0.015	-0.026	0.007	-0.008	-0.002	0.006	0.003
54.C	0.052	0.016	0.057	-0.055	-0.020	-0.063	-0.022	-0.012	-0.026
55.H	0.100	-0.010	0.077	-0.115	0.011	-0.086	-0.053	0.011	-0.046
56.C	0.026	-0.019	0.010	-0.027	0.019	-0.011	-0.009	0.006	-0.004
57.F	-0.021	0.026	-0.004	0.022	-0.027	0.004	0.007	-0.009	0.001
58.C	-0.067	-0.020	-0.064	0.071	0.021	0.071	0.029	0.010	0.028
59.H	-0.073	-0.003	-0.060	0.083	0.019	0.061	0.027	0.020	0.034
60.C	0.000	-0.002	-0.002	-0.003	0.001	-0.004	-0.006	-0.004	-0.007
61.H	0.115	-0.077	0.054	-0.145	0.076	-0.051	-0.068	0.034	-0.035
62.C	0.015	0.006	0.020	-0.014	-0.008	-0.021	-0.002	-0.007	-0.008
63.O	0.009	-0.013	0.000	-0.011	0.014	0.000	-0.008	0.004	0.002

979.923

991.161

1005.708

1.Mn	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001
2.O	0.003	0.002	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	-0.002	0.000
3.C	0.001	0.002	0.005	-0.002	0.003	-0.001	-0.005	0.004	0.000
4.C	0.014	-0.018	0.022	0.014	-0.020	0.021	-0.001	-0.003	0.005
5.H	0.070	0.012	0.041	0.039	0.000	0.038	-0.013	-0.024	-0.016
6.C	-0.026	0.013	-0.029	-0.014	0.010	-0.016	0.008	-0.001	0.005

7.H	-0.014	0.071	-0.053	0.005	0.077	-0.050	0.007	0.024	0.004
8.C	0.002	0.000	-0.001	-0.005	-0.005	-0.003	-0.007	-0.004	-0.003
9.F	0.002	0.001	0.001	0.006	0.007	0.002	0.004	0.005	0.001
10.C	0.006	-0.035	0.029	-0.005	-0.035	0.019	-0.016	-0.002	0.001
11.H	0.062	-0.014	0.040	0.040	-0.022	0.023	0.016	-0.028	-0.040
12.C	-0.015	0.013	-0.025	-0.018	0.013	-0.027	0.022	-0.014	-0.025
13.C	-0.018	0.053	-0.042	-0.012	0.062	-0.033	-0.081	0.090	0.072
14.C	-0.038	-0.076	0.011	-0.027	-0.074	0.006	0.107	-0.074	-0.055
15.H	0.062	0.057	0.118	0.049	0.037	0.149	-0.131	-0.228	0.532
16.H	-0.026	-0.089	0.343	-0.034	-0.054	0.303	-0.137	0.346	-0.103
17.H	0.097	0.158	-0.161	0.081	0.162	-0.167	-0.155	0.277	-0.301
18.N	0.054	0.035	0.030	0.068	0.024	0.048	0.003	-0.036	-0.007
19.C	-0.006	0.031	0.004	-0.036	0.038	-0.012	-0.002	-0.006	-0.018
20.H	0.042	0.092	0.116	0.008	0.102	0.088	-0.003	-0.042	-0.015
21.H	-0.022	0.055	0.027	-0.026	0.056	0.007	-0.014	0.014	0.001
22.C	-0.043	-0.077	-0.026	-0.018	-0.086	-0.009	0.013	0.036	0.009
23.H	0.000	-0.067	0.116	-0.001	-0.053	0.037	0.003	0.068	-0.033
24.H	0.058	-0.346	-0.073	0.000	-0.407	-0.003	-0.016	0.073	0.025
25.C	0.075	0.061	0.043	0.065	0.065	0.033	-0.014	-0.033	0.006
26.H	0.076	0.079	0.005	0.086	0.094	-0.017	-0.036	-0.037	0.010
27.H	0.061	0.015	0.013	0.033	0.047	-0.074	-0.008	-0.009	0.024
28.N	-0.041	-0.012	-0.073	-0.037	0.014	-0.085	-0.001	-0.010	0.013
29.H	-0.025	-0.035	0.011	-0.041	0.015	-0.093	-0.006	-0.019	-0.002
30.C	-0.061	0.010	-0.050	-0.006	0.004	0.036	0.006	0.019	-0.006
31.H	-0.065	-0.112	-0.088	-0.007	-0.056	0.030	0.004	0.005	-0.022
32.H	0.055	0.046	-0.062	0.049	0.007	0.061	0.013	0.035	-0.032
33.C	0.060	0.011	0.051	-0.009	-0.004	0.034	0.000	-0.021	-0.004
34.H	0.065	-0.107	0.088	-0.010	0.060	0.024	-0.003	0.013	-0.024
35.H	-0.051	0.047	0.066	0.051	-0.008	0.058	0.028	-0.036	-0.019
36.N	0.039	-0.011	0.070	-0.039	-0.016	-0.087	-0.001	0.013	0.010
37.H	0.025	-0.041	-0.010	-0.042	-0.015	-0.092	0.001	0.018	0.022
38.C	-0.073	0.057	-0.044	0.067	-0.065	0.037	-0.008	0.020	0.002
39.H	-0.073	0.074	-0.009	0.087	-0.095	-0.014	-0.028	0.019	-0.002
40.H	-0.060	0.013	-0.015	0.036	-0.050	-0.070	-0.001	0.011	0.028
41.C	0.043	-0.074	0.028	-0.020	0.087	-0.012	0.004	-0.026	0.005
42.H	0.001	-0.066	-0.112	-0.002	0.056	0.037	0.001	-0.039	-0.006
43.H	-0.059	-0.328	0.082	0.001	0.414	-0.015	-0.002	-0.059	0.007
44.C	0.004	0.030	-0.006	-0.035	-0.040	-0.010	0.004	0.007	-0.012
45.H	-0.043	0.086	-0.118	0.010	-0.102	0.096	0.002	0.035	-0.011

46.H	0.020	0.051	-0.028	-0.025	-0.057	0.010	-0.011	-0.006	0.001
47.N	-0.051	0.034	-0.028	0.069	-0.024	0.049	-0.002	0.020	-0.006
48.C	0.019	0.053	0.041	-0.014	-0.064	-0.032	-0.044	-0.046	0.042
49.C	0.037	-0.075	-0.009	-0.027	0.077	0.004	0.060	0.037	-0.032
50.H	-0.061	0.054	-0.118	0.050	-0.035	0.154	-0.074	0.133	0.284
51.H	0.026	-0.096	-0.335	-0.036	0.064	0.312	-0.075	-0.193	-0.060
52.H	-0.095	0.160	0.154	0.083	-0.171	-0.167	-0.087	-0.152	-0.158
53.C	0.014	0.014	0.024	-0.018	-0.015	-0.028	0.013	0.008	-0.013
54.C	-0.007	-0.035	-0.029	-0.005	0.037	0.019	-0.009	0.000	0.000
55.H	-0.063	-0.013	-0.042	0.042	0.023	0.025	0.008	0.015	-0.024
56.C	-0.003	0.001	0.001	-0.004	0.004	-0.003	-0.004	0.002	-0.002
57.F	-0.001	0.000	-0.001	0.006	-0.006	0.002	0.002	-0.003	0.001
58.C	0.027	0.014	0.029	-0.015	-0.011	-0.017	0.005	0.001	0.003
59.H	0.016	0.072	0.051	0.004	-0.082	-0.049	0.003	-0.010	0.004
60.C	-0.014	-0.019	-0.021	0.014	0.021	0.021	-0.001	0.001	0.002
61.H	-0.072	0.012	-0.041	0.042	0.001	0.039	-0.008	0.013	-0.012
62.C	-0.001	0.002	-0.005	-0.002	-0.003	-0.001	-0.002	-0.002	0.000
63.O	-0.003	0.002	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	0.000

1006.484

1028.370

1042.028

1.Mn	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	0.001	0.000	0.001	0.002	0.001	-0.002	-0.005	0.001
3.C	0.003	-0.002	0.001	0.009	0.001	0.006	-0.015	0.002	-0.006
4.C	-0.001	0.003	-0.004	-0.012	0.017	-0.017	0.038	-0.027	0.046
5.H	0.007	0.012	0.005	-0.028	-0.005	-0.041	0.243	0.099	0.137
6.C	-0.004	0.000	-0.002	0.009	-0.011	0.011	-0.061	0.024	-0.062
7.H	-0.006	-0.018	0.002	-0.014	-0.086	0.051	-0.034	0.143	-0.117
8.C	0.004	0.003	0.002	0.004	0.005	0.001	0.020	0.001	0.014
9.F	-0.003	-0.003	-0.001	-0.004	-0.004	-0.001	-0.007	-0.007	-0.002
10.C	0.009	0.003	-0.001	-0.002	0.027	-0.015	0.057	-0.025	0.066
11.H	-0.009	0.015	0.019	-0.023	0.000	-0.043	0.232	0.136	0.215
12.C	-0.011	0.007	0.015	0.023	-0.019	0.021	-0.071	0.025	-0.088
13.C	0.044	-0.053	-0.037	-0.023	-0.035	0.046	-0.019	-0.004	-0.068
14.C	-0.057	0.045	0.029	0.021	0.025	-0.027	0.075	0.040	0.057
15.H	0.068	0.122	-0.298	-0.025	-0.021	-0.007	-0.145	-0.208	0.045
16.H	0.077	-0.185	0.039	-0.006	0.071	-0.115	0.010	0.134	-0.376
17.H	0.080	-0.160	0.173	-0.035	0.008	-0.015	-0.236	-0.236	0.265

18.N	-0.008	0.020	0.000	-0.058	-0.011	-0.040	-0.041	-0.029	-0.008
19.C	0.011	-0.005	0.007	0.081	0.003	0.005	0.017	0.014	0.055
20.H	0.011	0.001	0.007	0.105	-0.127	0.081	-0.032	0.056	-0.068
21.H	0.002	-0.011	0.001	-0.086	0.054	0.042	0.099	0.046	0.095
22.C	-0.015	-0.008	-0.006	-0.061	0.019	0.013	0.014	-0.001	-0.037
23.H	-0.004	-0.034	0.039	-0.020	-0.070	0.176	0.020	-0.029	-0.011
24.H	0.023	-0.005	-0.029	0.089	0.118	-0.080	0.007	-0.004	-0.031
25.C	0.008	0.014	-0.004	0.049	-0.025	-0.002	0.004	0.003	0.051
26.H	0.005	0.023	-0.018	-0.138	-0.020	-0.042	0.079	-0.004	0.065
27.H	0.012	-0.004	0.019	0.121	0.005	0.257	-0.016	-0.078	0.007
28.N	0.000	-0.008	-0.002	-0.004	0.003	-0.034	-0.021	-0.025	-0.018
29.H	0.011	-0.002	0.046	0.057	-0.047	0.240	-0.024	0.011	-0.026
30.C	-0.010	0.008	0.001	-0.110	0.021	-0.056	-0.010	0.018	-0.039
31.H	-0.012	-0.037	-0.012	-0.121	-0.216	-0.137	-0.015	0.028	-0.072
32.H	0.034	0.013	0.012	0.123	0.145	-0.161	-0.015	0.016	-0.042
33.C	0.012	-0.004	-0.004	0.109	0.025	0.055	0.008	0.023	0.044
34.H	0.012	-0.034	-0.001	0.121	-0.210	0.144	0.010	0.024	0.056
35.H	-0.021	-0.009	-0.027	-0.125	0.151	0.159	0.018	0.032	0.067
36.N	-0.001	0.000	0.008	0.004	0.003	0.032	0.018	-0.028	0.003
37.H	-0.012	0.007	-0.038	-0.057	-0.054	-0.240	0.022	-0.026	0.009
38.C	-0.014	0.030	0.005	-0.048	-0.026	0.003	-0.002	-0.004	-0.036
39.H	-0.024	0.039	0.018	0.137	-0.018	0.045	-0.046	-0.013	-0.052
40.H	-0.014	0.001	-0.003	-0.118	-0.004	-0.256	0.009	-0.056	-0.014
41.C	0.020	-0.026	0.010	0.061	0.020	-0.014	-0.006	0.012	0.027
42.H	0.005	-0.066	-0.049	0.021	-0.073	-0.173	-0.014	0.012	0.000
43.H	-0.029	-0.043	0.039	-0.090	0.121	0.077	-0.014	0.025	0.031
44.C	-0.010	-0.001	-0.017	-0.082	0.002	-0.003	-0.012	-0.002	-0.031
45.H	-0.011	0.024	-0.016	-0.105	-0.132	-0.078	0.016	0.030	0.040
46.H	-0.009	-0.016	-0.001	0.089	0.054	-0.042	-0.063	0.012	-0.051
47.N	0.008	0.036	-0.004	0.058	-0.010	0.039	0.024	-0.013	0.009
48.C	-0.080	-0.091	0.072	0.023	-0.036	-0.045	0.009	-0.002	0.036
49.C	0.105	0.075	-0.056	-0.022	0.026	0.027	-0.038	0.021	-0.031
50.H	-0.129	0.237	0.528	0.026	-0.022	0.007	0.077	-0.110	-0.016
51.H	-0.139	-0.342	-0.076	0.006	0.076	0.115	-0.007	0.073	0.199
52.H	-0.149	-0.291	-0.302	0.036	0.008	0.015	0.123	-0.130	-0.138
53.C	0.021	0.012	-0.026	-0.023	-0.020	-0.020	0.036	0.014	0.044
54.C	-0.016	0.004	0.001	0.002	0.028	0.014	-0.030	-0.013	-0.033
55.H	0.014	0.027	-0.038	0.023	0.001	0.043	-0.117	0.066	-0.112
56.C	-0.007	0.005	-0.004	-0.004	0.005	-0.001	-0.011	0.001	-0.007

57.F	0.005	-0.006	0.001	0.004	-0.004	0.001	0.004	-0.004	0.001
58.C	0.008	0.001	0.005	-0.009	-0.011	-0.011	0.031	0.013	0.032
59.H	0.009	-0.027	0.001	0.014	-0.089	-0.049	0.018	0.074	0.057
60.C	0.000	0.004	0.006	0.012	0.018	0.017	-0.019	-0.014	-0.023
61.H	-0.014	0.023	-0.014	0.028	-0.002	0.040	-0.123	0.047	-0.069
62.C	-0.005	-0.004	-0.001	-0.008	0.001	-0.006	0.008	0.001	0.003
63.O	0.001	0.002	0.000	-0.001	0.002	-0.001	0.000	-0.002	-0.001

	1043.770	1044.118	1057.116
--	----------	----------	----------

	-----	-----	-----						
1.Mn	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
2.O	0.002	0.004	0.000	0.003	0.005	-0.002	-0.001	-0.001	0.000
3.C	0.007	-0.003	0.003	0.015	-0.006	0.012	-0.004	0.003	-0.006
4.C	-0.020	0.014	-0.024	-0.021	0.027	-0.032	0.000	-0.009	0.004
5.H	-0.129	-0.053	-0.072	-0.073	-0.006	-0.058	-0.039	-0.031	-0.009
6.C	0.032	-0.012	0.033	0.019	-0.018	0.024	0.008	0.004	0.005
7.H	0.019	-0.073	0.061	-0.015	-0.152	0.085	0.022	0.056	-0.019
8.C	-0.011	0.000	-0.007	0.002	0.007	0.001	-0.008	-0.005	-0.005
9.F	0.003	0.003	0.001	-0.005	-0.006	-0.001	0.005	0.005	0.001
10.C	-0.030	0.012	-0.034	-0.011	0.041	-0.032	-0.011	-0.019	0.000
11.H	-0.124	-0.074	-0.114	-0.068	-0.016	-0.087	-0.042	-0.040	-0.017
12.C	0.037	-0.013	0.046	0.042	-0.028	0.046	0.000	0.012	0.001
13.C	0.015	0.003	0.031	-0.035	-0.026	0.061	0.032	0.025	-0.021
14.C	-0.044	-0.021	-0.026	0.017	0.004	-0.039	-0.033	-0.018	0.011
15.H	0.081	0.117	-0.037	-0.011	-0.010	0.042	0.048	0.064	-0.030
16.H	-0.001	-0.086	0.207	-0.026	0.078	-0.052	0.012	-0.090	0.142
17.H	0.131	0.115	-0.129	-0.012	0.080	-0.096	0.077	0.019	-0.017
18.N	0.023	0.022	0.004	-0.051	-0.014	-0.078	0.049	0.021	0.046
19.C	-0.003	-0.030	-0.034	0.018	0.077	0.092	-0.026	-0.088	-0.075
20.H	0.019	-0.040	0.022	0.018	0.122	0.098	-0.038	-0.094	-0.115
21.H	-0.040	-0.046	-0.054	0.047	0.034	0.050	-0.004	-0.086	-0.073
22.C	-0.012	0.029	0.006	0.014	-0.101	0.008	0.016	0.127	-0.023
23.H	-0.005	0.080	0.019	0.003	-0.163	-0.016	0.022	0.289	-0.051
24.H	0.017	0.053	-0.014	-0.032	-0.060	0.037	0.019	0.223	-0.030
25.C	-0.002	-0.012	-0.007	0.011	0.032	-0.032	-0.026	-0.071	0.076
26.H	-0.037	-0.012	-0.010	0.043	-0.031	0.077	0.004	-0.098	0.118
27.H	0.008	0.012	0.024	0.000	0.068	-0.091	-0.031	-0.113	0.084
28.N	-0.006	-0.024	0.024	0.037	0.121	-0.031	-0.037	-0.068	0.030

29.H	-0.007	-0.078	0.035	0.022	0.136	-0.127	-0.054	-0.086	-0.018
30.C	0.004	0.029	-0.024	-0.025	-0.175	0.010	-0.014	0.067	-0.129
31.H	0.006	-0.010	-0.004	-0.013	0.106	0.103	-0.026	0.119	-0.201
32.H	0.008	0.059	-0.078	-0.206	-0.306	0.168	-0.065	0.117	-0.245
33.C	0.010	-0.015	0.005	-0.026	0.177	0.009	0.013	0.072	0.127
34.H	0.014	0.030	0.038	-0.013	-0.098	0.109	0.025	0.122	0.194
35.H	0.020	-0.044	-0.038	-0.204	0.311	0.166	0.062	0.128	0.246
36.N	0.007	0.007	0.030	0.039	-0.124	-0.027	0.038	-0.071	-0.029
37.H	0.008	0.073	0.045	0.025	-0.138	-0.118	0.054	-0.091	0.016
38.C	-0.004	0.010	-0.036	0.012	-0.033	-0.036	0.025	-0.072	-0.073
39.H	-0.075	0.003	-0.051	0.035	0.033	0.070	-0.001	-0.100	-0.115
40.H	0.016	-0.056	0.017	0.003	-0.078	-0.086	0.030	-0.114	-0.082
41.C	-0.019	-0.022	0.027	0.012	0.101	0.009	-0.015	0.128	0.020
42.H	-0.016	-0.076	0.026	0.000	0.163	-0.017	-0.022	0.291	0.039
43.H	0.010	-0.040	0.007	-0.032	0.061	0.038	-0.020	0.223	0.027
44.C	-0.011	0.030	-0.059	0.017	-0.075	0.089	0.025	-0.087	0.077
45.H	0.035	0.066	0.056	0.023	-0.113	0.108	0.036	-0.092	0.115
46.H	-0.091	0.057	-0.097	0.036	-0.031	0.043	0.005	-0.085	0.074
47.N	0.041	-0.033	0.010	-0.049	0.010	-0.078	-0.048	0.021	-0.045
48.C	0.023	-0.003	0.062	-0.035	0.027	0.067	-0.032	0.025	0.018
49.C	-0.078	0.038	-0.053	0.012	-0.002	-0.044	0.035	-0.019	-0.009
50.H	0.148	-0.216	-0.052	-0.002	-0.003	0.041	-0.053	0.071	0.030
51.H	-0.006	0.157	0.377	-0.027	-0.071	-0.025	-0.012	-0.099	-0.151
52.H	0.238	-0.229	-0.242	0.005	-0.101	-0.114	-0.084	0.027	0.024
53.C	0.068	0.027	0.085	0.047	0.032	0.052	-0.002	0.010	-0.004
54.C	-0.055	-0.026	-0.063	-0.015	-0.044	-0.036	0.013	-0.017	0.003
55.H	-0.223	0.127	-0.213	-0.082	0.022	-0.103	0.048	-0.042	0.024
56.C	-0.020	0.000	-0.014	0.001	-0.007	0.000	0.008	-0.004	0.005
57.F	0.006	-0.006	0.002	-0.005	0.005	-0.001	-0.005	0.005	-0.002
58.C	0.059	0.025	0.059	0.023	0.021	0.028	-0.010	0.003	-0.007
59.H	0.032	0.146	0.110	-0.013	0.171	0.090	-0.022	0.051	0.013
60.C	-0.036	-0.028	-0.044	-0.023	-0.031	-0.034	0.001	-0.008	-0.002
61.H	-0.232	0.089	-0.133	-0.088	0.008	-0.066	0.047	-0.033	0.014
62.C	0.014	0.004	0.007	0.016	0.006	0.012	0.003	0.002	0.006
63.O	0.003	-0.006	-0.001	0.003	-0.006	-0.002	0.000	-0.001	0.000

1063.031

1065.439

1077.315

1.Mn	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001
2.O	-0.004	-0.008	0.003	-0.007	-0.010	0.002	-0.001	-0.001	0.000
3.C	-0.009	0.012	-0.015	-0.017	0.013	-0.020	0.001	0.000	-0.001
4.C	0.009	-0.024	0.021	0.020	-0.032	0.034	0.001	0.001	0.002
5.H	-0.011	-0.043	0.006	0.063	-0.007	0.054	0.016	0.004	0.000
6.C	-0.003	0.016	-0.010	-0.018	0.021	-0.026	-0.003	0.001	-0.003
7.H	0.033	0.164	-0.076	0.028	0.218	-0.112	-0.003	0.001	-0.003
8.C	-0.008	-0.010	-0.004	-0.006	-0.015	0.000	0.001	-0.001	0.001
9.F	0.007	0.008	0.002	0.008	0.009	0.001	0.000	0.000	0.000
10.C	-0.002	-0.038	0.019	0.012	-0.044	0.036	0.002	0.001	0.002
11.H	0.012	-0.020	0.039	0.101	0.031	0.106	0.023	0.015	0.013
12.C	-0.021	0.026	-0.024	-0.044	0.031	-0.057	-0.005	-0.001	-0.004
13.C	0.030	0.037	-0.031	0.020	0.013	-0.030	-0.007	-0.001	0.006
14.C	-0.015	-0.022	0.014	0.006	0.005	0.015	0.009	0.000	-0.006
15.H	0.025	0.023	0.026	-0.008	-0.015	0.002	-0.009	-0.015	0.025
16.H	0.001	-0.045	0.104	0.011	-0.002	-0.005	-0.008	0.029	-0.019
17.H	0.037	0.009	-0.008	-0.020	-0.052	0.058	-0.017	0.008	-0.011
18.N	0.076	-0.009	0.078	0.051	-0.020	0.111	-0.002	-0.012	-0.002
19.C	-0.095	-0.002	-0.082	-0.018	0.000	-0.139	-0.027	0.072	0.031
20.H	-0.124	-0.063	-0.156	0.012	-0.238	-0.045	-0.022	0.077	0.049
21.H	-0.043	-0.021	-0.095	-0.229	0.075	-0.079	-0.017	0.045	0.006
22.C	0.076	0.026	0.046	-0.019	0.036	0.090	0.003	-0.117	0.038
23.H	-0.003	-0.006	-0.211	-0.049	-0.071	0.016	-0.037	-0.340	-0.027
24.H	-0.113	0.129	0.150	-0.023	0.035	0.088	-0.057	-0.185	0.074
25.C	-0.092	-0.040	-0.044	0.000	-0.049	-0.076	-0.052	0.078	-0.162
26.H	0.004	-0.056	0.008	-0.216	-0.006	-0.168	-0.033	0.145	-0.251
27.H	-0.104	-0.032	-0.093	0.077	0.082	0.161	-0.052	0.117	-0.198
28.N	0.069	0.060	0.049	0.042	0.070	-0.006	0.052	-0.074	0.134
29.H	0.053	0.204	-0.070	0.077	0.014	0.137	0.069	-0.125	0.208
30.C	-0.013	-0.097	-0.010	-0.039	-0.036	0.062	0.025	0.074	-0.032
31.H	-0.024	0.183	-0.133	-0.037	-0.164	0.074	0.023	0.017	-0.066
32.H	-0.119	-0.220	0.159	0.084	0.041	-0.004	0.056	0.109	-0.089
33.C	-0.012	0.095	-0.015	0.039	-0.037	-0.061	0.026	-0.075	-0.030
34.H	-0.023	-0.189	-0.132	0.037	-0.161	-0.063	0.023	-0.021	-0.066
35.H	-0.122	0.223	0.151	-0.085	0.039	0.000	0.054	-0.111	-0.086
36.N	0.068	-0.057	0.051	-0.043	0.069	0.003	0.051	0.079	0.133
37.H	0.052	-0.205	-0.064	-0.078	0.015	-0.137	0.068	0.129	0.204
38.C	-0.092	0.039	-0.044	0.002	-0.047	0.077	-0.052	-0.083	-0.160
39.H	0.006	0.058	0.010	0.210	0.001	0.170	-0.028	-0.153	-0.248

40.H	-0.105	0.032	-0.094	-0.072	0.077	-0.156	-0.053	-0.120	-0.196
41.C	0.077	-0.026	0.045	0.017	0.033	-0.090	0.004	0.120	0.033
42.H	-0.002	-0.002	-0.212	0.049	-0.076	-0.010	-0.037	0.341	-0.037
43.H	-0.113	-0.129	0.152	0.026	0.031	-0.092	-0.056	0.188	0.067
44.C	-0.096	0.001	-0.081	0.020	0.005	0.138	-0.027	-0.071	0.036
45.H	-0.126	0.057	-0.161	-0.009	-0.232	0.054	-0.023	-0.082	0.050
46.H	-0.039	0.020	-0.095	0.227	0.078	0.077	-0.012	-0.042	0.007
47.N	0.077	0.010	0.076	-0.051	-0.023	-0.111	-0.002	0.012	-0.004
48.C	0.030	-0.038	-0.029	-0.020	0.014	0.030	-0.008	0.001	0.006
49.C	-0.016	0.023	0.013	-0.007	0.004	-0.016	0.009	0.000	-0.005
50.H	0.027	-0.026	0.025	0.008	-0.017	-0.002	-0.010	0.016	0.025
51.H	0.001	0.051	0.110	-0.011	-0.002	0.006	-0.008	-0.030	-0.020
52.H	0.040	-0.012	-0.010	0.022	-0.055	-0.059	-0.018	-0.007	-0.010
53.C	-0.020	-0.027	-0.022	0.044	0.034	0.056	-0.005	0.001	-0.004
54.C	-0.003	0.039	0.017	-0.013	-0.046	-0.036	0.003	-0.001	0.002
55.H	0.008	0.023	0.037	-0.100	0.028	-0.110	0.024	-0.015	0.014
56.C	-0.008	0.010	-0.004	0.006	-0.015	0.000	0.001	0.001	0.001
57.F	0.007	-0.008	0.002	-0.008	0.009	-0.002	0.000	0.000	0.000
58.C	-0.003	-0.016	-0.009	0.018	0.023	0.025	-0.003	-0.001	-0.003
59.H	0.034	-0.169	-0.071	-0.030	0.232	0.109	-0.003	-0.001	-0.003
60.C	0.008	0.025	0.020	-0.019	-0.034	-0.034	0.001	-0.001	0.002
61.H	-0.017	0.045	0.003	-0.059	-0.011	-0.053	0.016	-0.004	0.000
62.C	-0.008	-0.012	-0.015	0.017	0.014	0.021	0.001	0.001	-0.001
63.O	-0.004	0.008	0.002	0.007	-0.011	-0.002	-0.001	0.001	0.000

1086.424

1088.118

1114.227

1.Mn	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.003	0.000	0.001	0.004	-0.002
3.C	-0.002	0.000	-0.001	-0.012	0.004	-0.010	0.003	-0.008	0.008
4.C	0.000	-0.003	0.001	0.007	-0.013	0.012	0.006	0.014	-0.003
5.H	-0.004	-0.001	0.006	0.017	-0.001	0.025	0.105	0.074	0.037
6.C	0.000	0.002	-0.001	-0.007	0.009	-0.010	-0.005	-0.012	0.003
7.H	0.005	0.019	-0.009	0.016	0.104	-0.052	-0.037	-0.148	0.060
8.C	-0.001	-0.002	0.000	-0.003	-0.008	0.001	0.000	-0.002	0.002
9.F	0.001	0.001	0.000	0.003	0.004	0.000	0.001	0.001	0.000
10.C	0.000	-0.002	0.001	0.008	-0.012	0.015	-0.008	0.006	-0.010
11.H	0.006	0.003	0.006	0.069	0.032	0.053	0.009	0.015	-0.004

12.C	-0.002	0.002	-0.001	-0.018	0.007	-0.027	-0.009	-0.004	-0.006
13.C	-0.001	0.004	0.002	-0.002	-0.018	0.013	-0.001	0.005	-0.007
14.C	0.003	-0.004	-0.003	0.010	0.016	-0.008	0.001	-0.001	0.003
15.H	-0.001	-0.003	0.021	-0.008	-0.005	-0.016	-0.003	-0.005	0.007
16.H	-0.006	0.013	0.006	0.006	0.023	-0.039	0.000	0.000	0.003
17.H	-0.003	0.011	-0.014	-0.018	-0.019	0.018	-0.003	-0.004	0.005
18.N	0.008	-0.009	0.004	-0.003	-0.013	0.048	0.005	0.001	0.007
19.C	-0.034	0.051	0.016	0.047	0.015	-0.081	0.000	-0.001	-0.005
20.H	-0.038	0.053	0.011	0.115	-0.170	0.107	0.001	-0.007	-0.002
21.H	-0.010	0.023	-0.010	-0.221	0.070	-0.047	-0.007	0.004	-0.001
22.C	0.011	-0.084	0.031	-0.070	0.001	0.073	-0.003	0.002	0.002
23.H	-0.031	-0.279	-0.046	-0.052	-0.034	0.144	-0.002	0.009	0.003
24.H	-0.051	-0.083	0.064	0.041	-0.027	0.005	0.001	-0.016	0.001
25.C	-0.065	0.055	-0.143	0.057	-0.028	-0.079	0.001	-0.001	-0.002
26.H	-0.033	0.104	-0.203	-0.230	-0.034	-0.105	-0.005	0.002	-0.008
27.H	-0.066	0.077	-0.171	0.137	0.183	0.141	0.002	0.007	0.000
28.N	0.040	-0.096	0.158	-0.001	0.063	0.015	-0.002	-0.002	0.001
29.H	0.056	-0.157	0.239	0.007	-0.220	0.085	-0.002	-0.006	0.001
30.C	-0.004	0.097	-0.111	-0.007	-0.052	-0.011	0.003	0.004	0.001
31.H	-0.021	0.136	-0.233	0.022	-0.100	0.260	0.003	0.001	0.002
32.H	0.000	0.132	-0.176	-0.074	0.004	-0.127	0.001	0.010	-0.010
33.C	0.005	0.090	0.110	-0.007	0.061	-0.002	-0.002	-0.003	0.001
34.H	0.017	0.122	0.184	0.023	0.119	0.276	-0.002	0.010	-0.001
35.H	0.012	0.137	0.192	-0.074	0.007	-0.108	0.008	-0.001	0.007
36.N	-0.039	-0.089	-0.156	-0.004	-0.073	0.002	-0.002	0.005	-0.007
37.H	-0.056	-0.198	-0.246	0.001	0.206	0.055	0.000	-0.005	0.001
38.C	0.054	0.054	0.153	0.063	0.032	-0.066	0.002	-0.010	0.011
39.H	0.070	0.105	0.217	-0.224	0.042	-0.086	0.030	-0.005	0.020
40.H	0.042	0.107	0.140	0.142	-0.173	0.160	-0.005	0.021	-0.005
41.C	0.000	-0.084	-0.039	-0.071	-0.008	0.070	0.003	0.010	-0.013
42.H	0.039	-0.281	0.029	-0.049	0.008	0.148	0.007	0.020	0.005
43.H	0.043	-0.086	-0.061	0.046	0.019	-0.001	0.004	-0.035	-0.014
44.C	0.027	0.053	-0.005	0.051	-0.012	-0.083	0.008	-0.003	0.032
45.H	0.020	0.027	-0.028	0.120	0.177	0.103	0.000	-0.029	0.011
46.H	0.043	0.032	0.017	-0.223	-0.070	-0.046	0.042	0.012	0.019
47.N	-0.007	-0.011	-0.011	-0.004	0.014	0.048	-0.029	0.002	-0.036
48.C	0.001	0.001	-0.004	-0.002	0.019	0.012	0.002	0.025	0.031
49.C	-0.005	-0.001	0.004	0.010	-0.017	-0.008	-0.005	-0.008	-0.014
50.H	0.002	-0.005	-0.017	-0.008	0.005	-0.019	0.013	-0.026	-0.035

51.H	0.005	0.016	0.001	0.007	-0.023	-0.040	0.001	-0.002	-0.017
52.H	0.006	0.007	0.009	-0.019	0.022	0.020	0.013	-0.016	-0.021
53.C	0.005	0.004	0.006	-0.018	-0.008	-0.027	0.044	-0.016	0.028
54.C	-0.002	-0.005	-0.004	0.008	0.013	0.015	0.034	0.027	0.045
55.H	-0.017	0.008	-0.016	0.069	-0.030	0.054	-0.047	0.076	0.011
56.C	0.001	-0.003	0.000	-0.003	0.008	0.001	0.001	-0.011	-0.008
57.F	-0.001	0.002	0.000	0.003	-0.004	0.000	-0.003	0.005	0.001
58.C	0.001	0.003	0.002	-0.007	-0.010	-0.010	0.020	-0.054	-0.010
59.H	-0.008	0.040	0.018	0.017	-0.113	-0.051	0.163	-0.670	-0.248
60.C	-0.002	-0.005	-0.003	0.007	0.013	0.012	-0.028	0.064	0.009
61.H	0.002	-0.002	-0.009	0.015	0.005	0.022	-0.480	0.331	-0.181
62.C	0.004	0.001	0.003	-0.012	-0.004	-0.010	-0.011	-0.041	-0.035
63.O	0.001	-0.002	0.000	0.000	0.004	0.000	-0.006	0.021	0.008

1114.867 1134.824 1160.687

	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.002	0.000	0.000
2.O	0.006	0.021	-0.009	-0.001	0.001	0.000	-0.006	-0.011	0.002
3.C	0.012	-0.041	0.037	0.008	-0.001	0.005	0.017	0.019	0.001
4.C	0.027	0.065	-0.013	-0.003	0.000	-0.004	0.002	-0.012	0.008
5.H	0.476	0.337	0.171	-0.015	-0.002	-0.002	-0.033	-0.036	-0.009
6.C	-0.020	-0.054	0.013	0.004	-0.001	0.004	0.004	0.004	0.001
7.H	-0.164	-0.666	0.270	-0.007	-0.055	0.025	-0.017	-0.096	0.044
8.C	-0.001	-0.011	0.008	0.007	0.010	0.001	0.032	0.046	0.001
9.F	0.003	0.005	-0.001	-0.004	-0.006	0.000	-0.015	-0.022	0.000
10.C	-0.035	0.026	-0.047	-0.005	-0.001	-0.006	0.000	-0.005	0.002
11.H	0.045	0.076	-0.015	-0.087	-0.051	-0.046	-0.213	-0.145	-0.113
12.C	-0.043	-0.017	-0.026	0.012	0.009	0.015	0.015	0.023	0.008
13.C	-0.002	0.024	-0.030	0.006	0.029	-0.033	-0.007	0.026	-0.052
14.C	0.005	-0.008	0.013	-0.004	-0.017	0.015	0.004	-0.012	0.023
15.H	-0.011	-0.023	0.035	0.001	-0.008	0.034	-0.012	-0.028	0.032
16.H	-0.001	-0.002	0.019	-0.007	-0.012	0.032	-0.004	-0.002	0.003
17.H	-0.011	-0.013	0.018	0.007	0.003	0.001	-0.008	-0.009	0.022
18.N	0.029	0.003	0.035	0.026	-0.005	-0.012	0.015	-0.010	-0.001
19.C	-0.008	-0.004	-0.031	-0.077	0.007	0.037	-0.042	0.009	0.020
20.H	0.000	-0.028	-0.010	-0.187	0.010	-0.241	-0.139	-0.062	-0.214
21.H	-0.041	0.009	-0.021	0.156	-0.003	0.047	0.096	0.048	0.071
22.C	-0.002	0.011	0.012	0.070	-0.003	-0.023	0.024	0.000	-0.005

23.H	-0.007	0.019	-0.007	0.016	-0.276	-0.124	-0.005	-0.283	-0.019
24.H	-0.004	-0.030	0.015	-0.049	0.199	0.039	-0.012	0.144	0.009
25.C	-0.003	-0.010	-0.010	-0.048	0.009	0.020	0.007	0.002	0.000
26.H	-0.028	-0.007	-0.017	0.082	0.059	-0.043	-0.028	0.055	-0.092
27.H	0.003	0.018	0.003	-0.033	-0.223	0.153	0.060	-0.126	0.233
28.N	0.003	0.006	0.007	0.041	0.007	-0.033	0.001	0.019	-0.026
29.H	0.001	-0.001	-0.003	0.093	0.134	0.172	0.039	-0.080	0.153
30.C	0.001	-0.005	-0.001	-0.076	-0.006	0.015	-0.016	-0.010	0.003
31.H	0.001	0.011	-0.001	-0.084	-0.173	-0.047	0.006	-0.164	0.222
32.H	-0.009	-0.006	-0.002	0.102	0.042	0.014	0.000	0.070	-0.122
33.C	-0.002	0.005	-0.001	0.077	-0.007	-0.015	-0.016	0.011	0.004
34.H	-0.002	-0.004	-0.003	0.084	-0.175	0.044	0.005	0.169	0.217
35.H	-0.004	0.011	0.008	-0.102	0.043	-0.011	0.001	-0.073	-0.119
36.N	0.003	-0.004	0.002	-0.041	0.009	0.034	0.002	-0.020	-0.026
37.H	0.002	-0.006	-0.002	-0.094	0.128	-0.178	0.040	0.082	0.152
38.C	-0.003	0.003	-0.003	0.047	0.009	-0.020	0.007	-0.002	0.001
39.H	-0.007	0.004	-0.001	-0.078	0.060	0.043	-0.028	-0.057	-0.091
40.H	-0.001	0.000	0.001	0.031	-0.229	-0.152	0.059	0.130	0.228
41.C	0.002	-0.003	0.003	-0.070	-0.003	0.023	0.023	0.000	-0.005
42.H	-0.001	0.000	-0.006	-0.016	-0.275	0.129	-0.005	0.278	-0.025
43.H	-0.003	-0.002	0.006	0.049	0.199	-0.043	-0.011	-0.143	0.012
44.C	-0.004	0.001	-0.008	0.077	0.007	-0.038	-0.041	-0.009	0.020
45.H	-0.002	0.005	-0.003	0.189	0.013	0.245	-0.137	0.057	-0.214
46.H	-0.011	-0.001	-0.008	-0.157	-0.004	-0.048	0.094	-0.044	0.071
47.N	0.007	0.000	0.009	-0.027	-0.004	0.012	0.015	0.009	-0.002
48.C	0.000	-0.006	-0.007	-0.007	0.030	0.032	-0.006	-0.026	-0.049
49.C	0.001	0.002	0.003	0.004	-0.017	-0.015	0.004	0.012	0.022
50.H	-0.002	0.005	0.008	-0.002	-0.008	-0.034	-0.011	0.026	0.031
51.H	0.000	0.001	0.005	0.007	-0.013	-0.032	-0.004	0.002	0.004
52.H	-0.003	0.003	0.004	-0.007	0.003	-0.001	-0.007	0.009	0.020
53.C	-0.010	0.003	-0.006	-0.011	0.008	-0.015	0.014	-0.021	0.009
54.C	-0.008	-0.006	-0.010	0.006	-0.001	0.006	-0.001	0.005	0.001
55.H	0.011	-0.018	-0.001	0.085	-0.049	0.047	-0.196	0.131	-0.109
56.C	-0.001	0.003	0.002	-0.006	0.009	-0.001	0.029	-0.042	0.003
57.F	0.001	-0.001	0.000	0.003	-0.005	0.000	-0.014	0.020	-0.001
58.C	-0.004	0.011	0.002	-0.004	-0.001	-0.004	0.004	-0.004	0.001
59.H	-0.035	0.145	0.053	0.007	-0.056	-0.023	-0.016	0.092	0.038
60.C	0.006	-0.014	-0.002	0.003	0.000	0.004	0.001	0.011	0.007
61.H	0.104	-0.072	0.040	0.016	-0.003	0.003	-0.035	0.035	-0.012

62.C	0.002	0.010	0.008	-0.008	-0.001	-0.006	0.017	-0.018	0.002
63.O	0.001	-0.005	-0.002	0.001	0.001	0.000	-0.006	0.010	0.001

	1174.236	1175.572	1219.556
--	----------	----------	----------

1.Mn	0.001	0.000	0.001	0.002	0.000	0.002	0.000	-0.002	0.000
2.O	0.013	0.026	-0.005	0.004	0.013	-0.003	0.001	0.012	-0.006
3.C	-0.012	-0.044	0.017	-0.005	-0.024	0.011	0.044	-0.035	0.054
4.C	-0.017	0.047	-0.040	-0.010	0.021	-0.020	-0.022	0.014	-0.026
5.H	0.048	0.088	-0.017	0.011	0.034	-0.014	-0.212	-0.101	-0.109
6.C	-0.013	-0.015	-0.001	-0.004	-0.006	0.000	0.002	0.016	-0.007
7.H	0.032	0.208	-0.099	0.015	0.092	-0.042	-0.007	-0.028	0.009
8.C	-0.097	-0.145	-0.003	-0.042	-0.064	0.000	-0.003	-0.006	0.000
9.F	0.046	0.069	0.001	0.020	0.029	0.000	0.001	0.001	0.000
10.C	-0.016	0.005	-0.019	-0.008	0.003	-0.010	-0.006	0.012	-0.015
11.H	0.542	0.382	0.296	0.215	0.156	0.119	0.133	0.114	0.068
12.C	-0.015	-0.055	0.016	-0.001	-0.021	0.013	0.006	-0.024	0.032
13.C	0.040	-0.010	0.084	0.019	0.006	0.023	-0.008	0.034	-0.064
14.C	-0.021	0.001	-0.042	-0.009	-0.004	-0.013	0.004	-0.009	0.018
15.H	0.040	0.073	-0.014	0.016	0.027	0.006	-0.022	-0.034	0.033
16.H	-0.007	-0.012	0.059	-0.005	-0.008	0.033	-0.003	-0.004	0.023
17.H	0.033	0.017	-0.053	0.013	0.004	-0.019	-0.040	-0.041	0.043
18.N	0.014	0.015	-0.026	0.013	0.004	-0.014	0.008	0.000	-0.005
19.C	-0.031	-0.001	0.018	-0.035	0.002	0.017	-0.003	-0.010	0.014
20.H	-0.055	0.023	-0.045	-0.086	-0.015	-0.109	-0.112	-0.134	-0.243
21.H	0.037	-0.062	-0.038	0.067	-0.016	0.008	0.111	0.145	0.183
22.C	0.023	-0.007	-0.013	0.021	-0.002	-0.010	-0.020	0.024	0.003
23.H	0.009	-0.082	-0.038	0.001	-0.183	-0.024	-0.018	-0.160	0.063
24.H	-0.008	0.122	0.000	-0.006	0.129	0.000	0.007	-0.105	-0.007
25.C	-0.012	0.011	0.010	0.002	0.007	0.005	0.044	-0.017	-0.008
26.H	0.038	0.014	0.011	0.002	0.038	-0.048	-0.117	0.071	-0.172
27.H	-0.005	-0.089	0.070	0.037	-0.102	0.163	0.095	0.010	0.167
28.N	0.009	-0.001	-0.016	-0.002	0.008	-0.020	-0.042	0.009	0.007
29.H	0.031	0.036	0.072	0.025	-0.039	0.104	-0.058	-0.157	-0.035
30.C	-0.022	-0.001	0.002	-0.007	-0.003	0.003	0.069	0.003	0.006
31.H	-0.020	-0.074	0.031	0.008	-0.106	0.151	0.085	0.057	0.149
32.H	0.021	0.016	-0.008	0.002	0.050	-0.080	-0.071	0.062	-0.152
33.C	0.014	0.001	0.001	-0.017	0.003	0.004	-0.069	0.002	-0.006

34.H	0.022	0.012	0.075	-0.004	0.126	0.135	-0.085	0.050	-0.153
35.H	-0.016	-0.021	-0.047	0.013	-0.051	-0.068	0.071	0.068	0.154
36.N	-0.009	-0.006	0.000	0.003	-0.007	-0.025	0.042	0.009	-0.006
37.H	-0.009	0.057	0.008	0.036	0.015	0.121	0.057	-0.156	0.037
38.C	0.012	0.005	-0.006	-0.004	-0.011	0.010	-0.044	-0.016	0.008
39.H	-0.031	-0.015	-0.042	0.020	-0.038	-0.032	0.114	0.075	0.169
40.H	0.029	-0.006	0.051	0.027	0.131	0.163	-0.095	0.007	-0.169
41.C	-0.006	-0.004	0.005	0.028	0.005	-0.015	0.020	0.023	-0.003
42.H	-0.007	0.055	0.015	0.006	0.185	-0.042	0.019	-0.165	-0.059
43.H	0.003	0.017	0.000	-0.008	-0.168	0.003	-0.009	-0.097	0.011
44.C	0.003	-0.003	-0.003	-0.043	-0.001	0.023	0.004	-0.009	-0.015
45.H	-0.013	0.031	-0.040	-0.096	-0.002	-0.109	0.112	-0.130	0.244
46.H	0.014	-0.043	0.040	0.072	0.045	-0.014	-0.109	0.134	-0.180
47.N	-0.003	0.010	0.012	0.018	-0.012	-0.026	-0.008	0.000	0.006
48.C	-0.022	-0.014	-0.057	0.037	0.003	0.066	0.006	0.035	0.058
49.C	0.011	0.004	0.027	-0.019	0.002	-0.034	-0.003	-0.010	-0.016
50.H	-0.025	0.046	0.015	0.036	-0.064	-0.002	0.019	-0.031	-0.031
51.H	0.003	-0.006	-0.028	-0.008	0.014	0.058	0.004	-0.004	-0.022
52.H	-0.021	0.014	0.033	0.031	-0.015	-0.044	0.035	-0.038	-0.038
53.C	0.012	-0.033	-0.004	-0.009	0.048	0.017	-0.006	-0.025	-0.030
54.C	0.008	0.003	0.009	-0.014	-0.006	-0.018	0.005	0.013	0.014
55.H	-0.320	0.219	-0.182	0.466	-0.327	0.268	-0.121	0.104	-0.065
56.C	0.056	-0.083	0.004	-0.086	0.132	-0.005	0.004	-0.006	0.000
57.F	-0.027	0.040	-0.002	0.041	-0.061	0.003	-0.001	0.001	0.000
58.C	0.009	-0.010	0.001	-0.011	0.014	-0.001	-0.002	0.014	0.005
59.H	-0.018	0.123	0.055	0.030	-0.195	-0.084	0.004	-0.019	-0.005
60.C	0.007	0.027	0.020	-0.017	-0.044	-0.036	0.020	0.014	0.024
61.H	-0.041	0.058	0.001	0.045	-0.082	-0.013	0.190	-0.087	0.100
62.C	0.009	-0.023	-0.006	-0.012	0.044	0.016	-0.037	-0.036	-0.048
63.O	-0.009	0.014	0.002	0.011	-0.025	-0.005	-0.003	0.013	0.006

1226.016

1230.616

1238.829

1.Mn	0.002	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.010	-0.005	0.009	0.017	0.007	0.006	0.006	0.006	0.001
3.C	-0.094	0.034	-0.094	-0.081	0.005	-0.066	-0.023	-0.004	-0.015
4.C	0.027	-0.018	0.031	0.012	-0.009	0.015	0.003	-0.002	0.004
5.H	0.400	0.214	0.201	0.305	0.175	0.150	0.053	0.027	0.025

6.C	0.001	-0.036	0.020	0.004	-0.030	0.020	0.003	-0.007	0.006
7.H	0.039	0.138	-0.048	0.045	0.153	-0.053	0.013	0.041	-0.012
8.C	-0.011	-0.020	0.002	-0.015	-0.029	0.003	-0.002	0.000	-0.002
9.F	0.005	0.009	-0.001	0.007	0.012	-0.001	0.000	0.000	0.000
10.C	0.011	-0.013	0.022	0.009	-0.003	0.012	0.006	0.006	0.003
11.H	-0.241	-0.196	-0.126	-0.181	-0.140	-0.098	-0.023	-0.017	-0.017
12.C	0.006	0.042	-0.033	0.014	0.028	-0.011	0.001	-0.005	0.000
13.C	0.034	-0.031	0.091	0.037	-0.003	0.052	0.004	-0.006	0.013
14.C	-0.014	0.003	-0.022	-0.015	-0.006	-0.010	-0.004	0.000	0.000
15.H	0.049	0.071	-0.034	0.042	0.058	-0.011	0.007	0.009	-0.018
16.H	-0.007	0.000	-0.018	-0.013	-0.002	-0.001	-0.002	-0.001	-0.013
17.H	0.083	0.065	-0.070	0.067	0.043	-0.048	0.009	0.010	-0.008
18.N	-0.010	0.001	-0.022	-0.006	0.000	-0.033	-0.012	0.012	-0.017
19.C	-0.014	0.009	0.009	-0.013	0.002	0.023	0.014	-0.031	0.009
20.H	0.012	0.047	0.070	-0.096	-0.104	-0.167	0.044	0.091	0.070
21.H	-0.026	-0.094	-0.097	0.079	0.043	0.074	0.071	0.064	0.110
22.C	0.012	-0.017	-0.009	-0.013	0.002	-0.002	0.026	0.026	-0.014
23.H	0.006	-0.051	-0.017	-0.013	-0.180	0.056	0.027	0.224	-0.073
24.H	0.003	0.155	-0.011	0.011	0.076	-0.020	-0.033	-0.380	0.041
25.C	0.000	0.017	0.005	0.042	0.001	-0.004	-0.049	-0.023	0.011
26.H	0.038	-0.006	0.045	-0.058	0.030	-0.065	-0.046	0.137	-0.247
27.H	0.003	-0.047	0.035	0.083	-0.006	0.143	-0.054	-0.080	0.013
28.N	-0.001	-0.006	-0.012	-0.038	0.005	0.000	0.030	-0.006	-0.003
29.H	0.012	0.001	0.043	-0.048	-0.127	-0.021	0.046	0.086	0.049
30.C	0.000	0.004	0.002	0.053	0.002	-0.003	-0.002	0.004	0.041
31.H	0.006	-0.046	0.064	0.065	0.045	0.110	0.004	-0.087	0.089
32.H	0.004	0.023	-0.027	-0.060	0.013	-0.071	0.031	0.210	-0.284
33.C	-0.010	-0.004	0.002	-0.052	0.003	0.002	0.002	0.002	-0.042
34.H	-0.007	0.055	0.040	-0.065	0.037	-0.117	-0.003	-0.091	-0.090
35.H	0.016	-0.016	-0.007	0.060	0.018	0.073	-0.032	0.220	0.284
36.N	0.006	0.007	-0.013	0.038	0.004	0.001	-0.030	-0.007	0.004
37.H	0.020	-0.024	0.048	0.047	-0.125	0.020	-0.047	0.087	-0.053
38.C	-0.007	-0.018	0.007	-0.043	0.003	0.003	0.050	-0.022	-0.011
39.H	0.051	0.017	0.065	0.052	0.028	0.055	0.042	0.141	0.238
40.H	-0.012	0.047	0.007	-0.082	-0.011	-0.143	0.056	-0.080	-0.009
41.C	0.015	0.019	-0.009	0.013	0.000	0.003	-0.027	0.024	0.014
42.H	0.009	0.021	-0.027	0.013	-0.187	-0.051	-0.027	0.228	0.073
43.H	0.002	-0.157	-0.005	-0.013	0.100	0.020	0.032	-0.370	-0.031
44.C	-0.012	-0.009	0.006	0.014	0.003	-0.024	-0.014	-0.030	-0.007

45.H	0.030	-0.066	0.105	0.093	-0.098	0.161	-0.049	0.095	-0.086
46.H	-0.042	0.104	-0.119	-0.071	0.028	-0.060	-0.067	0.053	-0.101
47.N	-0.010	-0.002	-0.018	0.007	0.001	0.035	0.012	0.013	0.015
48.C	0.029	0.035	0.087	-0.040	-0.009	-0.061	-0.003	-0.007	-0.014
49.C	-0.012	-0.005	-0.021	0.016	-0.005	0.013	0.004	0.000	0.001
50.H	0.044	-0.066	-0.033	-0.046	0.065	0.013	-0.007	0.010	0.018
51.H	-0.004	-0.001	-0.019	0.013	-0.003	0.003	0.002	-0.001	0.014
52.H	0.077	-0.064	-0.064	-0.075	0.050	0.053	-0.009	0.011	0.008
53.C	0.005	-0.043	-0.033	-0.014	0.035	0.015	0.000	-0.005	0.001
54.C	0.010	0.015	0.021	-0.009	-0.007	-0.015	-0.006	0.005	-0.003
55.H	-0.234	0.189	-0.128	0.211	-0.162	0.118	0.021	-0.016	0.016
56.C	-0.008	0.015	0.002	0.015	-0.030	-0.003	0.001	0.002	0.002
57.F	0.004	-0.008	-0.001	-0.007	0.013	0.001	0.001	0.000	0.000
58.C	0.000	0.033	0.017	-0.004	-0.034	-0.021	-0.003	-0.007	-0.005
59.H	0.033	-0.119	-0.037	-0.047	0.164	0.051	-0.012	0.036	0.009
60.C	0.026	0.018	0.031	-0.015	-0.012	-0.018	-0.003	-0.003	-0.004
61.H	0.375	-0.193	0.194	-0.344	0.190	-0.175	-0.051	0.024	-0.026
62.C	-0.085	-0.039	-0.087	0.088	0.012	0.075	0.023	-0.003	0.015
63.O	0.007	0.008	0.009	-0.017	0.005	-0.007	-0.006	0.006	-0.001

1244.197

1246.068

1247.701

1.Mn	0.001	0.000	0.003	0.002	0.000	0.002	0.001	-0.001	0.001
2.O	0.038	0.048	-0.003	0.022	0.034	-0.005	0.085	0.111	-0.010
3.C	-0.090	-0.071	-0.024	-0.054	-0.047	-0.012	-0.201	-0.147	-0.066
4.C	-0.005	-0.013	0.002	0.020	-0.030	0.033	0.050	-0.071	0.079
5.H	0.098	0.053	0.057	-0.150	-0.132	-0.026	-0.206	-0.226	0.001
6.C	0.023	-0.011	0.024	0.026	0.020	0.008	0.073	0.023	0.043
7.H	0.058	0.136	-0.033	0.002	-0.116	0.069	0.055	-0.131	0.121
8.C	0.002	0.016	-0.007	0.033	0.118	-0.037	0.059	0.264	-0.096
9.F	-0.006	-0.007	-0.001	-0.025	-0.041	0.001	-0.055	-0.089	0.002
10.C	0.020	0.034	-0.001	0.025	0.034	0.003	0.074	0.100	0.011
11.H	-0.047	-0.015	-0.047	0.168	0.127	0.066	0.356	0.273	0.117
12.C	-0.005	-0.029	0.015	-0.073	-0.077	-0.022	-0.165	-0.200	-0.030
13.C	0.027	0.026	-0.004	0.009	-0.007	0.034	0.068	0.017	0.088
14.C	-0.011	-0.012	0.005	-0.001	0.005	-0.019	-0.020	-0.004	-0.044
15.H	0.017	0.022	0.011	-0.001	0.009	0.019	0.033	0.069	0.060
16.H	-0.013	-0.006	0.013	0.006	-0.005	0.031	-0.008	-0.016	0.101

17.H	0.024	0.005	-0.007	0.004	-0.005	-0.010	0.057	-0.010	-0.036
18.N	-0.007	0.006	-0.033	0.017	0.001	0.021	0.030	0.013	-0.003
19.C	0.006	-0.023	0.019	-0.019	0.019	-0.011	-0.018	0.005	0.003
20.H	-0.103	-0.151	-0.241	0.062	0.107	0.176	-0.054	-0.032	-0.076
21.H	0.178	0.206	0.270	-0.096	-0.187	-0.228	-0.048	-0.061	-0.069
22.C	-0.015	0.034	0.007	0.024	-0.019	-0.010	0.006	0.005	0.001
23.H	-0.008	0.010	0.041	0.010	-0.025	-0.059	-0.003	-0.059	-0.008
24.H	-0.017	-0.291	0.024	0.007	0.174	-0.010	-0.005	0.031	0.005
25.C	0.010	-0.032	-0.010	-0.014	0.021	0.004	0.000	0.006	-0.005
26.H	-0.101	0.066	-0.179	0.077	-0.025	0.088	0.004	-0.034	0.057
27.H	0.037	0.031	0.069	-0.012	-0.071	0.040	0.008	-0.038	0.045
28.N	-0.016	0.019	0.024	0.009	-0.009	-0.020	0.002	0.002	-0.004
29.H	-0.039	-0.025	-0.074	0.033	0.031	0.080	0.007	0.026	0.017
30.C	0.012	-0.007	-0.005	-0.009	0.005	0.004	-0.013	0.001	-0.008
31.H	0.002	0.115	-0.113	0.002	-0.101	0.120	-0.015	-0.021	-0.013
32.H	-0.013	-0.050	0.059	0.017	0.046	-0.053	0.000	-0.041	0.067
33.C	0.012	0.007	-0.004	-0.015	-0.005	-0.001	0.007	-0.001	0.008
34.H	0.003	-0.114	-0.107	-0.006	0.097	0.092	0.014	0.027	0.067
35.H	-0.014	0.045	0.049	0.016	-0.016	-0.007	0.008	-0.057	-0.079
36.N	-0.015	-0.018	0.025	0.008	0.007	-0.020	0.002	0.004	-0.005
37.H	-0.038	0.020	-0.073	0.032	-0.035	0.078	0.009	0.007	0.024
38.C	0.009	0.032	-0.011	-0.011	-0.022	0.002	-0.009	-0.002	0.005
39.H	-0.102	-0.076	-0.185	0.075	0.048	0.117	0.026	-0.028	-0.029
40.H	0.036	-0.026	0.073	-0.009	0.071	0.038	-0.009	0.008	-0.001
41.C	-0.014	-0.035	0.007	0.022	0.016	-0.008	0.008	0.010	-0.006
42.H	-0.008	-0.014	0.037	0.007	0.049	-0.051	0.008	-0.044	-0.024
43.H	-0.018	0.301	0.017	0.006	-0.190	-0.004	0.005	-0.022	-0.005
44.C	0.006	0.024	0.020	-0.023	-0.020	-0.010	0.005	-0.002	-0.006
45.H	-0.104	0.148	-0.246	0.036	-0.082	0.132	0.070	-0.068	0.141
46.H	0.176	-0.196	0.272	-0.109	0.183	-0.236	0.014	0.026	-0.035
47.N	-0.006	-0.008	-0.034	0.026	-0.004	0.019	-0.018	0.010	0.010
48.C	0.031	-0.026	0.003	0.031	0.002	0.060	-0.050	0.013	-0.057
49.C	-0.012	0.012	0.003	-0.007	-0.004	-0.032	0.015	-0.004	0.028
50.H	0.020	-0.026	0.014	0.010	-0.030	0.038	-0.028	0.052	-0.041
51.H	-0.014	0.008	0.016	0.002	0.011	0.063	0.009	-0.012	-0.068
52.H	0.029	-0.006	-0.009	0.024	0.008	-0.021	-0.045	-0.006	0.024
53.C	-0.013	0.038	0.011	-0.122	0.136	-0.034	0.099	-0.122	0.020
54.C	0.025	-0.039	0.001	0.049	-0.064	0.010	-0.047	0.060	-0.011
55.H	-0.038	0.008	-0.046	0.272	-0.203	0.106	-0.215	0.159	-0.076

56.C	0.005	-0.029	-0.010	0.049	-0.196	-0.060	-0.030	0.157	0.056
57.F	-0.008	0.011	-0.001	-0.041	0.067	0.000	0.031	-0.051	0.000
58.C	0.026	0.012	0.026	0.047	-0.024	0.023	-0.043	0.008	-0.029
59.H	0.062	-0.136	-0.025	0.021	0.148	0.096	-0.037	-0.065	-0.065
60.C	-0.002	0.017	0.007	0.036	0.052	0.054	-0.033	-0.043	-0.048
61.H	0.099	-0.046	0.064	-0.200	0.192	-0.026	0.099	-0.122	-0.008
62.C	-0.102	0.076	-0.032	-0.116	0.088	-0.037	0.128	-0.083	0.051
63.O	0.042	-0.054	-0.002	0.048	-0.067	-0.006	-0.054	0.067	0.003

1254.063

1257.290

1276.424

1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.001
2.O	0.006	0.009	-0.001	0.018	0.023	-0.002	-0.048	-0.069	0.007
3.C	-0.009	-0.018	0.005	-0.026	-0.040	0.004	0.038	0.133	-0.056
4.C	-0.005	-0.001	-0.003	-0.017	0.002	-0.016	0.073	0.007	0.055
5.H	0.005	0.003	-0.002	0.061	0.053	0.021	-0.104	-0.105	-0.025
6.C	0.004	0.001	0.003	0.007	-0.008	0.010	-0.019	-0.004	-0.014
7.H	0.009	0.019	-0.005	0.035	0.118	-0.042	-0.088	-0.302	0.110
8.C	0.001	-0.002	0.002	-0.003	-0.024	0.011	-0.035	0.050	-0.058
9.F	0.000	0.000	0.000	0.003	0.006	-0.001	0.003	-0.004	0.004
10.C	-0.001	0.003	-0.003	0.004	0.015	-0.006	-0.001	-0.047	0.030
11.H	-0.010	-0.002	-0.007	-0.069	-0.033	-0.045	0.200	0.081	0.138
12.C	0.001	0.001	0.004	0.019	0.002	0.020	-0.032	-0.014	-0.031
13.C	0.008	0.014	-0.012	0.004	0.022	-0.032	0.047	-0.019	0.099
14.C	0.000	-0.004	0.001	-0.002	-0.008	0.014	-0.020	-0.002	-0.030
15.H	0.001	0.001	0.022	0.000	-0.007	0.002	0.059	0.092	0.004
16.H	-0.002	-0.001	0.019	-0.008	-0.001	-0.002	-0.023	0.015	0.007
17.H	0.004	-0.007	0.004	-0.005	-0.004	0.010	0.070	0.008	-0.037
18.N	0.009	-0.013	0.006	-0.010	0.000	-0.015	0.012	0.025	-0.041
19.C	-0.009	0.031	0.001	0.021	-0.016	0.001	-0.011	-0.018	0.017
20.H	-0.094	-0.182	-0.185	-0.059	-0.133	-0.182	-0.089	-0.087	-0.163
21.H	-0.029	-0.013	-0.044	0.096	0.203	0.233	0.105	0.083	0.132
22.C	-0.046	-0.021	0.015	-0.021	0.018	0.021	-0.011	0.014	-0.004
23.H	-0.035	-0.248	0.124	-0.007	0.123	0.045	-0.006	-0.076	0.041
24.H	0.036	0.353	-0.052	-0.024	-0.216	0.035	0.001	-0.056	-0.008
25.C	0.065	0.022	-0.007	-0.013	-0.022	-0.011	0.026	-0.015	0.002
26.H	0.032	-0.136	0.240	-0.017	-0.049	0.039	-0.074	0.064	-0.135
27.H	0.049	0.151	-0.108	-0.039	0.092	-0.134	0.048	0.015	0.076

28.N	-0.038	-0.020	0.003	0.020	0.017	0.019	-0.026	0.010	0.018
29.H	-0.067	-0.047	-0.112	0.008	0.069	-0.044	-0.053	-0.072	-0.084
30.C	0.026	0.021	-0.003	-0.056	-0.009	-0.022	0.021	0.000	-0.002
31.H	0.011	0.135	-0.163	-0.081	0.061	-0.248	0.007	0.130	-0.139
32.H	0.005	-0.074	0.140	0.036	-0.168	0.284	-0.016	-0.050	0.068
33.C	0.024	-0.021	-0.003	0.056	-0.007	0.023	0.019	0.000	-0.004
34.H	0.009	-0.138	-0.164	0.081	0.065	0.246	0.006	-0.139	-0.146
35.H	0.007	0.079	0.142	-0.035	-0.177	-0.284	-0.017	0.063	0.081
36.N	-0.037	0.020	0.003	-0.020	0.017	-0.020	-0.026	-0.012	0.020
37.H	-0.066	0.041	-0.113	-0.009	0.070	0.042	-0.055	0.073	-0.089
38.C	0.064	-0.022	-0.007	0.014	-0.022	0.012	0.025	0.017	0.002
39.H	0.032	0.141	0.236	0.018	-0.047	-0.033	-0.078	-0.074	-0.146
40.H	0.048	-0.151	-0.105	0.039	0.093	0.129	0.050	-0.013	0.083
41.C	-0.046	0.021	0.015	0.021	0.018	-0.021	-0.011	-0.015	-0.004
42.H	-0.035	0.245	0.118	0.007	0.129	-0.047	-0.006	0.070	0.039
43.H	0.036	-0.348	-0.042	0.025	-0.229	-0.030	0.001	0.069	-0.009
44.C	-0.008	-0.031	0.002	-0.021	-0.016	-0.002	-0.011	0.019	0.018
45.H	-0.093	0.176	-0.191	0.058	-0.133	0.185	-0.093	0.092	-0.175
46.H	-0.031	0.012	-0.044	-0.098	0.199	-0.240	0.115	-0.087	0.145
47.N	0.009	0.013	0.006	0.010	0.000	0.015	0.012	-0.027	-0.042
48.C	0.007	-0.015	-0.013	-0.004	0.023	0.032	0.050	0.023	0.103
49.C	0.000	0.004	0.001	0.002	-0.009	-0.014	-0.021	0.001	-0.032
50.H	0.001	0.000	0.022	0.000	-0.007	-0.002	0.062	-0.097	0.007
51.H	-0.002	0.002	0.019	0.008	-0.001	0.003	-0.024	-0.015	0.008
52.H	0.003	0.007	0.004	0.005	-0.004	-0.011	0.073	-0.009	-0.037
53.C	0.002	-0.002	0.004	-0.020	0.003	-0.020	-0.033	0.012	-0.033
54.C	-0.001	-0.003	-0.003	-0.003	0.015	0.006	-0.001	0.051	0.030
55.H	-0.012	0.003	-0.008	0.076	-0.037	0.050	0.212	-0.082	0.149
56.C	0.001	0.003	0.002	0.003	-0.026	-0.011	-0.037	-0.053	-0.059
57.F	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.007	0.001	0.003	0.004	0.005
58.C	0.004	-0.001	0.002	-0.006	-0.008	-0.010	-0.021	0.003	-0.016
59.H	0.008	-0.020	-0.005	-0.035	0.123	0.040	-0.092	0.319	0.105
60.C	-0.006	0.001	-0.004	0.018	0.003	0.016	0.076	-0.006	0.057
61.H	0.005	-0.004	-0.002	-0.065	0.055	-0.024	-0.111	0.109	-0.031
62.C	-0.007	0.017	0.005	0.026	-0.040	-0.003	0.042	-0.142	-0.053
63.O	0.006	-0.009	-0.001	-0.018	0.023	0.001	-0.051	0.073	0.006

1280.920

1288.663

1293.577

1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.001
2.O	-0.035	-0.047	0.004	0.032	0.042	-0.004	0.004	0.005	-0.001
3.C	0.032	0.084	-0.028	-0.027	-0.074	0.027	0.005	-0.014	0.013
4.C	0.041	0.006	0.030	-0.041	-0.008	-0.029	-0.012	-0.002	-0.008
5.H	-0.064	-0.061	-0.019	0.072	0.059	0.017	0.002	0.009	0.000
6.C	-0.014	0.000	-0.012	0.012	0.002	0.009	0.000	0.004	-0.002
7.H	-0.056	-0.180	0.062	0.051	0.176	-0.062	0.008	0.033	-0.015
8.C	-0.020	0.021	-0.029	0.026	-0.019	0.033	0.011	-0.006	0.013
9.F	0.003	-0.001	0.002	-0.004	-0.001	-0.003	-0.001	-0.001	-0.001
10.C	-0.003	-0.032	0.018	0.002	0.033	-0.018	-0.003	0.004	-0.005
11.H	0.094	0.030	0.073	-0.088	-0.026	-0.071	-0.031	-0.014	-0.021
12.C	-0.012	0.004	-0.021	0.008	-0.007	0.015	0.002	0.007	-0.002
13.C	0.019	-0.019	0.057	-0.034	-0.002	-0.043	-0.017	-0.009	-0.008
14.C	-0.010	0.000	-0.014	0.013	0.007	0.009	0.006	0.006	0.000
15.H	0.032	0.047	-0.013	-0.042	-0.057	-0.003	-0.020	-0.025	-0.001
16.H	-0.012	0.012	-0.016	0.021	-0.015	0.005	0.014	-0.009	0.002
17.H	0.034	0.013	-0.024	-0.042	-0.007	0.019	-0.016	-0.001	0.005
18.N	0.003	0.018	-0.023	-0.005	-0.007	0.026	0.000	-0.003	0.013
19.C	-0.012	-0.023	0.010	-0.004	-0.004	-0.010	-0.013	0.001	0.003
20.H	0.000	0.055	0.027	0.113	0.242	0.258	0.067	0.174	0.184
21.H	0.091	0.022	0.066	-0.107	-0.124	-0.144	-0.069	-0.152	-0.159
22.C	0.025	0.022	-0.011	0.038	0.010	-0.015	0.027	0.012	-0.023
23.H	0.011	0.003	-0.057	0.012	-0.055	-0.102	0.004	-0.160	-0.071
24.H	-0.008	-0.184	0.017	0.016	-0.035	-0.001	0.033	0.022	-0.030
25.C	-0.005	-0.021	-0.006	-0.005	-0.003	-0.004	0.025	-0.009	0.003
26.H	-0.083	0.115	-0.229	-0.039	0.082	-0.142	-0.084	0.132	-0.235
27.H	0.064	-0.121	0.278	0.064	-0.155	0.291	0.101	-0.118	0.310
28.N	-0.024	0.043	0.025	-0.024	0.026	0.008	-0.049	0.019	0.023
29.H	-0.039	-0.120	-0.012	-0.024	-0.102	0.030	-0.080	-0.124	-0.082
30.C	-0.008	-0.010	-0.040	0.008	-0.004	-0.029	0.031	0.004	-0.008
31.H	-0.023	0.115	-0.159	0.005	0.050	-0.035	0.013	0.191	-0.198
32.H	-0.027	-0.216	0.298	-0.038	-0.128	0.160	-0.017	-0.099	0.147
33.C	0.010	-0.008	0.041	-0.009	-0.002	0.029	0.031	-0.004	-0.007
34.H	0.023	0.108	0.147	-0.006	0.055	0.040	0.013	-0.196	-0.195
35.H	0.028	-0.222	-0.291	0.039	-0.136	-0.162	-0.017	0.101	0.142
36.N	0.022	0.042	-0.025	0.025	0.026	-0.010	-0.049	-0.019	0.023
37.H	0.036	-0.116	0.010	0.026	-0.106	-0.025	-0.081	0.121	-0.087
38.C	0.006	-0.021	0.006	0.003	-0.005	0.003	0.026	0.010	0.005

39.H	0.078	0.119	0.221	0.041	0.090	0.148	-0.082	-0.139	-0.233
40.H	-0.061	-0.125	-0.269	-0.066	-0.162	-0.294	0.099	0.119	0.299
41.C	-0.025	0.022	0.011	-0.039	0.012	0.015	0.026	-0.014	-0.023
42.H	-0.011	0.008	0.060	-0.011	-0.065	0.105	0.002	0.165	-0.074
43.H	0.007	-0.182	-0.013	-0.018	-0.031	0.003	0.035	-0.027	-0.030
44.C	0.012	-0.023	-0.008	0.005	-0.006	0.011	-0.014	0.000	0.003
45.H	-0.004	0.058	-0.037	-0.114	0.245	-0.269	0.065	-0.173	0.186
46.H	-0.089	0.020	-0.064	0.103	-0.118	0.144	-0.066	0.144	-0.157
47.N	-0.002	0.018	0.021	0.004	-0.007	-0.025	0.000	0.003	0.013
48.C	-0.017	-0.019	-0.053	0.034	-0.001	0.042	-0.017	0.009	-0.007
49.C	0.009	0.001	0.013	-0.012	0.007	-0.009	0.006	-0.006	0.000
50.H	-0.029	0.044	0.011	0.041	-0.056	0.004	-0.019	0.023	-0.003
51.H	0.011	0.011	0.015	-0.021	-0.014	-0.004	0.013	0.008	0.002
52.H	-0.031	0.013	0.021	0.041	-0.008	-0.019	-0.015	0.000	0.004
53.C	0.011	0.005	0.020	-0.008	-0.008	-0.015	0.002	-0.007	-0.002
54.C	0.003	-0.031	-0.015	-0.003	0.033	0.017	-0.002	-0.003	-0.004
55.H	-0.089	0.028	-0.070	0.085	-0.023	0.070	-0.029	0.013	-0.019
56.C	0.019	0.020	0.026	-0.025	-0.019	-0.031	0.010	0.006	0.011
57.F	-0.002	-0.001	-0.002	0.004	-0.001	0.003	-0.001	0.000	-0.001
58.C	0.013	0.000	0.011	-0.011	0.001	-0.009	0.000	-0.004	-0.001
59.H	0.051	-0.169	-0.052	-0.049	0.173	0.055	0.006	-0.029	-0.012
60.C	-0.038	0.005	-0.028	0.039	-0.006	0.028	-0.010	0.001	-0.008
61.H	0.060	-0.056	0.020	-0.069	0.057	-0.018	0.001	-0.007	0.000
62.C	-0.031	0.079	0.023	0.027	-0.072	-0.024	0.005	0.012	0.011
63.O	0.033	-0.044	-0.003	-0.031	0.041	0.002	0.004	-0.004	-0.001

1324.868

1326.616

1327.653

1.Mn	0.000	0.000	-0.001	0.002	0.000	0.001	-0.001	-0.001	0.000
2.O	-0.003	-0.004	0.000	0.008	0.018	-0.002	0.009	0.015	-0.002
3.C	0.002	0.006	-0.003	0.054	-0.096	0.104	0.031	-0.062	0.063
4.C	0.005	0.004	0.001	-0.079	-0.061	-0.024	-0.051	-0.036	-0.017
5.H	-0.006	-0.002	-0.004	-0.011	-0.035	-0.010	-0.001	-0.014	-0.004
6.C	-0.003	-0.004	0.000	0.029	0.104	-0.034	0.018	0.058	-0.018
7.H	-0.003	-0.005	0.000	-0.002	-0.078	0.034	0.007	-0.021	0.010
8.C	-0.005	-0.003	-0.003	0.087	0.000	0.074	0.055	0.001	0.046
9.F	0.001	0.002	0.000	-0.006	-0.013	0.002	-0.005	-0.009	0.001
10.C	0.002	-0.001	0.003	-0.083	-0.063	-0.034	-0.047	-0.031	-0.022

11.H	-0.002	-0.004	0.000	-0.024	-0.008	0.014	-0.022	-0.006	-0.001
12.C	0.004	0.000	0.004	-0.056	0.136	-0.157	-0.035	0.074	-0.090
13.C	-0.001	0.001	-0.003	0.076	-0.015	0.121	0.041	-0.008	0.066
14.C	0.000	-0.001	0.003	-0.017	-0.004	-0.014	-0.008	-0.001	-0.008
15.H	0.002	0.000	-0.009	0.067	0.088	-0.018	0.036	0.047	-0.005
16.H	-0.002	0.002	-0.009	-0.006	-0.011	-0.067	-0.004	-0.004	-0.029
17.H	-0.002	0.006	-0.003	0.123	0.075	-0.075	0.065	0.036	-0.037
18.N	-0.003	0.001	-0.002	-0.009	-0.010	-0.031	-0.006	-0.004	-0.016
19.C	0.006	-0.006	0.002	0.021	0.069	0.067	0.010	0.028	0.029
20.H	0.006	-0.007	0.000	-0.129	-0.443	-0.279	-0.055	-0.168	-0.120
21.H	0.012	0.001	0.012	0.032	-0.252	-0.249	-0.014	-0.107	-0.107
22.C	0.009	0.028	0.011	-0.011	-0.032	-0.020	-0.004	-0.014	-0.009
23.H	-0.002	0.002	-0.013	0.032	0.334	0.028	0.014	0.140	0.011
24.H	-0.022	-0.187	0.041	-0.028	-0.140	-0.004	-0.011	-0.054	-0.003
25.C	-0.018	0.020	-0.040	-0.015	0.012	-0.004	-0.005	0.004	0.000
26.H	0.059	-0.148	0.243	-0.041	0.059	-0.088	-0.029	0.034	-0.053
27.H	0.024	-0.095	0.153	-0.001	-0.128	0.107	-0.002	-0.059	0.042
28.N	-0.006	0.008	-0.002	0.000	0.004	0.006	0.000	0.003	0.004
29.H	0.015	-0.093	0.112	-0.001	0.009	0.001	-0.002	0.007	-0.005
30.C	-0.003	0.060	-0.067	-0.003	0.003	-0.006	-0.003	-0.002	0.000
31.H	0.027	-0.104	0.189	-0.001	-0.009	0.015	-0.005	0.002	-0.015
32.H	0.073	-0.227	0.451	0.006	-0.017	0.034	-0.005	-0.004	0.002
33.C	-0.002	-0.062	-0.065	0.000	-0.003	-0.004	0.003	0.003	0.006
34.H	0.029	0.112	0.195	0.003	0.009	0.020	0.003	-0.005	-0.002
35.H	0.073	0.236	0.439	0.005	0.011	0.022	-0.001	-0.024	-0.039
36.N	-0.006	-0.008	-0.003	0.000	-0.002	0.002	0.001	0.006	-0.008
37.H	0.017	0.100	0.117	0.000	-0.001	0.006	0.003	0.006	-0.001
38.C	-0.019	-0.022	-0.041	-0.008	-0.007	-0.002	0.014	0.012	0.003
39.H	0.061	0.157	0.245	-0.015	-0.032	-0.044	0.049	0.074	0.105
40.H	0.024	0.101	0.155	0.001	0.066	0.059	0.000	-0.142	-0.117
41.C	0.009	-0.028	0.012	-0.005	0.019	-0.010	0.009	-0.035	0.022
42.H	-0.002	-0.001	-0.013	0.018	-0.179	0.018	-0.035	0.346	-0.033
43.H	-0.024	0.191	0.038	-0.016	0.062	-0.003	0.030	-0.124	0.006
44.C	0.006	0.008	0.001	0.010	-0.034	0.033	-0.022	0.065	-0.068
45.H	0.008	0.003	0.004	-0.063	0.224	-0.141	0.124	-0.407	0.279
46.H	0.014	-0.004	0.016	0.029	0.118	-0.122	-0.004	-0.244	0.256
47.N	-0.003	-0.001	-0.002	-0.004	0.004	-0.015	0.012	-0.010	0.033
48.C	-0.001	-0.001	-0.003	0.036	0.009	0.058	-0.083	-0.021	-0.133
49.C	0.000	0.001	0.002	-0.008	0.001	-0.006	0.017	-0.002	0.016

50.H	0.001	0.000	-0.008	0.031	-0.042	-0.009	-0.069	0.093	0.013
51.H	-0.001	-0.002	-0.007	-0.002	0.006	-0.035	0.004	-0.012	0.065
52.H	-0.002	-0.005	-0.002	0.059	-0.037	-0.035	-0.132	0.079	0.076
53.C	0.004	0.001	0.004	-0.023	-0.069	-0.071	0.063	0.161	0.174
54.C	0.003	0.001	0.003	-0.040	0.033	-0.017	0.096	-0.070	0.044
55.H	-0.001	0.004	0.000	-0.002	-0.001	0.015	0.024	-0.004	-0.015
56.C	-0.005	0.002	-0.003	0.037	0.001	0.031	-0.101	0.000	-0.085
57.F	0.001	-0.002	0.000	-0.002	0.006	0.001	0.008	-0.016	-0.002
58.C	-0.003	0.004	0.000	0.014	-0.051	-0.015	-0.037	0.122	0.033
59.H	-0.003	0.004	0.000	-0.005	0.055	0.023	-0.004	-0.086	-0.036
60.C	0.005	-0.004	0.002	-0.035	0.029	-0.010	0.095	-0.072	0.031
61.H	-0.006	0.002	-0.003	-0.009	0.021	-0.007	0.012	-0.040	0.013
62.C	0.002	-0.007	-0.003	0.023	0.045	0.046	-0.058	-0.124	-0.119
63.O	-0.003	0.004	0.000	0.003	-0.007	-0.001	-0.015	0.027	0.002

1332.062

1332.938

1336.770

1.Mn	0.000	-0.001	0.001	0.001	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000
2.O	0.008	0.012	-0.001	-0.003	-0.004	0.001	0.000	0.000	0.000
3.C	0.012	-0.044	0.039	-0.007	0.017	-0.016	-0.002	0.004	-0.005
4.C	-0.033	-0.031	-0.007	0.013	0.009	0.004	0.002	0.003	0.000
5.H	0.000	-0.017	0.002	0.003	0.006	0.001	0.006	0.007	0.003
6.C	0.016	0.047	-0.013	-0.005	-0.015	0.004	-0.002	-0.007	0.002
7.H	0.001	-0.044	0.022	-0.002	0.007	-0.003	0.003	0.016	-0.006
8.C	0.036	0.007	0.027	-0.014	-0.002	-0.011	-0.002	0.000	-0.002
9.F	-0.004	-0.008	0.001	0.002	0.003	0.000	0.000	0.000	0.000
10.C	-0.036	-0.026	-0.016	0.011	0.008	0.005	0.005	0.006	0.001
11.H	0.016	0.017	0.021	0.002	-0.001	-0.002	-0.005	-0.003	-0.008
12.C	-0.022	0.051	-0.064	0.009	-0.018	0.023	0.001	-0.009	0.009
13.C	0.026	-0.015	0.053	-0.010	0.002	-0.016	-0.005	0.002	-0.008
14.C	-0.009	-0.011	0.004	0.003	0.004	-0.002	0.002	0.006	-0.009
15.H	0.075	0.080	-0.041	-0.024	-0.026	0.013	-0.026	-0.020	0.041
16.H	-0.048	0.064	-0.072	0.015	-0.019	0.026	0.019	-0.024	0.041
17.H	0.042	0.035	-0.031	-0.016	-0.013	0.011	-0.003	-0.032	0.022
18.N	-0.007	0.028	-0.025	0.004	-0.008	0.010	0.004	-0.007	0.008
19.C	-0.040	-0.091	-0.073	0.011	0.026	0.023	-0.001	0.023	0.015
20.H	0.098	0.428	0.251	-0.033	-0.114	-0.078	-0.022	-0.045	-0.032
21.H	0.096	0.415	0.445	-0.044	-0.133	-0.143	-0.045	-0.111	-0.125

22.C	0.009	-0.010	0.022	-0.006	0.004	-0.011	-0.012	-0.017	-0.025
23.H	-0.018	-0.220	-0.005	0.003	0.026	0.008	0.001	-0.041	0.013
24.H	0.012	0.307	0.006	0.006	-0.059	-0.016	0.038	0.154	-0.065
25.C	0.020	-0.013	0.020	0.002	-0.005	0.007	0.028	-0.035	0.055
26.H	0.032	0.028	-0.037	-0.028	0.032	-0.059	-0.083	0.208	-0.347
27.H	0.003	0.146	-0.116	-0.006	-0.003	-0.015	-0.009	0.121	-0.136
28.N	-0.003	-0.001	-0.002	0.001	-0.001	0.003	-0.008	0.001	0.017
29.H	-0.006	0.000	-0.018	-0.007	0.024	-0.035	-0.048	0.078	-0.166
30.C	0.000	0.002	0.009	-0.001	-0.009	0.016	-0.017	-0.016	0.064
31.H	-0.005	0.025	-0.045	-0.010	0.028	-0.061	-0.062	0.175	-0.365
32.H	0.011	0.008	0.004	-0.008	0.039	-0.068	0.029	0.079	-0.067
33.C	0.001	-0.007	-0.017	0.001	0.006	-0.002	0.017	-0.017	-0.063
34.H	0.010	0.034	0.065	0.002	0.014	0.021	0.061	0.181	0.357
35.H	0.002	0.037	0.053	-0.016	-0.009	-0.033	-0.029	0.077	0.060
36.N	0.001	-0.002	-0.001	0.002	0.000	0.003	0.008	0.001	-0.017
37.H	0.008	0.020	0.035	0.003	-0.007	0.005	0.047	0.082	0.163
38.C	-0.011	-0.011	-0.015	-0.018	-0.011	-0.015	-0.027	-0.035	-0.053
39.H	0.004	0.037	0.057	-0.039	0.014	0.011	0.083	0.212	0.335
40.H	0.004	0.076	0.074	-0.004	0.140	0.103	0.009	0.121	0.132
41.C	0.000	-0.001	-0.003	-0.009	-0.012	-0.025	0.012	-0.016	0.026
42.H	0.008	-0.095	-0.001	0.019	-0.209	0.013	-0.001	-0.033	-0.013
43.H	-0.012	0.111	0.007	-0.012	0.303	-0.017	-0.038	0.143	0.061
44.C	0.012	-0.026	0.021	0.040	-0.089	0.077	-0.001	0.025	-0.018
45.H	-0.026	0.131	-0.072	-0.101	0.415	-0.266	0.026	-0.056	0.044
46.H	-0.016	0.110	-0.124	-0.109	0.418	-0.470	0.050	-0.122	0.144
47.N	0.000	0.008	0.004	0.008	0.027	0.025	-0.004	-0.008	-0.008
48.C	-0.004	-0.006	-0.012	-0.026	-0.014	-0.049	0.006	0.002	0.009
49.C	0.002	-0.003	-0.001	0.009	-0.012	-0.005	-0.002	0.007	0.008
50.H	-0.019	0.020	0.011	-0.076	0.082	0.038	0.027	-0.023	-0.038
51.H	0.014	0.020	0.016	0.050	0.068	0.072	-0.020	-0.026	-0.040
52.H	-0.006	0.008	0.007	-0.041	0.034	0.028	0.004	-0.030	-0.019
53.C	0.002	0.010	0.011	0.021	0.053	0.062	-0.002	-0.011	-0.010
54.C	0.008	-0.006	0.003	0.035	-0.026	0.016	-0.006	0.006	-0.001
55.H	-0.011	0.008	-0.010	-0.016	0.016	-0.022	0.006	-0.003	0.008
56.C	-0.005	0.002	-0.003	-0.035	0.007	-0.026	0.003	0.000	0.002
57.F	0.000	-0.002	0.000	0.004	-0.008	-0.001	0.000	0.001	0.000
58.C	-0.004	0.010	0.002	-0.017	0.047	0.011	0.002	-0.008	-0.002
59.H	0.002	-0.018	-0.008	-0.002	-0.046	-0.022	-0.003	0.018	0.007
60.C	0.005	-0.007	0.000	0.033	-0.030	0.008	-0.003	0.004	0.000

61.H	-0.002	-0.004	-0.002	0.003	-0.019	-0.001	-0.006	0.007	-0.003
62.C	0.001	-0.008	-0.005	-0.012	-0.047	-0.038	0.002	0.006	0.006
63.O	-0.002	0.003	0.000	-0.009	0.013	0.001	0.000	-0.001	0.000

	1345.556		1345.888		1356.952
--	----------	--	----------	--	----------

	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1.Mn	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	-0.002	-0.003	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	-0.003	0.001
3.C	0.010	-0.002	0.009	-0.007	0.005	-0.009	0.006	0.006	0.001
4.C	-0.008	-0.006	-0.003	0.009	0.006	0.003	-0.010	-0.005	-0.004
5.H	0.006	0.001	0.002	-0.007	-0.001	-0.001	0.031	0.019	0.012
6.C	0.001	0.010	-0.005	-0.002	-0.008	0.003	0.001	0.000	0.001
7.H	-0.001	-0.004	0.000	-0.002	-0.005	0.002	0.007	0.024	-0.009
8.C	0.011	-0.003	0.011	-0.011	0.000	-0.010	0.011	0.000	0.009
9.F	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.001	0.000	-0.001	-0.001	0.000
10.C	-0.010	-0.008	-0.004	0.008	0.004	0.004	-0.008	-0.001	-0.005
11.H	-0.011	-0.010	-0.005	0.008	0.005	0.005	-0.027	-0.024	-0.031
12.C	-0.004	0.017	-0.020	0.007	-0.011	0.017	0.001	0.005	-0.005
13.C	0.002	-0.014	0.026	-0.003	0.009	-0.019	0.000	-0.003	0.011
14.C	-0.002	0.013	-0.021	0.002	-0.007	0.013	-0.004	0.056	-0.096
15.H	-0.019	0.004	0.083	0.007	-0.007	-0.049	-0.156	-0.043	0.516
16.H	0.023	-0.030	0.044	-0.012	0.015	-0.022	0.120	-0.164	0.319
17.H	0.041	-0.056	0.032	-0.029	0.032	-0.017	0.136	-0.411	0.271
18.N	-0.002	0.004	-0.008	0.001	-0.004	0.006	-0.004	0.000	-0.006
19.C	-0.007	-0.020	0.027	0.004	0.015	-0.013	0.002	-0.004	-0.003
20.H	0.003	0.081	0.045	-0.003	-0.052	-0.028	0.001	0.019	-0.005
21.H	-0.022	-0.178	-0.135	0.005	0.085	0.057	0.007	0.051	0.052
22.C	0.002	0.146	-0.008	-0.003	-0.085	0.001	-0.001	-0.016	0.000
23.H	-0.049	-0.561	0.016	0.028	0.316	-0.008	0.006	0.059	-0.002
24.H	0.015	-0.404	0.009	-0.003	0.248	-0.013	0.001	0.054	-0.004
25.C	0.008	-0.024	-0.017	-0.001	0.010	0.016	-0.002	-0.005	0.012
26.H	0.006	-0.180	0.223	-0.011	0.127	-0.165	0.000	0.042	-0.060
27.H	-0.007	0.103	-0.108	0.005	-0.046	0.055	-0.011	0.023	-0.034
28.N	0.005	-0.011	-0.005	-0.007	0.008	0.007	0.003	0.005	0.001
29.H	0.000	0.049	-0.040	-0.009	-0.034	0.009	0.006	-0.008	0.015
30.C	-0.006	-0.010	0.033	0.000	0.021	-0.019	-0.003	0.009	-0.015
31.H	-0.024	0.040	-0.131	0.006	0.002	0.026	0.006	-0.027	0.060
32.H	-0.002	0.060	-0.087	0.038	-0.073	0.161	0.016	-0.033	0.066

33.C	0.006	0.000	-0.021	0.003	-0.024	-0.032	-0.003	-0.008	-0.007
34.H	0.018	0.039	0.102	0.018	0.020	0.086	0.001	0.013	0.024
35.H	-0.016	0.021	0.005	0.033	0.098	0.181	0.017	0.024	0.053
36.N	-0.001	-0.007	0.001	-0.009	-0.013	0.009	0.002	-0.003	0.002
37.H	0.004	0.030	0.031	-0.008	0.057	0.029	0.002	0.001	0.001
38.C	-0.007	-0.016	0.009	-0.005	-0.019	0.023	0.000	0.006	0.011
39.H	0.000	-0.105	-0.121	-0.011	-0.203	-0.246	-0.003	-0.039	-0.055
40.H	0.003	0.069	0.067	0.007	0.088	0.095	-0.008	-0.026	-0.033
41.C	-0.001	0.090	0.004	-0.003	0.143	0.001	-0.001	0.009	-0.002
42.H	0.031	-0.348	-0.001	0.049	-0.537	0.001	0.004	-0.028	0.002
43.H	-0.012	-0.246	0.005	-0.011	-0.408	-0.005	0.002	-0.040	-0.005
44.C	0.004	-0.011	-0.018	0.007	-0.023	-0.024	0.002	0.001	0.000
45.H	0.000	0.046	-0.025	-0.003	0.082	-0.044	-0.001	-0.011	-0.005
46.H	0.017	-0.117	0.095	0.014	-0.153	0.115	-0.003	-0.021	0.021
47.N	0.002	0.001	0.005	0.003	0.005	0.009	-0.003	0.001	-0.003
48.C	-0.001	-0.009	-0.015	-0.005	-0.015	-0.030	0.000	0.001	0.005
49.C	0.001	0.009	0.014	0.003	0.013	0.022	-0.002	-0.033	-0.055
50.H	0.014	0.000	-0.055	0.016	0.008	-0.086	-0.091	0.032	0.298
51.H	-0.016	-0.021	-0.031	-0.021	-0.029	-0.043	0.069	0.099	0.183
52.H	-0.024	-0.039	-0.021	-0.046	-0.058	-0.031	0.079	0.243	0.152
53.C	0.000	0.011	0.010	0.007	0.021	0.024	0.000	-0.002	-0.002
54.C	0.006	-0.006	0.002	0.013	-0.009	0.006	-0.004	0.000	-0.003
55.H	0.004	-0.005	0.002	0.011	-0.008	0.005	-0.016	0.014	-0.019
56.C	-0.005	-0.002	-0.005	-0.015	-0.001	-0.014	0.007	0.000	0.006
57.F	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.002	0.000	-0.001	0.001	0.000
58.C	-0.001	0.006	0.003	-0.003	0.014	0.005	0.001	0.000	0.001
59.H	0.002	-0.008	-0.002	-0.001	-0.002	0.000	0.005	-0.017	-0.006
60.C	0.004	-0.003	0.001	0.012	-0.009	0.004	-0.006	0.003	-0.003
61.H	-0.001	0.000	-0.001	-0.008	0.000	-0.001	0.019	-0.011	0.007
62.C	-0.005	0.000	-0.005	-0.011	-0.007	-0.013	0.003	-0.002	0.001
63.O	0.002	-0.002	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000

1358.164

1375.136

1389.984

1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	0.000
2.O	-0.002	-0.003	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.001	0.000
3.C	0.004	0.005	0.000	-0.001	0.000	-0.001	-0.006	-0.004	-0.002
4.C	-0.004	-0.003	-0.001	0.002	0.001	0.001	0.002	-0.001	0.002

5.H	0.014	0.008	0.006	-0.007	-0.003	0.000	-0.007	-0.008	-0.002
6.C	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.003	0.004	0.000
7.H	0.002	0.007	-0.003	-0.002	-0.011	0.004	-0.003	-0.024	0.012
8.C	0.005	0.000	0.004	-0.004	-0.001	-0.003	-0.008	0.000	-0.007
9.F	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.001
10.C	-0.005	-0.002	-0.002	0.000	-0.003	0.001	-0.001	-0.006	0.003
11.H	-0.014	-0.014	-0.015	0.000	-0.003	0.001	0.007	-0.001	0.008
12.C	0.002	0.005	-0.003	0.005	0.004	0.002	0.009	0.009	0.002
13.C	0.000	-0.002	0.008	-0.001	0.001	-0.003	0.000	0.002	-0.004
14.C	-0.003	0.032	-0.056	-0.001	0.005	-0.009	-0.001	0.002	-0.003
15.H	-0.089	-0.023	0.301	-0.014	0.000	0.066	-0.004	0.003	0.035
16.H	0.068	-0.093	0.182	0.009	-0.014	0.026	0.003	-0.004	0.009
17.H	0.081	-0.240	0.158	0.022	-0.056	0.038	0.013	-0.031	0.022
18.N	-0.003	0.001	-0.004	-0.003	0.001	-0.002	-0.005	-0.001	-0.001
19.C	0.001	-0.005	-0.004	0.003	-0.005	-0.016	0.002	-0.003	-0.012
20.H	0.003	0.013	0.002	0.020	-0.006	0.022	0.016	-0.003	0.021
21.H	0.016	0.050	0.052	0.043	0.106	0.102	0.030	0.074	0.070
22.C	0.001	-0.011	0.004	0.011	-0.032	0.026	0.008	-0.025	0.019
23.H	0.004	0.052	-0.004	0.010	0.186	-0.031	0.008	0.128	-0.015
24.H	-0.004	0.025	0.005	-0.025	-0.025	0.050	-0.023	-0.006	0.038
25.C	-0.004	0.003	-0.001	-0.009	0.065	-0.073	-0.002	0.057	-0.059
26.H	0.009	0.003	0.002	0.027	-0.169	0.292	0.017	-0.137	0.241
27.H	-0.002	-0.009	0.008	0.064	-0.258	0.319	0.053	-0.211	0.253
28.N	0.002	0.002	-0.001	-0.024	-0.016	-0.011	-0.029	-0.016	-0.012
29.H	0.007	-0.011	0.022	-0.017	-0.045	0.032	-0.025	-0.041	0.021
30.C	0.002	0.001	-0.011	0.024	-0.031	0.049	0.021	-0.018	0.098
31.H	0.009	-0.023	0.054	-0.011	0.117	-0.231	-0.039	0.154	-0.425
32.H	-0.005	-0.010	0.004	-0.080	0.092	-0.216	-0.068	0.098	-0.147
33.C	0.000	0.005	0.016	0.023	0.032	0.045	-0.022	-0.021	-0.098
34.H	-0.010	-0.036	-0.075	-0.009	-0.125	-0.216	0.039	0.178	0.426
35.H	-0.003	-0.025	-0.034	-0.074	-0.093	-0.206	0.063	0.106	0.150
36.N	-0.003	0.004	0.000	-0.024	0.014	-0.011	0.030	-0.016	0.013
37.H	-0.008	-0.014	-0.024	-0.017	0.048	0.032	0.026	-0.045	-0.022
38.C	0.004	-0.001	-0.005	-0.008	-0.065	-0.070	0.001	0.061	0.058
39.H	-0.008	0.027	0.031	0.019	0.171	0.278	-0.005	-0.146	-0.241
40.H	0.007	0.006	0.011	0.062	0.268	0.306	-0.053	-0.233	-0.250
41.C	-0.001	-0.018	-0.003	0.011	0.033	0.025	-0.008	-0.027	-0.019
42.H	-0.007	0.076	0.001	0.011	-0.185	-0.026	-0.009	0.133	0.011
43.H	0.004	0.054	-0.004	-0.026	0.022	0.049	0.024	-0.003	-0.040

44.C	-0.002	-0.006	0.006	0.002	0.005	-0.017	-0.001	-0.003	0.013
45.H	-0.005	0.025	-0.003	0.020	0.008	0.024	-0.018	-0.005	-0.025
46.H	-0.015	0.068	-0.073	0.045	-0.103	0.105	-0.034	0.076	-0.076
47.N	0.005	0.001	0.007	-0.003	-0.001	-0.002	0.004	-0.001	0.001
48.C	0.000	-0.004	-0.011	-0.001	-0.001	-0.004	0.000	0.002	0.005
49.C	0.005	0.057	0.094	-0.001	-0.005	-0.009	0.001	0.002	0.003
50.H	0.154	-0.052	-0.517	-0.014	0.001	0.067	0.004	0.002	-0.036
51.H	-0.116	-0.167	-0.311	0.009	0.014	0.026	-0.002	-0.004	-0.009
52.H	-0.139	-0.421	-0.263	0.022	0.057	0.038	-0.013	-0.032	-0.022
53.C	-0.003	0.007	0.004	0.005	-0.003	0.002	-0.009	0.008	-0.003
54.C	0.008	-0.002	0.005	0.000	0.002	0.001	0.001	-0.006	-0.003
55.H	0.025	-0.023	0.029	0.000	0.003	0.001	-0.007	-0.001	-0.008
56.C	-0.009	-0.001	-0.008	-0.004	0.001	-0.003	0.008	0.000	0.007
57.F	0.001	-0.001	0.000	0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.001	-0.001
58.C	-0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.004	0.000
59.H	-0.005	0.018	0.006	-0.002	0.010	0.004	0.002	-0.023	-0.011
60.C	0.008	-0.005	0.003	0.002	-0.001	0.001	-0.002	-0.001	-0.002
61.H	-0.026	0.016	-0.011	-0.006	0.003	0.000	0.007	-0.008	0.002
62.C	-0.006	0.007	0.000	-0.002	0.000	-0.001	0.006	-0.004	0.002
63.O	0.002	-0.003	-0.001	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.001	0.000

1394.685

1395.499

1417.942

1.Mn	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	-0.027	-0.024	-0.005	0.037	0.031	0.008	-0.001	0.000	0.000
3.C	0.099	0.071	0.032	-0.117	-0.085	-0.038	0.000	-0.003	0.002
4.C	-0.010	0.045	-0.033	0.004	-0.058	0.035	0.004	0.005	0.001
5.H	0.061	0.095	-0.017	-0.047	-0.098	0.027	-0.013	-0.007	-0.008
6.C	-0.066	-0.084	-0.005	0.080	0.099	0.008	-0.002	-0.001	-0.001
7.H	0.024	0.368	-0.190	-0.021	-0.412	0.218	-0.003	-0.004	0.000
8.C	0.122	-0.004	0.106	-0.138	0.007	-0.122	-0.002	-0.003	0.000
9.F	-0.018	-0.008	-0.011	0.021	0.009	0.013	0.000	0.001	0.000
10.C	0.027	0.104	-0.037	-0.036	-0.121	0.040	0.003	0.001	0.002
11.H	-0.160	-0.012	-0.153	0.198	0.023	0.181	-0.011	-0.008	-0.004
12.C	-0.138	-0.145	-0.035	0.161	0.166	0.044	-0.001	0.002	-0.002
13.C	-0.008	-0.020	0.047	0.013	0.025	-0.054	0.001	0.001	-0.001
14.C	-0.009	-0.007	0.000	0.014	0.008	0.000	-0.002	-0.002	0.000
15.H	0.042	0.050	0.010	-0.054	-0.071	-0.048	0.014	0.020	0.022

16.H	-0.021	0.015	-0.100	0.025	-0.013	0.147	-0.008	0.009	-0.020
17.H	0.098	0.051	-0.046	-0.153	-0.043	0.042	0.028	-0.011	0.007
18.N	0.057	0.042	0.001	-0.067	-0.051	0.001	-0.003	-0.001	-0.002
19.C	-0.012	-0.006	-0.007	0.027	0.006	0.016	-0.002	0.000	0.001
20.H	-0.038	-0.064	-0.068	0.019	0.122	0.000	0.002	-0.011	0.010
21.H	0.042	0.032	0.039	-0.171	-0.045	-0.063	0.029	0.016	0.023
22.C	-0.004	-0.006	0.002	0.004	0.003	-0.005	-0.014	-0.005	0.036
23.H	0.000	0.039	0.010	0.004	-0.019	-0.007	-0.092	-0.014	-0.284
24.H	-0.004	0.004	0.001	0.003	-0.005	-0.003	0.263	-0.010	-0.145
25.C	0.002	0.006	-0.002	0.001	-0.008	0.008	0.022	0.014	-0.029
26.H	-0.029	-0.007	0.013	-0.016	0.025	-0.046	-0.024	-0.024	0.023
27.H	-0.003	-0.033	-0.003	-0.003	0.009	-0.014	0.070	-0.062	0.162
28.N	-0.002	0.001	-0.001	0.004	0.002	0.003	0.005	-0.029	0.038
29.H	0.000	-0.030	0.014	0.001	0.028	-0.021	-0.082	0.272	-0.395
30.C	0.004	0.000	0.000	-0.005	0.004	-0.014	-0.037	0.004	-0.012
31.H	0.002	0.010	-0.020	0.003	-0.035	0.059	-0.018	0.008	0.131
32.H	-0.010	-0.008	0.007	0.002	-0.014	0.022	0.139	0.057	-0.010
33.C	0.005	0.000	0.002	0.004	0.005	0.014	0.037	0.004	0.013
34.H	0.002	-0.017	-0.028	-0.003	-0.035	-0.055	0.017	0.013	-0.134
35.H	-0.010	0.006	0.003	0.000	-0.017	-0.024	-0.145	0.055	0.004
36.N	-0.003	0.000	-0.001	-0.004	0.002	-0.003	-0.004	-0.029	-0.037
37.H	0.000	0.036	0.017	-0.001	0.022	0.017	0.080	0.275	0.378
38.C	0.002	-0.007	-0.003	-0.001	-0.007	-0.008	-0.022	0.015	0.028
39.H	-0.026	0.012	0.021	0.018	0.026	0.044	0.027	-0.024	-0.023
40.H	-0.003	0.033	-0.003	0.003	0.005	0.013	-0.068	-0.069	-0.158
41.C	-0.005	0.006	0.003	-0.003	0.002	0.005	0.014	-0.007	-0.036
42.H	-0.001	-0.037	0.013	-0.004	-0.007	0.005	0.092	-0.003	0.285
43.H	-0.005	-0.004	0.002	-0.002	-0.003	0.002	-0.263	-0.005	0.145
44.C	-0.017	0.007	-0.010	-0.025	0.004	-0.014	0.002	0.001	-0.001
45.H	-0.040	0.085	-0.065	-0.011	0.109	0.012	-0.001	-0.014	-0.009
46.H	0.076	-0.039	0.053	0.162	-0.036	0.055	-0.029	0.015	-0.023
47.N	0.068	-0.051	0.001	0.054	-0.042	0.000	0.002	0.000	0.002
48.C	-0.008	0.027	0.060	-0.009	0.023	0.047	-0.001	0.001	0.001
49.C	-0.013	0.008	-0.002	-0.013	0.007	-0.002	0.002	-0.002	0.000
50.H	0.054	-0.067	0.026	0.046	-0.063	0.051	-0.013	0.018	-0.022
51.H	-0.025	-0.020	-0.131	-0.019	-0.013	-0.128	0.007	0.009	0.019
52.H	0.135	-0.060	-0.052	0.139	-0.033	-0.031	-0.026	-0.010	-0.006
53.C	-0.169	0.169	-0.053	-0.133	0.131	-0.044	0.001	0.002	0.002
54.C	0.030	-0.125	-0.042	0.027	-0.099	-0.030	-0.003	0.001	-0.002

55.H	-0.196	0.011	-0.187	-0.164	0.016	-0.150	0.010	-0.007	0.004
56.C	0.150	0.009	0.131	0.116	0.008	0.102	0.002	-0.003	0.000
57.F	-0.022	0.009	-0.014	-0.017	0.007	-0.011	0.000	0.001	0.000
58.C	-0.079	0.098	-0.011	-0.065	0.078	-0.010	0.002	-0.001	0.001
59.H	0.027	-0.446	-0.214	0.016	-0.338	-0.167	0.003	-0.004	0.001
60.C	-0.014	-0.053	-0.038	-0.005	-0.046	-0.027	-0.004	0.004	-0.001
61.H	0.074	-0.114	-0.016	0.040	-0.080	-0.018	0.011	-0.006	0.007
62.C	0.123	-0.084	0.044	0.098	-0.067	0.035	0.000	-0.003	-0.001
63.O	-0.034	0.029	-0.007	-0.031	0.026	-0.007	0.001	0.000	0.000

	1423.679	1432.805	1435.401						
	-----	-----	-----						
1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.000
2.O	-0.001	0.000	-0.001	-0.003	0.010	-0.006	0.000	0.009	-0.004
3.C	0.000	-0.005	0.004	-0.014	-0.063	0.028	-0.010	-0.050	0.023
4.C	0.010	0.010	0.002	0.079	0.075	0.020	0.054	0.054	0.013
5.H	-0.028	-0.012	-0.014	-0.235	-0.114	-0.114	-0.164	-0.080	-0.084
6.C	-0.005	-0.004	-0.002	-0.037	-0.025	-0.016	-0.026	-0.019	-0.010
7.H	-0.007	-0.006	-0.002	-0.055	-0.071	-0.003	-0.036	-0.043	-0.004
8.C	-0.004	-0.006	0.000	-0.044	-0.047	-0.011	-0.031	-0.033	-0.008
9.F	0.001	0.002	0.000	0.007	0.014	-0.002	0.005	0.010	-0.001
10.C	0.007	0.003	0.004	0.062	0.028	0.039	0.043	0.019	0.027
11.H	-0.021	-0.014	-0.009	-0.163	-0.115	-0.069	-0.121	-0.087	-0.053
12.C	-0.003	0.003	-0.005	-0.022	0.024	-0.037	-0.017	0.020	-0.029
13.C	0.003	0.003	-0.001	0.028	0.033	-0.021	0.031	0.028	-0.015
14.C	-0.004	-0.004	0.001	-0.030	-0.025	0.011	-0.018	-0.024	0.003
15.H	0.027	0.036	0.032	0.185	0.248	0.236	0.182	0.225	0.146
16.H	-0.015	0.018	-0.033	-0.089	0.102	-0.267	-0.109	0.152	-0.122
17.H	0.044	-0.014	0.009	0.357	-0.092	0.060	0.193	-0.097	0.062
18.N	-0.005	-0.002	-0.003	-0.038	-0.030	0.006	-0.034	-0.028	0.006
19.C	-0.001	0.002	0.004	-0.010	0.014	-0.009	0.009	0.000	0.003
20.H	-0.003	-0.020	-0.001	0.073	-0.082	0.196	0.016	0.071	0.021
21.H	0.023	0.008	0.015	0.147	-0.051	-0.054	-0.087	-0.022	-0.034
22.C	-0.018	-0.004	0.041	0.008	0.004	-0.014	0.008	0.001	-0.009
23.H	-0.113	-0.011	-0.345	0.038	-0.023	0.111	0.026	-0.008	0.064
24.H	0.323	-0.013	-0.183	-0.105	0.023	0.058	-0.065	0.013	0.038
25.C	0.012	0.004	-0.016	0.000	-0.005	0.005	0.004	0.001	0.002
26.H	0.033	0.003	-0.005	-0.005	0.009	-0.020	-0.052	0.004	-0.014

27.H	0.053	0.014	0.117	-0.005	0.007	-0.017	-0.007	-0.042	-0.018
28.N	0.008	-0.019	0.027	0.001	0.003	-0.002	0.002	0.001	0.002
29.H	-0.058	0.212	-0.301	0.005	-0.006	0.019	0.000	0.009	-0.008
30.C	-0.014	0.019	-0.002	-0.001	-0.002	-0.001	-0.001	0.002	-0.002
31.H	-0.017	-0.199	0.059	0.001	0.015	0.007	-0.001	-0.013	0.006
32.H	-0.086	-0.002	-0.006	0.015	0.004	-0.002	-0.006	-0.005	0.007
33.C	-0.014	-0.019	-0.001	-0.001	0.003	0.000	0.002	0.002	0.003
34.H	-0.018	0.198	0.053	0.001	-0.021	0.008	0.001	-0.017	-0.011
35.H	-0.084	0.000	-0.007	0.020	-0.007	-0.004	0.004	-0.004	-0.007
36.N	0.008	0.020	0.026	0.000	-0.002	-0.002	-0.002	0.001	-0.003
37.H	-0.057	-0.221	-0.297	0.004	0.006	0.015	0.001	0.017	0.016
38.C	0.012	-0.005	-0.016	-0.001	0.005	0.003	-0.005	-0.001	-0.003
39.H	0.035	-0.001	-0.002	0.013	-0.006	-0.012	0.054	0.007	0.021
40.H	0.054	-0.009	0.122	-0.001	-0.021	-0.007	0.007	-0.038	0.021
41.C	-0.019	0.006	0.042	0.005	-0.004	-0.010	-0.010	0.003	0.014
42.H	-0.116	-0.003	-0.356	0.027	0.022	0.084	-0.039	-0.021	-0.103
43.H	0.331	0.007	-0.187	-0.078	-0.015	0.042	0.101	0.019	-0.058
44.C	-0.001	-0.003	0.004	-0.013	-0.013	-0.010	-0.003	0.007	0.002
45.H	-0.004	0.024	-0.002	0.060	0.109	0.169	-0.047	0.015	-0.110
46.H	0.025	-0.008	0.015	0.168	0.040	-0.040	0.003	-0.041	0.054
47.N	-0.004	0.002	-0.003	-0.022	0.017	0.003	0.045	-0.037	-0.006
48.C	0.003	-0.003	-0.001	0.014	-0.020	-0.013	-0.038	0.039	0.021
49.C	-0.004	0.003	0.001	-0.021	0.015	0.009	0.029	-0.032	-0.008
50.H	0.024	-0.032	0.031	0.101	-0.140	0.165	-0.230	0.291	-0.237
51.H	-0.013	-0.017	-0.032	-0.040	-0.041	-0.202	0.127	0.170	0.232
52.H	0.042	0.013	0.008	0.258	0.045	0.030	-0.333	-0.115	-0.072
53.C	-0.003	-0.003	-0.004	-0.014	-0.015	-0.023	0.025	0.029	0.041
54.C	0.006	-0.003	0.004	0.040	-0.017	0.026	-0.064	0.027	-0.042
55.H	-0.018	0.013	-0.009	-0.104	0.072	-0.046	0.175	-0.124	0.081
56.C	-0.003	0.005	0.000	-0.028	0.031	-0.008	0.045	-0.050	0.013
57.F	0.001	-0.001	0.000	0.004	-0.009	-0.001	-0.007	0.015	0.002
58.C	-0.005	0.003	-0.002	-0.025	0.015	-0.012	0.039	-0.026	0.017
59.H	-0.006	0.005	-0.002	-0.037	0.049	-0.003	0.056	-0.071	0.006
60.C	0.009	-0.008	0.002	0.053	-0.048	0.015	-0.083	0.079	-0.023
61.H	-0.025	0.011	-0.012	-0.155	0.073	-0.076	0.248	-0.118	0.127
62.C	0.001	0.004	0.003	-0.009	0.039	0.016	0.016	-0.072	-0.030
63.O	-0.001	0.000	-0.001	-0.003	-0.006	-0.004	0.001	0.012	0.006

	1439.407	1441.533	1443.444						
	-----			-----			-----		
1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.000	-0.001	0.006	0.001	0.002
3.C	0.000	-0.001	0.001	0.001	-0.008	0.006	-0.003	0.019	-0.013
4.C	0.000	0.001	0.000	0.013	0.014	0.003	-0.040	-0.038	-0.010
5.H	-0.004	-0.002	-0.001	-0.035	-0.016	-0.020	0.103	0.047	0.053
6.C	0.000	0.000	0.000	-0.008	-0.007	-0.003	0.024	0.017	0.010
7.H	0.000	-0.001	0.001	-0.008	-0.001	-0.006	0.027	0.011	0.016
8.C	-0.001	0.000	-0.001	-0.002	-0.007	0.002	0.004	0.022	-0.009
9.F	0.000	0.000	0.000	0.001	0.002	-0.001	-0.002	-0.006	0.002
10.C	0.001	0.000	0.001	0.008	0.005	0.005	-0.022	-0.015	-0.013
11.H	-0.003	-0.001	0.001	-0.033	-0.027	-0.023	0.091	0.073	0.064
12.C	0.001	0.001	0.000	-0.010	0.003	-0.012	0.026	-0.009	0.033
13.C	0.002	0.001	-0.004	0.012	0.005	0.009	-0.022	-0.001	-0.033
14.C	-0.002	-0.009	-0.001	0.005	0.005	-0.004	-0.015	-0.022	0.009
15.H	0.072	0.082	0.025	-0.047	-0.060	-0.046	0.179	0.221	0.145
16.H	-0.052	0.082	-0.016	0.028	-0.039	0.075	-0.113	0.162	-0.195
17.H	0.020	-0.039	0.026	-0.068	0.025	-0.018	0.194	-0.105	0.074
18.N	-0.003	-0.004	-0.002	-0.003	-0.003	0.000	-0.003	-0.001	0.007
19.C	0.007	0.003	0.011	0.008	-0.007	0.001	-0.019	0.018	-0.012
20.H	-0.022	-0.007	-0.056	-0.018	0.085	-0.061	0.068	-0.185	0.200
21.H	-0.038	-0.008	-0.004	-0.111	0.016	0.005	0.261	-0.055	-0.045
22.C	-0.019	0.000	0.040	0.011	-0.004	-0.027	-0.002	0.005	-0.001
23.H	-0.124	0.018	-0.376	0.081	0.004	0.241	-0.004	-0.011	-0.006
24.H	0.348	-0.035	-0.199	-0.222	0.021	0.124	0.010	-0.002	-0.009
25.C	-0.018	-0.007	0.023	-0.006	-0.013	-0.021	0.006	0.003	0.009
26.H	0.074	0.027	-0.008	0.175	0.019	-0.033	-0.091	-0.004	-0.001
27.H	-0.040	0.083	-0.085	0.072	0.140	0.179	-0.028	-0.063	-0.078
28.N	-0.003	0.016	-0.026	0.005	-0.010	0.019	0.000	0.004	-0.004
29.H	0.049	-0.162	0.236	-0.039	0.144	-0.204	0.011	-0.036	0.048
30.C	0.030	0.008	0.011	0.005	0.023	0.007	0.001	-0.004	-0.003
31.H	0.009	-0.110	-0.116	-0.016	-0.277	-0.052	0.004	0.037	0.012
32.H	-0.187	-0.054	0.001	-0.227	-0.041	-0.011	0.027	-0.002	0.007
33.C	-0.030	0.009	-0.013	0.001	-0.022	0.008	0.002	-0.004	0.005
34.H	-0.007	-0.129	0.125	-0.018	0.267	-0.053	-0.004	0.040	-0.030
35.H	0.204	-0.056	0.003	-0.211	0.032	-0.017	-0.043	0.001	-0.010
36.N	0.002	0.016	0.024	0.005	0.013	0.021	-0.002	0.003	0.001
37.H	-0.046	-0.156	-0.217	-0.045	-0.172	-0.232	-0.007	-0.022	-0.027

38.C	0.019	-0.009	-0.021	-0.005	0.012	-0.025	-0.012	0.004	-0.010
39.H	-0.089	0.026	0.007	0.191	-0.017	-0.029	0.136	-0.011	-0.003
40.H	0.034	0.095	0.069	0.082	-0.140	0.210	0.033	-0.086	0.107
41.C	0.018	-0.001	-0.037	0.013	0.003	-0.031	0.003	0.006	-0.002
42.H	0.115	0.028	0.349	0.091	0.002	0.273	0.008	-0.032	0.006
43.H	-0.323	-0.026	0.186	-0.253	-0.019	0.142	-0.013	0.012	0.010
44.C	-0.006	0.003	-0.011	0.008	0.007	0.001	0.035	0.023	0.021
45.H	0.022	-0.004	0.055	-0.016	-0.091	-0.057	-0.091	-0.280	-0.282
46.H	0.037	-0.007	0.004	-0.111	-0.017	0.007	-0.405	-0.046	0.027
47.N	0.003	-0.004	0.002	-0.003	0.003	0.000	-0.006	0.008	-0.002
48.C	-0.003	0.001	0.003	0.011	-0.004	0.008	0.028	-0.002	0.018
49.C	0.002	-0.007	0.000	0.005	-0.004	-0.004	0.015	0.004	-0.016
50.H	-0.057	0.065	-0.024	-0.034	0.045	-0.046	0.038	-0.020	-0.106
51.H	0.040	0.063	0.015	0.017	0.023	0.078	-0.058	-0.109	0.238
52.H	-0.021	-0.030	-0.019	-0.073	-0.016	-0.012	-0.227	0.040	0.019
53.C	0.000	0.002	0.001	-0.009	-0.002	-0.010	-0.022	-0.005	-0.024
54.C	-0.003	0.001	-0.002	0.006	-0.004	0.003	0.014	-0.012	0.007
55.H	0.009	-0.005	0.003	-0.027	0.021	-0.020	-0.074	0.055	-0.054
56.C	0.002	-0.002	0.001	0.000	0.005	0.002	0.002	0.013	0.008
57.F	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.004	-0.001
58.C	0.001	-0.001	0.001	-0.007	0.006	-0.002	-0.019	0.018	-0.005
59.H	0.002	-0.004	0.000	-0.006	-0.003	-0.006	-0.015	-0.014	-0.019
60.C	-0.003	0.003	-0.001	0.010	-0.011	0.002	0.025	-0.028	0.005
61.H	0.011	-0.005	0.005	-0.026	0.011	-0.016	-0.064	0.023	-0.037
62.C	0.001	-0.003	-0.001	0.002	0.006	0.005	0.008	0.010	0.012
63.O	0.000	0.001	0.000	-0.002	0.000	-0.001	-0.006	0.003	-0.002

1444.324

1446.653

1448.170

1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.002	0.000	0.002
2.O	0.003	0.003	0.000	0.001	0.008	-0.003	-0.004	0.003	-0.004
3.C	-0.010	-0.007	-0.003	-0.015	-0.039	0.014	-0.004	-0.030	0.017
4.C	0.006	-0.001	0.005	0.045	0.037	0.015	0.040	0.038	0.011
5.H	-0.019	-0.017	-0.005	-0.131	-0.070	-0.061	-0.113	-0.055	-0.057
6.C	0.001	0.010	-0.004	-0.019	-0.004	-0.013	-0.021	-0.014	-0.009
7.H	-0.007	-0.032	0.011	-0.033	-0.055	0.003	-0.027	-0.021	-0.010
8.C	-0.008	-0.005	-0.003	-0.021	-0.029	-0.002	-0.010	-0.023	0.004
9.F	0.001	0.001	0.000	0.004	0.008	-0.001	0.002	0.006	-0.001

10.C	0.004	-0.002	0.004	0.030	0.013	0.021	0.026	0.015	0.015
11.H	0.013	0.005	0.011	-0.078	-0.066	-0.043	-0.097	-0.076	-0.060
12.C	0.005	0.003	0.000	-0.016	0.017	-0.029	-0.023	0.014	-0.032
13.C	-0.020	-0.003	0.007	0.008	0.008	0.022	0.028	0.007	0.021
14.C	-0.007	0.029	0.017	-0.003	0.029	0.010	0.010	0.004	-0.010
15.H	-0.245	-0.256	0.014	-0.249	-0.270	-0.029	-0.033	-0.054	-0.088
16.H	0.206	-0.350	-0.164	0.203	-0.338	-0.062	0.007	0.004	0.170
17.H	0.153	0.170	-0.111	0.077	0.176	-0.120	-0.156	0.015	-0.014
18.N	0.012	0.012	-0.005	-0.001	0.000	-0.007	-0.008	-0.009	-0.005
19.C	-0.032	0.014	-0.021	-0.008	0.000	-0.004	0.025	-0.013	0.018
20.H	0.069	-0.208	0.225	0.007	-0.025	0.035	-0.072	0.173	-0.214
21.H	0.333	-0.006	0.011	0.054	0.024	0.028	-0.277	0.033	0.021
22.C	-0.003	0.003	0.003	-0.004	0.000	0.014	-0.005	-0.004	0.014
23.H	-0.008	-0.033	-0.004	-0.037	-0.014	-0.103	-0.041	0.031	-0.134
24.H	0.010	0.020	-0.006	0.095	0.009	-0.052	0.117	-0.021	-0.065
25.C	0.011	0.004	0.004	0.002	0.003	0.010	-0.023	-0.009	0.005
26.H	-0.097	-0.012	0.007	-0.064	-0.003	0.007	0.173	0.018	0.004
27.H	-0.018	-0.062	-0.066	-0.030	-0.039	-0.082	0.003	0.133	0.038
28.N	0.002	0.000	0.002	-0.001	0.007	-0.009	-0.007	0.006	-0.019
29.H	-0.001	0.008	-0.012	0.020	-0.061	0.093	0.030	-0.108	0.167
30.C	-0.002	0.000	-0.003	0.006	-0.003	0.000	0.002	-0.016	0.002
31.H	0.000	0.001	0.020	0.005	0.021	-0.015	0.010	0.163	-0.004
32.H	0.013	0.000	0.006	-0.004	-0.006	0.002	0.107	0.027	-0.016
33.C	-0.004	-0.002	-0.001	-0.005	0.006	0.000	0.005	0.014	0.003
34.H	-0.003	0.017	0.015	0.000	-0.065	0.016	0.010	-0.143	-0.014
35.H	0.004	-0.005	0.000	0.062	-0.020	-0.008	0.081	-0.021	-0.015
36.N	0.001	0.004	0.006	-0.003	0.003	-0.001	-0.007	-0.008	-0.020
37.H	-0.011	-0.041	-0.056	-0.004	-0.003	-0.004	0.033	0.121	0.178
38.C	0.005	-0.001	-0.005	-0.012	0.005	-0.007	-0.023	0.010	0.007
39.H	-0.006	0.007	0.006	0.121	-0.010	-0.003	0.166	-0.018	0.006
40.H	0.010	0.003	0.014	0.025	-0.079	0.086	-0.001	-0.131	0.028
41.C	0.000	0.001	0.000	0.002	0.002	-0.006	-0.005	0.005	0.017
42.H	0.004	0.018	0.024	0.013	-0.029	0.025	-0.048	-0.029	-0.152
43.H	-0.021	-0.015	0.013	-0.026	0.021	0.013	0.135	0.012	-0.074
44.C	-0.011	0.001	-0.008	0.020	0.006	0.013	0.021	0.014	0.015
45.H	0.006	0.032	0.032	-0.039	-0.111	-0.130	-0.064	-0.164	-0.185
46.H	0.073	-0.029	0.036	-0.185	0.011	-0.023	-0.242	-0.045	0.037
47.N	0.012	-0.011	-0.007	-0.005	0.005	0.005	-0.007	0.008	-0.009
48.C	-0.003	0.004	0.024	0.005	0.004	-0.015	0.031	-0.009	0.031

49.C	0.005	-0.032	0.005	0.006	0.030	-0.015	0.008	-0.018	-0.005
50.H	-0.265	0.298	-0.091	0.262	-0.279	0.010	-0.153	0.182	-0.101
51.H	0.200	0.318	0.016	-0.221	-0.365	0.132	0.107	0.167	0.128
52.H	-0.032	-0.171	-0.109	-0.132	0.188	0.118	-0.108	-0.101	-0.069
53.C	-0.010	-0.005	-0.016	0.007	0.012	0.016	-0.030	-0.022	-0.045
54.C	0.011	-0.006	0.007	-0.019	0.006	-0.014	0.039	-0.020	0.025
55.H	-0.033	0.030	-0.026	0.036	-0.033	0.020	-0.131	0.102	-0.083
56.C	-0.004	0.013	0.004	0.016	-0.019	0.003	-0.019	0.037	0.003
57.F	0.001	-0.003	-0.001	-0.003	0.005	0.000	0.004	-0.010	-0.002
58.C	-0.011	0.002	-0.008	0.010	0.002	0.009	-0.031	0.016	-0.016
59.H	-0.017	0.021	-0.003	0.022	-0.046	-0.006	-0.042	0.046	-0.011
60.C	0.022	-0.017	0.008	-0.029	0.020	-0.012	0.061	-0.055	0.019
61.H	-0.056	0.029	-0.027	0.083	-0.047	0.038	-0.173	0.085	-0.087
62.C	-0.003	0.010	0.003	0.013	-0.026	-0.005	-0.011	0.048	0.021
63.O	-0.002	0.000	-0.001	-0.003	0.006	0.001	-0.003	-0.007	-0.005

1452.358

1455.571

1464.897

1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
2.O	-0.001	-0.001	0.001	-0.002	0.001	-0.002	-0.001	-0.004	0.001
3.C	0.003	0.003	0.000	-0.001	-0.014	0.008	0.005	0.012	-0.004
4.C	0.000	0.001	-0.001	0.017	0.017	0.004	-0.009	-0.007	-0.003
5.H	0.006	0.004	0.000	-0.051	-0.023	-0.024	0.032	0.018	0.014
6.C	-0.002	-0.003	0.000	-0.009	-0.008	-0.003	0.003	0.000	0.002
7.H	0.000	0.008	-0.004	-0.010	-0.005	-0.006	0.006	0.015	-0.003
8.C	0.004	0.000	0.004	-0.004	-0.008	0.001	0.008	0.006	0.003
9.F	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.002	-0.001	-0.001	-0.002	0.000
10.C	-0.002	0.001	-0.002	0.011	0.006	0.007	-0.009	-0.003	-0.006
11.H	-0.007	-0.005	-0.008	-0.044	-0.036	-0.029	0.019	0.015	0.008
12.C	-0.002	-0.001	-0.002	-0.010	0.007	-0.015	0.003	-0.005	0.007
13.C	0.002	-0.005	0.004	0.016	0.003	0.009	-0.005	-0.004	-0.002
14.C	0.007	-0.002	-0.006	0.008	0.000	-0.008	0.002	-0.001	-0.002
15.H	0.027	0.019	-0.040	0.004	-0.009	-0.057	0.013	0.011	-0.009
16.H	-0.034	0.066	0.088	-0.019	0.042	0.127	-0.015	0.029	0.022
17.H	-0.097	-0.028	0.018	-0.124	-0.016	0.010	-0.032	-0.016	0.012
18.N	0.002	0.002	-0.001	-0.006	-0.004	-0.001	0.004	0.004	0.001
19.C	0.005	-0.007	0.003	0.008	-0.012	0.001	-0.005	0.001	-0.004
20.H	-0.017	0.052	-0.052	-0.016	0.108	-0.062	0.012	-0.022	0.035

21.H	-0.065	0.013	0.013	-0.116	0.024	0.019	0.046	-0.002	-0.001
22.C	-0.001	0.003	0.010	0.007	0.001	-0.007	0.002	0.000	-0.008
23.H	-0.027	-0.005	-0.083	0.031	-0.024	0.086	0.024	-0.014	0.075
24.H	0.075	-0.004	-0.037	-0.079	0.018	0.052	-0.066	0.010	0.037
25.C	0.023	0.026	0.018	0.043	0.032	-0.007	0.012	0.002	-0.014
26.H	-0.356	-0.039	0.038	-0.393	-0.054	0.031	-0.017	-0.007	-0.007
27.H	-0.089	-0.297	-0.234	-0.032	-0.343	-0.117	0.035	-0.018	0.069
28.N	-0.001	0.011	-0.011	0.008	-0.013	0.025	0.006	-0.016	0.024
29.H	0.030	-0.097	0.140	-0.040	0.150	-0.214	-0.045	0.152	-0.229
30.C	-0.005	-0.023	-0.008	-0.030	-0.007	-0.014	-0.016	0.012	-0.007
31.H	0.012	0.220	0.065	-0.006	0.105	0.176	-0.011	-0.081	0.076
32.H	0.191	0.026	0.012	0.210	0.061	0.005	0.004	0.027	-0.014
33.C	0.010	-0.023	0.010	-0.029	0.001	-0.014	-0.037	0.045	-0.015
34.H	-0.012	0.225	-0.095	-0.008	-0.050	0.167	0.011	-0.493	0.243
35.H	-0.215	0.032	-0.016	0.166	-0.051	0.008	0.519	-0.141	-0.028
36.N	0.000	0.009	0.007	0.009	0.015	0.027	-0.009	0.011	-0.007
37.H	-0.023	-0.077	-0.104	-0.044	-0.173	-0.236	-0.009	-0.001	0.002
38.C	-0.029	0.029	-0.018	0.039	-0.027	-0.008	-0.030	0.018	-0.015
39.H	0.400	-0.043	-0.035	-0.335	0.044	0.018	0.360	-0.020	0.009
40.H	0.091	-0.325	0.253	-0.018	0.288	-0.087	0.070	-0.261	0.224
41.C	0.000	0.002	-0.009	0.007	-0.001	-0.009	-0.001	0.004	0.000
42.H	0.020	-0.006	0.067	0.034	0.027	0.099	0.001	-0.024	0.000
43.H	-0.060	-0.001	0.028	-0.091	-0.017	0.058	-0.004	0.011	0.000
44.C	-0.008	-0.010	-0.004	0.007	0.011	0.001	0.001	-0.004	0.001
45.H	0.023	0.083	0.073	-0.015	-0.103	-0.054	-0.001	0.017	0.000
46.H	0.102	0.018	-0.017	-0.109	-0.024	0.018	0.003	0.005	-0.007
47.N	-0.001	0.001	0.002	-0.006	0.004	-0.001	0.001	0.001	0.001
48.C	-0.007	-0.004	-0.006	0.016	-0.003	0.009	-0.006	-0.002	-0.005
49.C	-0.009	-0.002	0.008	0.007	-0.001	-0.007	-0.007	0.000	0.006
50.H	-0.024	0.015	0.053	-0.004	0.015	-0.054	-0.008	0.000	0.044
51.H	0.036	0.068	-0.119	-0.011	-0.025	0.116	0.020	0.040	-0.094
52.H	0.125	-0.030	-0.017	-0.111	0.010	0.004	0.102	-0.019	-0.012
53.C	0.006	0.001	0.006	-0.011	-0.007	-0.015	0.004	0.003	0.006
54.C	-0.002	0.003	0.000	0.011	-0.006	0.007	-0.004	0.003	-0.002
55.H	0.021	-0.016	0.017	-0.045	0.035	-0.030	0.020	-0.016	0.015
56.C	-0.003	-0.003	-0.004	-0.005	0.009	0.000	0.001	-0.004	-0.001
57.F	0.000	0.001	0.000	0.001	-0.003	-0.001	0.000	0.001	0.000
58.C	0.005	-0.005	0.001	-0.010	0.008	-0.004	0.004	-0.004	0.001
59.H	0.004	0.006	0.006	-0.011	0.006	-0.006	0.004	-0.001	0.003

60.C	-0.006	0.007	-0.001	0.018	-0.018	0.005	-0.007	0.007	-0.002
61.H	0.011	-0.003	0.008	-0.054	0.024	-0.026	0.018	-0.008	0.010
62.C	-0.002	-0.002	-0.003	-0.001	0.015	0.008	0.001	-0.006	-0.003
63.O	0.002	-0.001	0.000	-0.002	-0.002	-0.002	0.001	0.001	0.001

1465.357

1478.619

1482.486

1.Mn	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	-0.001	0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.000	-0.003	-0.007	0.002
3.C	-0.001	-0.006	0.003	0.005	0.011	-0.003	0.014	0.030	-0.009
4.C	0.007	0.007	0.002	-0.019	-0.016	-0.005	-0.027	-0.023	-0.009
5.H	-0.019	-0.009	-0.010	0.041	0.020	0.021	0.076	0.040	0.035
6.C	-0.004	-0.003	-0.001	0.010	0.006	0.005	0.012	0.005	0.007
7.H	-0.004	-0.001	-0.003	0.013	0.006	0.005	0.018	0.022	0.001
8.C	-0.001	-0.004	0.001	-0.003	0.009	-0.007	0.007	0.016	-0.003
9.F	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.002	0.001	-0.002	-0.004	0.001
10.C	0.004	0.002	0.002	-0.005	-0.005	-0.002	-0.014	-0.008	-0.009
11.H	-0.020	-0.016	-0.014	0.047	0.038	0.037	0.067	0.055	0.047
12.C	-0.004	0.003	-0.006	0.005	-0.009	0.012	0.008	-0.016	0.020
13.C	0.006	-0.001	0.004	0.001	0.021	-0.011	-0.007	0.015	-0.012
14.C	0.007	-0.001	-0.006	-0.025	0.001	0.019	-0.024	0.000	0.018
15.H	0.008	-0.001	-0.043	-0.033	-0.005	0.138	-0.021	0.008	0.138
16.H	-0.019	0.042	0.091	0.076	-0.162	-0.295	0.065	-0.143	-0.296
17.H	-0.099	-0.018	0.012	0.351	0.087	-0.064	0.346	0.078	-0.057
18.N	-0.001	0.001	-0.001	-0.009	-0.015	0.005	-0.002	-0.011	0.005
19.C	-0.001	-0.004	-0.001	0.028	-0.015	0.015	0.030	-0.016	0.016
20.H	0.001	0.017	0.002	-0.057	0.205	-0.191	-0.066	0.220	-0.218
21.H	-0.002	0.004	0.006	-0.317	0.033	0.013	-0.341	0.036	0.016
22.C	0.001	0.004	0.000	0.002	-0.003	-0.001	0.002	-0.003	-0.002
23.H	-0.001	-0.025	0.001	0.005	0.010	0.004	0.007	0.010	0.010
24.H	0.004	0.012	0.000	-0.007	-0.004	0.007	-0.011	-0.006	0.009
25.C	0.031	0.019	0.015	0.004	0.005	0.000	0.007	0.008	-0.001
26.H	-0.371	-0.021	-0.008	-0.053	-0.004	0.001	-0.083	-0.008	0.002
27.H	-0.073	-0.275	-0.226	-0.007	-0.051	-0.017	-0.009	-0.075	-0.028
28.N	0.009	0.012	0.007	0.001	0.000	0.002	0.002	-0.001	0.004
29.H	0.009	-0.003	0.001	-0.001	0.007	-0.009	-0.005	0.017	-0.029
30.C	0.037	0.045	0.014	0.000	0.001	0.000	0.001	0.004	0.000
31.H	-0.009	-0.492	-0.231	-0.001	-0.009	0.000	-0.002	-0.045	-0.009

32.H	-0.514	-0.142	0.034	-0.006	-0.002	0.001	-0.037	-0.009	0.003
33.C	0.017	0.011	0.007	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.004	0.000
34.H	0.011	-0.072	-0.077	-0.001	0.012	0.000	0.002	-0.045	0.010
35.H	-0.013	0.028	0.013	-0.008	0.003	0.002	0.037	-0.009	-0.003
36.N	-0.006	-0.017	-0.022	0.001	0.000	0.002	-0.002	-0.001	-0.004
37.H	0.044	0.153	0.220	-0.002	-0.008	-0.011	0.005	0.018	0.029
38.C	-0.011	0.002	0.015	0.005	-0.006	0.000	-0.007	0.007	0.001
39.H	0.002	-0.006	0.007	-0.059	0.005	0.001	0.080	-0.008	-0.002
40.H	-0.037	-0.009	-0.077	-0.007	0.056	-0.019	0.009	-0.073	0.028
41.C	-0.002	0.000	0.007	0.003	0.003	-0.001	-0.002	-0.003	0.002
42.H	-0.023	-0.014	-0.071	0.005	-0.010	0.005	-0.007	0.009	-0.010
43.H	0.064	0.009	-0.035	-0.007	0.005	0.008	0.011	-0.007	-0.010
44.C	0.005	0.001	0.004	0.029	0.016	0.015	-0.028	-0.016	-0.015
45.H	-0.012	-0.025	-0.035	-0.058	-0.221	-0.194	0.061	0.216	0.201
46.H	-0.047	-0.003	0.001	-0.330	-0.037	0.017	0.323	0.037	-0.018
47.N	-0.004	0.004	-0.001	-0.009	0.016	0.005	0.002	-0.010	-0.005
48.C	0.005	-0.004	0.002	0.000	-0.022	-0.011	0.007	0.014	0.011
49.C	-0.002	-0.001	0.001	-0.026	0.000	0.020	0.023	0.000	-0.017
50.H	-0.012	0.011	0.008	-0.036	0.010	0.143	0.022	0.003	-0.130
51.H	0.014	0.026	-0.020	0.082	0.162	-0.313	-0.065	-0.129	0.284
52.H	0.029	-0.016	-0.011	0.367	-0.096	-0.064	-0.328	0.079	0.052
53.C	-0.004	-0.005	-0.007	0.006	0.010	0.013	-0.009	-0.016	-0.019
54.C	0.009	-0.003	0.006	-0.005	0.005	-0.002	0.014	-0.008	0.009
55.H	-0.019	0.016	-0.009	0.050	-0.040	0.040	-0.065	0.053	-0.047
56.C	-0.007	0.006	-0.003	-0.003	-0.010	-0.007	-0.006	0.015	0.002
57.F	0.001	-0.002	0.000	0.000	0.002	0.001	0.002	-0.004	-0.001
58.C	-0.003	0.000	-0.002	0.011	-0.006	0.006	-0.011	0.005	-0.007
59.H	-0.007	0.015	0.002	0.014	-0.006	0.006	-0.018	0.021	-0.002
60.C	0.010	-0.007	0.004	-0.020	0.017	-0.006	0.027	-0.022	0.009
61.H	-0.032	0.017	-0.014	0.045	-0.021	0.023	-0.075	0.039	-0.035
62.C	-0.005	0.012	0.004	0.005	-0.013	-0.004	-0.013	0.029	0.008
63.O	0.001	-0.004	-0.001	0.000	0.002	0.000	0.003	-0.007	-0.002

1525.571

1526.604

1563.529

1.Mn	-0.001	0.000	-0.003	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	0.001
2.O	0.021	0.017	0.004	0.027	0.021	0.004	0.004	0.010	-0.005
3.C	-0.093	-0.008	-0.068	-0.120	-0.010	-0.087	0.017	-0.061	0.055

4.C	0.060	-0.028	0.061	0.078	-0.034	0.078	-0.005	0.039	-0.027
5.H	-0.140	-0.154	-0.012	-0.182	-0.194	-0.012	-0.009	0.041	-0.029
6.C	-0.010	0.153	-0.095	-0.013	0.194	-0.120	0.001	-0.095	0.055
7.H	-0.109	-0.280	0.070	-0.140	-0.357	0.089	0.050	0.120	-0.025
8.C	0.035	-0.127	0.102	0.042	-0.163	0.129	-0.050	0.070	-0.082
9.F	0.004	0.012	-0.003	0.006	0.017	-0.004	0.000	-0.005	0.003
10.C	-0.002	0.042	-0.028	-0.001	0.054	-0.035	0.027	-0.029	0.042
11.H	-0.088	-0.010	-0.070	-0.113	-0.014	-0.089	0.016	-0.038	0.042
12.C	0.022	-0.029	0.038	0.028	-0.037	0.048	0.017	0.076	-0.040
13.C	-0.140	-0.120	0.012	-0.175	-0.150	0.015	-0.129	-0.118	0.021
14.C	0.008	0.009	-0.005	0.010	0.011	-0.006	0.009	0.011	-0.002
15.H	0.050	0.064	0.055	0.070	0.088	0.062	0.024	0.031	0.031
16.H	-0.039	0.090	-0.127	-0.055	0.123	-0.154	-0.016	0.057	-0.112
17.H	0.061	-0.058	0.048	0.068	-0.076	0.062	0.036	-0.038	0.035
18.N	0.111	0.085	0.002	0.139	0.105	0.001	0.099	0.078	-0.007
19.C	-0.001	-0.008	0.005	0.001	-0.005	0.006	-0.005	-0.001	0.002
20.H	-0.066	0.028	-0.173	-0.087	-0.008	-0.218	-0.044	-0.025	-0.108
21.H	-0.092	0.019	0.023	-0.100	0.010	0.013	-0.026	0.003	0.007
22.C	-0.003	-0.004	-0.006	-0.006	-0.006	-0.008	-0.004	-0.004	-0.004
23.H	0.008	0.019	0.031	0.010	0.039	0.041	0.004	0.017	0.018
24.H	-0.021	-0.013	0.007	-0.024	-0.021	0.006	-0.008	-0.008	0.000
25.C	0.002	0.003	-0.002	0.001	0.002	-0.001	0.001	0.001	0.000
26.H	-0.012	0.000	0.000	-0.004	0.004	-0.004	-0.001	0.004	-0.003
27.H	0.001	-0.011	-0.001	0.003	-0.003	0.005	0.001	-0.001	0.002
28.N	0.000	-0.004	0.004	0.000	-0.004	0.003	0.000	-0.002	0.001
29.H	-0.004	0.022	-0.021	-0.003	0.020	-0.017	-0.001	0.010	-0.004
30.C	-0.001	0.003	-0.002	0.000	0.002	-0.002	0.000	0.000	-0.001
31.H	0.000	-0.015	0.005	0.000	-0.012	0.002	0.000	-0.002	0.003
32.H	-0.006	-0.006	0.010	-0.009	-0.004	0.004	-0.002	0.000	0.000
33.C	-0.001	-0.003	-0.003	0.000	0.001	0.002	0.000	0.002	0.003
34.H	0.000	0.018	0.005	0.000	-0.008	-0.001	0.000	-0.010	-0.005
35.H	-0.008	0.007	0.011	0.008	-0.002	-0.002	0.006	-0.005	-0.007
36.N	0.000	0.005	0.004	0.000	-0.003	-0.002	0.000	-0.005	-0.003
37.H	-0.005	-0.026	-0.025	0.002	0.014	0.012	0.001	0.022	0.010
38.C	0.002	-0.003	-0.002	-0.001	0.001	0.001	-0.002	0.002	0.000
39.H	-0.014	-0.002	-0.002	0.000	0.004	0.004	0.004	0.007	0.007
40.H	0.001	0.012	-0.001	-0.002	0.000	-0.005	-0.001	-0.001	0.001
41.C	-0.004	0.005	-0.008	0.005	-0.005	0.006	0.007	-0.008	0.009
42.H	0.010	-0.026	0.040	-0.008	0.032	-0.033	-0.009	0.034	-0.043

43.H	-0.026	0.018	0.008	0.018	-0.018	-0.004	0.023	-0.016	-0.003
44.C	-0.001	0.010	0.005	-0.001	-0.003	-0.005	0.012	-0.006	-0.005
45.H	-0.083	-0.031	-0.216	0.067	-0.011	0.169	0.113	-0.022	0.270
46.H	-0.111	-0.021	0.026	0.072	0.005	-0.008	0.081	0.020	-0.031
47.N	0.140	-0.107	0.006	-0.109	0.083	-0.002	-0.228	0.179	0.008
48.C	-0.176	0.151	0.011	0.138	-0.119	-0.008	0.294	-0.272	-0.041
49.C	0.010	-0.012	-0.006	-0.008	0.009	0.005	-0.020	0.026	0.004
50.H	0.064	-0.082	0.070	-0.056	0.070	-0.049	-0.048	0.064	-0.079
51.H	-0.051	-0.121	-0.157	0.045	0.103	0.118	0.033	0.129	0.260
52.H	0.074	0.075	0.058	-0.051	-0.061	-0.048	-0.092	-0.086	-0.077
53.C	0.028	0.040	0.048	-0.022	-0.032	-0.038	-0.043	0.178	0.084
54.C	-0.002	-0.055	-0.033	0.001	0.044	0.026	-0.052	-0.073	-0.088
55.H	-0.112	0.011	-0.090	0.090	-0.010	0.072	-0.049	-0.078	-0.099
56.C	0.044	0.165	0.123	-0.033	-0.132	-0.098	0.104	0.172	0.177
57.F	0.005	-0.016	-0.004	-0.005	0.013	0.003	0.001	-0.013	-0.006
58.C	-0.011	-0.200	-0.113	0.009	0.158	0.090	0.002	-0.230	-0.119
59.H	-0.136	0.359	0.079	0.109	-0.287	-0.063	-0.112	0.291	0.058
60.C	0.073	0.040	0.076	-0.060	-0.031	-0.060	0.007	0.098	0.057
61.H	-0.172	0.192	-0.017	0.140	-0.151	0.011	0.022	0.094	0.070
62.C	-0.118	0.004	-0.088	0.095	-0.003	0.070	-0.038	-0.142	-0.120
63.O	0.027	-0.021	0.006	-0.022	0.016	-0.004	-0.006	0.024	0.009

1564.306

1595.185

1596.311

1.Mn	0.000	0.000	-0.002	-0.001	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000
2.O	0.005	0.023	-0.009	-0.008	-0.009	-0.002	0.000	0.000	0.000
3.C	0.042	-0.136	0.126	0.146	0.060	0.078	-0.005	-0.002	-0.003
4.C	-0.015	0.090	-0.062	-0.233	-0.186	-0.075	0.009	0.007	0.003
5.H	-0.009	0.097	-0.070	0.274	0.111	0.138	-0.011	-0.004	-0.005
6.C	0.002	-0.222	0.127	0.149	0.207	0.003	-0.006	-0.008	0.000
7.H	0.116	0.284	-0.062	0.056	-0.301	0.209	-0.002	0.011	-0.008
8.C	-0.109	0.166	-0.186	-0.248	-0.113	-0.151	0.010	0.004	0.006
9.F	0.000	-0.012	0.006	0.021	0.020	0.007	-0.001	-0.001	0.000
10.C	0.058	-0.068	0.094	0.299	0.158	0.174	-0.012	-0.006	-0.007
11.H	0.041	-0.083	0.098	-0.374	-0.308	-0.189	0.014	0.012	0.007
12.C	0.039	0.174	-0.092	-0.143	-0.108	-0.063	0.005	0.004	0.002
13.C	-0.290	-0.267	0.049	-0.004	-0.011	0.019	0.001	0.001	0.000
14.C	0.020	0.026	-0.006	0.004	-0.003	-0.008	0.000	0.000	0.000

15.H	0.044	0.061	0.077	0.004	-0.004	-0.017	-0.001	-0.001	0.002
16.H	-0.030	0.116	-0.254	-0.014	0.026	0.069	0.002	-0.003	-0.004
17.H	0.089	-0.084	0.078	-0.063	-0.004	-0.001	0.005	0.001	-0.001
18.N	0.225	0.177	-0.012	0.025	0.019	0.000	-0.002	-0.001	0.000
19.C	-0.011	-0.008	0.006	-0.006	-0.003	-0.003	0.001	-0.001	0.001
20.H	-0.119	-0.016	-0.278	-0.009	-0.009	-0.011	-0.002	0.019	-0.010
21.H	-0.090	0.026	0.036	0.017	0.007	0.009	-0.019	0.003	0.001
22.C	-0.007	-0.009	-0.009	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
23.H	0.009	0.035	0.042	-0.001	0.000	0.001	0.001	-0.004	0.001
24.H	-0.025	-0.014	0.005	0.000	-0.001	0.000	-0.002	0.000	0.001
25.C	0.001	0.002	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.001	0.000
26.H	-0.003	0.007	-0.006	0.001	-0.002	0.003	-0.012	-0.002	0.001
27.H	0.001	0.000	-0.003	0.002	0.000	0.004	-0.003	-0.009	-0.012
28.N	0.000	-0.005	0.003	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000
29.H	-0.001	0.022	-0.012	-0.003	-0.002	-0.011	0.001	0.003	0.002
30.C	0.000	0.003	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
31.H	0.000	-0.013	0.004	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.009	-0.002
32.H	-0.007	-0.006	0.010	0.000	0.000	0.000	-0.007	-0.002	-0.001
33.C	0.000	-0.002	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
34.H	0.000	0.008	0.001	0.000	-0.009	0.003	0.000	0.000	0.000
35.H	-0.003	0.005	0.008	0.007	-0.002	0.001	0.000	0.000	0.000
36.N	0.000	0.003	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001
37.H	0.000	-0.009	-0.006	-0.001	0.003	-0.001	0.003	-0.002	0.011
38.C	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001
39.H	-0.001	-0.003	-0.002	0.012	-0.002	-0.001	-0.002	-0.002	-0.003
40.H	-0.001	-0.001	-0.003	0.003	-0.009	0.012	-0.002	0.001	-0.004
41.C	-0.002	0.004	-0.004	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
42.H	0.004	-0.014	0.019	-0.001	-0.004	-0.001	0.001	0.001	-0.001
43.H	-0.013	0.005	0.003	0.002	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.000
44.C	-0.005	0.005	0.002	0.000	-0.002	-0.001	0.006	-0.003	0.003
45.H	-0.056	-0.008	-0.130	0.002	0.019	0.010	0.010	-0.011	0.015
46.H	-0.047	-0.017	0.022	0.018	0.003	-0.002	-0.017	0.007	-0.010
47.N	0.098	-0.078	-0.002	0.000	0.000	0.000	-0.028	0.022	-0.001
48.C	-0.126	0.116	0.018	-0.001	0.001	-0.001	0.009	-0.017	-0.020
49.C	0.008	-0.012	-0.002	0.000	0.000	0.000	-0.004	-0.002	0.008
50.H	0.017	-0.024	0.037	0.001	-0.001	-0.001	-0.004	-0.003	0.015
51.H	-0.011	-0.050	-0.112	-0.001	-0.001	-0.002	0.014	0.025	-0.066
52.H	0.042	0.036	0.032	0.000	0.001	0.001	0.062	-0.006	0.000
53.C	0.018	-0.077	-0.037	0.006	-0.004	0.003	0.143	-0.101	0.070

54.C	0.021	0.032	0.038	-0.011	0.006	-0.007	-0.301	0.151	-0.184
55.H	0.023	0.033	0.044	0.015	-0.012	0.008	0.373	-0.309	0.197
56.C	-0.043	-0.077	-0.077	0.010	-0.004	0.006	0.252	-0.105	0.161
57.F	-0.001	0.006	0.002	-0.001	0.001	0.000	-0.021	0.020	-0.007
58.C	-0.001	0.101	0.052	-0.006	0.008	0.000	-0.149	0.201	-0.014
59.H	0.050	-0.130	-0.026	-0.002	-0.012	-0.008	-0.061	-0.298	-0.198
60.C	-0.005	-0.042	-0.025	0.009	-0.007	0.003	0.234	-0.181	0.084
61.H	-0.004	-0.042	-0.032	-0.011	0.005	-0.006	-0.273	0.111	-0.138
62.C	0.018	0.060	0.053	-0.006	0.003	-0.003	-0.149	0.053	-0.085
63.O	0.001	-0.010	-0.003	0.001	-0.001	0.000	0.008	-0.008	0.003

2914.515

2915.007

2932.377

	-----	-----	-----						
1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
16.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
18.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
20.H	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
21.H	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
22.C	0.003	-0.001	-0.008	0.002	-0.001	-0.004	0.000	0.000	0.000
23.H	-0.097	0.008	0.024	-0.052	0.004	0.013	0.001	0.000	-0.001
24.H	0.054	0.007	0.077	0.029	0.003	0.042	-0.002	0.000	-0.003
25.C	0.009	0.057	0.031	0.004	0.030	0.017	0.001	-0.001	-0.001

48.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
49.C	-0.001	-0.001	-0.001	-0.028	-0.028	-0.041	0.000	0.000	0.000
50.H	0.011	0.010	0.001	0.591	0.517	0.060	0.000	0.000	0.000
51.H	-0.005	0.003	0.000	-0.249	0.136	-0.011	0.000	0.000	0.000
52.H	0.000	-0.006	0.008	-0.001	-0.324	0.429	0.000	0.000	0.000
53.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
54.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
55.H	0.000	0.000	0.000	-0.002	-0.006	-0.001	0.000	0.000	0.000
56.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
57.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
58.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
59.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
60.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
61.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
62.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
63.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

2988.426

2988.742

2995.333

1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.H	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.H	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.H	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.001	-0.001
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.001	0.000
14.C	0.000	0.000	0.000	0.003	-0.004	0.000	-0.002	0.004	0.001
15.H	-0.005	0.005	-0.001	-0.050	0.043	-0.007	0.035	-0.029	0.005
16.H	0.001	0.001	0.000	0.014	0.007	-0.001	-0.007	-0.003	0.001
17.H	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.003	0.000	-0.010	-0.015
18.N	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	-0.001	-0.001	-0.001
19.C	0.004	-0.002	0.000	0.035	-0.020	0.003	-0.038	0.018	-0.001

59.H	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	-0.001	0.000	-0.001
60.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
61.H	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.001
62.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
63.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

	2995.713	2999.744	3006.875
--	----------	----------	----------

	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.H	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.H	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.001
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.C	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15.H	0.010	-0.008	0.001	-0.002	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000
16.H	-0.002	-0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17.H	0.000	-0.003	-0.004	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000
18.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19.C	-0.010	0.005	0.000	0.002	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
20.H	0.128	-0.001	-0.053	-0.031	0.000	0.013	0.004	0.000	-0.002
21.H	-0.008	-0.055	0.056	0.002	0.013	-0.013	0.000	-0.003	0.003
22.C	0.000	0.000	-0.002	0.002	0.000	0.002	-0.001	0.000	-0.001
23.H	-0.014	0.000	0.004	-0.005	0.000	0.002	0.007	-0.001	-0.002
24.H	0.012	0.002	0.019	-0.015	-0.001	-0.025	0.005	0.000	0.009
25.C	0.016	-0.005	-0.007	-0.004	0.003	0.003	-0.001	0.000	0.000
26.H	-0.002	0.042	0.025	0.004	-0.028	-0.016	0.000	-0.002	-0.001
27.H	-0.188	0.019	0.053	0.042	-0.003	-0.015	0.009	-0.001	-0.002
28.N	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
29.H	0.003	0.000	-0.003	0.016	-0.006	0.002	0.000	0.000	0.000
30.C	-0.003	0.002	0.001	0.060	-0.018	-0.018	0.001	0.000	0.000

31.H	0.037	-0.001	-0.003	-0.652	0.010	0.070	-0.012	0.000	0.002
32.H	0.005	-0.021	-0.013	-0.055	0.221	0.134	-0.001	0.002	0.001
33.C	-0.002	0.001	0.000	0.059	0.018	-0.018	0.002	0.002	-0.001
34.H	0.023	-0.001	-0.005	-0.638	-0.010	0.068	-0.012	-0.001	0.000
35.H	-0.004	-0.010	0.008	-0.054	-0.214	0.138	-0.005	-0.016	0.011
36.N	0.001	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
37.H	-0.016	-0.002	0.009	0.015	0.006	0.003	-0.008	0.001	0.007
38.C	-0.057	-0.017	0.023	-0.004	-0.003	0.003	-0.035	-0.008	0.012
39.H	0.005	0.145	-0.092	0.003	0.026	-0.016	0.002	0.058	-0.037
40.H	0.672	0.066	-0.188	0.038	0.002	-0.014	0.413	0.037	-0.118
41.C	-0.003	-0.001	0.004	0.002	0.000	0.002	-0.058	-0.002	-0.036
42.H	0.057	-0.001	-0.015	-0.006	0.000	0.003	0.361	0.029	-0.109
43.H	-0.022	0.005	-0.036	-0.016	0.001	-0.026	0.332	-0.012	0.538
44.C	0.040	0.019	0.000	0.003	0.001	0.000	-0.030	-0.018	-0.003
45.H	-0.505	0.000	0.208	-0.033	0.000	0.014	0.384	0.004	-0.160
46.H	0.034	-0.222	-0.215	0.002	-0.014	-0.013	-0.028	0.205	0.197
47.N	0.001	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001
48.C	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000
49.C	0.002	0.004	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.002	-0.005	0.002
50.H	-0.037	-0.032	-0.005	-0.002	-0.002	0.000	0.039	0.033	0.005
51.H	0.009	-0.004	-0.001	0.001	0.000	0.000	-0.008	0.004	0.001
52.H	0.000	-0.010	0.016	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.016	-0.026
53.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
54.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
55.H	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001
56.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
57.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
58.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
59.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
60.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
61.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
62.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
63.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

3007.396

3034.158

3034.434

1.Mn 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

2.O 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

3.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.H	0.000	-0.001	0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.C	0.002	-0.004	-0.002	-0.033	0.062	0.044	-0.002	0.004	0.003
15.H	-0.037	0.032	-0.005	0.391	-0.329	0.064	0.028	-0.024	0.005
16.H	0.006	0.002	-0.002	0.028	0.036	0.011	0.002	0.003	0.001
17.H	0.000	0.017	0.026	-0.025	-0.447	-0.592	-0.002	-0.032	-0.042
18.N	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19.C	0.031	-0.017	0.003	0.023	0.017	-0.026	0.002	0.001	-0.002
20.H	-0.388	0.007	0.163	-0.250	0.010	0.100	-0.018	0.001	0.007
21.H	0.027	0.198	-0.199	-0.021	-0.218	0.214	-0.001	-0.015	0.015
22.C	0.057	-0.001	0.035	0.004	0.000	-0.002	0.000	0.000	0.000
23.H	-0.359	0.031	0.108	-0.042	0.005	0.012	-0.003	0.000	0.001
24.H	-0.330	-0.026	-0.533	0.003	0.000	0.004	0.000	0.000	0.000
25.C	0.036	-0.008	-0.012	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
26.H	-0.003	0.062	0.037	-0.001	0.007	0.004	0.000	0.001	0.000
27.H	-0.419	0.040	0.119	-0.012	0.000	0.004	-0.001	0.000	0.000
28.N	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
29.H	0.007	0.001	-0.007	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
30.C	-0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
31.H	0.008	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
32.H	0.005	-0.016	-0.009	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
33.C	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
34.H	0.009	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
35.H	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
36.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
37.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
38.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.001
39.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.006	-0.003
40.H	0.005	0.001	-0.002	-0.001	0.000	0.000	0.016	0.000	-0.005
41.C	-0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.004	0.000	0.002

42.H	0.005	0.000	-0.002	-0.003	0.000	0.001	0.042	0.005	-0.011
43.H	0.005	0.000	0.009	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.000	-0.003
44.C	-0.001	0.000	0.000	0.002	-0.001	-0.002	-0.023	0.018	0.025
45.H	0.009	0.000	-0.004	-0.018	-0.001	0.007	0.250	0.008	-0.099
46.H	-0.001	0.004	0.004	-0.002	0.017	0.016	0.022	-0.220	-0.205
47.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
48.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
49.C	0.000	0.000	0.000	-0.002	-0.004	0.003	0.033	0.061	-0.045
50.H	0.001	0.000	0.000	0.028	0.023	0.004	-0.395	-0.332	-0.058
51.H	0.000	0.000	0.000	0.002	-0.002	0.001	-0.025	0.034	-0.012
52.H	0.000	0.001	-0.001	-0.001	0.031	-0.043	0.020	-0.431	0.602
53.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
54.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
55.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000
56.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
57.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
58.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
59.H	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
60.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
61.H	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
62.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
63.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

3043.701

3043.821

3106.301

1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.H	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.003	0.002
6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.H	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.001
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.H	0.000	-0.001	0.001	0.001	-0.004	0.003	0.000	-0.001	0.001
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000

14.C	-0.005	0.008	0.006	-0.015	0.024	0.020	0.000	0.000	0.000
15.H	0.046	-0.039	0.008	0.145	-0.123	0.025	0.000	0.000	0.000
16.H	0.013	0.010	0.001	0.039	0.030	0.002	0.001	0.001	0.000
17.H	-0.004	-0.064	-0.084	-0.014	-0.204	-0.267	0.000	0.000	0.000
18.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19.C	-0.011	-0.013	0.018	-0.037	-0.043	0.057	0.000	0.000	0.000
20.H	0.123	-0.006	-0.049	0.394	-0.020	-0.155	0.000	0.000	0.000
21.H	0.019	0.167	-0.164	0.060	0.535	-0.526	0.000	0.000	0.000
22.C	-0.001	0.000	0.001	-0.004	0.001	0.004	0.000	0.000	0.000
23.H	0.018	-0.002	-0.005	0.058	-0.007	-0.016	0.000	0.000	0.000
24.H	-0.005	-0.001	-0.009	-0.018	-0.002	-0.029	0.000	0.000	0.000
25.C	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000
26.H	0.000	-0.003	-0.002	0.002	-0.011	-0.006	0.000	0.000	0.000
27.H	0.004	0.000	-0.001	0.013	0.000	-0.004	0.000	0.000	0.000
28.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
29.H	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
30.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
31.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
32.H	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
33.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
34.H	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
35.H	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
36.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
37.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
38.C	-0.002	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
39.H	0.001	0.010	-0.005	0.000	-0.003	0.002	0.000	0.000	0.000
40.H	0.021	0.000	-0.006	-0.006	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000
41.C	-0.004	0.000	0.004	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
42.H	0.059	0.006	-0.016	-0.018	-0.002	0.005	0.000	0.000	0.000
43.H	-0.018	0.001	-0.030	0.006	0.000	0.010	0.000	0.000	-0.001
44.C	-0.037	0.044	0.055	0.012	-0.014	-0.017	-0.001	0.001	0.001
45.H	0.398	0.017	-0.156	-0.124	-0.005	0.049	0.005	0.000	-0.002
46.H	0.062	-0.547	-0.512	-0.019	0.172	0.161	0.000	-0.016	-0.016
47.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
48.C	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001
49.C	-0.016	-0.024	0.020	0.005	0.007	-0.006	0.079	-0.038	0.014
50.H	0.150	0.128	0.023	-0.046	-0.039	-0.007	-0.133	-0.135	-0.012
51.H	0.038	-0.030	0.003	-0.011	0.009	-0.001	-0.824	0.475	-0.016
52.H	-0.012	0.192	-0.265	0.004	-0.060	0.082	0.014	0.110	-0.156

53.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
54.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.008	0.007
55.H	0.001	0.003	0.002	0.000	-0.001	-0.001	-0.023	-0.096	-0.067
56.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
57.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
58.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
59.H	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.002	0.000	0.001
60.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
61.H	0.000	-0.001	0.000	-0.001	-0.002	-0.001	-0.002	-0.006	-0.005
62.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
63.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

	3107.464	3116.488	3117.071
--	----------	----------	----------

1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.000	0.000	0.000	-0.002	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	-0.001	0.001	0.017	-0.057	0.046	0.000	-0.001	0.001
5.H	-0.003	0.010	-0.008	-0.186	0.673	-0.532	-0.004	0.013	-0.010
6.C	0.000	0.000	0.000	-0.031	-0.001	-0.025	-0.001	0.000	0.000
7.H	0.001	0.000	0.000	0.372	0.031	0.284	0.007	0.001	0.006
8.C	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
9.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.C	0.002	-0.009	0.008	0.001	-0.003	0.002	0.000	0.000	0.000
11.H	-0.025	0.103	-0.077	-0.008	0.034	-0.027	0.000	0.002	-0.001
12.C	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.C	0.078	0.038	0.012	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
15.H	-0.129	0.133	-0.014	0.002	-0.002	0.000	-0.001	0.001	0.000
16.H	-0.826	-0.472	0.000	0.015	0.008	0.000	-0.004	-0.002	0.000
17.H	0.013	-0.113	-0.151	0.000	0.002	0.002	0.000	-0.001	-0.001
18.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19.C	-0.001	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
20.H	0.006	0.000	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
21.H	0.001	0.014	-0.014	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.001
22.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
23.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
24.H	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001

36.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
37.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
38.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
39.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
40.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
41.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
42.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
43.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
44.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
45.H	0.002	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
46.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001
47.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
48.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001
49.C	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.001	0.000	0.009	-0.004	0.001
50.H	0.000	0.000	0.000	0.003	0.003	0.000	-0.013	-0.013	-0.001
51.H	0.000	0.000	0.000	0.018	-0.011	0.000	-0.098	0.058	-0.003
52.H	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.003	0.001	0.011	-0.014
53.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.002	0.000
54.C	0.000	0.000	0.000	0.002	0.011	0.008	-0.016	-0.066	-0.049
55.H	0.001	0.003	0.002	-0.029	-0.128	-0.095	0.181	0.767	0.573
56.C	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.003	-0.002	0.003	-0.002	0.002
57.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
58.C	-0.001	0.000	-0.001	0.062	-0.005	0.047	0.008	0.000	0.007
59.H	0.014	-0.001	0.011	-0.693	0.049	-0.529	-0.096	0.006	-0.074
60.C	0.000	-0.001	0.000	0.006	0.033	0.023	0.002	0.009	0.006
61.H	0.002	0.007	0.005	-0.093	-0.354	-0.261	-0.025	-0.093	-0.069
62.C	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.001	-0.001	0.000	0.001	0.000
63.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

3138.831

3357.836

3358.116

1.Mn	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.C	0.002	-0.008	0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.H	-0.022	0.082	-0.064	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.C	0.007	0.000	0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.H	-0.082	-0.007	-0.063	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

47.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
48.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
49.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
50.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
51.H	0.004	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
52.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
53.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
54.C	0.001	0.002	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
55.H	-0.006	-0.027	-0.020	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
56.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
57.F	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
58.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
59.H	0.004	0.000	0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
60.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
61.H	0.001	0.003	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
62.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
63.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

1. R. C. Clark, J. S. Reid, *Acta Cryst. A*, 1995, **51**, 887-897

2. G. M. Sheldrick, *Acta Cryst. A*, 2008, **64**, 112-122.