

Department Chemie
der Technischen Universität München

NMR-spektroskopische Untersuchungen an Peptiden und Proteinen

Untersuchungen zu Omphalotin und unter Verwendung des Programms CYANA
zur IIB-Domäne des Mannosetransporters.

Eva Gloria Villarreal y López

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Chemie
der Technischen Universität München
zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. Johannes Buchner

Prüfer der Dissertation:

1. Univ.-Prof. Dr. Horst Kessler
2. Univ.-Prof. Dr. Sevil Weinkauff

Die Dissertation wurde am 30. Juni 2004 bei der Technischen Universität München
eingereicht und durch die Fakultät für Chemie am 2. August 2004 angenommen.

Am Anfang schuf Gott Himmel und Erde.
Und die Erde war wüst und leer, und es
war finster auf der Tiefe; und der Geist
Gottes schwebte auf dem Wasser. Und
Gott sprach: Es werde Licht! Und es ward
Licht.

Schöpfung, 1-3.

Al principio creó Dios los cielos y la
tierra. La tierra estaba confusa y vacía y
las tinieblas cubrían el haz del abismo,
pero el espíritu de Dios se cernía sobre la
superficie de las aguas. Dijo Dios: „Haya
luz“; y hubo luz.

Génesis, 1-3.

Diese Dissertation ist meiner Familie gewidmet:
meinen Eltern: Gloria und Ramón;
meinem Bruder Antonio;
meinem Partner Jochen;
seinen Eltern: Ida und Alois
und Javier Ramón, den ich im Herzen trage.

Este trabajo está dedicado a mi familia:
a mis padres: Ramón y Gloria;
a mi hermano Antonio;
a mi pareja Jochen;
a sus padres: Alois e Ida y
a Javier Ramón, a quien llevo en el corazón.

Ich möchte mich weiterhin bei den vielen Personen bedanken, die meine Anwesenheit in Deutschland und die Durchführung dieser Doktorarbeit am Lehrstuhl II des ehemaligen Instituts für organische Chemie und Biochemie der Technischen Universität München in Garching in der Zeit von Januar 1999 bis Juni 2004 ermöglicht haben (in ungefährender chronologischer Reihenfolge):

Meinen Eltern, Gloria y Ramón, für ihre finanzielle und geistige Unterstützung, ohne die der Sprung nach Deutschland nicht möglich gewesen wäre, ihre Liebe und das Opfer mich so fern zu haben. Meinem Bruder, Antonio David, weil er in dieser Zeit die Verpflichtungen von uns zwei wahrgenommen hat und noch vieles mehr.

Isabel, weil sie den ersten Schritt nach Deutschland tat und mir den Weg bereitete; Hatti, weil er den Weg zeichnete, die Türen seiner Wohnung in München für mich öffnete und mir seine Freundschaft gab; K. Hanke für meine erste Stelle in Deutschland und P. Reißmann für seine Betreuung und all das Wissen, das er während meiner Praktikumszeit und später mit mir geteilt hat. Jochen, weil er nach Spanien kam, um mich zurück zu holen, und seiner Familie: Ida, Alois, Christian, Regina, Gusti, Marie, ... , die mich liebevoll angenommen haben.

P. Lemmen, für den ersten Versuch in Deutschland eine Promotion finanziell zu ermöglichen, auch wenn es nicht geklappt hat; D. Mihailios und M. Geisberger während meiner Beschäftigung im Lehrstuhl von Prof. Herrmann, für die Möglichkeit die Funktionsweise einer großen Uni kennen zu lernen, mein Deutsch zu verbessern und die Anerkennung meines Diploms zu erreichen.

G. Gemmecker, für das Aushängen eines Stellenangebotes, das meinen Weg in die OCII geführt hat. Und - den Ärger schon vergessen - für das Gute, das danach kam.

Prof. Kessler, als Leiter des Lehrstuhles, für die Aufnahme in den Arbeitskreis als wissenschaftliche Mitarbeiterin während der Zeit meiner Promotion und, als akademischer Lehrer, für die Einführung in die Welt der NMR und die Betreuung während des Omphalotin-Projekts.

Den ehemaligen und Noch-Mitgliedern des AK, die meine erste Einführung in die NMR-, Computer- und Uni-Welt begleitet haben, auch wenn man ihnen lange hinterher laufen musste, um etwas zu erfahren; meinen Zimmerkollegen; den später gekommenen NMR-Experten und allen anderen Mitarbeitern des AK, die ein offenes Ohr für meine Probleme, Kummer und Tränen hatten und die an mich bei Geburtstagen, Feiern und sonstigen Einladungen gedacht haben: Rainer, Angie, Monika, Tammo, Vincent, Adriane, Kerstin, Murray, Jens, Georg, Gustav, „ma“, Henrik, Manuel, Mona, Kay, Alex (ad), Mandar, Mrunal, Uli, Martin S., Julien, Bernd, Bulu, Manu, Jing, Alex F., Beate, ...

Besonders bei Christian Rölz, für die Zusammenarbeit bei Omphalotin; Regula Gutknecht, Prof. Erni und seiner Gruppe für die Zusammenarbeit bei der Expression von IIB^{Man} und die gute Annahme in Bern; Tom Malia, bei der Zuordnung von IIB^{Man}; Luis Horacio Gutiérrez für die leider kurze Hilfe bei CYANA und Peter Güntert für die schnelle Antwort auf meine Mails.

Den Mitgliedern der hispanischen Gruppe, die mir diese Promotionszeit begleitet haben und alles viel angenehmer gemacht haben: Sofia, Paula+Matthias, Guergana, Bertha+Laurent, Alvaro, Lidia, Niki, Fermín, Anna, Ainhoa, Maite+Florian, Raquel+Paco, Quique, Mauricio+Fabiola, Norge, Horacio, ...

Den deutschsprachigen Freunden: Martina, Toni und Familie; Uwe; Sam, Hormi und Bekannten; Matthias; Antje, Rüdiger; Heike, Mark, Steve und Familie; Anita, Hans und Nachbarn; ... Susanne, Jürgen, Anja, Christa und Bekannten ... für die kulturellen Erfahrungen, die mir Deutschland und die Deutschen ein bisschen näher gebracht haben, um sie zu verstehen und mich integrieren zu können.

Für Ratschläge und Korrekturen der deutschen Semantik und Grammatik bei dieser Dissertation, von kleinem bis zu großem Umfang bei: Axel Meyer, Andreas Enthart, Beate Diaw, Franz Hagn, Torsten Arndt, Angelika Kühlewein, Christoph Freudenberger, Joachim Schorer, Nikolaus Neumaier, Horst Kessler und besonders bei Gerd Gemmecker.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	I
Abkürzungen, Akronyme und Symbole	II
1 Einleitung	1
2 Konformationsanalyse von Biomolekülen in Lösung	3
2.1 Allgemeine Grundlagen der NMR-Spektroskopie	3
2.2 Parameter zur Konformationsanalyse	5
2.2.1 Abstandsbeschränkung	6
2.2.2 Kopplungskonstanten- und Diëderwinkelbeschränkung	8
2.2.3 Diastereotope Zuordnung	10
2.2.4 Temperaturgradienten	11
2.3 Rechenverfahren zur Konformationsraumsuche	12
2.3.1 Distanzgeometrie	12
2.3.2 <i>Simulated annealing</i>	14
3 Strukturberechnung mit dem Programm CYANA	16
3.1 Beschreibung des CANDID-Moduls	17
3.1.1 Eingabedaten	20
3.1.2 Erstellung der ersten Zuordnungsliste	20
3.1.3 Klassifizierung der Anfangszuordnung	21
3.1.4 Kalibrierung von NOE-Abstandsbeschränkungen	26
3.1.5 Eliminierung zweifelhafter NOESY-Signale	27
3.1.6 Beschränkungskombination	28
3.2 Strukturberechnung mit DYANA	30
4 Omphalotin A von <i>Omphalotus olearius</i>	33
4.1 Biochemischer Hintergrund	33
4.2 NMR-spektroskopische Untersuchungen	36
4.2.1 Vorbereitungen	36
4.2.2 Messungen und Bearbeitung	36
4.2.3 Strukturparameter	41
4.3 Strukturrechnungen	43

5	IIB ^{Man} -Domäne von <i>E. coli</i>	48
5.1	Biochemischer Hintergrund	48
5.1.1	Das Phosphotransferase-System	48
5.1.2	Der Mannosetransporter	50
5.2	Materialien und Methoden	51
5.2.1	Expression von IIB ^{Man}	51
5.2.2	NMR-spektroskopische Messungen an IIB ^{Man}	56
5.2.3	Spektrenprozessierung	57
5.2.4	Resonanzzuordnung	58
5.2.5	Sekundärstruktur-Analyse	63
5.2.6	NOE-Zuordnung und Strukturberechnung mittels CYANA	65
5.3	Ausblick	72
	Anhang	III
1	NOE-Tabellen von Omphalotin	1
2	IIB ^{Man} -Dateien für die Strukturberechnung mit CYANA	5
3	IIB ^{Man} -Literaturdaten	65
4	Pulsprogramme	67
	Literaturverzeichnis	IV

Abkürzungen, Akronyme und Symbole

1D	eindimensional
2D	zweidimensional
3D	dreidimensional
4D	vierdimensional
Å	Ångström ($1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$)
Abb.	Abbildung
APS	Ammoniumpersulfat
AS	Aminosäure
CANDID	automatisches NOE-Zuordnungsmodul (<i>combined automated NOE assignment and structure determination module</i>)
COSY	<i>correlated spectroscopy</i>
CSI	<i>chemical shift index</i>
ct	<i>constant time</i>
δ	chemische Verschiebung
D, ^2H	Deuterium
DNS	Desoxyribonukleinsäure (<i>deoxyribonucleic acid, DNA</i>)
DYANA	<i>dynamics algorithm for NMR applications</i>
<i>E. coli</i>	<i>Escherichia coli</i>
EDTA	Ethylendiamintetraacetat
Φ	Bindungswinkel, Torsionswinkel
FPLC	<i>fast protein liquid chromatography</i>
kDa	Kilodalton ($1 \text{ kDa} = 10^3 \text{ Atommasseneinheit}$)
γ	gyromagnetisches Verhältnis
G	Gauß ($1 \text{ G} = 10^{-4} \text{ Tesla}$)
HMQC	<i>heteronuclear multiquantum spectroscopy</i>
HPr	histidinhaltiges Phosphatübertragungsprotein des PTS
HSQC	<i>heteronuclear singlequantum spectroscopy</i>
<i>I</i>	Kernspinzahlnzahl
IIB ^{Man}	IIB-Domäne des Mannosetransporters von <i>E. coli</i>
ISPA	isolierte Zwei-Spin-Näherung (<i>isolated spin pair approximation</i>)
IUPAC	<i>international union of pure and applied chemistry</i>

φ	Diäderwinkel zwischen N und C ^α
χ^1	Diäderwinkel zwischen C ^α und C ^β
KP _i	Kaliumphosphat
<i>m</i>	magnetische Quantenzahl
MD	Moleküldynamik
MOLMOL	<i>molecule analysis and molecule display</i>
MRI	<i>magnetic resonance imaging</i>
NaP _i	Natriumphosphat
J	skalare Kopplungskonstante
ⁿ J(XY)	skalare Kopplungskonstante zwischen den Kernen X und Y über <i>n</i> Bindungen
LD ₅₀ /LD ₉₀	tödliche Dosis für 50 % bzw. 90 % der Empfänger (<i>lethal dose</i>)
NMR	Kernspinresonanz (<i>nuclear magnetic resonance</i>)
NOE	Kern-OVERHAUSER-Effekt (<i>nuclear Overhauser enhancement</i>)
NOESY	<i>nuclear Overhauser and exchange spectroscopy</i>
PASTA	Zuordnungsprogramm (<i>protein assignment by threshold accepting</i>)
P _i	anorganisches Phosphat
ppb	<i>parts per billion</i>
ppm	<i>parts per million</i>
PTS	Phosphoenolpyruvat-abhängiges Phosphotransferase-System
RMSD	paarweise Standardabweichung (<i>root mean square deviation</i>)
ROESY	<i>rotating frame Overhauser effect spectroscopy</i>
SA	<i>simulated annealing</i>
SDS	Natriumdodecylsulfat (<i>sodium dodecyl sulphate</i>)
TEMED	N, N, N', N'-Tetramethyl-1,2-diaminomethan
Tris	Tris-(hydroxymethyl)-methylamin
τ_c	Rotationskorrelationszeit
τ_m	Mischzeit
TOCSY	<i>total correlation spectroscopy</i>
TPPI	<i>time proportional phase incrementation</i>
[U- ¹³ C/ ¹⁵ N/ 50% ² H]	uniform ¹³ C- und ¹⁵ N-isotopenmarkiert, 50 % Deuterium

1 Einleitung

Vor gut 50 Jahren wurden die Biowissenschaften durch die Entdeckung der DNS-Struktur grundlegend revolutioniert [1]. Aber erst heute ist das menschliche Genom weitgehend aufgeklärt. Die Methoden zu Strukturaufklärung von organischen Molekülen, Proteinen und Nukleinsäuren in Lösung gewinnen damit noch mehr an Bedeutung. Die NMR-Spektroskopie gehört heute unbestreitbar zu den am besten dafür geeigneten Methoden. Im Jahr 2002 wurde den Nobelpreis in Chemie „für die Entwicklung von Methoden zur Identifikation und Strukturanalyse von biologischen Makromolekülen“ verliehen [2]. Die Hälfte des Preises wurde zu Ehren der Entwicklung der NMR-Spektroskopie zur Bestimmung der dreidimensionalen Struktur von biologischen Makromolekülen in Lösung vergeben [3]. Auch im Jahr 2003 gingen sowohl der Nobelpreis in Medizin oder Physiologie für die Entdeckungen in Bezug auf die „Abbildung mit Magnetresonanz“ (*Magnetic Resonance Imaging*: MRI) [4], als auch der Nobelpreis in Chemie „für die Entdeckungen bezüglich der Kanäle in Zellmembranen“ [5] an denselben Bereich: Strukturen, Proteine und Kernspinresonanz.

Alle diese Themen zeigen, wie die aktuelle Biochemie bis zum atomaren Niveau vordringt, mit dem Ziel die grundlegenden Prozesse des Lebens besser zu verstehen und auch wie unsere Gesellschaft diese Anstrengungen würdigt.

Aber der Weg dahin ist nicht leicht: im Bereich der Proteinstrukturanalyse mittels NMR in Lösung sind einige Hürden zu überwinden. Die Schwierigkeiten beginnen bereits beim biochemischen Teil der Arbeit. Die Proteinexpression wird erschwert durch die Notwendigkeit der Anreicherung von magnetisch aktiven Kernen wie ^{15}N und ^{13}C und von Deuterium, welches einen günstigen Einfluss auf das Relaxationsverhalten des Kernspins hat. Bei Isotopen-Anreicherung in lebenden Systemen kann die Abweichung von den normalen physiologischen Bedingungen die Ausbeute negativ beeinflussen. Qualität und Stabilität der Proben, die in vielen Fällen nicht selbst erzeugt werden, sind oft nicht ausreichend für NMR-Messungen, die sich über mehrere Tage hinziehen können. Die Lager-, Mess- und Lösungsbedingungen müssen daher optimiert werden.

Die Schwierigkeiten setzen sich bei den spektroskopischen Messungen fort. Die Anzahl der möglichen Messungen, die bei der Strukturaufklärung helfen sollen, steigt. Wie viele sind notwendig? Welche und wie sollten sie ausgewählt werden? Das sind Entscheidungen, die auch nach ökonomischen und zeitlichen Gründen erfolgen müssen. Zusätzlich können Schwierigkeiten wegen fehlender oder qualitativ nicht ausreichender Spektren dazu kommen. Nach langer, aufwändiger Arbeit an dem ersten analysierten Material wird oft festgestellt, dass es Schwierigkeiten gibt, Signale mit Überlagerung und Artefakten auszuwerten, bzw. dass die Aufnahme weiterer Spektren notwendig ist. Daraus resultieren Ergebnisse, die keine eindeutige Information zur Zuordnung ermöglichen. Hinzu kommen Schwierigkeiten bei der Integration der Signale, was zu ungenauen Abstandsbeschränkungen führt, die zur Strukturermittlung verwendet werden müssen.

Auch die Anzahl und Komplexität der Programme zur Auswertung der Spektren und für die automatische Zuordnung der Signale nimmt zu [6]. Mit unvollständigen Informationen und mit neuen Programmen, die oft noch nicht ausreichend getestet sind, soll letztendlich eine korrekte dreidimensionale Proteinstruktur berechnet werden.

Die Entscheidungen, die man am Anfang der Untersuchungen treffen muss, um optimale Ergebnisse zu erzielen, verlangen technisch-spektroskopische sowie protein-biochemische Erfahrungen. Mangelnde Erfahrung führt zu Verzögerungen und Schwierigkeiten bei den Untersuchungen und damit zu nicht optimalen Ergebnissen.

Ein Teil dieser Dissertation handelt von dem Forschungsprojekt zur Ermittlung der Struktur des zyklischen Dodekapeptids Omphalotin A von *Omphalotus olearius*, das von der Firma BAYER zur Verfügung gestellt wurde. Dafür wurden 1D- und 2D-NMR-Experimente aufgenommen, NMR-Parameter für die Strukturberechnung ermittelt und iterativ der Konformationsraum berechnet. In einem anderen Teil wird das Projekt zur Ermittlung der verfeinerten 3D-Struktur der IIB-Domäne des Mannosetransporters von *E. coli* (168 Aminosäuren) verfolgt. Dafür wurde nach der Messung mehrerer 2D- und 3D-NMR-Experimente und der Zuordnung der chemischen Verschiebungen das neue Programm CYANA [7] für automatische Zuordnung der NOE-Signale und Strukturberechnungen verwendet.

2 Konformationsanalyse von Biomolekülen in Lösung

2.1 Allgemeine Grundlagen der NMR-Spektroskopie

Die Kernspinresonanz nimmt unter den Methoden zur dreidimensionalen Strukturaufklärung von Proteinen und Nukleinsäuren eine einzigartige Rolle ein, da mit ihr Strukturen mit atomarer Auflösung in Lösung gewonnen werden können. Bedenkt man, dass Körperflüssigkeiten wie Blut, Magenflüssigkeit oder Speichel Proteinlösungen sind, so wird deutlich, wie wichtig die Kenntnis von Strukturen in Lösung ist. Seit der ersten experimentellen Beobachtung des Phänomens im Jahr 1946 [8, 9] hat die Entwicklung der NMR-Spektroskopie eine Reihe von fundamentalen Fortschritten erlebt: die Einführung der FOURIER-Transformations-Technik [10], die modernen mehrdimensionalen Experimente [11-13] und die bildgebenden Verfahren [14] sind wichtige Beispiele.

Die NMR-Spektroskopie nutzt die Resonanzwechselwirkung zwischen einem hochfrequenten elektromagnetischen Feld und bestimmten Atomkernen der zu untersuchenden Substanz, die sich in einem starken und homogenen äußeren Magnetfeld befindet. Grundlage der Messungen ist die Präzessionsbewegung, die Atome mit einem Kernspin $I \neq 0$ und einem magnetischem Moment μ in einem äußeren Magnetfeld um die Richtung des Magnetfeldes mit einer charakteristischen Frequenz (LARMOR-Frequenz ω) ausführen. Die Einstellung von Kernspin und magnetischem Moment wird durch die magnetische Quantenzahl m bestimmt. Übergänge zwischen den Energieniveaus (ZEEMAN-Aufspaltung) sind nur möglich, wenn sich die Quantenzahl um eine Einheit ändert. Bei Einstrahlung eines elektromagnetischen Wechselfeldes kommt es daher genau bei der Larmor-Frequenz zur Resonanzabsorption. Für die Anwendung der NMR-Spektroskopie zur Strukturaufklärung ist es wesentlich, dass das angelegte äußere Magnetfeld durch die Induktionswirkung der Elektronen und durch die Felder benachbarter Kerne abgeschwächt oder verstärkt wird. Dieser als magnetische Abschirmung bezeichnete Effekt ist von der Art der Kerne und der zugehörigen Elektronenverteilung abhängig. Die auf der Abschirmung beruhende Verschiebung der Resonanzlinie gegenüber der des isolierten Atomkerns wird als chemische Verschiebung bezeichnet und ist charakteristisch für die entsprechende „chemische“ Umgebung [15].

Die in der organische Chemie und Biochemie interessanten Elemente H, C, N und P haben Isotope mit $I = \frac{1}{2}$, ^{13}C und ^{15}N allerdings nur in geringer natürlicher Häufigkeit (1,1 % bzw. 0,37 %). Der empfindlichste aller zugänglichen magnetischen Kerne ist das Wasserstoffisotop ^1H , da es (abgesehen von Tritium) das größte kernmagnetische Moment und eine natürliche Häufigkeit von 99,98 % besitzt [16].

Die NMR-Spektroskopie wurde durch die Einführung von 2D-Techniken revolutioniert [17-19]. Sie ermöglichen die Interpretation der komplexen Protein-NMR-Spektren und die Ermittlung der für die Strukturberechnung benötigten Parameter: Kern-OVERHAUSER-Effekte (NOE) [20] und Kopplungskonstanten [21, 22], deren Werte Abstände zwischen Kernen sowie Diëderwinkel repräsentieren, die als Grundlage für die Rekonstruktion der Raumstruktur des Proteins mit Hilfe von computerisierten Struktur-Optimierungsalgorithmen dienen.

Die NMR-spektroskopischen Untersuchungen von Proteinen werden ab einer Größe von 60-80 Aminosäuren zunehmend durch die Signalüberlagerungen in den 2D-Spektren limitiert. Erst die 3D- und 4D-NMR-Techniken [11, 12] ermöglichen die Überwindung dieser Barriere. Grosse Fortschritte bei den experimentellen Techniken zur NMR-spektroskopischen Strukturbestimmung wurden durch die Einführung von Methoden zur biotechnologischen Herstellung von Proteinen angeregt, die so mit speziellen Isotopen markiert werden können [23, 24]. Beispielsweise eröffnete dies den Weg zur effizienten Nutzung heteronuklearer NMR-Techniken mit Proteinen, wie 3D- $[^1\text{H}, ^{13}\text{C}, ^{15}\text{N}]$ -Tripelresonanzexperimente, 3D- ^{13}C - oder ^{15}N -aufgelöste $[^1\text{H}, ^1\text{H}]$ -NOESY-Spektren [25, 26] und die Verwendung heteronuklearer Filter [27]. Mit vollständig mit ^{13}C - und/oder ^{15}N -markierten Proteinen lassen sich Systeme mit größerem Molekulargewicht untersuchen. Die Molekulargewichtsobergrenze wird im Wesentlichen durch die mit zunehmender Masse kürzer werdende transversale Relaxationszeit bestimmt. Dies führt zu einer Abnahme des Signal-Rausch-Verhältnisses sowie zu zunehmender Linienbreite (schlechtere Auflösung).

Der (teilweise) Ersatz des natürlichen Wasserstoff-Isotops ^1H durch Deuterium führt zu einer grundlegenden Erhöhung der Relaxationszeit [28, 29] und damit verbesserter Auflösung und Empfindlichkeit [30, 31]. Wegen der starken quadrupolaren Wechselwirkungen von Deuterium (ca. 170 kHz) befindet sich dessen Spin-Gitterrelaxationszeit (T_1) in Proteinen bei einer Feldstärke von 14 T im Millisekundenbereich. Deshalb führt die $^1\text{J}(\text{DC})$ -Kopplung (ca.

22 Hz) nicht zu dem erwarteten Triplett, sondern zeigt ein kollabiertes Singulett, das durch skalare Relaxation der zweiten Art [32, 33] verbreitert ist. Eine Deuteriumkopplung verringert effektiv diese Linienverbreiterung und führt zu schmäleren ^{13}C -Linienbreiten als bei Spektren mit protonierten Proben [28]. Zusätzlich bewirkt die Eliminierung von passiven Interprotonenkopplungen eine weitere Verschmälerung der Linien. Die daraus resultierende geringere Linienbreite konnte jedoch erst durch die Einführung einer effektiven Deuteriumkopplung [28] und der dazugehörigen Elektronik genutzt werden, die den raschen Wechsel zwischen Pulsen für die Deuteriumkopplung und Deuterium-Lock erlaubt [34].

Wichtige Fortschritte wurden auch bei der Entwicklung von Methoden zur Strukturrechnung erzielt, wo die benötigte Prozessorzeit zur Berechnung einer kleinen Proteinstruktur von ungefähr einem Tag im Jahre 1984 [35] auf wenige Sekunden verringert werden konnte [36]. Momentan wird intensiv an der Automatisierung und kombinierten Durchführung der einzelnen Schritte zur Strukturinterpretation NMR-spektroskopischer Daten gearbeitet [6, 36].

2.2 Parameter zur Konformationsanalyse

Die räumliche Struktur von Molekülen kann selbst mit modernen Methoden der Strukturberechnung in der Regel nur für kleine Moleküle korrekt vorhergesagt werden. Das Problem besteht dabei darin, aus der Vielzahl möglicher Konformationen die energetisch günstigste, das so genannte globale Energieminimum, herauszufiltern. Selbst kleinere Moleküle können jedoch bereits so viele Konformationen annehmen, dass eine erschöpfende Konformationsraumsuche unmöglich wird. Zur Strukturbestimmung benötigt man deshalb zusätzlich experimentelle Information, um den Konformationsraum einzuschränken. Als Quelle detaillierter Strukturinformation dient die NMR-Spektroskopie von Molekülen in Lösung. Um die Lösungsstruktur eines Proteins zu untersuchen, werden die aus den NMR-Daten gewonnenen strukturrelevanten Parameter – wie interatomare Abstands- und Diäderwinkelbeschränkungen – mit den korrespondierenden Restriktionen im Molekül wie Bindungslängen oder Bindungswinkel unter Berücksichtigung sterischer Limitierungen kombiniert [37].

2.2.1 Abstandsbeschränkung

Abstände zwischen Protonen sind experimentell aus NOESY- oder ROESY-Spektren zugänglich [20]. Der NOE beschreibt eine Intensitätsänderung der Resonanzfrequenz eines Kernes I nach Störung der Resonanz eines zweiten Kerns S durch Einstrahlen der entsprechenden Frequenz. Dieser Effekt beruht auf der Dipol-Dipol-Relaxation. Seine Größe ist eine Funktion des räumlichen Abstands der dipolar gekoppelten Kerne I und S. Die Intensität der beobachteten NOE- bzw. ROE-Kreuzsignale hängt vom Abstand r der beteiligten Protonen und von den effektiven Rotationskorrelationszeiten τ_c ab:

$$NOE \propto \frac{1}{\langle r \rangle^6} \cdot f(\tau_c) \quad \text{Gleichung 2.1}$$

Für jedes Paar von Wasserstoffatomen wird der effektive τ_c -Wert nicht nur durch die molekulare Rotation des gesamten Moleküls (BROWNSche Bewegung) bestimmt, die ihrerseits von Größe und Form des Proteins sowie der Viskosität des Lösungsmittels abhängt, sondern kann auch durch intramolekulare Bewegungen beeinflusst werden; daher kann $f(\tau_c)$ für verschiedene Paare von Wasserstoffatomen in einem Proteinmolekül unterschiedlich sein. Zusätzliche Mehrdeutigkeiten können durch partielle Auslöschung einzelner ^1H - ^1H -NOEs durch konkurrierende Spinrelaxationsprozesse auftreten, z.B. durch Spindiffusion (Abb. 2.1), chemischen oder konformationellen Austausch und Wechselwirkungen mit anderen Elektronen- oder Kernspins. Zusätzlich kann als Ergebnis rascher intramolekulare Bewegung ein gegebener NOE durch Mittelung über einen größeren Abstandsbereich zwischen zwei betrachteten Wasserstoffatomen zustande kommen [38].

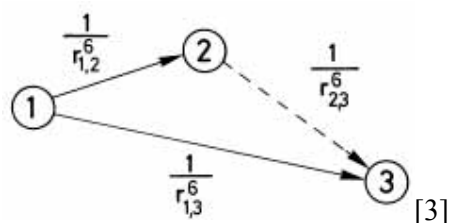


Abb. 2.1. Spindiffusion: der Magnetisierungstransfer zwischen den beiden Wasserstoffatomen 1 und 3 erfolgt in Anwesenheit weiterer Wasserstoffatome auf zwei konkurrierenden Wegen, nämlich dem direkten NOE über den Abstand $r_{1,3}$ und der Zwei- oder Mehrschritt-Spindiffusion über die dazwischenliegenden Wasserstoffe.

In Anbetracht dieser intrinsischen Beschränkungen für eine quantitative NOE-Abstandsbestimmung wird vereinfachend ein einheitlicher Wert für die Korrelationsfunktion $f(\tau_c)$ (Gleichung 2.1, Seite 6) für alle ^1H - ^1H -Kombinationen eines Proteins angenommen und aus den NOE-Messungen nur die Obergrenze für jeden ^1H - ^1H -Abstand abgeleitet. In der Praxis bedeutet dies, dass die Daten für eine Strukturrechnung aus erlaubten Abstandsbereichen bestehen, die durch den oberen Wert begrenzt sind, sowie durch einen unteren Wert, der der Summe der VAN-DER-WAALS-Radien zweier NOE-verknüpfter Wasserstoffatome entspricht. Obwohl so jeder einzelne Eintrag in der Datengrundlage nur von begrenzter Genauigkeit ist, ist dieses Verfahren doch robust und berücksichtigt prinzipiell auch den Einfluss der intramolekularen Beweglichkeit, die üblicherweise in strukturierten Bereichen globulärer Proteine zu erwarten ist [3].

Bei der Berechnung von Proteinstrukturen hat sich gezeigt, dass die Anzahl der verwendeten NOE-Abstände weit wichtiger ist als deren Präzision. Deshalb werden bei Proteinen die Abstandsbeschränkungen in der Regel gemäß der Signalintensität in Klassen eingeteilt, z.B. in die Klassen stark (1,8 – 2,7 Å), mittel (1,8 – 3,3 Å) und schwach (1,8 – 5,0 Å) [11].

Kleinere zyklische Peptide haben ein größeres Oberfläche-zu-Volumen-Verhältnis als globuläre Proteine. Die Anzahl der pro Monomer gemessenen Protonenabstände ist deshalb deutlich geringer als bei Proteinen. Diese Tatsache macht es erforderlich, die Abstände vor der Strukturberechnung genauer zu quantifizieren. Die Signalintensität ist hierfür jedoch nur bedingt geeignet, da sie auch von der individuellen Linienbreite abhängt. Man integriert deshalb jedes einzelne Signal und rechnet das erhaltene Signalvolumen unter Anwendung der isolierten Zwei-Spin-Näherung (ISPA) [39] in den korrespondierenden Atomabstand um (Gleichung 2.2). Zur Kalibrierung wird ein Signal bekannten Abstands verwendet, z.B. eines zwischen geminalen Methylen-Protonen (entsprechend 1,8 Å).

$$r_{ij} = r_{ref} \left(\frac{V_{ref}}{V_{ij}} \right)^{\frac{1}{6}} \quad \text{Gleichung 2.2}$$

Die Genauigkeit der ISPA ist zur Bestimmung von Abständen in kleineren Peptiden ausreichend [37].

2.2.2 Kopplungskonstanten- und Diëderwinkelbeschränkung

Als Spin-Spin-Kopplungen oder J-Kopplungen werden magnetische Wechselwirkungen zwischen zwei Kerne bezeichnet, die nicht über den Raum, sondern über die Elektronen der chemischen Bindungen vermittelt werden [40]. Nach dem NOE sind vicinale J-Kopplungen die zweite wichtige Informationsquelle für die Bestimmung der Lösungsstruktur biologischer Makromoleküle.

Die Größe einer solchen Kopplung über drei Bindungen, die skalare 3J -Kopplungskonstante, hängt im wesentlichen vom Diëderwinkel ab, aber auch von der Natur der beiden koppelnden und der beiden überbrückenden Kerne [41]. In Proteinen mit ihrem systematischen Aufbau lassen sich ähnliche Substitutionsmuster finden. Daher fasst man die vicinalen Kopplungen zu Gruppen zusammen und bezeichnet sie z. B. mit $^3J(\text{H}^{\text{N}}\text{H}^{\text{a}})$ oder $^3J(\text{H}^{\text{a}}\text{H}^{\text{b}})$. Innerhalb einer solchen Gruppe von Kopplungen wird der Einfluss der chemischen Umgebung näherungsweise als konstant angesehen. Als einzige Möglichkeit zur Beeinflussung der Kopplung verbleibt eine Änderung der Konformation durch eine Drehung um die mittlere der drei verbrückenden Bindungen, den Diëderwinkel, den die beiden koppelnden Kerne einschließen.

Der mathematische Zusammenhang zwischen Kopplungskonstante und Diëderwinkel Φ wird durch die KARPLUS-Beziehung beschrieben:

$$^3J = A \cos^2(\Phi + \omega) + B \cos(\Phi + \omega) + C \quad \text{Gleichung 2.3}$$

Sie kann sowohl für homo- als auch für heteronukleare Kopplungen verwendet werden, muss jedoch für jeden Diëderwinkel wegen des Einflusses der Elektronegativität und der relativen Anordnung der Substituenten neu parametrisiert werden (siehe Tabelle 2.1, Seite 9).

Tabelle 2.1. Parameter A, B und C für die in Gleichung 2.3, Seite 8, angegebene KARPLUS-Beziehung [22]. Die Phasenverschiebung ω berücksichtigt die Abweichung zwischen dem nach der IUPAC-Nomenklatur [42] definierten Diëderwinkel und dem von den koppelnden Kernen eingeschlossenen Diëderwinkel.

Diëderwinkel	Kopplungs-konstante	A	B	C	ω (L-AS)	ω (D-AS)
Φ	${}^3J(\text{H}^{\text{N}}\text{H}^{\alpha})$	9,4	-1,1	0,4	-60	60
Φ	${}^3J(\text{H}^{\text{N}}\text{C}'_i)$	5,7	-2,7	0,1	180	180
Φ	${}^3J(\text{H}^{\text{N}}\text{C}^{\beta})$	4,7	-1,5	-0,2	60	-60
Φ	${}^3J(\text{H}^{\text{N}}\text{C}'_{i-1})$	4,5	-1,3	-1,2	120	-120
χ^1	${}^3J(\text{H}^{\alpha}\text{H}^{\beta \text{ proR}})$	9,5	-1,6	1,9	120	0
χ^1	${}^3J(\text{H}^{\alpha}\text{H}^{\beta \text{ proS}})$	9,5	-1,6	1,9	0	120
χ^1	${}^3J(\text{C}'\text{H}^{\beta \text{ proR}})$	6,1	-2,7	1,0	0	-120
χ^1	${}^3J(\text{C}'\text{H}^{\beta \text{ proS}})$	6,1	-2,7	1,0	120	0

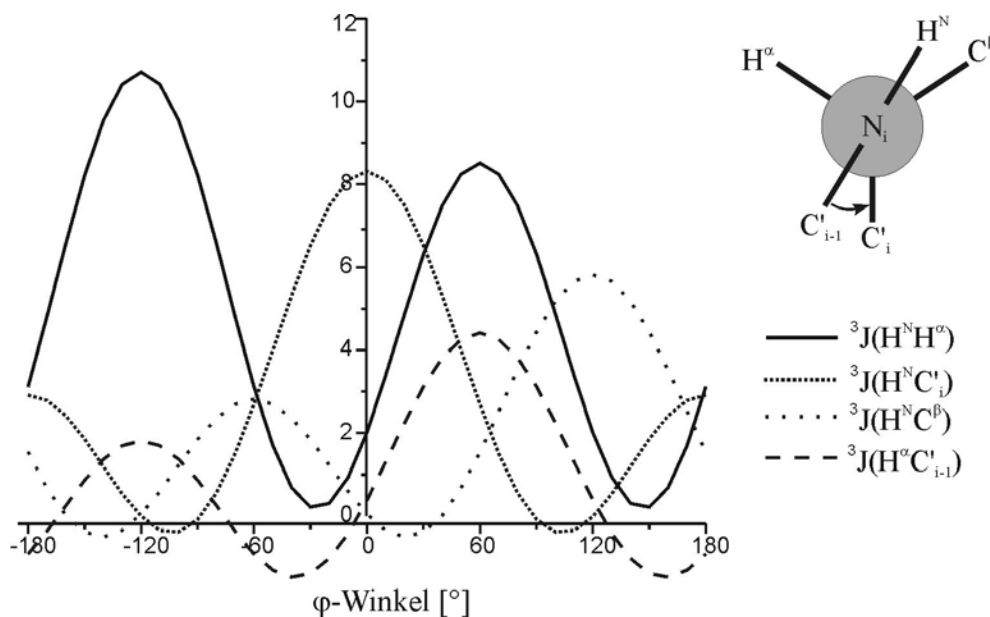


Abb. 2.2: Vom ϕ -Winkel abhängige KARPLUS-Kurven verschiedener Paare skalar koppelnder Kerne.

In Abb. 2.2 sind verschiedene KARPLUS-Kurven in Abhängigkeit des ϕ -Winkels dargestellt. Wie bereits aus Gleichung 2.3, Seite 8, hervorgeht, sind KARPLUS-Kurven periodische Funktionen und daher nicht eindeutig, d.h. ein gegebener Wert einer Kopplungskonstante ist in der Regel mit mehreren ϕ -Winkeln vereinbar. Diese Mehrdeutigkeit lässt sich aber durch gleichzeitige Verwendung verschiedener Kopplungskonstanten beseitigen.

Ist, wie im Fall von Proteinen, bereits die Sekundärstruktur (α -Helix, β -Faltblatt) bekannt, so kann die Kopplungskonstante unmittelbar anhand der KARPLUS-Kurve in den für die jeweilige Sekundärstruktur charakteristischen Torsionswinkel umgerechnet werden.

Zur experimentellen Bestimmung von Kopplungskonstanten können verschiedene Verfahren angewendet werden. So lassen sich die $^3J(\text{H}^{\text{N}}\text{H}^{\alpha})$ -Werte kleiner zyklischer Peptide im Idealfall aus eindimensionalen Spektren ablesen. Allerdings sind meist nur wenige Signale so gut aufgelöst, dass ein fehlerfreies Ablesen möglich ist. Bei Signalüberlappung zieht man daher oft zweidimensionale Spektren heran, die eine größere Dispersion aufweisen. In COSY-Spektren kommt es jedoch zwischen benachbarten Resonanzen eines Multipletts auf Grund des Antiphasen-Charakters zu Auslöschungen, wodurch sich die Lage der Multiplettlinien verschiebt und daher zu große Kopplungskonstanten abgelesen werden. Für ein isoliertes Zwei-Spin-System kann dieser Fehler nach der Methode von KIM und PRESTEGARD [43] korrigiert werden. Das E.COSY-Muster in P.E.COSY-Spektren [44, 45] enthält im Kreuzsignal zweier Spins die passive Kopplung zu einem dritten Spin in Form einer *in-Phase*-Verschiebung, aus der die passive Kopplung abgelesen werden kann. [37]

2.2.3 Diastereotope Zuordnung

Bei der Strukturbestimmung von Peptiden ist die Genauigkeit der verwendeten Abstandsbeschränkungen von großer Bedeutung (vgl. Abschnitt 2.2.1, Seite 6). Im Falle diastereotoper Gruppen (Methylen-Protonen, Methyl-Gruppen) ist jedoch eine diastereotope Zuordnung nicht immer möglich. Deshalb müssen Pseudoatome eingeführt und die Abstandsintervalle entsprechend vergrößert werden, was einen Verlust an Genauigkeit mit sich bringt. Diastereotope Gruppen werden deshalb, wo möglich, stereospezifisch zugeordnet.

Die diastereotope Zuordnung der H^{β} -Signale von Aminosäuren beruht auf der Annahme, dass nur die drei energetisch günstigsten Seitenketten-Rotamere populiert sind ($\chi^1 = -60^\circ, 60^\circ, 180^\circ$). Unter dieser Voraussetzung kann durch die Kombination verschiedener experimenteller Größen eine diastereotope Zuordnung vorgenommen werden (Tabelle 2.2, Seite 11). Dies ist jedoch am einfachsten, wenn ein Seitenketten-Rotamer überwiegend populiert ist, da anderenfalls NOE-Abstände und Kopplungskonstanten zu sehr gemittelt sind. [37]

Tabelle 2.2. Zusammenstellung wichtiger Abstände und Kopplungskonstanten für die diastereotopie Zuordnung der H^β -Protonen in Peptiden und Proteinen. [37]

	Rotamer I	Rotamer II	Rotamer III
Experimentelle Größe			
	$\chi^1 = -60^\circ$	$\chi^1 = 180^\circ$	$\chi^1 = 60^\circ$
$^3J(H^\alpha H^\beta \text{ proR})$ [Hz]	13,6	2,6	2,6
$^3J(H^\alpha H^\beta \text{ proS})$ [Hz]	2,6	13,6	2,6
$^3J(C^\alpha H^\beta \text{ proR})$	klein	groß	klein
$^3J(C^\alpha H^\beta \text{ proS})$	klein	klein	groß
$d(H^\alpha H^\beta \text{ proR})$ [Å]	3,1	2,5	2,5
$d(H^\alpha H^\beta \text{ proS})$ [Å]	2,5	3,1	2,5
$d(H^N H^\beta \text{ proR})$ [Å]	2,5 - 3,8	2,5 - 3,8	3,7 - 4,8
$d(H^N H^\beta \text{ proS})$ [Å]	3,7 - 4,4	2,5 - 3,8	2,5 - 3,8

2.2.4 Temperaturgradienten

Die Orientierung der Amidbindungen wird in der Regel durch Wasserstoffbrücken (intra- oder intermolekular sowie durch solche zum Lösungsmittel) festgelegt. Intermolekulare Brücken und solche zum Solvens werden im Gegensatz zu den intramolekularen Brücken bei Temperaturerhöhung leicht gespalten. Die chemische Verschiebung von Amidprotonen ändert sich daher mit der Temperatur. Dabei zeigen dem Lösungsmittel zugängliche Amidprotonen eine deutlich größere Temperaturabhängigkeit als solche, die vom Lösungsmittel abgeschirmt sind. Ein negativer Temperaturgradient, beispielsweise für DMSO-Lösungen, dessen Betrag größer als 5 ppb/K ist, deutet auf Lösungsmittel-Exposition des Amidprotons hin, während Beträge kleiner als 3 ppb/K für eine Abschirmung des Protons vom Lösungsmittel sprechen. Letztere kann sowohl von intramolekularen Wasserstoffbrücken als auch von einer benachbarten Seitenkette herrühren [46, 47].

2.3 Rechenverfahren zur Konformationsraumsuche

Wie in Abschnitt 2.2 erläutert, ist eine vollständige Konformationsraumsuche selbst bei kleineren Molekülen aus Gründen der Rechenkapazität in der Regel unmöglich. In der Praxis wird der zugängliche Konformationsraum daher eingeschränkt, indem die vorgestellten NMR-Strukturdaten in die Konformationsraumsuche einbezogen werden. Ausgehend von den NMR-Strukturdaten werden verschiedene Verfahren eingesetzt, um zu räumlichen Molekülstrukturen zu gelangen: Distanzgeometrie (DG) und moleküldynamisches *simulated annealing* (SA). [37, 48]

2.3.1 Distanzgeometrie

Die ersten Strukturbestimmungsmethoden verwendeten einen Distanzgeometrie-Algorithmus mit metrischer Matrix, um nach Molekülgeometrien zu suchen, die mit dem Ensemble aller NOE-Abstandsvorgaben konsistent sind [35, 49]. Jede derartige Rechnung endet mit der Minimierung einer Fehlerfunktion. [3]

Distanzgeometrie-Methoden durchsuchen den Konformationsraum sehr effektiv [50]. Sie erzeugen aus eindimensionalen Atomabständen dreidimensionale Atomkoordinaten. Die verwendeten Abstandsinformationen stammen aus zweierlei Quellen: Sie ergeben sich entweder aus der Konnektivität des Moleküls (holonomische Abstände) oder werden NMR-spektroskopisch ermittelt (NOE-Abstände). Die holonomischen Atomabstände erhält man aus den kovalenten Bindungsgeometrien (Bindungslängen, Bindungswinkel) und durch Rotation um frei drehbare Bindungen. Der dabei gemessene Abstandsbereich wird in Form von Abstandsober- und Abstandsuntergrenzen festgehalten. Die Untergrenze ist dabei mindestens so groß wie die Summe der VAN-DER-WAALS-Radien. NOE-Abstände werden berücksichtigt, indem die Grenzen des holonomischen Abstandsintervalls durch diejenigen des NOE-Abstandsintervalls ersetzt werden. Das führt zu einer Intervallverkleinerung und damit zu einer Einschränkung des Konformationsraums. [48]

Beim *random-metrization*-Schritt [51, 52] wird nun ein beliebig ausgewählter Abstand zufällig innerhalb seiner Grenzen festgelegt. Die sich daraus ergebenden Einschränkungen der übrigen Intervalle werden anschließend über Dreiecksungleichungen berechnet. Diese Prozedur wird so oft wiederholt, bis alle Abstände des Moleküls festgelegt sind. In vertretbarer Rechenzeit können auf diese Weise für kleinere Moleküle leicht 50 bis 100 Abstandsmatrizen generiert werden. [37]

Im nachfolgenden *embedding*-Schritt werden diese Abstandsmatrizen in einen vierdimensionalen Koordinatenraum überführt. Dort sind die Energiebarrieren wesentlich kleiner als im dreidimensionalen Raum [53], so dass durch Energie-Minimierung mit anschließender *distance driven dynamics* (DDD) [54, 55] die Struktur gut optimiert werden kann. Für diese Optimierung wird ein einfaches Potenzial verwendet, das Verletzungen der Ober- (OG) bzw. Untergrenzen (UG) mit einer Strafergie belegt (Gleichung 2.4). Da allein anhand von Abständen nicht zwischen Bild und Spiegelbild eines Moleküls unterschieden werden kann, kommt ein zusätzliches Potenzial ins Spiel, die so genannten chiralen Volumina. Sie stellen die richtige Händigkeit von Chiralitätszentren sicher und dienen darüber hinaus dem Erhalt der planarer Zentren. Sie sind als Spatprodukt der Vektoren, die die Substituenten eines planaren bzw. chiralen Zentrums verbinden, definiert. Verzerrungen der Geometrie resultieren in einer Veränderung des Spatvolumens, der mit entsprechenden Kräften auf die betroffenen Atome entgegengewirkt wird. [37]

$$V_{DG} = \sum_i (OG - r_i)^2 + \sum_i (UG - r_i)^2 + \sum_j (V_{Chir,j} - V_{Chir,j,0})^2 \quad \text{Gleichung 2.4}$$

An die Optimierung im vierdimensionalen Raum schließt sich eine Projektion in den dreidimensionalen Raum an, gefolgt von erneuter Optimierung durch Energie-Minimierung mit anschließender *distance and angle driven dynamics* (DADD) [56]. Das Potenzial V_{DG} ist darin zur Berücksichtigung der Kopplungskonstanten um den Term $V_J = \sum_i k_i (J_{i,calc} - J_{i,exp})^2$ erweitert.

Der Endwert der Fehlerfunktion stellt ein direktes Maß für den Erfolg dar, eine Molekülgeometrie gefunden zu haben, welche die experimentellen Daten erfüllt. In Anbetracht des zuvor angesprochenen Abstandsbereich-Charakters der Eingabedaten ist es von großer Wichtigkeit, die Eindeutigkeit der berechneten Struktur abschätzen zu können. Zu diesem Zweck wird die Strukturrechnung mit den gleichen Eingabedaten, aber unterschiedlichen Randbedingungen wiederholt und die Eindeutigkeit der Struktur nach der Ähnlichkeit der Strukturen des erhaltenen Konformer-Ensembles beurteilt.

Üblicherweise werden etwa 100 Konformere berechnet und eine Untergruppe aus den 20 Konformeren mit den geringsten Werten der Fehlerfunktion ausgewählt, um die NMR-Struktur des Proteins zu repräsentieren. Der Mittelwert der für diese Gruppe von Konformeren berechneten paarweisen Standardabweichungen (RMSD) wird als Maß für die Genauigkeit der Strukturbestimmung genommen. Anschaulich zeigt eine gute Übereinstimmung innerhalb dieses Bündels von Strukturen solche Bereiche an, in denen die Struktur durch die NMR-Daten mit hoher Präzision definiert ist. Strukturell ungeordnete Bereiche des Polypeptids weisen dagegen eine große Abweichung zwischen den einzelnen Strukturen des Ensembles auf. In der Abwesenheit von Abstandsvorgaben durch weitreichende NOEs wird ein korrekt funktionierender Algorithmus zur Strukturberechnung im Wesentlichen den gesamten Konformationsraum abdecken, der mit der gegebenen Länge der Polypeptidkette zugänglich ist.

Das erste komplette Programm für Proteinstrukturrechnungen mit NMR-Daten war DISGEO [35], eine verbesserte Version des originalen Algorithmus.

2.3.2 *Simulated annealing*

Der Algorithmus der variablen Zielfunktion oder *simulated annealing* (SA) ist die Methode der Wahl bei der nichtlinearen Optimierung von Systemen [57] und findet daher auch bei der Lösung von Multiminima-Problemen in Strukturrechnungen vielfache Anwendung [58, 59].

SA ist an den physikalischen Prozess des langsamen Abkühlens angelehnt. Der Konformationsraum wird zunächst bei hohen Temperaturen abgesucht, wo Potenzialbarrieren leicht überwunden werden können. Durch langsames Abkühlen entzieht man dem System allmählich kinetische Energie. Wird hinreichend langsam abgekühlt, sollte das System zum globalen Minimum potenzieller Energie finden können und sich nicht in lokalen Minima verfangen.

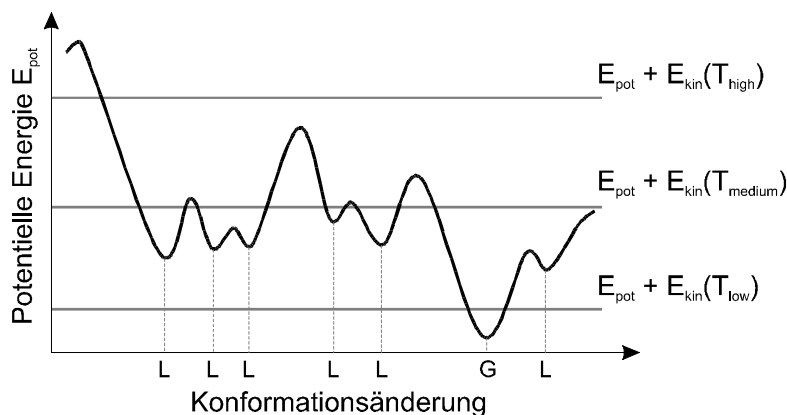


Abb. 2.3. Schematische Darstellung der Bestimmung des globalen Minimums G der potentiellen Energie auf der Energiehyperfläche durch langsames Abkühlen des Systems (*simulated annealing*). [37]

SA kann sowohl in Moleküldynamik- (MD) als auch in MONTE-CARLO-Rechnungen eingesetzt werden. Das *simulated-annealing*-MD-Protokoll ist u. a. in dem Programm X-Plor implementiert [60]. Es geht von einer beliebigen (in der Regel gestreckten) Molekülkonformation aus, deren kovalente Bindungsgeometrien optimiert sind. Die NMR-Beschränkungen werden wie geschildert berücksichtigt. Das SA-Protokoll verwendet ein einfaches Kraftfeld, dessen Kraftkonstanten so gewählt sind, dass die kovalenten Geometrien auch in Gegenwart der NMR-Beschränkungen problemlos aufrechterhalten werden können. Ausgehend von unterschiedlich verteilten Anfangsgeschwindigkeiten der Atome wird eine größere Anzahl von Molekülstrukturen erzeugt. Dies stellt sicher, dass die erhaltene Struktur von der Startstruktur weitestgehend unabhängig ist.

3 Strukturberechnung mit dem Programm CYANA

Für die Strukturaufklärung von Proteinen in Lösung sind aus NOE-Daten abgeleitete Abstandsbeschränkungen notwendig. Um Informationen aus NOESY-Spektren zu gewinnen, müssen die Kreuzsignale der Protonen, welche die Signale verursachen, eindeutig zugeordnet werden. Die NOESY-Zuordnung beruht auf der vorhergehenden sequenzspezifischen Zuordnung der ^1H -chemischen Verschiebung. Auf Grund der begrenzten Genauigkeit, mit der die Lage der Kreuzsignale und ihre chemische Verschiebung gemessen werden kann, ist eine eindeutige Zuordnungen aller Kreuzsignale anhand von den bekannten Verschiebungswerten, selbst für kleine Proteine, nicht immer möglich. Die Anzahl der NOESY-Kreuzsignale, die eindeutig zugeordnet werden können, nimmt mit zunehmender Ungenauigkeit in den Verschiebungswerten und NOE-Lagen rasch ab. Der Anteil der zuordenbaren Signale kann bis unter 10% der gesamten NOE-Kreuzsignale sinken [61]. Die Ermittlung einer umfassenden Reihe von Abstandsbeschränkungen aus NOESY-Spektren eines Proteins ist ein iterativer Prozess, in dem vorläufige, aus einem Teil der gesamten Anzahl von Abständen berechnete, dreidimensionale Strukturen zum Einsatz kommen, um die Mehrdeutigkeit der weiteren Signale zu mindern [62]. Zusätzliche Schwierigkeiten ergeben sich durch Artefakte und Rauschen und durch die Abwesenheit erwarteter Signale auf Grund von Relaxationsprozessen. Alle diese unvermeidbaren Beschränkungen bei der NMR-Datensammlung sind der Hauptgrund, weshalb aufwändige interaktive Arbeitsschritte immer noch eine wichtige Rolle bei der 3D-Proteinstrukturanalyse spielen.

Interaktive computergestützte Methoden für die NOESY-Zuordnung [6] benutzen die chemische Verschiebung für eine Anfangszuordnung der NOE-Signale und ein molekulares Modell einer vorläufigen Strukturberechnung, um einzelne Paare aus verschiedenen Zuordnungsmöglichkeiten auszuwählen. Es ist möglich zusätzliche Informationen wie Sekundärstrukturdaten oder die Linienform zu berücksichtigen und Strukturberechnungen mit unvollständigen Eingaben durchzuführen. In der Praxis sind mehrere Durchläufe von NOE-Zuordnung und Strukturberechnung erforderlich, um eine Struktur mit guter Qualität zu erreichen.

Methoden, in denen die Strukturberechnung einer automatischen NOE-Zuordnung folgt, funktionieren nach dem gleichen Schema, aber ohne interaktive Eingriffe.

Weil in der Anfangsphase die Anzahl von Kreuzsignalen mit eindeutigen Zuordnungen nicht groß genug ist, um die Proteinfaltung zu definieren, sollten automatische Methoden auch Informationen aus mehrdeutigen Kreuzsignalen entnehmen können. Außerdem sollte eine automatische Methode Rauschen, Artefakte und ungenau positionierte tatsächliche NOE-Signale differenzieren können.

CYANA [7] ist ein Programm, das die automatische NOE-Zuordnung und die Strukturberechnung verbindet. CANDID [63] heißt das Modul, das die automatische Zuordnung durchführt. Es verwendet Filter, die auf berechneten 3D-Strukturen basieren, Beschränkungen für mehrdeutige Signale und die neuen Konzepte der Netzverankerung und der Beschränkungskombination. Dies alles sollte eine effiziente und zuverlässige Suche der primären Durchlaufstruktur ermöglichen.

3.1 Beschreibung des CANDID-Moduls

Die automatische Methode der NOE-Zuordnung läuft in iterativen Zyklen ab. Diese bestehen aus einer erschöpfenden, zum Teil auch mehrdeutigen NOE-Zuordnung und anschließender Strukturberechnung nach dem Algorithmus der Torsionswinkeldynamik, der in dem Programm DYANA [63, 64] enthalten ist. Die Information zwischen nachfolgenden Zyklen wird ausschließlich durch die intermediäre 3D-Struktur übermittelt. Die in einem Zyklus erhaltene Proteinstruktur wird benutzt, um weitere NOE-Signale beim nächsten Zyklus zuzuordnen. Andererseits werden die gleichen Eingangsdaten in allen Zyklen benutzt. Als Ausgangsinformation müssen dem Programm die Aminosäuresequenz, eine oder mehrere Listen mit der sequenzspezifischen chemischen Verschiebungszuordnung und eine oder mehrere Listen mit Lage und Volumen der NOE-Kreuzsignale aus 2D-, 3D- oder 4D-NOESY-Spektren eingegeben werden. Die Ausgangsinformationen können durch sicher zugeordnete NOE-Abstandsbeschränkungen oder andere vorher bekannte konformationelle Abstände ergänzt werden. Diese Daten werden nur für die Strukturberechnung benutzt und können nicht von CANDID geändert werden.

Ein CANDID-Zyklus beginnt mit der Erzeugung einer Liste aller möglichen Zuordnungen für jedes Kreuzsignal, d. h. allen Paaren von Wasserstoffatomen, deren Werte innerhalb eines benutzerdefinierten bzw. standardmäßigen Toleranzbereichs der chemischen Verschiebung liegen und somit zum Signal beitragen könnten.

Anschließend werden alle Zuordnungen eines Signals nach einer Kriterienreihe gewichtet (siehe Abb. 3.1, Seite 19), um die niedrig gewerteten Zuordnungen auszusondern. Der erste Zyklus ist bestimmt durch die Netzverankerung (s. Kap. 3.1.3, Seite 21), weil noch kein Kriterium benutzt werden kann, das auf einer vorliegenden Struktur basiert. Für jede beibehaltene NOESY-Signalz Zuordnung wird eine Abstandsobergrenze aus der Signalintensität bzw. dem Volumen berechnet. Dadurch wird für jedes Signal mit eindeutiger Zuordnung eine herkömmliche Abstandsbeschränkung erhalten und für Signale mit mehrdeutigen Zuordnungen wird ein Abstand berechnet, der mehrere Zuordnungen enthält. Alle Signale mit niedrigen Werten werden in diesem Zyklus nicht weiter berücksichtigt. Um den Einfluss der nach dem Filterschritt noch enthaltenen fehlerhaften Abstände bei der Strukturberechnung zu verringern, werden weitreichende Abstandsbeschränkungen mit der Beschränkungskombination (s. Kap. 3.1.6, Seite 28) umgesetzt. Die endgültigen Abstände dienen dann als Eingabedaten für die Strukturberechnung mittels der DYANA-Torsionswinkeldynamik.

Die komplette Strukturberechnung von CYANA besteht insgesamt aus sieben CANDID-Zyklen. Abweichend vom ersten Zyklus benutzen alle weiteren CANDID-Zyklen Kriterien für die NOE-Zuordnung, die auf der 3D-Struktur des jeweils vorangehenden Zyklus basieren. Weil die Genauigkeit der Strukturbestimmung in der Regel mit jedem folgenden Zyklus steigt, werden die Kriterien für die Zuordnungsannahme und Abstandsbeschränkungen immer enger gewählt. Die Ausgabedateien eines CANDID-Zyklus enthalten eine Liste der Zuordnungen der NOESY-Signale, eine Liste der Erläuterungen jedes Zuordnungsbeschlusses und eine Datei mit der 3D-Proteinstruktur als Konformerbündel.

Ein zusätzlicher Filterschritt gewährleistet im siebten und letzten CANDID-Zyklus, dass nur NOESY-Signale mit eindeutigen Zuordnungen zur Strukturbestimmung herangezogen werden, sodass ein Vergleich mit herkömmlichen interaktiven Methoden bei Benutzung von CANDID-Abstandsbeschränkungsdateien möglich ist.

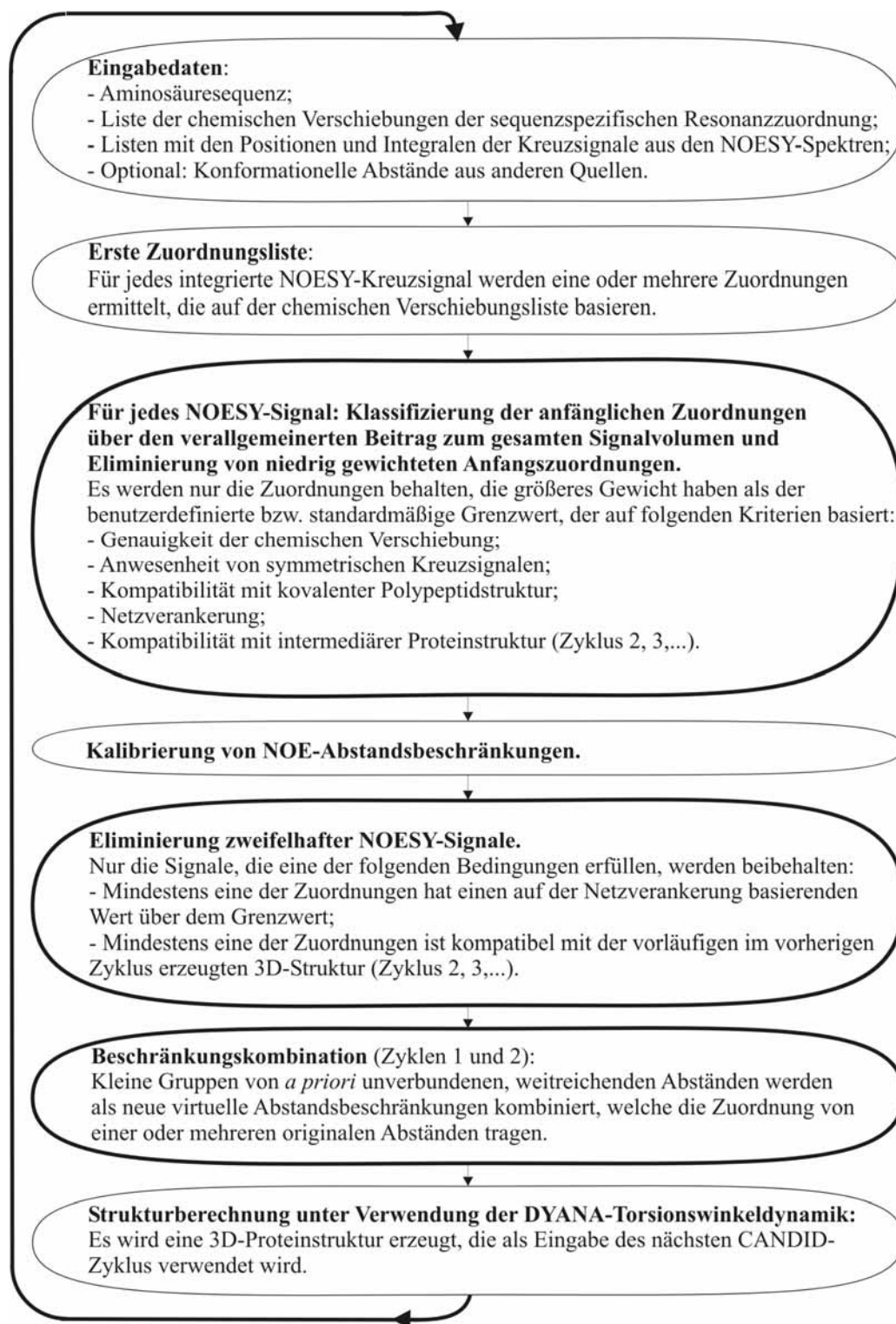


Abb. 3.1: Flussdiagramm der NMR-Konformationsanalyse mit automatischer NOE-Zuordnung mit dem CANDID-Modul und Strukturberechnung mit DYANA.

3.1.1 Eingabedaten

Das Format der Eingabedateien mit der Aminosäuresequenz, der chemischen Verschiebungsliste, den Positionen und Integralen der NOESY-Signale und optionalen konformationellen Abständen aus anderen Quellen ist mit dem Programm XEASY [65] kompatibel, das gleichzeitig andere interaktive sequenzielle Zuordnungsprotokolle und das Programm DYANA unterstützt.

3.1.2 Erstellung der ersten Zuordnungsliste

Die chemische Verschiebung eines Atoms α in der Eingabeliste eines NOESY-Spektrums S ist mit $\Omega_\alpha^S \pm \Delta\Omega_\alpha^S$ gekennzeichnet, wobei $\Delta\Omega_\alpha^S$ der Toleranzbereich ist. Die Abwesenheit eines Verschiebungswerts für ein Atom α wird mit $\Omega_\alpha^S = \infty$ angezeigt. Es ist möglich unterschiedliche Verschiebungslisten für jedes NOESY-Spektrum zu erstellen, jedoch ist es von Vorteil, die Daten von mehreren Experimenten abzustimmen und für alle Spektren eine gemeinsame Liste zu benutzen.

Ein Signal p in der Liste eines 2D-, 3D-, oder 4D-NOESY-Spektrums ist durch D chemische Verschiebungskordinaten ω_i^p ($i = 1, 2, \dots, D$), die mit $\Delta\omega_i^p$ als Toleranzbereich begrenzt sind, und durch sein Volumen I^p charakterisiert. Die Dimensionen des Spektrums müssen bei ω_1^p und ω_2^p die chemischen Verschiebungen zweier Wasserstoffatome besitzen. Jedes Wasserstoffatom α ist an ein anderes Schweratom $h(\alpha)$ kovalent gebunden. Wenn dies zutrifft, sind ω_3^p und ω_4^p die chemischen Verschiebungen der ^{13}C bzw. ^{15}N Atome, an welche die ^1H -Atome in Dimension 1 und 2 jeweils kovalent gebunden sind. CANDID kann mit mehreren NOESY-Listen verschiedener Dimensionen arbeiten.

Ein ^1H -Atom α wird einer Dimension i ($i=1, 2$) eines Signals p in einem NOESY-Spektrum S zugeordnet, wenn der Wert der chemischen Verschiebung Ω_α^S mit der Signallage ω_i^p innerhalb des Toleranzbereichs übereinstimmt:

$$\left| \omega_i^p - \Omega_\alpha^S \right| \leq \max \left(\Delta\omega_i^p, \Delta\Omega_\alpha^S \right) \quad \text{Gleichung 3.1}$$

Falls 3D- oder 4D-NOESY-Spektren vorhanden sind, gilt die Zuordnung, wenn zusätzlich zu Gleichung 3.1 gilt:

$$\left| \omega_{i+2}^p - \Omega_{h(\alpha)}^s \right| \leq \max \left(\Delta \omega_{i+2}^p, \Delta \Omega_{h(\alpha)}^s \right) \quad \text{Gleichung 3.2}$$

Für die Reihe A_i^p ($i=1, 2$) aller Wasserstoffatome α , die die Bedingungen der Gleichungen 3.1 und 3.2 erfüllen, sind die Anfangszuordnungen für das Signal p das direkte Produkt aller Reihen A_1^p und A_2^p , d. h. die Liste besteht aus den angeordneten Paaren der Wasserstoffatome (α, β) mit $\alpha \in A_1^p$ und $\beta \in A_2^p$. Alle Signale mit mindestens einer Anfangszuordnung in der Diagonale (d. h. $\alpha = \beta$) werden nicht weiter berücksichtigt.

3.1.3 Klassifizierung der Anfangszuordnung

Ein NOESY-Kreuzsignal mit einer einzelnen Anfangszuordnung führt zu einer herkömmlichen Abstandsbeschränkung, während ein NOESY-Kreuzsignal mit $n \geq 2$ Anfangszuordnungen zu einer mehrdeutigen Abstandsbeschränkung führt [66, 67]. Vorausgesetzt, dass die möglichen Zuordnungen auch die richtige beinhalten, wird sich die damit berechnete Proteinstruktur nicht verzerren. Eine mehrdeutige Abstandsbeschränkung hat jedoch verminderten Informationsinhalt, was es der Strukturrechnung erschwert, zur richtigen Struktur zu konvergieren. Deshalb werden unzulässige Zuordnungen möglichst vor der Strukturberechnung eliminiert. Für diesen Filterprozess werden die Anfangszuordnungen nach ihren *verallgemeinerten relativen Beiträgen* klassifiziert und nur solche eindeutigen wie mehrdeutigen Signale, deren Wert groß genug ist, für die Berechnung herangezogen.

Der verallgemeinerte relative Beitrag V_k einer Zuordnung k zum Signalvolumen ist durch den normalisierten Gesamtwert aus vier strukturabhängigen und einem strukturbasierten Term gegeben und definiert als:

$$V_k = \frac{C_k \min(T_k O_k N_k, S_{\max}) D_k}{\sum_{i=1}^n C_i \min(T_i O_i N_i, S_{\max}) D_i} \quad \text{Gleichung 3.3}$$

so dass $\sum_{k=1}^n V_k = 1$.

C_k gewichtet die Genauigkeit der chemischen Verschiebungen (s. u.). Die anderen Faktoren T_k , O_k , N_k und D_k hängen mit der Anwesenheit von symmetrischen Kreuzsignalen, der Kompatibilität mit der kovalenten Polypeptidstruktur, der Konvergenz der Netzverankerung und der Kompatibilität mit der intermediären Proteinstruktur zusammen und werden im folgenden näher erläutert. Das Produkt der drei Faktoren T_k , O_k und N_k ist auf einen standardmäßigen bzw. benutzerdefinierten maximalen Wert S_{max} begrenzt.

Klassifizierung nach der Genauigkeit der chemischen Verschiebungen, C_k

Mit der Absicht die mehrdeutigen Anfangszuordnungen zu unterscheiden, wird die Genauigkeit zwischen Signallage ω_i^p ($i = 1, 2, \dots, D$) und chemischer Verschiebung der entsprechenden Anfangszuordnung $\Omega_{\alpha i}^S$ ($\alpha_1 = \alpha$, $\alpha_2 = \beta$, $\alpha_3 = h(\alpha)$, $\alpha_4 = h(\beta)$) durch einen GAUßschen Gewichtungsfaktor quantifiziert:

$$C_k = C_{\alpha\beta}^p = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^D \left(\frac{\omega_i^p - \Omega_{\alpha i}^S}{\Gamma \max(\Delta\omega_i^p, \Delta\Omega_{\alpha i}^S)} \right)^2 \right) \quad \text{Gleichung 3.4}$$

C_k hat den Wert 1,0 für Gleichwertigkeit. Γ ist ein standardmäßiger bzw. benutzerdefinierter Parameter, der die relative Bedeutung der Genauigkeit der chemischen Verschiebung gegenüber den anderen Klassifizierungskriterien bestimmt.

Klassifizierung nach der Anwesenheit von symmetrischen Kreuzsignalen, T_k

Wenn ein Signal p in einem heteronuklear editierten 3D-NOESY-Spektrum die Anfangszuordnung (α , β , $h(\alpha)$) hat, dann ist p^* , mit Signallage $(\omega_1^{p^*}, \omega_2^{p^*}, \omega_3^{p^*})$, das symmetrische Signal von p , wenn:

$$\left| \omega_i^{p^*} - \Omega_{\alpha i}^S \right| \leq \max(\Delta\omega_i^p, \Delta\Omega_{\alpha i}^S) \quad (i = 1, 2, 3) \quad \text{Gleichung 3.5}$$

mit $\alpha_1 = \beta$, $\alpha_2 = \alpha$, $\alpha_3 = h(\beta)$; 4D-NOESY-Spektren werden entsprechend behandelt. Wenn das symmetrische Signal gefunden wird, wird für die Anfangszuordnung k ein Faktor $T_k = T \gg 1$ zugefügt (T ist eine benutzerdefinierte Konstante), ansonsten wird standardmäßig $T_k = 1$ gesetzt. Um zu verhindern, dass zwischen den Anfangszuordnungen eine nicht gerechtfertigte Diskriminierung stattfindet, wird nur $T_k \neq 1$ gesetzt, wenn die Heteroatome $h(\beta)$ auch wirklich in allen Anfangszuordnungen eines Signals zugeordnet wurden.

Klassifizierung nach der Kompatibilität mit der kovalenten Polypeptidstruktur, O_k

Die festen Bindungslängen, Bindungswinkel und die Chiralität der kovalenten Struktur werden auf ihre Vereinbarkeit mit den jeweiligen Abstandsbeschränkungen zwischen Resten und sequenziellen Abständen überprüft. In CANDID werden diese konformationsabhängigen Abstandsbeschränkungen $u_{\alpha\beta}^{(cc)}$ für jedes Atoppaar (α , β), das durch einen oder zwei Torsionswinkel getrennt ist, analytisch errechnet. CANDID setzt für die Anfangszuordnung k einen Faktor $O_k = O \gg 1$ fest, wenn die entsprechenden Abstände einen benutzerdefinierten Wert d_{max} nicht überschreiten (O ist eine benutzerdefinierte Konstante), ansonsten wird standardmäßig $O_k = 1$ gesetzt. Diese Diskriminierung zu Gunsten von Zuordnungen, die in jeder möglichen Konformation eines Proteins ein sichtbares NOE-Signal ergeben sollten, entsprechen der gebräuchlichen Behandlung von kurzreichenden ^1H - ^1H -Konnektivitäten durch erfahrene Spektroskopiker im Verlauf der interaktiven NOE-Zuordnungsstrategie.

Klassifizierung nach Kompatibilität mit intermediärer 3D-Proteinstruktur, D_k

Der strukturabhängige Volumenbeitrag D_k einer Anfangszuordnung k ($k = 1, \dots, n$) wird als Durchschnitt über alle M Konformere im vorläufigen Strukturbündel berechnet:

$$D_k = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left(d_{\alpha_k \beta_k}^{(j)} / \bar{d}^{(j)} \right)^{-\eta} \quad \text{Gleichung 3.6}$$

$d_{\alpha_k \beta_k}^{(j)}$ ist der Abstand zwischen den Atomen α_k und β_k im Konformer j .

$$\bar{d} = \left(\sum_{k=1}^n d_{\alpha_k \beta_k}^{-6} \right)^{-1/6} \quad \text{Gleichung 3.7}$$

Für die isolierte Zwei-Spin-Näherung ist $\eta = 6$. Kleinere Werte können jedoch benutzt werden, um die Sensibilität von D_k auf Strukturabweichungen zu minimieren, wenn eine ungenaue vorläufige Struktur als Referenz benutzt wird. In Abwesenheit einer Struktur während des ersten CANDID-Zyklus werden einheitliche Faktoren $D_k = 1/n$ für jede Anfangszuordnung benutzt.

Klassifizierung nach dem Netzverankerungsprinzip, N_k

Die Netzverankerung nutzt die Betrachtung, dass die richtigen Abstandsbeschränkungen einen selbstkonsistenten Teilsatz jedes Abstandsbeschränkungsnetzes bilden, das für die Strukturbestimmung eines Proteins genügend dicht sein soll. Die Netzverankerung berechnet die Selbstkonsistenz von NOE-Zuordnungen unabhängig von der Kenntnis der Proteinstruktur. Die Anforderung, dass jede NOE-Zuordnung konsistent mit allen anderen Zuordnungen sein soll, stellt sicher, dass die Netzverankerung irrtümliche, allein stehende Zuordnungen ausschließen sollte, welche letztendlich strukturelle Verzerrungen erzeugen würden. Solche fehlerhaften Zuordnungen müssen nicht zwingend während der Strukturberechnung zu systematischen Beschränkungsverletzungen führen und können deshalb nicht sicher mit den anderen Filtern eliminiert werden.

Der Faktor für die Netzverankerung für eine Anfangszuordnung eines NOESY-Signals $N_k = N_{\alpha\beta}$ wird wie folgt berechnet. Es werden alle Atome $\gamma \neq \alpha, \beta$ gesucht, die gleichzeitig mit α und β verbunden sind, entweder durch Anfangszuordnungen anderer Signale oder weil die kovalente Struktur bedingt, dass der Abstand kurz genug ist, um ein NOESY-Signal zu erzeugen. Zusätzlich ist es erforderlich, dass alle Atome γ im gleichen Aminosäurerest sind wie α oder β oder in einem angrenzenden Rest. Dann ist $N_{\alpha\beta}$ die Summe aller indirekten Wege, die α und β durch ein drittes Atom γ verbinden.

$$N_k = N_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma} \sqrt{v_{\alpha\gamma} v_{\beta\gamma}} \quad \text{Gleichung 3.8}$$

$N_{\alpha\beta}$ stellt die Anzahl der indirekten Wege zwischen α und β durch ein drittes Atom γ und damit die Netzverankerung dieser Zuordnungsmöglichkeit dar. Die Verbindungen $v_{\alpha\gamma}$ sind dabei folgendermaßen festgelegt:

$$v_{\alpha\gamma} = \tilde{v}_{\alpha\gamma} \theta(\tilde{v}_{\alpha\gamma} - v_{\min}) \quad \text{mit} \quad \tilde{v}_{\alpha\gamma} = \max\left(\sum_p V_{\alpha\gamma}^{(p)}, V_{\alpha\gamma}^{(cc)}\right) \quad \text{Gleichung 3.9}$$

θ ist die HEAVISIDE-Funktion und v_{\min} ist der Grenzwert für den Mindestbeitrag. $\tilde{v}_{\alpha\gamma}$ ist die Summe aller verallgemeinerten Volumenbeiträge (siehe Gleichung 3.3, Seite 21) der Signale mit der Zuordnung (α, γ) .

$V_{\alpha\gamma}^{(cc)}$ stellt sicher, dass ein Mindestbeitrag für Wasserstoffatompaaire mit Platzierung innerhalb eines Aminosäurerestes bzw. sequenzieller Reste geben wird:

$$V_{\alpha\gamma}^{(cc)} = \begin{cases} v_{\max} & \text{wenn } u_{\alpha\gamma}^{(cc)} \leq d_{\max} \quad (\text{Def. s. S. 23 unter "O}_k\text{"}) \\ v_{\min} & \text{alle anderen Beiträge innerhalb eines} \\ & \text{AS - Restes bzw. sequenzieller Reste} \\ 0 & \text{alle weitreichenden Beiträge} \end{cases} \quad \text{Gleichung 3.10}$$

Die Berechnung der Netzverankerungsbeiträge in Gleichungen 3.8 bis 3.10 erfolgt rekursiv, weil die Beurteilung eines Signals die Kenntnis des verallgemeinerten Volumenbeitrages (Gleichung 3.3, Seite 21) anderer Signale benötigt, welcher wiederum eine Funktion des Netzverankerungsbeitrags dieses Signals ist. Deswegen wird die Berechnung dieser Werte dreimal abwechselnd wiederholt. Wenn man verschiedene NOESY-Listen verwendet, werden alle Signale aller Spektren gleichzeitig an der Netzverankerung mitwirken. Schließlich wird die Netzverankerung aminosäureresteweise zwischen den Resten A und B wie folgt berechnet:

$$\bar{N}_{AB} = \sum_{\alpha \in A} \sum_{\beta \in B} N_{\alpha\beta} \quad \text{Gleichung 3.11}$$

Eliminierung von niedrig eingestuften Anfangszuordnungen

Die Anfangszuordnungsliste wird nach hohen Werten des verallgemeinerten Beitrags V_k zum Signalvolumen (Gleichung 3.3, Seite 21) durchsucht. Nur Werte mit $V_k \geq V_{\min}$ werden beibehalten. Diese Werte werden danach als abgeleitete Abstandsbeschränkung zur Strukturberechnung verwendet.

Im letzten CANDID-Zyklus werden die übrig gebliebenen mehrdeutigen NOE-Zuordnungen entweder durch eine eindeutige Zuordnung vertreten oder für die Berechnung nicht verwendet. Dieser Filterschritt wird durch Erhöhung des minimal verallgemeinerten Volumenbeitrags V_{\min} jeder Anfangszuordnung auf Werten größer als 50% vollzogen.

3.1.4 Kalibrierung von NOE-Abstandsbeschränkungen

Ein NOESY-Kreuzsignal mit einer einzigen eindeutigen Zuordnung (α , β) führt zu einer Obergrenze b des Abstandes $d_{\alpha\beta}$ zwischen den Wasserstoffatomen α und β in der molekularen Struktur, d. h. $d_{\alpha\beta} \leq b$. Ein NOESY-Kreuzsignal mit $n \geq 2$ Zuordnungen wird als eine Überlagerung der n Signale angenommen:

$$\bar{d} = \left(\sum_{k=1}^n d_{\alpha_k\beta_k}^{-6} \right)^{-1/6} \leq b \quad \text{Gleichung 3.12}$$

Jedem Abstand $d_{\alpha_k\beta_k}$ entspricht eine Zuordnung (α_k , β_k). In CANDID wird die Obergrenze b eines Signals p des NOESY-Spektrums S mit Signalvolumen I^p und n möglichen Zuordnungen (α_k , β_k) mit $k = 1, \dots, n$ wie folgt berechnet:

$$b = \left(\sum_{k=1}^n \frac{I^p V_k}{\sqrt{Q_{\alpha_k}^S Q_{\beta_k}^S}} \right)^{-1/6} \quad \text{Gleichung 3.13}$$

Q_{α}^S und Q_{β}^S sind Atomkalibrierungskonstanten für α und β im Spektrum S . In der Praxis werden entsprechende Kalibrierungskonstanten für bestimmte Atomtypen, z. B. für Rückgrat- atome, Seitenkettenatome oder Methylgruppen, verwendet [68]. CANDID bietet drei Möglichkeiten an, die Konstanten zu bestimmen: benutzerdefinierte Kalibrierung, automatische strukturunabhängige Kalibrierung oder automatische strukturbasierte Kalibrierung. Die benutzerdefinierte Kalibrierung verwendet Werte für Q_{α}^S und Q_{β}^S , die der Benutzer ausgewählt hat und die während aller CANDID-Zyklen konstant gehalten werden. Die automatischen Methoden brauchen keine ausdrücklichen Eingaben vom Benutzer. Die automatische strukturunabhängige Kalibrierung legt die Kalibrierungskonstante fest, so dass der Durchschnittswert der Abstandsobergrenze für alle Signale einer bestimmten Atomtypkombination einen vorgegeben Wert erreicht. Die automatische strukturbasierte Kalibrierung legt die Kalibrierungskonstante fest, so dass die verfügbare vorläufige Struktur nicht mehr als einen vorgegebenen Prozentsatz der Abstandsobergrenzen verletzt.

3.1.5 Eliminierung zweifelhafter NOESY-Signale

Die Identifizierung und Eliminierung potenziell falscher NOE-Kreuzsignale ist ein erforderlicher Schritt der Suche nach der korrekten 3D-Proteinstruktur, weil die experimentellen Eingabedaten i. d. R. nicht fehlerfrei sind. Üblicherweise kann eine begrenzte Anzahl von Signalen nicht zugeordnet werden, weil sie z. B. Artefakten oder Rauschen entsprechen, oder die Signallage einen größeren Fehler als die Toleranz zeigt, die chemische Verschiebungsliste unvollständig ist, einige Signalintegrale stark überschätzt wurden, usw.

Um schädliche Effekte auf die resultierende Struktur zu minimieren verwendet CANDID vier verschiedene Signalfilter, so dass eine Abstandsbeschränkung aus einem gegebenen Signal nur abgeleitet wird, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind: (i) mindestens einer der verallgemeinerten Volumenbeiträge V_k (Gleichung 3.3, Seite 21) überschreitet den Grenzwert V_{\min} ; (ii) die Anzahl der Zuordnungen ist unterhalb eines benutzerdefinierten maximalen Wertes n_{\max} ; (iii) die entsprechende Abstandsbeschränkung wird nicht in mehr als einem bestimmten Prozentsatz der Konformere, die für die Darstellung der vorläufigen Struktur benutzt werden, einen Anhaltswert d_{cut} überschreiten (ab dem 2. CANDID-Zyklus); (iv) die Zuordnung des Signals hat eine gute Bewertung in der Netzverankerung aller Signalzuordnungen, berechnet als $\langle \bar{N} \rangle_p = \sum_{k=1}^n V_k \bar{N}_k$ bzw. $\langle N \rangle_p = \sum_{k=1}^n V_k N_k$, d. h. um akzeptiert zu werden, muss ein Signal p entweder die einfache Bedingung eines hohen Wertes für die Netzverankerung pro Aminosäurerest $\langle \bar{N} \rangle_p \geq \bar{N}_{high}$ haben (Gleichung 3.11, Seite 25) oder die kombinierte Bedingung eines minimalen Wertes der Netzverankerung pro Aminosäure $\langle \bar{N} \rangle_p \geq \bar{N}_{\min}$ und pro Atom $\langle N \rangle_p \geq N_{\min}$ erfüllen, wobei \bar{N}_{high} , \bar{N}_{\min} und N_{\min} konstante Parameter von CANDID sind ($\bar{N}_{high} > \bar{N}_{\min}$).

3.1.6 Beschränkungskombination

In der Praxis ergeben sich unechte Abstandsbeschränkungen in den Eingabedaten aus der Fehleinschätzung des Rauschens und ähnlicher Artefakte, ebenso wie aus echten Signalen von Atomen, deren Zuordnung nicht in der chemischen Verschiebungsliste erfasst ist. Dieser Zustand ist am Anfang einer Strukturberechnung besonders kritisch, weil keine vorläufige Struktur für die 3D-strukturbasierte Bewertung der Zuordnungen verfügbar ist. Die Beschränkungskombination versucht die Auswirkung dieser Imperfektionen auf die sich ergebende Struktur auf Kosten von vorübergehendem Informationsverlust zu minimieren. Die Beschränkungskombination wird in den ersten CANDID-Zyklen angewendet, um virtuelle Abstandsbeschränkungen mit kombinierten Zuordnungen aus normalerweise nicht verwandten Kreuzsignalen zu erzeugen. Die fundamentale Eigenschaft der Beschränkungskombination für die mehrdeutigen Abstandsbeschränkungen ist: Immer wenn mindestens *eine* richtige Zuordnung in der kombinierten Einschränkung eingeschlossen ist, werden die Einschränkungen zur richtigen Proteinstruktur führen. Deshalb haben kombinierte Abstandsbeschränkungen eine geringere Wahrscheinlichkeit falsch zu sein als einzelne Abstandsbeschränkungen.

Zwei verschiedene Modelle der Beschränkungskombination wurden in CANDID implementiert: die „2 zu 1 Beschränkungskombination“, die weitreichende Zuordnungen zweier Signale A und B in eine einzelne neue virtuelle Abstandsbeschränkung $A \cup B$ umsetzt, und die „4 zu 4 paarweise Beschränkungskombination“, die weitreichende Zuordnungen der vier Signale A , B , C und D in vier neue virtuelle Abstandsbeschränkungen $A \cup B$, $A \cup C$, $A \cup D$ und $B \cup C$ umsetzt. Eine Beschränkungskombination wird nur auf weitreichende Zuordnungen angewandt, die sich aus Atomen ergeben, die mindestens fünf Aminosäurereste in der Sequenz trennen, weil die Wirkung von weitreichenden Abstandsbeschränkungen in der globalen Faltung viel wichtiger ist als kurz- oder mittelreichweitige Abstandsbeschränkungen. Um die Effizienz der „4 zu 4 paarweisen Beschränkungskombination“ zu steigern, werden die weitreichenden Signale - entsprechend ihrem Netzverankerungsbeitrag pro Aminosäure (Gleichung 3.11, Seite 25) sortiert - in vier Gruppen eingeteilt und die vier Signale A , B , C und D jeweils aus einer Gruppe gewählt. Der Anzahl der weitreichenden Abstandsbeschränkungen wird bei der „2 zu 1 Kombination“ halbiert, während bei der „4 zu 4 paarweisen Kombination“ die inhärente strukturelle Information bewahrt wird, denn die Anzahl der Einschränkungen bleibt gleich.

Außerdem werden die Zuordnungen nach ihrer Zuverlässigkeit unterschiedlich gewichtet, weil in den Beschränkungskombinationen die ursprünglichen Signale A , B , C und D jeweils 3, 2, 2 und 1 Mal verwendet werden.

Die Wirkung der Beschränkungskombination wird quantitativ in folgenden Beispielen gezeigt: Wenn für Eingabedaten mit N weitreichenden Signalen, von denen eines zu einer falschen Abstandsbeschränkung führt, eine einheitliche Wahrscheinlichkeit $p \ll 1$ angenommen wird, dann werden bei der „2 zu 1 Beschränkungskombination“ die N experimentellen Abstandsbeschränkungen durch $N/2$ virtuelle Einschränkungen mit einer einheitlichen Fehlerwahrscheinlichkeit $p^2 \ll p$ ersetzt. Bei der „4 zu 4 Beschränkungskombination“ werden die Fehlerwahrscheinlichkeiten der N weitreichenden Signale in vier Gruppen αp , p , p und $(2-\alpha)p$ geteilt, so dass die gesamte Wahrscheinlichkeit einer falschen Eingangseinschränkung wieder p ist. Der Parameter α , mit $0 \leq \alpha \leq 1$, beschreibt die höhere Zuverlässigkeit des Signals aus der ersten Gruppe, in Vergleich zu denen der beiden mittleren und der vierten Gruppe. Die N virtuellen nach der „4 zu 4 Kombination“ berechneten weitreichenden Abstandsbeschränkungen haben eine gesamte Fehlerwahrscheinlichkeit von $(\alpha + (1-\alpha^2)/4)p^2$, was kleiner als p^2 ist für $\alpha < 1$, vorausgesetzt, dass die Sortierung der experimentellen Einschränkungen nach unterschiedlicher Zuverlässigkeit erfolgreich war. So wird z. B. durch die „4 zu 4 Beschränkungskombination“ mit $\alpha = 0,5$ eine Eingabedatei mit 900 richtigen und 100 falschen weitreichenden Kreuzsignalen (d. h. $N = 1000$, $p = 0,1$) in eine Datei mit ca. 993 richtigen und 7 falschen virtuellen Abstandsbeschränkungen umgesetzt. Für die gleiche Eingabedatei wird die „2 zu 1 Beschränkungskombination“ ca. 495 richtige und 5 falsche Abstandsbeschränkungen hervorbringen. Die „4 zu 4 Beschränkungskombination“ ist in den ersten zwei CANDID-Zyklen von CYANA als Standard definiert.

Die Abstandsbergrenze b für eine virtuelle kombinierte Einschränkung wird aus den zwei Abstandsbergrenzen b_1 und b_2 der originalen experimentellen Abstandsbeschränkungen abgeleitet, entweder als r^{-6} -Summe $b = (b_1^{-6} + b_2^{-6})^{-1/6}$ (standarddefiniert) oder als das Maximum $b = \max(b_1, b_2)$. Die erste Wahl minimiert den Informationsverlust, wenn zwei richtige Einschränkungen kombiniert werden, während die zweite Wahl die Einführung einer unechten zu kleinen Obergrenze vermeidet, wenn eine richtige und eine falsche Beschränkung kombiniert werden.

3.2 Strukturberechnung mit DYANA

Das Programm DYANA [64] wurde für die Zusammenarbeit mit dem CANDID-Modul angepasst. Jeder CANDID-Zyklus wird mit einer durch den schnellen DYANA-Torsionswinkeldynamik-Algorithmus berechneten Struktur abgeschlossen (Abb. 3.1). Mehrdeutige Abstandsbeschränkungen werden von DYANA als Eingabedaten angenommen. Beiden Programme können dadurch gut miteinander kommunizieren. DYANA arbeitet nach der *simulated-annealing*-Methode (Abschnitt 2.3.2, Seite 14). Das Programm DIANA [76] („*distance geometry algorithm for NMR applications*“), Vorgänger von DYANA, wurde entwickelt, um die Konformationsberechnung von Biomakromolekülen insbesondere von Proteinen und DNA/RNA auf der Basis von Atom-Atom-Abständen und Diëderwinkeln aus experimentellen NMR-Daten zu ermöglichen.

Da der Konformerhyperraum viele lokale Minima besitzt, werden ständig neue Ansätze für Strukturrechnungen aus NMR-Daten gesucht. Die Methoden der Distanzgeometrie-Algorithmen führen noch immer zu sehr langen Rechenzeiten, besonders wenn durch einen zu geringen Datensatz die Anzahl der zur Konvergenz der Struktur nötigen Programmläufe erhöht werden muss. Darüber hinaus müssen sehr viele Strukturen berechnet werden, um einen Basissatz an energetisch niedrigen Strukturen zu erhalten. Diese Schwierigkeit ist darauf zurückzuführen, dass letztendlich eine (immer zufällige) Ausgangsstruktur energieminiert wird, und diese somit leicht in ein lokales Minimum gerät. Auch das *simulated-annealing*-Verfahren im kartesischen Koordinatenraum weist die gleichen Probleme auf, solange man nicht mit einer gut definierten Konformation anfängt [69].

Im Torsionswinkelraum wird so gearbeitet, dass Standardgeometrien der Aminosäurereste, wie Bindungslängen und -winkel, während der Strukturberechnung erhalten bleiben. Mit der Definition der Aminosäuresequenz wird für die ω -Torsionswinkel eine *cis*- oder *trans*-Konformation festgelegt. Nach der Festlegung zweier Startpunkte am N-Terminus kann die Tertiärstruktur des Proteins lediglich mit einem Satz von Torsionswinkeleinstellungen beschrieben werden. Durch Änderung der frei drehbaren Torsionswinkel innerhalb erlaubter Intervalle werden zunächst intraresiduale Abstandsbeschränkungen erfüllt. Anschließend werden Schritt für Schritt auch immer weiterreichende Abstandsbeschränkungen berücksichtigt.

Eine Fehlerfunktion enthält alle Verletzungen der vorgegebenen Abstands- und Diëderwinkelbeschränkungen sowie der zumindest erforderlichen VAN-DER-WAALS-Abstände in einer errechneten Konformation, und ist somit ein Maß dafür, inwieweit diese Konformation zur Beschreibung der experimentellen Daten dienen kann. Ziel der Strukturrechnung ist daher die Minimierung dieser Fehlerfunktion, der so genannten „variablen Zielfunktion“ Z durch Variation der Torsionswinkel.

Bei DYANA-Rechnungen wird das zu berechnende Molekül als Baumstruktur aus einem starren, im Raum fixierten Basiskörper und n starren Körpern dargestellt, die durch n rotierbare Bindungen verbunden sind [70]. Die Freiheitsgrade bestehen dabei ausschließlich aus Diëderwinkeln. Die Zielfunktion oder Fehlerfunktion Z spielt hierbei die Rolle der potentiellen Energie: $E_{pot} = \omega_0 Z$, mit einem Gewichtungsfaktor $\omega_0 = 10 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ \AA}^{-2}$:

$$Z = \sum_{c=o,u,v} \omega_c \sum_{(\alpha,\beta) \in I_c} f_c(d_{\alpha\beta}, b_{\alpha\beta}) + \omega_d \sum_{k \in I_d} \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_k}{\Gamma_k} \right)^2 \right) \Delta_k^2 \quad \text{Gleichung 3.14}$$

Dabei gilt $Z \geq 0$, wobei 0 nur erreicht wird, wenn alle experimentellen Abstands- und Winkelbeschränkungen erfüllt sind sowie alle nicht bindenden Atompaaire keine sterische Überlappung zeigen. Der erste Summand der Gleichung 3.14 beschreibt die Verletzung der Abstandsgrenzen für obere, untere und VAN-DER-WAALS-Abstandsgrenzen. Die Funktion f_c , die den Anteil der Verletzung der Abstandsbeschränkungen angibt, kann verschiedene Formen annehmen:

$$f_c = \left(\frac{d^2 - b^2}{2b} \right)^2 \quad \text{Gleichung 3.15}$$

$$f_c = (d - b)^2 \quad \text{Gleichung 3.16}$$

$$f_c = \frac{\beta^2}{2} \left[\sqrt{1 + \left(\frac{d^2 - b^2}{\beta b^2} \right)^2} - 1 \right] \quad \text{Gleichung 3.17}$$

$$f_c = 2\beta^2 b^2 \left[\sqrt{1 + \left(\frac{d - b}{\beta b} \right)^2} - 1 \right] \quad \text{Gleichung 3.18}$$

wobei d den tatsächlichen Abstand, b die Abstandsbeschränkung und β eine dimensionslose Zahl, die große Verletzungen zu kleinen wichtet, darstellen. Die Funktionen 3.15, 3.16 und 3.18 haben die Einheit \AA^2 ; 3.17 ist dimensionslos, weshalb diese Funktion nicht mit den anderen verglichen werden kann. Für kleine Verletzungen nähern sich die Gleichungen 3.15 und 3.18 der Gleichung 3.16 an und Gleichung 3.17 geht in $[(d-b)/b]^2$ über. In CYANA ist Gleichung 3.16 als Standard definiert.

Um die Gefahr zu verringern, während des Minimierungsprozesses der Zielfunktion Z in ein lokales Minimum zu geraten, besteht die Menge I_c aller berücksichtigten Abstandsgrenzen bei der Minimierung einer zufälligen Anfangskonformation nur aus Beschränkungen zwischen Atomen eines Restes. Ausgehend von der erhaltenen Konformation werden bei der zweiten Minimierung zusätzlich Beschränkungen zwischen Atomen benachbarter Reste berücksichtigt. In der dritten Minimierung enthält I_c zusätzlich alle Beschränkungen zwischen Atomen innerhalb von Aminosäuretripletts. Da der für die Berechnung der Zielfunktion benötigte Datensatz schrittweise vergrößert wird und erst mit der letzten Minimierung alle experimentellen Randbedingungen berücksichtigt werden, bezeichnet man die Zielfunktion als variabel.

Der zweite Summand in Gleichung 3.14 fasst die Verletzungen der zulässigen Diëderwinkelbeschränkung zusammen. Dabei ist Δ_k die vorzeichenbehaftete Verletzung einer Diëderwinkelbeschränkung, die mit dem Faktor ω_d gewichtet wird und Γ_k die Halbwertsbreite des verbotenen Diëderwinkelintervalls:

$$\Gamma_k = \pi - \frac{\phi_k^{\max} - \phi_k^{\min}}{2} \quad \text{Gleichung 3.19}$$

Die Eingabedaten für DYANA bestehen aus der Liste der CANDID-Abstandsbeschränkungen und aus möglichen zusätzlichen konformationellen Abständen aus anderen Quellen (Abb. 3.1). Um Informationsverlust zu minimieren, werden die Einschränkungen betreffend äquivalenter Protonengruppen in mehrdeutige Abstandsbeschränkungen der beteiligten Wasserstoffatome umgewandelt und die Abwesenheit von stereospezifischen Zuordnungen diastereotoper Gruppen wird mit periodischem Austausch der Atompaare für die Minimierung der Zielfunktion während des *simulated-annealing*-Verfahrens behandelt.

4 Omphalotin A von *Omphalotus olearius*

4.1 Biochemischer Hintergrund

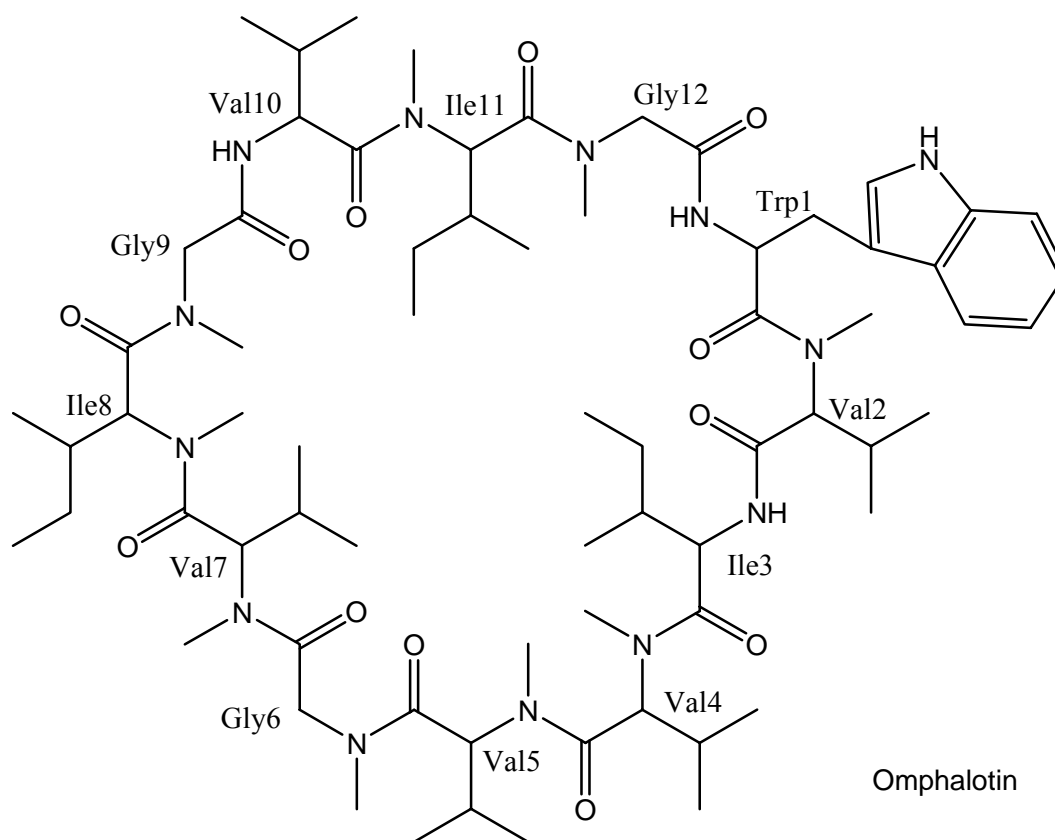
Der Basidiomyzete *Omphalotus olearius* ist als Holz-Bewohner besonders bei Oliven-, Eichen- und Kastanienbäumen weltweit verbreitet. Da dieser „Ölbaumpilz“ giftig ist, kommt es oft zu Pilzvergiftungen wegen Verwechslungen mit dem Pfifferling (*Cantharellus cibarius*). Der Hut erreicht einen Durchmesser von 6-12 cm und hat jung eine gewölbte, später dann eine abgeflachte bis trichterförmiger vertiefte Mitte. Er ist teilweise unregelmäßig verbogen und am lange eingerollten Hutrand eingerissen. Der ganze Hut ist meist orange, manchmal bräunlich gefärbt, die Oberfläche glatt und glänzend. Die orangefarbenen, dicht stehenden, manchmal gabelig verzweigten Lamellen leuchten bei Dunkelheit (Biolumineszenz). Der Stiel erreicht eine Höhe von 6-15 cm, bei einem Durchmesser von 0,6-3 cm. Auch er hat eine orange Färbung, die aber meist dunkler als die Lamellen und der Hut ist. Das orange bis weißlich marmorierte Fleisch hat einen angenehmen Geruch, der an Pfifferlinge erinnert [71].



Abb. 4.1: Unterseite von *Omphatus olearius* [72]

Basidiomyzeten haben eine große Bedeutung in der biologischen Bekämpfung von Fadenwürmer unter Berücksichtigung der nematiziden Pilzmetaboliten [73]. Omphalotin ist ein Cyclopeptid, das zusammen mit anderen Produkten in der Kultur des Pilzstammes TA 90170 dieses Basidiomyzeten, aber auch in anderen Stämmen gefunden wurde [74, 75].

Details über die Isolierung und die biologische Wirkung des Omphalotins werden in der Literatur angegeben [74, 76]. Seine Sequenz und absolute Konfiguration wurden schon untersucht und über eine Synthese berichtet [77-79]. Omphalotin ($C_{69}H_{115}N_{13}O_{12}$), ein modifiziertes Cyclopeptid, besteht aus 12 Aminosäuren: drei Glycin-, fünf Valin-, drei Isoleucin- und ein Tryptophan-Rest, von denen neun N-methyliert sind [75, 78].

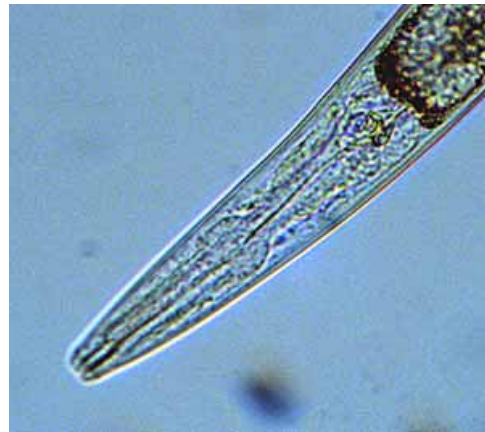


Es ist ein potentes Nematizid und wirkt selektiv gegen den pathogenen *Meloidogyne incognita*, ist aber nur 50 Mal weniger aktiv gegen den saprophytischen *Caenorhabditis elegans* (siehe Tabelle 4.1). Es hat keine phytotoxische, antibakterielle oder antifugale Aktivität und ist schwach cytotoxisch (bei Konzentrationen über 100 $\mu\text{g}/\text{mL}$) [74].

Tabelle 4.1: Aktivität des Omphalotins in Vergleich mit dem kommerziellen Ivermectin [74]:

Nematode:	Omphalotin		Ivermectin
	LD ₅₀ (μM)	LD ₉₀ (μM)	LD ₉₀ (μM)
<i>C. elegans</i>	18,95	37,9	0,46
<i>M. incognita</i>	0,57	0,76	4,6

Weltweit stellen pflanzenparasitäre Nematoden (Fadenwürmer, Älchen) eine der größten Bedrohungen in der landwirtschaftlichen und gärtnerischen Produktion da. Insbesondere die Konzentration von Kulturpflanzen auf engem Raum erhöht die Gefahr des Auftretens von pflanzenparasitären Nematoden, die jeden Teil einer Pflanze befallen können. Sie sind in oder an den Wurzeln, dem Stamm, den Blättern, den Früchten und Samen ebenso zu finden wie frei lebend in der Erde.



pathogen: *Meloidogyne incognita* [80]

saprophytisch: *Caenorhabditis elegans* [80]

Nematoden sind mikroskopisch kleine Würmer, die jährlich einen hohen Ernteverlust weltweit verursachen. Verluste ganzer Felder sind zumeist nur einer bestimmten Nematoden-Art zuzuschreiben. Wurzelgallenerzeugende Nematoden (z.B. *Meloidogyne*- Arten) bohren sich meist nahe der Spitze in die Wurzeln ein und verursachen durch Ausscheidungen ihrer Speicheldrüsen Verdickungen (Gallen) des sie umgebenden Pflanzengewebes. In diesen Gallen überdauern sie und gelangen entweder aktiv oder nach Zerfall der Gallen wieder in den Boden zurück. Die Störung im Stoffwechsel der Pflanze infolge des Schädlingsbefalls macht sich in mehr oder weniger kümmerlichem Wuchs und allgemeinem Kränkeln der Pflanze bemerkbar. Wurzelgallenälchen zählen vor allem in Gewächshäusern zu den größten Schädlingen.

In diesem Kapitel werden Untersuchungen zur 3D-Struktur des Omphalotins in Lösung vorgestellt. Dafür wurden NMR-Experimente an einer von der Firma BAYER zur Verfügung gestellte Probe durchgeführt, um die für die Ermittlung der dreidimensionalen Struktur erforderlichen NMR-Parameter zu bestimmen.

4.2 NMR-spektroskopische Untersuchungen

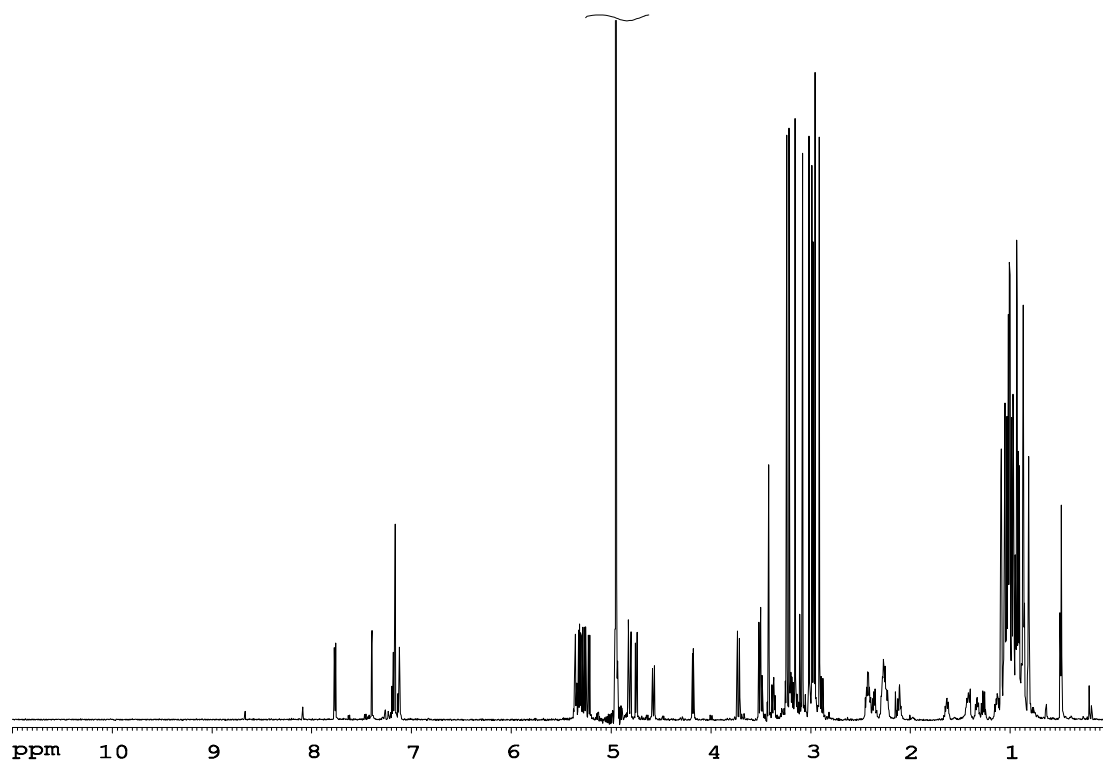
4.2.1 Vorbereitungen

Da Omphalotin nicht mit ^{13}C - bzw. ^{15}N -Isotopen angereichert wurde, steht ^1H als wichtigster zu untersuchender Kern fest. Das Auffinden optimaler Messbedingungen war, wegen des Wunsches der Firma BAYER nach Methanol als Lösungsmittel, auf die Möglichkeiten CD_3OD und CD_3OH begrenzt. Beide Lösungsmittel wurden verwendet, da in CD_3OH einige Signale unter dem intensiven Lösungsmittel-Signal liegen und in CD_3OD die mit dem Lösungsmittel austauschbaren Amidprotonen nicht mehr gemessen bzw. detektiert werden können (siehe Spektren 4.1 und 4.2).

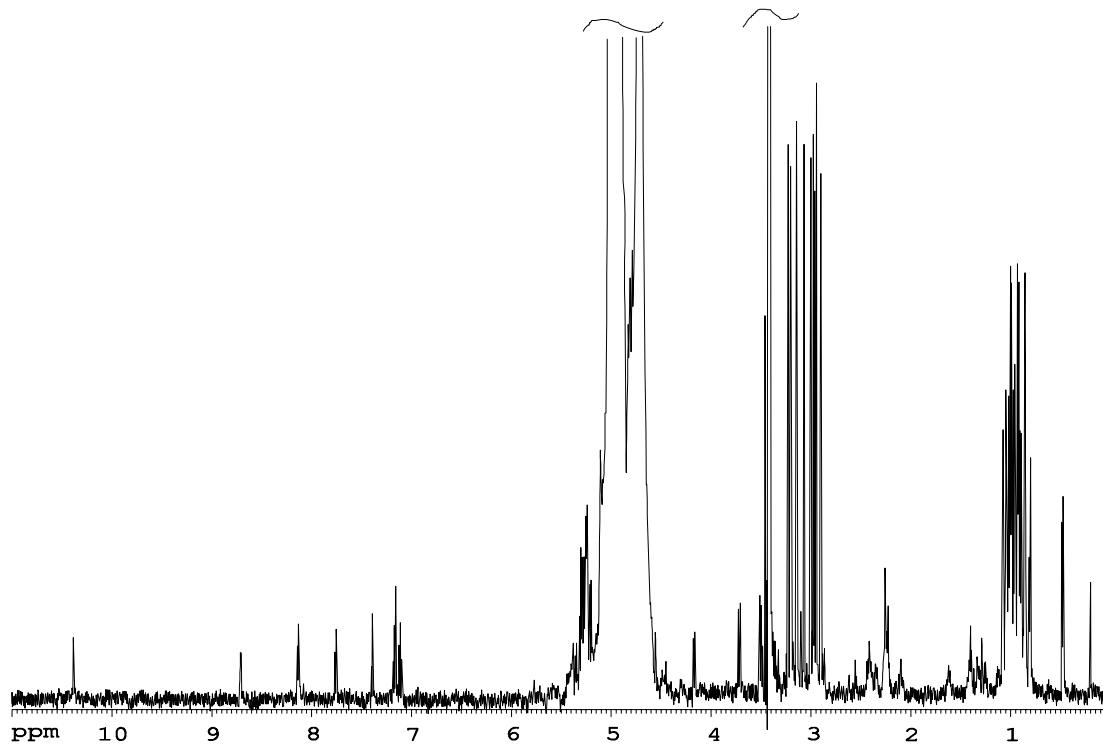
Die Zuordnung der Protonen-Resonanzen zu den einzelnen Aminosäuren kann in so einem kleinen Peptid über das TOCSY-Experiment [81] erfolgen, aus dem man Informationen über die zu einem Spinsystem gehörenden Protonen erhält. Auf den Frequenzspuren der Protonenresonanzen sind deutlich die Spinsysteme der zugehörigen Aminosäuren zu erkennen (Spektrum 4.3, Seite 38). Alle Aminosäuretypen in Omphalotin haben charakteristische Spinsysteme und können so leicht direkt identifiziert werden. Isoleucin, Valin und Glycin treten in Omphalotin mehrfach auf. Deshalb musste geklärt werden, welches Spinsystem welcher Position in der Sequenz entspricht. Dazu wurden Kreuzsignale aus dem NOESY-Spektrum [82] (Spektrum 4.4, Seite 39), die durch Kreuzrelaxation zwischen N-Methyl- und α -Protonen entstehen, herangezogen, um auf eine benachbarte Position in der Sequenz zu schließen. Die drei Amidprotonen können durch ein DQF-COSY-Spektrum [83] ihren Aminosäuren zugeordnet werden.

4.2.2 Messungen und Bearbeitung

Die ersten Experimente wurden an einem DMX750-NMR-Spektrometer (BRUKER, Karlsruhe, Deutschland) bei 300 K in d_3 - bzw. d_4 -Methanol durchgeführt. Daraus wurden die chemische Verschiebungen der Protonen, Spinsysteme und sequentielle Abfolge der Aminosäure in Omphalotin bestimmt. Schließlich wurde ein E.COSY-Spektrum [44] bei 300 K aufgenommen, um die $^3\text{J}(\text{H}^\alpha\text{H}^\beta)$ -Kopplungen zu bestimmen. Weder im NOESY-Spektrum bei 300 K (Spektrum 4.4) noch im ROESY-Spektrum (ohne Abb.) wurde ein weitreichendes NOE-Signal gefunden.



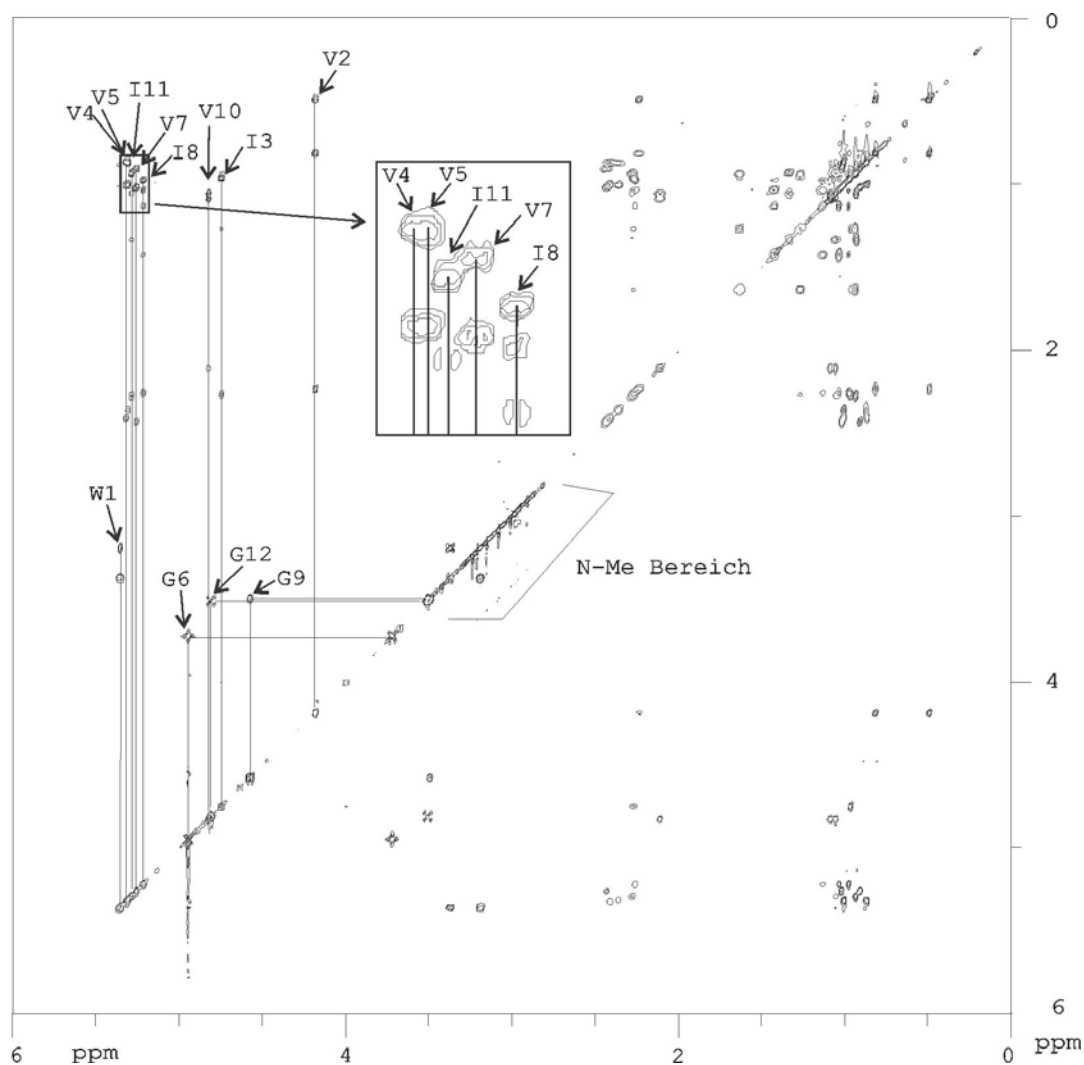
Spektrum 4.1: 1D- ^1H -NMR-Spektrum von Omphalotin in CD_3OD bei 750 MHz und 300 K. Die Amidprotonen sind sehr klein bzw. nicht detektierbar (vergleiche Spektrum 4.2).



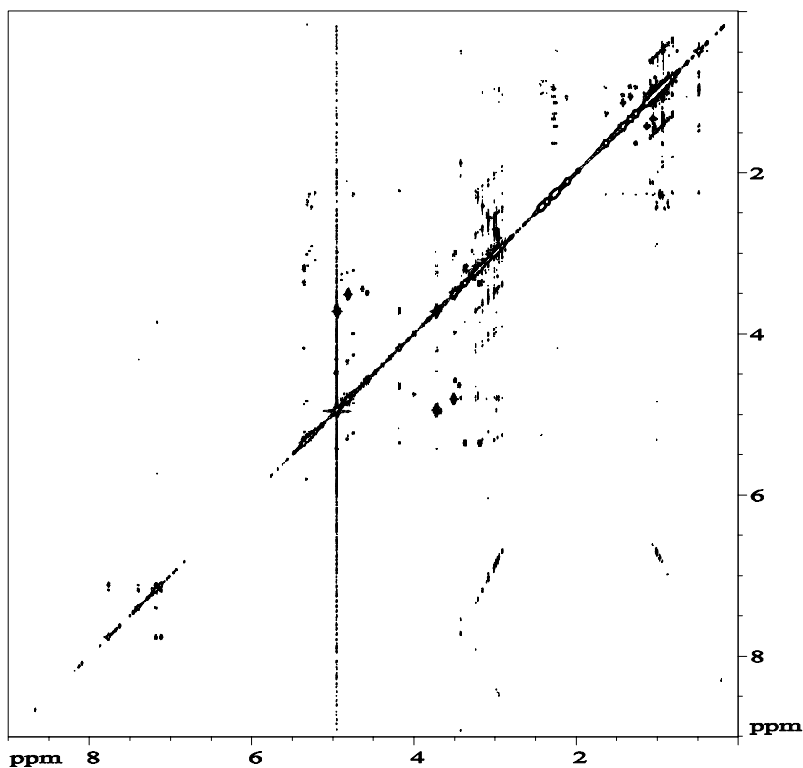
Spektrum 4.2: 1D- ^1H -NMR-Spektrum von Omphalotin in CD_3OH bei 750 MHz und 300 K. Die Signale unter dem Lösungsmittel-Signal um 5 ppm sind nicht mehr messbar.

Aus diesem Grund wurden Tieftemperatur-Messungen an einem DMX600-NMR-Gerät (BRUKER, Karlsruhe, Deutschland) durchgeführt. 1D-Experimente wurden in einer Reihe von 300 K bis 240 K in CD₃OH gemessen, um die Temperaturabhängigkeit der Verschiebung der vier in Molekül vorkommenden H^N-Protonen zu verfolgen. Anschließend wurden ROESY- und NOESY-Spektren bei 270 K und 240 K gemessen. Während bei 270 K noch kein weitreichendes NOE-Signal auftritt, konnten bei 240 K zahlreiche Signale gefunden werden (Spektrum 4.5).

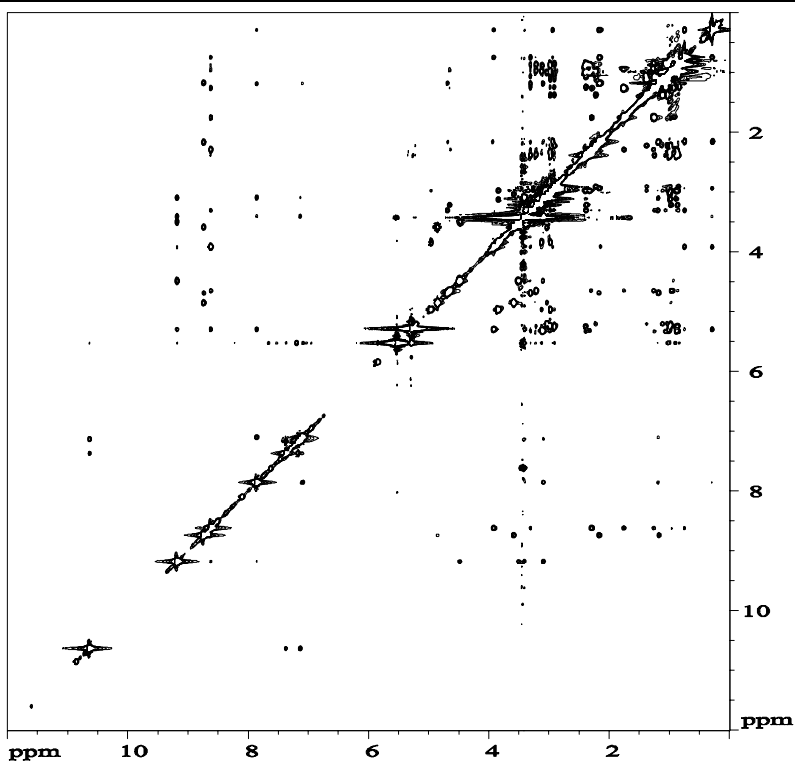
Um die Signale auch bei 240 K zuzuordnen, wurden TOCSY-Spektren bei 240 K in CD₃OH und CD₃OD aufgenommen. Die Zuordnung der ¹H-Resonanzen bei 300 K und 240 K sind in den Tabellen 4.2 und 4.3, Seite 40, zu finden.



Spektrum 4.3: Ausschnitt aus dem TOCSY-Spektrum von Omphalotin in CD₃OD bei 750 MHz und 300 K. Auf den Frequenzspuren der Protonenresonanzen sind deutlich die Spinsysteme der zugehörigen Aminosäure zu erkennen.



Spektrum 4.4: NOESY-Spektrum von Omphalotin in CD₃OD bei 750 MHz und 300 K. Es wurde kein weitreichendes NOE-Signal gefunden.



Spektrum 4.5: NOESY-Spektrum von Omphalotin in CD₃OH bei 600 MHz und 240 K. Während bei 270 K noch kein weitreichendes NOE-Signal auftritt, konnten bei 240 K zahlreiche Signale gefunden werden.

Tabelle 4.2: ¹H-NMR-Daten (δ [ppm]; Multiplizität: s = Singulett; d = Dublett; dd = Doppelduplett; t = Triplett; m = Multiplett; ³J [Hz]) von Omphalotin in CD₃OD bei 750 MHz und 300 K

Trp1	H ^N : 8,71; d; 8,4 H ^α : 5,36; t; 7 H ^{β1} : 3,37; dd; 7,7 H ^{β2} : 3,19; dd; 7,7 H ^{δ1} : 7,16; s H ^{Nε} : - H ^{ε3} : 7,76; d; 7,7 H ^{ε2} : 7,39; d; 8,4 H ^{ε1} : 7,11; t; 7,7 H ^η : 7,18; t; 7,7
Val2	H ^{NMe} : 2,98; s H ^α : 4,18; d; 10,5 H ^β : 2,24; m H ^{γ1} : 0,81; d; 6,3 H ^{γ2} : 0,49; d; 7
Ile3	H ^N : 8,13 H ^α : 4,75; d; 10,5 H ^β : 2,27; m H ^{γ1} : 1,63; m H ^{γ2} : 1,26; m H ^ε : 0,97; d; 6,3 H ^δ : 0,96; t; 7
Val4	H ^{NMe} : 3,21; s H ^α : 5,32; d; 7,7 H ^β : 2,42; m H ^{γ1} : 1,00; d; 6,3 H ^{γ2} : 0,86; d; 6,3
Val5	H ^{NMe} : 3,01; s H ^α : 5,31; d; 8,4 H ^β : 2,35; m H ^{γ1} : 1,00; d; 6,3 H ^{γ2} : 0,87; d; 6,3
Gly6	H ^{NMe} : 3,16; s H ^{α1} : 4,96; d; 16,1 H ^{α2} : 3,72; d; 16,1
Val7	H ^{NMe} : 2,98; s H ^α : 5,26; d; 10,5 H ^β : 2,43; m H ^{γ1} : 1,01; d; 6,3 H ^{γ2} : 0,90; d; 7
Ile8	H ^{NMe} : 2,91; s H ^α : 5,21; d; 10,5 H ^β : 2,26; m H ^{γ1} : 1,42; m H ^{γ2} : 1,11; m H ^ε : 0,97; d; 6,3 H ^δ : 1,03; t; 7,7
Gly9	H ^{NMe} : 3,08; s H ^{α1} : 4,57; d; 16,1 H ^{α2} : 3,49; d; 16,1
Val10	H ^N : 8,13 H ^α : 4,83; d; 8,4 H ^β : 2,10; m H ^{γ1} : 1,09; d; 7 H ^{γ2} : 1,05; d; 7
Ile11	H ^{NMe} : 3,24; s H ^α : 5,29; d; 10,5 H ^β : 2,28; m H ^{γ1} : 1,33; m H ^{γ2} : 1,05; m H ^ε : 0,93; d; H ^δ : 1,03; t; 7,7
Gly12	H ^{NMe} : 2,97; s H ^{α1} : 4,81; d; 16,1 H ^{α2} : 3,51; d; 16,1

Tabelle 4.3: ¹H-NMR-Daten (δ [ppm]) von Omphalotin in CD₃OD bei 600 MHz und 240 K

Trp1	H ^N : 9,16 H ^α : 5,30 H ^{β1} : 3,40 H ^{β2} : 3,09 H ^{δ1} : 7,13 H ^{Nε} : 10,62 H ^{ε3} : 7,86 H ^{ε2} : 7,37 H ^η : 7,10
Val2	H ^{NMe} : 2,94; s H ^α : 3,92 H ^β : 2,15 H ^{γ1} : 0,74 H ^{γ2} : 0,28 H ^ε : 0,94 H ^δ : 0,94
Ile3	H ^N : 8,60 H ^α : 4,65 H ^β : 2,29 H ^{γ1} : 1,75 H ^{γ2} : 1,26 H ^ε : 0,94 H ^δ : 0,94
Val4	H ^{NMe} : 3,22 H ^α : 5,24 H ^β : 2,38 H ^{γ1} : 0,97 H ^{γ2} : 0,85
Val5	H ^{NMe} : 2,91 H ^α : 5,25 H ^β : 2,40 H ^{γ1} : 0,98 H ^{γ2} : 0,88
Gly6	H ^{NMe} : 2,99 H ^{α1} : 4,97 H ^{α2} : 3,84
Val7	H ^{NMe} : 3,12 H ^α : 5,32 H ^β : 2,33 H ^{γ1} : 1,00 H ^{γ2} : 0,86
Ile8	H ^{NMe} : 2,98 H ^α : 5,21 H ^β : 2,21 H ^{γ1} : 1,35 H ^{γ2} : 1,10 H ^ε : 0,96 H ^δ : 1,04
Gly9	H ^{NMe} : 3,03 H ^{α1} : 4,86 H ^{α2} : 3,59
Val10	H ^N : 8,72 H ^α : 4,69 H ^β : 2,16 H ^{γ1} : 1,19 H ^{γ2} : 1,17
Ile11	H ^{NMe} : 3,31 H ^α : 5,33 H ^β : 2,39 H ^{γ1} : 1,24 H ^{γ2} : 1,06 H ^ε : 0,87 H ^δ : 1,01
Gly12	H ^{NMe} : 3,11 s H ^{α1} : 4,49 H ^{α2} : 3,50

4.2.3 Strukturparameter

Abstandsinformationen können aus NOESY- bzw. ROESY-Experimenten und Diëderwinkel aus Kopplungskonstanten gewonnen werden. Die Temperaturgradienten der ^1H -Verschiebung von Amidprotonen geben Auskunft über ihre Lösungsmittelzugänglichkeit.

Bestimmung von Abständen

Zur Kalibrierung wurde der bekannte Abstand der drei geminalen Glycin-Methylenprotonen und anstelle der Kreuzrelaxationsrate die Intensität der NOE-Signale nach der Zwei-Spin-Näherung (Seite 7) verwendet. Zur Abstandsbestimmung für Omphalotin wurde das NOESY-Spektrum bei 240 K in CD_3OH benutzt, weil nur bei dieser Temperatur genügend weitreichende Signale gefunden werden konnten (siehe Listen in Anhang).

Bestimmung von Kopplungskonstanten

Die $^3\text{J}(\text{H}^{\text{N}}\text{H}^{\alpha})$ -Kopplungskonstanten können bei kleineren zyklischen Peptiden direkt aus den H^{N} -Dubletts in den 1D-Spektren abgelesen werden.

Tabelle 4.2: $^3\text{J}(\text{H}^{\text{N}}\text{H}^{\alpha})$ -Kopplungen (1D) des Omphalotin bei 240 K:

AA	$\delta(\text{H}^{\text{N}})$ [ppm]	$^3\text{J}(\text{H}^{\text{N}}\text{H}^{\alpha})$ [Hz]
Trp1	9,16	8,8
Ile3	8,60	8,4
Val10	8,72	8,4

Die $^3\text{J}(\text{H}^{\alpha}\text{H}^{\beta})$ -Kopplungen sind aus dem 1D-Spektrum auf Grund von Signalüberlagerungen meist nicht zu erhalten. In diesem Fall bietet sich das E.COSY-Experiment an. Die homonuklearen, passiven Kopplungen lassen sich durch die Aufspaltung der Signale in beiden Dimensionen des Kreuzsignals und die vereinfachte Multipllett-Struktur im E.COSY leicht ablesen.

Tabelle 4.3: $^3J(H^\alpha H^\beta)$ -Kopplungen des Omphalotins bei 240 K (aus E.COSY):

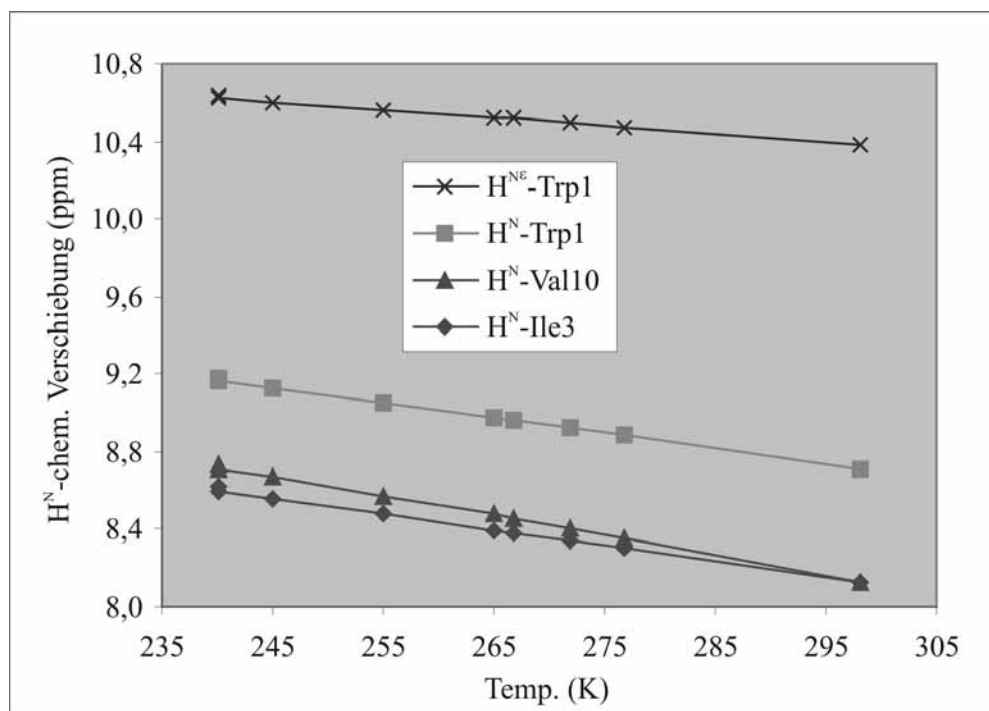
AA	$\delta (H^\alpha / H^\beta)$ [ppm]		$^3J(H^\alpha H^\beta)$ [Hz]
Val2	3,92	2,15	11,0
Val10	4,69	2,17	9,5
Ile3	4,65	2,30	11,3
Trp1	5,30	3,09	6,0
	5,30	3,40	8,2
Ile8	5,21	2,22	10,7
Val7	5,32	2,33	10,9
Val4	5,25	2,38	10,7
Val5	5,26	2,40	10,7
Ile11	5,33	2,40	11,4

Temperaturgradienten

Zur Bestimmung der Temperaturkoeffizienten für die H^N -Signale wurden 1D-Spektren in einer Reihe zwischen 300 K und 240 K aufgenommen.

Tabelle 4.4: Temperaturabhängigkeit der chemischen Verschiebung der vier H^N -Signale:

T [K]	δ [ppm]	δ [ppm]	δ [ppm]	δ [ppm]
	H^{Ne} -Trp1	H^N -Trp1	H^N -Val10	H^N -Ile3
298,2	10,38	8,71	8,13	8,13
276,8	10,47	8,89	8,36	8,30
271,8	10,50	8,92	8,41	8,34
266,8	10,52	8,96	8,45	8,38
265	10,52	8,98	8,48	8,40
255	10,56	9,05	8,58	8,48
245	10,60	9,13	8,67	8,56
240	10,62	9,16	8,72	8,60
240	10,63	9,18	8,74	8,62



$$\text{Trp1 H}^{\text{NE}}: \quad \delta = -4,14 \cdot 10^{-3} \text{ ppm K}^{-1} \cdot T + 11,631 \text{ ppm} \quad R = 0,9918$$

$$\text{Trp1 H}^{\text{N}}: \quad \delta = -7,68 \cdot 10^{-3} \text{ ppm K}^{-1} \cdot T + 11,030 \text{ ppm} \quad R = 0,9943$$

$$\text{Val10 H}^{\text{N}}: \quad \delta = -1,00 \cdot 10^{-2} \text{ ppm K}^{-1} \cdot T + 11,151 \text{ ppm} \quad R = 0,9954$$

$$\text{Ile3 H}^{\text{N}}: \quad \delta = -8,06 \cdot 10^{-3} \text{ ppm K}^{-1} \cdot T + 10,555 \text{ ppm} \quad R = 0,9990$$

Abb. 4.2: Darstellung der Temperaturabhängigkeit der chemischen Verschiebung der vier H^N-Protonen. Aus der Steigung ergibt sich der Temperaturkoeffizient.

4.3 Strukturrechnungen

Ausgehend von den strukturelevanten NMR-Daten (104 Interprotonen-Abstände, drei H^NH^α- und acht H^αH^β-Kopplungskonstanten) wurde die räumliche Struktur von Omphalotin A von Christian Rölz berechnet.

Methoden

Die Strukturberechnung gliederte sich in zwei Abschnitte. Zunächst wurde mit dem Programm X-Plor [60] unter Verwendung eines *simulated-annealing*-Protokolls [58, 84] ein Ensemble von Vakuum-Strukturen berechnet, das die experimentellen Daten erfüllt.

Ein Repräsentant der erhaltenen Vakuum-Strukturen wurde anschließend in ausgedehnten Moleküldynamik-Simulationen bei 240 K (entsprechend der NMR-Messtemperatur) verfeinert. Um die molekulare Umgebung im NMR-Röhrchen realitätsnah wiederzugeben, wurde die Omphalotin-Struktur in eine kubische Methanol-Zelle mit einer Seitenlänge von 35 Å platziert. Mit der so erhaltenen Simulationszelle wurden folgende Rechnungen durchgeführt: 500 ps MD in Gegenwart der experimentellen Abstandsbeschränkungen (*restrained* MD, rMD), gefolgt von weiteren 500 ps freier MD (fMD). Die jeweils letzten 400 ps von rMD bzw. fMD wurden auf Erfüllung der experimentellen Daten hin analysiert. NOEs zum Indol-Ring von Trp1 waren vom verwendeten NOE-Datensatz ausgeschlossen, da sie bereits bei der Berechnung der Vakuum-Strukturen nicht erfüllt werden konnten, was auf eine Rotation der Trp1-Seitenkette hindeutet. Um diese Hypothese zu testen wurden zwei weitere MD-Simulationen mit zeitlich gemittelten Abstandsbeschränkungen (*time averaged distance restraints*) [85-88] (tavMD) durchgeführt, in denen auch obige NOEs zur Trp1-Seitenkette präsent waren (jeweils 250 ps pro Trajektorie, ausgehend von unterschiedlichen Geschwindigkeitsverteilungen). Als Abklingzeit τ wurden 10 ps gewählt [88]. Die jeweils letzten 200 ps beider Trajektorien wurden zusammen auf Erfüllung der experimentellen Daten hin analysiert. In allen MD-Simulationen wurden nichtbindende Wechselwirkungen nur innerhalb einer Sphäre von 10 Å (Abbruchradius) berücksichtigt.

Ergebnisse und Diskussion

Die aus dem NOESY-Spektrum gewonnenen Interprotonen-Abstände (NOEs) sind nicht gleichmäßig über das Molekül verteilt. Während die räumliche Struktur der einen Molekülhälfte (Reste 1-3 und 10-12) sehr gut definiert ist (ca. 19 NOEs pro Aminosäure), führen Signalüberlagerungen dazu, dass die Zahl eindeutiger NOEs in der anderen Molekülhälfte (Reste 4-9) deutlich geringer ausfällt (ca. 7 NOEs pro Aminosäure). Dies wirkt sich direkt auf die Konvergenz der SA-Strukturen (Abb. 4.3) aus, wie ein Vergleich der mittleren quadratischen Abweichung (RMSD) der Peptidrückgrat-Atome des berechneten SA-Ensembles vom Ensemble-Repräsentanten zeigt: $0,3 \pm 0,1$ Å für die Reste 1-3 und 10-12 bzw. $0,6 \pm 0,4$ Å für Reste 4-9.

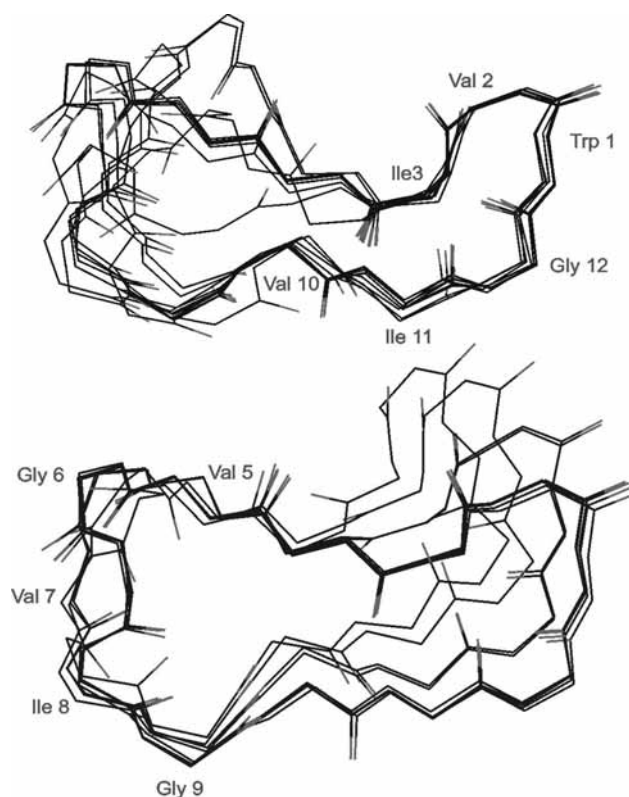


Abb. 4.3: Vakuum-Strukturen von Omphalotin A. Die Überlagerung des Ensembles erfolgte einmal auf die geordnete rechte Molekülhälfte (Reste 1-3, 10-12; oben) und einmal auf die weniger geordnete linke Molekülhälfte (Reste 4-9; unten). Deutlich sichtbar ist die geringere Konvergenz in der linken Molekülhälfte (Reste 4-9), die durch den Mangel an eindeutigen NOEs in diesem Bereich bedingt ist.

Die oben abgebildete Vakuum-Struktur ist auch in der Methanol-Zelle stabil; die RMSD-Werte der minimierten gemittelten MD-Strukturen zur Struktur des Vakuum-Repräsentanten betragen dabei für die strukturell gut definierte Molekülhälfte $0,8 \text{ \AA}$, $2,2 \text{ \AA}$ und $0,8 \text{ \AA}$, bezogen auf die Strukturen aus rMD, fMD und tavMD. Die Abweichung der fMD-Struktur ($2,2 \text{ \AA}$) erscheint dabei auf den ersten Blick recht groß. Ein Vergleich der Ramachandran-Diagramme von rMD, fMD und tavMD (ohne Abbildung) relativiert dies jedoch: das Peptidrückgrat hält sich auch in der fMD-Simulation noch immer in demselben Bereich des Konformationsraums auf, die β -Faltblatt-ähnliche Struktur bleibt also auch während der freien Dynamik-Simulation erhalten. Diese Beobachtung bestätigt die anfangs angeführte Hypothese, wonach der Konformationsraum von Omphalotin A durch die Vielzahl sperriger Seitenketten und N-methylierter Peptidbindungen stark eingeschränkt ist, was zu einer relativ starren Struktur führt. Ein Vergleich der MD-Simulationen zeigt, dass die experimentellen Daten von der Trajektorie mit zeitlich gemittelten Abstandsbeschränkungen (tavMD) am besten erfüllt werden. Diese Trajektorie wird daher im Folgenden analysiert.

Omphalotin A besteht überwiegend aus sperrigen hydrophoben Resten (fünf Valine, drei Isoleucine, ein Tryptophan, gegenüber drei Glycinen). Darüber hinaus ist es an neun der zwölf Peptidbindungen N-methyliert, was die konformationelle Flexibilität weiter einschränkt. Das Molekül löst das resultierende sterische Problem, indem es eine β -Faltblatt-ähnliche Struktur (Abb. 4.4) ausbildet, in der die räumlich anspruchsvollen Seitenketten abwechselnd ober- bzw. unterhalb der Ringebene zu liegen kommen. Die N-Methylgruppen sind dabei aus Platzgründen größtenteils nach außen hin orientiert. Die Amidprotonen des Peptidrückgrates (Ile3-H^N, Val10-H^N) hingegen liegen auf der Ringinnenseite, wo sie mit den ebenfalls nach innen gerichteten Carbonylgruppen N-methylierter Peptidbindungen Wasserstoffbrücken ausbilden (vgl. Tabelle 4.5 und Abb. 4.5, Seite 47). Im strukturell gut definierten Bereich existiert eine β VIIa-ähnliche Schleife um die *cis*-Peptidbindung zwischen Trp1 und Val2 (Abb. 4.4 und Tabelle 4.6). Lediglich Trp1-H^N, welches vom Ringzentrum weg nach außen zeigt, geht während der Simulation keine (bzw. nur eine sehr schwach populierte) intramolekulare Wasserstoff-Brücke ein. Dabei ist Trp1-H^N jedoch nicht vollständig Lösungsmittel-exponiert, sondern teilweise durch die Trp-Seitenkette abgeschirmt. Beteiligung an intramolekularen Wasserstoff-Brücken (Ile3-H^N, Val10-H^N) bzw. Abschirmung durch Seitenketten (Trp1-H^N) lassen ähnliche H^N-Temperaturgradienten erwarten, was die beiliegende Grafik (Seite 43) bestätigt.

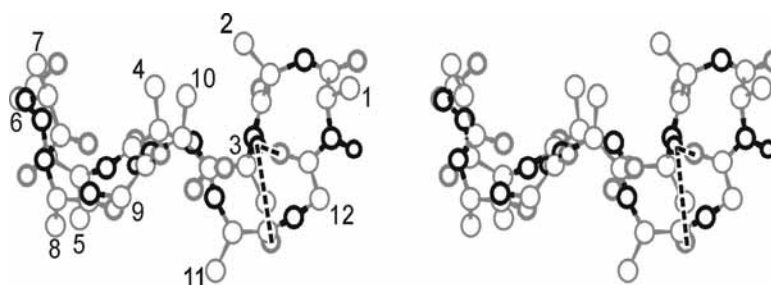


Abb. 4.4: Stereodarstellung der minimierten gemittelten Struktur von Omphalotin A. Unterschiedliche Atomtypen sind wie folgt gekennzeichnet: N bzw. H^N in dicken schwarzen Linien, Carbonyl-O in dicken grauen Linien, C in dünnen grauen Linien. Zur besseren Übersicht werden die Seitenketten nur durch ihre C ^{β} -Atome repräsentiert. Das Molekül nimmt in seiner strukturell gut definierten rechten Hälfte (vgl. Abb. 4.3) um Trp1 und Val2 eine β VIIa-ähnliche Schleife an. Deutlich erkennbar ist auch die alternierende Ausrichtung der Seitenketten auf die Ringoberseite bzw. -unterseite, die an eine β -Faltblatt-Struktur erinnert. Wasserstoffbrücken innerhalb der strukturell gut definierten Region, die während der MD-Simulation populierte werden, sind durch gestrichelte Linien hervorgehoben.

Tabelle 4.5: Wasserstoffbrücken-Populationen aus der gemeinsamen Analyse der beiden MD-Simulationen mit zeitlich gemittelten Abstandsbeschränkungen in MeOH bei 240 K:

Donor	Akzeptor	Population [%]
Val10-H ^N	Ile8-CO	87
Val10-H ^N	Val7-CO	17
Ile3-H ^N	Gly12-CO	59
Ile3-H ^N	Ile11-CO	28
Trp1-H ^N	Ile11-CO	6

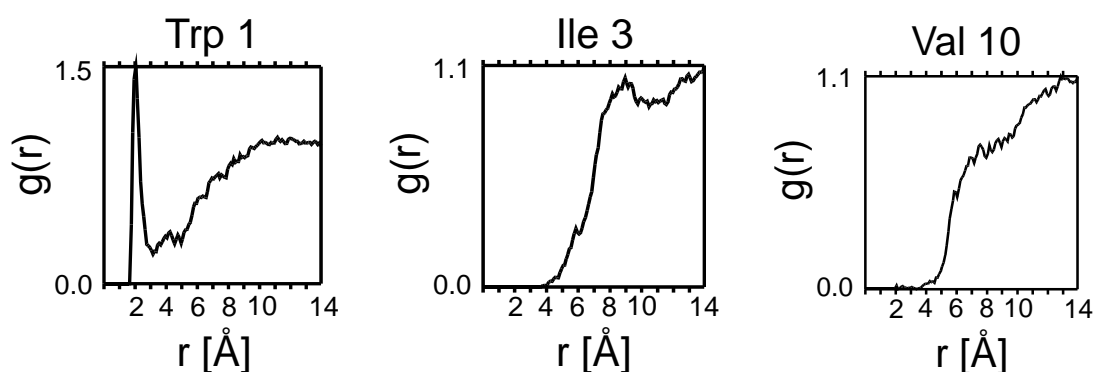


Abb. 4.5: Radiale Verteilungsfunktion $g(r)$ der Hydroxyl-Sauerstoffatome von Methanol um die Amidprotonen der angegebenen Aminosäuren, berechnet aus den vereinigten Trajektorien der beiden MD-Simulationen mit zeitlich gemittelten Abstandsbeschränkungen in MeOH bei 240 K. Ein Maximum von $g(r)$ bei ca. 2 Å (Wasserstoff-Sauerstoff-VAN-DEr-WAALS-Abstand) resultiert aus der Lösungsmittel-Exposition des jeweiligen Amidprotons, während das Fehlen eines solchen Maximums ein Beleg für die Abschirmung vom Lösungsmittel ist.

Tabelle 4.6: Vergleich der β VIa-ähnlichen Schleife^a um Trp1 und Val2 mit dem β VIa-Prototyp.

Molekül	φ_{i+1}	ψ_{i+1}	φ_{i+2}	ψ_{i+2}
β VIa-Prototyp ^b	-60	120	-90	0
Omphalotin ^c	-124	94	-108	120

^a zwischen Trp1 und Val2 liegt eine cis-Peptidbindung vor.

^b bzgl. Definition s. [89].

^c gemessen an der minimierten, gemittelten Struktur.

5 IIB^{Man}-Domäne von *E. coli*

5.1 Biochemischer Hintergrund

5.1.1 Das Phosphotransferase-System

Das bakterielle Phosphotransferase-System (PTS) verknüpft den Transport und die Phosphorylierung von Hexosen und anderer Kohlehydrate mit regulatorischen Funktionen und steuert somit den Energiehaushalt der Bakterien (vergleiche Übersichtsartikel [90-95]). Während es in Bakterien fast ubiquitär vorkommt, ist bisher im Tierreich und bei höheren Pflanzen nur ein einziges Mal ein Glukose-PTS-Transporter in der Flechte *Evernia prunastri* gefunden worden [96].

Substrataufnahme wird in Bakterien über Transportsysteme vermittelt, die entweder passiv einen Substrat-Konzentrationsgradienten über die Membran nutzen oder das Substrat aktiv unter Energieaufwand in die Zelle befördern. PTS-Transporter befördern selektiv nur ihre jeweiligen Substratmoleküle über ihr Transmembran-Transportsystem durch die Plasmamembran. Am intrazellulären Ende angekommen, wird das transportierte Kohlenhydrat vom cytosolischen Teil des Transporters phosphoryliert [97]. Neben seiner Eigenschaft als Transporter ist das PTS Teil einer Signalkaskade, die den Kohlenhydrat-Stoffwechsel [94] und chemotaktische Ereignisse [98] über den Phosphorylierungszustand seiner Komponenten regelt.

Die molekulare Grundlage dieser Bifunktionalität stellt eine Proteinphosphorylierungskaskade aus den vier Proteinen Enzym I, HPr, IIA und IIB und dem transmembranen Transporter IIC (bei der Mannose-Klasse auch IID) dar (siehe Abb. 5.1, Seite 49). Die löslichen cytosolischen Proteine Enzym I und HPr (*phospho-histidine-containing phosphocarrier protein*) sind Zucker-unspezifisch. Die funktionellen Untereinheiten IIA, IIB und IIC/IID der zuckerspezifischen Transporter variieren stark in ihrer Substratspezifität und können in unterschiedlichen Kombinationen als separate lösliche Proteine oder als Domänen innerhalb multifunktionaler Proteine vorliegen.

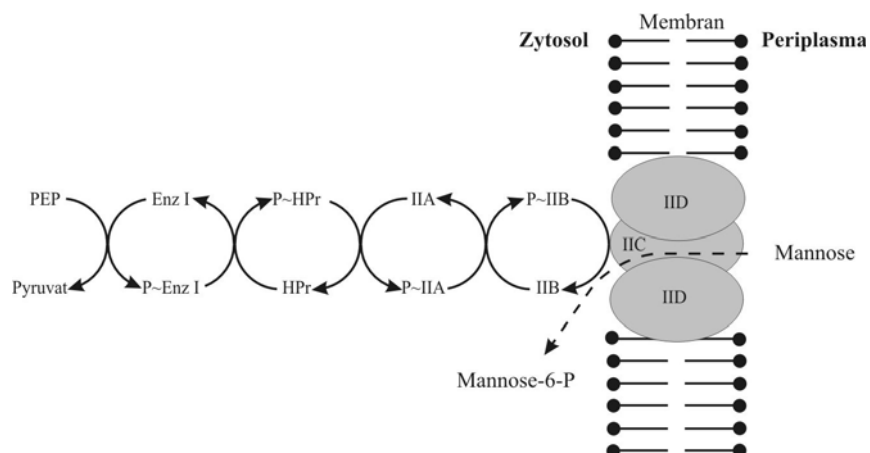


Abb. 5.1: Phosphorylierungskaskade: Darstellung der Proteine bzw. Domänen des PTS am Beispiel des *E. coli*-Mannose-Transporters.

Die Domänen IIA und IIB bilden die dritten und vierten Glieder der Phosphorylierungskaskade und sind hydrophile cytoplasmatische Komponenten, während IIC (und IID) in die Plasmamembran integriert ist und die Zuckerbindungsstelle beinhaltet. Anzahl und Substratspezifitäten der Enzyme II unterscheiden sich je nach bakterieller Spezies [90, 93]. Alleine in *E. coli* sind bis jetzt mindestens dreizehn PTS-Transporter bekannt, zahlreiche weitere wurden in gram-negativen und Nicht-Enterobakterien gefunden. All diese Systeme werden nach ihrer Sequenzhomologie in verschiedene Familien gegliedert [99].

Bisher sind hochaufgelöste dreidimensionale Strukturen von Enzym I [100, 101], etlichen HPr-Proteinen [102-107], der IIA^{Glc}-Domäne des Glukosetransporters von *E. coli* und ihrem Gegenstück aus *B. subtilis* [108-111], der IIA^{Lac}-Domäne des Lactosetransporters aus *Lactococcus lactis* [112], der IIA^{Man}-Domäne des Mannosetransporters [113], der IIB^{Glc}-Domäne von *E. coli* [114] und der IIB^{Cel}-Domäne des Cellobiosetransporters [115] bekannt. Die Sekundärstruktur von IIB^{Lev} wurde ebenfalls bestimmt [116]. Die Röntgenstruktur der subklonalen IIA^{Man}-Domäne wurde bereits mit 1,7 Å Auflösung erhalten [113], sowie die Lösungsstruktur NMR-spektroskopisch bestimmt [117]. Im Jahr 2003 wurde die Röntgenstruktur der IIB^{Sor}-Domäne der Sorbosetransporter von *Klebsiella pneumoniae* mit 1,75 Å publiziert [118].

5.1.2 Der Mannosetransporter

Der Mannosetransporter von *E. coli* [119, 120] gehört zu einer kleinen Familie von ähnlichen PTS-Transportern, zu der noch der Fructosetransporter von *B. subtilis* [121], der Sorbose-transporter von *Klebsiella pneumoniae* [122] und der Glukose-/Mannose-Transporter von *Vibrio furnissii* [123] gehören.

Im Gegensatz zu allen anderen PTS-Transportern weist der Mannosetransporter von *E. coli* zwei transmembrane Untereinheiten im Verhältnis 1 : 2 auf (IIC und IID, siehe Abb. 5.2), und die IIB-Domänen werden an einem Histidin und nicht an einem Cystein phosphoryliert [120, 124]. Außerdem zeigt der Mannosetransporter im Vergleich zu den anderen PTS-Transportern eine sehr breite Substratspezifität und einen abweichenden Reaktionsmechanismus [123]. Obwohl die IAB^{Man}-Untereinheit ein Dimer aus jeweils zwei Domänen darstellt, sind die subklonalen Domänen IIA^{Man} und IIB^{Man} *in vivo* und *in vitro* funktionell und somit biochemisch weitestgehend voneinander unabhängig [124]. Dabei enthält IIA^{Man} die Dimerisierungsstelle und die Kontaktfläche zu HPr, IIB^{Man} hingegen bindet an den membranständigen IIC/IID-Komplex [120].

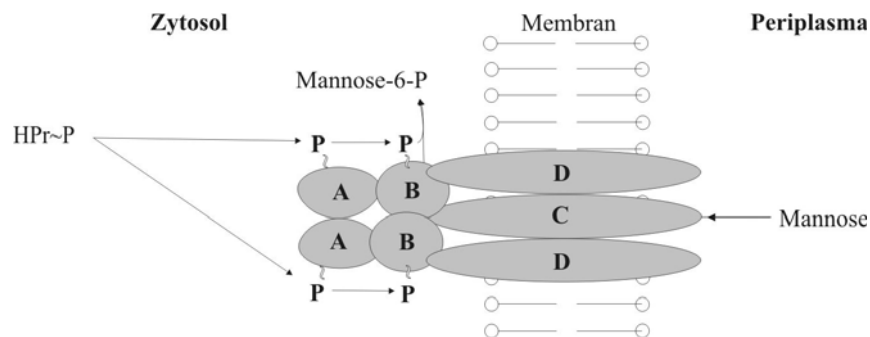


Abb. 5.2: Domänenstruktur des Mannosetransporters von *E. coli*. Er weist zwei unterschiedliche Transmembran-Domänen auf. Durch die PTS-Transporter wird eine Phosphatgruppe von HPr-Protein auf die 6'-OH-Gruppe des Zuckers übertragen.

Die subklonale IIB^{Man}-Domäne ist weniger stabil und zeigt eine geringere Löslichkeit als IIA^{Man} [125]. In einer Vergleichsstudie mit den IIB-Domänen von *E. coli*, *B. subtilis* und *K. pneumoniae* zeigte sich, dass IIB^{Lev} von *B. subtilis* bedeutend stabiler ist als die Vergleichsdomänen. Die Ursache hierfür ist vielleicht das Auftreten von IIB^{Lev} als separates Protein.

5.2 Materialien und Methoden

5.2.1 Expression von IIB^{Man}

Die Expression und Reinigung der verschiedenen Proben von IIB^{Man}, die speziell für diese Arbeit angefertigt wurden, wurde gemeinsam mit dem Arbeitskreis von Prof. B. Erni an der Universität Bern durchgeführt. Die subklonale IIB^{Man}-Domäne wurde als separates lösliches Protein exprimiert. Gleichzeitig wurde auch die IIA^{Man}-Domäne erhalten. IIB^{Man} besteht aus 168 Aminosäuren (20 kDa), wobei die erste Aminosäure Met1 und das aktive Zentrum His20 dem Met156 und His175 des gesamten IIB^{Man}-Proteins entsprechen [120].

Zur Herstellung der IIB^{Man}-Domäne wurde in den *E. coli*-Stamm W3110 das Expressionsplasmid pJFL1320 für IIA^{Man} und IIB^{Man} als getrennte Polypeptide mit Ampicillin-Resistenz transformiert. Das für die Produktion von separatem IIB^{Man} zuständige Plasmid pMSP20 ist in pJFL1320 einkloniert [113]. Die Anzucht und Expression wurden nach bereits optimierten Prozessen durchgeführt [113, 119, 120, 124, 126]. Da eine [U-¹³C/ ¹⁵N/ 50% ²H]-isotopenmarkierte Probe hergestellt werden sollte, wurden 40 µL einer Start-Zellkultur von 4 mg/mL in 16 mL Martek-9-dCN-medium mit ²H ~ 50 %; ¹³C >98 %; ¹⁵N, >98% als Isotopenquelle und 4 mL LB-Medium über Nacht bei 37°C wachsen gelassen. Die Expression erfolgte in vier 500 mL-Ansätzen Martek-dCN-Medium. Diese wurden mit Ampicillin (100 µM Endkonzentration) versetzt und mit je 5 mL der Vorkultur angeimpft. Bei einer OD₅₅₀ ~ 1 wurde mit Isopropyl-1-thio-β-D-galaktopyranosid (IPTG, 100 µM Endkonzentration) induziert. Das Protein wurde über Nacht bei 30°C exprimiert.

Anschließend wurden die Zellen abzentrifugiert. Aus den 2 L Medium wurden 14 g nasse Zellen erhalten. Für die Isolierung und Reinigung der Proteine wurden die Zellen im 32 mL Puffer (1 mM EDTA, 20 mM NaP_i und 0,5 mM Dithiothreitol (DTT)) bei pH 7,2 mit 0,01 mM Hefabloc (Proteasehemmer) durch eine Zellpresse (French pressure cell, 20000 psi) aufgeschlossen. Der Überstand wurde abgetrennt und das Pellet mit Puffer mehrmals gewaschen. Proben des Pellet und des Überstandes wurden für eine Gel-Analyse aufbewahrt (Spalte 10-11 Abb. 5.9).

Zur Trennung von IIA und IIB wurden die gesammelten Überstände durch eine PL-Phosphorcellulose Säule (Kationentauscher) schrittweise eluiert. Erster und zweiter Durchlauf wurden mit der bereits durchgelaufenen Probe-Lösung, der dritter mit neuem Puffer gemacht. Die Fraktion von IIA^{Man}, die zuerst eluiert wurde [124], wurde aufbewahrt. Als das Signal an Detektor abgesunken war, wurde es mit einem exponentiellen Gradienten (Puffer mit 0-800 mM NaCl) weiter eluiert.

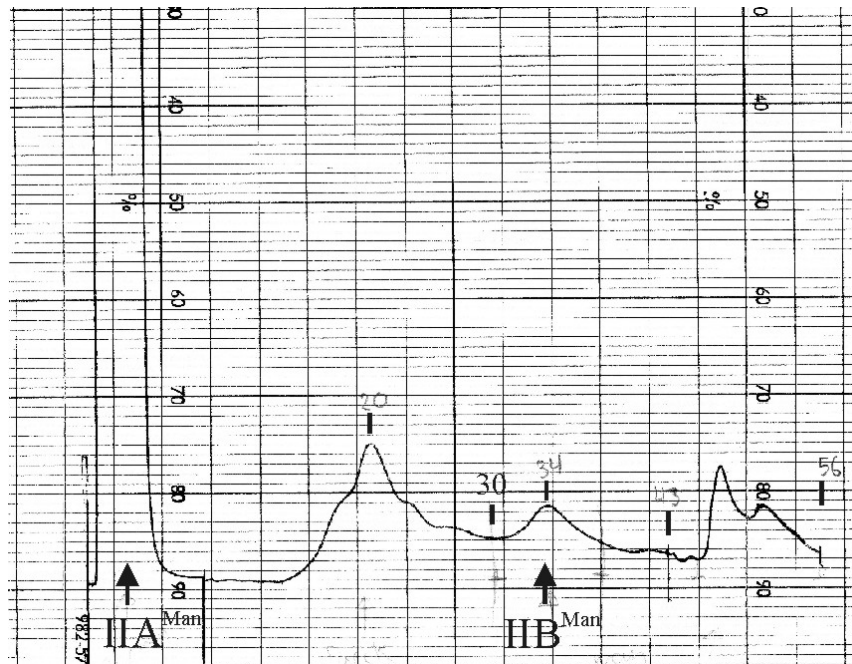


Abb. 5.3: Chromatogramm der Elution für die IIA^{Man}/ IIB^{Man}-Trennung. Das erste große Signal ist IIA^{Man}, danach wurde es mit einem exponentiellen Gradienten weiter eluiert. Zwischen den 30. und 42. Fraktionen befindet sich IIB^{Man}.

Die aufgefangenen Fraktionen wurden durch SDS-Elektrophorese analysiert. Das Acrylamid-Gel wurde mit folgender Zusammensetzung hergestellt: 1,5 M Tris pH 8,7, 10% SDS, 30% Acrylamid, 1% Bisacrylamid, 10% APS, TEMED, H₂O. Das IIB^{Man} Protein wurde von der 30. bis der 42. Fraktion (insgesamt 45 mL) gefunden (Abb. 5.5). Eine Konzentrationsbestimmung des Proteins durch eine UV-Messung bei OD₂₈₀ (~ 0,204) ergab ca. 0,4 mg/mL. Die Reste aus der Säule wurden gelöst und für eine Gel-Analyse aufbewahrt. (Abb. 5.9)

Vor der Reinigung betrug die durchschnittliche Ausbeute an IIB^{Man} ca. 9 mg pro Liter Zellkultur.

Die Fraktionen von IIB^{Man} wurden durch Gel-Filtration FPLC mit SUPERDEX-75 gereinigt (Abb. 5.4).

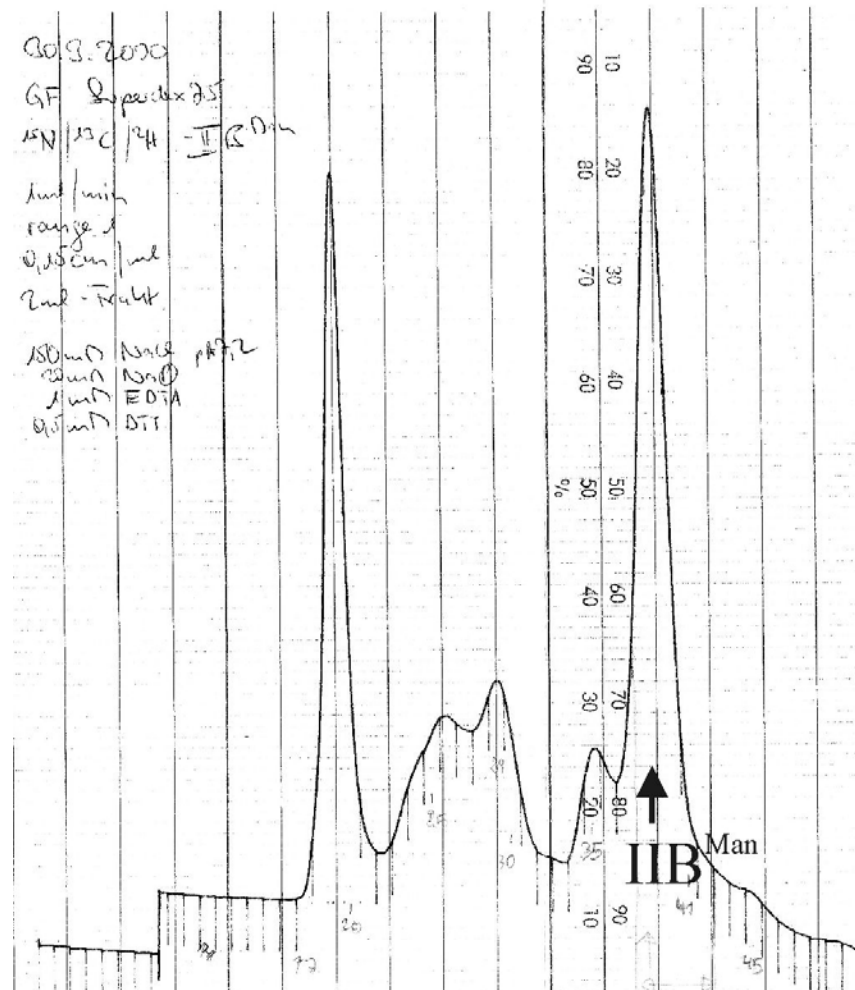


Abb. 5.4: FPLC (*fast protein liquid chromatography*) mit SUPERDEX 75.

Die Gel-Elektrophorese der Fraktionen 19 bis 47 (Abb. 5.7) zeigt, dass IIB^{Man} sich zwischen Fraktionen 38 und 41 befindet. OD₂₈₀ ~0,23 (ca. 3,4 mg Protein).

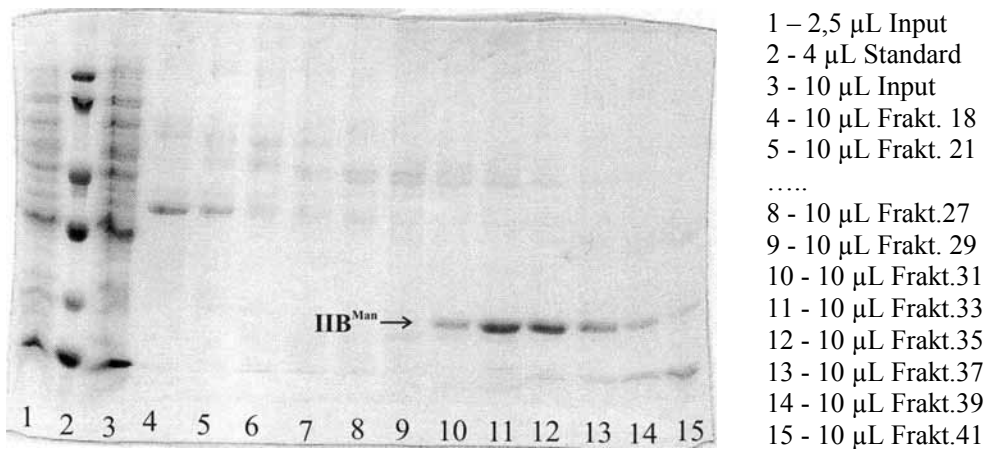


Abb. 5.5: Gel ausgewählter Fraktionen nach der ersten chromatographischen Trennung durch Kationentauscher (Abb. 5.3). Ab der 10. Spur (Fraktion 31) erkennt man IIB^{Man}.

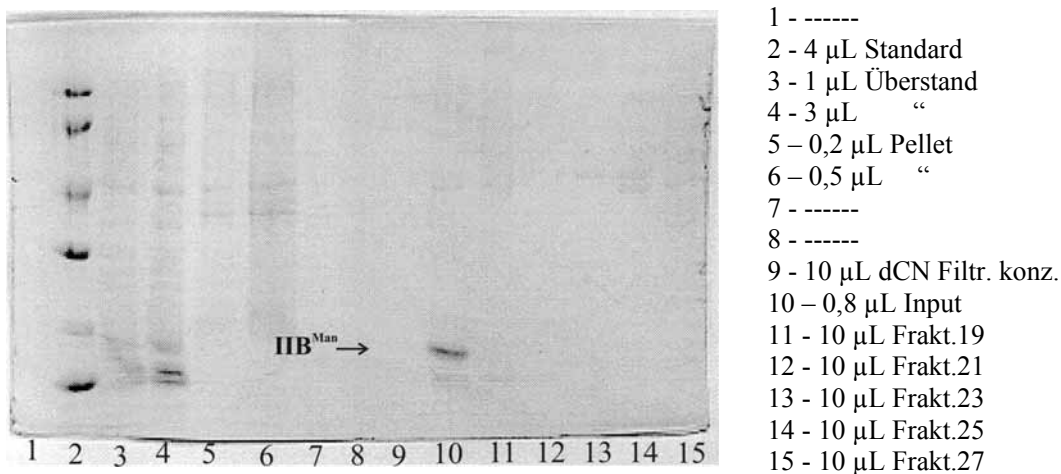


Abb. 5.6: Gel I ausgewählter Fraktionen nach der Reinigung mit FPLC. IIB^{Man} ist deutlich nur an dem Input (10. Spur) zu erkennen.

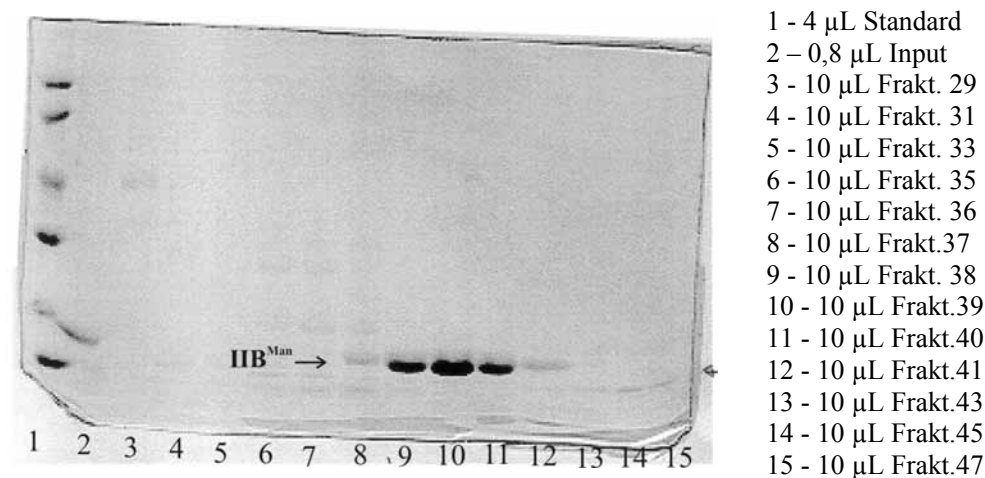


Abb. 5.7: Gel II ausgewählter Fraktionen nach der Reinigung mit FPLC. IIB^{Man} wurde aus den Fraktionen 38 bis 41 (Spuren 9 bis 11) isoliert.

Die 10 mL vereinten Fraktionen wurden mit einem CENTRICON10-Konzentrator auf ca. 200 μ L eingengt. Nach OD₂₈₀ wurde eine Endkonzentration von ca. 20 mg/mL erhalten. Eine Probe von ¹⁵N-IIB^{Man} (500 μ L), durch ähnliche Prozesse hergestellt, wurde ab diesem Moment parallel behandelt. In einem NMR-Puffer (50 mM KP_i, 10 μ M EDTA, pH 7,0) wurden die ¹⁵N-IIB^{Man}-Probe mit Membran SLIDE-A-LYZER der Firma Pierce und die dCN-IIB^{Man}-Probe mit einer in Prof. Ernis Gruppe selbst hergestellten Membran jeweils umdialysiert.

Die endgültigen Konzentrationen von IIB^{Man} nach der Dialyse betragen 26 mg/mL (500 μ L Endvolumen) für die ¹⁵N-Probe, bzw. 18,7 mg/mL (180 μ L Endvolumen) für die dCN-Probe.

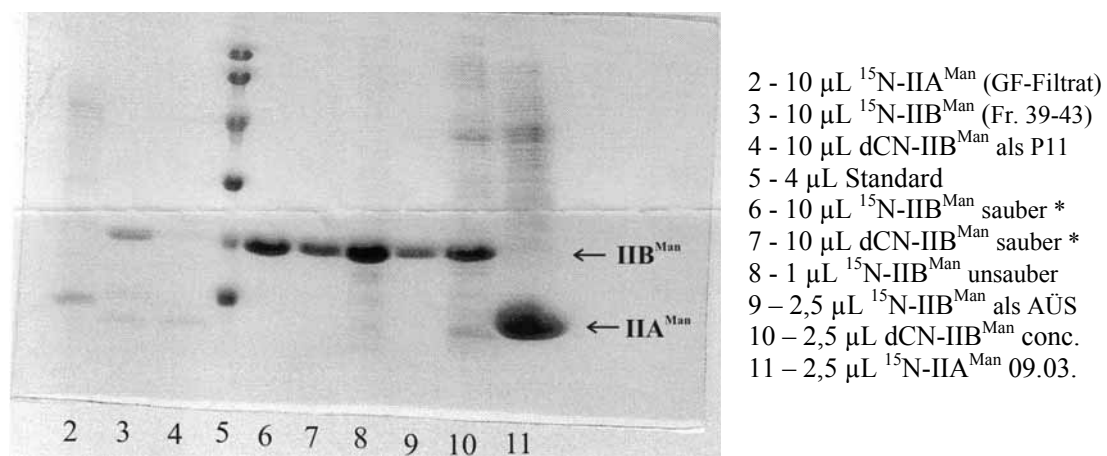


Abb. 5.8: Gel diverser Proben vor und nach der Reinigung. Die gereinigten ¹⁵N- und dCN-Proben befinden sich in den Spuren 6 und 7.

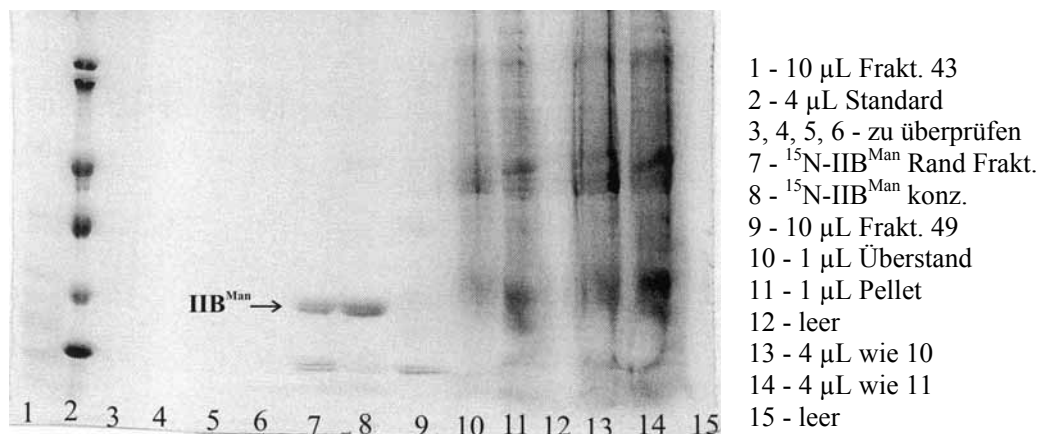


Abb. 5.9: Gel von verschiedenen Fraktionen, Überstand und Pellet zur Kontrolle vor der Entsorgung bzw. Weiterverarbeitung

Die so vorbereiteten Proben wurden gekühlt nach München gebracht. Vor den NMR-Messungen wurden der Probe 0,02% Azid und 5% D₂O zugesetzt.

5.2.2 NMR-spektroskopische Messungen an IIB^{Man}

Die neuen NMR-Experimente an IIB^{Man} wurden an DMX600- und DMX750-Spektrometern (BRUKER, Karlsruhe, Deutschland) bei Protonenfrequenzen von 600,40 MHz bzw. 600,13 MHz und 750,13 MHz und 300 K durchgeführt. Die verwendeten Spektrometer sind mit mindestens vier unabhängigen Frequenzkanälen, abgeschirmten 3-Achsen-Feldgradienten und Tripel- bzw. Quadrupel-Probenköpfen ausgestattet. Die Protonenverschiebungen sind auf externes TSP (295 K, pH 7,0) bezogen, die ¹³C- und ¹⁵N-Verschiebungen wurden über die Frequenzverhältnisse Ξ kalibriert [127]. Die Sendefrequenzen entsprachen 116 ppm (¹⁵N), 41 ppm bzw. 73 ppm (¹³C), 4,78 ppm (¹H).

Die folgenden Experimente, ¹³C- bzw. ¹⁵N-editierten 3D-Spektren wurden an der [U-¹³C/ ¹⁵N/ 50 % ²H] markierten Probe (ca. 1 mM in 95 % H₂O / 5 % D₂O) aufgenommen:

Experiment	Parameter und Bemerkungen	Spektrometer
¹³ C-HSQC	NS 8; TD (¹³ C/F2) 384; SW (¹³ C) 63,1 ppm	DMX 750
¹⁵ N-HSQC	NS 8; TD (¹⁵ N/F2) 192; SW (¹⁵ N) 29 ppm (gefaltet)	DMX 750
¹⁵ N-HSQC	NS 8; TD (¹⁵ N/F2) 192; SW (¹⁵ N) 60,4 ppm	DMX 750
H(CCCO)NH	$\tau_{\text{mix}} = 16,1$ ms (DIPSI-2 mit 28 μ s 90°-Puls); NS 32; TD (¹⁵ N/F2) 58; (¹ H/F1) 108; SW (¹⁵ N) 29 ppm; SW (¹ H) 8 ppm	DMX 600
HC(C)H-COSY	NS 16; TD (¹³ C/F2) 144; (¹ H/F1) 112, SW (¹³ C) 63,7 ppm; SW (¹ H) 11,1 ppm	DMX 600
HC(C)H-TOCSY	$\tau_{\text{mix}} = 18,9$ ms (DIPSI-3 mit 29 μ s 90°-Puls); NS 16; TD (¹ H/F2) 128; (¹³ C/ F1) 160; SW (¹ H) 11,1 ppm; SW (¹³ C) 63,1 ppm	DMX 750
¹³ C-NOESY-HSQC (hchnoesy)	$\tau_{\text{mix}} = 50$ ms; NS 24; TD (¹ H/F3) 1024; TD (¹ H/F2) 120; (¹³ C/F1) 160; SW (¹ H) 11,1 ppm; SW (¹³ C) 63,1 ppm	DMX 750
¹³ C-NOESY-HSQC (hchnoesy600)	$\tau_{\text{mix}} = 50$ ms; NS 16; TD (¹ H/F3) 1024; TD (¹ H/F2) 96; (¹³ C/F1) 224; SW (¹ H) 11,1 ppm; SW (¹³ C) 138 ppm	DMX 600

Experiment	Parameter und Bemerkungen	Spektrometer
¹³ C-NOESY-HSQC (hchnoesy_last)	$\tau_{\text{mix}} = 70$ ms; NS 16; TD (¹ H/F3) 1024; TD (¹ H/F2) 128; (¹³ C/F1) 240; SW (¹ H) 11,1 ppm; SW (¹³ C) 138 ppm	DMX 600
CCH-NOESY	$\tau_{\text{mix}} = 70$ ms; NS 24; TD (¹³ C /F2) 128; (¹³ C/F1)160; SW (¹³ C/F2/F1) 63,1 ppm; SW (¹ H) 13,1 ppm	DMX 750
CNH-NOESY	$\tau_{\text{mix}} = 100$ ms; NS 24; TD (¹³ C /F2) 192; (¹⁵ N/F1) 96; SW (¹³ C) 138 ppm; SW (¹⁵ N) 29 ppm	DMX 750

Die Anzahl der komplexen Punkte (TD) in der direkten ¹H-Dimension (F3) betrug jeweils 1024 und die spektrale Breite (SW) 13 ppm.

Mit dem Ziel der Überprüfung der vorhandenen Daten wurden Spektren zum Vergleich benutzt, die von R. GSCHWIND aufgenommen wurden [126, 128]. Besonders zu Strukturrechnungen wurde folgendes Experiment von R. GSCHWIND benutzt:

Experiment	Parameter und Bemerkungen	Spektrometer
¹⁵ N-NOESY-HSQC (hnhnoesy)	$\tau_{\text{mix}} = 100$ ms; NS 48; TD (¹ H/F2) 48; (¹⁵ N/F1) 44; SW (¹ H) 11,1 ppm; SW (¹⁵ N) 29 ppm	DMX 750

5.2.3 Spektrenprozessierung

Alle Daten der NMR-Messungen wurden mit dem Programm XWINNMR (BRUKER, Karlsruhe, Deutschland) prozessiert. 2D-Spektren wurden danach mit dem Programm AURELIA (BRUKER, Karlsruhe, Deutschland) konvertiert und bearbeitet. 3D-Spektren mit dem Programm SYBYL (TRIPOS AG, St. Louis, MO). Während es bei AURELIA keinerlei Probleme bei der Konvertierung gaben, führt die Bearbeitung mit SYBYL zur Notwendigkeit, die Akquisitions- und Prozessierungsparameter der Rohdaten für die Konvertierung z. T. manuell einzugeben. Von R. GSCHWIND wurden auch einige Daten mit SYBYL bearbeitet. Bei diesen Daten fehlten z. T. die Rohdaten im XWINNMR-Format, sodass bei Unstimmigkeiten bei der Kalibrierung in SYBYL die originalen Parameter nicht bekannt waren und nicht korrigiert werden konnten. Dies führte zu Unterschieden bis zu 2 ppm in der Kohlenstoff-Dimension, die den Vergleich der Spektren erschwerten.

Diese Variation in der chemischen Verschiebung war desto größer, je kleiner die spektrale Breite war. Eine Besonderheit bei SYBYL (Version 6.9) führt dazu, dass die Mitte des Spektrums (Sendefrequenz) sich bei der Hälfte der Punkte plus eins befindet. Der Unterschied produzierte einen umso größeren Fehler je kleiner die Anzahl der Punkte ist. Die NOESY-Listen, die aus alten SYBYL-Spektren erzeugt wurden, mussten dann manuell korrigiert und alle bis dahin konvertierten Spektren neu kalibriert werden, was die Arbeit verzögerte.

5.2.4 Resonanzzuordnung

Ein wichtiger Schritt der Ermittlung von Proteinstruktur und -dynamik durch NMR-Spektroskopie ist die Zuordnung der Signale. Zuordnung bezeichnet die Korrelation der atomaren Resonanzfrequenzen mit der Konstitution des zu untersuchenden Moleküls. Die Strategie, die jetzt gut bekannt ist, um die Zuordnung kleiner Proteine zu bekommen, ist in der Analyse von Spinsystemen und NOE in 2D-Spektren basiert [12]. Mit Einbeziehung von multidimensionalen Techniken sowie mit ^{13}C - und ^{15}N -markierten Proteinen kann man größere Proteine untersuchen [25, 129, 130]. Der erste Schritt der Mehrzahl von Zuordnungsvorgängen von Isotopen-markierten Proteinen ist die sequenzielle Zuordnung der Rückgratresonanzen. Das kann bei kombinierten Daten aus Tripelresonanzexperimenten ausgeführt werden.

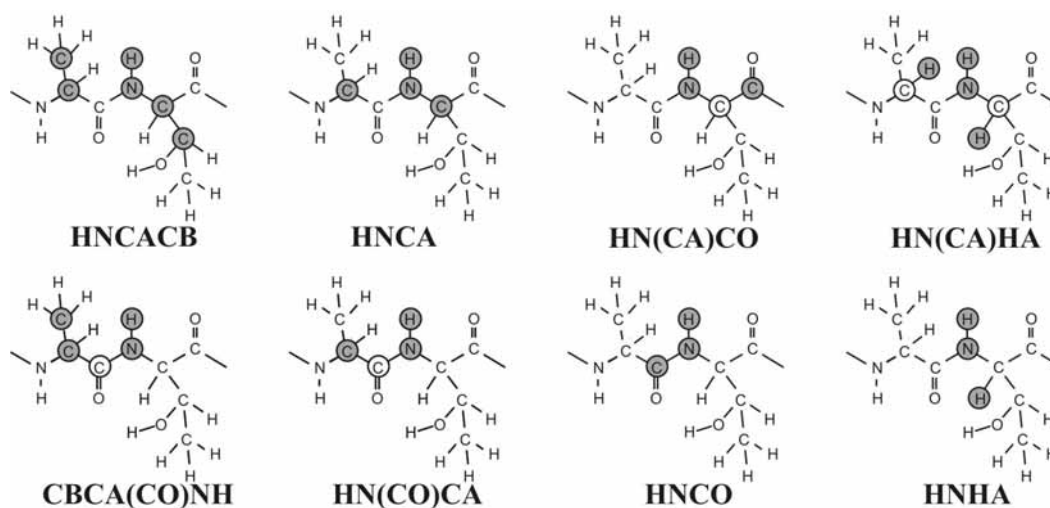
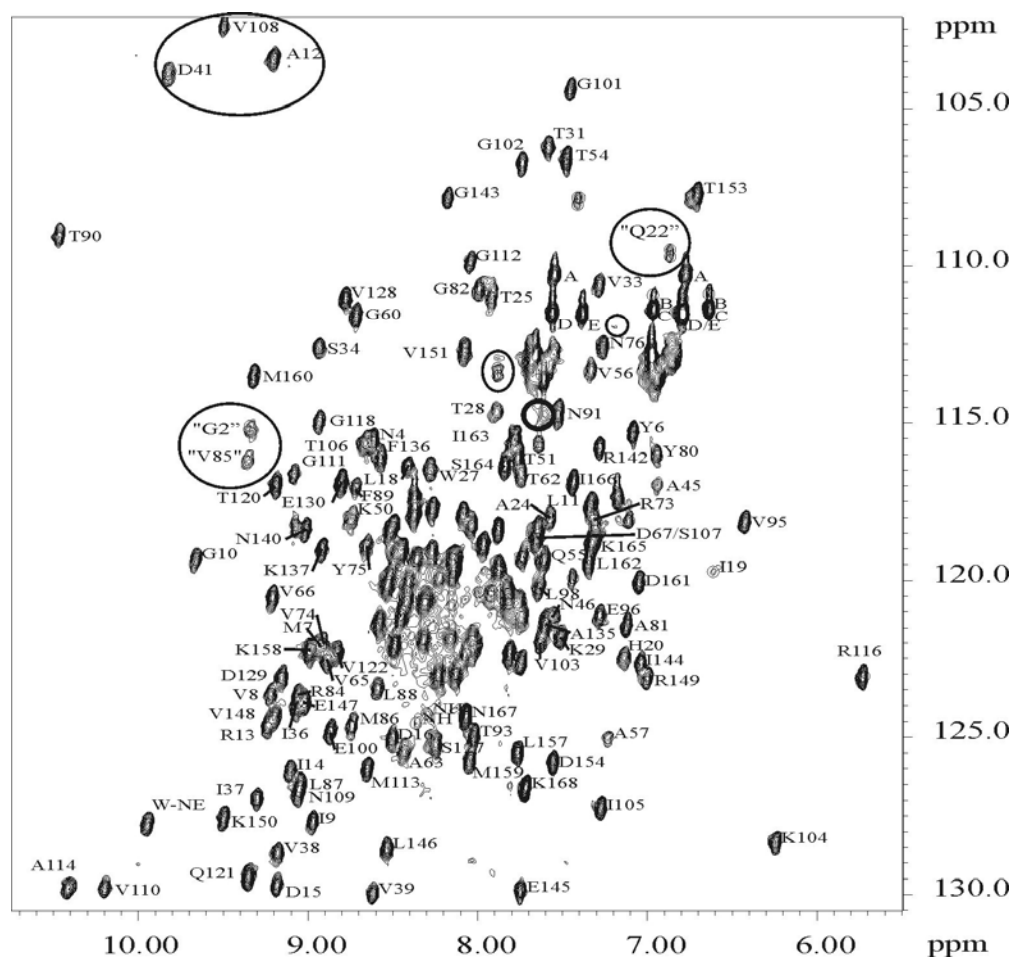


Abb. 5.10: Kombination der Tripelresonanz-Experimente für die Zuordnung der Rückgrat-Verschiebungen eines doppelt markierten Proteins. Graunterlegte Atome erscheinen im Spektrum.

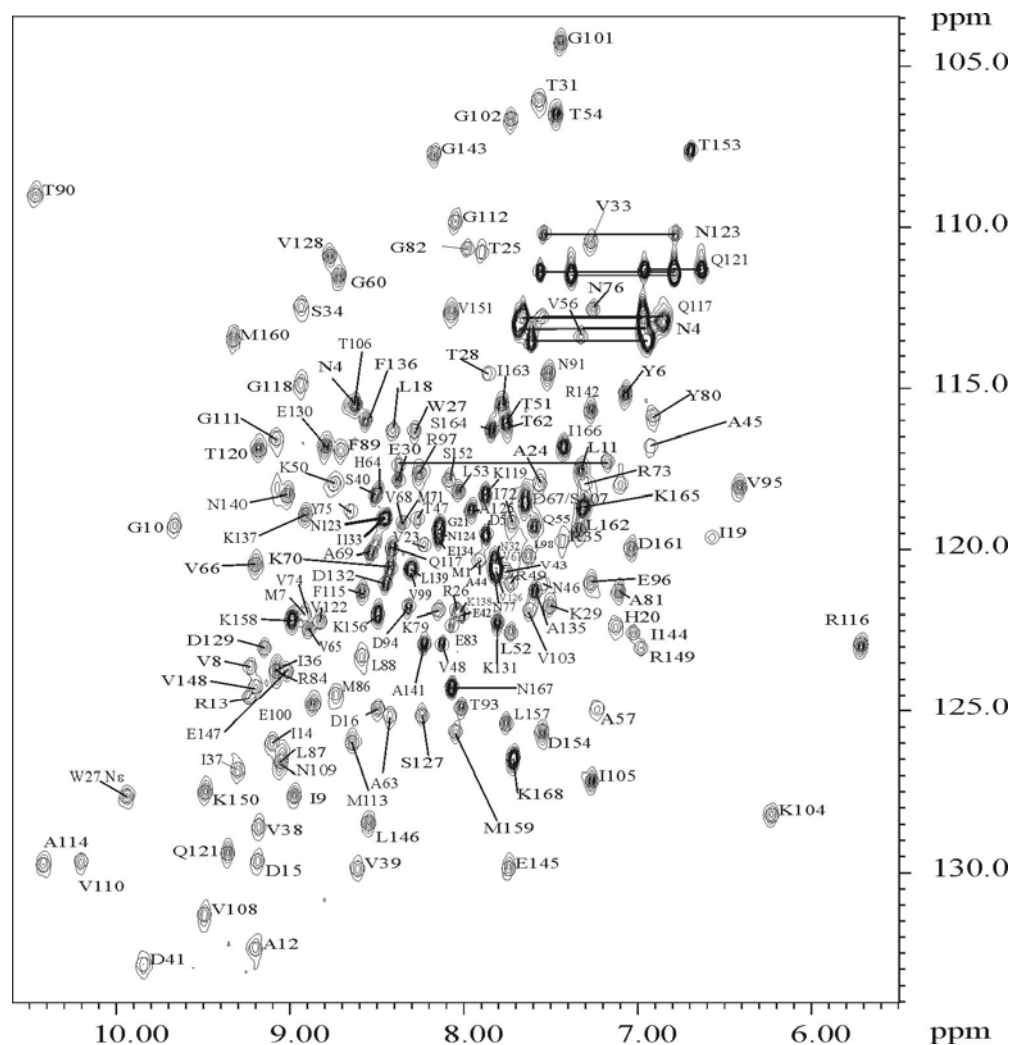
In Fall von IIB^{Man} wurde diese Arbeit in der Dissertation von R. Gschwind mit Hilfe des Programms PASTA erledigt [128]. Die Zuordnungsdaten des Rückgrats wurden als Ausgangspunkt für die weitere Zuordnung von Seitenketten angenommen. Kleinere dabei festgestellte Unstimmigkeiten und ihre Korrektur werden nachher beschrieben.

Der Ausgangspunkt für die Zuordnung ist das 2D-(¹⁵N, ¹H)-HSQC-Spektrum, das die H^N(i)- und ¹⁵N(i)-chemische Verschiebung des i-Restes liefert. Der Verschiebungsbereich der IIB^{Man}-Amidprotonsignale im ¹⁵N-editierten Spektrum erstreckt sich von 5,75 bis 10,5 ppm, während bei der ¹⁵N-Verschiebung die gewählte Sendefrequenz (116 ppm) und das engere spektrale Fenster (29 ppm) bei dem aufgenommenen HSQC die unabsichtlichen Faltung einiger Signale verursacht (siehe Spektrum 5.1).



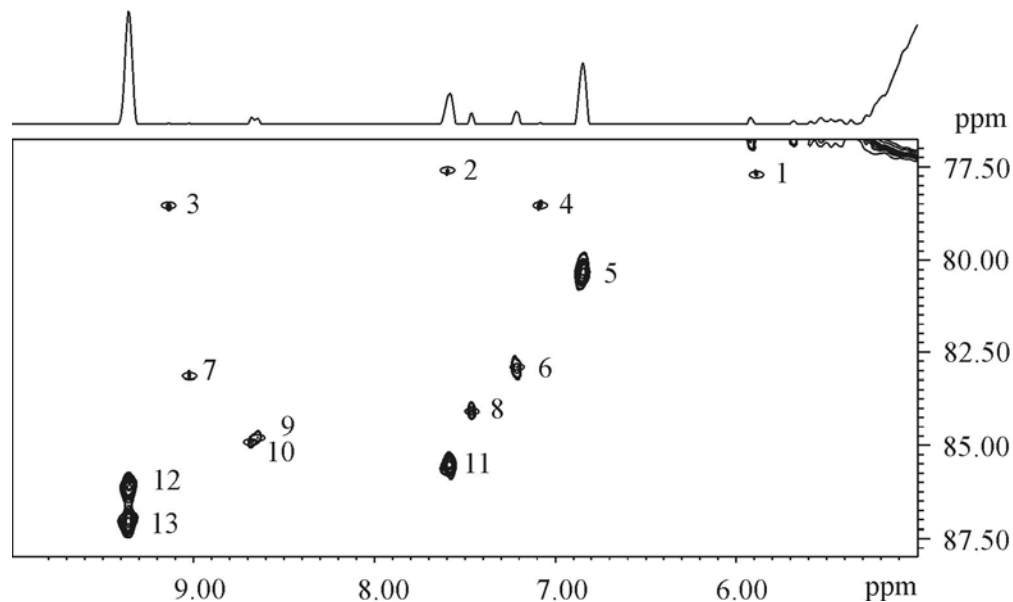
Spektrum 5.1: ¹⁵N-HSQC-Spektrum von IIB^{Man}. Die gefalteten Signale sind eingekreist.

Diese Faltung wurde später nach Vergleich mit einem mit großem spektralem Bereich aufgenommenen Spektrum deutlich (Spektrum 5.2). Die Faltung von V108 war schon in Vorarbeit erkannt und der richtige Wert der chemische Verschiebung angegeben worden. Die Faltung anderer Signale (A12, D41) war in den vorhandenen Daten nicht erkannt und die chemische Verschiebung musste daher korrigiert werden. Alle HN-Paare des Rückgrats waren mit ähnlichen Werten wie bei [128] identifiziert, außer G2, A12, R17, Q22, D41 und V85.



Spektrum 5.2: Abschnitt des ^{15}N -HSQC-Spektrum mit 60,4 ppm SW(^{15}N).

Außer V108, A12 und D41 gehören die anderen eingekreisten Signale zu HN-Gruppen der Seitenketten. Die Signale mit ^{15}N -chemischen Verschiebungen zwischen 77 und 87 ppm würden mit den Lysin- bzw. Arginin-Aminprotonen übereinstimmen. Diese Signale konnten jedoch nicht zugeordnet werden (Spektrum 5.3).



Spektrum 5.3: Abschnitt des ^{15}N -HSQC-Spektrums mit 60,4 ppm SW(^{15}N). Der obere Teil des Spektrums zwischen 76 und 88 ppm zeigt die ungefalteten Signale von K- bzw. R-Aminogruppen, die nicht zugeordnet werden konnten.

Die Auswertung des ungefalteten HSQC-Spektrums ergibt 184 Signale, davon sind 21 dieser Signale zwei- oder mehrfach überlagert. Außer 15 Seitenketten-HN einschließlich des aromatischen HN-Paares von Tryptophan wurden 173 HN-Paare zugeordnet. Daraus ergibt sich, dass 98 % der Rückgrat-HN und insgesamt mehr als 84 % der nicht austauschenden Amin- bzw. Amidprotonen zugeordnet wurden. Ca. 94 % der zuordenbare N- und HN-Werte wurden ihren Aminosäuren zugeteilt.

Der nächste Schritt, die Identifizierung der Seitenketten-Signale, wurde mit Hilfe des 3D-H(CCCO)NH-Spektrums der entsprechenden Aminosäure und mit HC(C)H-TOCSY und HC(C)H-COSY einem bestimmten C/H-Atom zugeordnet. Im letzten Experiment werden nur angrenzende ^1H - und ^{13}C -Atome korreliert, während im HC(C)H-TOCSY die Resonanzen des gesamten aliphatischen Spinsystems korreliert werden können (Abb. 5.12).

Mehr als 90 % der aliphatischen C- und ca. 96 % der aliphatischen H-Werte wurden so zugeordnet (Tabelle 5.2, Seite 67). Im Fall der Lysin- und Argininreste (jeweils 14 und 11 Aminosäuren) gab es Schwierigkeiten in der Zuordnung der Seitenketten wegen der großen Zahl der Überlagerungen (siehe Zuordnungstabelle in Anhang).

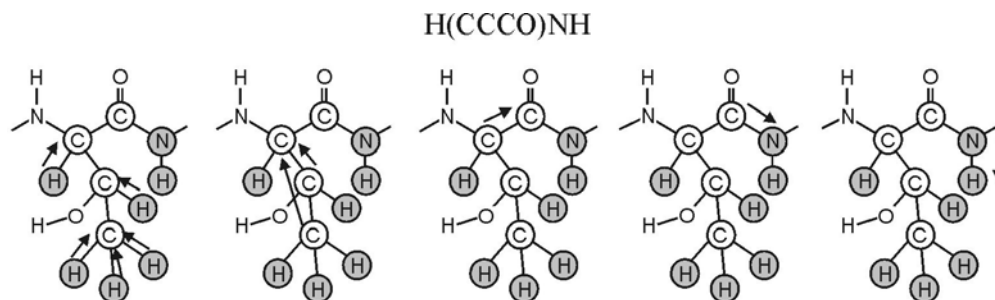


Abb. 5.11: Der Magnetisierungstransferweg im H(CCCO)NH ist in diesen fünf Schritten durch Pfeile gekennzeichnet. Die Magnetisierung der aliphatischen Wasserstoffe der Seitenketten wird zunächst auf die Kohlenstoffe übertragen. Durch einen TOCSY-Transfer wird sie über die aliphatischen Kohlenstoffe zum C^α weitergegeben, über den CO-Kohlenstoff auf den Stickstoff übertragen und letztendlich auf dem H^N detektiert.

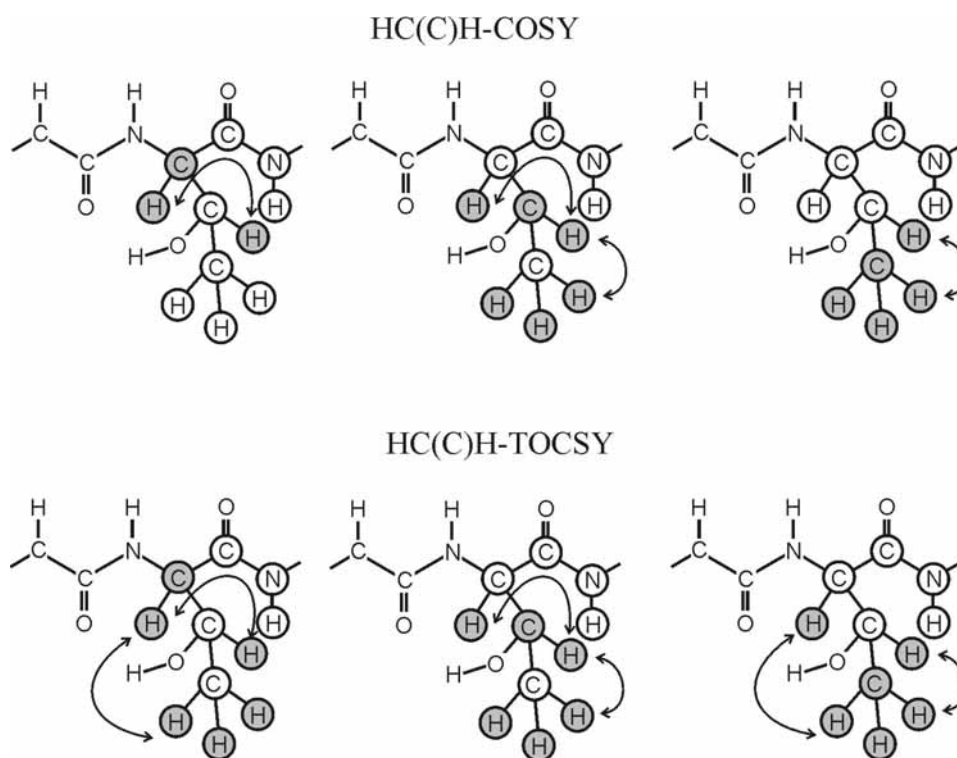


Abb. 5.12: Kohärenztransfers im HCCH-COSY- und HCCH-TOCSY-Experiment für Seitenkettenzuordnung am Beispiel der Aminosäure Threonin. Die Pfeile zeigen die Atomkorrelationen, grauunterlegte Atome erscheinen im Spektrum.

Nur ein Paar der Seitenkettenamidgruppen (in Spektrum 5.2 mit einer geraden Linie verknüpft) konnte im H(CCCO)NH beobachtet werden. Die aromatischen Signale und die Prolin-Stickstoffatome wurden nicht identifiziert. Die Daten der Carbonylgruppen wurden von [128] übernommen.

5.2.5 Sekundärstruktur-Analyse

Die chemischen Verschiebungen der ^1H -, ^{13}C -, und ^{15}N -Atome können benutzt werden, um Sekundärstruktur-Elemente in Proteine zu identifizieren [131]. Eine Verschiebung zu hohem Feld der Werte der α -Protonen, Amidprotonen und β -Kohlenstoffen und zu tieferem Feld von α -Kohlenstoffen und Rückgrat-Carbonylen ist ein Zeichen von α -Helices. Dagegen ist ein β -Faltblatt durch tieffeldige Werte der α -Protonen-, Amidprotonen- und β -Kohlenstoff-Verschiebung und hochfeldige Werte von α -Kohlenstoffen- und Rückgrat-Carbonylen-Verschiebung charakterisiert. Flexible Teile der Struktur haben normalerweise Verschiebungen in der Nähe der *random-coil*-Werte. Da die einzelnen Verschiebungswerte durch lokale Einflüsse von diesem Schema abweichen können, werden die vier unabhängigen Verschiebungsparameter C^α , H^α , CO und C^β in einem Verschiebungsindex gemäß ihrer Relevanz kombiniert, was zu einer Vorhersage von bis zu 92 % Genauigkeit führt. Die Grenzen dieser Methode liegen in der exakten Bestimmung der Lage der Sekundärstruktur-Elemente.

Eine genauere Bestimmung berücksichtigt zusätzlich die für die einzelnen Sekundärstruktur-Elemente typischen kurzen und mittleren Abstände aus NOESY-Spektren. Für die Analyse der sekundären Struktur muss man sehr viele NOEs messen und identifizieren. α -helikale Bereiche zeichnen sich dabei vor allem durch kurze $\text{H}_{(i)}^{\text{N}}-\text{H}_{(i+1)}^{\text{N}}$ -Abstände, schwache $d_{\alpha\text{N}}$ NOEs und mittlere $d_{\text{NN}}(i,i+2)$, $d_{\alpha\text{N}}(i,i+3)$, $d_{\alpha\text{N}}(i,i+4)$, und $d_{\alpha\beta}(i,i+3)$ NOEs aus. β -Faltblatt-Bereiche lassen sich durch kurze sequentielle $\text{H}_{(i)}^{\text{N}}-\text{H}_{(i+1)}^{\alpha}$ -Abstände und schwache d_{NN} NOEs identifizieren. Da β -Stränge entweder parallel oder antiparallel angeordnet vorliegen, können zwischen den Strängen ebenfalls charakteristische NOEs bestimmt werden, wodurch die Lage der Stränge zueinander eindeutig festgelegt wird.

Auch die $^3\text{J}(\text{H}^{\text{N}}\text{H}^\alpha)$ -Kopplungskonstanten enthalten Informationen über die Sekundärstruktur durch ihre typischen Werte für α -Helices (ca. 4 Hz) bzw. β -Faltblätter (9 Hz). Zusätzlich können Sekundärstruktur-Elemente durch verminderte Austauschraten der Amidprotonen [132-134] mit Hilfe eines Lösungsmittelaustausches oder eines MEXICO-Experiments [135] bestätigt werden.

Die Analyse der Verschiebungen wurde erneut mit dem CSI-Programm der Universität Alberta durchgeführt. Mit 100 % Zuordnung der C^α-, 100 % der H^α-, 94 % der CO- und 100 % der C^β-Verschiebungen führt der Vergleich dieser Analyse mit der in der Dissertation von R. GSCHWIND (s. Anhang) zu ähnlichen Ergebnissen: abwechselndes Auftreten von β -Faltblättern und α -Helices.

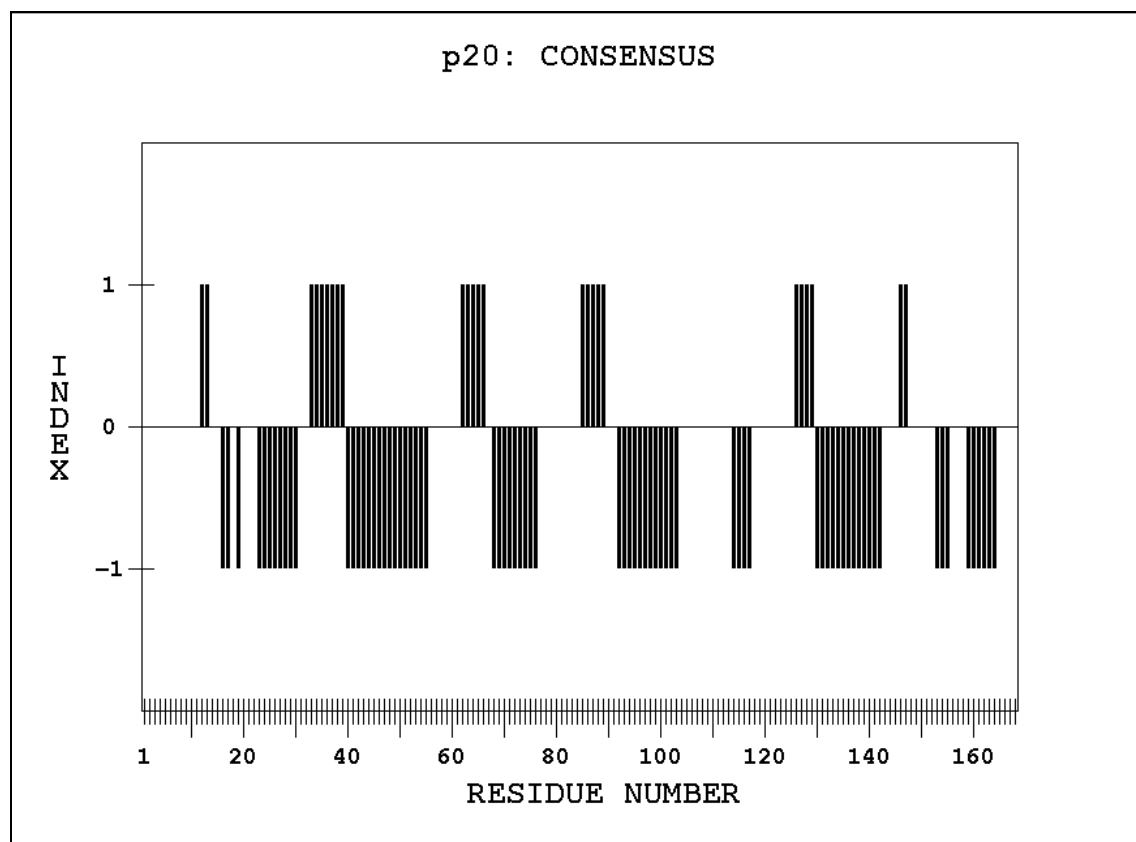


Abb. 5.13: Graphische Darstellung des aus einer gewichteten Mittelung der Abweichungen der C^α-, H^α-, CO- und C^β-chemischen Verschiebungen ermittelten Konsensus der Sekundärstruktur. Positive Werte zeigen β -Faltblätter, negative Werte α -Helices. Keine Angaben werden für *random-coil*-Werte angegeben oder wenn Daten fehlen.

Bei der Dissertation von R. GSCHWIND wurde die Sekundärstruktur von IIB^{Man} aus einer Kombination dieser vier Parameter bestimmt: semiquantitative NOEs, Abweichungen der chemischen Verschiebungen vom Durchschnittswert (CSI), ³J(H^NH^α)-Kopplungskonstanten und Austauschraten der Amidprotonen mit dem Lösungsmittel. Die letzten zwei Parameter wurden im Rahmen dieser Dissertation nicht wieder gemessen. Sowohl die Werte von Kopplungskonstanten als auch die Ergebnisse von Austauschraten wurden für neue Rechnungen sowie für Schlussfolgerungen so wie in [128] angegeben übernommen.

5.2.6 NOE-Zuordnung und Strukturberechnung mittels CYANA

Die wichtigsten Parameter für die Strukturaufklärung durch NMR-Spektroskopie sind interatomare Abstände zwischen Protonen, die durch den NOE bestimmt werden können. Die Strukturaufklärung großer Proteine, beruhend auf diesen NOEs, ist immer noch problematisch. Bei dieser Arbeit wurde das Programm CYANA (Kapitel 3, Seite 16) zur automatischen NOE-Zuordnung herangezogen.

Die aus den auf Seite 56 und 57 aufgelisteten 3D-NOESY-Spektren entnommenen Kreuzsignallisten wurden nach Konvertierung ins XEASY-Format [65] und manueller Eliminierung von eindeutigen Rausch- und Artefakt-Signalen als Eingabedateien für CYANA verwendet. Zusätzlich wurden eine Datei mit der 168 Aminosäure langen Sequenz des IIB^{Man} und eine Datei mit der sequenzspezifischen chemischen Verschiebungszuordnung erzeugt (s. Anhang). Die Zuordnungsdatei wurde im Laufe der multiplen Berechnungen mehrmals ergänzt bzw. geändert. Die chemischen Verschiebungswerte der verschiedenen NOE-Spektren wurden aufeinander abgestimmt, so dass nur eine Verschiebungsliste für alle NOESY-Listen benutzt werden konnte. Einige Signale der NOESY-Listen wurden auch korrigiert, wenn innerhalb einer ¹⁵N-Spur Abweichungen festgestellt wurden. Besonders für die gefalteten Signale wurden die Werte des Stickstoffs in allen Listen korrigiert.

CYANA benutzt auch zusätzliche konformationelle Abstandsbeschränkungen aus anderen Quellen, die nur für die Strukturberechnung benutzt werden und nicht von dem Programm geändert werden können. Für die Berechnung von IIB^{Man} wurde auch eine Datei mit Abständen zwischen Wasserstoffbrücken, die aus der Sekundärstruktur-Analyse abgeleitet wurden, und eine Datei mit Kopplungskonstanten aus [128] verwendet (s. Anhang).

Da von CYANA bis heute kein Manual publiziert wurde, wurden erste Rechnungen zum Test des Programms durchgeführt, während gleichzeitig die sequenzspezifische Zuordnung der Seitenkette vorangetrieben wurde. Alle Konstanten und programmspezifische Parameter wurden so gelassen wie im Programm standardmäßig definiert, da Optimierungsangaben für das System fehlten.

Die Datei mit der sequenzspezifischen chemischen Verschiebungszuordnung der 168 Aminosäuren besteht aus 2860 Eintragungen, in denen diastereotope und auch Pseudoatome, aber kein Sauerstoff oder Schwefel, eingeschlossen sind (s. Anhang und Tabelle 5.1). Auch die Protonen der Säuregruppen (19 Atome) wurden nicht eingeschlossen. IIB^{Man} besteht letztendlich aus 2688 Atomen. Die letzte Rechnung wurde – auf Grundlage der im CYANA-Archiv dargestellten Aminosäure-Typen (CYANA-Library) - mit 1572 zugeordneten und 674 fehlenden Werten durchgeführt. 500 dieser fehlenden Zuordnungen sind Atome, die bei diesen Messungen nicht zugeordnet werden können: die Prolin-Stickstoffe (6 Atome), Sauerstoff-Atome (242 Atome), die Carbonylgruppen der Seitenketten (34 C-Atome), Methionin-Schwefel (7 Atome), aromatische Atome von Tryptophan, Phenylalanin, Tyrosin und Histidin (50 C-, 4 N-, 9 H- und 6 Q-Atome (Bezeichnung für Pseudoatome)), etc. Das bedeutet, dass mehr als 90 % der möglich zuordenbaren Protonen, Kohlenstoffe und Stickstoffe zugeordnet wurden.

Tabelle 5.1: Liste der IIB^{Man}-Atome, die für die Rechnung der Zuordnungsrate verwendet wurde. Die Aminosäuren (AS) werden mit dem Ein-Buchstaben-Kode dargestellt.

IIB ^{Man} ; 168 AS; Programm "seq_in_AS" von Dr. L.H. Gutiérrez: 2860 Eingaben (443 Pseudoatome)		
No OH		C-Terminus
No H		N-Terminus
No Säure-H		(10D-H ^δ O+9E-H ^ε O)
No S:		(7M)
No O: 242		(168AS, 6S, 12T, 2x10D, 2x9E, 11N, 4Q, 3Y)
235 N:		(168AS, 3x11R, 11N, 4Q, 14K, 1W, 2x2H)
817 C:		
202 C=O		(168AS, 11N-C ^γ , 10D-C ^γ , 4Q-C ^δ , 9E-C ^δ)
50 C-Arom.		(8W, 6x3Y, 3x2H, 6x3F)
547 C-Aliph.		
	168 CA	(168AS)
	157 CB	(168AS-11G)
	144 CG	(4Q, 6P, 7M, 9E, 11L, 11R, 12T, 14K, 2x11I, 2x24V)
	64 CD	(6P, 11I, 11R, 14K, 2x11L)
	14 CE	(14K)
	18 C-Extras	(7M-C ^ε , 11R-C ^ε)
1365 H:		
292 HN		(162AS, 2H, 1W, 5x11R, 2x11N, 2x4Q, 3x14K)
21 HO		(6S, 2T, 3Y)
36 H-Arom.		(5x1W, 2x2H, 5x3F, 4x3Y)
995 H-Aliph.		
	157 HA	(168AS-11G)
	22 HAn	(11G)
	47 HB	(24V, 11I, 12T)
	232 HBn	(3x12A, 2x98(168AS-11G-12A-24V-11I-12T))
	11 HG	(11L)
	102 HGn	(2x7M, 2x6P, 2x11R, 2x4Q, 2x14K, 2x9E)
	235 HGnn	(6x24V, 5x11I, 3x12T)
	62 HDn	(2x11R, 2x14K, 2x6P)
	99 HDnn	(3x11I, 6x11L)
	28 HEn	(2x14K)
	21 H-Extras	(3x7M-H ^ε)
443 Q:		
51 Q-HN		(14K-Q ^δ , 2x11R-Q ^{δn} , 11N-Q ^{δn} , 4Q-Q ^{δn})
18 Q-Arom.		(3x3Y, 3x3F)
367 Q-Aliph.		
	11 QA	(11G)
	110 QB	(168AS-11G-24V-11I-12T)
	51 QG	(7M, 6P, 11R, 4Q, 9E, 14K)
	82 QGn	(2x11I, 12T, 2x24V)
	31 QD	(11R, 14K, 6P)
	33 QDn	(11I, 2x11L)
	14 QE	(14K)
	35 QQ?	(24V, 11L)
	7 Q-Extras	(7M-Q ^ε)
2860 Eingaben - 443 Pseudoatome + 242 O + 7 S + 19 Säure-H + 3 Terminal-Atome = 2688 Atom		

Die Anweisungen für CYANA [7] empfehlen, dass mindesten 90% der nichtaustauschenden und Rückgrat-Amidprotonen und mindesten 90% der ^{13}C - und ^{15}N -chemischen Verschiebungen zugeordnet werden sollen, um eine erfolgreiche Durchführung von CYANA zu gewährleisten. Diese Voraussetzungen wurden, wenn auch knapp, erfüllt. So wurden sowohl die aliphatischen ^{13}C - chemischen Verschiebungen mit mehr als 90 % Zuordnung, als auch die ^{15}N -chemischen Verschiebungen mit ca. 94 % Zuordnung gewertet. Die aromatischen Kohlenstoffe wurden nicht zugeordnet, es standen aber auch keine NOEs im C-aromatischen Bereich zur Verfügung.

Während bei den HN-Signalen des HSQC die Zuordnung unter 85 % liegt (173 Zuordnungen von 205 Signalen), wird die Grenze von 90 % erreicht, wenn man nur die nichtaustauschenden Amidsignale betrachtet, d. h. wenn man die 13 Amino-Signale subtrahiert (Spektrum 5.3, Seite 61).

Tabelle 5.2: Rechnung der Zuordnungsrate der gesamte Anzahl von zuordenbaren Atomen, der Stickstoffe und der aliphatischen Kohlenstoffe.

IIB ^{Man} ; Zuordnungsrate	1572 Zuord. + 674 fehl. Zuord. - 500 nicht zuordenbar ----- 1746 mögliche Werte	Zuord. Total: $1572/1746 \times 100 > 90 \%$
500 nicht zuordenbare Atome: 7 S, 242 O, 57 N, 34 CO, 50 C-Arom., 18 C-Extras (7 M-C ^e , 11 R-C ⁵), 21 HO, 13 HN (11R, 2H-H ⁸), 9 H-Arom. (5x1W, 2x2H), 21 H-Extras (3x7M-H ⁶), 36 Q-HN (2x11R-Q ¹ , 14K-Q ⁵), 6 Q-Arom (3Y, 3F), 7 Q-Extras (7M-Q ⁶).		
Zuord. N	235 N Total - 57 nicht zuordenbar (6P, 3x11R, 14K, 2x2H) ----- 178 N mög. - 8 fehl. Zuord = 170 Zuord. - 3 nicht sicher = 167 Zuord.	$170/178 \times 100 \sim 96 \%$ $167/178 \times 100 \sim 94 \%$
Zuord. C-Aliph.	565 C-Aliph. Total - 18 nicht zuordenbar (7M-C ^e , 11R-C ⁵) - 36 fehl. Zuord ----- 511 C-Aliph. Zuord.	Zuord. C-Aliph: $511/565 \times 100 > 90 \%$ - C-Extras (7M+11R): $511/547 \times 100 \sim 93 \%$

Aus der Auswertung des ^{15}N -NOESY-HSQC-Spektrums kamen 1954 Signale zustande, die so für die ersten Rechnungen benutzt wurden und die stufenweise auf 1303 Signale für die letzten Rechnungen reduziert wurden. Die Analyse dieser Liste ergab 164 HN-Spuren (in Vergleich zu 184 Signalen im HSQC). Dabei kann man von mindestens 15 überlagerten Signalen ausgehen. Nur 2 Spuren im NOESY-Spektrum konnten am Ende ihren womöglich gefalteten HN-Paaren nicht zugeordnet werden (s. Anhang).

Die Analyse der ^{13}C -NOESY-HSQC-Spektren bereitete größere Schwierigkeiten. Das Auswerten des ersten verwendeten Spektrums (hchnoesy) ergab 2335 Signale (s. Tabelle 5.3, Seite 69, Spalte I), die nach Eliminierung einiger deutlicher Rauschsignale und Artefakte auf 2052 reduziert werden konnten (Seite 70, Spalte IX). Trotzdem war es wegen der großen Anzahl an Überlagerungen und kleinen Abweichungen nicht möglich, den größten Teil der CH-Spuren manuell zuzuordnen. Die Signale von Methionin- CH_3^{e} , die schöne NOE-Spuren zeigten, waren wegen der fehlenden Zuordnung nicht für die Rechnungen verwendbar (s. ^{13}C -NOESY-HSQC-Tabelle in Anhang, Seite III-61).

Zwei weitere ^{13}C -NOESY-HSQC-Spektren (hchnoesy600 und hchnoesy_last), ab Spalte VII in Tabelle 5.3, mit größerer ^{13}C -spektraler Breite (138 ppm) wurden auch verwendet. Die Listen, die aus diesen Spektren für die automatische NOE-Zuordnung mit CYANA benutzt wurden, bestanden letztendlich aus 1742 bzw. 2270 Signalen. Dabei wurden die Bereiche der aromatische Signale bereits eliminiert, deren Zuordnung fehlte und von denen keine NOE-Kreuzsignale zu sehen waren.

Auch wenn keine zusätzliche Information aus dem aromatischen Bereich dieser Spektren erhalten wurde, wurden sie als Ergänzung und zur Fehlerminimierung für die CYANA-Rechnungen verwendet, da sie wegen unterschiedlicher Auflösung und Rausch-Signal-Verhältnisse im manchen Bereichen komplementär sind.

Die Empfehlungen der Programmentwickler [7] sagen, dass die Werte der Fehlerfunktion und der durchschnittlichen Rückgrat-RMSD nach dem ersten CANDID-Zyklus für ein gutes Ergebnis der Rechnungen unter 250 \AA^2 bzw. $3,0 \text{ \AA}$ liegen sollten. Außerdem wird nach dem letzten Zyklus vorausgesetzt, dass der Wert der Fehlerfunktion unter 10 \AA^2 liegt und dass mehr als 80 % der gelisteten Signale zugeordnet wurden.

Tabelle 5.3: Parameter und Ergebnisse beispielhafter Rechnungen mit CYANA:

Spalte	I	II	III	IV	V	VI
Test	06.02.	00.07.	28.08.	03.06.	01.10.ns	01.10.gr
Zuordnungsanzahl	1281	1424	1424	1424	1437	1437
Fehlende Zuordnung ^a	419	304	304	304	293	293
Zuordnungsrate	75 %	82 %	82 %	82 %	83 %	83 %
Sekundärstrukturbeschränkungen	Nein	Nein	52	Nein	Nein	Nein
Kopplungskonstanten	Nein	82	82	82	82	82
Toleranz HX [ppm]	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02
Toleranz H [ppm]	0,02	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05
Toleranz X [ppm]	0,50	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40
Spektrum		HNH	HNH	HNH	HNH	HNH
Signalauswertung		Intensität	Intensität	Intensität	Intensität	Integral
Gesamte/ zugeordn. Signale ^b		1356/ 428	1232/ 351	1356/ 430	1362/ 369	1362/ 345
Spektrum	HCH			HCH	HCH	HCH
Signalauswertung	Integral			Integral	Intensität	Integral
Gesamte/ zugeordn. Signale ^b	2335/ 209			2250/ 396	2117/ 313	2117/ 299
Spektrum						
Signalauswertung						
Gesamte/ zugeordn. Signale ^b						
Konformere	100	100	100	100	100	100
Schritte	10	10000	5000	10000	100	100
Durchschnitt Fehlerfunktion [\AA^2]	8,40 ± 2,19	1,61 ± 0,41	7,12 ± 2,10	3,39 ± 0,39	8,35 ± 1,73	11,66 ± 2,18
Durchschnitt RMSD ^c [\AA]	13,84 ± 2,99	10,28 ± 2,18	9,04 ± 1,55	7,78 ± 3,22	15,62 ± 1,65	15,69 ± 1,86
Verletzte Beschränkungen	12/ -	3/ 0	11/ 2	11/ 0	24/ 2	30/ 2
Abstand/ Kopplungskonstante						

^a nicht zuordenbaren Atome sind bereit abgezogen

^b Anzahl nach dem 7. Zyklus

^c für die gesamten Schweratome

Die Eingabedateien für die erste Rechnung waren nur eine sequenzspezifische Resonanzzuordnungsliste mit 919 fehlenden und 1281 tatsächlichen Zuordnungen (75 % H- und C-Zuordnung) und eine ¹³C-NOE-Liste, die aus 2335 Signalen bestand. Mit einer Toleranz von 0,02 ppm für beide H-Dimensionen und von 0,5 ppm für die Dimension des schweren Atoms (im diesen Fall C) wurden im letzten Zyklus nur 209 NOE-Signale zugeordnet, die ein Konformerenbündel von 20 Strukturen mit einer durchschnittlichen Rückgrat-RMSD von $13,45 \pm 3,13 \text{ \AA}$ und einem durchschnittlichen Wert der Fehlerfunktion von $8,40 \pm 2,19 \text{ \AA}^2$ lieferten (s. Tabelle 5.3, Spalte I).

Tabelle 5.3 (Fortsetz.): Parameter und Ergebnisse beispielhafter Rechnungen mit CYANA:

VII	VIII	IX	X	XI	Spalte
03.10.ns_2	03.10.gr_2	02.12.	09.12	24.04.	Test
1437	1437	1475	1473	1572	Zuordnungsanzahl
293	293	267	268	174	Fehlende Zuordnung ^a
83 %	83 %	85 %	85 %	90 %	Zuordnungsrate
Nein	Nein	52	Nein	Nein	Sekundärstrukturbeschränkungen
82	82	82	82	82	Kopplungskonstanten
0,02	0,02	0,02	0,03	0,03	Toleranz HX [ppm]
0,05	0,05	0,05	0,06	0,06	Toleranz H [ppm]
0,40	0,40	0,50	0,50	0,50	Toleranz X [ppm]
HNH	HNH	HNH	HNH	HNH	Spektrum
Intensität	Integral	Intensitätsfakt.	Intensitätsfakt.	Intensitätsfakt.	Signalauswertung
1362/ 452	1362/ 457	1362/ 431	1303/ 546	1303/ 535	Gesamte/ zugeordn. Signale ^b
		HCH	HCH	HCH	Spektrum
		Intensität	Intensität	Intensität	Signalauswertung
		2052/ 390	2055/ 569	2055/ 565	Gesamte/ zugeordn. Signale ^b
HCH_600	HCH_600	HCH_600	HCH_last	HCH_last	Spektrum
Intensität	Integral	Intensität	Intensität	Intensität	Signalauswertung
1742/ 396	1742/ 402	1732/ 443	2270/ 776	2270/ 807	Gesamte/ zugeordn. Signale ^b
100	100	100	100	100	Konformere
10000	10000	10000	8000	8000	Schritte
3,52 ± 0,35	5,77 ± 0,80	34,70 ± 5,54	21,76 ± 1,85	22,15 ± 3,36	Durchschnitt Fehlerfunktion [Å ²]
9,36 ± 1,62	7,37 ± 2,19	8,22 ± 1,45	3,64 ± 0,31	7,43 ± 1,21	Durchschnitt RMSD ^c [Å]
8/ 0	24/ 2	123/ 2	80/ 1	122/ 0	Verletzte Beschränkungen Abstand/ Kopplungskonstante

^a nicht zuordenbaren Atome sind bereit abgezogen^b Anzahl nach dem 7. Zyklus^c für die gesamten Schweratome

Die Listen mit den konformationellen Strukturparametern der letzten Rechnung sind auch im Anhang zu finden. Die Listen der NOE-Kreuzsignale aus den 3D-NOESY-Spektren (Seite 56 und 57), wo Lage (chemische Verschiebungswerte) und Volumen der Signale angegeben werden sollen, wurden auch alternativ mit den Signalintensitätswerten statt mit den Signalvolumina erzeugt (s. Anhang), um zu überprüfen, ob Fehler in der Integration einen Unterschied in den Ergebnissen hervorrufen (vergleiche Spalte VII und VIII). Die Werte der Signalintensitäten im ¹⁵N-NOESY-HSQC-Spektrum wurden für eine weitere Rechnung sogar mit einem Gewichtungsfaktor aus dem Intensitätsunterschied der Signale im ¹⁵N-HSQC-Spektrum variiert [136] (Spalten IX, X, und XI).

Auch nach vielfachen Änderungen, Korrekturen und Ergänzungen der Eingabedateien wurden die Voraussetzungen für einen erfolgreichen ersten Zyklus nie erreicht. Eines des besten Ergebnisses erreichte nach dem letzten Zyklus einen durchschnittlichen Wert der Fehlerfunktion von $21,76 \pm 1,85 \text{ \AA}^2$ und eine durchschnittlichen Rückgrat-RMSD von $2.84 \pm 0,35 \text{ \AA}$ (Spalte X in Tabelle 5.3). Außerdem konnte man in keinen Konformeren die erwarteten Sekundärstrukturelemente erkennen.

Die Listen aus den doppelt heteronuklear editierten NOESY-Spektren (CCH-NOESY und CNH-NOESY) konnten nicht zusammen mit den anderen NOE-Listen verwendet werden, denn CYANA unterstützt solche Listen nicht. Das Programm wurde so entwickelt, dass Protonen mindestens zwei Dimensionen besetzen sollen. Es wurde versucht, dieses Hindernis zu überwinden, indem man die Werte von C- und H-Paaren in der sequenzspezifischen Resonanzzuordnungsliste tauschte [137]. Aber der Zuordnungserfolg war so noch niedriger als mit den normalen Listen. Die gesamte in den verschiedenen Spektren erhaltene Information konnte man mit CYANA nicht gemeinsam nutzen.

Aus den Zuordnungslisten der jeweiligen Rechnungen wurden verschiedene Möglichkeiten zu Korrektur der Eingabedateien für die weiteren Rechnungen herangezogen. Die Zuordnungsrates stieg über 90%; die Toleranzbereiche wurden variiert: eingeschränkt bzw. gelockert, mehrere Listen aus den gleichen Sortenspektren getrennt bzw. paarweise verwendet. Die Rechnungen wurden abwechselnd mit und ohne konformationellen Strukturparameterlisten (Kopplungskonstanten und abgeleitete Abstandseinschränkungen aus Sekundärstrukturelementen) verwendet. Intensität und Integrale wurden als Basis für die NOE-Abstandsberechnung verglichen (s. Tabelle 5.3).

Die Verbesserungsmöglichkeiten der Eingabedateien wurden mit den wachsenden Kenntnissen über das Programm nach und nach erweitert. Aber wegen ungenügender Informationen über die Optimierung der programmeigenen Parameter konnten die Möglichkeiten zur Verbesserung der Rechnungen nicht ausgeschöpft werden. Viele Signale, die eindeutigen NOEs entsprechen, wurden nach den Programmfilterregeln eliminiert, so dass nach dem letzten Zyklus keine Zuordnungsrate von mehr als 40 % erreicht wurde. Leider war es im Rahmen dieser Dissertation nicht möglich, alle diese Parameter und Filter eigenständig und kohärent zu optimieren.

5.3 Ausblick

Leider war es nicht möglich im Rahmen dieser Doktorarbeit mit den verfügbaren Daten die Strukturanalyse des IIB^{Man}-Proteins in Lösung erfolgreich abzuschließen.

Die notwendige Optimierung der Programmparameter des neuen Programms CYANA konnte in der Zeit dieser Promotion nicht zu einem befriedigenden Ende geführt werden, zumal weder ein Manual noch ausreichend Erfahrung und Kenntnisse über das Programm vorlagen. Das Programm CYANA, das hier für die NOE-automatische Zuordnung und die Strukturberechnung verwendet wurde, wurde mittlerweile durch eine neue, ergänzte Version ersetzt (ATNOS [138]).

Weitere Möglichkeiten die Konformationsanalyse des IIB^{Man}-Proteins in der Zukunft voranzutreiben wären entweder eine weitgehend manuelle Zuordnung der NOE-Signale, oder aber der Einsatz alternativer Programmmodule zur Berechnung.

Auch neue NMR-Techniken könnten in Zukunft eingesetzt werden. Zusammen mit geeigneten Strategien der Isotopenmarkierung sollten auch neuere TROSY-basierte NMR-Techniken, RDCs, etc... deutliche Verbesserung der Methodik zu strukturellen Untersuchungen darstellen. Die Anwendungen der neuen NMR-Techniken erscheinen für die *de-novo*-Strukturbestimmung deswegen besonders attraktiv.

Forschung ist eine unendliche Geschichte.

Anhang

1 NOE-Tabellen von Omphalotin

1.1 Liste der benutzten NOEs für die Strukturberechnung

N.	δ [ppm]		Atom 1		Atom 2		Integral 1-2
	Atom 1	Atom 2	AS	Typ	AS	Typ	
1	5,30	3,92	Trp1	H ^{α}	Val5	H ^{α}	113
2	0,28	10,62	Val2	H ^{γ^2}	Trp1	H ^{N_e}	3,066
3	3,40	9,17	Trp1	H ^{β}	Trp1	H ^N	25,848
4	7,13	9,17	Trp1	H ^{δ^1}	Trp1	H ^N	2,367
5	7,86	9,17	Trp1	H ^{ϵ^3}	Trp1	H ^N	5,3317
6	0,28	9,17	Val2	H ^{γ^2}	Trp1	H ^N	1,7104
7	0,74	9,17	Val2	H ^{γ^1}	Trp1	H ^N	0,73536
8	3,92	9,17	Val2	H ^{α}	Trp1	H ^N	10
9	2,94	9,17	Val2	H ^{N_{Me}}	Trp1	H ^N	3,2229
10	0,94	9,17	Ile3	H ^{δ}	Trp1	H ^N	4,9424
11	1,26	9,17	Ile3	H ^{γ^{12}}	Trp1	H ^N	3,4851
12	1,75	9,17	Ile3	H ^{γ^{11}}	Trp1	H ^N	5,5167
13	2,29	9,17	Ile3	H ^{β}	Trp1	H ^N	1,3649
14	8,62	9,17	Ile3	H ^N	Trp1	H ^N	6,4859
15	3,22	9,17	Val4	H ^{N_{Me}}	Trp1	H ^N	1,87
16	3,31	9,17	Ile11	H ^{N_{Me}}	Trp1	H ^N	2,27
17	3,50	9,17	Gly12	H ^{α}	Trp1	H ^N	25
18	4,49	9,17	Gly12	H ^{α}	Trp1	H ^N	67,538
19	2,91	8,73	Val5	H ^{N_{Me}}	Val10	H ^N	1,231
20	3,03	8,73	Gly9	H ^{N_{Me}}	Val10	H ^N	5,3352
21	3,59	8,73	Gly9	H ^{α}	Val10	H ^N	54,259
22	4,86	8,73	Gly9	H ^{α}	Val10	H ^N	63,409
23	2,16	8,73	Val10	H ^{β}	Val10	H ^N	54,551
24	1,07	8,73	Ile11	H ^{γ^{12}}	Val10	H ^N	2,5748
25	3,31	8,73	Ile11	H ^{N_{Me}}	Val10	H ^N	3,3217
26	3,11	8,73	Gly12	H ^{N_{Me}}	Val10	H ^N	1,6868
27	5,30	8,62	Trp1	H ^{α}	Ile3	H ^N	22,115
28	3,92	8,62	Val2	H ^{α}	Ile3	H ^N	111,05
29	2,15	8,62	Val2	H ^{β}	Ile3	H ^N	5,1153
30	0,28	8,62	Val2	H ^{γ^2}	Ile3	H ^N	2,9524
31	0,74	8,62	Val2	H ^{γ^1}	Ile3	H ^N	13,728
32	2,94	8,62	Val2	H ^{N_{Me}}	Ile3	H ^N	4,6725
33	1,25	8,62	Ile3	H ^{γ^{12}}	Ile3	H ^N	21,474
34	1,75	8,62	Ile3	H ^{γ^{11}}	Ile3	H ^N	32,067
35	2,29	8,62	Ile3	H ^{β}	Ile3	H ^N	73,637
36	3,22	8,62	Val4	H ^{N_{Me}}	Ile3	H ^N	2,9963
37	3,31	8,62	Ile11	H ^{N_{Me}}	Ile3	H ^N	13,518
38	3,11	8,62	Gly12	H ^{N_{Me}}	Ile3	H ^N	2,003
39	4,49	8,62	Gly12	H ^{α}	Ile3	H ^N	6,5211
40	0,28	7,37	Val2	H ^{γ^2}	Trp1	H ^{ζ^2}	1,4647
41	5,30	7,86	Trp1	H ^{α}	Trp1	H ^{ϵ^3}	23,141
42	3,40	7,86	Trp1	H ^{β}	Trp1	H ^{ϵ^3}	7,6417
43	3,92	7,86	Val2	H ^{α}	Trp1	H ^{ϵ^3}	4,0109
44	0,74	7,86	Val2	H ^{γ^1}	Trp1	H ^{ϵ^3}	2,6221

N.	δ [ppm]		Atom 1		Atom 2		Integral 1-2
	Atom 1	Atom 2	AS	Typ	AS	Typ	
45	0,28	7,86	Val2	H $^{\gamma 2}$	Trp1	H $^{\epsilon 3}$	10,053
46	3,31	7,86	Ile11	H NMe	Trp1	H $^{\epsilon 3}$	0,81783
47	3,50	7,86	Gly12	H $^{\alpha}$	Trp1	H $^{\epsilon 3}$	1,3092
48	4,49	7,86	Gly12	H $^{\alpha}$	Trp1	H $^{\epsilon 3}$	1,1493
49	5,30	7,13	Trp1	H $^{\alpha}$	Trp1	H $^{\delta 1}$	2,2587
50	3,09	7,13	Trp1	H $^{\beta}$	Trp1	H $^{\delta 1}$	7,0263
51	3,40	7,13	Trp1	H $^{\beta}$	Trp1	H $^{\delta 1}$	13,761
52	0,28	7,13	Val2	H $^{\gamma 2}$	Trp1	H $^{\delta 1}$	5,2502
53	2,94	7,13	Val2	H NMe	Trp1	H $^{\delta 1}$	0,77775
54	5,30	0,28	Trp1	H $^{\alpha}$	Val2	H $^{\gamma 2}$	22,5
55	5,30	0,74	Trp1	H $^{\alpha}$	Val2	H $^{\gamma 1}$	6,5
56	3,40	0,28	Trp1	H $^{\beta}$	Val2	H $^{\gamma 2}$	8,1301
57	3,09	0,28	Trp1	H $^{\beta}$	Val2	H $^{\gamma 2}$	3,9936
58	2,94	0,28	Val2	H NMe	Val2	H $^{\gamma 2}$	16,949
59	2,94	0,74	Val2	H NMe	Val2	H $^{\gamma 1}$	6,0725
60	2,29	0,74	Ile3	H $^{\beta}$	Val2	H $^{\gamma 1}$	0,70331
61	3,22	0,74	Val4	H NMe	Val2	H $^{\gamma 1}$	1,7086
62	2,38	0,74	Val4	H $^{\beta}$	Val2	H $^{\gamma 1}$	3,78
64	3,31	0,28	Ile11	H NMe	Val2	H $^{\gamma 2}$	2,1941
65	3,31	0,74	Ile11	H NMe	Val2	H $^{\gamma 1}$	25,835
66	4,65	1,26	Ile3	H $^{\alpha}$	Ile3	H $^{\gamma 12}$	21,715
67	4,65	1,75	Ile3	H $^{\alpha}$	Ile3	H $^{\gamma 11}$	13,176
68	3,21	1,26	Val4	H NMe	Ile3	H $^{\gamma 12}$	1,9141
69	4,49	1,26	Gly12	H $^{\alpha}$	Ile3	H $^{\gamma 12}$	5,13
70	4,49	1,75	Gly12	H $^{\alpha}$	Ile3	H $^{\gamma 11}$	7,5513
71	5,21	1,37	Ile8	H $^{\alpha}$	Ile8	H $^{\gamma 11}$	12,735
63	4,69	0,74	Val10	H $^{\alpha}$	Val2	H $^{\gamma 1}$	3,7418
72	2,91	1,37	Val5	H NMe	Ile8	H $^{\gamma 11}$	15,224
73	2,91	1,04	Val5	H NMe	Ile8	H $^{\delta}$	11,724
74	2,98	1,11	Ile8	H NMe	Ile8	H $^{\gamma 12}$	11,909
75	2,98	1,37	Ile8	H NMe	Ile8	H $^{\gamma 11}$	16,626
76	3,03	1,00	Gly9	H NMe	Val7	H $^{\gamma 1}$	39,575
77	2,91	1,24	Val5	H NMe	Ile11	H $^{\gamma 11}$	2,2602
78	5,33	1,24	Ile11	H $^{\alpha}$	Ile11	H $^{\gamma 11}$	11,605
79	3,31	1,24	Ile11	H NMe	Ile11	H $^{\gamma 11}$	10,829
80	3,31	1,07	Ile11	H NMe	Ile11	H $^{\gamma 12}$	12,897
81	5,30	2,15	Trp1	H $^{\alpha}$	Val2	H $^{\beta}$	5,0288
82	4,49	2,29	Gly12	H $^{\alpha}$	Ile3	H $^{\beta}$	5,0725
83	4,65	2,38	Ile3	H $^{\alpha}$	Ile11	H $^{\beta}$	3,2382
84	3,31	2,29	Ile11	H NMe	Ile3	H $^{\beta}$	3
85	3,31	2,16	Ile11	H NMe	Val10	H $^{\beta}$	9,82965
86	2,16	3,31	Val10	H $^{\beta}$	Ile11	H NMe	Durchschnitt
87	2,94	2,15	Val2	H NMe	Val2	H $^{\beta}$	59,641
88	2,15	2,94	Val2	H $^{\beta}$	Val2	H NMe	Durchschnitt
89	2,91	2,21	Val5	H NMe	Ile8	H $^{\beta}$	55,195
90	2,22	2,91	Ile8	H $^{\beta}$	Val5	H NMe	Durchschnitt
91	2,98	2,33	Gly6	H NMe	Val7	H $^{\beta}$	57,926
92	2,33	2,98	Val7	H $^{\beta}$	Gly6	H NMe	Durchschnitt
93	2,98	2,40	Ile8	H NMe	Val5	H $^{\beta}$	64,69
94	2,40	2,98	Val5	H $^{\beta}$	Ile8	H NMe	Durchschnitt

N.	δ [ppm]		Atom 1		Atom 2		Integral 1-2
	Atom 1	Atom 2	AS	Typ	AS	Typ	
95	3,22	2,38	Val4	H ^{NMe}	Val4	H ^{β}	71,5375
96	2,38	3,22	Val4	H ^{β}	Val4	H ^{NMe}	Durchschnitt
97	3,31	2,39	Ile11	H ^{NMe}	Ile11	H ^{β}	59,87
98	2,39	3,31	Ile11	H ^{β}	Ile11	H ^{NMe}	Durchschnitt
99	5,25	2,91	Val5	H ^{α}	Val5	H ^{NMe}	139,37
100	4,97	2,91	Gly6	H ^{α}	Val5	H ^{NMe}	9,8029
101	3,92	2,94	Val2	H ^{α}	Val2	H ^{NMe}	10,993
102	5,25	2,98	Val5	H ^{α}	Ile8	H ^{NMe}	156,81
103	5,32	2,99	Val7	H ^{α}	Gly6	H ^{NMe}	19,92
104	5,25	2,99	Val5	H ^{α}	Gly6	H ^{NMe}	161,91
105	4,97	2,99	Gly6	H ^{α}	Gly6	H ^{NMe}	73,369
106	3,84	2,99	Gly6	H ^{α}	Gly6	H ^{NMe}	79,621
107	5,21	3,03	Ile8	H ^{α}	Gly9	H ^{NMe}	78,128
108	4,86	3,03	Gly9	H ^{α}	Gly9	H ^{NMe}	12,769
109	3,59	3,03	Gly9	H ^{α}	Gly9	H ^{NMe}	55,943
110	4,49	3,11	Gly12	H ^{α}	Gly12	H ^{NMe}	21,565
111	5,32	3,12	Val7	H ^{α}	Val7	H ^{NMe}	278,48
112	4,97	3,12	Gly6	H ^{α}	Val7	H ^{NMe}	15,552
113	3,84	3,12	Gly6	H ^{α}	Val7	H ^{NMe}	87,579
114	5,24	3,21	Val4	H ^{α}	Val4	H ^{NMe}	9,4809
115	4,65	3,21	Ile3	H ^{α}	Val4	H ^{NMe}	130,64
116	5,33	3,31	Ile11	H ^{α}	Ile11	H ^{NMe}	11,441
117	4,69	3,31	Val10	H ^{α}	Ile11	H ^{NMe}	99,913

1.2 Liste der redundanten NOEs

N.	δ [ppm]		Atom 1		Atom 2		Integral 1-2
	Atom 1	Atom 2	AS	Typ	AS	Typ	
1	5,31	9,16	Trp1	H ^{α}	Trp1	H ^N	18,422
2	5,30	3,40	Trp1	H ^{α}	Trp1	H ^{β}	22,389
3	0,28	0,74	Val2	H ^{γ2}	Val2	H ^{γ1}	66,276
4	0,75	0,28	Val2	H ^{γ1}	Val2	H ^{γ2}	60,375
5	3,92	0,28	Val2	H ^{α}	Val2	H ^{γ2}	22,84
6	3,92	0,75	Val2	H ^{α}	Val2	H ^{γ1}	35,019
7	3,91	2,15	Val2	H ^{α}	Val2	H ^{β}	14,314
8	4,65	8,60	Ile3	H ^{α}	Ile3	H ^N	20,837
9	4,65	2,30	Ile3	H ^{α}	Ile3	H ^{β}	16,314
10	2,29	1,26	Ile3	H ^{β}	Ile3	H ^{γ12}	20,292
11	2,29	1,75	Ile3	H ^{β}	Ile3	H ^{γ11}	39,369
12	5,32	2,32	Val7	H ^{α}	Val7	H ^{β}	18,992
13	5,21	2,22	Ile8	H ^{α}	Ile8	H ^{β}	19,431
14	2,22	1,38	Ile8	H ^{β}	Ile8	H ^{γ11}	43,432
15	1,38	1,03	Ile8	H ^{γ11}	Ile8	H ^{δ}	95,389
16	4,69	8,72	Val10	H ^{α}	Val10	H ^N	18,992
17	4,69	2,17	Val10	H ^{α}	Val10	H ^{β}	23,323
18	4,69	1,18	Val10	H ^{α}	Val10	H ^{γ2}	62,121
19	2,16	1,18	Val10	H ^{β}	Val10	H ^{γ2}	80,151
20	5,34	2,39	Ile11	H ^{α}	Ile11	H ^{β}	14,408
21	2,38	1,07	Ile11	H ^{β}	Ile11	H ^{γ12}	10,951
22	2,38	1,25	Ile11	H ^{β}	Ile11	H ^{γ11}	33,892

1.3 Nicht benutzte, nicht eindeutige NOEs

δ Atom 1	δ Atom 2	Atom 1		Atom 2		Integral 1-2
		AS	Typ	AS	Typ	
3,09	10,62	1/ 12	H ^{β} / H ^{NMe}	Trp1	H ^{Nc}	2,4713
3,09	9,16	1/ 12	H ^{β} / H ^{NMe}	Trp1	H ^N	32,143
0,86	8,72	11/ 4/ 7	H ^{γ2}	Val10	H ^N	2,727
1,23	8,72	3/ 11	H ^{γ1?}	Val10	H ^N	2,1478
2,39	8,60	4/ 5	H ^{β}	Ile3	H ^N	4,8027
2,17	7,86	2/ 10	H ^{β}	Trp1	H ^{ϵ3}	1,2058
3,09	7,86	1/12	H ^{β} / H ^{NMe}	Trp1	H ^{ϵ3}	24,269
3,09	1,18	1/ 12	H ^{β} / H ^{NMe}	Val10	H ^{γ}	20,658
2,15	0,75	2/ 10	H ^{β}	Val2	H ^{γ}	66,717
2,15	0,28	2/ 10	H ^{β}	Val2	H ^{γ}	49,307
1,18	10,62	Val10	H ^{γ}	Trp1	H ^{Nc}	3,9397
1,18	8,73	Val10	H ^{γ}	Val10	H ^N	51,491
1,18	7,37	Val10	H ^{γ}	Trp1	H ^{ϵ2}	2,7886
1,18	7,17	Val10	H ^{γ}	Trp1	H ^{η}	1,0405
1,18	7,09	Val10	H ^{γ}	Trp1	H ^{ϵ3}	9,8511
1,18	7,86	Val10	H ^{γ}	Trp1	H ^{ϵ3}	14,844
1,18	0,74	Val10	H ^{γ}	Val2	H ^{γ}	17,101
3,59	1,16	Gly9	H ^{α}	Val10	H ^{γ}	4,3696
5,32	1,19	Val7	H ^{α}	Val10	H ^{γ}	4,8489
3,30	1,18	Ile11	H ^{NMe}	Val10	H ^{γ}	33,493
5,52	9,16			Trp1	H ^N	5,2488
0,87	8,60			Ile3	H ^N	7,5771
0,96	8,60			Ile3	H ^N	14,171
5,52	8,60			Ile3	H ^N	3,4008
2,91	0,99	Val4	H ^{NMe}			13,887
2,98	0,98	Gly6	H ^{NMe}			28,721
3,12	0,98	Val7	H ^{NMe}			64,256
3,31	0,98	Ile11	H ^{NMe}			3,9579
3,21	0,97	Val4	H ^{NMe}			38,424
4,85	0,97	Gly9	H ^{α}			8,7765
3,84	0,90	Gly6	H ^{α}			5,3109
3,11	0,89	1/ 12	H ^{β} / H ^{NMe}			29,594
4,97	0,89	Gly6	H ^{α}			3,6965
3,21	0,87	Val4	H ^{NMe}			53,891
4,66	0,86	Ile3	H ^{α}			10,838
2,91	0,85	Val5	H ^{NMe}			21,415
4,86	0,85	Gly9	H ^{α}			3,6549
3,31	0,85	Ile11	H ^{NMe}			11,082
2,32	1,01	Val7	H ^{β}			35,0815
2,22	0,97	Ile8	H ^{β}			32,204
2,30	0,97	Ile3	H ^{β}			27,7725
2,37	0,98	Val4	H ^{β}			33,89
2,40	1,00	Val5	H ^{β}			31,203
2,39	0,89	Ile11	H ^{β}			31,527
2,37	0,86	Val4	H ^{β}			47,8495
2,33	0,87	Val7	H ^{β}			36,5345

1.4 Als Referenz benutzte NOEs

δ Atom 1	δ Atom 2	Atom 1		Atom 2		Integral 1-2	Integral 2-1
		AS	Typ	AS	Typ		
7,13	10,63	Trp1	H ^{δ1}	Trp1	H ^{Nϵ}	44,04	32,106
7,36	10,63	Trp1	H ^{ϵ3}	Trp1	H ^{Nϵ}	18,607	17,569
7,85	10,63	Trp1	H ^{ζ2}	Trp1	H ^{Nϵ}	0,37572	0,15963
7,1	7,86	Trp1	H ⁿ	Trp1	H ^{ζ2}	32,097	27,176
3,86	4,96	Gly6	H ^{α2}	Gly6	H ^{α1}	55,425	267,07
3,6	4,85	Gly9	H ^{α2}	Gly9	H ^{α1}	121,35	294,23
3,52	4,48	Gly12	H ^{α2}	Gly12	H ^{α1}	95,573	187,49

2 IIB^{Man}-Dateien für die Strukturberechnung mit CYANA

2.1 Aminosäuresequenz

#IIB^{Man} 168 AS

MET	1	ARG+	35	ALA	69	VAL	103	LYS+	137
GLY	2	ILE	36	LYS+	70	LYS+	104	LYS+	138
PRO	3	ILE	37	MET	71	ILE	105	LEU	139
ASN	4	VAL	38	ILE	72	THR	106	ASN	140
ASP-	5	VAL	39	ARG+	73	SER	107	ALA	141
TYR	6	SER	40	VAL	74	VAL	108	ARG+	142
MET	7	ASP-	41	TYR	75	ASN	109	GLY	143
VAL	8	GLU-	42	ASN	76	VAL	110	ILE	144
ILE	9	VAL	43	ASN	77	GLY	111	GLU-	145
GLY	10	ALA	44	PRO	78	GLY	112	LEU	146
LEU	11	ALA	45	LYS+	79	MET	113	GLU-	147
ALA	12	ASN	46	TYR	80	ALA	114	VAL	148
ARG+	13	THR	47	ALA	81	PHE	115	ARG+	149
ILE	14	VAL	48	GLY	82	ARG+	116	LYS+	150
ASP-	15	ARG+	49	GLU-	83	GLN	117	VAL	151
ASP-	16	LYS+	50	ARG+	84	GLY	118	SER	152
ARG+	17	THR	51	VAL	85	LYS+	119	THR	153
LEU	18	LEU	52	MET	86	THR	120	ASP-	154
ILE	19	LEU	53	LEU	87	GLN	121	PRO	155
HIS	20	THR	54	LEU	88	VAL	122	LYS+	156
GLY	21	GLN	55	PHE	89	ASN	123	LEU	157
GLN	22	VAL	56	THR	90	ASN	124	LYS+	158
VAL	23	ALA	57	ASN	91	ALA	125	MET	159
ALA	24	PRO	58	PRO	92	VAL	126	MET	160
THR	25	PRO	59	THR	93	SER	127	ASP-	161
ARG+	26	GLY	60	ASP-	94	VAL	128	LEU	162
TRP	27	VAL	61	VAL	95	ASP-	129	ILE	163
THR	28	THR	62	GLU-	96	GLU-	130	SER	164
LYS+	29	ALA	63	ARG+	97	LYS+	131	LYS+	165
GLU-	30	HIS	64	LEU	98	ASP-	132	ILE	166
THR	31	VAL	65	VAL	99	ILE	133	ASN	167
ASN	32	VAL	66	GLU-	100	GLU-	134	LYS+	168
VAL	33	ASP-	67	GLY	101	ALA	135		
SER	34	VAL	68	GLY	102	PHE	136		

2.2 Chemische Verschiebungen der sequenzspezifischen Resonanzzuordnung

N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS
1	120,51	N	1	74	999,00	QD	6	147	9,66	HN	10	220	15,61	CG2	14
2	7,92	HN	1	75	999,00	QE	6	148	45,90	CA	10	221	999,00	HG21	14
3	55,30	CA	1	76	999,00	QR	6	149	4,09	HA1	10	222	999,00	HG22	14
4	4,05	HA	1	77	999,00	CG	6	150	3,25	HA2	10	223	999,00	HG23	14
5	33,37	CB	1	78	999,00	CD1	6	151	999,00	QA	10	224	999,00	CG1	14
6	2,12	HB2	1	79	999,00	HD1	6	152	173,00	C	10	225	999,00	HG12	14
7	2,05	HB3	1	80	999,00	CE1	6	153	117,55	N	11	226	999,00	HG13	14
8	999,00	QB	1	81	999,00	HE1	6	154	7,34	HN	11	227	1,48	QG1	14
9	31,00	CG	1	82	999,00	CZ	6	155	55,05	CA	11	228	0,69	QD1	14
10	2,61	HG2	1	83	999,00	CE2	6	156	4,40	HA	11	229	15,43	CD1	14
11	2,49	HG3	1	84	999,00	HE2	6	157	45,44	CB	11	230	999,00	HD11	14
12	999,00	QG	1	85	999,00	CD2	6	158	1,83	HB2	11	231	999,00	HD12	14
13	999,00	QE	1	86	999,00	HD2	6	159	1,41	HB3	11	232	999,00	HD13	14
14	999,00	CE	1	87	999,00	HH	6	160	999,00	QB	11	233	175,40	C	14
15	999,00	HE1	1	88	177,10	C	6	161	27,09	CG	11	234	129,52	N	15
16	999,00	HE2	1	89	122,12	N	7	162	1,24	HG	11	235	9,18	HN	15
17	999,00	HE3	1	90	8,92	HN	7	163	0,84	QD1	11	236	53,44	CA	15
18	174,00	C	1	91	56,78	CA	7	164	0,44	QD2	11	237	5,41	HA	15
19	113,30	N	2	92	4,61	HA	7	165	22,32	CD1	11	238	41,25	CB	15
20	9,25	HN	2	93	33,30	CB	7	166	999,00	HD11	11	239	2,92	HB2	15
21	44,78	CA	2	94	2,30	HB2	7	167	999,00	HD12	11	240	2,57	HB3	15
22	4,35	HA1	2	95	2,05	HB3	7	168	999,00	HD13	11	241	999,00	QB	15
23	4,13	HA2	2	96	999,00	QB	7	169	26,22	CD2	11	242	999,00	CG	15
24	999,00	QA	2	97	29,25	CG	7	170	999,00	HD21	11	243	176,40	C	15
25	999,00	C	2	98	2,91	HG2	7	171	999,00	HD22	11	244	124,88	N	16
26	999,00	N	3	99	2,21	HG3	7	172	999,00	HD23	11	245	8,50	HN	16
27	49,25	CD	3	100	999,00	QG	7	173	999,00	QD	11	246	55,68	CA	16
28	64,67	CA	3	101	999,00	QE	7	174	173,00	C	11	247	4,14	HA	16
29	4,45	HA	3	102	999,00	CE	7	175	132,36	N	12	248	39,00	CB	16
30	31,88	CB	3	103	999,00	HE1	7	176	9,20	HN	12	249	3,15	HB2	16
31	2,37	HB2	3	104	999,00	HE2	7	177	50,37	CA	12	250	2,98	HB3	16
32	1,96	HB3	3	105	999,00	HE3	7	178	5,36	HA	12	251	999,00	QB	16
33	999,00	QB	3	106	173,70	C	7	179	1,53	QB	12	252	999,00	CG	16
34	26,95	CG	3	107	123,55	N	8	180	18,81	CB	12	253	177,30	C	16
35	2,06	HG2	3	108	9,20	HN	8	181	999,00	HB1	12	254	113,45	N	17
36	2,04	HG3	3	109	62,00	CA	8	182	999,00	HB2	12	255	7,63	HN	17
37	999,00	QG	3	110	4,18	HA	8	183	999,00	HB3	12	256	56,18	CA	17
38	3,71	HD2	3	111	32,54	CB	8	184	173,80	C	12	257	4,33	HA	17
39	3,67	HD3	3	112	2,02	HB	8	185	124,54	N	13	258	29,17	CB	17
40	999,00	QD	3	113	0,92	QG1	8	186	9,23	HN	13	259	1,81	HB2	17
41	178,20	C	3	114	0,88	QG2	8	187	52,96	CA	13	260	1,73	HB3	17
42	115,47	N	4	115	20,60	CG1	8	188	5,91	HA	13	261	999,00	QB	17
43	8,62	HN	4	116	999,00	HG11	8	189	33,26	CB	13	262	26,57	CG	17
44	53,33	CA	4	117	999,00	HG12	8	190	1,37	HB2	13	263	1,65	HG2	17
45	4,91	HA	4	118	999,00	HG13	8	191	1,20	HB3	13	264	1,40	HG3	17
46	38,29	CB	4	119	20,50	CG2	8	192	999,00	QB	13	265	999,00	QG	17
47	2,92	HB2	4	120	999,00	HG21	8	193	27,00	CG	13	266	43,24	CD	17
48	2,72	HB3	4	121	999,00	HG22	8	194	1,61	HG2	13	267	2,97	HD2	17
49	999,00	QB	4	122	999,00	HG23	8	195	0,97	HG3	13	268	3,18	HD3	17
50	999,00	CG	4	123	999,00	QQG	8	196	999,00	QG	13	269	999,00	QD	17
51	113,25	ND2	4	124	175,20	C	8	197	43,24	CD	13	270	999,00	NE	17
52	7,63	HD21	4	125	127,49	N	9	198	2,26	HD2	13	271	999,00	HE	17
53	6,94	HD22	4	126	8,97	HN	9	199	2,23	HD3	13	272	999,00	CZ	17
54	999,00	QD2	4	127	59,98	CA	9	200	999,00	QD	13	273	999,00	NH1	17
55	175,30	C	4	128	4,29	HA	9	201	999,00	NE	13	274	999,00	HH11	17
56	119,40	N	5	129	35,00	CB	9	202	999,00	HE	13	275	999,00	HH12	17
57	7,88	HN	5	130	2,22	HB	9	203	999,00	CZ	13	276	999,00	QH1	17
58	55,18	CA	5	131	0,83	QG2	9	204	999,00	NH1	13	277	999,00	NH2	17
59	4,59	HA	5	132	17,58	CG2	9	205	999,00	HH11	13	278	999,00	HH21	17
60	41,74	CB	5	133	999,00	HG21	9	206	999,00	HH12	13	279	999,00	HH22	17
61	2,61	HB2	5	134	999,00	HG22	9	207	999,00	QH1	13	280	999,00	QH2	17
62	2,43	HB3	5	135	999,00	HG23	9	208	999,00	NH2	13	281	176,60	C	17
63	999,00	QB	5	136	26,75	CG1	9	209	999,00	HH21	13	282	116,29	N	18
64	999,00	CG	5	137	1,47	HG12	9	210	999,00	HH22	13	283	8,41	HN	18
65	173,00	C	5	138	1,25	HG13	9	211	999,00	QH2	13	284	56,78	CA	18
66	115,25	N	6	139	999,00	QG1	9	212	175,10	C	13	285	3,66	HA	18
67	7,07	HN	6	140	0,69	QD1	9	213	125,88	N	14	286	39,64	CB	18
68	57,67	CA	6	141	11,66	CD1	9	214	9,12	HN	14	287	2,22	HB2	18
69	4,61	HA	6	142	999,00	HD11	9	215	59,98	CA	14	288	0,95	HB3	18
70	39,76	CB	6	143	999,00	HD12	9	216	4,49	HA	14	289	999,00	QB	18
71	3,06	HB2	6	144	999,00	HD13	9	217	39,03	CB	14	290	26,41	CG	18
72	3,03	HB3	6	145	176,10	C	9	218	1,69	HB	14	291	0,86	HG	18
73	999,00	QB	6	146	119,32	N	10	219	0,79	QG2	14	292	0,83	QD1	18

N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS
293	0,80	QD2	18	369	65,63	CA	23	445	999,00	CD1	27	521	22,51	CG2	31
294	23,11	CD1	18	370	3,62	HA	23	446	999,00	CD2	27	522	999,00	HG21	31
295	999,00	HD11	18	371	31,30	CB	23	447	999,00	CE3	27	523	999,00	HG22	31
296	999,00	HD12	18	372	1,62	HB	23	448	999,00	CE2	27	524	999,00	HG23	31
297	999,00	HD13	18	373	0,83	QG1	23	449	127,61	NE1	27	525	174,80	C	31
298	22,46	CD2	18	374	0,94	QG2	23	450	999,00	HD1	27	526	120,42	N	32
299	999,00	HD21	18	375	22,51	CG1	23	451	999,00	HE3	27	527	7,82	HN	32
300	999,00	HD22	18	376	999,00	HG11	23	452	999,00	CZ3	27	528	53,94	CA	32
301	999,00	HD23	18	377	999,00	HG12	23	453	999,00	CZ2	27	529	4,56	HA	32
302	999,00	QQD	18	378	999,00	HG13	23	454	9,95	HE1	27	530	37,02	CB	32
303	174,50	C	18	379	21,60	CG2	23	455	999,00	HZ3	27	531	2,56	HB2	32
304	119,72	N	19	380	999,00	HG21	23	456	999,00	CH2	27	532	3,19	HB3	32
305	6,61	HN	19	381	999,00	HG22	23	457	999,00	HZ2	27	533	999,00	QB	32
306	61,96	CA	19	382	999,00	HG23	23	458	999,00	HH2	27	534	999,00	CG	32
307	3,77	HA	19	383	999,00	QQG	23	459	179,60	C	27	535	111,50	ND2	32
308	36,81	CB	19	384	177,40	C	23	460	114,65	N	28	536	7,56	HD21	32
309	1,81	HB	19	385	117,99	N	24	461	7,92	HN	28	537	6,79	HD22	32
310	0,70	QG2	19	386	7,58	HN	24	462	66,39	CA	28	538	999,00	QD2	32
311	18,07	CG2	19	387	54,81	CA	24	463	3,82	HA	28	539	175,00	C	32
312	999,00	HG21	19	388	4,12	HA	24	464	68,37	CB	28	540	110,68	N	33
313	999,00	HG22	19	389	1,40	QB	24	465	4,14	HB	28	541	7,30	HN	33
314	999,00	HG23	19	390	18,32	CB	24	466	1,19	QG2	28	542	59,98	CA	33
315	999,00	CG1	19	391	999,00	HB1	24	467	999,00	HG1	28	543	4,61	HA	33
316	999,00	HG12	19	392	999,00	HB2	24	468	22,34	CG2	28	544	33,85	CB	33
317	999,00	HG13	19	393	999,00	HB3	24	469	999,00	HG21	28	545	2,35	HB	33
318	999,00	QG1	19	394	179,10	C	24	470	999,00	HG22	28	546	0,80	QG1	33
319	0,69	QD1	19	395	111,30	N	25	471	999,00	HG23	28	547	0,92	QG2	33
320	12,89	CD1	19	396	7,91	HN	25	472	176,10	C	28	548	21,03	CG1	33
321	999,00	HD11	19	397	63,68	CA	25	473	121,78	N	29	549	999,00	HG11	33
322	999,00	HD12	19	398	4,11	HA	25	474	7,52	HN	29	550	999,00	HG12	33
323	999,00	HD13	19	399	69,11	CB	25	475	58,75	CA	29	551	999,00	HG13	33
324	999,00	C	19	400	4,25	HB	25	476	4,22	HA	29	552	20,78	CG2	33
325	122,21	N	20	401	1,22	QG2	25	477	32,04	CB	29	553	999,00	HG21	33
326	7,13	HN	20	402	999,00	HG1	25	478	999,00	HB2	29	554	999,00	HG22	33
327	54,07	CA	20	403	21,52	CG2	25	479	999,00	HB3	29	555	999,00	HG23	33
328	4,83	HA	20	404	999,00	HG21	25	480	1,92	QB	29	556	999,00	QQG	33
329	31,63	CB	20	405	999,00	HG22	25	481	24,30	CG	29	557	175,40	C	33
330	3,17	HB2	20	406	999,00	HG23	25	482	999,00	HG2	29	558	112,64	N	34
331	3,07	HB3	20	407	175,50	C	25	483	999,00	HG3	29	559	8,92	HN	34
332	999,00	QB	20	408	121,80	N	26	484	1,48	QG	29	560	58,26	CA	34
333	999,00	CG	20	409	8,05	HN	26	485	28,80	CD	29	561	4,88	HA	34
334	999,00	ND1	20	410	59,24	CA	26	486	999,00	HD2	29	562	64,39	CB	34
335	999,00	CD2	20	411	4,22	HA	26	487	999,00	HD3	29	563	4,26	HB2	34
336	999,00	HD1	20	412	30,30	CB	26	488	1,70	QD	29	564	3,88	HB3	34
337	999,00	CE1	20	413	999,00	HB2	26	489	41,98	CE	29	565	999,00	QB	34
338	999,00	NE2	20	414	999,00	HB3	26	490	999,00	HE2	29	566	999,00	HG	34
339	999,00	HD2	20	415	1,95	QB	26	491	999,00	HE3	29	567	174,60	C	34
340	999,00	HE1	20	416	999,00	CG	26	492	3,00	QE	29	568	120,54	N	35
341	999,00	C	20	417	999,00	HG2	26	493	999,00	NZ	29	569	7,45	HN	35
342	119,75	N	21	418	999,00	HG3	26	494	999,00	HZ1	29	570	54,93	CA	35
343	8,15	HN	21	419	1,87	QG	26	495	999,00	HZ2	29	571	5,48	HA	35
344	44,46	CA	21	420	42,97	CD	26	496	999,00	HZ3	29	572	35,03	CB	35
345	4,48	HA1	21	421	999,00	HD2	26	497	999,00	QZ	29	573	999,00	HB2	35
346	4,02	HA2	21	422	999,00	HD3	26	498	180,10	C	29	574	999,00	HB3	35
347	999,00	QA	21	423	3,13	QD	26	499	117,93	N	30	575	1,66	QB	35
348	999,00	C	21	424	999,00	NE	26	500	8,38	HN	30	576	999,00	CG	35
349	999,00	N	22	425	999,00	HE	26	501	58,50	CA	30	577	999,00	HG2	35
350	999,00	HN	22	426	999,00	CZ	26	502	4,08	HA	30	578	999,00	HG3	35
351	59,49	CA	22	427	999,00	NH1	26	503	29,90	CB	30	579	1,62	QG	35
352	4,38	HA	22	428	999,00	HH11	26	504	999,00	HB2	30	580	42,99	CD	35
353	31,61	CB	22	429	999,00	HH12	26	505	999,00	HB3	30	581	999,00	HD2	35
354	999,00	HB2	22	430	999,00	QH1	26	506	1,96	QB	30	582	999,00	HD3	35
355	999,00	HB3	22	431	999,00	NH2	26	507	36,11	CG	30	583	2,49	QD	35
356	2,31	QB	22	432	999,00	HH21	26	508	999,00	HG2	30	584	999,00	NE	35
357	999,00	CG	22	433	999,00	HH22	26	509	999,00	HG3	30	585	999,00	HE	35
358	2,83	HG2	22	434	999,00	QH2	26	510	2,31	QG	30	586	999,00	CZ	35
359	2,36	HG3	22	435	178,40	C	26	511	999,00	CD	30	587	999,00	NH1	35
360	999,00	QG	22	436	116,46	N	27	512	178,30	C	30	588	999,00	HH11	35
361	999,00	CD	22	437	8,27	HN	27	513	106,00	N	31	589	999,00	HH12	35
362	111,42	NE2	22	438	61,71	CA	27	514	7,57	HN	31	590	999,00	QH1	35
363	6,97	HE21	22	439	4,40	HA	27	515	62,20	CA	31	591	999,00	NH2	35
364	6,64	HE22	22	440	29,17	CB	27	516	4,52	HA	31	592	999,00	HH21	35
365	999,00	QE2	22	441	3,18	HB2	27	517	69,60	CB	31	593	999,00	HH22	35
366	179,60	C	22	442	3,35	HB3	27	518	4,18	HB	31	594	999,00	QH2	35
367	119,80	N	23	443	999,00	QB	27	519	1,51	QG2	31	595	174,70	C	35
368	8,23	HN	23	444	999,00	CG	27	520	999,00	HG1	31	596	124,20	N	36

N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS
597	9,06	HN	36	673	175,10	C	39	749	4,37	HA	46	825	999,00	HB3	50
598	59,98	CA	36	674	118,44	N	40	750	41,50	CB	46	826	1,92	QB	50
599	4,83	HA	36	675	8,52	HN	40	751	2,45	HB2	46	827	24,45	CG	50
600	41,49	CB	36	676	57,76	CA	40	752	3,57	HB3	46	828	999,00	HG2	50
601	1,44	HB	36	677	4,40	HA	40	753	999,00	QB	46	829	999,00	HG3	50
602	0,70	QG2	36	678	63,93	CB	40	754	999,00	CG	46	830	1,44	QG	50
603	17,67	CG2	36	679	3,83	HB2	40	755	999,00	ND2	46	831	29,00	CD	50
604	999,00	HG21	36	680	3,22	HB3	40	756	999,00	HD21	46	832	999,00	HD2	50
605	999,00	HG22	36	681	999,00	QB	40	757	999,00	HD22	46	833	999,00	HD3	50
606	999,00	HG23	36	682	999,00	HG	40	758	999,00	QD2	46	834	1,70	QD	50
607	26,70	CG1	36	683	174,20	C	40	759	175,00	C	46	835	42,35	CE	50
608	1,07	HG12	36	684	132,83	N	41	760	119,15	N	47	836	999,00	HE2	50
609	1,48	HG13	36	685	9,85	HN	41	761	8,27	HN	47	837	999,00	HE3	50
610	999,00	QG1	36	686	57,42	CA	41	762	66,39	CA	47	838	3,00	QE	50
611	0,70	QD1	36	687	3,75	HA	41	763	3,80	HA	47	839	999,00	NZ	50
612	13,63	CD1	36	688	45,48	CB	41	764	68,61	CB	47	840	999,00	HZ1	50
613	999,00	HD11	36	689	2,19	HB2	41	765	4,21	HB	47	841	999,00	HZ2	50
614	999,00	HD12	36	690	1,87	HB3	41	766	1,28	QG2	47	842	999,00	HZ3	50
615	999,00	HD13	36	691	999,00	QB	41	767	999,00	HG1	47	843	999,00	QZ	50
616	174,60	C	36	692	999,00	CG	41	768	21,77	CG2	47	844	178,30	C	50
617	126,72	N	37	693	999,00	C	41	769	999,00	HG21	47	845	116,15	N	51
618	9,27	HN	37	694	122,12	N	42	770	999,00	HG22	47	846	7,76	HN	51
619	60,00	CA	37	695	8,02	HN	42	771	999,00	HG23	47	847	66,39	CA	51
620	4,72	HA	37	696	57,20	CA	42	772	176,70	C	47	848	3,96	HA	51
621	39,25	CB	37	697	4,10	HA	42	773	122,88	N	48	849	68,86	CB	51
622	1,69	HB	37	698	32,62	CB	42	774	8,13	HN	48	850	4,33	HB	51
623	0,66	QG2	37	699	2,17	HB2	42	775	66,39	CA	48	851	1,22	QG2	51
624	19,00	CG2	37	700	2,05	HB3	42	776	3,75	HA	48	852	999,00	HG1	51
625	999,00	HG21	37	701	999,00	QB	42	777	31,55	CB	48	853	21,28	CG2	51
626	999,00	HG22	37	702	34,10	CG	42	778	2,15	HB	48	854	999,00	HG21	51
627	999,00	HG23	37	703	999,00	HG2	42	779	0,96	QG1	48	855	999,00	HG22	51
628	27,00	CG1	37	704	999,00	HG3	42	780	1,03	QG2	48	856	999,00	HG23	51
629	1,27	HG12	37	705	2,50	QG	42	781	19,36	CG1	48	857	176,40	C	51
630	0,59	HG13	37	706	999,00	CD	42	782	999,00	HG11	48	858	122,35	N	52
631	999,00	QG1	37	707	178,40	C	42	783	999,00	HG12	48	859	7,76	HN	52
632	0,41	QD1	37	708	120,71	N	43	784	999,00	HG13	48	860	57,39	CA	52
633	13,15	CD1	37	709	7,77	HN	43	785	20,04	CG2	48	861	4,13	HA	52
634	999,00	HD11	37	710	66,64	CA	43	786	999,00	HG21	48	862	40,84	CB	52
635	999,00	HD12	37	711	3,75	HA	43	787	999,00	HG22	48	863	2,03	HB2	52
636	999,00	HD13	37	712	32,37	CB	43	788	999,00	HG23	48	864	1,30	HB3	52
637	175,20	C	37	713	1,92	HB	43	789	999,00	QQG	48	865	999,00	QB	52
638	128,42	N	38	714	0,92	QG1	43	790	178,30	C	48	866	26,70	CG	52
639	9,15	HN	38	715	1,09	QG2	43	791	121,06	N	49	867	1,83	HG	52
640	61,71	CA	38	716	20,29	CG1	43	792	7,74	HN	49	868	999,00	QD1	52
641	4,21	HA	38	717	999,00	HG11	43	793	59,49	CA	49	869	999,00	QD2	52
642	32,00	CB	38	718	999,00	HG12	43	794	3,97	HA	49	870	24,33	CD1	52
643	2,22	HB	38	719	999,00	HG13	43	795	31,20	CB	49	871	999,00	HD11	52
644	0,82	QG1	38	720	999,00	CG2	43	796	1,81	HB2	49	872	999,00	HD12	52
645	0,97	QG2	38	721	999,00	HG21	43	797	1,71	HB3	49	873	999,00	HD13	52
646	21,03	CG1	38	722	999,00	HG22	43	798	999,00	QB	49	874	24,33	CD2	52
647	999,00	HG11	38	723	999,00	HG23	43	799	27,80	CG	49	875	999,00	HD21	52
648	999,00	HG12	38	724	999,00	QQG	43	800	999,00	HG2	49	876	999,00	HD22	52
649	999,00	HG13	38	725	174,40	C	43	801	999,00	HG3	49	877	999,00	HD23	52
650	999,00	CG2	38	726	120,08	N	44	802	1,79	QG	49	878	0,87	QQD	52
651	999,00	HG21	38	727	7,92	HN	44	803	43,96	CD	49	879	179,70	C	52
652	999,00	HG22	38	728	54,81	CA	44	804	999,00	HD2	49	880	118,12	N	53
653	999,00	HG23	38	729	3,74	HA	44	805	999,00	HD3	49	881	8,03	HN	53
654	999,00	QQG	38	730	1,36	QB	44	806	3,16	QD	49	882	57,46	CA	53
655	173,70	C	38	731	17,58	CB	44	807	999,00	NE	49	883	4,05	HA	53
656	129,96	N	39	732	999,00	HB1	44	808	999,00	HE	49	884	41,99	CB	53
657	8,62	HN	39	733	999,00	HB2	44	809	999,00	CZ	49	885	1,86	HB2	53
658	59,98	CA	39	734	999,00	HB3	44	810	999,00	NH1	49	886	1,22	HB3	53
659	4,50	HA	39	735	178,00	C	44	811	999,00	HH11	49	887	999,00	QB	53
660	30,65	CB	39	736	116,82	N	45	812	999,00	HH12	49	888	26,65	CG	53
661	1,62	HB	39	737	6,93	HN	45	813	999,00	QH1	49	889	0,76	HG	53
662	0,49	QG1	39	738	52,09	CA	45	814	999,00	NH2	49	890	999,00	QD1	53
663	0,70	QG2	39	739	4,39	HA	45	815	999,00	HH21	49	891	999,00	QD2	53
664	20,78	CG1	39	740	1,48	QB	45	816	999,00	HH22	49	892	24,47	CD1	53
665	999,00	HG11	39	741	18,81	CB	45	817	999,00	QH2	49	893	999,00	HD11	53
666	999,00	HG12	39	742	999,00	HB1	45	818	178,90	C	49	894	999,00	HD12	53
667	999,00	HG13	39	743	999,00	HB2	45	819	118,05	N	50	895	999,00	HD13	53
668	21,28	CG2	39	744	999,00	HB3	45	820	8,74	HN	50	896	24,47	CD2	53
669	999,00	HG21	39	745	176,70	C	45	821	60,30	CA	50	897	999,00	HD21	53
670	999,00	HG22	39	746	121,16	N	46	822	3,83	HA	50	898	999,00	HD22	53
671	999,00	HG23	39	747	7,55	HN	46	823	31,55	CB	50	899	999,00	HD23	53
672	999,00	QQG	39	748	52,10	CA	46	824	999,00	HB2	50	900	0,87	QQD	53

N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS
901	177,90	C	53	977	999,00	N	59	1053	999,00	CE1	64	1129	999,00	HB2	69
902	106,64	N	54	978	49,88	CD	59	1054	999,00	NE2	64	1130	999,00	HB3	69
903	7,48	HN	54	979	63,93	CA	59	1055	999,00	HD2	64	1131	181,50	C	69
904	64,42	CA	54	980	4,33	HA	59	1056	999,00	HE1	64	1132	120,68	N	70
905	3,96	HA	54	981	31,40	CB	59	1057	173,60	C	64	1133	8,42	HN	70
906	69,35	CB	54	982	2,28	HB2	59	1058	122,52	N	65	1134	59,00	CA	70
907	4,38	HB	54	983	1,88	HB3	59	1059	8,87	HN	65	1135	3,98	HA	70
908	1,27	QG2	54	984	999,00	QB	59	1060	60,97	CA	65	1136	32,40	CB	70
909	999,00	HG1	54	985	27,32	CG	59	1061	5,00	HA	65	1137	999,00	HB2	70
910	21,28	CG2	54	986	2,07	HG2	59	1062	33,60	CB	65	1138	999,00	HB3	70
911	999,00	HG21	54	987	2,03	HG3	59	1063	1,87	HB	65	1139	1,84	QB	70
912	999,00	HG22	54	988	999,00	QG	59	1064	0,83	QG1	65	1140	999,00	CG	70
913	999,00	HG23	54	989	3,82	HD2	59	1065	0,70	QG2	65	1141	999,00	HG2	70
914	176,70	C	54	990	3,56	HD3	59	1066	20,54	CG1	65	1142	999,00	HG3	70
915	119,25	N	55	991	999,00	QD	59	1067	999,00	HG11	65	1143	999,00	QG	70
916	7,62	HN	55	992	178,30	C	59	1068	999,00	HG12	65	1144	999,00	CD	70
917	57,52	CA	55	993	111,63	N	60	1069	999,00	HG13	65	1145	999,00	HD2	70
918	4,33	HA	55	994	8,72	HN	60	1070	20,54	CG2	65	1146	999,00	HD3	70
919	28,59	CB	55	995	45,50	CA	60	1071	999,00	HG21	65	1147	999,00	QD	70
920	1,96	HB2	55	996	4,16	HA1	60	1072	999,00	HG22	65	1148	999,00	CE	70
921	1,68	HB3	55	997	3,72	HA2	60	1073	999,00	HG23	65	1149	999,00	HE2	70
922	999,00	QB	55	998	999,00	QA	60	1074	999,00	QQG	65	1150	999,00	HE3	70
923	33,82	CG	55	999	173,80	C	60	1075	175,00	C	65	1151	999,00	QE	70
924	2,74	HG2	55	1000	120,62	N	61	1076	120,48	N	66	1152	999,00	NZ	70
925	2,59	HG3	55	1001	7,81	HN	61	1077	9,22	HN	66	1153	999,00	HZ1	70
926	999,00	QG	55	1002	59,98	CA	61	1078	58,41	CA	66	1154	999,00	HZ2	70
927	999,00	CD	55	1003	4,61	HA	61	1079	4,78	HA	66	1155	999,00	HZ3	70
928	111,50	NE2	55	1004	34,10	CB	61	1080	36,07	CB	66	1156	999,00	QZ	70
929	7,39	HE21	55	1005	1,96	HB	61	1081	2,13	HB	66	1157	178,20	C	70
930	6,80	HE22	55	1006	0,75	QG1	61	1082	0,77	QG1	66	1158	119,12	N	71
931	999,00	QE2	55	1007	999,00	QG2	61	1083	0,69	QG2	66	1159	8,38	HN	71
932	177,30	C	55	1008	20,78	CG1	61	1084	21,77	CG1	66	1160	56,60	CA	71
933	113,11	N	56	1009	999,00	HG11	61	1085	999,00	HG11	66	1161	4,48	HA	71
934	7,33	HN	56	1010	999,00	HG12	61	1086	999,00	HG12	66	1162	31,38	CB	71
935	61,22	CA	56	1011	999,00	HG13	61	1087	999,00	HG13	66	1163	1,90	HB2	71
936	4,38	HA	56	1012	999,00	CG2	61	1088	20,29	CG2	66	1164	1,83	HB3	71
937	31,63	CB	56	1013	999,00	HG21	61	1089	999,00	HG21	66	1165	999,00	QB	71
938	2,31	HB	56	1014	999,00	HG22	61	1090	999,00	HG22	66	1166	34,21	CG	71
939	0,92	QG1	56	1015	999,00	HG23	61	1091	999,00	HG23	66	1167	999,00	HG2	71
940	0,96	QG2	56	1016	999,00	QQG	61	1092	999,00	QQG	66	1168	999,00	HG3	71
941	20,78	CG1	56	1017	173,30	C	61	1093	172,80	C	66	1169	3,03	QG	71
942	999,00	HG11	56	1018	117,16	N	62	1094	118,40	N	67	1170	999,00	QE	71
943	999,00	HG12	56	1019	7,72	HN	62	1095	7,66	HN	67	1171	999,00	CE	71
944	999,00	HG13	56	1020	61,22	CA	62	1096	51,95	CA	67	1172	999,00	HE1	71
945	19,30	CG2	56	1021	4,44	HA	62	1097	4,40	HA	67	1173	999,00	HE2	71
946	999,00	HG21	56	1022	69,85	CB	62	1098	41,00	CB	67	1174	999,00	HE3	71
947	999,00	HG22	56	1023	4,03	HB	62	1099	3,57	HB2	67	1175	177,80	C	71
948	999,00	HG23	56	1024	1,14	QG2	62	1100	2,49	HB3	67	1176	119,26	N	72
949	999,00	QQG	56	1025	999,00	HG1	62	1101	999,00	QB	67	1177	7,73	HN	72
950	174,90	C	56	1026	21,60	CG2	62	1102	999,00	CG	67	1178	66,39	CA	72
951	124,80	N	57	1027	999,00	HG21	62	1103	175,10	C	67	1179	3,40	HA	72
952	7,21	HN	57	1028	999,00	HG22	62	1104	119,38	N	68	1180	37,84	CB	72
953	50,62	CA	57	1029	999,00	HG23	62	1105	8,36	HN	68	1181	2,01	HB	72
954	4,17	HA	57	1030	172,70	C	62	1106	67,87	CA	68	1182	0,93	QG2	72
955	1,31	QB	57	1031	125,66	N	63	1107	3,20	HA	68	1183	17,09	CG2	72
956	17,33	CB	57	1032	8,48	HN	63	1108	31,38	CB	68	1184	999,00	HG21	72
957	999,00	HB1	57	1033	49,63	CA	63	1109	2,05	HB	68	1185	999,00	HG22	72
958	999,00	HB2	57	1034	5,71	HA	63	1110	0,79	QG1	68	1186	999,00	HG23	72
959	999,00	HB3	57	1035	1,09	QB	63	1111	0,93	QG2	68	1187	999,00	CG1	72
960	174,40	C	57	1036	21,77	CB	63	1112	21,54	CG1	68	1188	999,00	HG12	72
961	999,00	N	58	1037	999,00	HB1	63	1113	999,00	HG11	68	1189	999,00	HG13	72
962	49,40	CD	58	1038	999,00	HB2	63	1114	999,00	HG12	68	1190	999,00	QG1	72
963	61,17	CA	58	1039	999,00	HB3	63	1115	999,00	HG13	68	1191	0,88	QD1	72
964	4,68	HA	58	1040	175,60	C	63	1116	999,00	CG2	68	1192	12,66	CD1	72
965	30,24	CB	58	1041	118,30	N	64	1117	999,00	HG21	68	1193	999,00	HD11	72
966	2,39	HB2	58	1042	8,51	HN	64	1118	999,00	HG22	68	1194	999,00	HD12	72
967	1,86	HB3	58	1043	54,07	CA	64	1119	999,00	HG23	68	1195	999,00	HD13	72
968	999,00	QB	58	1044	4,78	HA	64	1120	999,00	QQG	68	1196	178,00	C	72
969	26,87	CG	58	1045	33,36	CB	64	1121	177,30	C	68	1197	118,24	N	73
970	2,08	HG2	58	1046	3,09	HB2	64	1122	119,85	N	69	1198	7,62	HN	73
971	1,87	HG3	58	1047	2,69	HB3	64	1123	8,51	HN	69	1199	59,98	CA	73
972	999,00	QG	58	1048	999,00	QB	64	1124	55,30	CA	69	1200	4,22	HA	73
973	3,61	HD2	58	1049	999,00	CG	64	1125	3,97	HA	69	1201	30,30	CB	73
974	3,26	HD3	58	1050	999,00	ND1	64	1126	1,40	QB	69	1202	999,00	HB2	73
975	999,00	QD	58	1051	999,00	CD2	64	1127	17,33	CB	69	1203	999,00	HB3	73
976	999,00	C	58	1052	999,00	HD1	64	1128	999,00	HB1	69	1204	1,93	QB	73

N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS
1205	33,45	CG	73	1281	7,82	HN	77	1357	999,00	HH	80	1433	999,00	HG23	85
1206	999,00	HG2	73	1282	50,37	CA	77	1358	174,40	C	80	1434	999,00	QQG	85
1207	999,00	HG3	73	1283	5,10	HA	77	1359	121,42	N	81	1435	175,20	C	85
1208	2,18	QG	73	1284	40,01	CB	77	1360	7,12	HN	81	1436	124,67	N	86
1209	43,45	CD	73	1285	2,92	HB2	77	1361	54,07	CA	81	1437	8,75	HN	86
1210	999,00	HD2	73	1286	3,65	HB3	77	1362	3,37	HA	81	1438	53,08	CA	86
1211	999,00	HD3	73	1287	999,00	QB	77	1363	1,35	QB	81	1439	5,32	HA	86
1212	3,22	QD	73	1288	999,00	CG	77	1364	18,56	CB	81	1440	36,32	CB	86
1213	999,00	NE	73	1289	999,00	ND2	77	1365	999,00	HB1	81	1441	999,00	HB2	86
1214	999,00	HE	73	1290	999,00	HD21	77	1366	999,00	HB2	81	1442	999,00	HB3	86
1215	999,00	CZ	73	1291	999,00	HD22	77	1367	999,00	HB3	81	1443	2,05	QB	86
1216	999,00	NH1	73	1292	999,00	QD2	77	1368	179,50	C	81	1444	30,40	CG	86
1217	999,00	HH11	73	1293	999,00	C	77	1369	110,72	N	82	1445	2,40	HG2	86
1218	999,00	HH12	73	1294	999,00	N	78	1370	7,99	HN	82	1446	1,88	HG3	86
1219	999,00	QH1	73	1295	31,35	CD	78	1371	45,50	CA	82	1447	999,00	QG	86
1220	999,00	NH2	73	1296	63,93	CA	78	1372	4,22	HA1	82	1448	999,00	QE	86
1221	999,00	HH21	73	1297	4,49	HA	78	1373	3,66	HA2	82	1449	999,00	CE	86
1222	999,00	HH22	73	1298	31,89	CB	78	1374	999,00	QA	82	1450	999,00	HE1	86
1223	999,00	QH2	73	1299	2,18	HB2	78	1375	174,10	C	82	1451	999,00	HE2	86
1224	180,30	C	73	1300	1,98	HB3	78	1376	122,48	N	83	1452	999,00	HE3	86
1225	122,01	N	74	1301	999,00	QB	78	1377	8,10	HN	83	1453	174,00	C	86
1226	8,91	HN	74	1302	26,26	CG	78	1378	57,27	CA	83	1454	126,40	N	87
1227	66,13	CA	74	1303	1,96	HG2	78	1379	4,21	HA	83	1455	9,05	HN	87
1228	3,77	HA	74	1304	1,86	HG3	78	1380	30,50	CB	83	1456	52,61	CA	87
1229	31,63	CB	74	1305	999,00	QG	78	1381	2,09	HB2	83	1457	5,33	HA	87
1230	2,24	HB	74	1306	3,85	HD2	78	1382	2,05	HB3	83	1458	44,16	CB	87
1231	0,62	QG1	74	1307	3,99	HD3	78	1383	999,00	QB	83	1459	1,75	HB2	87
1232	0,93	QG2	74	1308	999,00	QD	78	1384	36,81	CG	83	1460	1,01	HB3	87
1233	20,80	CG1	74	1309	177,80	C	78	1385	2,25	HG2	83	1461	999,00	QB	87
1234	999,00	HG11	74	1310	121,82	N	79	1386	2,15	HG3	83	1462	27,27	CG	87
1235	999,00	HG12	74	1311	8,19	HN	79	1387	999,00	QG	83	1463	1,71	HG	87
1236	999,00	HG13	74	1312	58,50	CA	79	1388	999,00	CD	83	1464	0,85	QD1	87
1237	22,51	CG2	74	1313	3,88	HA	79	1389	175,70	C	83	1465	0,75	QD2	87
1238	999,00	HG21	74	1314	31,88	CB	79	1390	123,66	N	84	1466	25,99	CD1	87
1239	999,00	HG22	74	1315	1,44	HB2	79	1391	9,03	HN	84	1467	999,00	HD11	87
1240	999,00	HG23	74	1316	0,84	HB3	79	1392	55,93	CA	84	1468	999,00	HD12	87
1241	999,00	QQG	74	1317	999,00	QB	79	1393	5,14	HA	84	1469	999,00	HD13	87
1242	177,50	C	74	1318	23,60	CG	79	1394	31,88	CB	84	1470	23,25	CD2	87
1243	118,89	N	75	1319	0,68	HG2	79	1395	2,12	HB2	84	1471	999,00	HD21	87
1244	8,66	HN	75	1320	0,64	HG3	79	1396	1,69	HB3	84	1472	999,00	HD22	87
1245	60,97	CA	75	1321	999,00	QG	79	1397	999,00	QB	84	1473	999,00	HD23	87
1246	4,26	HA	75	1322	28,92	CD	79	1398	27,48	CG	84	1474	999,00	QQD	87
1247	39,03	CB	75	1323	1,36	HD2	79	1399	1,79	HG2	84	1475	175,00	C	87
1248	999,00	HB2	75	1324	1,30	HD3	79	1400	1,50	HG3	84	1476	123,35	N	88
1249	999,00	HB3	75	1325	999,00	QD	79	1401	999,00	QG	84	1477	8,57	HN	88
1250	3,09	QB	75	1326	41,75	CE	79	1402	42,73	CD	84	1478	52,50	CA	88
1251	999,00	QD	75	1327	999,00	HE2	79	1403	3,63	HD2	84	1479	5,52	HA	88
1252	999,00	QE	75	1328	999,00	HE3	79	1404	3,32	HD3	84	1480	46,72	CB	88
1253	999,00	QR	75	1329	2,74	QE	79	1405	999,00	QD	84	1481	1,36	HB2	88
1254	999,00	CG	75	1330	999,00	NZ	79	1406	999,00	NE	84	1482	1,31	HB3	88
1255	999,00	CD1	75	1331	999,00	HZ1	79	1407	999,00	HE	84	1483	999,00	QB	88
1256	999,00	HD1	75	1332	999,00	HZ2	79	1408	999,00	CZ	84	1484	27,00	CG	88
1257	999,00	CE1	75	1333	999,00	HZ3	79	1409	999,00	NH1	84	1485	1,31	HG	88
1258	999,00	HE1	75	1334	999,00	QZ	79	1410	999,00	HH11	84	1486	0,91	QD1	88
1259	999,00	CZ	75	1335	177,10	C	79	1411	999,00	HH12	84	1487	0,64	QD2	88
1260	999,00	CE2	75	1336	116,09	N	80	1412	999,00	QH1	84	1488	23,75	CD1	88
1261	999,00	HE2	75	1337	6,98	HN	80	1413	999,00	NH2	84	1489	999,00	HD11	88
1262	999,00	CD2	75	1338	56,30	CA	80	1414	999,00	HH21	84	1490	999,00	HD12	88
1263	999,00	HD2	75	1339	4,61	HA	80	1415	999,00	HH22	84	1491	999,00	HD13	88
1264	999,00	HH	75	1340	38,02	CB	80	1416	999,00	QH2	84	1492	26,25	CD2	88
1265	176,20	C	75	1341	999,00	HB2	80	1417	176,40	C	84	1493	999,00	HD21	88
1266	112,60	N	76	1342	999,00	HB3	80	1418	118,81	N	85	1494	999,00	HD22	88
1267	7,27	HN	76	1343	3,38	QB	80	1419	9,07	HN	85	1495	999,00	HD23	88
1268	53,69	CA	76	1344	999,00	QD	80	1420	59,16	CA	85	1496	999,00	QQD	88
1269	4,61	HA	76	1345	999,00	QE	80	1421	5,21	HA	85	1497	173,80	C	88
1270	40,20	CB	76	1346	999,00	QR	80	1422	35,33	CB	85	1498	117,08	N	89
1271	3,06	HB2	76	1347	999,00	CG	80	1423	1,91	HB	85	1499	8,74	HN	89
1272	2,79	HB3	76	1348	999,00	CD1	80	1424	0,79	QG1	85	1500	54,56	CA	89
1273	999,00	QB	76	1349	999,00	HD1	80	1425	0,89	QG2	85	1501	5,10	HA	89
1274	999,00	CG	76	1350	999,00	CE1	80	1426	20,78	CG1	85	1502	43,71	CB	89
1275	999,00	ND2	76	1351	999,00	HE1	80	1427	999,00	HG11	85	1503	3,70	HB2	89
1276	999,00	HD21	76	1352	999,00	CZ	80	1428	999,00	HG12	85	1504	2,40	HB3	89
1277	999,00	HD22	76	1353	999,00	CE2	80	1429	999,00	HG13	85	1505	999,00	QB	89
1278	999,00	QD2	76	1354	999,00	HE2	80	1430	20,29	CG2	85	1506	999,00	QD	89
1279	173,00	C	76	1355	999,00	CD2	80	1431	999,00	HG21	85	1507	999,00	QE	89
1280	120,74	N	77	1356	999,00	HD2	80	1432	999,00	HG22	85	1508	999,00	QR	89

N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS
1509	999,00	CG	89	1585	999,00	CG	94	1661	999,00	HD12	98	1737	30,65	CB	104
1510	999,00	CD1	89	1586	177,00	C	94	1662	999,00	HD13	98	1738	1,75	HB2	104
1511	999,00	HD1	89	1587	118,16	N	95	1663	25,63	CD2	98	1739	1,62	HB3	104
1512	999,00	CE1	89	1588	6,42	HN	95	1664	999,00	HD21	98	1740	999,00	QB	104
1513	999,00	HE1	89	1589	65,39	CA	95	1665	999,00	HD22	98	1741	24,24	CG	104
1514	999,00	CZ	89	1590	2,84	HA	95	1666	999,00	HD23	98	1742	999,00	HG2	104
1515	999,00	HZ	89	1591	29,78	CB	95	1667	999,00	QOD	98	1743	999,00	HG3	104
1516	999,00	CE2	89	1592	1,87	HB	95	1668	179,00	C	98	1744	1,27	QG	104
1517	999,00	HE2	89	1593	0,44	QG1	95	1669	120,52	N	99	1745	999,00	CD	104
1518	999,00	CD2	89	1594	-0,43	QG2	95	1670	8,30	HN	99	1746	999,00	HD2	104
1519	999,00	HD2	89	1595	21,52	CG1	95	1671	65,63	CA	99	1747	999,00	HD3	104
1520	176,00	C	89	1596	999,00	HG11	95	1672	4,07	HA	99	1748	1,40	QD	104
1521	108,98	N	90	1597	999,00	HG12	95	1673	31,38	CB	99	1749	999,00	CE	104
1522	10,47	HN	90	1598	999,00	HG13	95	1674	1,94	HB	99	1750	999,00	HE2	104
1523	61,96	CA	90	1599	19,30	CG2	95	1675	0,88	QG1	99	1751	999,00	HE3	104
1524	4,39	HA	90	1600	999,00	HG21	95	1676	0,92	QG2	99	1752	2,96	QE	104
1525	69,85	CB	90	1601	999,00	HG22	95	1677	22,59	CG1	99	1753	999,00	NZ	104
1526	4,68	HB	90	1602	999,00	HG23	95	1678	999,00	HG11	99	1754	999,00	HZ1	104
1527	1,22	QG2	90	1603	999,00	QQG	95	1679	999,00	HG12	99	1755	999,00	HZ2	104
1528	999,00	HG1	90	1604	177,30	C	95	1680	999,00	HG13	99	1756	999,00	HZ3	104
1529	21,84	CG2	90	1605	121,08	N	96	1681	20,54	CG2	99	1757	999,00	QZ	104
1530	999,00	HG21	90	1606	7,27	HN	96	1682	999,00	HG21	99	1758	174,40	C	104
1531	999,00	HG22	90	1607	58,50	CA	96	1683	999,00	HG22	99	1759	127,06	N	105
1532	999,00	HG23	90	1608	4,15	HA	96	1684	999,00	HG23	99	1760	7,27	HN	105
1533	173,70	C	90	1609	27,44	CB	96	1685	999,00	QQG	99	1761	60,48	CA	105
1534	114,56	N	91	1610	999,00	HB2	96	1686	181,70	C	99	1762	4,17	HA	105
1535	7,52	HN	91	1611	999,00	HB3	96	1687	124,64	N	100	1763	40,01	CB	105
1536	52,44	CA	91	1612	1,98	QB	96	1688	8,86	HN	100	1764	1,38	HB	105
1537	4,80	HA	91	1613	999,00	CG	96	1689	59,00	CA	100	1765	0,68	QG2	105
1538	41,25	CB	91	1614	999,00	HG2	96	1690	3,99	HA	100	1766	12,89	CG2	105
1539	3,24	HB2	91	1615	999,00	HG3	96	1691	28,90	CB	100	1767	999,00	HG21	105
1540	2,52	HB3	91	1616	2,18	QG	96	1692	2,03	HB2	100	1768	999,00	HG22	105
1541	999,00	QB	91	1617	999,00	CD	96	1693	1,99	HB3	100	1769	999,00	HG23	105
1542	999,00	CG	91	1618	178,00	C	96	1694	999,00	QB	100	1770	26,95	CG1	105
1543	999,00	ND2	91	1619	117,76	N	97	1695	36,22	CG	100	1771	1,18	HG12	105
1544	999,00	HD21	91	1620	8,28	HN	97	1696	999,00	HG2	100	1772	1,44	HG13	105
1545	999,00	HD22	91	1621	59,49	CA	97	1697	999,00	HG3	100	1773	999,00	QG1	105
1546	999,00	QD2	91	1622	3,97	HA	97	1698	2,25	QG	100	1774	0,83	QD1	105
1547	999,00	C	91	1623	31,90	CB	97	1699	999,00	CD	100	1775	12,40	CD1	105
1548	999,00	N	92	1624	2,14	HB2	97	1700	178,10	C	100	1776	999,00	HD11	105
1549	51,15	CD	92	1625	2,06	HB3	97	1701	104,62	N	101	1777	999,00	HD12	105
1550	63,44	CA	92	1626	999,00	QB	97	1702	7,45	HN	101	1778	999,00	HD13	105
1551	4,38	HA	92	1627	26,39	CG	97	1703	45,00	CA	101	1779	175,40	C	105
1552	31,75	CB	92	1628	1,92	HG2	97	1704	4,25	HA1	101	1780	115,60	N	106
1553	2,28	HB2	92	1629	1,31	HG3	97	1705	3,53	HA2	101	1781	8,66	HN	106
1554	1,92	HB3	92	1630	999,00	QG	97	1706	999,00	QA	101	1782	62,20	CA	106
1555	999,00	QB	92	1631	43,96	CD	97	1707	174,00	C	101	1783	4,52	HA	106
1556	27,25	CG	92	1632	999,00	HD2	97	1708	106,72	N	102	1784	69,35	CB	106
1557	999,00	HG2	92	1633	999,00	HD3	97	1709	7,73	HN	102	1785	4,40	HB	106
1558	999,00	HG3	92	1634	3,31	QD	97	1710	44,94	CA	102	1786	1,13	QG2	106
1559	2,02	QG	92	1635	999,00	NE	97	1711	4,41	HA1	102	1787	999,00	HG1	106
1560	999,00	HD2	92	1636	999,00	HE	97	1712	3,66	HA2	102	1788	21,40	CG2	106
1561	999,00	HD3	92	1637	999,00	CZ	97	1713	999,00	QA	102	1789	999,00	HG21	106
1562	3,81	QD	92	1638	999,00	NH1	97	1714	174,30	C	102	1790	999,00	HG22	106
1563	177,40	C	92	1639	999,00	HH11	97	1715	121,88	N	103	1791	999,00	HG23	106
1564	124,83	N	93	1640	999,00	HH12	97	1716	7,63	HN	103	1792	175,40	C	106
1565	8,02	HN	93	1641	999,00	QH1	97	1717	62,94	CA	103	1793	118,66	N	107
1566	68,61	CA	93	1642	999,00	NH2	97	1718	3,07	HA	103	1794	7,66	HN	107
1567	3,64	HA	93	1643	999,00	HH21	97	1719	30,40	CB	103	1795	57,52	CA	107
1568	67,63	CB	93	1644	999,00	HH22	97	1720	1,32	HB	103	1796	5,13	HA	107
1569	4,22	HB	93	1645	999,00	QH2	97	1721	-0,02	QG1	103	1797	62,90	CB	107
1570	1,09	QG2	93	1646	179,70	C	97	1722	0,38	QG2	103	1798	3,91	HB2	107
1571	999,00	HG1	93	1647	120,00	N	98	1723	19,36	CG1	103	1799	3,49	HB3	107
1572	21,60	CG2	93	1648	7,63	HN	98	1724	999,00	HG11	103	1800	999,00	QB	107
1573	999,00	HG21	93	1649	58,21	CA	98	1725	999,00	HG12	103	1801	999,00	HG	107
1574	999,00	HG22	93	1650	3,88	HA	98	1726	999,00	HG13	103	1802	173,30	C	107
1575	999,00	HG23	93	1651	41,20	CB	98	1727	20,78	CG2	103	1803	131,30	N	108
1576	177,30	C	93	1652	1,87	HB2	98	1728	999,00	HG21	103	1804	9,49	HN	108
1577	121,75	N	94	1653	1,50	HB3	98	1729	999,00	HG22	103	1805	60,97	CA	108
1578	8,32	HN	94	1654	999,00	QB	98	1730	999,00	HG23	103	1806	4,58	HA	108
1579	57,67	CA	94	1655	999,00	CG	98	1731	999,00	QQG	103	1807	30,89	CB	108
1580	4,35	HA	94	1656	1,48	HG	98	1732	176,10	C	103	1808	2,09	HB	108
1581	40,26	CB	94	1657	0,97	QD1	98	1733	128,16	N	104	1809	0,70	QG1	108
1582	2,77	HB2	94	1658	0,92	QD2	98	1734	6,22	HN	104	1810	0,73	QG2	108
1583	2,59	HB3	94	1659	27,09	CD1	98	1735	56,29	CA	104	1811	20,35	CG1	108
1584	999,00	QB	94	1660	999,00	HD11	98	1736	4,16	HA	104	1812	999,00	HG11	108

N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS
1813	999,00	HG12	108	1889	1,44	QB	114	1965	8,93	HN	118	2041	999,00	HG21	122
1814	999,00	HG13	108	1890	19,55	CB	114	1966	44,70	CA	118	2042	999,00	HG22	122
1815	23,25	CG2	108	1891	999,00	HB1	114	1967	4,47	HA1	118	2043	999,00	HG23	122
1816	999,00	HG21	108	1892	999,00	HB2	114	1968	3,69	HA2	118	2044	999,00	QQG	122
1817	999,00	HG22	108	1893	999,00	HB3	114	1969	999,00	QA	118	2045	175,70	C	122
1818	999,00	HG23	108	1894	177,90	C	114	1970	175,10	C	118	2046	118,89	N	123
1819	999,00	QQG	108	1895	121,39	N	115	1971	118,30	N	119	2047	8,44	HN	123
1820	999,00	C	108	1896	8,58	HN	115	1972	7,88	HN	119	2048	52,44	CA	123
1821	126,71	N	109	1897	60,97	CA	115	1973	56,12	CA	119	2049	4,57	HA	123
1822	9,06	HN	109	1898	3,92	HA	115	1974	4,51	HA	119	2050	39,52	CB	123
1823	52,09	CA	109	1899	38,78	CB	115	1975	35,30	CB	119	2051	3,26	HB2	123
1824	5,22	HA	109	1900	3,23	HB2	115	1976	999,00	HB2	119	2052	2,83	HB3	123
1825	41,99	CB	109	1901	2,71	HB3	115	1977	999,00	HB3	119	2053	999,00	QB	123
1826	3,05	HB2	109	1902	999,00	QB	115	1978	1,76	QB	119	2054	999,00	CG	123
1827	2,05	HB3	109	1903	999,00	QD	115	1979	999,00	CG	119	2055	110,28	ND2	123
1828	999,00	QB	109	1904	999,00	QE	115	1980	999,00	HG2	119	2056	7,55	HD21	123
1829	999,00	CG	109	1905	999,00	QR	115	1981	999,00	HG3	119	2057	6,77	HD22	123
1830	999,00	ND2	109	1906	999,00	CG	115	1982	999,00	QG	119	2058	999,00	QD2	123
1831	999,00	HD21	109	1907	999,00	CD1	115	1983	999,00	CD	119	2059	178,70	C	123
1832	999,00	HD22	109	1908	999,00	HD1	115	1984	999,00	HD2	119	2060	119,32	N	124
1833	999,00	QD2	109	1909	999,00	CE1	115	1985	999,00	HD3	119	2061	8,15	HN	124
1834	177,00	C	109	1910	999,00	HE1	115	1986	999,00	QD	119	2062	56,67	CA	124
1835	129,65	N	110	1911	999,00	CZ	115	1987	999,00	CE	119	2063	4,27	HA	124
1836	10,20	HN	110	1912	999,00	HZ	115	1988	999,00	HE2	119	2064	38,01	CB	124
1837	63,19	CA	110	1913	999,00	CE2	115	1989	999,00	HE3	119	2065	2,83	HB2	124
1838	3,96	HA	110	1914	999,00	HE2	115	1990	999,00	QE	119	2066	2,74	HB3	124
1839	30,89	CB	110	1915	999,00	CD2	115	1991	999,00	NZ	119	2067	999,00	QB	124
1840	2,13	HB	110	1916	999,00	HD2	115	1992	999,00	HZ1	119	2068	999,00	CG	124
1841	0,79	QG1	110	1917	175,50	C	115	1993	999,00	HZ2	119	2069	113,00	ND2	124
1842	0,87	QG2	110	1918	122,97	N	116	1994	999,00	HZ3	119	2070	7,65	HD21	124
1843	19,80	CG1	110	1919	5,72	HN	116	1995	999,00	QZ	119	2071	6,99	HD22	124
1844	999,00	HG11	110	1920	53,94	CA	116	1996	175,00	C	119	2072	999,00	QD2	124
1845	999,00	HG12	110	1921	4,05	HA	116	1997	116,84	N	120	2073	175,30	C	124
1846	999,00	HG13	110	1922	32,79	CB	116	1998	9,19	HN	120	2074	118,70	N	125
1847	21,55	CG2	110	1923	1,45	HB2	116	1999	62,25	CA	120	2075	7,96	HN	125
1848	999,00	HG21	110	1924	1,74	HB3	116	2000	4,61	HA	120	2076	52,09	CA	125
1849	999,00	HG22	110	1925	999,00	QB	116	2001	70,59	CB	120	2077	4,60	HA	125
1850	999,00	HG23	110	1926	25,82	CG	116	2002	3,98	HB	120	2078	1,48	QB	125
1851	999,00	QQG	110	1927	1,39	HG2	116	2003	1,21	QG2	120	2079	21,03	CB	125
1852	174,20	C	110	1928	1,35	HG3	116	2004	999,00	HG1	120	2080	999,00	HB1	125
1853	116,60	N	111	1929	999,00	QG	116	2005	21,52	CG2	120	2081	999,00	HB2	125
1854	9,07	HN	111	1930	43,24	CD	116	2006	999,00	HG21	120	2082	999,00	HB3	125
1855	46,18	CA	111	1931	999,00	HD2	116	2007	999,00	HG22	120	2083	177,30	C	125
1856	4,41	HA1	111	1932	999,00	HD3	116	2008	999,00	HG23	120	2084	120,48	N	126
1857	3,34	HA2	111	1933	3,12	QD	116	2009	174,20	C	120	2085	7,84	HN	126
1858	999,00	QA	111	1934	999,00	NE	116	2010	129,55	N	121	2086	63,19	CA	126
1859	175,70	C	111	1935	999,00	HE	116	2011	9,36	HN	121	2087	4,48	HA	126
1860	109,80	N	112	1936	999,00	CZ	116	2012	57,17	CA	121	2088	35,03	CB	126
1861	8,04	HN	112	1937	999,00	NH1	116	2013	4,88	HA	121	2089	1,77	HB	126
1862	47,66	CA	112	1938	999,00	HH11	116	2014	28,67	CB	121	2090	0,66	QG1	126
1863	4,31	HA1	112	1939	999,00	HH12	116	2015	1,97	HB2	121	2091	0,77	QG2	126
1864	4,00	HA2	112	1940	999,00	QH1	116	2016	1,87	HB3	121	2092	21,10	CG1	126
1865	999,00	QA	112	1941	999,00	NH2	116	2017	999,00	QB	121	2093	999,00	HG11	126
1866	171,90	C	112	1942	999,00	HH21	116	2018	34,10	CG	121	2094	999,00	HG12	126
1867	125,93	N	113	1943	999,00	HH22	116	2019	2,31	HG2	121	2095	999,00	HG13	126
1868	8,66	HN	113	1944	999,00	QH2	116	2020	2,24	HG3	121	2096	21,77	CG2	126
1869	55,79	CA	113	1945	173,30	C	116	2021	999,00	QG	121	2097	999,00	HG21	126
1870	4,62	HA	113	1946	119,89	N	117	2022	999,00	CD	121	2098	999,00	HG22	126
1871	37,70	CB	113	1947	8,41	HN	117	2023	111,31	NE2	121	2099	999,00	HG23	126
1872	2,74	HB2	113	1948	58,17	CA	117	2024	6,95	HE21	121	2100	999,00	QQG	126
1873	1,96	HB3	113	1949	3,88	HA	117	2025	6,64	HE22	121	2101	175,10	C	126
1874	999,00	QB	113	1950	27,69	CB	117	2026	999,00	QE2	121	2102	125,05	N	127
1875	32,20	CG	113	1951	1,97	HB2	117	2027	176,30	C	121	2103	8,26	HN	127
1876	2,76	HG2	113	1952	2,01	HB3	117	2028	122,29	N	122	2104	58,26	CA	127
1877	2,22	HG3	113	1953	999,00	QB	117	2029	8,84	HN	122	2105	5,57	HA	127
1878	999,00	QG	113	1954	33,11	CG	117	2030	62,45	CA	122	2106	65,90	CB	127
1879	999,00	QE	113	1955	999,00	HG2	117	2031	4,43	HA	122	2107	3,55	HB2	127
1880	999,00	CE	113	1956	999,00	HG3	117	2032	31,88	CB	122	2108	3,51	HB3	127
1881	999,00	HE1	113	1957	2,43	QG	117	2033	2,22	HB	122	2109	999,00	QB	127
1882	999,00	HE2	113	1958	999,00	CD	117	2034	0,77	QG1	122	2110	999,00	HG	127
1883	999,00	HE3	113	1959	112,70	NE2	117	2035	0,84	QG2	122	2111	172,80	C	127
1884	175,20	C	113	1960	6,98	HE21	117	2036	20,19	CG1	122	2112	110,97	N	128
1885	129,60	N	114	1961	7,66	HE22	117	2037	999,00	HG11	122	2113	8,78	HN	128
1886	10,41	HN	114	1962	999,00	QE2	117	2038	999,00	HG12	122	2114	58,26	CA	128
1887	53,08	CA	114	1963	179,00	C	117	2039	999,00	HG13	122	2115	5,65	HA	128
1888	4,16	HA	114	1964	114,85	N	118	2040	22,26	CG2	122	2116	36,81	CB	128

N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS
2117	2,51	HB	128	2193	3,61	HA	133	2269	1,32	QG	137	2345	179,20	C	140
2118	0,88	QG1	128	2194	38,04	CB	133	2270	28,80	CD	137	2346	122,86	N	141
2119	0,83	QG2	128	2195	1,96	HB	133	2271	999,00	HD2	137	2347	8,23	HN	141
2120	22,76	CG1	128	2196	0,96	QG2	133	2272	999,00	HD3	137	2348	54,56	CA	141
2121	999,00	HG11	128	2197	17,09	CG2	133	2273	1,66	QD	137	2349	4,20	HA	141
2122	999,00	HG12	128	2198	999,00	HG21	133	2274	41,50	CE	137	2350	1,57	QB	141
2123	999,00	HG13	128	2199	999,00	HG22	133	2275	999,00	HE2	137	2351	17,58	CB	141
2124	18,07	CG2	128	2200	999,00	HG23	133	2276	999,00	HE3	137	2352	999,00	HB1	141
2125	999,00	HG21	128	2201	999,00	CG1	133	2277	2,74	QE	137	2353	999,00	HB2	141
2126	999,00	HG22	128	2202	1,50	HG12	133	2278	999,00	NZ	137	2354	999,00	HB3	141
2127	999,00	HG23	128	2203	1,24	HG13	133	2279	999,00	HZ1	137	2355	179,10	C	141
2128	999,00	QQG	128	2204	999,00	QG1	133	2280	999,00	HZ2	137	2356	115,72	N	142
2129	175,60	C	128	2205	0,88	QD1	133	2281	999,00	HZ3	137	2357	7,27	HN	142
2130	123,00	N	129	2206	13,63	CD1	133	2282	999,00	QZ	137	2358	56,67	CA	142
2131	9,15	HN	129	2207	999,00	HD11	133	2283	180,40	C	137	2359	4,31	HA	142
2132	51,70	CA	129	2208	999,00	HD12	133	2284	122,12	N	138	2360	31,38	CB	142
2133	5,22	HA	129	2209	999,00	HD13	133	2285	8,02	HN	138	2361	1,99	HB2	142
2134	42,99	CB	129	2210	177,30	C	133	2286	59,98	CA	138	2362	1,92	HB3	142
2135	3,29	HB2	129	2211	119,52	N	134	2287	4,02	HA	138	2363	999,00	QB	142
2136	2,59	HB3	129	2212	8,15	HN	134	2288	32,50	CB	138	2364	27,50	CG	142
2137	999,00	QB	129	2213	59,16	CA	134	2289	999,00	HB2	138	2365	1,66	HG2	142
2138	999,00	CG	129	2214	4,09	HA	134	2290	999,00	HB3	138	2366	1,44	HG3	142
2139	173,60	C	129	2215	29,8	CB	134	2291	999,00	QB	138	2367	999,00	QG	142
2140	116,80	N	130	2216	999,00	HB2	134	2292	999,00	CG	138	2368	44,21	CD	142
2141	8,79	HN	130	2217	999,00	HB3	134	2293	999,00	HG2	138	2369	999,00	HD2	142
2142	60,23	CA	130	2218	1,88	QB	134	2294	999,00	HG3	138	2370	999,00	HD3	142
2143	4,01	HA	130	2219	36,14	CG	134	2295	999,00	QG	138	2371	2,91	QD	142
2144	28,92	CB	130	2220	2,37	HG2	134	2296	999,00	CD	138	2372	999,00	NE	142
2145	999,00	HB2	130	2221	2,22	HG3	134	2297	999,00	HD2	138	2373	999,00	HE	142
2146	999,00	HB3	130	2222	999,00	QG	134	2298	999,00	HD3	138	2374	999,00	CZ	142
2147	2,09	QB	130	2223	999,00	CD	134	2299	1,62	QD	138	2375	999,00	NH1	142
2148	36,02	CG	130	2224	179,40	C	134	2300	999,00	CE	138	2376	999,00	HH11	142
2149	999,00	HG2	130	2225	121,20	N	135	2301	999,00	HE2	138	2377	999,00	HH12	142
2150	999,00	HG3	130	2226	7,59	HN	135	2302	999,00	HE3	138	2378	999,00	QH1	142
2151	2,35	QG	130	2227	55,30	CA	135	2303	999,00	QE	138	2379	999,00	NH2	142
2152	999,00	CD	130	2228	4,00	HA	135	2304	999,00	NZ	138	2380	999,00	HH21	142
2153	178,90	C	130	2229	1,21	QB	135	2305	999,00	HZ1	138	2381	999,00	HH22	142
2154	122,22	N	131	2230	17,58	CB	135	2306	999,00	HZ2	138	2382	999,00	QH2	142
2155	7,81	HN	131	2231	999,00	HB1	135	2307	999,00	HZ3	138	2383	177,10	C	142
2156	58,91	CA	131	2232	999,00	HB2	135	2308	999,00	QZ	138	2384	107,78	N	143
2157	4,09	HA	131	2233	999,00	HB3	135	2309	180,00	C	138	2385	8,17	HN	143
2158	31,30	CB	131	2234	179,90	C	135	2310	120,55	N	139	2386	45,19	CA	143
2159	999,00	HB2	131	2235	116,09	N	136	2311	8,30	HN	139	2387	4,16	HA1	143
2160	999,00	HB3	131	2236	8,57	HN	136	2312	58,26	CA	139	2388	3,81	HA2	143
2161	1,88	QB	131	2237	61,96	CA	136	2313	3,98	HA	139	2389	999,00	QA	143
2162	999,00	CG	131	2238	4,35	HA	136	2314	42,23	CB	139	2390	174,60	C	143
2163	1,40	HG2	131	2239	37,30	CB	136	2315	2,23	HB2	139	2391	122,52	N	144
2164	1,31	HG3	131	2240	999,00	HB2	136	2316	1,22	HB3	139	2392	7,05	HN	144
2165	999,00	QG	131	2241	999,00	HB3	136	2317	999,00	QB	139	2393	61,46	CA	144
2166	999,00	CD	131	2242	2,99	QB	136	2318	26,78	CG	139	2394	3,74	HA	144
2167	999,00	HD2	131	2243	999,00	QD	136	2319	2,09	HG	139	2395	38,53	CB	144
2168	999,00	HD3	131	2244	999,00	QE	136	2320	0,75	QD1	139	2396	1,53	HB	144
2169	1,65	QD	131	2245	999,00	QR	136	2321	0,70	QD2	139	2397	0,61	QG2	144
2170	999,00	CE	131	2246	999,00	CG	136	2322	23,25	CD1	139	2398	16,10	CG2	144
2171	999,00	HE2	131	2247	999,00	CD1	136	2323	999,00	HD11	139	2399	999,00	HG21	144
2172	999,00	HE3	131	2248	999,00	HD1	136	2324	999,00	HD12	139	2400	999,00	HG22	144
2173	3,00	QE	131	2249	999,00	CE1	136	2325	999,00	HD13	139	2401	999,00	HG23	144
2174	999,00	NZ	131	2250	999,00	HE1	136	2326	25,04	CD2	139	2402	28,67	CG1	144
2175	999,00	HZ1	131	2251	999,00	CZ	136	2327	999,00	HD21	139	2403	999,00	HG12	144
2176	999,00	HZ2	131	2252	999,00	HZ	136	2328	999,00	HD22	139	2404	999,00	HG13	144
2177	999,00	HZ3	131	2253	999,00	CE2	136	2329	999,00	HD23	139	2405	1,05	QG1	144
2178	999,00	QZ	131	2254	999,00	HE2	136	2330	999,00	QQD	139	2406	0,83	QD1	144
2179	179,90	C	131	2255	999,00	CD2	136	2331	179,40	C	139	2407	15,36	CD1	144
2180	120,96	N	132	2256	999,00	HD2	136	2332	118,40	N	140	2408	999,00	HD11	144
2181	8,45	HN	132	2257	175,30	C	136	2333	9,01	HN	140	2409	999,00	HD12	144
2182	57,17	CA	132	2258	118,88	N	137	2334	47,17	CA	140	2410	999,00	HD13	144
2183	4,09	HA	132	2259	8,92	HN	137	2335	4,42	HA	140	2411	175,50	C	144
2184	41,49	CB	132	2260	60,90	CA	137	2336	40,00	CB	140	2412	129,72	N	145
2185	3,23	HB2	132	2261	3,92	HA	137	2337	2,94	HB2	140	2413	7,74	HN	145
2186	2,40	HB3	132	2262	32,00	CB	137	2338	3,03	HB3	140	2414	56,53	CA	145
2187	999,00	QB	132	2263	999,00	HB2	137	2339	999,00	QB	140	2415	4,20	HA	145
2188	999,00	CG	132	2264	999,00	HB3	137	2340	999,00	CG	140	2416	30,20	CB	145
2189	179,60	C	132	2265	1,99	QB	137	2341	999,00	ND2	140	2417	999,00	HB2	145
2190	118,99	N	133	2266	26,00	CG	137	2342	999,00	HD21	140	2418	999,00	HB3	145
2191	8,47	HN	133	2267	999,00	HG2	137	2343	999,00	HD22	140	2419	2,03	QB	145
2192	67,13	CA	133	2268	999,00	HG3	137	2344	999,00	QD2	140	2420	36,20	CG	145

N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS
2421	999,00	HG2	145	2497	999,00	HE	149	2573	999,00	HG23	153	2649	122,21	N	158
2422	999,00	HG3	145	2498	999,00	CZ	149	2574	175,40	C	153	2650	8,99	HN	158
2423	2,28	QG	145	2499	999,00	NH1	149	2575	125,64	N	154	2651	55,93	CA	158
2424	999,00	CD	145	2500	999,00	HH11	149	2576	7,55	HN	154	2652	4,66	HA	158
2425	174,60	C	145	2501	999,00	HH12	149	2577	53,44	CA	154	2653	31,00	CB	158
2426	128,25	N	146	2502	999,00	QH1	149	2578	4,74	HA	154	2654	999,00	HB2	158
2427	8,54	HN	146	2503	999,00	NH2	149	2579	39,57	CB	154	2655	999,00	HB3	158
2428	52,83	CA	146	2504	999,00	HH21	149	2580	2,83	HB2	154	2656	1,85	QB	158
2429	5,15	HA	146	2505	999,00	HH22	149	2581	2,73	HB3	154	2657	24,60	CG	158
2430	44,70	CB	146	2506	999,00	QH2	149	2582	999,00	QB	154	2658	999,00	HG2	158
2431	2,05	HB2	146	2507	176,60	C	149	2583	999,00	CG	154	2659	999,00	HG3	158
2432	0,65	HB3	146	2508	127,42	N	150	2584	999,00	C	154	2660	1,45	QG	158
2433	999,00	QB	146	2509	9,49	HN	150	2585	999,00	N	155	2661	28,80	CD	158
2434	27,19	CG	146	2510	61,30	CA	150	2586	42,71	CD	155	2662	999,00	HD2	158
2435	1,03	HG	146	2511	4,36	HA	150	2587	62,45	CA	155	2663	999,00	HD3	158
2436	0,89	QD1	146	2512	32,00	CB	150	2588	4,36	HA	155	2664	1,75	QD	158
2437	0,91	QD2	146	2513	2,18	HB2	150	2589	31,47	CB	155	2665	40,00	CE	158
2438	23,73	CD1	146	2514	2,08	HB3	150	2590	2,27	HB2	155	2666	999,00	HE2	158
2439	999,00	HD11	146	2515	999,00	QB	150	2591	1,84	HB3	155	2667	999,00	HE3	158
2440	999,00	HD12	146	2516	25,00	CG	150	2592	999,00	QB	155	2668	3,00	QE	158
2441	999,00	HD13	146	2517	999,00	HG2	150	2593	27,44	CG	155	2669	999,00	NZ	158
2442	23,94	CD2	146	2518	999,00	HG3	150	2594	2,11	HG2	155	2670	999,00	HZ1	158
2443	999,00	HD21	146	2519	1,53	QG	150	2595	2,06	HG3	155	2671	999,00	HZ2	158
2444	999,00	HD22	146	2520	38,06	CD	150	2596	999,00	QG	155	2672	999,00	HZ3	158
2445	999,00	HD23	146	2521	999,00	HD2	150	2597	3,88	HD2	155	2673	999,00	QZ	158
2446	999,00	QQD	146	2522	999,00	HD3	150	2598	3,65	HD3	155	2674	177,90	C	158
2447	174,90	C	146	2523	1,79	QD	150	2599	999,00	QD	155	2675	125,60	N	159
2448	123,72	N	147	2524	41,50	CE	150	2600	181,60	C	155	2676	8,05	HN	159
2449	9,02	HN	147	2525	999,00	HE2	150	2601	122,12	N	156	2677	57,17	CA	159
2450	52,64	CA	147	2526	999,00	HE3	150	2602	8,49	HN	156	2678	4,04	HA	159
2451	5,50	HA	147	2527	3,00	QE	150	2603	57,60	CA	156	2679	33,28	CB	159
2452	30,80	CB	147	2528	999,00	NZ	150	2604	4,13	HA	156	2680	1,61	HB2	159
2453	999,00	HB2	147	2529	999,00	HZ1	150	2605	32,53	CB	156	2681	1,10	HB3	159
2454	999,00	HB3	147	2530	999,00	HZ2	150	2606	999,00	HB2	156	2682	999,00	QB	159
2455	1,64	QB	147	2531	999,00	HZ3	150	2607	999,00	HB3	156	2683	30,50	CG	159
2456	31,30	CG	147	2532	999,00	QZ	150	2608	2,05	QB	156	2684	1,46	HG2	159
2457	2,60	HG2	147	2533	178,50	C	150	2609	999,00	CG	156	2685	1,20	HG3	159
2458	1,96	HG3	147	2534	112,53	N	151	2610	999,00	HG2	156	2686	999,00	QG	159
2459	999,00	QG	147	2535	8,07	HN	151	2611	999,00	HG3	156	2687	999,00	QE	159
2460	999,00	CD	147	2536	59,66	CA	151	2612	999,00	QG	156	2688	999,00	CE	159
2461	173,80	C	147	2537	4,43	HA	151	2613	999,00	CD	156	2689	999,00	HE1	159
2462	124,39	N	148	2538	35,08	CB	151	2614	999,00	HD2	156	2690	999,00	HE2	159
2463	9,21	HN	148	2539	2,01	HB	151	2615	999,00	HD3	156	2691	999,00	HE3	159
2464	60,90	CA	148	2540	0,92	QG1	151	2616	999,00	QD	156	2692	178,20	C	159
2465	4,53	HA	148	2541	0,76	QG2	151	2617	999,00	CE	156	2693	113,50	N	160
2466	33,04	CB	148	2542	999,00	CG1	151	2618	999,00	HE2	156	2694	9,33	HN	160
2467	2,00	HB	148	2543	999,00	HG11	151	2619	999,00	HE3	156	2695	56,42	CA	160
2468	0,66	QG1	148	2544	999,00	HG12	151	2620	999,00	QE	156	2696	4,46	HA	160
2469	0,77	QG2	148	2545	999,00	HG13	151	2621	999,00	NZ	156	2697	28,20	CB	160
2470	22,84	CG1	148	2546	20,54	CG2	151	2622	999,00	HZ1	156	2698	999,00	HB2	160
2471	999,00	HG11	148	2547	999,00	HG21	151	2623	999,00	HZ2	156	2699	999,00	HB3	160
2472	999,00	HG12	148	2548	999,00	HG22	151	2624	999,00	HZ3	156	2700	2,40	QB	160
2473	999,00	HG13	148	2549	999,00	HG23	151	2625	999,00	QZ	156	2701	31,45	CG	160
2474	20,54	CG2	148	2550	999,00	QQG	151	2626	177,20	C	156	2702	999,00	HG2	160
2475	999,00	HG21	148	2551	177,90	C	151	2627	125,34	N	157	2703	999,00	HG3	160
2476	999,00	HG22	148	2552	117,78	N	152	2628	7,76	HN	157	2704	2,62	QG	160
2477	999,00	HG23	148	2553	8,08	HN	152	2629	53,33	CA	157	2705	999,00	QE	160
2478	999,00	QQG	148	2554	61,65	CA	152	2630	4,73	HA	157	2706	999,00	CE	160
2479	176,70	C	148	2555	5,39	HA	152	2631	43,22	CB	157	2707	999,00	HE1	160
2480	122,95	N	149	2556	63,39	CB	152	2632	1,68	HB2	157	2708	999,00	HE2	160
2481	6,99	HN	149	2557	999,00	HB2	152	2633	1,44	HB3	157	2709	999,00	HE3	160
2482	56,98	CA	149	2558	999,00	HB3	152	2634	999,00	QB	157	2710	179,90	C	160
2483	4,66	HA	149	2559	4,85	QB	152	2635	26,70	CG	157	2711	119,63	N	161
2484	32,04	CB	149	2560	999,00	HG	152	2636	1,81	HG	157	2712	7,04	HN	161
2485	999,00	HB2	149	2561	175,20	C	152	2637	0,92	QD1	157	2713	56,92	CA	161
2486	999,00	HB3	149	2562	107,70	N	153	2638	0,87	QD2	157	2714	4,48	HA	161
2487	2,18	QB	149	2563	6,70	HN	153	2639	25,19	CD1	157	2715	39,77	CB	161
2488	28,67	CG	149	2564	61,15	CA	153	2640	999,00	HD11	157	2716	2,97	HB2	161
2489	999,00	HG2	149	2565	4,09	HA	153	2641	999,00	HD12	157	2717	2,75	HB3	161
2490	999,00	HG3	149	2566	68,37	CB	153	2642	999,00	HD13	157	2718	999,00	QB	161
2491	1,79	QG	149	2567	4,43	HB	153	2643	22,28	CD2	157	2719	999,00	CG	161
2492	41,65	CD	149	2568	1,03	QG2	153	2644	999,00	HD21	157	2720	178,30	C	161
2493	2,87	HD2	149	2569	999,00	HG1	153	2645	999,00	HD22	157	2721	119,30	N	162
2494	2,61	HD3	149	2570	21,84	CG2	153	2646	999,00	HD23	157	2722	7,34	HN	162
2495	999,00	QD	149	2571	999,00	HG21	153	2647	999,00	QQD	157	2723	57,92	CA	162
2496	999,00	NE	149	2572	999,00	HG22	153	2648	178,40	C	157	2724	4,09	HA	162

N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS	N.	δ^* [ppm]	Atom	AS
2725	41,50	CB	162	2759	13,63	CD1	163	2793	999,00	QE	165	2827	2,59	HB3	167
2726	1,80	HB2	162	2760	999,00	HD11	163	2794	999,00	NZ	165	2828	999,00	QB	167
2727	1,66	HB3	162	2761	999,00	HD12	163	2795	999,00	HZ1	165	2829	999,00	CG	167
2728	999,00	QB	162	2762	999,00	HD13	163	2796	999,00	HZ2	165	2830	999,00	ND2	167
2729	999,00	CG	162	2763	177,60	C	163	2797	999,00	HZ3	165	2831	999,00	HD21	167
2730	999,00	HG	162	2764	116,37	N	164	2798	999,00	QZ	165	2832	999,00	HD22	167
2731	0,87	QD1	162	2765	7,84	HN	164	2799	174,40	C	165	2833	999,00	QD2	167
2732	0,83	QD2	162	2766	60,97	CA	164	2800	116,85	N	166	2834	174,80	C	167
2733	999,00	CD1	162	2767	4,31	HA	164	2801	7,43	HN	166	2835	126,50	N	168
2734	999,00	HD11	162	2768	62,90	CB	164	2802	62,15	CA	166	2836	7,72	HN	168
2735	999,00	HD12	162	2769	999,00	HB2	164	2803	4,19	HA	166	2837	57,42	CA	168
2736	999,00	HD13	162	2770	999,00	HB3	164	2804	38,53	CB	166	2838	4,19	HA	168
2737	999,00	CD2	162	2771	4,05	QB	164	2805	2,01	HB	166	2839	33,99	CB	168
2738	999,00	HD21	162	2772	999,00	HG	164	2806	0,92	QG2	166	2840	1,82	HB2	168
2739	999,00	HD22	162	2773	175,20	C	164	2807	17,33	CG2	166	2841	1,68	HB3	168
2740	999,00	HD23	162	2774	118,74	N	165	2808	999,00	HG21	166	2842	999,00	QB	168
2741	999,00	QQD	162	2775	7,34	HN	165	2809	999,00	HG22	166	2843	24,12	CG	168
2742	179,70	C	162	2776	57,00	CA	165	2810	999,00	HG23	166	2844	999,00	HG2	168
2743	115,38	N	163	2777	4,27	HA	165	2811	27,19	CG1	166	2845	999,00	HG3	168
2744	7,78	HN	163	2778	32,70	CB	165	2812	1,14	HG12	166	2846	1,37	QG	168
2745	63,93	CA	163	2779	999,00	HB2	165	2813	1,57	HG13	166	2847	28,80	CD	168
2746	3,82	HA	163	2780	999,00	HB3	165	2814	999,00	QG1	166	2848	999,00	HD2	168
2747	38,04	CB	163	2781	999,00	QB	165	2815	0,79	QD1	166	2849	999,00	HD3	168
2748	1,96	HB	163	2782	24,50	CG	165	2816	13,88	CD1	166	2850	1,66	QD	168
2749	0,88	QG2	163	2783	999,00	HG2	165	2817	999,00	HD11	166	2851	42,00	CE	168
2750	17,58	CG2	163	2784	999,00	HG3	165	2818	999,00	HD12	166	2852	999,00	HE2	168
2751	999,00	HG21	163	2785	999,00	QG	165	2819	999,00	HD13	166	2853	999,00	HE3	168
2752	999,00	HG22	163	2786	42,38	CD	165	2820	175,80	C	166	2854	3,00	QE	168
2753	999,00	HG23	163	2787	999,00	HD2	165	2821	124,30	N	167	2855	999,00	NZ	168
2754	28,92	CG1	163	2788	999,00	HD3	165	2822	8,07	HN	167	2856	999,00	HZ1	168
2755	1,22	HG12	163	2789	999,00	QD	165	2823	54,31	CA	167	2857	999,00	HZ2	168
2756	1,66	HG13	163	2790	999,00	CE	165	2824	4,66	HA	167	2858	999,00	HZ3	168
2757	999,00	QG1	163	2791	999,00	HE2	165	2825	41,00	CB	167	2859	999,00	QZ	168
2758	0,84	QD1	163	2792	999,00	HE3	165	2826	2,75	HB2	167	2860	175,70	C	168

* 999,00 bedeutet keine Zuordnung vorhanden.

2.3 Listen aus den NOESY-Spektren

¹⁵N-NOESY-HSQC

#Number of dimensions 3

#FORMAT xeasy3D

#INAME 1 HN

#INAME 2 H

#INAME 3 N

#CYANAFORMAT HhN

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3000	7,445	1,984	104,561	5,00E+07	2,24E+06	5,60E+06	# G101
3001	7,445	8,304	104,581	2,14E+07	1,93E+06	4,82E+06	
3002	7,445	8,854	104,581	1,24E+08	6,96E+06	1,74E+07	
3003	7,445	7,444	104,581	7,64E+08	3,25E+07	8,12E+07	
3004	7,445	7,714	104,591	4,02E+08	9,90E+06	2,48E+07	
3005	7,445	0,864	104,591	3,84E+07	2,03E+06	5,07E+06	
3006	7,455	3,544	104,641	4,31E+07	1,49E+06	3,72E+06	
3007	7,445	4,134	104,701	5,32E+07	1,79E+06	4,49E+06	
3008	7,455	4,314	104,731	2,84E+07	1,26E+06	3,14E+06	
3009	7,585	1,894	106,171	1,30E+07	7,24E+05	4,82E+06	# T31
3010	7,585	4,304	106,171	5,75E+07	2,66E+06	1,77E+07	
3011	7,585	7,314	106,171	1,73E+07	1,10E+06	7,32E+06	
3012	7,585	7,604	106,181	3,14E+08	1,17E+07	7,77E+07	
3013	7,585	7,814	106,191	2,72E+08	5,57E+06	3,72E+07	
3014	7,585	8,374	106,191	4,87E+07	3,41E+06	2,28E+07	
3015	7,585	1,464	106,241	1,80E+07	9,74E+05	6,49E+06	
3016	7,585	4,044	106,271	1,12E+07	6,18E+05	4,12E+06	
3017	7,585	0,804	106,331	5,16E+05	3,65E+05	2,43E+06	
3018	7,475	0,824	106,661	1,45E+07	9,93E+05	2,07E+06	# T54
3019	7,475	8,034	106,701	1,21E+08	6,19E+06	1,29E+07	
3020	7,475	7,494	106,711	6,94E+08	3,07E+07	6,40E+07	
3021	7,475	2,594	106,721	8,56E+05	4,14E+05	8,63E+05	
3022	7,475	1,274	106,721	5,66E+07	2,17E+06	4,52E+06	
3023	7,475	1,814	106,741	2,38E+07	1,22E+06	2,54E+06	
3024	7,475	4,014	106,751	4,52E+07	1,73E+06	3,61E+06	
3025	7,475	3,874	106,761	1,95E+07	1,53E+06	3,20E+06	
3026	7,475	4,424	106,771	2,19E+06	6,65E+05	1,39E+06	
3027	7,475	2,314	106,791	4,04E+06	4,24E+05	8,83E+05	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3028	7,735	1,874	106,591	3,49E+06	5,58E+05	1,47E+06	# G102
3029	7,725	1,394	106,631	1,91E+06	4,94E+05	1,30E+06	
3030	7,725	8,864	106,691	9,99E+06	1,14E+06	3,00E+06	
3031	7,735	0,424	106,691	7,00E+06	4,79E+05	1,26E+06	
3032	7,725	0,834	106,711	1,79E+07	1,13E+06	2,98E+06	
3033	7,725	7,714	106,711	8,19E+08	3,86E+07	1,02E+08	
3034	7,725	4,074	106,731	4,19E+07	1,13E+06	2,96E+06	
3035	7,725	8,304	106,761	4,98E+06	7,34E+05	1,93E+06	
3036	7,725	4,264	106,771	3,79E+07	1,44E+06	3,80E+06	
3037	7,725	3,574	106,781	5,78E+07	2,22E+06	5,85E+06	
3038	6,685	8,064	107,641	5,20E+07	3,92E+06	1,35E+07	# T153
3039	6,685	0,904	107,651	8,27E+07	3,20E+06	1,10E+07	
3040	6,685	6,694	107,661	5,34E+08	2,37E+07	8,16E+07	
3041	6,695	1,884	107,661	6,14E+06	5,90E+05	2,03E+06	
3042	6,685	7,544	107,671	1,37E+08	7,04E+06	2,43E+07	
3043	6,695	3,164	107,671	2,90E+06	4,48E+05	1,55E+06	
3044	6,695	2,074	107,681	7,93E+06	5,76E+05	1,99E+06	
3045	6,695	4,124	107,761	1,49E+07	9,26E+05	3,19E+06	
3046	8,175	1,074	107,711	1,07E+07	5,05E+05	1,20E+06	# G143
3047	8,165	1,904	107,761	1,80E+07	8,78E+05	2,09E+06	
3048	8,165	8,164	107,761	5,38E+08	3,39E+07	8,07E+07	
3049	8,165	7,274	107,761	1,92E+08	8,11E+06	1,93E+07	
3050	8,175	9,014	107,761	2,64E+06	6,14E+05	1,46E+06	
3051	8,165	7,064	107,771	2,44E+08	8,55E+06	2,04E+07	
3052	8,175	1,534	107,821	2,40E+07	1,28E+06	3,04E+06	
3053	8,175	3,754	107,831	3,67E+07	1,91E+06	4,55E+06	
3054	8,175	0,874	107,841	1,02E+07	7,42E+05	1,77E+06	
3055	8,175	4,234	107,841	2,58E+07	1,33E+06	3,16E+06	
3056	10,475	10,464	108,931	1,61E+08	8,09E+06	8,09E+07	# T90
3057	10,465	7,084	108,941	3,25E+06	6,58E+05	6,58E+06	
3058	10,475	8,694	108,951	1,09E+06	4,01E+05	4,01E+06	
3059	10,475	1,174	108,961	1,19E+07	7,53E+05	7,53E+06	
3060	10,475	7,514	108,971	7,97E+07	5,17E+06	5,17E+07	
3061	10,475	0,924	108,971	7,94E+06	4,81E+05	4,81E+06	
3062	10,465	3,694	108,991	2,29E+06	4,85E+05	4,85E+06	
3063	10,475	4,264	109,051	7,91E+05	4,29E+05	4,29E+06	
3064	8,035	3,304	109,671	5,48E+06	5,60E+05	1,40E+06	# G112
3065	8,035	5,384	109,721	8,09E+06	7,90E+05	1,98E+06	
3066	8,045	1,524	109,721	5,28E+06	5,62E+05	1,41E+06	
3067	8,035	0,794	109,731	4,43E+07	1,76E+06	4,39E+06	
3068	8,035	9,104	109,741	1,89E+08	8,47E+06	2,12E+07	
3069	8,035	8,044	109,761	5,47E+08	3,18E+07	7,94E+07	
3070	8,035	8,584	109,801	3,80E+07	1,73E+06	4,33E+06	
3071	8,045	4,134	109,821	4,97E+07	1,34E+06	3,34E+06	
3072	8,035	7,584	109,841	1,67E+06	5,47E+05	1,37E+06	
3073	8,035	2,114	109,841	3,89E+06	4,47E+05	1,12E+06	
3074	8,035	6,664	109,841	3,75E+06	5,34E+05	1,34E+06	
3075	8,035	4,324	109,851	3,70E+07	1,23E+06	3,08E+06	
3076	7,545	7,544	110,211	4,20E+08	1,48E+07	8,23E+07	# SK1 N123
3077	7,555	0,814	110,271	2,54E+07	1,25E+06	6,93E+06	
3078	7,545	6,764	110,331	2,55E+08	1,43E+07	7,92E+07	
3079	6,775	6,764	110,241	5,73E+08	1,50E+07	7,90E+07	# SK2 N123
3080	6,775	0,794	110,281	3,05E+07	1,32E+06	6,97E+06	
3081	6,775	7,544	110,331	2,10E+08	1,25E+07	6,57E+07	
3082	6,785	7,924	110,341	9,15E+06	7,74E+05	4,07E+06	
3083	7,315	3,894	110,561	2,90E+06	4,16E+05	8,48E+05	# V33
3084	7,305	7,834	110,691	1,04E+08	5,62E+06	1,15E+07	
3085	7,305	7,304	110,701	7,83E+08	3,93E+07	8,02E+07	
3086	7,305	4,394	110,711	4,61E+07	1,57E+06	3,20E+06	
3087	7,315	2,384	110,731	2,92E+06	5,47E+05	1,12E+06	
3088	7,315	8,914	110,731	8,27E+06	9,24E+05	1,88E+06	
3089	7,305	0,854	110,741	1,10E+08	3,55E+06	7,25E+06	
3090	7,305	8,374	110,751	3,90E+06	6,89E+05	1,41E+06	
3091	7,315	1,774	110,751	5,73E+06	5,77E+05	1,18E+06	
3092	7,305	1,354	110,761	1,42E+07	4,85E+05	9,91E+05	
3093	7,315	2,244	110,771	5,31E+06	4,47E+05	9,12E+05	
3094	7,985	9,204	110,671	1,26E+07	1,28E+06	2,41E+06	# G82
3095	7,995	2,084	110,671	8,59E+06	7,54E+05	1,42E+06	
3096	7,995	1,384	110,681	1,95E+07	1,35E+06	2,55E+06	
3097	7,995	8,964	110,691	1,56E+07	1,05E+06	1,99E+06	
3098	7,985	8,004	110,691	1,08E+09	4,24E+07	8,00E+07	
3099	7,985	7,094	110,701	2,75E+07	2,32E+06	4,38E+06	
3100	7,985	0,954	110,711	1,83E+07	8,36E+05	1,58E+06	
3101	7,995	3,514	110,741	9,96E+07	3,22E+06	6,07E+06	
3102	7,985	2,724	110,761	1,23E+06	4,17E+05	7,87E+05	
3103	7,995	4,064	110,801	2,71E+07	1,15E+06	2,16E+06	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3104	8,775	8,794	110,931	8,51E+08	4,48E+07	8,00E+07	# V128
3105	8,775	0,824	110,931	1,66E+08	5,67E+06	1,01E+07	
3106	8,775	8,284	110,941	1,32E+07	1,11E+06	1,98E+06	
3107	8,775	9,174	110,941	4,52E+08	7,53E+06	1,35E+07	
3108	8,785	7,894	110,941	4,22E+06	5,51E+05	9,83E+05	
3109	8,775	1,384	110,941	2,84E+07	1,16E+06	2,08E+06	
3110	8,785	3,494	110,951	1,46E+07	9,31E+05	1,66E+06	
3111	8,775	5,474	110,961	5,37E+07	2,55E+06	4,56E+06	
3112	8,775	8,464	110,971	3,29E+08	1,04E+06	1,86E+06	
3113	8,785	1,724	110,971	5,00E+06	5,24E+05	9,36E+05	
3114	8,775	5,614	110,971	5,49E+07	2,14E+06	3,81E+06	
3115	8,775	2,524	111,011	2,67E+06	5,26E+05	9,39E+05	
3116	7,905	7,924	111,281	4,78E+08	1,21E+07	8,05E+07	# T25
3117	7,915	1,324	111,291	1,89E+07	1,05E+06	6,97E+06	
3118	7,915	4,114	111,371	1,27E+07	7,12E+05	4,75E+06	
3119	7,905	1,954	111,371	2,01E+06	4,27E+05	2,85E+06	
3120	6,975	8,484	111,201	2,78E+06	5,91E+05	9,39E+05	# SK1 Q121/Q22
3121	6,965	2,264	111,221	6,18E+06	7,89E+05	1,25E+06	
3122	6,965	6,964	111,351	1,09E+09	5,04E+07	7,99E+07	
3123	6,965	5,434	111,391	6,41E+06	9,88E+05	1,57E+06	
3124	6,965	6,634	111,401	7,77E+08	4,13E+07	6,56E+07	
3125	6,975	7,894	111,411	3,33E+06	6,61E+05	1,05E+06	
3126	6,975	5,684	111,441	4,74E+05	4,29E+05	6,81E+05	
3127	6,635	8,824	111,261	1,14E+06	4,54E+05	6,88E+05	# SK2 Q121/Q22
3128	6,635	5,424	111,301	3,15E+06	7,71E+05	1,17E+06	
3129	6,635	2,314	111,351	3,34E+06	5,91E+05	8,95E+05	
3130	6,635	6,634	111,371	1,10E+09	5,28E+07	8,00E+07	
3131	6,635	6,964	111,401	9,49E+08	3,93E+07	5,95E+07	
3132	6,645	7,374	111,491	7,37E+07	7,91E+05	1,20E+06	
3133	7,565	7,574	111,461	6,74E+08	3,04E+07	8,01E+07	# SK1 N32
3134	7,565	3,174	111,471	5,52E+06	6,41E+05	1,69E+06	
3135	7,565	6,794	111,491	5,27E+08	2,68E+07	7,06E+07	
3136	6,795	8,224	111,381	1,78E+06	4,58E+05	4,02E+05	# SK2 N32/Q55
3137	6,785	0,774	111,451	2,87E+06	5,35E+05	4,70E+05	
3138	6,785	2,444	111,451	5,00E+06	8,00E+05	7,02E+05	
3139	6,795	3,184	111,471	4,47E+06	7,05E+05	6,18E+05	
3140	6,785	6,784	111,481	1,91E+09	9,15E+07	8,02E+07	
3141	6,785	7,414	111,521	1,15E+09	4,44E+07	3,90E+07	
3142	6,785	1,224	111,531	4,20E+06	5,00E+05	4,38E+05	
3143	7,385	2,464	111,451	7,64E+06	6,74E+05	7,09E+05	# SK1 Q55
3144	7,385	0,904	111,471	5,14E+06	4,45E+05	4,69E+05	
3145	7,385	1,214	111,481	6,97E+06	7,46E+05	7,85E+05	
3146	7,385	7,394	111,491	1,20E+09	7,60E+07	8,00E+07	
3147	7,385	6,774	111,521	6,37E+08	4,35E+07	4,58E+07	
3148	8,715	8,704	111,471	3,03E+08	1,43E+07	7,94E+07	# G60
3149	8,715	7,824	111,481	7,85E+07	5,94E+06	3,30E+07	
3150	8,705	1,994	111,531	3,07E+06	4,34E+05	2,41E+06	
3151	8,725	3,634	111,571	1,85E+07	1,27E+06	7,07E+06	
3152	8,715	4,264	111,571	2,88E+07	1,29E+06	7,16E+06	
3153	8,705	0,764	111,581	1,36E+06	4,51E+05	2,51E+06	
3154	7,265	8,674	112,491	1,04E+08	5,47E+06	1,30E+07	# N76
3155	7,265	7,274	112,501	7,69E+08	3,41E+07	8,12E+07	
3156	7,265	8,904	112,501	3,58E+07	1,73E+06	4,12E+06	
3157	7,265	7,784	112,511	2,18E+08	8,95E+06	2,13E+07	
3158	7,265	1,914	112,521	3,68E+06	4,95E+05	1,18E+06	
3159	7,255	4,194	112,521	3,73E+06	5,39E+05	1,28E+06	
3160	7,265	2,044	112,531	3,38E+06	4,97E+05	1,18E+06	
3161	7,265	2,974	112,541	5,53E+07	1,96E+06	4,67E+06	
3162	7,265	2,674	112,541	3,29E+07	1,23E+06	2,93E+06	
3163	7,275	0,824	112,561	9,75E+06	6,49E+05	1,55E+06	
3164	7,265	1,664	112,561	1,97E+06	4,33E+05	1,03E+06	
3165	7,265	4,504	112,691	2,42E+07	6,46E+05	1,54E+06	
3166	8,065	0,794	112,511	7,48E+07	2,90E+06	4,99E+06	# V151
3167	8,065	2,924	112,521	4,88E+06	5,46E+05	9,41E+05	
3168	8,065	2,104	112,531	8,77E+07	3,06E+06	5,27E+06	
3169	8,065	8,054	112,531	8,46E+08	4,66E+07	8,03E+07	
3170	8,065	9,484	112,531	2,16E+08	1,20E+07	2,06E+07	
3171	8,065	7,544	112,531	1,63E+07	1,42E+06	2,44E+06	
3172	8,065	6,684	112,541	9,65E+06	1,13E+06	1,95E+06	
3173	8,065	9,964	112,561	3,31E+06	6,63E+05	1,14E+06	
3174	8,065	4,494	112,591	2,93E+07	1,12E+06	1,93E+06	
3175	8,905	8,914	112,601	4,40E+08	2,45E+07	8,16E+07	# S34
3176	8,915	7,464	112,611	1,74E+08	8,64E+06	2,88E+07	
3177	8,915	0,844	112,621	2,15E+07	1,25E+06	4,17E+06	
3178	8,915	1,664	112,641	6,48E+06	7,49E+05	2,50E+06	
3179	8,915	3,944	112,671	8,87E+06	7,14E+05	2,38E+06	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3180	8,905	2,214	112,721	1,74E+07	8,86E+05	2,95E+06	
3181	7,665	7,324	112,671	1,49E+06	5,88E+05	9,34E+05	# SK1 Q117
3182	7,655	8,034	112,731	3,95E+06	6,27E+05	9,95E+05	
3183	7,675	2,414	112,811	5,91E+06	6,58E+05	1,04E+06	
3184	7,665	7,654	112,841	1,16E+09	5,06E+07	8,04E+07	
3185	7,655	6,954	112,851	6,99E+08	3,52E+07	5,59E+07	
3186	6,975	6,974	112,821	1,81E+09	1,16E+08	8,06E+07	# SK2 Q117
3187	6,975	7,654	112,821	4,81E+08	2,61E+07	1,81E+07	
3188	6,985	9,154	113,011	6,43E+05	4,39E+05	3,05E+05	
3189	6,985	0,474	113,071	8,01E+05	4,38E+05	3,04E+05	
3190	6,985	7,314	113,181	1,89E+06	5,94E+05	4,12E+05	
3191	7,345	6,764	112,791	1,13E+06	4,58E+05	1,53E+06	# V56
3192	7,335	1,304	112,991	5,85E+06	5,50E+05	1,83E+06	
3193	7,335	0,954	113,081	6,27E+07	2,05E+06	6,83E+06	
3194	7,335	7,334	113,081	9,17E+08	2,37E+07	7,91E+07	
3195	7,335	4,274	113,111	1,63E+07	8,27E+05	2,76E+06	
3196	7,335	7,604	113,111	5,63E+08	5,47E+06	1,82E+07	
3197	7,335	2,214	113,151	1,64E+07	9,38E+05	3,13E+06	
3198	9,325	0,974	113,321	2,57E+07	1,03E+06	2,95E+06	# M160
3199	9,335	2,544	113,361	3,16E+07	1,37E+06	3,90E+06	
3200	9,325	9,344	113,361	4,56E+08	2,78E+07	7,94E+07	
3201	9,325	8,044	113,371	6,55E+07	4,87E+06	1,39E+07	
3202	9,325	7,054	113,381	9,79E+07	6,21E+06	1,77E+07	
3203	9,325	9,014	113,381	2,66E+06	5,91E+05	1,69E+06	
3204	9,325	7,344	113,391	1,36E+07	1,46E+06	4,18E+06	
3205	9,325	1,964	113,401	8,68E+07	2,91E+06	8,32E+06	
3206	9,335	4,254	113,431	1,21E+07	8,20E+05	2,34E+06	
3207	9,335	4,454	113,491	4,19E+07	7,51E+05	2,15E+06	
3208	6,945	7,254	113,371	2,97E+06	5,32E+05	1,09E+06	# HN X1
3209	6,965	6,644	113,381	8,22E+06	6,99E+05	1,43E+06	# HN X2
3210	6,945	6,954	113,571	1,23E+09	3,92E+07	7,99E+07	# SK1 N4/N124
3211	6,945	7,614	113,631	4,40E+08	2,27E+07	4,63E+07	
3212	6,999	7,924	113,571	5,46E+07	1,69E+06	3,45E+06	# HN X3
3213	7,615	7,614	113,581	7,08E+08	2,76E+07	8,11E+07	# SK2 N4/N124
3214	7,615	6,954	113,621	4,47E+08	2,35E+07	6,90E+07	
3215	7,924	7,924	113,341	9,95E+07	3,23E+06	8,07E+07	# HN X4
3216	7,924	6,975	113,581	4,91E+07	2,26E+06	5,64E+07	# HN X5
3217	7,515	7,104	114,531	7,54E+07	1,62E+06	4,51E+06	# N91
3218	7,515	9,184	114,541	3,25E+06	5,10E+05	1,42E+06	
3219	7,525	8,304	114,541	2,74E+06	4,74E+05	1,32E+06	
3220	7,515	3,674	114,551	1,59E+07	1,14E+06	3,16E+06	
3221	7,515	0,774	114,551	3,54E+07	1,47E+06	4,09E+06	
3222	7,525	4,304	114,561	9,58E+06	7,19E+05	2,00E+06	
3223	7,525	2,334	114,561	7,43E+06	7,12E+05	1,98E+06	
3224	7,515	1,234	114,561	8,89E+06	6,39E+05	1,78E+06	
3225	7,515	8,714	114,571	3,45E+06	5,26E+05	1,46E+06	
3226	7,515	10,464	114,571	1,18E+08	6,85E+06	1,90E+07	
3227	7,515	7,514	114,571	6,59E+08	2,86E+07	7,95E+07	
3228	7,515	2,894	114,591	2,21E+06	5,01E+05	1,39E+06	
3229	7,515	7,934	114,591	3,99E+07	4,81E+05	1,34E+06	
3230	7,925	1,774	114,541	7,10E+06	7,13E+05	5,48E+06	# T28
3231	7,925	4,034	114,561	1,25E+07	5,72E+05	4,40E+06	
3232	7,925	7,934	114,571	3,14E+08	1,03E+07	7,89E+07	
3233	7,925	8,284	114,571	9,96E+07	2,48E+06	1,91E+07	
3234	7,925	7,514	114,581	5,63E+07	2,80E+06	2,15E+07	
3235	7,925	1,154	114,581	1,20E+07	7,21E+05	5,55E+06	
3236	7,925	1,284	114,591	1,05E+07	7,60E+05	5,85E+06	
3237	7,925	3,754	114,631	4,48E+06	4,23E+05	3,25E+06	
3238	7,925	4,254	114,681	7,60E+06	6,62E+05	5,09E+06	
3239	8,935	8,924	114,841	2,91E+07	2,15E+06	7,16E+07	# G118
3240	8,925	7,874	114,861	2,08E+07	1,70E+06	4,24E+06	
3241	7,085	8,634	115,211	5,08E+06	7,62E+05	8,66E+05	# Y6
3242	7,085	1,414	115,221	6,69E+06	7,78E+05	8,84E+05	
3243	7,085	6,674	115,231	2,60E+07	1,57E+06	1,78E+06	
3244	7,085	7,074	115,251	1,03E+09	7,04E+07	8,00E+07	
3245	7,085	0,784	115,251	9,01E+05	4,16E+05	4,73E+05	
3246	7,085	7,884	115,251	1,55E+08	8,60E+06	9,77E+06	
3247	7,085	2,564	115,271	6,39E+07	2,67E+06	3,03E+06	
3248	7,085	8,944	115,291	6,18E+06	1,09E+06	1,23E+06	
3249	7,775	2,844	115,291	8,93E+05	4,11E+05	9,13E+05	# I163
3250	7,775	4,154	115,301	3,35E+07	1,07E+06	2,38E+06	
3251	7,775	7,064	115,331	7,55E+07	2,37E+06	5,26E+06	
3252	7,775	7,344	115,341	2,46E+08	7,27E+06	1,61E+07	
3253	7,775	0,884	115,381	1,55E+08	4,50E+06	1,00E+07	
3254	7,775	7,794	115,391	1,59E+09	3,59E+07	7,97E+07	
3255	7,775	9,334	115,391	1,69E+06	5,44E+05	1,21E+06	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3256	7,775	1,904	115,411	1,39E+08	3,02E+06	6,72E+06	
3257	7,775	3,924	115,481	4,12E+07	1,16E+06	2,58E+06	
3258	7,795	3,064	115,611	1,86E+06	4,94E+05	1,10E+06	# s. Ass
3259	8,625	7,064	115,451	5,92E+06	9,26E+05	1,20E+06	# N4
3260	8,625	2,634	115,451	1,02E+07	7,37E+05	9,58E+05	
3261	8,615	3,804	115,461	3,50E+06	4,14E+05	5,37E+05	
3262	8,625	7,854	115,461	1,43E+08	3,57E+06	4,63E+06	
3263	8,625	2,064	115,481	7,34E+06	6,74E+05	8,76E+05	
3264	8,625	8,624	115,491	5,85E+08	1,54E+07	8,09E+07	
3265	8,655	4,184	115,491	2,07E+07	7,80E+05	1,37E+06	# T106
3266	8,655	1,024	115,501	2,76E+07	1,01E+06	1,76E+06	
3267	8,655	0,664	115,511	3,10E+07	1,40E+06	2,45E+06	
3268	8,635	4,364	115,521	7,72E+07	7,82E+05	1,37E+06	
3269	8,655	7,644	115,551	1,45E+08	6,06E+06	1,06E+07	
3270	8,665	7,284	115,621	1,40E+06	5,58E+05	9,79E+05	
3271	9,345	8,474	115,521	5,52E+06	5,36E+05	5,36E+06	# HN gefaltet??
3272	9,355	6,754	115,631	4,33E+07	1,40E+06	1,40E+07	#
3273	9,355	6,934	115,631	4,21E+07	1,26E+06	1,26E+07	#
3274	9,355	9,354	115,651	1,79E+08	7,95E+06	7,95E+07	#
3275	9,355	1,854	115,671	1,58E+07	8,06E+05	8,06E+06	#
3276	9,355	7,404	115,671	1,51E+07	1,09E+06	1,09E+07	#
3277	9,355	2,994	115,681	7,70E+06	6,41E+05	6,41E+06	#
3278	9,345	1,444	115,751	4,98E+06	4,83E+05	4,83E+06	#
3279	7,275	0,784	115,691	1,28E+07	8,92E+05	1,62E+06	# R142
3280	7,265	7,284	115,701	7,41E+08	4,41E+07	8,01E+07	
3281	7,275	9,014	115,701	1,56E+07	1,76E+06	3,20E+06	
3282	7,265	8,204	115,711	2,80E+08	1,45E+07	2,63E+07	
3283	7,265	1,654	115,721	1,02E+08	2,38E+06	4,33E+06	
3284	7,275	1,904	115,741	1,05E+08	3,18E+06	5,79E+06	
3285	7,275	2,964	115,771	7,92E+06	7,48E+05	1,36E+06	
3286	7,275	4,244	115,851	3,01E+07	1,41E+06	2,56E+06	
3287	8,565	7,244	115,931	6,37E+07	8,17E+05	1,34E+06	# F136
3288	8,565	0,834	115,941	4,31E+07	1,73E+06	2,83E+06	
3289	8,565	3,514	115,941	3,21E+06	4,91E+05	8,05E+05	
3290	8,565	7,604	115,941	1,89E+08	1,00E+07	1,64E+07	
3291	8,565	1,164	115,951	8,75E+07	2,73E+06	4,47E+06	
3292	8,565	8,574	115,961	1,02E+09	4,91E+07	8,05E+07	
3293	8,565	4,054	115,961	2,37E+07	9,87E+05	1,62E+06	
3294	8,565	8,914	115,961	2,54E+08	9,22E+06	1,51E+07	
3295	8,565	8,114	115,971	2,16E+08	2,67E+06	4,37E+06	
3296	8,565	7,084	115,981	1,31E+07	1,02E+06	1,67E+06	
3297	8,565	1,964	115,991	3,53E+07	1,30E+06	2,13E+06	
3298	8,565	2,984	116,011	6,21E+07	2,36E+06	3,86E+06	
3299	7,765	1,324	115,971	4,99E+07	1,11E+06	1,32E+06	# T51
3300	7,765	7,744	116,011	1,53E+09	3,23E+07	3,84E+07	
3301	7,765	8,734	116,041	7,95E+07	4,25E+06	5,06E+06	
3302	7,775	4,434	116,051	3,52E+06	5,97E+05	7,11E+05	
3303	7,765	8,034	116,071	3,39E+08	1,95E+06	2,33E+06	
3304	7,765	3,894	116,131	7,64E+07	1,66E+06	1,98E+06	
3305	6,995	1,374	116,041	1,86E+07	9,11E+05	2,94E+06	# Y80
3306	6,995	3,464	116,081	4,53E+06	4,59E+05	1,48E+06	
3307	6,995	3,884	116,081	2,08E+06	4,27E+05	1,38E+06	
3308	6,985	6,984	116,091	6,58E+08	2,48E+07	8,00E+07	
3309	6,985	8,174	116,101	1,09E+08	5,90E+06	1,90E+07	
3310	6,985	2,814	116,121	1,28E+07	9,74E+05	3,14E+06	
3311	6,985	0,754	116,141	9,17E+06	6,98E+05	2,25E+06	
3312	8,405	4,074	116,181	2,55E+06	5,85E+05	2,25E+06	# L18
3313	8,405	8,164	116,271	5,06E+08	8,98E+06	3,45E+07	
3314	8,405	1,484	116,271	3,53E+07	1,19E+06	4,58E+06	
3315	8,405	8,394	116,281	7,31E+08	2,10E+07	8,07E+07	
3316	8,405	0,824	116,291	4,58E+07	1,68E+06	6,46E+06	
3317	8,405	2,974	116,291	4,34E+06	5,71E+05	2,20E+06	
3318	8,405	1,234	116,291	3,99E+07	8,97E+05	3,45E+06	
3319	8,405	6,614	116,301	6,74E+06	8,15E+05	3,13E+06	
3320	8,405	9,154	116,351	1,44E+06	4,28E+05	1,65E+06	
3321	8,405	3,634	116,421	1,00E+07	8,11E+05	3,12E+06	
3322	7,845	9,314	116,201	9,16E+05	4,09E+05	4,98E+05	# S164
3323	7,835	7,834	116,271	1,43E+09	6,59E+07	8,04E+07	
3324	7,845	8,474	116,271	1,40E+06	4,88E+05	5,95E+05	
3325	7,835	7,334	116,281	1,82E+08	7,99E+06	9,74E+06	
3326	7,835	0,874	116,291	6,07E+07	2,50E+06	3,04E+06	
3327	7,835	1,924	116,291	7,27E+07	2,31E+06	2,82E+06	
3328	7,835	3,964	116,291	1,27E+08	3,22E+06	3,93E+06	
3329	7,835	7,064	116,311	1,97E+07	1,17E+06	1,42E+06	
3330	7,835	4,144	116,331	1,43E+08	4,51E+06	5,50E+06	
3331	8,275	1,214	116,281	6,00E+06	5,66E+05	2,18E+06	# W27

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3332	8,265	1,004	116,371	4,04E+06	5,18E+05	1,99E+06	
3333	8,275	7,964	116,381	3,12E+08	4,73E+06	1,82E+07	
3334	8,275	1,804	116,391	2,35E+07	1,30E+06	5,00E+06	
3335	8,275	8,264	116,391	5,03E+08	2,08E+07	8,00E+07	
3336	8,275	7,514	116,401	1,53E+07	9,76E+05	3,76E+06	
3337	8,275	4,334	116,481	1,20E+07	6,93E+05	2,67E+06	
3338	8,275	3,294	116,491	1,00E+07	7,54E+05	2,90E+06	
3339	9,075	6,964	116,301	6,58E+05	4,15E+05	1,60E+06	# G111
3340	9,075	6,694	116,331	2,22E+06	5,06E+05	1,95E+06	
3341	9,085	8,504	116,411	1,42E+07	5,42E+05	2,08E+06	
3342	9,075	8,044	116,471	1,32E+08	8,09E+06	3,11E+07	
3343	9,075	9,104	116,481	5,53E+08	2,10E+07	8,08E+07	
3344	9,085	1,604	116,491	1,61E+07	8,60E+05	3,31E+06	
3345	9,085	0,794	116,501	6,14E+07	2,01E+06	7,73E+06	
3346	9,075	10,214	116,521	3,68E+06	7,48E+05	2,88E+06	
3347	9,085	3,204	116,531	4,05E+06	7,57E+05	2,91E+06	
3348	9,085	4,264	116,531	2,17E+07	7,78E+05	2,99E+06	
3349	9,075	3,904	116,561	2,95E+07	1,26E+06	4,85E+06	
3350	8,785	5,184	116,731	2,05E+07	1,07E+06	1,42E+06	# E130
3351	8,795	1,434	116,761	3,94E+06	4,54E+05	6,05E+05	
3352	8,795	3,334	116,771	3,65E+07	1,71E+06	2,28E+06	
3353	8,795	8,464	116,771	2,17E+08	3,13E+06	4,17E+06	
3354	8,795	7,824	116,781	1,24E+08	9,50E+06	1,27E+07	
3355	8,785	8,794	116,781	1,22E+09	6,06E+07	8,09E+07	
3356	8,795	2,384	116,781	8,06E+07	1,67E+06	2,23E+06	
3357	8,795	0,794	116,791	1,15E+07	8,58E+05	1,14E+06	
3358	8,795	2,004	116,801	1,14E+08	4,16E+06	5,54E+06	
3359	8,795	7,504	116,811	1,18E+06	4,98E+05	6,64E+05	
3360	8,785	9,134	116,821	4,89E+08	2,46E+06	3,28E+06	
3361	8,795	8,144	116,821	1,72E+06	5,93E+05	7,91E+05	
3362	8,805	9,674	116,831	6,92E+05	4,14E+05	5,51E+05	
3363	8,805	4,004	116,971	1,71E+07	1,08E+06	1,44E+06	
3364	7,435	8,324	116,801	5,77E+07	5,37E+05	5,37E+05	# I166
3365	7,425	1,604	116,831	1,12E+08	3,00E+06	3,00E+06	
3366	7,425	1,014	116,851	1,43E+08	4,52E+06	4,52E+06	
3367	7,425	7,414	116,851	1,36E+09	8,04E+07	8,04E+07	
3368	7,425	7,804	116,861	3,39E+08	2,83E+06	2,83E+06	
3369	7,425	8,064	116,861	1,77E+08	1,15E+07	1,15E+07	
3370	7,425	1,894	116,901	1,14E+08	3,05E+06	3,05E+06	
3371	7,425	4,224	116,911	6,37E+07	2,43E+06	2,43E+06	
3372	6,925	7,544	116,801	1,02E+08	3,72E+06	2,86E+07	# A45
3373	6,925	6,944	116,831	4,27E+08	1,01E+07	7,77E+07	
3374	6,925	1,414	116,841	3,37E+07	1,19E+06	9,18E+06	
3375	9,185	3,494	116,711	3,75E+06	4,54E+05	9,27E+05	# T120
3376	9,185	5,664	116,811	8,77E+06	7,92E+05	1,62E+06	
3377	9,185	8,794	116,821	4,14E+08	1,06E+07	2,16E+07	
3378	9,185	9,184	116,831	9,24E+08	3,92E+07	7,99E+07	
3379	9,185	7,864	116,841	4,34E+06	8,15E+05	1,66E+06	
3380	9,185	2,654	116,841	5,38E+06	6,03E+05	1,23E+06	
3381	9,185	0,854	116,841	7,61E+07	2,46E+06	5,01E+06	
3382	9,195	8,464	116,851	3,39E+06	4,25E+05	8,67E+05	# s. Ass
3383	9,185	3,904	116,861	2,01E+07	1,01E+06	2,07E+06	
3384	9,185	1,354	116,861	8,35E+07	2,61E+06	5,33E+06	
3385	9,175	5,464	116,881	1,04E+07	7,69E+05	1,57E+06	
3386	8,725	7,474	116,891	1,21E+06	4,49E+05	1,50E+06	# F89
3387	8,725	5,504	116,921	1,43E+07	9,08E+05	3,03E+06	
3388	8,725	8,714	116,931	8,37E+08	2,39E+07	7,95E+07	
3389	8,725	9,184	116,941	1,84E+08	3,44E+06	1,15E+07	
3390	8,725	0,784	116,941	3,83E+07	1,51E+06	5,02E+06	
3391	8,725	2,334	116,971	8,24E+06	7,50E+05	2,50E+06	
3392	8,715	4,384	116,971	5,03E+06	7,55E+05	2,52E+06	
3393	8,725	7,074	116,981	1,65E+07	1,03E+06	3,45E+06	
3394	8,725	1,314	116,991	1,59E+07	9,05E+05	3,02E+06	
3395	7,705	8,814	117,061	1,52E+06	5,17E+05	1,72E+06	# s. Ass
3396	7,715	5,384	117,131	3,13E+06	6,12E+05	2,04E+06	
3397	7,725	7,724	117,141	8,48E+08	3,97E+07	8,11E+07	# T62
3398	7,725	1,164	117,161	4,02E+07	1,33E+06	2,72E+06	
3399	7,725	8,474	117,191	1,28E+07	1,16E+06	2,38E+06	
3400	7,725	9,054	117,191	1,56E+07	1,28E+06	2,61E+06	
3401	7,725	0,734	117,211	5,89E+07	1,97E+06	4,01E+06	
3402	7,735	1,834	117,241	6,72E+06	6,74E+05	1,38E+06	
3403	7,725	4,514	117,241	9,42E+07	2,07E+06	4,23E+06	
3404	7,725	1,554	117,251	9,06E+06	6,11E+05	1,25E+06	
3405	7,725	3,934	117,261	1,42E+06	4,70E+05	9,60E+05	
3406	7,345	8,464	117,441	5,52E+05	4,34E+05	8,86E+05	# s. Ass
3407	7,345	2,284	117,461	2,51E+06	4,89E+05	9,99E+05	# s. Ass

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3408	7,335	3,244	117,471	9,54E+06	8,46E+05	1,73E+06	
3409	7,325	9,664	117,541	1,81E+08	1,18E+07	2,42E+07	
3410	7,335	4,224	117,541	3,35E+07	1,34E+06	2,74E+06	
3411	7,325	7,324	117,551	8,54E+08	3,76E+07	7,99E+07	# L11
3412	7,325	0,814	117,551	9,70E+07	3,48E+06	7,41E+06	
3413	7,325	9,054	117,561	8,54E+07	4,03E+06	8,58E+06	
3414	7,335	1,374	117,561	2,89E+07	1,21E+06	2,58E+06	
3415	7,325	1,804	117,601	2,42E+07	1,04E+06	2,22E+06	
3416	7,335	5,334	117,631	1,39E+07	8,29E+05	1,76E+06	
3417	8,275	9,234	117,621	5,93E+05	4,64E+05	1,03E+06	# R97
3418	8,265	3,354	117,631	1,78E+06	5,13E+05	1,14E+06	# s. Ass
3419	8,265	7,284	117,651	9,78E+07	6,43E+06	1,43E+07	
3420	8,265	8,264	117,651	7,01E+08	3,63E+07	8,06E+07	
3421	8,265	6,414	117,661	1,71E+07	1,93E+06	4,29E+06	
3422	8,265	8,884	117,661	2,93E+06	7,41E+05	1,65E+06	
3423	8,265	1,884	117,661	1,38E+08	3,82E+06	8,48E+06	
3424	8,265	7,634	117,681	1,05E+08	5,47E+06	1,22E+07	
3425	8,265	0,814	117,691	2,31E+07	1,09E+06	2,42E+06	
3426	8,275	3,984	117,821	1,42E+07	8,19E+05	1,82E+06	
3427	8,275	2,734	117,841	9,18E+05	5,01E+05	1,11E+06	
3428	8,085	6,684	117,711	4,12E+07	2,49E+06	8,58E+06	# S152
3429	8,085	0,884	117,721	1,84E+07	1,02E+06	3,51E+06	
3430	8,075	8,074	117,741	7,83E+08	2,31E+07	7,97E+07	
3431	8,085	2,074	117,741	2,88E+07	1,15E+06	3,97E+06	
3432	8,085	4,514	117,751	2,10E+07	8,70E+05	3,00E+06	
3433	8,085	9,944	117,761	3,97E+06	6,75E+05	2,33E+06	
3434	8,085	3,354	117,861	8,43E+06	7,98E+05	2,75E+06	
3435	8,075	8,514	117,931	1,97E+06	4,20E+05	1,45E+06	
3436	8,385	7,844	117,841	1,52E+08	1,76E+06	4,63E+06	# E30
3437	8,385	8,374	117,851	8,27E+08	3,08E+07	8,09E+07	
3438	8,375	1,524	117,871	3,80E+07	7,94E+05	2,09E+06	
3439	8,385	1,974	117,881	1,35E+08	3,27E+06	8,61E+06	
3440	8,385	7,534	117,891	2,37E+08	8,38E+06	2,21E+07	
3441	8,385	4,254	117,921	4,16E+07	1,69E+06	4,45E+06	
3442	7,565	6,944	117,861	3,77E+07	2,39E+06	1,26E+07	# A24
3443	7,565	8,214	117,861	7,84E+07	2,94E+06	1,55E+07	
3444	7,565	0,774	117,861	2,33E+07	1,10E+06	5,78E+06	
3445	7,575	7,584	117,871	9,75E+08	1,50E+07	7,87E+07	
3446	7,565	3,644	117,871	3,36E+06	5,22E+05	2,75E+06	
3447	7,575	1,414	117,881	7,74E+07	1,86E+06	9,76E+06	
3448	8,745	8,354	117,851	6,47E+07	4,79E+05	2,99E+06	# K50
3449	8,755	0,894	117,941	2,33E+06	4,80E+05	3,00E+06	
3450	8,745	1,334	117,951	9,77E+06	6,88E+05	4,30E+06	
3451	8,745	8,734	117,951	4,85E+08	1,27E+07	7,94E+07	
3452	8,745	8,154	117,951	9,92E+06	8,40E+05	5,25E+06	
3453	8,745	7,744	117,961	1,26E+08	5,57E+06	3,48E+07	
3454	8,745	1,794	117,971	5,58E+07	1,68E+06	1,05E+07	
3455	8,745	3,914	118,071	7,66E+06	7,47E+05	4,67E+06	
3456	6,415	7,614	117,991	1,15E+07	8,74E+05	2,43E+06	# V95
3457	6,405	0,594	118,011	2,93E+07	1,21E+06	3,36E+06	
3458	6,415	-0,426	118,021	5,08E+07	2,21E+06	6,15E+06	
3459	6,415	8,034	118,021	3,82E+07	1,33E+06	3,70E+06	
3460	6,415	6,414	118,031	5,36E+08	2,88E+07	8,01E+07	
3461	6,415	8,294	118,031	1,20E+08	5,33E+06	1,48E+07	
3462	6,415	1,874	118,031	4,38E+07	1,71E+06	4,75E+06	
3463	6,415	7,284	118,031	1,53E+08	8,07E+06	2,24E+07	
3464	6,415	0,754	118,041	3,22E+07	1,35E+06	3,74E+06	
3465	6,405	3,984	118,061	9,64E+06	6,65E+05	1,85E+06	
3466	6,415	4,414	118,071	5,63E+06	4,26E+05	1,18E+06	
3467	6,415	2,764	118,121	1,60E+07	1,12E+06	3,10E+06	
3468	8,025	8,704	118,031	3,47E+06	4,78E+05	8,24E+05	# L53
3469	8,025	0,844	118,111	7,09E+07	1,92E+06	3,31E+06	
3470	8,025	8,044	118,111	1,36E+09	4,70E+07	8,10E+07	
3471	8,025	7,724	118,121	9,24E+08	9,13E+06	1,57E+07	
3472	8,025	7,504	118,121	2,89E+08	6,55E+06	1,13E+07	
3473	8,025	1,784	118,121	1,67E+08	5,25E+06	9,05E+06	
3474	8,025	1,264	118,141	4,48E+07	1,38E+06	2,37E+06	
3475	8,025	3,954	118,181	3,96E+07	1,66E+06	2,86E+06	
3476	7,625	1,984	118,181	9,47E+07	2,90E+06	3,67E+06	# S107/ D67
3477	7,625	1,344	118,201	8,86E+07	1,62E+06	2,05E+06	
3478	7,635	2,464	118,241	3,26E+07	1,19E+06	1,50E+06	
3479	7,635	9,204	118,261	1,05E+07	1,02E+06	1,30E+06	
3480	7,635	7,624	118,281	1,87E+09	6,33E+07	8,01E+07	
3481	7,635	6,994	118,291	1,51E+06	4,97E+05	6,29E+05	
3482	9,005	8,714	118,141	4,37E+06	8,37E+05	1,67E+06	# N140
3483	9,015	0,984	118,201	6,25E+07	1,90E+06	3,79E+06	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3484	9,015	7,624	118,231	7,83E+06	5,00E+05	1,00E+06	
3485	9,015	9,024	118,251	8,99E+08	4,05E+07	8,10E+07	
3486	9,015	8,264	118,251	2,56E+08	1,44E+07	2,88E+07	
3487	9,015	2,094	118,271	6,00E+07	1,67E+06	3,34E+06	
3488	9,015	1,854	118,271	5,92E+07	1,36E+06	2,71E+06	
3489	9,015	2,924	118,281	6,68E+07	2,57E+06	5,14E+06	
3490	9,025	9,474	118,281	7,78E+05	4,38E+05	8,76E+05	
3491	9,015	7,274	118,301	1,99E+07	1,73E+06	3,46E+06	
3492	9,015	3,904	118,331	1,88E+07	1,05E+06	2,09E+06	
3493	9,015	4,254	118,361	3,10E+07	1,30E+06	2,60E+06	
3494	7,875	9,424	118,151	4,28E+05	4,33E+05	6,98E+05	# K119
3495	7,875	3,784	118,291	2,68E+07	1,30E+06	2,10E+06	
3496	7,875	1,374	118,301	9,61E+07	2,60E+06	4,20E+06	
3497	7,875	8,924	118,301	7,56E+07	5,39E+06	8,69E+06	
3498	7,875	7,874	118,311	1,30E+09	4,97E+07	8,02E+07	
3499	7,875	7,274	118,321	1,30E+07	7,58E+05	1,22E+06	
3500	7,875	5,714	118,321	2,60E+07	2,38E+06	3,83E+06	
3501	7,875	1,004	118,341	3,60E+07	1,05E+06	1,70E+06	
3502	7,885	6,994	118,361	1,04E+06	4,66E+05	7,51E+05	
3503	7,875	4,474	118,361	1,03E+08	1,47E+06	2,36E+06	
3504	7,885	2,494	118,361	4,79E+06	5,48E+05	8,84E+05	
3505	7,885	8,464	118,361	1,55E+07	9,46E+05	1,53E+06	
3506	8,515	6,734	118,361	1,29E+07	9,66E+05	9,66E+05	# S40/ H64
3507	8,525	7,614	118,361	4,14E+07	1,97E+06	1,97E+06	
3508	8,515	8,504	118,391	2,06E+09	8,13E+07	8,13E+07	
3509	8,515	0,724	118,401	2,00E+08	4,92E+06	4,92E+06	
3510	8,515	9,174	118,411	1,35E+08	4,71E+06	4,71E+06	
3511	8,525	4,434	118,421	1,80E+08	3,45E+06	3,45E+06	
3512	8,535	7,284	118,431	6,55E+05	4,04E+05	4,04E+05	
3513	8,515	3,094	118,431	2,36E+07	9,15E+05	9,15E+05	
3514	8,525	9,804	118,431	1,17E+07	1,13E+06	1,13E+06	
3515	8,515	1,184	118,491	7,96E+07	2,06E+06	2,06E+06	
3516	8,525	6,454	118,511	5,77E+06	6,64E+05	6,64E+05	
3517	8,525	2,694	118,521	2,12E+07	1,06E+06	1,06E+06	
3518	8,515	5,754	118,531	1,45E+07	9,05E+05	9,05E+05	
3519	7,645	3,474	118,461	7,45E+06	6,04E+05	7,65E+05	# S107/ D67
3520	7,645	0,644	118,561	1,27E+08	2,92E+06	3,69E+06	
3521	7,645	8,664	118,621	1,95E+08	7,05E+06	8,92E+06	
3522	7,655	9,524	118,631	3,11E+06	7,36E+05	9,31E+05	
3523	7,665	5,114	118,801	1,72E+06	4,30E+05	5,44E+05	
3524	7,955	0,744	118,671	3,51E+07	1,27E+06	2,49E+06	# A125
3525	7,955	7,944	118,701	1,31E+09	4,11E+07	8,06E+07	
3526	7,955	6,754	118,711	1,45E+07	1,39E+06	2,73E+06	
3527	7,965	8,444	118,721	5,78E+07	1,80E+06	3,54E+06	
3528	7,965	8,764	118,721	8,54E+06	7,91E+05	1,55E+06	
3529	7,955	2,814	118,731	1,07E+07	8,95E+05	1,75E+06	
3530	7,965	1,514	118,731	7,96E+07	3,28E+06	6,43E+06	
3531	7,295	3,294	118,691	3,71E+06	4,91E+05	7,92E+05	# K165/ L162/ R73
3532	7,295	8,914	118,711	9,50E+07	6,08E+06	9,81E+06	
3533	7,305	0,874	118,731	9,67E+07	2,17E+06	3,49E+06	
3534	7,295	8,384	118,731	4,70E+07	1,72E+06	2,78E+06	
3535	7,305	1,934	118,751	2,52E+08	4,34E+06	7,00E+06	
3536	7,315	7,314	118,761	1,82E+09	4,97E+07	8,02E+07	
3537	7,325	4,174	118,831	1,05E+08	2,50E+06	4,04E+06	
3538	7,325	7,824	118,861	3,81E+08	8,79E+06	1,42E+07	
3539	7,335	9,644	119,061	7,92E+05	4,80E+05	7,74E+05	
3540	9,075	7,324	118,781	5,79E+06	8,92E+05	3,72E+06	# V85
3541	9,075	9,074	118,781	7,11E+08	1,93E+07	8,03E+07	
3542	9,075	9,664	118,791	5,68E+07	3,75E+06	1,56E+07	
3543	9,065	4,804	118,801	5,89E+06	6,68E+05	2,78E+06	
3544	9,075	1,954	118,801	1,57E+07	9,12E+05	3,80E+06	
3545	9,075	0,814	118,811	6,96E+07	2,70E+06	1,12E+07	
3546	9,075	5,134	118,861	1,29E+07	8,18E+05	3,41E+06	
3547	8,665	2,094	118,601	1,80E+07	1,08E+06	4,30E+06	# Y75
3548	8,655	8,904	118,611	2,23E+08	5,30E+06	2,12E+07	
3549	8,655	7,734	118,611	4,23E+07	2,08E+06	8,33E+06	
3550	8,665	0,884	118,611	1,63E+07	9,29E+05	3,72E+06	
3551	8,655	3,034	118,611	4,34E+07	1,82E+06	7,28E+06	
3552	8,655	8,674	118,631	5,81E+08	2,03E+07	8,13E+07	
3553	8,655	7,274	118,631	8,26E+07	5,60E+06	2,24E+07	
3554	8,665	4,334	118,811	3,54E+06	5,38E+05	2,15E+06	
3555	8,665	8,394	118,951	3,29E+06	5,40E+05	2,16E+06	
3556	8,435	5,634	118,841	4,03E+06	5,90E+05	8,94E+05	# N123
3557	8,435	5,464	118,871	5,03E+06	9,13E+05	1,38E+06	
3558	8,445	1,354	118,881	1,45E+06	4,30E+05	6,51E+05	
3559	8,445	2,854	118,901	1,05E+07	5,59E+05	8,48E+05	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3560	8,445	6,954	118,911	4,87E+06	6,92E+05	1,05E+06	
3561	8,435	8,814	118,941	9,09E+08	1,96E+07	2,97E+07	
3562	8,445	7,824	118,951	2,10E+08	5,28E+06	8,00E+06	
3563	8,445	4,484	118,961	6,23E+07	1,48E+06	2,24E+06	
3564	8,435	6,694	118,961	2,09E+06	5,43E+05	8,22E+05	
3565	8,445	0,784	118,961	2,54E+08	4,27E+06	6,46E+06	
3566	8,455	8,474	118,961	2,69E+09	5,31E+07	8,04E+07	
3567	8,475	9,144	118,941	1,49E+08	1,72E+06	2,61E+06	# I133
3568	8,475	4,044	118,951	1,34E+07	8,08E+05	1,22E+06	
3569	8,465	3,164	118,991	1,65E+07	7,11E+05	1,08E+06	
3570	8,475	8,154	118,991	1,06E+09	7,77E+06	1,18E+07	
3571	8,475	1,934	119,001	1,48E+08	3,56E+06	5,39E+06	
3572	8,925	0,824	118,811	2,56E+07	1,32E+06	2,65E+06	# K137
3573	8,915	7,294	118,811	1,24E+07	6,77E+05	1,35E+06	
3574	8,915	1,174	118,831	3,19E+07	1,02E+06	2,03E+06	
3575	8,915	8,264	118,841	1,57E+08	2,37E+06	4,75E+06	
3576	8,915	7,594	118,851	1,58E+07	1,61E+06	3,22E+06	
3577	8,915	8,914	118,861	6,87E+08	4,01E+07	8,02E+07	
3578	8,915	8,034	118,861	1,06E+08	6,72E+06	1,34E+07	
3579	8,915	8,574	118,871	4,02E+08	6,65E+06	1,33E+07	
3580	8,915	1,814	118,881	1,12E+08	3,02E+06	6,04E+06	
3581	8,925	2,894	118,931	2,13E+07	1,28E+06	2,56E+06	
3582	8,925	3,844	119,081	2,09E+07	1,38E+06	2,75E+06	
3583	8,275	1,284	118,981	4,92E+06	7,22E+05	4,01E+06	# T47
3584	8,275	4,334	118,991	1,64E+06	4,86E+05	2,70E+06	
3585	8,275	8,264	119,031	5,98E+08	1,43E+07	7,97E+07	
3586	8,275	3,734	119,171	9,20E+06	7,79E+05	4,33E+06	
3587	8,285	7,704	119,181	3,26E+07	8,32E+05	4,62E+06	
3588	7,735	4,024	119,161	4,15E+06	4,51E+05	1,25E+06	# I72
3589	7,735	7,734	119,221	8,78E+08	2,88E+07	7,99E+07	
3590	7,735	0,824	119,231	9,83E+07	3,00E+06	8,33E+06	
3591	7,735	8,384	119,231	1,13E+08	6,06E+06	1,68E+07	
3592	7,735	1,334	119,241	1,37E+07	5,82E+05	1,62E+06	
3593	7,735	8,924	119,241	1,65E+07	1,59E+06	4,40E+06	
3594	7,735	7,294	119,251	1,39E+08	6,52E+06	1,81E+07	
3595	7,745	1,884	119,251	9,35E+07	3,11E+06	8,64E+06	
3596	7,745	2,324	119,261	3,03E+07	8,94E+05	2,48E+06	
3597	7,735	3,854	119,281	1,42E+06	5,03E+05	1,40E+06	
3598	7,745	3,304	119,391	6,27E+06	6,75E+05	1,88E+06	
3599	8,365	4,014	119,091	2,52E+06	4,26E+05	8,52E+05	# M71/ V68
3600	8,365	3,814	119,101	1,68E+06	4,36E+05	8,73E+05	
3601	8,375	3,174	119,191	5,78E+06	5,33E+05	1,07E+06	
3602	8,385	9,204	119,211	1,61E+06	4,29E+05	8,58E+05	
3603	8,375	8,384	119,221	1,34E+09	4,05E+07	8,10E+07	
3604	8,365	7,724	119,221	1,19E+08	5,34E+06	1,07E+07	
3605	8,375	0,774	119,231	1,02E+08	2,32E+06	4,63E+06	
3606	8,365	7,284	119,241	7,33E+06	1,20E+06	2,40E+06	
3607	8,375	1,324	119,241	2,25E+07	9,05E+05	1,81E+06	
3608	8,375	2,334	119,261	6,80E+07	1,22E+06	2,45E+06	
3609	8,375	1,844	119,261	1,28E+08	2,91E+06	5,83E+06	
3610	9,645	1,534	119,161	6,48E+06	5,29E+05	2,03E+06	# G10
3611	9,645	9,054	119,201	1,01E+08	5,12E+06	1,97E+07	
3612	9,645	9,664	119,201	3,91E+08	2,06E+07	7,92E+07	
3613	9,645	7,324	119,211	1,24E+08	6,41E+06	2,47E+07	
3614	9,645	0,814	119,211	5,79E+07	2,39E+06	9,18E+06	
3615	9,645	1,854	119,221	5,23E+06	5,08E+05	1,95E+06	
3616	9,645	5,214	119,231	2,18E+06	4,70E+05	1,81E+06	
3617	9,645	3,174	119,251	5,51E+06	6,75E+05	2,60E+06	
3618	9,655	4,184	119,271	2,57E+07	1,21E+06	4,66E+06	
3619	8,135	9,824	119,171	5,13E+07	3,20E+06	3,36E+06	# N124/ E134
3620	8,145	3,004	119,281	1,49E+07	7,27E+05	7,65E+05	
3621	8,145	7,084	119,321	4,05E+06	5,42E+05	5,71E+05	
3622	8,155	2,864	119,331	2,01E+07	8,14E+05	8,57E+05	
3623	7,615	1,144	119,211	2,49E+07	1,02E+06	1,83E+06	# Q55
3624	7,615	0,824	119,241	2,39E+07	1,09E+06	1,95E+06	
3625	7,615	7,614	119,261	1,55E+09	4,53E+07	8,09E+07	
3626	7,615	2,294	119,291	6,57E+07	2,21E+06	3,95E+06	
3627	7,615	8,044	119,331	8,85E+07	1,68E+06	3,00E+06	
3628	7,625	4,244	119,371	3,75E+07	1,29E+06	2,31E+06	
3629	7,335	7,804	119,241	3,16E+08	8,96E+06	1,44E+07	# L162
3630	7,335	0,834	119,291	7,95E+07	2,40E+06	3,86E+06	
3631	7,345	2,874	119,301	1,82E+07	1,10E+06	1,77E+06	
3632	7,345	7,054	119,311	7,29E+08	9,93E+06	1,60E+07	
3633	7,345	9,334	119,331	2,10E+07	1,75E+06	2,82E+06	
3634	7,345	9,004	119,401	3,31E+06	6,22E+05	1,00E+06	
3635	8,145	3,644	119,381	2,29E+07	8,06E+05	8,49E+05	# E134/ N124

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3636	8,145	6,744	119,391	2,24E+06	4,37E+05	4,60E+05	
3637	8,155	7,254	119,421	1,11E+06	5,19E+05	5,46E+05	
3638	8,145	8,464	119,431	1,30E+09	1,85E+07	1,95E+07	
3639	8,145	1,204	119,431	1,06E+08	1,94E+06	2,04E+06	
3640	8,155	9,154	119,431	9,01E+06	7,99E+05	8,41E+05	
3641	8,145	8,154	119,451	2,04E+09	7,63E+07	8,04E+07	
3642	8,145	0,824	119,461	1,00E+08	2,62E+06	2,76E+06	
3643	7,895	8,394	119,181	1,47E+07	1,13E+06	2,18E+06	# 2 versch. Spuren
3644	7,905	1,884	119,191	8,48E+06	7,09E+05	1,36E+06	
3645	7,895	0,794	119,211	2,30E+06	5,30E+05	1,02E+06	
3646	7,885	7,634	119,261	2,83E+08	1,87E+06	3,59E+06	
3647	7,895	4,154	119,381	9,28E+05	4,55E+05	8,76E+05	
3648	7,885	6,684	119,471	1,59E+06	5,63E+05	1,08E+06	
3649	7,875	7,884	119,471	1,18E+09	4,19E+07	8,05E+07	# D5
3650	7,875	8,604	119,481	7,80E+07	4,45E+06	8,57E+06	
3651	7,875	7,074	119,491	1,49E+08	1,14E+07	2,19E+07	
3652	7,875	2,514	119,491	4,76E+07	2,19E+06	4,22E+06	
3653	7,885	1,424	119,591	2,44E+06	5,05E+05	9,71E+05	
3654	6,595	4,804	119,661	6,02E+05	4,04E+05	5,78E+06	# I19
3655	6,595	6,604	119,661	1,99E+08	5,80E+06	8,28E+07	
3656	6,595	0,814	119,681	3,07E+07	1,12E+06	1,60E+07	
3657	8,145	4,064	119,541	7,75E+07	2,13E+06	2,39E+06	# G21
3658	8,145	7,604	119,601	2,05E+08	8,81E+06	9,90E+06	
3659	8,145	2,024	119,601	2,20E+08	4,85E+06	5,45E+06	
3660	8,145	8,884	119,621	1,79E+07	8,57E+05	9,63E+05	
3661	8,235	3,084	119,701	9,45E+05	4,55E+05	2,53E+06	# V23
3662	8,225	8,204	119,701	1,03E+09	1,42E+07	7,88E+07	
3663	8,225	1,534	119,711	2,73E+07	8,95E+05	4,97E+06	
3664	8,225	1,934	119,721	4,41E+07	9,72E+05	5,40E+06	
3665	8,225	7,574	119,751	1,48E+08	3,51E+06	1,95E+07	
3666	8,225	0,874	119,751	7,27E+07	1,54E+06	8,57E+06	
3667	8,235	6,944	119,841	2,45E+06	5,64E+05	3,14E+06	
3668	8,225	3,274	119,861	3,08E+06	4,69E+05	2,60E+06	
3669	8,235	9,814	119,861	3,02E+06	6,49E+05	3,60E+06	
3670	8,235	3,574	119,981	3,73E+06	4,91E+05	2,73E+06	
3671	7,035	3,954	119,881	1,01E+06	4,33E+05	9,62E+05	# D161
3672	7,035	7,054	119,901	7,33E+08	3,59E+07	7,98E+07	
3673	7,035	7,344	119,901	6,78E+08	9,07E+06	2,02E+07	
3674	7,035	1,894	119,901	8,54E+07	2,99E+06	6,64E+06	
3675	7,035	7,804	119,901	5,49E+07	2,69E+06	5,99E+06	
3676	7,035	9,344	119,901	8,81E+07	7,11E+06	1,58E+07	
3677	7,035	8,034	119,911	1,80E+07	1,71E+06	3,81E+06	
3678	7,035	9,014	119,931	8,85E+06	8,46E+05	1,88E+06	
3679	7,045	0,834	119,931	1,82E+07	1,13E+06	2,52E+06	
3680	7,035	2,854	119,951	3,67E+07	1,85E+06	4,10E+06	
3681	7,045	4,394	120,001	2,07E+07	9,73E+05	2,16E+06	
3682	8,415	3,964	119,871	2,03E+07	8,39E+05	1,20E+06	# Q117
3683	8,405	2,044	119,891	8,40E+07	1,63E+06	2,33E+06	
3684	8,405	4,104	119,951	1,64E+07	8,09E+05	1,16E+06	
3685	8,505	4,374	119,661	2,27E+07	1,10E+06	1,37E+06	# A69
3686	8,505	9,814	119,721	5,98E+06	8,99E+05	1,12E+06	
3687	8,515	7,634	119,741	2,29E+07	1,19E+06	1,48E+06	
3688	8,515	2,484	119,771	3,52E+06	4,80E+05	6,00E+05	
3689	8,515	3,454	119,841	3,36E+07	9,16E+05	1,14E+06	
3690	8,515	3,264	119,851	3,02E+07	1,14E+06	1,43E+06	
3691	8,515	6,844	119,851	5,57E+06	7,02E+05	8,77E+05	
3692	8,515	0,794	119,861	1,45E+08	3,63E+06	4,54E+06	
3693	8,525	9,224	119,891	3,69E+06	5,74E+05	7,17E+05	
3694	8,515	8,504	119,901	1,86E+09	6,47E+07	8,08E+07	
3695	8,515	2,014	119,951	7,16E+07	2,07E+06	2,59E+06	
3696	8,535	7,274	119,981	1,14E+06	4,35E+05	5,44E+05	
3697	8,525	1,394	120,031	1,20E+08	3,74E+06	4,67E+06	
3698	8,525	3,934	120,081	2,30E+07	1,01E+06	1,27E+06	
3699	7,635	7,624	120,101	1,06E+09	3,09E+07	8,12E+07	# L98
3700	7,635	8,864	120,121	1,16E+07	1,27E+06	3,34E+06	
3701	7,635	8,284	120,121	2,13E+08	1,11E+07	2,91E+07	
3702	7,635	1,864	120,131	1,02E+08	3,40E+06	8,96E+06	
3703	7,635	0,814	120,141	5,70E+07	2,06E+06	5,42E+06	
3704	7,635	6,424	120,181	1,29E+06	4,60E+05	1,21E+06	
3705	7,635	1,474	120,191	3,54E+07	1,16E+06	3,04E+06	
3706	7,635	3,974	120,211	1,80E+07	8,46E+05	2,23E+06	
3707	7,925	1,874	120,221	3,30E+06	4,83E+05	2,54E+06	# A44/ M1
3708	7,925	7,164	120,301	2,82E+06	5,36E+05	2,82E+06	
3709	7,925	7,924	120,321	7,36E+08	1,56E+07	8,21E+07	
3710	7,915	1,354	120,341	3,32E+07	1,36E+06	7,16E+06	
3711	7,915	0,904	120,361	9,72E+06	6,67E+05	3,51E+06	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3712	7,825	7,304	120,261	3,01E+08	5,54E+06	5,54E+06	# 4Pos: N32.V61.N77.V126
3713	7,815	3,164	120,331	1,54E+07	6,82E+05	6,82E+05	# 527/ 1001/ 1281/ 2083
3714	7,815	8,414	120,341	2,69E+08	5,13E+06	5,13E+06	
3715	7,825	4,364	120,371	2,29E+08	4,07E+06	4,07E+06	
3716	7,825	2,434	120,371	2,61E+07	9,44E+05	9,44E+05	
3717	7,825	6,944	120,411	4,74E+07	1,06E+06	1,06E+06	
3718	7,815	1,534	120,421	1,49E+08	2,47E+06	2,47E+06	
3719	7,815	6,764	120,431	1,94E+07	1,03E+06	1,03E+06	
3720	7,815	5,444	120,451	3,59E+06	7,01E+05	7,01E+05	
3721	7,815	7,824	120,531	3,85E+09	1,28E+08	8,03E+07	
3722	7,815	2,804	120,541	1,99E+07	7,88E+05	7,88E+05	
3723	7,815	0,754	120,561	2,40E+08	5,56E+06	5,56E+06	
3724	7,815	1,864	120,571	2,04E+08	3,62E+06	3,62E+06	
3725	7,815	8,714	120,621	2,65E+08	7,27E+06	7,27E+06	
3726	9,215	7,604	120,481	2,31E+07	2,22E+06	3,21E+06	# V66
3727	9,215	0,704	120,491	2,40E+08	6,85E+06	9,93E+06	
3728	9,215	9,224	120,501	1,06E+09	5,55E+07	8,04E+07	
3729	9,215	8,524	120,511	4,48E+07	2,39E+06	3,47E+06	
3730	9,215	8,894	120,521	5,10E+08	1,74E+06	2,51E+06	
3731	9,215	4,844	120,531	8,71E+07	2,92E+06	4,23E+06	
3732	9,215	1,284	120,531	1,22E+07	6,93E+05	1,00E+06	
3733	9,215	2,154	120,531	1,82E+07	1,05E+06	1,52E+06	
3734	8,305	8,564	120,491	8,49E+08	1,87E+06	2,71E+06	# V99/ L139
3735	8,305	1,484	120,511	7,68E+07	1,60E+06	2,31E+06	# 1669/ 2308
3736	8,305	2,964	120,521	1,09E+07	7,59E+05	1,10E+06	
3737	8,315	7,624	120,531	1,60E+08	6,53E+06	9,46E+06	
3738	8,295	8,054	120,531	5,62E+08	7,29E+06	1,06E+07	
3739	7,465	2,364	120,531	4,21E+06	5,25E+05	3,28E+06	# R35
3740	7,455	8,914	120,531	1,59E+08	6,62E+06	4,14E+07	
3741	7,455	5,274	120,541	5,31E+06	4,79E+05	2,99E+06	
3742	7,465	0,834	120,551	2,14E+07	1,06E+06	6,64E+06	
3743	7,455	7,474	120,581	4,91E+08	1,32E+07	8,25E+07	
3744	7,455	1,624	120,611	1,00E+07	6,55E+05	4,10E+06	
3745	8,695	9,134	120,661	2,12E+06	4,52E+05	4,11E+06	# HN gefaltet ???
3746	8,725	8,404	120,661	3,16E+07	1,39E+06	1,26E+07	#
3747	8,725	1,254	120,671	1,15E+06	4,65E+05	4,22E+06	#
3748	8,725	8,714	120,681	1,82E+08	8,68E+06	7,89E+07	#
3749	8,725	1,394	120,771	1,02E+06	4,88E+05	4,43E+06	#
3750	8,715	7,814	120,821	2,21E+06	5,77E+05	5,24E+06	#
3751	8,415	7,274	120,721	1,42E+06	5,17E+05	7,83E+05	# K70
3752	8,425	1,394	120,731	1,07E+08	2,36E+06	3,58E+06	
3753	8,425	0,794	120,761	5,42E+07	1,66E+06	2,52E+06	
3754	7,775	3,704	120,841	8,61E+07	1,88E+06	3,09E+06	# V43
3755	7,765	7,274	120,851	2,26E+08	6,74E+06	1,11E+07	
3756	7,765	2,924	120,871	3,16E+07	1,17E+06	1,92E+06	
3757	8,305	8,294	120,541	1,50E+09	5,56E+07	8,06E+07	# L139/ V99
3758	8,295	8,974	120,551	2,30E+08	7,44E+06	1,08E+07	
3759	8,315	0,804	120,551	1,83E+08	4,75E+06	6,88E+06	
3760	8,305	1,924	120,561	2,36E+08	5,20E+06	7,53E+06	
3761	8,305	4,004	120,601	7,10E+07	2,13E+06	3,08E+06	
3762	7,275	7,604	120,901	3,45E+07	1,34E+06	3,72E+06	# E96
3763	7,275	3,534	120,911	1,37E+06	4,57E+05	1,27E+06	
3764	7,275	7,284	120,921	6,77E+08	2,86E+07	7,94E+07	
3765	7,275	6,414	120,931	1,17E+08	7,85E+06	2,18E+07	
3766	7,275	8,274	120,931	1,20E+08	7,39E+06	2,05E+07	
3767	7,265	1,164	120,931	1,40E+07	6,31E+05	1,75E+06	
3768	7,275	0,764	120,951	4,47E+07	1,99E+06	5,51E+06	
3769	7,275	1,884	120,951	1,10E+08	3,45E+06	9,59E+06	
3770	7,275	4,084	120,961	1,18E+07	8,59E+05	2,39E+06	
3771	8,435	1,934	120,891	2,13E+08	4,31E+06	6,16E+06	# D132
3772	8,445	8,464	120,911	1,97E+09	5,66E+07	8,08E+07	
3773	8,445	4,034	120,961	5,17E+07	1,69E+06	2,42E+06	
3774	8,445	8,764	120,981	5,94E+08	2,98E+06	4,25E+06	
3775	8,455	3,204	121,001	1,86E+07	9,74E+05	1,39E+06	
3776	8,445	7,814	121,011	2,75E+08	1,36E+07	1,95E+07	
3777	8,445	9,144	121,011	6,90E+07	3,88E+06	5,55E+06	
3778	7,545	6,944	121,011	9,05E+07	4,26E+06	1,85E+07	# N46
3779	7,545	1,514	121,041	1,96E+07	7,19E+05	3,13E+06	
3780	7,545	7,534	121,051	1,43E+09	1,86E+07	8,09E+07	
3781	7,545	3,224	121,061	1,12E+07	7,17E+05	3,12E+06	
3782	7,545	2,444	121,061	5,04E+06	5,67E+05	2,46E+06	
3783	7,745	8,724	121,031	1,64E+08	4,57E+06	6,44E+06	# R49
3784	7,735	8,144	121,061	4,37E+08	6,48E+06	9,12E+06	
3785	7,745	1,764	121,071	1,56E+08	2,40E+06	3,38E+06	
3786	7,595	2,034	121,181	8,77E+07	2,76E+06	3,89E+06	# A135
3787	7,595	8,154	121,191	2,59E+08	1,02E+07	1,44E+07	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3788	7,595	8,564	121,191	2,15E+08	9,61E+06	1,35E+07	
3789	7,595	7,604	121,201	1,71E+09	5,68E+07	7,99E+07	
3790	7,595	2,994	121,201	6,17E+06	6,63E+05	9,34E+05	
3791	7,595	8,914	121,231	7,58E+07	2,29E+06	3,22E+06	
3792	7,595	1,164	121,231	1,59E+08	4,16E+06	5,85E+06	
3793	7,595	4,024	121,251	5,00E+07	1,66E+06	2,34E+06	
3794	8,585	7,014	121,191	2,27E+06	5,63E+05	1,17E+06	# F115
3795	8,585	1,424	121,251	4,59E+07	2,20E+06	4,59E+06	
3796	8,585	8,594	121,251	6,50E+08	3,89E+07	8,09E+07	
3797	8,585	10,424	121,261	9,53E+06	1,39E+06	2,90E+06	
3798	8,585	5,434	121,261	2,30E+07	2,43E+06	5,06E+06	
3799	8,585	3,234	121,261	3,95E+07	1,86E+06	3,86E+06	
3800	8,585	4,204	121,271	4,12E+07	1,56E+06	3,24E+06	
3801	8,585	4,054	121,281	4,66E+07	1,95E+06	4,06E+06	
3802	8,585	2,674	121,281	3,95E+07	2,04E+06	4,25E+06	
3803	8,585	5,694	121,291	7,70E+06	7,69E+05	1,60E+06	
3804	8,585	6,634	121,411	5,48E+05	4,41E+05	9,19E+05	
3805	8,595	8,264	121,641	1,57E+07	6,72E+05	1,40E+06	
3806	7,125	0,764	121,181	1,51E+06	4,19E+05	7,75E+05	# A81
3807	7,115	7,094	121,231	9,27E+08	4,31E+07	7,99E+07	
3808	7,125	2,764	121,251	2,63E+06	5,61E+05	1,04E+06	
3809	7,115	8,154	121,251	3,84E+07	2,21E+06	4,09E+06	
3810	7,115	1,394	121,261	8,91E+07	4,04E+06	7,48E+06	
3811	7,125	3,324	121,391	7,67E+06	8,05E+05	1,49E+06	
3812	7,525	0,894	121,501	3,57E+06	4,58E+05	1,35E+06	# K29
3813	7,515	7,514	121,681	9,53E+08	2,73E+07	8,02E+07	
3814	7,515	1,494	121,681	5,14E+07	1,02E+06	2,99E+06	
3815	7,515	8,374	121,711	1,20E+08	6,35E+06	1,87E+07	
3816	7,515	7,924	121,711	2,16E+08	4,43E+06	1,30E+07	
3817	7,515	1,914	121,721	8,78E+07	2,51E+06	7,37E+06	
3818	7,515	4,224	121,731	3,60E+07	1,50E+06	4,41E+06	
3819	7,515	3,744	121,881	8,78E+05	4,13E+05	1,22E+06	
3820	8,195	6,984	121,691	1,41E+08	7,41E+06	1,43E+07	# K79
3821	8,195	1,424	121,721	4,11E+07	1,90E+06	3,65E+06	
3822	8,195	0,804	121,721	3,21E+07	1,52E+06	2,92E+06	
3823	8,195	8,174	121,741	1,02E+09	4,19E+07	8,06E+07	
3824	8,195	1,914	121,801	2,51E+07	1,03E+06	1,98E+06	
3825	8,195	3,834	121,821	2,52E+07	1,17E+06	2,26E+06	
3826	8,195	7,624	121,891	2,11E+06	5,85E+05	1,13E+06	
3827	8,195	9,134	121,951	2,17E+06	5,84E+05	1,12E+06	
3828	8,325	-0,426	121,641	2,92E+06	4,89E+05	1,53E+06	# D94
3829	8,325	3,814	121,731	1,03E+07	6,51E+05	2,03E+06	
3830	8,315	8,314	121,741	8,82E+08	2,59E+07	8,09E+07	
3831	8,325	8,034	121,751	4,97E+08	7,70E+06	2,41E+07	
3832	8,325	1,044	121,751	2,48E+07	1,23E+06	3,84E+06	
3833	8,325	3,584	121,751	4,21E+06	5,43E+05	1,70E+06	
3834	8,325	6,414	121,761	7,69E+07	5,60E+06	1,75E+07	
3835	8,325	1,774	121,761	5,80E+06	6,23E+05	1,95E+06	
3836	8,325	2,714	121,761	1,76E+07	9,39E+05	2,94E+06	
3837	8,325	7,274	121,771	4,66E+07	2,16E+06	6,74E+06	
3838	8,325	4,224	121,791	2,08E+07	1,08E+06	3,37E+06	
3839	8,325	1,934	121,881	2,89E+06	5,05E+05	1,58E+06	
3840	8,055	7,614	121,401	2,74E+07	6,69E+05	1,10E+06	# R26 ?
3841	7,635	3,534	121,811	8,97E+06	8,87E+05	1,97E+06	# V103
3842	7,645	8,894	121,851	6,77E+06	8,19E+05	1,82E+06	
3843	7,625	4,054	121,861	4,67E+07	1,29E+06	2,86E+06	
3844	7,635	1,344	121,861	5,47E+07	1,42E+06	3,16E+06	
3845	7,635	7,634	121,871	1,20E+09	3,63E+07	8,07E+07	
3846	7,635	1,874	121,871	1,14E+07	7,13E+05	1,58E+06	
3847	7,635	0,864	121,891	4,01E+07	1,36E+06	3,02E+06	
3848	7,635	0,414	121,891	5,29E+07	2,11E+06	4,69E+06	
3849	7,635	-0,036	121,901	2,54E+06	5,72E+05	1,27E+06	
3850	7,635	6,204	121,931	4,10E+06	7,74E+05	1,72E+06	
3851	7,635	3,024	121,971	6,73E+06	6,81E+05	1,51E+06	
3852	7,635	7,214	122,111	3,03E+06	4,26E+05	9,46E+05	
3853	8,955	2,764	121,891	5,04E+07	1,96E+06	3,70E+06	# V74/ M7/ K158 ???
3854	8,955	7,104	121,911	3,95E+07	1,54E+06	2,90E+06	#
3855	8,965	2,384	121,911	6,14E+07	1,53E+06	2,88E+06	#
3856	8,965	2,194	122,081	1,53E+08	1,93E+06	3,64E+06	#
3857	8,485	8,484	121,961	1,61E+09	1,10E+08	8,05E+07	# K156
3858	8,495	2,854	121,961	4,54E+06	5,25E+05	5,25E+05	
3859	8,495	4,434	121,971	1,56E+08	3,23E+06	3,23E+06	
3860	8,495	4,274	121,981	1,01E+08	3,77E+06	3,77E+06	
3861	8,495	1,634	121,991	2,15E+08	6,96E+06	6,96E+06	
3862	8,485	2,124	122,001	5,84E+07	1,15E+06	1,15E+06	
3863	8,495	9,224	122,011	3,84E+06	4,76E+05	4,76E+05	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3864	8,495	7,744	122,031	1,51E+07	1,42E+06	1,42E+06	
3865	8,495	0,894	122,041	1,81E+06	4,41E+05	4,41E+05	
3866	8,485	3,034	122,071	3,86E+06	5,41E+05	5,41E+05	
3867	8,005	0,814	121,951	1,66E+07	9,10E+05	1,49E+06	# K138/ E42
3868	8,015	1,254	121,961	6,92E+07	1,47E+06	2,42E+06	
3869	8,015	8,264	121,981	1,27E+09	1,03E+07	1,69E+07	
3870	8,005	8,024	121,981	1,52E+09	4,89E+07	8,01E+07	
3871	8,005	8,924	121,991	1,66E+08	9,42E+06	1,54E+07	
3872	8,005	8,554	121,991	1,90E+08	1,90E+06	3,12E+06	
3873	8,015	1,824	122,001	2,73E+08	4,89E+06	8,01E+06	
3874	8,005	2,954	122,021	1,03E+07	7,60E+05	1,25E+06	
3875	8,005	7,634	122,031	2,60E+07	1,20E+06	1,97E+06	
3876	8,015	4,024	122,041	7,48E+07	1,92E+06	3,14E+06	
3877	8,015	7,274	122,071	1,82E+06	5,32E+05	8,73E+05	
3878	8,995	7,784	122,061	2,30E+07	1,13E+06	1,13E+06	# K158
3879	8,995	9,004	122,101	2,01E+09	8,41E+07	8,41E+07	
3880	8,995	1,634	122,131	2,62E+08	5,73E+06	5,73E+06	
3881	8,995	8,054	122,131	2,29E+07	1,74E+06	1,74E+06	
3882	8,995	0,844	122,151	1,04E+08	2,51E+06	2,51E+06	
3883	8,995	10,434	122,161	2,57E+06	6,22E+05	6,22E+05	
3884	8,995	8,484	122,191	2,10E+07	9,16E+05	9,16E+05	
3885	8,995	7,294	122,211	4,31E+07	1,03E+06	1,03E+06	
3886	8,835	6,964	122,121	6,79E+05	4,21E+05	7,52E+05	# V122
3887	8,825	5,624	122,121	1,30E+07	1,09E+06	1,95E+06	
3888	8,825	2,194	122,161	3,22E+07	1,27E+06	2,26E+06	
3889	8,835	8,824	122,161	1,67E+09	4,49E+07	8,02E+07	
3890	8,835	0,764	122,171	1,86E+08	4,59E+06	8,20E+06	
3891	8,825	8,454	122,171	7,75E+08	1,46E+07	2,61E+07	
3892	8,825	5,454	122,171	2,15E+07	1,63E+06	2,91E+06	
3893	8,825	7,834	122,191	2,77E+07	1,52E+06	2,71E+06	
3894	8,095	3,504	122,411	2,01E+07	9,11E+05	1,47E+06	# E83
3895	8,095	3,324	122,461	4,45E+06	6,41E+05	1,03E+06	
3896	8,105	7,084	122,481	9,31E+06	1,13E+06	1,82E+06	
3897	8,105	8,094	122,491	1,86E+09	4,98E+07	8,03E+07	
3898	8,105	9,154	122,511	4,17E+07	1,95E+06	3,15E+06	
3899	8,105	2,074	122,521	1,73E+08	4,00E+06	6,45E+06	
3900	8,105	4,184	122,551	4,09E+07	1,32E+06	2,13E+06	
3901	7,815	9,144	122,191	2,28E+07	1,63E+06	2,43E+06	# K131
3902	7,815	0,834	122,201	6,94E+06	7,96E+05	1,19E+06	
3903	7,805	7,824	122,221	1,23E+09	5,37E+07	8,02E+07	
3904	7,805	8,794	122,221	2,49E+08	8,66E+06	1,29E+07	
3905	7,805	8,464	122,231	3,52E+08	1,50E+07	2,23E+07	
3906	7,805	1,944	122,241	1,99E+08	5,50E+06	8,21E+06	
3907	7,815	1,354	122,291	3,29E+07	1,26E+06	1,89E+06	
3908	7,815	3,284	122,301	6,72E+06	6,76E+05	1,01E+06	
3909	7,815	4,064	122,351	4,14E+07	1,77E+06	2,64E+06	
3910	7,135	7,914	122,151	1,42E+07	8,62E+05	5,75E+06	# H20
3911	7,135	0,774	122,201	2,81E+07	1,12E+06	7,44E+06	
3912	7,135	6,654	122,211	1,66E+07	9,30E+05	6,20E+06	
3913	7,135	3,764	122,211	8,55E+06	6,91E+05	4,61E+06	
3914	7,135	7,144	122,211	5,26E+08	1,18E+07	7,85E+07	
3915	7,145	1,944	122,281	1,94E+06	4,73E+05	3,15E+06	
3916	7,135	1,224	122,291	5,94E+06	4,56E+05	3,04E+06	
3917	7,145	3,064	122,301	4,43E+06	6,29E+05	4,19E+06	
3918	8,905	7,744	122,191	3,91E+07	1,79E+06	3,37E+06	# V65/ M7/ V74
3919	8,905	7,294	122,211	1,21E+08	7,20E+06	1,36E+07	
3920	8,905	1,914	122,281	1,31E+08	1,87E+06	3,54E+06	
3921	8,895	4,354	122,231	1,32E+07	5,03E+05	9,49E+05	
3922	8,895	8,904	122,271	1,98E+09	4,24E+07	8,00E+07	
3923	8,865	2,984	122,211	2,43E+07	1,10E+06	2,07E+06	
3924	8,855	2,644	122,271	4,08E+06	5,04E+05	9,52E+05	
3925	8,855	1,264	122,291	6,23E+07	1,04E+06	1,97E+06	
3926	8,875	1,824	122,301	1,02E+08	1,64E+06	3,10E+06	
3927	7,745	8,724	122,411	3,90E+07	1,15E+06	2,40E+06	# L52
3928	7,745	7,744	122,531	1,25E+09	3,89E+07	8,11E+07	
3929	7,745	0,864	122,541	3,03E+07	1,30E+06	2,70E+06	
3930	7,745	8,034	122,551	8,06E+08	7,05E+06	1,47E+07	
3931	7,745	1,744	122,551	1,61E+08	3,78E+06	7,87E+06	
3932	7,755	3,984	122,591	3,96E+07	1,44E+06	3,01E+06	
3933	7,745	1,234	122,591	2,65E+07	9,12E+05	1,90E+06	
3934	7,745	4,114	122,611	4,88E+07	1,54E+06	3,20E+06	
3935	7,035	8,174	122,541	1,82E+08	1,14E+07	2,48E+07	# I144
3936	7,035	7,054	122,551	1,13E+09	3,68E+07	7,99E+07	
3937	7,035	0,894	122,551	9,49E+07	2,10E+06	4,56E+06	
3938	7,035	1,464	122,561	1,07E+08	3,29E+06	7,14E+06	
3939	7,035	4,244	122,561	3,06E+07	1,05E+06	2,28E+06	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
3940	7,035	3,754	122,581	2,74E+07	1,37E+06	2,98E+06	
3941	7,045	9,024	122,591	4,29E+06	5,66E+05	1,23E+06	
3942	7,035	0,714	122,591	8,67E+07	1,80E+06	3,92E+06	
3943	7,035	1,954	122,601	3,87E+07	9,64E+05	2,10E+06	
3944	7,025	2,934	122,621	2,38E+06	4,74E+05	1,03E+06	
3945	7,035	7,724	122,621	7,18E+06	1,04E+06	2,26E+06	
3946	8,125	7,734	122,831	4,37E+08	1,09E+07	1,46E+07	# V48
3947	8,125	0,944	122,841	8,79E+07	3,23E+06	4,31E+06	
3948	8,125	8,734	122,881	2,71E+07	1,70E+06	2,27E+06	
3949	8,125	3,774	122,901	5,12E+07	1,46E+06	1,94E+06	
3950	8,235	2,924	122,841	2,32E+07	1,54E+06	2,33E+06	# A141
3951	8,235	1,974	122,851	4,62E+07	1,26E+06	1,91E+06	
3952	8,235	8,244	122,851	1,08E+09	5,34E+07	8,09E+07	
3953	8,235	9,024	122,861	1,14E+08	8,62E+06	1,31E+07	
3954	8,235	7,274	122,861	1,29E+08	9,15E+06	1,39E+07	
3955	8,235	1,484	122,881	1,17E+08	4,16E+06	6,30E+06	
3956	8,235	1,604	122,891	1,28E+08	4,24E+06	6,42E+06	
3957	8,235	4,084	122,911	3,99E+07	1,47E+06	2,23E+06	
3958	8,235	0,824	122,981	8,64E+06	7,52E+05	1,14E+06	
3959	5,715	0,934	122,901	8,54E+06	7,00E+05	8,97E+05	# R116
3960	5,715	7,874	122,931	2,78E+07	2,46E+06	3,15E+06	
3961	5,715	5,714	122,941	1,18E+09	6,24E+07	8,00E+07	
3962	5,715	1,424	122,951	1,55E+08	4,61E+06	5,91E+06	
3963	5,715	4,464	122,951	1,92E+07	4,94E+05	6,33E+05	
3964	5,715	7,254	122,971	1,90E+07	1,17E+06	1,51E+06	
3965	5,725	7,004	122,971	7,58E+06	9,70E+05	1,24E+06	
3966	5,715	8,494	122,971	1,47E+07	1,05E+06	1,35E+06	
3967	5,715	3,234	122,981	1,48E+07	8,11E+05	1,04E+06	
3968	5,715	9,214	122,981	3,71E+06	5,65E+05	7,25E+05	
3969	5,715	2,684	122,981	1,51E+07	9,48E+05	1,22E+06	
3970	5,725	6,604	122,981	6,10E+05	4,34E+05	5,57E+05	
3971	5,725	3,944	122,991	8,41E+07	3,07E+06	3,94E+06	
3972	9,145	3,224	122,951	3,17E+07	1,37E+06	2,02E+06	# D129
3973	9,155	8,464	122,991	1,20E+08	6,68E+06	9,82E+06	
3974	9,155	8,804	122,991	4,60E+08	2,48E+06	3,64E+06	
3975	9,155	2,524	122,991	8,24E+07	2,62E+06	3,85E+06	
3976	9,155	9,154	123,001	1,51E+09	5,45E+07	8,02E+07	
3977	9,155	5,604	123,001	5,38E+07	2,14E+06	3,14E+06	
3978	9,155	7,824	123,021	1,65E+07	1,62E+06	2,38E+06	
3979	9,155	0,864	123,021	1,09E+08	2,54E+06	3,73E+06	
3980	9,155	1,324	123,021	2,25E+07	8,46E+05	1,24E+06	
3981	9,165	5,154	123,061	2,95E+07	6,66E+05	9,79E+05	
3982	6,995	9,234	122,921	2,41E+07	9,28E+05	2,86E+06	
3983	6,995	6,984	122,941	9,20E+08	3,02E+07	1,49E+06	
3984	6,995	6,764	122,941	5,26E+08	5,59E+06	2,87E+06	
3985	6,995	10,214	122,951	2,45E+07	2,28E+06	8,22E+06	
3986	6,995	7,404	122,951	1,91E+08	4,13E+06	7,93E+07	# R149
3987	6,995	2,054	122,981	2,71E+07	1,01E+06	1,09E+07	
3988	6,995	9,454	122,981	2,13E+07	1,37E+06	2,44E+06	
3989	6,995	4,484	122,981	5,72E+07	1,95E+06	3,59E+06	
3990	6,995	0,754	122,991	7,30E+07	1,95E+06	5,99E+06	
3991	8,565	4,214	123,261	8,49E+06	7,58E+05	1,61E+06	# L88
3992	8,565	8,584	123,311	7,83E+08	3,77E+07	8,02E+07	
3993	8,565	0,784	123,331	1,02E+08	2,37E+06	5,04E+06	
3994	8,565	9,224	123,351	4,24E+07	2,10E+06	4,46E+06	
3995	8,565	1,314	123,381	6,31E+07	1,81E+06	3,86E+06	
3996	8,575	5,324	123,381	3,56E+07	1,31E+06	2,78E+06	
3997	9,205	0,254	123,501	4,99E+05	4,32E+05	8,64E+05	# V8
3998	9,195	0,894	123,511	1,62E+08	3,08E+06	6,16E+06	
3999	9,195	4,524	123,511	4,45E+07	1,13E+06	2,26E+06	
4000	9,195	8,064	123,541	4,69E+07	2,56E+06	5,12E+06	
4001	9,195	1,964	123,551	1,53E+08	2,88E+06	5,76E+06	
4002	9,195	9,214	123,551	1,82E+09	3,99E+07	7,99E+07	
4003	9,195	4,124	123,641	1,97E+07	8,47E+05	1,69E+06	
4004	9,195	9,664	123,671	2,80E+06	4,82E+05	9,64E+05	
4005	9,05	1,314	123,211	1,26E+06	4,04E+05	7,21E+05	# R84
4006	9,015	6,774	123,501	1,72E+06	4,88E+05	8,72E+05	
4007	9,025	7,464	123,591	1,86E+07	6,99E+05	1,25E+06	
4008	9,035	8,064	123,671	1,76E+07	1,39E+06	2,48E+06	
4009	9,045	4,234	123,691	4,15E+07	1,42E+06	2,53E+06	
4010	9,025	7,054	123,711	1,00E+07	5,98E+05	1,07E+06	# E147
4011	9,035	3,474	123,711	3,15E+06	5,04E+05	8,99E+05	
4012	9,035	2,044	123,721	1,88E+08	3,44E+06	6,14E+06	
4013	9,025	2,564	123,721	6,53E+07	1,82E+06	3,25E+06	
4014	9,025	9,464	123,741	6,61E+07	2,69E+06	4,80E+06	
4015	9,035	9,034	123,751	2,50E+09	8,06E+07	8,06E+07	# E147/ R84/ I36

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
4016	9,015	5,194	123,771	9,47E+07	2,23E+06	3,99E+06	
4017	9,015	10,214	123,781	2,38E+07	2,16E+06	3,86E+06	
4018	9,025	0,764	123,871	2,01E+08	3,10E+06	5,53E+06	
4019	9,045	6,754	124,071	3,04E+06	6,37E+05	1,14E+06	# I36
4020	9,055	1,524	124,151	1,79E+08	2,71E+06	4,84E+06	
4021	9,055	8,494	124,161	4,19E+07	2,03E+06	3,62E+06	
4022	9,055	7,734	124,181	3,32E+07	2,01E+06	3,59E+06	
4023	9,055	5,504	124,191	5,20E+07	1,45E+06	2,58E+06	
4024	9,055	7,444	124,291	7,82E+06	7,89E+05	1,41E+06	
4025	9,065	6,474	124,331	3,30E+06	5,79E+05	1,03E+06	
4026	9,065	3,154	124,361	1,77E+06	5,39E+05	9,62E+05	
4027	8,065	8,474	124,011	4,16E+06	7,37E+05	7,37E+05	# N167
4028	8,065	4,224	124,181	1,02E+08	4,17E+06	4,17E+06	
4029	8,075	0,944	124,181	7,00E+07	2,81E+06	2,81E+06	
4030	8,075	7,414	124,201	2,51E+08	1,81E+07	1,81E+07	
4031	8,075	8,064	124,211	2,21E+09	1,62E+08	8,09E+07	
4032	8,085	1,534	124,231	2,59E+07	1,21E+06	1,21E+06	
4033	8,075	2,634	124,251	5,59E+07	2,86E+06	2,86E+06	
4034	8,075	7,734	124,261	9,68E+08	6,51E+06	6,51E+06	
4035	8,075	1,924	124,261	2,40E+07	1,39E+06	1,39E+06	
4036	8,075	8,484	124,321	1,73E+07	9,04E+05	9,04E+05	
4037	8,085	9,014	124,361	5,88E+05	4,74E+05	4,74E+05	
4038	8,075	9,214	124,581	3,78E+05	4,17E+05	4,17E+05	
4039	9,195	2,044	124,131	1,44E+08	2,25E+06	3,52E+06	# V148
4040	9,195	1,854	124,131	1,82E+08	2,51E+06	3,92E+06	
4041	9,195	7,764	124,181	1,34E+08	7,37E+06	1,15E+07	
4042	9,195	0,724	124,181	1,73E+08	3,23E+06	5,05E+06	
4043	9,195	8,054	124,251	2,14E+07	1,27E+06	1,98E+06	
4044	9,205	4,604	124,281	3,14E+07	8,61E+05	1,35E+06	
4045	9,205	10,204	124,291	4,94E+06	7,73E+05	1,21E+06	
4046	9,215	9,224	124,331	1,98E+09	5,14E+07	8,03E+07	
4047	9,215	6,994	124,361	2,31E+07	9,96E+05	1,56E+06	
4048	8,745	4,804	124,631	2,15E+07	1,36E+06	4,00E+06	# M86
4049	8,745	8,744	124,641	7,17E+08	2,72E+07	8,01E+07	
4050	8,745	9,234	124,641	5,47E+07	1,75E+06	5,15E+06	
4051	8,745	0,804	124,671	9,11E+07	2,87E+06	8,44E+06	
4052	8,745	9,044	124,671	4,60E+08	2,19E+06	6,43E+06	
4053	8,745	7,434	124,681	1,45E+07	1,01E+06	2,97E+06	
4054	8,745	1,954	124,691	7,50E+07	2,42E+06	7,11E+06	
4055	8,745	1,324	124,751	1,41E+07	6,38E+05	1,88E+06	
4056	8,745	2,394	124,751	8,38E+06	6,97E+05	2,05E+06	
4057	8,745	5,204	124,751	3,92E+07	1,54E+06	4,52E+06	
4058	9,235	9,234	124,511	1,49E+09	5,23E+07	8,04E+07	# R13
4059	9,235	5,394	124,521	6,21E+07	1,72E+06	2,65E+06	
4060	9,235	8,704	124,541	4,00E+07	1,40E+06	2,15E+06	
4061	9,235	1,354	124,561	1,11E+08	2,58E+06	3,97E+06	
4062	9,235	7,264	124,611	9,18E+06	5,43E+05	8,35E+05	
4063	8,855	9,204	124,531	1,84E+07	8,58E+05	2,45E+06	# E100
4064	8,855	7,684	124,611	6,20E+07	2,80E+06	7,99E+06	
4065	8,855	8,854	124,631	6,34E+08	2,81E+07	8,02E+07	
4066	8,855	7,464	124,641	1,55E+08	6,13E+06	1,75E+07	
4067	8,855	0,824	124,641	4,54E+07	2,10E+06	6,01E+06	
4068	8,855	8,304	124,651	1,06E+08	6,06E+06	1,73E+07	
4069	8,855	1,994	124,651	1,13E+08	3,51E+06	1,00E+07	
4070	8,865	4,034	124,701	3,05E+07	1,24E+06	3,54E+06	
4071	8,865	3,484	124,711	2,39E+06	4,87E+05	1,39E+06	
4072	8,875	6,754	124,801	1,07E+06	4,17E+05	1,19E+06	
4073	8,015	1,724	124,781	1,96E+07	8,44E+05	2,28E+06	# T93
4074	8,015	8,314	124,801	6,97E+08	7,11E+06	1,92E+07	
4075	8,025	2,294	124,801	5,17E+05	4,02E+05	1,09E+06	
4076	8,015	7,274	124,811	1,70E+07	9,44E+05	2,55E+06	
4077	8,015	2,954	124,821	6,29E+06	7,34E+05	1,98E+06	
4078	8,015	8,024	124,821	8,06E+08	3,00E+07	8,09E+07	
4079	8,015	4,114	124,831	3,38E+07	1,50E+06	4,05E+06	
4080	8,015	1,074	124,831	4,55E+07	1,83E+06	4,94E+06	
4081	8,015	6,414	124,831	1,94E+07	1,92E+06	5,18E+06	
4082	8,015	3,694	124,931	2,41E+07	1,04E+06	2,80E+06	
4083	7,205	0,814	124,721	5,97E+06	5,50E+05	2,90E+06	# A57
4084	7,195	4,454	124,781	2,62E+06	4,71E+05	2,48E+06	
4085	7,205	7,574	124,791	1,22E+07	7,77E+05	4,09E+06	
4086	7,205	7,204	124,801	4,70E+08	1,54E+07	8,13E+07	
4087	7,205	1,254	124,831	2,32E+07	1,14E+06	6,00E+06	
4088	7,205	4,244	124,841	7,75E+06	6,58E+05	3,46E+06	
4089	8,505	1,514	124,821	4,12E+06	5,18E+05	1,04E+06	# D16
4090	8,505	8,494	124,861	1,06E+09	4,04E+07	8,09E+07	
4091	8,505	10,424	124,871	7,55E+06	1,12E+06	2,23E+06	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
4092	8,505	2,124	124,881	7,92E+05	4,17E+05	8,33E+05	
4093	8,505	1,234	124,881	1,03E+07	6,30E+05	1,26E+06	
4094	8,505	8,154	124,891	3,71E+08	7,71E+06	1,54E+07	
4095	8,505	2,974	124,901	2,63E+07	1,35E+06	2,70E+06	
4096	8,505	9,154	124,901	2,40E+07	1,65E+06	3,30E+06	
4097	8,505	5,384	124,921	1,26E+07	9,23E+05	1,85E+06	
4098	8,505	8,964	124,921	4,72E+07	4,59E+05	9,18E+05	
4099	8,505	0,774	124,941	1,67E+07	8,68E+05	1,74E+06	
4100	8,505	4,184	125,021	3,44E+07	1,03E+06	2,05E+06	
4101	8,255	1,574	125,001	1,57E+07	5,46E+05	9,10E+05	# S127
4102	8,265	9,154	125,031	3,37E+06	6,59E+05	1,10E+06	
4103	8,255	8,264	125,041	7,55E+08	4,81E+07	8,02E+07	
4104	8,255	2,724	125,041	1,28E+07	9,68E+05	1,61E+06	
4105	8,255	0,754	125,051	5,54E+07	2,57E+06	4,28E+06	
4106	8,265	1,344	125,051	3,07E+06	5,16E+05	8,61E+05	
4107	8,255	1,924	125,051	4,38E+07	1,86E+06	3,10E+06	
4108	8,255	5,434	125,051	6,96E+07	5,28E+06	8,81E+06	
4109	8,255	8,664	125,051	9,61E+07	3,17E+06	5,28E+06	
4110	8,245	3,424	125,061	1,69E+07	1,12E+06	1,87E+06	
4111	8,255	10,424	125,071	1,63E+06	5,31E+05	8,86E+05	
4112	8,255	6,964	125,081	1,46E+06	4,90E+05	8,16E+05	
4113	8,255	3,564	125,081	1,40E+07	1,12E+06	1,86E+06	
4114	8,255	4,414	125,091	5,00E+07	1,86E+06	3,10E+06	
4115	8,245	7,824	125,091	1,66E+07	1,47E+06	2,45E+06	
4116	8,485	7,724	125,591	9,05E+06	8,95E+05	1,75E+06	# A63
4117	8,475	8,484	125,631	1,05E+09	4,09E+07	8,02E+07	
4118	8,485	9,014	125,661	3,11E+06	5,69E+05	1,12E+06	
4119	8,475	4,404	125,661	7,91E+07	2,38E+06	4,66E+06	
4120	8,485	1,104	125,701	9,59E+07	2,87E+06	5,62E+06	
4121	7,765	5,364	125,281	4,09E+05	4,10E+05	6,41E+05	L157
4122	7,775	6,984	125,291	4,08E+06	6,45E+05	1,01E+06	
4123	7,765	0,804	125,301	5,44E+07	2,52E+06	3,94E+06	
4124	7,765	9,224	125,321	1,36E+08	7,63E+06	1,19E+07	
4125	7,765	8,494	125,321	1,18E+07	1,32E+06	2,05E+06	
4126	7,765	8,004	125,341	6,65E+07	1,33E+06	2,07E+06	
4127	7,765	1,694	125,341	1,63E+08	4,90E+06	7,65E+06	
4128	7,765	7,754	125,341	9,13E+08	5,15E+07	8,05E+07	
4129	7,765	4,104	125,361	4,80E+07	2,06E+06	3,22E+06	
4130	7,775	6,764	125,441	2,12E+06	4,46E+05	6,97E+05	
4131	7,555	9,464	125,631	4,40E+06	7,82E+05	1,70E+06	# D154
4132	7,555	6,694	125,641	1,27E+08	6,59E+06	1,43E+07	
4133	7,555	2,094	125,641	6,00E+06	6,80E+05	1,48E+06	
4134	7,555	0,854	125,641	3,63E+07	1,77E+06	3,86E+06	
4135	7,555	7,544	125,641	7,11E+08	3,70E+07	8,03E+07	
4136	7,555	8,064	125,651	4,55E+07	3,06E+06	6,65E+06	
4137	7,555	4,114	125,661	8,74E+06	7,93E+05	1,72E+06	
4138	7,555	2,834	125,701	4,42E+07	1,72E+06	3,73E+06	
4139	7,545	7,064	125,711	1,95E+07	4,99E+05	1,08E+06	
4140	8,045	7,324	125,531	4,33E+06	6,17E+05	1,14E+06	# M159
4141	8,045	9,034	125,571	4,00E+07	1,78E+06	3,29E+06	
4142	8,045	8,044	125,581	9,40E+08	4,37E+07	8,09E+07	
4143	8,045	7,044	125,581	1,47E+07	1,54E+06	2,86E+06	
4144	8,045	1,564	125,591	6,61E+07	2,05E+06	3,79E+06	
4145	8,045	9,334	125,591	9,27E+07	5,47E+06	1,01E+07	
4146	8,045	0,714	125,601	5,88E+07	2,10E+06	3,89E+06	
4147	8,045	1,014	125,611	7,62E+07	2,10E+06	3,89E+06	
4148	8,045	1,974	125,611	5,30E+07	1,78E+06	3,29E+06	
4149	8,045	2,394	125,621	3,53E+06	5,20E+05	9,62E+05	
4150	8,045	4,134	125,751	1,30E+07	7,25E+05	1,34E+06	
4151	9,115	4,004	125,841	1,71E+07	9,24E+05	1,78E+06	# I14
4152	9,105	8,044	125,851	9,36E+06	1,14E+06	2,20E+06	
4153	9,115	9,124	125,871	1,10E+09	4,17E+07	8,02E+07	
4154	9,105	5,954	125,871	1,73E+07	1,01E+06	1,94E+06	
4155	9,115	2,164	125,881	7,26E+06	6,64E+05	1,28E+06	
4156	9,115	5,814	125,881	1,33E+07	1,00E+06	1,93E+06	
4157	9,115	0,744	125,881	1,08E+08	2,87E+06	5,52E+06	
4158	9,115	6,744	125,891	2,28E+06	4,44E+05	8,53E+05	
4159	9,115	4,804	125,901	1,83E+06	4,95E+05	9,53E+05	
4160	9,115	1,574	125,901	8,71E+07	2,46E+06	4,73E+06	
4161	9,105	10,204	125,911	2,24E+06	5,84E+05	1,12E+06	
4162	9,105	8,714	125,931	8,50E+06	6,40E+05	1,23E+06	
4163	9,115	4,374	125,981	8,90E+06	5,67E+05	1,09E+06	
4164	8,655	5,414	125,811	1,34E+06	4,37E+05	7,04E+05	# M113
4165	8,655	8,264	125,901	2,72E+08	3,97E+06	6,40E+06	
4166	8,655	1,494	125,911	1,77E+07	9,20E+05	1,48E+06	
4167	8,655	8,664	125,911	9,28E+08	5,02E+07	8,09E+07	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
4168	8,655	0,714	125,931	5,50E+07	2,47E+06	3,99E+06	
4169	8,655	4,374	125,931	1,40E+08	4,16E+06	6,71E+06	
4170	8,655	2,774	125,941	5,98E+06	6,36E+05	1,03E+06	
4171	8,655	10,424	125,941	1,63E+07	1,88E+06	3,04E+06	
4172	8,655	2,034	125,951	2,50E+07	1,20E+06	1,93E+06	
4173	9,045	7,324	126,371	3,61E+07	2,00E+06	2,29E+06	# L87
4174	9,045	1,734	126,371	1,77E+08	3,64E+06	4,19E+06	
4175	9,045	8,594	126,371	2,48E+07	1,14E+06	1,31E+06	
4176	9,045	2,364	126,381	2,02E+07	1,06E+06	1,21E+06	
4177	9,045	7,724	126,391	7,61E+06	7,28E+05	8,37E+05	
4178	9,045	5,274	126,431	6,22E+07	2,43E+06	2,80E+06	
4179	9,045	9,044	126,451	1,87E+09	6,98E+07	8,02E+07	# tb. N109
4180	9,055	0,764	126,481	2,33E+08	5,23E+06	6,01E+06	
4181	7,715	7,724	126,471	4,35E+09	4,25E+08	1,52E+07	# K168
4182	7,725	0,844	126,441	1,53E+07	1,05E+06	5,23E+05	
4183	7,725	2,634	126,451	2,78E+06	6,21E+05	3,10E+05	
4184	7,715	2,804	126,461	1,36E+06	5,04E+05	2,52E+05	
4185	7,715	8,054	126,461	2,21E+09	7,07E+06	3,54E+06	
4186	7,715	4,634	126,421	6,56E+07	2,84E+06	1,42E+06	# EXC ?
4187	7,725	1,734	126,501	6,79E+07	3,47E+06	1,73E+06	
4188	7,735	8,614	126,501	5,07E+06	9,76E+05	1,14E+06	
4189	7,735	9,014	126,521	1,89E+06	5,40E+05	4,88E+05	# s. Ass
4190	7,725	8,384	126,531	2,56E+06	6,85E+05	2,70E+05	# s. Ass
4191	7,735	6,854	126,551	2,24E+06	8,80E+05	3,43E+05	# s. Ass
4192	7,725	4,224	126,561	4,86E+07	2,29E+06	4,40E+05	# s. Ass
4193	9,055	6,964	126,551	1,14E+07	5,14E+05	5,91E+05	# N109
4194	9,055	6,754	126,591	5,30E+06	7,22E+05	8,30E+05	
4195	9,065	2,994	126,611	5,46E+06	6,63E+05	7,62E+05	
4196	9,055	5,944	126,621	7,19E+06	6,34E+05	7,28E+05	
4197	9,065	4,504	126,641	6,20E+07	2,23E+06	2,56E+06	
4198	9,065	4,674	126,711	5,78E+07	2,00E+06	2,30E+06	
4199	9,055	10,204	126,731	7,95E+06	1,08E+06	1,24E+06	
4200	9,275	5,274	126,711	1,54E+07	6,94E+05	1,51E+06	# I37
4201	9,275	8,614	126,721	5,38E+07	2,40E+06	5,21E+06	
4202	9,275	9,274	126,721	8,18E+08	3,73E+07	8,11E+07	
4203	9,275	1,374	126,731	6,38E+07	1,59E+06	3,45E+06	
4204	9,275	0,694	126,741	1,50E+08	4,51E+06	9,81E+06	
4205	9,275	1,594	126,751	6,41E+07	1,74E+06	3,78E+06	
4206	7,275	8,204	126,991	2,73E+06	5,63E+05	5,63E+05	# I105
4207	7,265	6,214	127,061	2,15E+07	2,33E+06	2,33E+06	
4208	7,265	0,104	127,061	7,26E+06	6,33E+05	6,33E+05	
4209	7,265	7,274	127,061	1,44E+09	9,06E+07	8,01E+07	
4210	7,265	6,834	127,071	1,74E+06	4,72E+05	4,72E+05	
4211	7,265	0,794	127,071	1,80E+08	5,36E+06	5,36E+06	
4212	7,265	1,314	127,081	1,52E+08	4,74E+06	4,74E+06	
4213	7,265	-0,036	127,101	3,16E+06	5,85E+05	5,85E+05	
4214	7,265	8,674	127,111	7,75E+06	8,37E+05	8,37E+05	
4215	7,265	4,154	127,111	1,16E+08	3,78E+06	3,78E+06	
4216	9,505	3,164	127,321	1,96E+06	4,58E+05	9,17E+05	# K150
4217	9,495	0,804	127,391	1,77E+07	1,13E+06	2,25E+06	
4218	9,495	9,484	127,411	7,21E+08	4,04E+07	8,08E+07	
4219	9,495	7,544	127,411	3,27E+06	5,23E+05	1,05E+06	
4220	9,495	1,684	127,421	4,49E+07	1,44E+06	2,88E+06	
4221	9,495	8,054	127,421	1,89E+08	1,31E+07	2,62E+07	
4222	9,495	6,724	127,431	1,08E+07	8,63E+05	1,73E+06	
4223	9,495	2,104	127,451	9,41E+07	3,27E+06	6,54E+06	
4224	9,505	2,864	127,461	5,04E+06	5,47E+05	1,09E+06	
4225	9,495	6,974	127,461	1,03E+07	1,16E+06	2,31E+06	
4226	9,505	8,954	127,461	2,03E+06	4,29E+05	8,58E+05	
4227	8,985	-0,396	127,421	1,93E+06	5,51E+05	7,98E+05	# I9
4228	8,955	5,344	127,461	5,77E+06	1,11E+06	1,61E+06	
4229	8,965	4,804	127,471	1,39E+07	1,82E+06	2,64E+06	
4230	8,975	0,804	127,471	1,29E+08	4,45E+06	6,44E+06	
4231	8,975	2,174	127,481	5,13E+07	2,59E+06	3,76E+06	
4232	8,975	8,984	127,491	1,17E+09	5,55E+07	8,05E+07	
4233	8,975	1,304	127,491	1,22E+08	3,68E+06	5,33E+06	
4234	8,975	3,984	127,551	5,34E+07	2,38E+06	3,44E+06	
4235	8,975	4,114	127,561	8,03E+07	2,67E+06	3,87E+06	
4236	8,955	1,634	127,681	1,93E+07	1,30E+06	1,88E+06	
4237	9,935	9,494	127,531	6,63E+06	6,34E+05	2,19E+06	# SK W27
4238	9,945	7,554	127,541	2,34E+07	1,09E+06	3,75E+06	
4239	9,945	4,524	127,591	2,97E+07	1,20E+06	4,12E+06	
4240	9,945	0,904	127,591	3,70E+07	1,45E+06	5,01E+06	
4241	9,945	6,664	127,611	1,10E+08	3,60E+06	1,24E+07	
4242	9,945	9,954	127,611	5,99E+08	2,35E+07	8,09E+07	
4243	9,945	8,064	127,611	3,30E+07	1,94E+06	6,69E+06	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
4244	9,945	2,204	127,631	1,01E+07	6,97E+05	2,40E+06	
4245	9,955	8,564	127,641	1,12E+07	6,95E+05	2,40E+06	
4246	9,965	9,084	127,701	1,21E+06	4,16E+05	1,43E+06	
4247	9,945	7,264	127,711	3,06E+07	9,69E+05	3,34E+06	
4248	6,215	0,784	128,101	1,58E+07	9,20E+05	1,48E+06	# K104
4249	6,215	1,344	128,111	6,47E+07	1,77E+06	2,86E+06	
4250	6,225	6,954	128,121	1,58E+07	6,39E+05	1,03E+06	
4251	6,215	6,634	128,121	7,87E+07	7,54E+05	1,22E+06	
4252	6,215	6,214	128,121	8,71E+08	4,99E+07	8,04E+07	
4253	6,215	0,504	128,131	1,22E+07	5,76E+05	9,28E+05	
4254	6,215	1,684	128,151	9,96E+07	2,93E+06	4,73E+06	
4255	6,215	2,984	128,161	4,34E+07	1,95E+06	3,14E+06	
4256	6,215	0,004	128,161	3,30E+07	1,67E+06	2,69E+06	
4257	6,215	7,654	128,161	5,20E+06	8,30E+05	1,34E+06	
4258	6,215	7,274	128,171	1,97E+07	1,80E+06	2,90E+06	
4259	6,225	4,114	128,221	1,30E+07	8,00E+05	1,29E+06	
4260	8,535	9,444	128,311	6,36E+06	7,89E+05	1,13E+06	# L146
4261	8,535	0,864	128,331	4,08E+07	1,43E+06	2,05E+06	
4262	8,535	7,734	128,341	1,30E+07	1,42E+06	2,02E+06	
4263	8,535	8,544	128,341	1,17E+09	5,60E+07	8,00E+07	
4264	8,535	8,064	128,351	1,79E+07	8,74E+05	1,25E+06	
4265	8,535	0,714	128,351	3,23E+07	1,40E+06	2,00E+06	
4266	8,535	2,004	128,371	1,22E+08	3,47E+06	4,95E+06	
4267	8,535	9,014	128,371	5,02E+07	2,18E+06	3,11E+06	
4268	8,535	4,084	128,381	3,71E+07	1,77E+06	2,52E+06	
4269	9,145	1,514	128,371	5,83E+06	5,63E+05	1,06E+06	# V38
4270	9,155	9,154	128,421	8,81E+08	4,24E+07	8,00E+07	
4271	9,155	2,114	128,431	3,19E+07	1,56E+06	2,94E+06	
4272	9,155	0,764	128,441	2,03E+08	4,89E+06	9,23E+06	
4273	9,155	8,544	128,441	6,74E+07	2,85E+06	5,37E+06	
4274	9,155	4,164	128,451	7,68E+06	6,39E+05	1,21E+06	
4275	9,365	7,274	129,241	7,14E+06	7,57E+05	1,15E+06	# Q121
4276	9,365	1,164	129,261	5,51E+07	2,39E+06	3,61E+06	
4277	9,365	9,354	129,261	7,24E+08	5,30E+07	8,03E+07	
4278	9,365	0,794	129,271	7,50E+06	8,77E+05	1,33E+06	
4279	9,365	7,454	129,271	9,77E+05	4,77E+05	7,22E+05	
4280	9,365	8,454	129,281	1,80E+06	5,60E+05	8,48E+05	
4281	9,365	1,924	129,291	7,17E+07	2,91E+06	4,41E+06	
4282	9,365	8,804	129,291	1,01E+07	1,53E+06	2,32E+06	
4283	9,175	2,934	129,431	1,10E+07	9,44E+05	2,05E+06	# D15
4284	9,175	8,504	129,471	6,57E+07	2,00E+06	4,34E+06	
4285	9,175	1,294	129,491	1,62E+07	8,42E+05	1,83E+06	
4286	9,175	8,714	129,491	9,03E+07	3,88E+06	8,44E+06	
4287	9,175	9,174	129,491	7,80E+08	3,70E+07	8,05E+07	
4288	9,175	0,784	129,491	6,92E+07	2,59E+06	5,63E+06	
4289	9,175	5,444	129,511	7,29E+06	9,50E+05	2,07E+06	
4290	9,175	2,414	129,521	2,74E+06	5,33E+05	1,16E+06	
4291	9,175	4,424	129,541	4,71E+07	1,68E+06	3,65E+06	
4292	9,175	8,064	129,591	1,02E+07	1,10E+06	2,40E+06	
4293	9,185	10,424	129,601	3,05E+06	5,72E+05	1,24E+06	
4294	9,175	7,504	129,621	1,17E+06	5,01E+05	1,09E+06	
4295	9,175	2,234	129,681	5,35E+05	4,02E+05	8,73E+05	
4296	10,205	9,434	129,591	2,37E+06	4,20E+05	9,76E+05	# V110
4297	10,205	6,744	129,591	4,08E+07	1,70E+06	3,95E+06	
4298	10,205	10,214	129,601	5,92E+08	3,49E+07	8,12E+07	
4299	10,205	7,404	129,601	2,46E+07	2,02E+06	4,70E+06	
4300	10,205	6,974	129,601	5,08E+07	2,53E+06	5,88E+06	
4301	10,205	2,084	129,601	3,21E+07	1,41E+06	3,28E+06	
4302	10,205	8,034	129,611	1,31E+06	4,45E+05	1,04E+06	
4303	10,205	9,054	129,611	4,63E+07	2,83E+06	6,58E+06	
4304	10,205	0,734	129,611	9,32E+07	3,44E+06	8,01E+06	
4305	10,205	4,414	129,631	2,10E+07	1,12E+06	2,61E+06	
4306	10,205	5,154	129,631	1,64E+07	9,31E+05	2,16E+06	
4307	10,195	1,574	129,641	5,56E+06	5,58E+05	1,30E+06	
4308	10,195	3,974	129,751	3,16E+06	4,42E+05	1,03E+06	
4309	10,395	4,514	129,551	5,99E+07	1,52E+06	1,97E+06	# A114
4310	10,405	10,424	129,561	1,16E+09	6,21E+07	8,07E+07	
4311	10,405	1,364	129,581	1,35E+08	4,30E+06	5,58E+06	
4312	10,405	2,814	129,601	7,81E+06	6,33E+05	8,22E+05	
4313	10,405	8,614	129,601	3,71E+07	2,19E+06	2,85E+06	
4314	10,415	8,254	129,621	1,39E+06	5,35E+05	6,95E+05	
4315	10,415	2,074	129,631	1,41E+06	4,14E+05	5,38E+05	
4316	10,405	0,714	129,651	1,95E+06	5,22E+05	6,78E+05	
4317	10,415	4,064	129,691	1,20E+07	1,10E+06	1,42E+06	
4318	7,745	4,804	129,681	3,81E+07	2,84E+06	3,83E+06	# E145
4319	7,745	4,414	129,681	1,57E+07	5,16E+05	6,98E+05	

N.	HN	H	N	Integral	Intensität	Norm. Intens. ¹	Zuord. ²
4320	7,745	7,044	129,701	6,82E+06	8,82E+05	1,19E+06	
4321	7,745	1,464	129,701	8,07E+06	5,28E+05	7,13E+05	
4322	7,745	7,734	129,701	8,43E+08	5,96E+07	8,06E+07	
4323	7,745	5,074	129,701	2,32E+07	1,22E+06	1,64E+06	
4324	7,745	0,654	129,711	7,09E+07	3,18E+06	4,30E+06	
4325	7,745	2,114	129,721	8,38E+07	3,52E+06	4,75E+06	
4326	7,745	8,574	129,721	1,58E+07	1,55E+06	2,10E+06	
4327	7,745	9,484	129,731	2,13E+07	1,95E+06	2,64E+06	
4328	7,745	8,154	129,741	6,10E+06	6,96E+05	9,41E+05	
4329	7,755	1,624	129,741	1,38E+07	5,01E+05	6,77E+05	
4330	7,745	3,774	129,751	5,41E+07	2,10E+06	2,84E+06	
4331	7,745	4,214	129,821	1,27E+07	7,18E+05	9,71E+05	
4332	7,735	9,024	129,851	1,05E+06	4,14E+05	5,60E+05	
4333	8,615	9,164	129,721	2,34E+07	1,46E+06	2,56E+06	# V39
4334	8,615	8,604	129,731	8,23E+08	4,57E+07	8,02E+07	
4335	8,615	0,704	129,741	1,54E+08	3,72E+06	6,53E+06	
4336	8,615	1,544	129,741	3,68E+07	1,50E+06	2,63E+06	
4337	8,615	4,274	129,771	5,03E+07	1,61E+06	2,82E+06	
4338	9,505	8,534	131,181	4,25E+06	5,37E+05	1,41E+06	# V108
4339	9,495	7,714	131,231	1,81E+07	1,85E+06	4,86E+06	
4340	9,505	9,494	131,231	5,92E+08	3,07E+07	8,07E+07	
4341	9,505	0,654	131,241	8,52E+07	3,18E+06	8,36E+06	
4342	9,505	1,524	131,241	3,60E+06	4,41E+05	1,16E+06	
4343	9,505	9,034	131,241	2,93E+07	2,47E+06	6,50E+06	
4344	9,505	2,014	131,261	3,70E+07	1,72E+06	4,51E+06	
4345	9,505	5,114	131,271	4,15E+07	1,62E+06	4,26E+06	
4346	9,505	4,454	131,321	8,60E+06	5,12E+05	1,35E+06	
4347	9,205	7,324	132,361	8,18E+06	1,12E+06	1,90E+06	# A12
4348	9,195	0,784	132,361	7,79E+07	2,94E+06	4,99E+06	
4349	9,195	9,214	132,361	9,20E+08	4,78E+07	8,11E+07	
4350	9,195	5,424	132,361	2,61E+06	7,95E+05	1,35E+06	
4351	9,195	1,454	132,361	9,05E+07	2,91E+06	4,93E+06	
4352	9,195	4,434	132,361	5,77E+07	1,91E+06	3,24E+06	
4353	9,205	5,254	132,361	4,38E+06	5,77E+05	9,78E+05	
4354	9,825	6,844	132,833	2,01E+06	5,29E+05	2,78E+06	# D41
4355	9,825	8,154	132,833	8,20E+07	4,27E+06	2,25E+07	
4356	9,825	9,824	132,833	3,54E+08	1,51E+07	7,94E+07	
4357	9,825	8,494	132,833	2,05E+07	1,42E+06	7,45E+06	
4358	9,825	4,354	132,833	3,04E+07	1,17E+06	6,14E+06	
4359	9,825	0,814	132,833	1,18E+07	8,89E+05	4,68E+06	
4360	9,825	2,664	132,833	1,11E+07	6,93E+05	3,65E+06	
4361	9,815	2,794	132,833	6,43E+06	6,72E+05	3,54E+06	

¹ Normierte Intensität. Die Werte der Intensität wurden mit einem Gewichtungsfaktor aus dem Intensitätsunterschied der Signale im ¹⁵N-HSQC-Spektrum multipliziert.

² Zuordnung der HN-Spur. In einigen Fällen werden Signale markiert, die unsicher waren oder wenn keine Zuordnung vorhanden ist.

¹³C-NOESY-HSQC

#Number of dimensions 3

#FORMAT xeasy3D

#INAME 1 HC

#INAME 2 H

#INAME 3 C

#CYANAFORMAT HhC

hchnoesy						hchnoesy600						hchnoesy_last					
N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5000	3,98	9,21	70,58	2,77E+07	5,75E+05	8000	3,97	4,53	70,30	1,19E+07	1,73E+05	10000	4,02	4,62	70,84	1,62E+07	2,41E+05
# thr120 cb						8001	3,97	3,97	70,30	3,00E+08	3,69E+06	10001	4,00	9,22	70,84	1,47E+07	4,18E+05
5001	3,98	3,99	70,58	2,19E+08	4,76E+06	8002	3,97	1,19	70,30	3,19E+07	4,00E+05	10002	4,00	0,85	70,84	1,65E+07	3,50E+05
5002	3,98	1,22	70,58	1,67E+07	4,99E+05	8003	3,96	0,85	70,30	1,25E+07	2,19E+05	10003	4,07	4,06	70,30	4,58E+08	7,53E+06
5003	3,98	0,88	70,58	1,20E+07	3,24E+05	8004	4,67	4,66	69,77	1,10E+08	1,93E+06	10004	4,02	4,01	70,30	4,23E+08	5,08E+06
5004	4,68	4,70	69,84	1,19E+08	2,65E+06	8005	4,67	4,40	69,77	2,37E+07	2,50E+05	10005	4,00	1,24	70,30	4,19E+07	5,67E+05
# thr90 cb						8006	4,67	1,24	69,77	2,35E+07	3,00E+05	10007	4,71	1,28	69,77	2,30E+07	3,87E+05
5005	4,39	1,14	69,84	2,97E+07	8,96E+05	8007	4,23	4,23	69,77	8,81E+08	8,83E+06	10008	4,70	4,71	69,77	1,31E+08	2,43E+06
# thr106 cb						8008	4,17	1,54	69,77	1,07E+07	1,81E+05	10009	4,70	4,40	69,77	1,97E+07	4,18E+05
5006	4,20	4,18	69,84	4,10E+08	6,59E+06	8009	4,02	4,79	69,77	2,48E+07	4,27E+05	10010	4,68	0,93	69,77	6,24E+06	2,00E+05
# thr31 cb						8010	4,02	4,45	69,77	2,94E+07	2,71E+05	10012	4,21	4,49	69,77	4,73E+07	4,44E+05
5007	4,03	4,00	69,84	2,24E+08	4,60E+06	8011	4,02	4,01	69,77	3,21E+08	3,94E+06	10013	4,21	1,54	69,77	1,79E+07	3,18E+05
# thr62 cb						8012	4,02	1,15	69,77	2,70E+07	3,54E+05	10014	4,19	4,19	69,77	1,10E+09	1,31E+07
5008	4,02	1,14	69,84	2,05E+07	4,09E+05	8013	4,00	8,44	69,77	9,13E+06	1,80E+05	10015	4,06	7,79	69,77	1,11E+07	2,26E+05
5009	4,36	4,35	69,35	4,79E+08	9,56E+06	8014	4,36	4,75	69,23	2,93E+07	3,01E+05	10016	4,06	4,49	69,77	2,68E+07	4,40E+05

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5010	4,36	4,00	69,35	3,27E+07	8,15E+05	8015	4,36	4,36	69,23	5,37E+08	7,87E+06	10017	4,04	8,44	69,77	1,37E+07	3,27E+05
5011	4,34	1,22	69,10	3,86E+07	6,16E+05	8016	4,34	3,97	69,23	3,81E+07	4,50E+05	10018	4,04	4,79	69,77	4,26E+07	8,74E+05
5012	4,26	1,22	69,10	2,98E+07	4,17E+05	8017	4,34	1,24	69,23	4,97E+07	6,38E+05	10019	4,04	1,19	69,77	4,56E+07	6,13E+05
5013	4,33	7,73	68,86	2,38E+07	5,94E+05	8018	4,25	8,00	69,23	8,79E+06	1,75E+05	10020	4,40	4,79	69,23	5,68E+07	6,80E+05
5014	4,21	4,18	68,86	4,34E+08	8,76E+06	8019	4,25	4,79	69,23	3,42E+07	3,25E+05	10021	4,38	7,48	69,23	1,15E+07	2,28E+05
5015	4,21	1,31	68,86	2,65E+07	5,28E+05	8020	4,19	4,19	69,23	9,50E+08	9,24E+06	10022	4,38	4,36	69,23	6,84E+08	1,10E+07
5016	4,21	8,25	68,61	1,17E+07	3,87E+05	8021	4,18	4,49	69,23	4,29E+07	2,95E+05	10023	4,38	3,97	69,23	3,60E+07	8,15E+05
5017	3,64	3,65	68,61	2,26E+08	7,12E+06	8022	4,44	1,02	68,69	2,06E+07	3,53E+05	10024	4,37	1,28	69,23	7,53E+07	1,15E+06
#thr93 ha						8023	4,42	4,79	68,69	2,73E+07	3,96E+05	10025	4,36	4,79	69,23	5,53E+07	6,98E+05
5018	3,64	1,14	68,61	3,06E+07	8,06E+05	8024	4,42	4,40	68,69	3,07E+08	2,72E+06	10026	4,34	3,80	69,23	1,86E+07	2,23E+05
5019	4,45	1,05	68,37	2,11E+07	5,49E+05	8025	4,42	4,06	68,69	2,17E+07	2,24E+05	10027	4,27	7,92	69,23	2,37E+07	2,16E+05
5020	4,44	4,78	68,37	1,71E+07	6,92E+05	8026	4,33	4,79	68,69	2,29E+07	3,01E+05	10028	4,47	4,79	68,69	4,01E+07	6,49E+05
5021	4,44	4,44	68,37	1,19E+08	3,76E+06	8027	4,32	7,74	68,69	2,57E+07	4,72E+05	10029	4,47	4,45	68,69	3,38E+08	4,22E+06
5022	4,44	4,09	68,37	3,50E+07	5,41E+05	8028	4,25	1,24	68,69	4,35E+07	4,16E+05	10030	4,47	4,10	68,69	1,72E+07	3,49E+05
5023	4,16	4,18	68,37	2,32E+08	3,05E+06	8029	4,21	4,79	68,69	3,87E+07	3,44E+05	10031	4,47	1,06	68,69	3,99E+07	6,48E+05
5024	4,15	1,22	68,37	2,06E+07	4,24E+05	8030	4,21	3,97	68,69	6,66E+07	2,31E+05	10032	4,34	7,79	68,69	3,46E+07	7,80E+05
5025	3,19	8,60	67,87	1,89E+07	4,93E+05	8031	4,21	1,28	68,69	3,43E+07	4,46E+05	10033	4,23	8,13	68,69	2,58E+07	4,04E+05
#Val68 ha						8032	4,19	8,22	68,69	1,74E+07	2,71E+05	10034	4,23	4,79	68,69	7,69E+07	8,36E+05
5026	3,19	3,22	67,87	2,24E+08	6,98E+06	8033	4,19	3,84	68,69	2,52E+07	1,99E+05	10035	4,23	3,84	68,69	2,30E+07	3,85E+05
5027	3,19	0,79	67,87	4,68E+07	1,07E+06	8034	4,12	1,24	68,69	2,19E+07	2,35E+05	10036	4,23	1,32	68,69	4,61E+07	7,52E+05
5028	4,21	8,08	67,38	1,11E+07	3,65E+05	8035	3,62	3,62	68,69	2,40E+08	4,32E+06	10037	4,15	3,88	68,69	2,18E+07	2,05E+05
5029	4,21	4,18	67,38	9,65E+07	1,83E+06	8036	3,62	1,15	68,69	2,37E+07	4,53E+05	10038	3,66	8,05	68,69	8,98E+06	2,77E+05
5030	4,21	1,14	67,38	1,59E+07	3,64E+05	8037	3,18	3,19	68,15	1,72E+08	3,72E+06	10039	3,66	3,67	68,69	2,61E+08	5,57E+06
5031	3,61	8,51	67,13	1,23E+07	4,01E+05	8038	3,18	0,76	68,15	2,90E+07	5,30E+05	10040	3,66	1,15	68,69	3,37E+07	7,72E+05
#Ile133 ha						8039	3,17	8,52	68,15	1,41E+07	2,35E+05	10041	3,65	2,06	68,69	8,09E+06	2,03E+05
5032	3,61	3,65	67,13	2,21E+08	4,92E+06	8040	4,21	1,06	67,61	2,00E+07	1,64E+05	10043	4,17	7,92	68,15	1,04E+07	2,40E+05
5033	3,61	1,92	67,13	1,35E+07	4,01E+05	8041	4,19	8,00	67,61	1,51E+07	2,01E+05	10044	4,17	1,24	68,15	3,14E+07	3,77E+05
5034	3,61	0,88	67,13	4,03E+07	1,08E+06	8042	3,61	8,48	67,07	5,57E+06	1,95E+05	10045	3,22	2,10	68,15	6,14E+06	2,32E+05
5035	4,57	2,79	66,64	2,81E+07	4,49E+05	8043	3,61	1,93	67,07	1,83E+07	1,98E+05	10046	3,21	8,57	68,15	1,97E+07	5,07E+05
5036	4,54	2,70	66,64	2,81E+07	3,97E+05	8044	3,61	0,85	67,07	4,26E+07	5,18E+05	10047	3,21	3,23	68,15	1,93E+08	5,16E+06
5037	3,82	7,91	66,64	2,72E+07	4,60E+05	8045	3,59	8,18	67,07	6,50E+06	1,60E+05	10048	3,21	0,76	68,15	4,84E+07	9,39E+05
5038	3,82	1,22	66,64	3,18E+07	5,64E+05	8046	3,59	3,58	67,07	3,57E+08	3,20E+06	10049	4,25	8,05	67,61	2,82E+07	3,70E+05
5039	3,80	8,25	66,64	2,41E+07	5,30E+05	8047	3,59	3,01	67,07	9,81E+06	1,64E+05	10050	4,23	1,11	67,61	3,06E+07	3,48E+05
5040	3,80	3,83	66,64	9,86E+08	2,08E+07	8048	3,58	7,14	67,07	1,40E+07	2,24E+05	10051	3,65	3,01	67,07	1,65E+07	3,04E+05
5041	3,80	1,92	66,64	2,65E+07	7,09E+05	8049	3,95	7,74	66,53	1,52E+07	3,13E+05	10052	3,63	8,52	67,07	1,34E+07	3,21E+05
5042	3,79	0,96	66,64	6,95E+07	1,03E+06	8050	3,95	4,32	66,53	1,83E+07	2,15E+05	10053	3,63	7,14	67,07	1,83E+07	3,42E+05
5043	3,97	1,22	66,39	1,57E+07	5,46E+05	8051	3,95	3,93	66,53	3,84E+08	6,06E+06	10054	3,63	3,62	67,07	4,17E+08	4,72E+06
5044	3,96	7,73	66,39	2,05E+07	5,06E+05	8052	3,95	1,24	66,53	1,74E+07	4,39E+05	10055	3,63	1,97	67,07	2,24E+07	3,34E+05
5045	3,96	3,92	66,39	3,26E+08	9,16E+06	8053	3,92	4,79	66,53	1,56E+07	1,75E+05	10056	3,63	0,89	67,07	6,62E+07	1,10E+06
5046	3,77	7,73	66,39	2,54E+07	4,97E+05	8054	3,80	7,79	66,53	2,36E+07	2,97E+05	10057	3,99	7,79	66,53	2,61E+07	6,43E+05
5047	3,75	3,74	66,39	6,35E+08	1,20E+07	8055	3,80	4,23	66,53	3,65E+07	3,62E+05	10058	3,97	4,79	66,53	1,39E+07	4,27E+05
5048	3,75	0,96	66,39	5,43E+07	9,27E+05	8056	3,80	3,80	66,53	8,44E+08	1,26E+07	10059	3,97	4,36	66,53	2,31E+07	2,56E+05
5049	3,42	3,39	66,39	2,02E+08	5,49E+06	8057	3,80	2,97	66,53	1,23E+07	1,80E+05	10060	3,97	3,97	66,53	4,79E+08	9,33E+06
5050	3,41	0,88	66,39	3,79E+07	9,21E+05	8058	3,80	1,89	66,53	2,52E+07	4,24E+05	10061	3,97	1,24	66,53	2,67E+07	6,96E+05
5051	3,84	8,95	66,15	2,01E+07	4,25E+05	8059	3,80	1,24	66,53	2,81E+07	4,32E+05	10062	3,84	8,31	66,53	2,25E+07	3,98E+05
5052	3,55	3,57	65,90	2,37E+08	3,85E+06	8060	3,78	8,26	66,53	1,95E+07	3,13E+05	10063	3,84	7,57	66,53	8,83E+06	2,02E+05
5053	3,51	3,48	65,90	1,94E+08	3,31E+06	8061	3,78	7,14	66,53	1,51E+07	2,09E+05	10064	3,84	4,79	66,53	2,97E+07	7,00E+05
5054	3,64	3,65	65,65	2,82E+08	4,17E+05	8062	3,78	4,79	66,53	2,17E+07	2,84E+05	10065	3,84	4,40	66,53	1,55E+07	2,85E+05
5055	3,64	0,88	65,65	2,80E+07	6,60E+06	8063	3,78	3,41	66,53	1,92E+07	2,74E+05	10066	3,84	4,23	66,53	3,30E+07	5,45E+05
5056	4,08	7,65	65,65	1,80E+07	5,74E+05	8064	3,78	3,19	66,53	1,36E+07	1,72E+05	10067	3,84	1,28	66,53	3,55E+07	7,05E+05
5057	4,08	4,09	65,41	2,52E+08	7,25E+06	8065	3,78	0,93	66,53	6,04E+07	6,80E+05	10068	3,82	7,18	66,53	1,13E+07	2,90E+05
5058	4,08	0,88	65,41	2,91E+07	8,79E+05	8066	3,76	0,93	66,53	5,81E+07	6,67E+05	10069	3,82	3,84	66,53	1,02E+09	1,87E+07
5059	2,85	2,87	65,41	2,12E+08	6,69E+06	8067	3,74	8,13	66,53	1,43E+07	2,26E+05	10070	3,82	3,14	66,53	1,38E+07	2,50E+05
5060	2,85	0,44	65,41	1,79E+07	5,55E+05	8068	3,74	2,15	66,53	9,48E+06	1,94E+05	10071	3,82	1,93	66,53	3,44E+07	8,25E+05
5061	2,85	-0,42	65,41	1,45E+07	4,97E+05	8069	3,73	3,19	66,53	9,05E+06	1,68E+05	10072	3,82	0,93	66,53	8,16E+07	1,22E+06
5062	4,47	2,35	64,67	1,92E+07	5,89E+05	8070	3,41	1,89	66,53	1,62E+07	2,10E+05	10073	3,81	7,79	66,53	3,01E+07	4,42E+05
5063	4,47	4,44	64,42	5,15E+08	1,34E+07	8071	3,40	3,41	66,53	1,70E+08	3,07E+06	10074	3,81	3,41	66,53	1,86E+07	3,47E+05
5064	4,47	2,01	64,42	1,94E+07	4,54E+05	8072	3,39	7,74	66,53	1,08E+07	1,99E+05	10075	3,78	8,18	66,53	2,29E+07	4,06E+05
5065	4,26	4,78	64,42	2,16E+07	4,45E+05	8073	3,39	3,75	66,53	2,35E+07	2,00E+05	10076	3,77	2,15	66,53	1,01E+07	3,41E+05
5066	4,26	3,92	64,42	4,21E+07	9,11E+05	8074	3,39	0,89	66,53	2,46E+07	4,41E+05	10077	3,43	7,74	66,53	1,35E+07	3,04E+05
5067	3,96	1,31	64,42	1,97E+07	5,62E+05	8075	3,33	3,62	66,53	2,20E+07	1,97E+05	10078	3,43	3,41	66,53	1,96E+08	4,46E+06
5068	3,96	1,05	64,42	1,72E+07	4,97E+05	8076	3,82	0,67	65,99	1,09E+07	1,61E+05	10079	3,43	1,93	66,53	2,01E+07	3,26E+05
5069	3,94	3,92	64,42	5,89E+08	9,41E+06	8077	3,54	5,49	65,99	2,03E+07	2,16E+05	10080	3,43	0,93	66,5		

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5083	3,82	0,88	63,93	2,78E+07	9,40E+05	8091	3,62	1,67	65,45	1,13E+07	1,75E+05	10095	4,10	4,10	65,45	4,16E+08	6,64E+06
5084	3,23	3,22	63,93	9,51E+07	2,42E+06	8092	2,84	6,92	65,45	8,80E+06	1,75E+05	10096	4,10	1,97	65,45	1,07E+07	2,64E+05
5085	4,41	4,44	63,68	3,70E+08	5,01E+06	8093	2,84	6,44	65,45	9,25E+06	1,57E+05	10097	4,10	1,37	65,45	9,51E+06	2,49E+05
5086	4,34	4,78	63,68	1,65E+07	5,00E+05	8094	2,84	2,84	65,45	1,72E+08	3,94E+06	10098	4,10	0,89	65,45	4,22E+07	1,09E+06
5087	3,22	1,66	63,68	1,02E+07	3,98E+05	8095	2,84	1,89	65,45	7,01E+06	2,47E+05	10099	3,67	3,23	65,45	1,02E+07	2,20E+05
5088	4,01	0,70	63,43	3,01E+07	5,83E+05	8096	2,84	0,41	65,45	1,45E+07	2,96E+05	10100	3,66	8,26	65,45	1,01E+07	3,03E+05
5089	4,01	-0,42	63,43	2,25E+07	4,71E+05	8097	2,84	-0,41	65,45	1,39E+07	2,03E+05	10101	3,66	7,61	65,45	8,21E+06	2,69E+05
5090	4,49	8,69	63,19	3,52E+07	6,34E+05	8098	4,45	4,45	64,38	7,63E+08	1,07E+07	10102	3,66	3,67	65,45	3,68E+08	6,08E+06
5091	4,49	8,25	63,19	3,26E+07	1,04E+06	8099	4,45	2,36	64,38	2,00E+07	3,29E+05	10103	3,66	1,63	65,45	1,22E+07	2,11E+05
5092	4,49	0,70	63,19	1,91E+07	5,28E+05	8100	4,44	6,74	64,38	7,88E+06	2,00E+05	10104	3,66	0,85	65,45	5,25E+07	6,74E+05
5093	4,17	4,18	63,19	2,01E+08	3,51E+06	8101	4,26	4,84	64,38	3,01E+07	4,01E+05	10105	2,87	6,96	65,45	7,57E+06	2,55E+05
5094	4,06	4,09	63,19	1,07E+09	2,43E+07	8102	4,26	3,88	64,38	3,27E+07	5,41E+05	10106	2,87	6,44	65,45	9,17E+06	2,90E+05
5095	4,02	0,96	63,19	2,02E+07	5,39E+05	8103	4,25	4,23	64,38	2,86E+08	3,39E+06	10107	2,87	2,88	65,45	2,00E+08	5,47E+06
5096	3,97	0,88	63,19	4,12E+07	7,68E+05	8104	3,95	1,28	64,38	2,24E+07	3,44E+05	10108	2,87	1,89	65,45	9,11E+06	2,63E+05
5097	3,96	9,12	63,19	4,26E+07	9,89E+05	8105	3,93	7,44	64,38	1,00E+07	1,68E+05	10109	2,87	0,46	65,45	1,90E+07	5,49E+05
5098	3,93	3,48	63,19	2,72E+07	5,50E+05	8106	3,93	1,06	64,38	2,01E+07	2,21E+05	10110	2,87	-0,41	65,45	9,00E+06	3,36E+05
5099	3,66	3,65	63,19	2,88E+07	9,01E+05	8107	3,88	4,27	64,38	6,23E+07	6,34E+05	10111	4,48	5,14	64,91	8,42E+06	2,20E+05
5100	3,51	3,92	63,19	2,99E+07	7,82E+05	8108	3,87	4,84	64,38	3,13E+07	4,13E+05	10112	4,49	2,41	64,38	2,43E+07	5,06E+05
5101	4,59	8,86	62,94	3,16E+07	4,38E+05	8109	3,22	4,40	64,38	2,01E+07	2,53E+05	10113	4,49	2,06	64,38	2,40E+07	3,05E+05
5102	4,52	8,86	62,94	2,44E+07	3,97E+05	8110	4,49	2,19	63,84	1,95E+07	2,33E+05	10114	4,48	4,49	64,38	1,05E+09	1,62E+07
5103	4,05	7,82	62,94	2,55E+07	7,11E+05	8111	4,48	1,97	63,84	2,27E+07	2,41E+05	10115	4,29	3,93	64,38	4,11E+07	7,85E+05
5104	3,50	3,48	62,94	1,34E+08	3,99E+06	8112	4,44	4,10	63,84	2,43E+07	1,72E+05	10116	4,27	4,84	64,38	3,92E+07	6,69E+05
5105	3,08	6,26	62,94	2,79E+07	8,46E+05	8113	4,41	4,79	63,84	3,66E+07	3,87E+05	10117	4,27	4,27	64,38	3,94E+08	5,50E+06
5106	3,08	3,05	62,94	1,29E+08	3,56E+06	8114	4,41	3,23	63,84	1,66E+07	1,81E+05	10118	4,21	3,88	64,38	2,13E+07	2,20E+05
5107	2,98	2,96	62,94	2,02E+07	6,03E+05	8115	4,33	2,28	63,84	2,05E+07	2,37E+05	10119	3,97	7,48	64,38	2,23E+07	4,39E+05
5108	2,85	2,87	62,94	2,34E+07	4,79E+05	8116	4,32	8,70	63,84	1,69E+07	4,19E+05	10120	3,97	4,40	64,38	4,40E+07	5,99E+05
5109	4,44	4,96	62,45	2,87E+07	3,83E+05	8117	4,32	4,79	63,84	3,13E+07	2,48E+05	10121	3,97	1,28	64,38	3,40E+07	5,84E+05
5110	4,43	8,86	62,45	3,63E+07	5,28E+05	8118	4,10	1,19	63,84	1,74E+07	2,06E+05	10122	3,97	1,15	64,38	3,52E+07	4,68E+05
5111	4,43	7,82	62,45	1,45E+07	3,99E+05	8119	4,08	4,79	63,84	1,79E+07	1,88E+05	10123	3,93	4,32	64,38	5,24E+07	6,57E+05
5112	4,43	2,27	62,45	2,95E+07	6,25E+05	8120	3,87	3,88	63,84	1,36E+09	1,55E+07	10124	3,91	4,84	64,38	4,74E+07	6,05E+05
5113	4,43	0,88	62,45	2,36E+07	7,30E+05	8121	3,85	3,62	63,84	2,13E+07	1,80E+05	10125	3,84	4,23	64,38	2,68E+07	2,02E+05
5114	4,36	1,83	62,45	1,23E+07	3,94E+05	8122	3,80	7,79	63,84	1,43E+07	2,49E+05	10126	4,45	3,27	63,84	1,75E+07	2,64E+05
5115	4,62	8,69	62,20	3,01E+07	4,68E+05	8123	3,80	1,93	63,84	1,32E+07	1,99E+05	10127	4,44	4,79	63,84	5,35E+07	6,96E+05
5116	4,62	1,22	62,20	2,33E+07	6,57E+05	8124	3,80	1,58	63,84	1,04E+07	2,28E+05	10128	4,36	8,74	63,84	2,23E+07	5,36E+05
5117	4,61	9,38	62,20	2,85E+07	1,23E+06	8125	3,80	0,85	63,84	3,89E+07	5,78E+05	10129	4,36	4,79	63,84	4,39E+07	5,25E+05
5118	4,61	4,87	62,20	3,58E+07	7,65E+05	8126	3,58	3,84	63,84	3,45E+07	2,21E+05	10130	4,36	4,36	63,84	8,86E+08	6,33E+06
5119	4,61	4,61	62,20	4,53E+08	1,02E+07	8127	3,21	3,19	63,84	7,73E+07	1,43E+06	10131	4,36	2,32	63,84	2,02E+07	4,03E+05
5120	4,53	8,69	62,20	3,36E+07	5,06E+05	8128	3,21	1,63	63,84	8,64E+06	1,91E+05	10132	4,36	1,84	63,84	7,96E+06	2,17E+05
5121	4,53	1,14	62,20	3,10E+07	1,10E+06	8129	4,48	8,26	63,30	3,63E+07	5,13E+05	10133	4,34	2,06	63,84	1,13E+07	2,65E+05
5122	4,52	7,56	62,20	2,28E+07	4,94E+05	8130	4,47	8,65	63,30	2,28E+07	2,90E+05	10134	4,14	4,79	63,84	2,21E+07	3,43E+05
5123	4,52	4,52	62,20	7,31E+08	1,77E+07	8131	4,47	0,72	63,30	2,61E+07	3,59E+05	10135	4,14	1,24	63,84	2,71E+07	6,42E+05
5124	4,52	1,48	62,20	1,95E+07	5,64E+05	8132	4,06	3,67	63,30	8,63E+06	1,56E+05	10137	3,84	7,83	63,84	1,99E+07	4,24E+05
5125	4,36	8,51	62,20	5,93E+07	1,41E+06	8133	4,04	7,83	63,30	1,87E+07	4,28E+05	10138	3,84	1,97	63,84	1,12E+07	2,72E+05
5126	4,36	2,27	62,20	3,55E+07	7,67E+05	8134	4,03	4,79	63,30	1,70E+07	2,22E+05	10139	3,84	1,63	63,84	1,38E+07	4,13E+05
5127	4,10	4,09	62,20	7,71E+08	1,09E+07	8135	4,00	-0,41	63,30	1,33E+07	2,04E+05	10140	3,84	0,89	63,84	5,18E+07	9,59E+05
5128	4,36	4,35	61,96	1,33E+09	2,23E+07	8136	3,99	0,93	63,30	3,80E+07	3,87E+05	10142	3,25	4,79	63,84	8,19E+06	2,49E+05
5129	4,36	0,88	61,96	2,64E+07	4,10E+05	8137	3,99	0,72	63,30	3,66E+07	3,98E+05	10143	3,25	4,45	63,84	1,29E+07	2,94E+05
5130	4,20	8,08	61,96	2,49E+07	7,90E+05	8138	3,95	9,09	63,30	2,88E+07	5,10E+05	10144	3,25	3,23	63,84	8,29E+07	1,89E+06
5131	4,20	7,47	61,96	1,80E+07	4,77E+05	8139	3,95	0,80	63,30	4,07E+07	3,94E+05	10145	3,25	1,63	63,84	1,35E+07	3,00E+05
5132	4,20	1,14	61,96	1,93E+07	5,06E+05	8140	3,91	3,49	63,30	2,61E+07	3,88E+05	10146	3,25	0,85	63,84	1,11E+07	2,35E+05
5133	4,19	4,18	61,96	1,01E+09	2,41E+07	8141	3,63	4,06	63,30	3,08E+07	1,92E+05	10147	3,24	0,98	63,84	1,04E+07	2,56E+05
5134	4,19	2,01	61,96	2,28E+07	7,45E+05	8142	3,59	3,58	63,30	6,31E+07	3,95E+05	10148	4,51	8,70	63,30	3,02E+07	5,40E+05
5135	3,78	0,70	61,96	2,92E+07	6,56E+05	8143	3,50	3,88	63,30	3,35E+07	3,25E+05	10149	4,51	8,26	63,30	4,79E+07	1,00E+06
5136	3,77	7,13	61,96	2,06E+07	5,09E+05	8144	2,81	2,84	63,30	5,57E+07	3,66E+05	10150	4,51	1,97	63,30	2,46E+07	2,91E+05
5137	4,36	2,96	61,71	1,57E+07	4,10E+05	8145	4,04	4,27	62,76	2,17E+08	1,10E+06	10151	4,51	0,72	63,30	3,15E+07	4,94E+05
5138	4,36	1,22	61,71	2,31E+07	6,36E+05	8146	4,04	4,06	62,76	1,47E+09	1,96E+07	10152	4,49	7,83	63,30	1,83E+07	2,36E+05
5139	4,19	0,88	61,71	4,79E+07	8,31E+05	8147	3,96	1,71	62,76	1,47E+07	1,94E+05	10153	4,14	7,92	63,30	1,64E+07	2,68E+05
5140	4,07	8,95	61,71	5,74E+07	1,54E+06	8148	3,89	4,79	62,76	3,00E+07	3,93E+05	10154	4,08	4,79	63,30	3,36E+07	5,84E+05
5141	3,30	2,35	61,71	1,80E+07	4,54E+05	8149	3,70	4,10	62,76	3,64E+07	2,08E+05	10155	4,03	0,98	63,30	5,29E+07	5,78E+05
5142	4,44	8,43	61,46	5,73E+07	1,26E+06	8150	3,59	4,10	62,76	2,67E+07	1,86E+05	10156	4,03	-0,41	63,30	1,23E+07	4,01E+05
5143	4,21	8,60	61,46	6,68E+07	1,28E+06	8151	3,48	4,79	62,76	1,20E+07	2,13E+05	10157	4,02	0,72	63,30	3,90E+07	6,23E+05
5144	3,73	7,73	61,46	2,45E+07	8,47E+05	8152	3,48	3,49	62,76	1,18E+08	2,64E+06	10158	4,00	1,71	63,30	2,25E+07	3,53E+05
5145	3,73	3,74	61,46	2,81E+08													

<u>N.</u>	<u>HC</u>	<u>H</u>	<u>C</u>	<u>Integral</u>	<u>Intens.</u>	<u>N.</u>	<u>HC</u>	<u>H</u>	<u>C</u>	<u>Integral</u>	<u>Intens.</u>	<u>N.</u>	<u>HC</u>	<u>H</u>	<u>C</u>	<u>Integral</u>	<u>Intens.</u>
5159	4,64	8,08	61,22	3,13E+07	5,72E+05	8167	4,41	0,85	62,22	4,97E+07	4,84E+05	10175	3,10	7,61	62,76	5,63E+06	2,04E+05
5160	4,43	1,14	61,22	2,60E+07	5,72E+05	8168	4,36	3,01	62,22	1,45E+07	1,78E+05	10176	3,09	6,27	62,76	3,13E+07	7,28E+05
5161	4,38	4,35	61,22	1,53E+09	2,23E+07	8169	4,36	2,23	62,22	5,11E+07	5,07E+05	10177	3,09	3,10	62,76	1,22E+08	2,80E+06
5162	4,38	2,27	61,22	4,16E+07	7,70E+05	8170	4,34	8,52	62,22	4,47E+07	8,49E+05	10178	3,09	0,41	62,76	1,25E+07	3,61E+05
5163	4,08	4,09	61,22	7,22E+08	1,42E+07	8171	4,34	1,80	62,22	2,22E+07	2,05E+05	10179	3,09	0,07	62,76	9,72E+06	2,52E+05
5164	4,08	1,05	61,22	4,51E+07	1,15E+06	8172	4,33	8,31	62,22	1,18E+07	1,61E+05	10180	3,01	6,31	62,76	1,72E+07	2,43E+05
5165	4,59	2,53	60,97	2,88E+07	4,54E+05	8173	4,33	2,97	62,22	1,36E+07	1,80E+05	10181	3,01	3,01	62,76	6,58E+07	8,98E+05
5166	4,59	0,36	60,97	2,43E+07	4,02E+05	8174	4,18	7,44	62,22	1,22E+07	1,88E+05	10182	4,63	9,39	62,22	4,72E+07	1,10E+06
5167	4,58	9,04	60,97	6,80E+07	1,06E+06	8175	4,18	4,53	62,22	5,24E+07	2,79E+05	10183	4,63	4,84	62,22	5,19E+07	6,36E+05
5168	4,57	9,99	60,97	2,94E+07	4,27E+05	8176	4,18	1,97	62,22	1,92E+07	3,22E+05	10184	4,63	4,62	62,22	5,95E+08	7,52E+06
5169	4,5210,25	60,97	1,57E+07	4,12E+05	8177	4,17	8,05	62,22	2,03E+07	4,56E+05	10185	4,63	1,24	62,22	2,84E+07	3,55E+05	
5170	4,52	7,04	60,97	6,91E+07	1,23E+06	8178	4,17	1,11	62,22	2,51E+07	2,51E+05	10186	4,55	7,70	62,22	2,10E+07	5,04E+05
5171	4,52	4,52	60,97	6,19E+08	8,09E+06	8179	4,14	4,14	62,22	1,97E+09	2,17E+07	10187	4,55	1,15	62,22	6,13E+07	1,25E+06
5172	4,39	7,30	60,97	2,52E+07	5,86E+05	8180	3,97	4,36	62,22	6,01E+07	2,85E+05	10188	4,53	4,53	62,22	1,15E+09	1,55E+07
5173	4,38	0,96	60,97	3,50E+07	7,82E+05	8181	3,76	7,14	62,22	2,01E+07	2,95E+05	10189	4,53	4,23	62,22	4,87E+07	5,40E+05
5174	4,31	7,82	60,97	1,48E+07	5,08E+05	8182	3,74	0,67	62,22	2,90E+07	3,24E+05	10190	4,53	1,54	62,22	3,32E+07	6,36E+05
5175	4,31	4,35	60,97	1,08E+09	1,68E+07	8183	4,38	7,57	61,68	1,04E+07	1,91E+05	10191	4,45	2,23	62,22	4,43E+07	6,18E+05
5176	4,26	3,05	60,97	1,85E+07	4,50E+05	8184	4,36	4,71	61,68	6,35E+07	4,77E+05	10192	4,45	0,85	62,22	7,07E+07	7,81E+05
5177	4,19	4,18	60,97	9,17E+08	1,23E+07	8185	4,36	4,36	61,68	1,96E+09	2,23E+07	10193	4,44	8,83	62,22	1,64E+09	3,76E+05
5178	3,93	5,74	60,97	2,37E+07	8,17E+05	8186	4,36	1,24	61,68	2,45E+07	3,51E+05	10194	4,40	5,01	62,22	1,58E+07	2,01E+05
5179	3,92	8,95	60,97	2,60E+07	4,83E+05	8187	4,34	7,14	61,68	2,00E+07	2,83E+05	10195	4,40	4,71	62,22	7,63E+07	5,65E+05
5180	3,92	3,92	60,97	3,75E+08	9,83E+06	8188	4,21	9,26	61,68	5,07E+06	1,71E+05	10196	4,40	1,84	62,22	1,92E+07	2,71E+05
5181	3,92	1,92	60,97	2,51E+07	6,13E+05	8189	4,19	8,61	61,68	4,82E+07	7,04E+05	10197	4,38	8,52	62,22	6,10E+07	1,36E+06
5182	4,58	7,04	60,72	7,18E+07	7,00E+05	8190	4,19	1,32	61,68	2,06E+07	1,67E+05	10198	4,38	3,01	62,22	2,38E+07	4,52E+05
5183	4,58	3,57	60,72	1,75E+07	3,97E+05	8191	4,18	0,89	61,68	5,27E+07	5,17E+05	10199	4,38	2,28	62,22	7,30E+07	7,24E+05
5184	4,54	6,00	60,48	3,62E+07	5,60E+05	8192	4,06	0,93	61,68	5,54E+07	5,81E+05	10200	4,23	4,66	62,22	1,17E+07	2,29E+05
5185	4,53	9,90	60,48	3,01E+07	4,02E+05	8193	4,04	8,96	61,68	3,90E+07	8,47E+05	10201	4,21	8,09	62,22	2,82E+07	8,33E+05
5186	4,17	8,69	60,48	3,85E+07	6,25E+05	8194	3,76	0,89	61,68	1,34E+07	1,59E+05	10202	4,21	7,48	62,22	1,74E+07	3,71E+05
5187	4,17	0,88	60,48	3,10E+07	5,76E+05	8195	3,73	3,71	61,68	5,66E+08	9,07E+06	10203	4,21	2,02	62,22	2,48E+07	6,39E+05
5188	4,17	0,62	60,48	2,29E+07	5,24E+05	8196	3,72	1,06	61,68	1,51E+07	2,17E+05	10204	4,21	1,15	62,22	1,79E+07	4,63E+05
5189	3,99	8,86	60,48	2,62E+07	4,12E+05	8197	3,54	3,71	61,68	3,16E+07	2,14E+05	10205	4,18	4,84	62,22	2,99E+07	2,23E+05
5190	3,98	7,04	60,48	2,18E+07	4,27E+05	8198	3,32	3,32	61,68	9,86E+07	1,29E+06	10206	4,18	4,19	62,22	3,37E+09	4,65E+07
5191	3,84	3,83	60,48	2,98E+08	8,42E+06	8199	3,29	2,32	61,68	2,73E+07	3,53E+05	10207	3,82	4,14	62,22	1,87E+07	2,17E+05
5192	3,84	1,92	60,48	2,42E+07	7,21E+05	8200	3,26	3,27	61,68	9,55E+07	1,37E+06	10208	3,80	7,18	62,22	1,66E+07	4,62E+05
5193	3,84	0,79	60,48	1,81E+07	5,97E+05	8201	2,34	3,32	61,68	2,18E+07	4,38E+05	10209	3,80	1,84	62,22	1,14E+07	2,15E+05
5194	5,30	9,64	60,23	1,28E+07	4,67E+05	8202	2,32	2,32	61,68	3,75E+07	5,73E+05	10210	3,80	0,98	62,22	3,13E+07	2,36E+05
5195	4,59	7,73	60,23	2,49E+07	8,90E+05	8203	5,01	5,01	61,14	1,14E+08	2,26E+06	10211	3,78	0,67	62,22	4,07E+07	5,50E+05
5196	4,59	0,79	60,23	6,37E+07	1,04E+06	8204	5,01	2,19	61,14	1,59E+07	2,75E+05	10212	4,68	6,74	61,68	7,06E+06	2,03E+05
5197	4,58	1,57	60,23	3,33E+07	5,08E+05	8205	5,01	0,76	61,14	1,79E+07	2,63E+05	10213	4,66	9,61	61,68	1,33E+07	2,11E+05
5198	4,53	9,21	60,23	3,73E+07	5,08E+05	8206	5,00	9,22	61,14	3,68E+07	6,72E+05	10214	4,41	7,57	61,68	1,67E+07	2,92E+05
5199	4,50	4,52	60,23	5,47E+08	7,22E+06	8207	5,00	4,79	61,14	3,33E+07	2,52E+05	10215	4,41	3,19	61,68	2,18E+07	2,93E+05
5200	4,50	0,70	60,23	6,47E+07	1,04E+06	8208	4,67	4,66	61,14	3,93E+08	4,83E+06	10216	4,40	1,28	61,68	3,66E+07	5,57E+05
5201	4,48	9,21	60,23	3,87E+07	6,71E+05	8209	4,67	3,84	61,14	9,37E+06	2,73E+05	10217	4,38	0,76	61,68	5,49E+07	4,62E+05
5202	4,03	8,08	60,23	2,24E+07	3,97E+05	8210	4,67	2,41	61,14	1,02E+07	2,53E+05	10218	4,37	7,18	61,68	3,04E+07	4,35E+05
5203	4,02	4,00	60,23	7,51E+08	1,43E+07	8211	4,51	2,19	61,14	2,36E+07	2,51E+05	10219	4,37	4,36	61,68	2,70E+09	3,68E+07
5204	4,02	2,01	60,23	5,48E+07	1,01E+06	8212	4,49	6,96	61,14	2,46E+07	4,76E+05	10220	4,23	9,22	61,68	1,07E+07	2,33E+05
5205	4,01	0,79	60,23	1,44E+07	4,11E+05	8213	4,44	8,44	61,14	4,67E+07	7,21E+05	10221	4,23	8,65	61,68	6,94E+07	1,24E+06
5206	3,66	3,65	60,23	6,05E+08	3,36E+07	8214	4,44	1,11	61,14	3,29E+07	3,53E+05	10222	4,23	0,54	61,68	2,34E+07	2,02E+05
5207	4,78	9,73	59,98	4,50E+07	9,11E+05	8215	4,42	7,79	61,14	8,31E+06	1,84E+05	10223	4,22	4,84	61,68	3,17E+07	3,15E+05
5208	4,77	4,70	59,98	2,13E+08	2,91E+06	8216	4,42	4,06	61,14	2,84E+07	2,49E+05	10224	4,22	1,63	61,68	1,51E+07	2,39E+05
5209	4,76	9,82	59,98	3,35E+07	7,64E+05	8217	4,36	7,31	61,14	2,29E+07	3,32E+05	10225	4,22	1,37	61,68	2,66E+07	4,21E+05
5210	4,76	7,82	59,98	1,05E+08	1,60E+06	8218	4,36	0,93	61,14	4,50E+07	4,97E+05	10226	4,22	0,93	61,68	7,85E+07	9,62E+05
5211	4,76	3,57	59,98	4,29E+07	9,82E+05	8219	4,30	7,83	61,14	1,56E+07	2,63E+05	10227	4,08	9,00	61,68	5,59E+07	1,45E+06
5212	4,74	8,86	59,98	6,80E+07	1,12E+06	8220	4,30	4,06	61,14	9,75E+07	7,94E+05	10228	4,07	1,93	61,68	3,31E+07	2,28E+05
5213	4,74	4,70	59,98	2,16E+08	3,19E+06	8221	4,29	7,35	61,14	1,75E+07	1,70E+05	10231	3,76	7,79	61,68	3,36E+07	7,63E+05
5214	4,73	7,82	59,98	9,40E+07	1,56E+06	8222	4,26	7,09	61,14	1,73E+07	1,65E+05	10232	3,76	3,75	61,68	1,07E+09	2,30E+07
5215	4,73	0,70	59,98	6,00E+07	1,16E+06	8223	4,25	3,10	61,14	1,54E+07	1,95E+05	10233	3,76	1,54	61,68	1,64E+07	3,31E+05
5216	4,72	4,70	59,98	2,15E+08	3,25E+06	8224	4,08	4,40	61,14	7,27E+07	4,65E+05	10234	3,74	1,06	61,68	1,89E+07	3,87E+05
5217	4,59	9,99	59,98	2,03E+07	6,40E+05	8225	4,07	6,70	61,14	1,05E+07	1,72E+05	10237	3,32	2,36	61,68	1,25E+07	3,72E+05
5218	4,59	8,08	59,98	2,55E+07	8,62E+05	8226	4,07	1,02	61,14	4,79E+07	6,81E+05	10238	3,31	3,32	61,68	8,63E+07	1,41E+06
5219	4,59	4,61	59,98	6,64E+08	1,48E+07	8227	3,92	1,71	61,14	2,73E+07	1,65E+05	10239	2,38	4,79	61,68	9,43E+06	2,13E+05
5220	4,59	2,09	59,98	2,46E+07	5,83E+05	8228	3,91	8,91	61,14	1,65E+07	2,02E+05	10240	2,37	3,36	61,68	1,92E+07	3,73E+05

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5235	5,20	5,22	59,49	1,37E+08	3,75E+06	8243	4,17	4,53	60,60	4,67E+07	2,32E+05	10257	4,60	9,09	61,14	6,42E+07	9,42E+05
5236	4,58	3,57	59,49	1,87E+07	3,82E+05	8244	4,17	0,63	60,60	2,38E+07	2,74E+05	10258	4,60	2,10	61,14	3,70E+07	3,15E+05
5237	3,97	8,08	59,49	2,29E+07	6,05E+05	8245	4,15	1,32	60,60	2,20E+07	1,67E+05	10259	4,53	10,26	61,14	8,33E+06	3,57E+05
5238	3,98	8,86	59,24	2,78E+07	5,52E+05	8246	3,84	1,93	60,60	3,19E+07	3,78E+05	10260	4,53	7,05	61,14	3,51E+07	8,10E+05
5239	3,98	7,73	59,24	2,29E+07	4,30E+05	8247	3,82	3,84	60,60	4,41E+08	4,97E+06	10261	4,53	2,19	61,14	2,81E+07	2,79E+05
5240	3,98	4,00	59,24	1,10E+09	2,04E+07	8248	3,65	3,88	60,60	6,10E+07	3,30E+05	10262	4,48	1,15	61,14	4,96E+07	7,19E+05
5241	3,97	2,01	59,24	8,80E+07	1,26E+06	8249	4,86	2,28	60,60	5,08E+06	1,69E+05	10263	4,47	8,44	61,14	8,02E+07	1,34E+06
5242	3,80	4,00	59,24	3,45E+07	4,06E+05	8250	4,83	8,83	60,60	5,54E+06	1,61E+05	10264	4,47	7,79	61,14	1,90E+07	2,29E+05
5243	4,52	8,51	59,00	2,98E+07	3,81E+05	8251	4,82	3,49	60,60	5,93E+06	1,55E+05	10265	4,47	4,06	61,14	2,89E+07	3,57E+05
5244	3,94	8,43	59,00	3,51E+07	5,09E+05	8252	4,75	7,44	60,60	1,00E+07	1,91E+05	10266	4,40	7,31	61,14	4,29E+07	6,60E+05
5245	4,33	8,60	58,75	2,29E+07	3,82E+05	8253	4,71	9,17	60,60	3,24E+07	5,26E+05	10267	4,40	2,32	61,14	4,77E+07	8,87E+05
5246	4,22	1,92	58,75	4,13E+07	6,83E+05	8254	4,70	0,63	60,60	2,11E+07	2,66E+05	10268	4,40	0,93	61,14	5,32E+07	8,20E+05
5247	4,16	1,92	58,75	4,49E+07	7,43E+05	8255	4,62	7,44	60,60	1,36E+07	1,68E+05	10269	4,38	9,56	61,14	5,17E+06	2,01E+05
5248	4,15	7,30	58,75	1,38E+07	4,07E+05	8256	4,60	8,96	60,60	3,54E+07	4,65E+05	10270	4,37	6,66	61,14	1,28E+07	2,30E+05
5249	4,08	2,01	58,75	5,53E+07	8,71E+05	8257	4,60	7,74	60,60	2,39E+07	5,49E+05	10271	4,34	4,79	61,14	2,40E+07	2,57E+05
5250	4,22	4,26	58,50	6,77E+08	9,90E+06	8258	4,60	7,35	60,60	1,27E+07	1,68E+05	10272	4,33	7,87	61,14	2,25E+07	5,15E+05
5251	4,15	4,18	58,50	8,69E+08	9,00E+06	8259	4,60	0,76	60,60	5,81E+07	6,02E+05	10273	4,33	4,10	61,14	1,66E+08	1,62E+06
5252	4,15	0,79	58,50	3,58E+07	6,35E+05	8260	4,59	4,58	60,60	6,55E+08	8,59E+06	10274	4,29	4,79	61,14	2,11E+07	2,72E+05
5253	4,08	8,43	58,50	2,95E+07	5,16E+05	8261	4,59	2,02	60,60	2,71E+07	3,32E+05	10275	4,29	3,10	61,14	1,57E+07	3,45E+05
5254	4,08	2,27	58,50	2,71E+07	4,40E+05	8262	4,57	8,09	60,60	2,37E+07	3,68E+05	10276	4,27	7,09	61,14	1,38E+07	2,01E+05
5255	5,66	2,53	58,26	1,21E+07	4,40E+05	8263	4,49	8,52	60,60	3,41E+07	5,51E+05	10277	4,27	4,27	61,14	2,25E+09	1,79E+07
5256	5,65	5,65	58,26	2,37E+08	6,05E+06	8264	4,48	4,49	60,60	6,94E+08	4,31E+06	10278	4,27	1,76	61,14	1,57E+07	2,92E+05
5257	5,60	3,57	58,26	1,80E+07	4,45E+05	8265	4,48	4,01	60,60	1,30E+07	2,09E+05	10279	4,11	7,57	61,14	4,65E+06	2,43E+05
5258	5,58	8,78	58,26	5,09E+07	1,17E+06	8266	4,44	9,17	60,60	3,14E+07	5,04E+05	10280	4,11	6,74	61,14	1,16E+07	3,41E+05
5259	5,58	5,56	58,26	2,02E+08	4,67E+06	8267	4,27	9,69	60,60	1,93E+07	3,44E+05	10281	4,11	4,79	61,14	1,31E+07	2,68E+05
5260	5,30	1,83	58,26	1,46E+07	4,09E+05	8268	4,27	0,85	60,60	3,42E+07	3,14E+05	10282	4,11	4,45	61,14	5,78E+07	5,96E+05
5261	4,88	4,87	58,26	3,23E+08	8,55E+06	8269	4,26	9,00	60,60	1,53E+07	1,75E+05	10283	4,11	1,06	61,14	6,16E+07	1,26E+06
5262	4,88	1,14	58,26	4,69E+07	2,76E+06	8270	4,22	7,27	60,60	2,24E+07	2,30E+05	10284	3,95	5,75	61,14	2,35E+07	6,86E+05
5263	4,59	6,17	58,26	3,29E+07	4,29E+05	8271	4,22	1,58	60,60	2,24E+07	2,13E+05	10285	3,95	3,54	61,14	1,91E+07	3,45E+05
5264	4,58	9,47	58,26	4,06E+07	4,27E+05	8272	4,00	8,83	60,60	2,41E+07	2,35E+05	10286	3,95	3,27	61,14	7,47E+06	2,50E+05
5265	4,58	7,04	58,26	6,32E+07	7,42E+05	8273	4,00	0,85	60,60	3,65E+07	3,47E+05	10287	3,95	2,97	61,14	1,72E+07	3,72E+05
5266	3,97	0,70	58,26	3,72E+07	8,07E+05	8274	3,84	0,80	60,60	2,08E+07	2,81E+05	10288	3,95	1,93	61,14	3,04E+07	4,68E+05
5267	3,77	3,92	58,26	4,34E+07	4,11E+05	8275	3,65	4,01	60,60	3,85E+07	2,15E+05	10289	3,95	1,71	61,14	2,12E+07	2,77E+05
5268	5,65	9,21	58,01	2,93E+07	7,81E+05	8276	3,65	3,67	60,60	4,21E+08	1,64E+07	10290	3,93	8,96	61,14	1,58E+07	3,52E+05
5269	5,65	0,88	58,01	2,79E+07	7,10E+05	8277	4,77	1,63	59,52	1,70E+07	1,66E+05	10291	3,93	7,18	61,14	7,70E+06	2,25E+05
5270	4,58	5,30	58,01	3,22E+07	4,83E+05	8278	4,59	9,91	59,52	1,32E+07	2,64E+05	10292	3,93	3,93	61,14	6,22E+08	7,63E+06
5271	4,53	4,26	58,01	4,13E+07	4,10E+05	8279	4,44	4,45	59,52	7,16E+08	4,37E+06	10293	3,93	1,32	61,14	1,44E+07	2,88E+05
5272	4,50	7,04	58,01	5,03E+07	6,90E+05	8280	4,37	4,36	59,52	7,39E+08	3,93E+06	10294	4,60	1,54	60,60	2,35E+07	3,49E+05
5273	4,50	6,17	58,01	2,83E+07	5,21E+05	8281	4,21	1,89	59,52	5,62E+07	5,20E+05	10295	4,22	4,79	60,60	2,66E+07	3,01E+05
5274	3,89	1,48	58,01	2,93E+07	4,98E+05	8282	4,04	8,13	59,52	2,69E+07	2,54E+05	10296	4,21	0,67	60,60	4,42E+07	4,43E+05
5275	3,88	4,78	58,01	6,33E+06	4,31E+05	8283	4,00	8,09	59,52	2,61E+07	1,87E+05	10297	4,19	7,31	60,60	2,65E+07	3,43E+05
5276	3,88	3,92	58,01	6,47E+08	1,24E+07	8284	3,99	7,74	59,52	2,33E+07	2,97E+05	10298	4,19	1,37	60,60	2,57E+07	3,31E+05
5277	3,87	8,95	58,01	1,52E+07	5,83E+05	8285	3,96	3,97	59,52	1,29E+09	1,44E+07	10299	4,02	8,83	60,60	1,33E+07	2,71E+05
5278	5,13	5,65	57,76	4,75E+06	3,94E+05	8286	3,96	1,97	59,52	9,86E+07	7,45E+05	10300	4,02	8,48	60,60	1,26E+07	2,22E+05
5279	4,55	4,26	57,76	4,15E+07	4,25E+05	8287	3,95	8,22	59,52	3,19E+07	3,43E+05	10301	3,88	1,93	60,60	4,51E+07	5,29E+05
5280	4,41	9,82	57,76	3,85E+07	8,82E+05	8288	3,59	4,01	59,52	2,79E+07	1,86E+05	10302	3,87	8,78	60,60	7,55E+06	2,88E+05
5281	4,40	6,95	57,76	3,79E+07	4,24E+05	8289	5,20	8,74	58,99	2,18E+07	3,49E+05	10303	3,87	0,85	60,60	2,88E+07	5,44E+05
5282	4,36	6,87	57,76	2,79E+07	3,96E+05	8290	5,20	5,18	58,99	1,07E+08	1,82E+06	10304	3,85	3,84	60,60	7,00E+08	9,43E+06
5283	4,11	7,73	57,76	6,63E+07	1,24E+06	8291	5,20	0,80	58,99	1,39E+07	2,39E+05	10313	4,66	4,10	60,60	5,98E+06	2,03E+05
5284	3,88	0,88	57,76	4,00E+07	8,18E+05	8292	5,19	1,93	58,99	7,49E+06	2,10E+05	10314	4,63	9,00	60,60	5,50E+07	7,74E+05
5285	3,87	1,92	57,76	3,07E+07	5,42E+05	8293	5,18	1,02	58,99	1,11E+07	1,56E+05	10315	4,63	7,79	60,60	4,25E+07	1,04E+06
5286	5,30	5,30	57,52	1,21E+07	4,07E+05	8294	4,85	9,35	58,99	1,65E+07	2,19E+05	10316	4,63	5,27	60,60	5,09E+06	2,26E+05
5287	5,13	9,56	57,52	2,51E+07	7,81E+05	8295	4,74	1,67	58,99	1,38E+07	1,62E+05	10317	4,63	4,92	60,60	1,96E+07	4,63E+05
5288	5,13	7,82	57,52	1,03E+07	5,36E+05	8296	4,21	4,19	58,99	1,40E+09	7,94E+06	10318	4,63	4,62	60,60	7,65E+08	1,27E+07
5289	5,13	5,13	57,52	1,46E+08	3,88E+06	8297	4,21	1,45	58,99	2,38E+07	1,94E+05	10319	4,63	4,32	60,60	2,23E+07	3,06E+05
5290	4,43	2,96	57,52	1,46E+07	4,38E+05	8298	4,07	1,97	58,99	7,90E+07	5,98E+05	10320	4,63	3,97	60,60	6,71E+06	2,07E+05
5291	4,41	4,44	57,52	8,64E+08	1,44E+07	8299	3,99	4,79	58,99	1,51E+07	2,02E+05	10321	4,63	2,41	60,60	2,09E+07	3,65E+05
5292	4,40	8,51	57,52	2,32E+07	4,39E+05	8300	3,97	8,87	58,99	1,42E+07	2,06E+05	10322	4,63	1,71	60,60	1,37E+07	2,41E+05
5293	4,40	7,73	57,52	1,80E+07	3,88E+05	8301	3,89	1,37	58,99	2,35E+07	1,72E+05	10323	4,63	0,80	60,60	9,04E+07	1,05E+06
5294	4,34	2,53	57,52	1,86E+07	3,93E+05	8302	5,64	9,13	58,45	2,27E+07	3,94E+05	10324	4,62	9,95	60,60	2,27E+07	6,13E+05
5295	4,21	3,65	57,52	9,50E+06	3,90E+05	8303	5,64	2,45	58,45	1,25E+07	2,46E+05	10325	4,62	8,09	60,60	3,29E+07	6,29E+05
5296	4,15	1,31	57,52	1,88E+07	3,89E+05	8304	5,64	0,85	58,45	1,67E+07	3,14E+05	10326	4,62	1,97	60,60	3,51E+07	5,06E+05
5297	4,13	7,39	57,52	2,73E+07	3,89E+0												

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5311	4,22	9,04	57,27	5,04E+07	1,24E+06	8319	3,96	0,76	58,45	3,89E+07	4,16E+05	10341	4,25	2,23	60,06	2,22E+07	2,05E+05
5312	4,20	10,25	57,27	1,88E+07	4,54E+05	8320	3,85	8,13	58,45	1,89E+07	2,45E+05	10342	4,25	1,58	60,06	2,65E+07	2,74E+05
5313	4,20	7,73	57,27	3,75E+07	5,73E+05	8321	3,85	3,84	58,45	6,17E+08	8,28E+06	10343	4,04	8,05	60,06	3,01E+07	4,28E+05
5314	4,20	4,18	57,27	1,98E+09	5,04E+07	8322	3,85	1,45	58,45	2,09E+07	2,66E+05	10344	4,04	1,58	60,06	4,93E+07	5,50E+05
5315	4,20	1,92	57,27	4,57E+07	6,31E+05	8323	3,69	3,88	58,45	5,49E+07	2,54E+05	10345	4,04	1,37	60,06	1,40E+07	3,10E+05
5316	4,13	0,88	57,27	6,81E+07	9,00E+05	8324	3,63	3,62	58,45	6,28E+06	3,22E+05	10346	4,03	2,02	60,06	1,27E+08	9,94E+05
5317	4,07	8,51	57,27	2,60E+07	4,74E+05	8325	5,64	5,62	57,91	1,52E+08	2,45E+06	10347	4,03	0,89	60,06	4,47E+07	4,47E+05
5318	4,07	1,14	57,27	4,74E+07	9,78E+05	8326	5,56	5,83	57,91	1,47E+07	1,64E+05	10349	5,26	1,93	59,52	1,94E+07	3,30E+05
5319	4,59	4,00	57,02	4,75E+07	5,42E+05	8327	4,87	4,88	57,91	3,00E+08	3,65E+06	10350	5,16	5,18	59,52	5,30E+07	4,25E+05
5320	4,58	5,65	57,02	2,23E+07	4,03E+05	8328	4,86	1,93	57,91	1,79E+07	2,13E+05	10351	4,45	4,45	59,52	1,02E+09	8,57E+06
5321	4,55	5,65	57,02	1,70E+07	4,32E+05	8329	4,82	1,93	57,91	1,64E+07	2,04E+05	10352	4,41	4,40	59,52	9,75E+08	8,42E+06
5322	4,54	9,38	57,02	4,26E+07	4,33E+05	8330	4,74	4,32	57,91	1,56E+07	2,14E+05	10353	4,08	8,18	59,52	3,56E+07	4,21E+05
5323	4,50	4,00	57,02	5,66E+07	8,86E+05	8331	4,53	4,53	57,91	6,22E+08	4,13E+06	10354	4,02	7,79	59,52	3,14E+07	4,89E+05
5324	4,49	9,47	57,02	2,61E+07	4,30E+05	8332	4,40	9,87	57,91	1,54E+07	3,17E+05	10355	4,00	4,01	59,52	1,55E+09	1,94E+07
5325	4,49	4,52	57,02	8,78E+08	1,59E+07	8333	4,38	1,11	57,91	1,48E+07	1,82E+05	10356	3,99	8,18	59,52	3,65E+07	5,16E+05
5326	4,47	1,92	57,02	2,42E+07	4,53E+05	8334	4,08	7,74	57,91	4,61E+07	6,85E+05	10357	3,99	7,66	59,52	2,31E+07	3,60E+05
5327	4,43	1,05	57,02	3,09E+07	4,89E+05	8335	4,08	1,76	57,91	7,22E+07	6,48E+05	10358	3,99	2,02	59,52	1,33E+08	1,22E+06
5328	4,31	8,60	57,02	3,03E+07	4,89E+05	8336	3,88	0,93	57,91	2,89E+07	3,74E+05	10359	3,81	4,01	59,52	1,02E+08	2,83E+05
5329	4,24	9,30	57,02	3,26E+07	4,62E+05	8337	3,87	1,97	57,91	3,58E+07	3,43E+05	10360	5,26	9,09	58,99	7,77E+06	2,32E+05
5330	4,24	8,60	57,02	2,60E+07	3,91E+05	8338	3,85	8,91	57,91	1,42E+07	2,52E+05	10361	5,26	0,85	58,99	2,06E+07	3,55E+05
5331	4,20	2,09	57,02	5,05E+07	4,98E+05	8339	3,85	4,79	57,91	1,45E+07	2,24E+05	10362	5,24	8,74	58,99	3,20E+07	6,17E+05
5332	3,77	3,74	57,02	4,25E+07	7,46E+05	8340	3,85	2,45	57,91	7,14E+06	1,76E+05	10363	5,24	7,44	58,99	9,49E+06	2,11E+05
5333	5,44	4,52	56,78	1,22E+07	3,96E+05	8341	3,69	4,14	57,91	2,77E+07	1,57E+05	10364	5,24	5,23	58,99	1,16E+08	2,45E+06
5334	4,61	9,21	56,78	4,22E+07	9,80E+05	8342	3,02	2,97	57,91	1,32E+07	2,30E+05	10365	4,87	9,95	58,99	7,09E+06	2,64E+05
5335	4,53	1,75	56,78	5,40E+07	7,13E+05	8343	5,11	9,52	57,37	1,78E+07	4,28E+05	10366	4,87	8,65	58,99	9,79E+06	2,54E+05
5336	4,33	1,75	56,78	2,19E+07	4,48E+05	8344	5,11	7,70	57,37	1,21E+07	2,41E+05	10367	4,87	1,45	58,99	1,45E+06	2,01E+05
5337	4,31	7,30	56,78	2,95E+07	6,14E+05	8345	5,11	5,10	57,37	1,09E+08	1,61E+06	10368	4,87	0,93	58,99	8,45E+06	2,86E+05
5338	4,31	2,01	56,78	4,32E+07	9,99E+05	8346	5,11	0,63	57,37	1,02E+07	1,85E+05	10369	4,25	7,53	58,99	1,26E+07	3,21E+05
5339	4,30	6,95	56,78	2,12E+07	3,88E+05	8347	4,89	8,83	57,37	3,12E+07	3,72E+05	10370	4,25	4,84	58,99	2,40E+07	2,39E+05
5340	4,30	4,26	56,78	1,96E+09	3,47E+07	8348	4,89	5,57	57,37	1,44E+07	2,92E+05	10371	4,25	4,23	58,99	1,87E+09	1,02E+07
5341	4,16	8,51	56,78	5,43E+07	1,15E+06	8349	4,83	2,41	57,37	1,13E+07	2,28E+05	10372	4,25	1,93	58,99	7,89E+07	8,51E+05
5342	4,16	2,09	56,78	4,87E+07	5,81E+05	8350	4,45	8,26	57,37	8,76E+06	1,55E+05	10373	4,25	1,50	58,99	1,64E+07	2,39E+05
5343	3,68	8,43	56,78	3,21E+07	8,64E+05	8351	4,42	7,05	57,37	1,40E+07	1,63E+05	10374	4,11	8,44	58,99	2,06E+07	3,20E+05
5344	3,68	3,65	56,78	1,24E+08	3,68E+06	8352	4,41	9,04	57,37	1,37E+07	1,74E+05	10375	4,11	1,93	58,99	1,11E+08	9,53E+05
5345	3,68	0,88	56,78	3,37E+07	7,90E+05	8353	4,40	4,75	57,37	4,39E+07	3,40E+05	10376	4,03	4,53	58,99	1,36E+07	2,13E+05
5346	5,32	-0,42	56,53	1,32E+07	3,81E+05	8354	4,40	2,97	57,37	1,12E+07	2,15E+05	10377	4,02	8,91	58,99	2,92E+07	4,37E+05
5347	4,61	4,61	56,53	7,59E+08	1,27E+07	8355	4,38	8,26	57,37	2,46E+07	3,01E+05	10378	4,02	7,44	58,99	1,07E+07	2,12E+05
5348	4,58	6,43	56,53	2,10E+07	3,90E+05	8356	4,38	3,27	57,37	1,69E+07	2,38E+05	10379	4,02	4,79	58,99	2,09E+07	2,67E+05
5349	4,52	0,96	56,53	2,01E+07	4,06E+05	8357	4,34	2,80	57,37	1,41E+07	1,58E+05	10380	3,96	1,37	58,99	2,92E+07	3,07E+05
5350	4,50	6,61	56,53	1,30E+07	4,28E+05	8358	4,32	1,32	57,37	7,57E+06	2,01E+05	10382	5,67	9,17	58,45	2,96E+07	7,96E+05
5351	4,50	2,27	56,53	2,61E+07	7,55E+05	8359	4,30	7,61	57,37	8,57E+06	1,68E+05	10383	5,67	5,66	58,45	1,77E+08	3,45E+06
5352	4,50	0,70	56,53	2,87E+07	7,51E+05	8360	4,30	2,49	57,37	1,67E+07	2,87E+05	10384	5,67	2,54	58,45	1,55E+07	3,05E+05
5353	4,49	8,34	56,53	2,55E+07	5,18E+05	8361	4,30	2,23	57,37	2,11E+07	2,96E+05	10385	5,67	0,89	58,45	2,90E+07	5,35E+05
5354	4,31	2,27	56,53	2,37E+07	4,00E+05	8362	4,21	9,09	57,37	2,71E+07	4,23E+05	10386	5,60	8,83	58,45	4,25E+07	1,06E+06
5355	4,24	1,40	56,53	2,68E+07	7,12E+05	8363	4,21	1,97	57,37	4,74E+07	2,74E+05	10387	5,60	5,62	58,45	1,60E+08	2,77E+06
5356	4,16	6,26	56,53	1,66E+07	3,92E+05	8364	4,19	2,10	57,37	3,86E+07	2,65E+05	10388	5,60	4,92	58,45	1,12E+07	3,51E+05
5357	5,38	5,04	56,29	1,25E+07	5,09E+05	8365	4,19	1,84	57,37	4,73E+07	2,71E+05	10389	5,60	3,58	58,45	8,06E+06	2,14E+05
5358	4,57	9,73	56,29	2,62E+07	5,28E+05	8366	4,19	1,71	57,37	4,01E+07	2,73E+05	10390	5,60	0,85	58,45	2,01E+07	3,19E+05
5359	4,57	3,13	56,29	2,40E+07	4,73E+05	8367	4,18	7,74	57,37	1,12E+07	1,95E+05	10391	4,92	4,92	58,45	2,92E+08	5,51E+06
5360	4,53	9,21	56,29	3,87E+07	7,60E+05	8368	4,18	4,71	57,37	2,01E+07	1,59E+05	10392	4,92	4,27	58,45	2,00E+07	3,68E+05
5361	4,52	1,48	56,29	1,89E+07	5,86E+05	8369	4,18	4,19	57,37	2,28E+09	3,71E+07	10393	4,92	3,93	58,45	1,83E+07	3,35E+05
5362	4,50	4,87	56,29	5,03E+07	7,60E+05	8370	4,08	3,71	57,37	2,42E+07	1,70E+05	10394	4,92	0,80	58,45	8,33E+06	2,93E+05
5363	4,40	2,35	56,29	1,15E+07	4,00E+05	8371	4,07	8,48	57,37	2,52E+07	2,45E+05	10395	4,90	0,72	58,45	1,83E+07	3,24E+05
5364	4,17	7,30	56,29	3,50E+07	1,17E+06	8372	4,07	8,05	57,37	2,54E+07	3,81E+05	10405	4,17	8,35	58,45	2,25E+07	2,70E+05
5365	4,17	1,40	56,29	2,68E+07	4,02E+05	8373	4,07	7,35	57,37	2,56E+07	2,01E+05	10406	4,17	0,76	58,45	5,80E+07	5,21E+05
5366	4,58	6,00	56,04	1,93E+07	3,97E+05	8374	4,07	4,06	57,37	1,58E+09	1,57E+07	10407	4,11	2,28	58,45	5,89E+07	5,83E+05
5367	4,55	7,30	56,04	1,84E+07	3,81E+05	8375	4,07	1,19	57,37	4,01E+07	4,24E+05	10408	4,04	4,79	58,45	2,56E+07	2,58E+05
5368	4,54	9,73	56,04	2,26E+07	5,19E+05	8376	4,07	0,85	57,37	6,55E+07	7,99E+05	10409	4,00	0,76	58,45	4,71E+07	6,41E+05
5369	4,54	4,00	56,04	3,18E+07	4,16E+05	8377	4,03	2,15	57,37	3,25E+07	1,57E+05	10410	3,99	4,79	58,45	2,44E+07	2,61E+05
5370	4,54	3,13	56,04	2,03E+07	4,65E+05	8378	3,78	4,14	57,37	4,89E+07	3,30E+05	10411	3,88	8,18	58,45	1,95E+07	3,59E+05
5371	4,39	4,87	56,04	2,27E+07	4,24E+05	8379	3,74	3,75	57,37	1,30E+08	2,22E+06	10412	3,88	3,88	58,45	7,39E+08	1,17E+07
5372	4,39	1,92	56,04	4,10E+07	8,68E+05	8380	4,64	9,00	56,83	1,90E+07	2,72E+05	10413	3,88	1,45	58,45	2,33E+07	3,97E+05
5373	4,06	3,13	56,04	1,34E+07	3,83E+0												

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5387	4,49	1,75	55,30	3,02E+07	4,75E+05	8395	4,29	4,66	56,83	4,92E+07	3,44E+05	10429	3,91	7,66	57,91	1,62E+07	2,82E+05
5388	4,48	0,88	55,30	2,37E+07	4,74E+05	8396	4,29	4,27	56,83	2,14E+09	2,84E+07	10430	3,91	0,93	57,91	4,81E+07	7,94E+05
5389	4,45	0,88	55,30	2,70E+07	4,59E+05	8397	4,29	3,93	56,83	1,08E+07	2,39E+05	10431	3,89	8,96	57,91	1,66E+07	3,07E+05
5390	4,05	4,78	55,30	1,23E+07	6,74E+05	8398	4,29	2,75	56,83	2,46E+07	3,45E+05	10432	3,89	4,79	57,91	3,03E+07	7,41E+05
5391	4,05	4,00	55,30	1,11E+09	2,90E+07	8399	4,29	1,63	56,83	2,47E+07	2,50E+05	10433	3,89	2,02	57,91	3,73E+07	5,12E+05
5392	4,05	3,48	55,30	1,40E+07	4,23E+05	8400	4,22	8,09	56,83	1,46E+07	1,56E+05	10434	3,88	7,40	57,91	1,32E+07	2,11E+05
5393	4,03	2,01	55,30	2,57E+07	4,85E+05	8401	4,22	1,41	56,83	3,41E+07	3,41E+05	10436	5,15	9,52	57,37	2,61E+07	7,06E+05
5394	4,01	1,92	55,30	3,14E+07	5,57E+05	8402	4,18	4,53	56,83	6,30E+07	3,58E+05	10437	5,15	7,74	57,37	1,37E+07	4,03E+05
5395	4,01	1,66	55,30	2,69E+07	5,09E+05	8403	4,15	2,23	56,83	2,96E+07	2,67E+05	10438	5,15	5,14	57,37	1,23E+08	2,16E+06
5396	3,98	1,40	55,30	4,96E+07	1,26E+06	8404	4,14	8,52	56,83	3,41E+07	4,80E+05	10439	5,15	0,63	57,37	1,38E+07	2,55E+05
5397	4,59	7,13	55,05	7,58E+06	4,32E+05	8405	3,66	8,44	56,83	1,88E+07	3,66E+05	10440	5,13	2,15	57,37	1,17E+07	2,89E+05
5398	4,59	2,53	55,05	1,30E+07	4,55E+05	8406	3,66	3,67	56,83	1,14E+08	1,76E+06	10441	4,93	1,93	57,37	1,78E+07	2,89E+05
5399	4,58	6,78	55,05	2,34E+07	4,59E+05	8407	3,66	0,89	56,83	2,03E+07	3,62E+05	10442	4,92	8,44	57,37	9,41E+06	2,39E+05
5400	4,58	5,82	55,05	1,41E+07	4,18E+05	8408	3,16	3,06	56,83	1,83E+07	1,65E+05	10446	4,66	4,36	57,37	3,03E+07	2,39E+05
5401	4,53	6,52	55,05	2,26E+07	4,74E+05	8409	4,64	8,05	56,29	3,22E+07	3,49E+05	10447	4,45	3,01	57,37	2,19E+07	3,70E+05
5402	4,47	6,52	55,05	2,23E+07	4,16E+05	8410	4,62	8,05	56,29	3,50E+07	3,50E+05	10448	4,44	9,04	57,37	1,52E+07	3,70E+05
5403	4,40	9,21	55,05	5,02E+07	1,24E+06	8411	4,62	2,10	56,29	2,81E+07	2,78E+05	10449	4,44	7,05	57,37	1,30E+07	2,66E+05
5404	4,40	1,75	55,05	3,05E+07	4,51E+05	8412	4,60	4,62	56,29	1,10E+09	8,44E+06	10450	4,42	8,31	57,37	3,26E+07	4,50E+05
5405	4,39	0,88	55,05	3,18E+07	7,14E+05	8413	4,59	7,22	56,29	1,36E+07	2,10E+05	10451	4,42	1,93	57,37	4,62E+07	3,33E+05
5406	3,98	8,51	55,05	2,88E+07	6,38E+05	8414	4,59	3,36	56,29	1,75E+07	2,64E+05	10452	4,42	0,76	57,37	2,30E+07	2,30E+05
5407	3,97	0,88	55,05	2,45E+07	6,48E+05	8415	4,52	9,17	56,29	3,09E+07	3,77E+05	10453	4,37	4,62	57,37	8,69E+07	2,99E+05
5408	5,48	9,04	54,81	2,66E+07	5,11E+05	8416	4,51	1,41	56,29	1,22E+07	2,13E+05	10454	4,34	7,66	57,37	1,88E+07	4,59E+05
5409	5,47	5,48	54,81	1,18E+08	2,89E+06	8417	4,49	1,76	56,29	2,07E+07	2,53E+05	10455	4,34	2,49	57,37	2,56E+07	4,80E+05
5410	5,43	9,04	54,81	2,31E+07	4,15E+05	8418	4,49	0,89	56,29	2,28E+07	2,90E+05	10456	4,34	2,23	57,37	4,23E+07	7,22E+05
5411	4,55	7,47	54,81	9,91E+06	4,08E+05	8419	4,48	8,35	56,29	1,01E+07	1,66E+05	10457	4,25	9,09	57,37	3,74E+07	9,72E+05
5412	4,52	4,09	54,81	1,47E+07	4,29E+05	8420	4,48	0,72	56,29	1,93E+07	2,33E+05	10458	4,25	2,15	57,37	4,83E+07	4,50E+05
5413	4,12	4,09	54,81	6,89E+08	1,03E+07	8421	4,38	1,97	56,29	4,59E+07	4,31E+05	10459	4,23	5,40	57,37	7,94E+06	2,31E+05
5414	4,12	1,40	54,81	3,94E+07	9,19E+05	8422	4,36	4,36	56,29	1,96E+09	1,75E+07	10460	4,23	3,58	57,37	1,19E+07	2,96E+05
5415	3,75	1,40	54,81	2,81E+07	7,05E+05	8423	4,15	7,27	56,29	3,25E+07	5,69E+05	10461	4,22	7,74	57,37	3,28E+07	4,92E+05
5416	3,74	0,70	54,81	2,52E+07	5,10E+05	8424	4,15	1,67	56,29	3,73E+07	2,73E+05	10462	4,22	4,84	57,37	2,61E+07	3,92E+05
5417	5,33	5,30	54,56	2,33E+07	4,04E+05	8425	5,15	9,09	55,75	1,99E+07	3,98E+05	10463	4,22	4,23	57,37	3,33E+09	6,88E+07
5418	5,10	5,13	54,56	1,40E+08	3,18E+06	8426	5,15	5,14	55,75	1,17E+08	1,33E+06	10464	4,22	1,84	57,37	6,18E+07	3,98E+05
5419	4,41	5,74	54,56	1,76E+07	4,01E+05	8427	4,81	5,92	55,75	1,34E+07	1,93E+05	10465	4,18	2,06	57,37	5,91E+07	3,38E+05
5420	4,40	4,09	54,56	2,11E+07	4,61E+05	8428	4,63	1,45	55,75	1,48E+07	2,02E+05	10466	4,17	0,89	57,37	8,68E+07	8,35E+05
5421	4,21	1,57	54,56	4,54E+07	1,33E+06	8429	4,60	-0,67	55,75	1,72E+07	6,37E+05	10467	4,15	4,45	57,37	7,55E+07	4,53E+05
5422	4,20	8,25	54,56	2,31E+07	7,06E+05	8430	4,59	2,75	55,75	3,01E+07	2,86E+05	10468	4,15	3,84	57,37	2,08E+07	3,04E+05
5423	4,20	4,18	54,56	6,75E+08	1,40E+07	8431	4,15	3,01	55,75	2,16E+07	2,51E+05	10469	4,15	1,32	57,37	5,45E+07	5,31E+05
5424	4,12	7,91	54,56	1,82E+07	5,12E+05	8432	4,15	1,24	55,75	3,17E+07	2,27E+05	10470	4,11	8,48	57,37	3,68E+07	4,76E+05
5425	3,74	7,65	54,56	1,74E+07	3,96E+05	8433	4,00	1,89	55,75	2,74E+07	2,08E+05	10471	4,11	2,41	57,37	2,25E+07	3,07E+05
5426	3,74	3,74	54,56	2,51E+08	6,69E+06	8434	5,50	1,63	55,21	7,02E+06	1,56E+05	10472	4,10	8,09	57,37	3,49E+07	6,38E+05
5427	4,66	4,61	54,31	1,16E+09	2,50E+07	8435	4,85	8,31	55,21	1,20E+07	1,73E+05	10473	4,10	7,40	57,37	2,90E+07	2,75E+05
5428	4,58	7,91	54,31	2,48E+07	4,70E+05	8436	4,59	1,37	55,21	2,01E+07	3,53E+05	10474	4,10	1,50	57,37	3,86E+07	3,10E+05
5429	4,58	1,75	54,31	2,45E+07	4,15E+05	8437	4,38	9,22	55,21	2,37E+07	3,86E+05	10475	4,10	1,19	57,37	5,11E+07	7,12E+05
5430	4,54	4,52	54,31	5,40E+08	8,46E+06	8438	4,38	0,80	55,21	2,67E+07	3,09E+05	10476	4,10	0,89	57,37	9,71E+07	1,36E+06
5431	4,47	4,87	54,31	5,29E+07	7,54E+05	8439	4,04	4,79	55,21	3,08E+07	5,24E+05	10479	4,92	8,83	56,83	3,15E+07	6,30E+05
5432	4,39	4,87	54,31	4,28E+07	6,52E+05	8440	4,04	4,06	55,21	1,16E+09	1,64E+07	10480	4,92	5,57	56,83	2,51E+07	4,39E+05
5433	4,31	4,87	54,31	3,37E+07	5,56E+05	8441	4,04	2,06	55,21	1,88E+07	2,54E+05	10481	4,92	-0,11	56,83	8,39E+06	2,43E+05
5434	4,27	4,87	54,31	3,40E+07	5,08E+05	8442	4,03	3,67	55,21	1,50E+07	1,56E+05	10482	4,90	1,89	56,83	1,14E+07	3,00E+05
5435	4,24	4,87	54,31	2,89E+07	5,16E+05	8443	4,00	1,19	55,21	3,28E+07	4,92E+05	10483	4,89	-0,37	56,83	6,94E+06	2,01E+05
5436	4,16	4,87	54,31	2,17E+07	4,28E+05	8444	3,99	7,61	55,21	1,53E+07	2,28E+05	10484	4,68	8,96	56,83	2,62E+07	5,22E+05
5437	4,13	4,87	54,31	2,16E+07	4,44E+05	8445	3,97	1,63	55,21	1,00E+07	1,93E+05	10485	4,68	7,14	56,83	1,99E+07	3,09E+05
5438	4,10	4,87	54,31	2,22E+07	4,20E+05	8446	3,96	8,52	55,21	1,75E+07	2,66E+05	10486	4,67	9,52	56,83	2,55E+07	5,42E+05
5439	4,85	4,87	54,07	4,11E+08	4,75E+06	8447	3,96	3,97	55,21	9,64E+08	1,26E+07	10487	4,67	1,80	56,83	2,18E+07	2,81E+05
5440	4,59	7,65	54,07	2,77E+07	4,28E+05	8448	3,96	1,89	55,21	2,05E+07	2,54E+05	10488	4,63	8,05	56,83	4,99E+07	6,35E+05
5441	4,53	7,82	54,07	3,50E+07	8,26E+05	8449	3,96	1,37	55,21	4,18E+07	7,00E+05	10489	4,63	2,32	56,83	2,73E+07	3,11E+05
5442	4,53	4,87	54,07	6,08E+07	1,21E+06	8450	3,95	0,89	55,21	1,64E+07	3,24E+05	10490	4,63	2,15	56,83	4,57E+07	4,31E+05
5443	4,39	0,88	54,07	2,48E+07	3,97E+05	8451	3,74	3,97	55,21	4,61E+07	3,40E+05	10491	4,63	0,98	56,83	1,60E+07	2,15E+05
5444	4,06	1,48	54,07	2,08E+07	4,23E+05	8452	5,50	5,49	54,67	9,74E+07	1,21E+06	10492	4,62	9,26	56,83	4,11E+07	8,31E+05
5445	4,05	1,75	54,07	1,70E+07	5,68E+05	8453	5,49	9,09	54,67	1,36E+07	2,33E+05	10493	4,60	9,00	56,83	2,52E+07	3,00E+05
5446	3,94	4,87	54,07	1,53E+07	4,04E+05	8454	5,08	5,10	54,67	1,09E+08	1,48E+06	10494	4,52	2,23	56,83	3,48E+07	5,32E+05
5447	3,38	1,40	54,07	3,12E+07	9,15E+05	8455	5,08	4,79	54,67	9,51E+06	1,64E+05	10495	4,52	1,80	56,83	2,70E+07	4,85E+05
5448	3,37	7,99	54,07	4,93E+07	1,40E+06	8456	5,08	-0,63	54,67	1,07E+07	1,75E+05	10496	4,51	8,39	56,83	1,86E+07	3,25E+05
5449	3,37	7,13	54,07	1,35													

N. HC H C Integral Intens.						N. HC H C Integral Intens.						N. HC H C Integral Intens.					
5463	5,30	2,01	53,08	1,75E+07	5,06E+05	8471	3,73	1,37	54,67	1,87E+07	3,69E+05	10511	4,32	4,79	56,83	3,73E+07	4,16E+05
5464	4,16	8,60	53,08	5,19E+07	1,42E+06	8472	3,73	0,67	54,67	1,53E+07	2,97E+05	10512	4,32	2,80	56,83	3,82E+07	6,11E+05
5465	4,16	4,18	53,08	4,31E+08	1,03E+07	8473	4,83	3,14	54,13	1,95E+07	2,85E+05	10513	4,32	1,54	56,83	3,04E+07	3,91E+05
5466	4,16	1,48	53,08	2,97E+07	1,00E+06	8474	4,83	0,41	54,13	7,55E+06	1,71E+05	10514	4,25	8,22	56,83	1,48E+07	3,08E+05
5467	5,91	9,12	52,83	3,00E+07	8,60E+05	8475	4,82	8,57	54,13	1,58E+07	1,95E+05	10515	4,25	1,41	56,83	4,68E+07	5,61E+05
5468	5,91	5,91	52,83	9,58E+07	2,69E+06	8476	4,64	7,74	54,13	2,09E+07	3,07E+05	10516	4,19	2,23	56,83	3,06E+07	4,27E+05
#Arg13 ha						8477	4,63	4,62	54,13	1,32E+09	1,90E+07	10517	4,18	8,52	56,83	5,21E+07	8,78E+05
5469	5,15	5,13	52,83	1,57E+08	3,56E+06	8478	4,52	7,83	54,13	2,14E+07	4,08E+05	10518	3,99	4,32	56,83	4,01E+07	2,35E+05
5470	5,51	1,40	52,59	2,37E+07	4,93E+05	8479	4,52	7,27	54,13	1,21E+07	2,00E+05	10519	3,70	0,89	56,83	3,16E+07	6,43E+05
5471	5,49	5,48	52,59	2,57E+08	5,23E+06	8480	4,51	2,58	54,13	8,61E+06	1,79E+05	10520	3,69	8,44	56,83	2,21E+07	6,70E+05
5472	5,48	9,21	52,59	2,44E+07	7,90E+05	8481	4,41	4,79	54,13	3,21E+07	2,46E+05	10521	3,69	3,71	56,83	1,59E+08	2,69E+06
5473	5,33	8,60	52,59	4,35E+07	8,22E+05	8482	4,18	4,84	54,13	1,67E+07	1,65E+05	10522	3,69	0,67	56,83	1,21E+07	2,35E+05
5474	5,52	8,78	52,34	3,79E+07	8,56E+05	8483	4,11	4,10	54,13	8,98E+08	7,82E+06	10525	4,70	2,80	56,29	2,29E+07	2,77E+05
5475	5,52	0,88	52,34	1,45E+07	4,31E+05	8484	4,04	8,39	54,13	1,56E+07	2,37E+05	10526	4,70	2,45	56,29	5,41E+06	2,10E+05
5476	4,82	4,78	52,34	1,68E+08	2,52E+06	8485	4,04	1,76	54,13	1,56E+07	1,87E+05	10527	4,68	2,06	56,29	2,56E+07	2,83E+05
5477	4,58	3,22	52,34	1,31E+07	3,97E+05	8486	3,35	8,00	54,13	3,20E+07	6,38E+05	10528	4,67	0,89	56,29	1,07E+07	2,35E+05
5478	4,41	4,87	52,34	2,50E+07	4,81E+05	8487	3,35	7,14	54,13	9,88E+06	2,32E+05	10529	4,63	7,31	56,29	1,49E+07	2,33E+05
5479	4,59	7,99	52,09	3,12E+07	6,53E+05	8488	3,35	3,36	54,13	1,50E+08	3,04E+06	10530	4,63	4,62	56,29	1,46E+09	1,18E+07
5480	4,59	4,61	52,09	7,03E+08	1,97E+07	8489	3,35	1,37	54,13	1,77E+07	3,77E+05	10531	4,63	3,41	56,29	2,22E+07	2,35E+05
5481	4,54	1,92	52,09	2,26E+07	4,35E+05	8490	5,42	8,05	53,60	1,12E+07	2,05E+05	10532	4,55	9,22	56,29	3,96E+07	6,45E+05
5482	4,48	4,87	52,09	2,59E+07	4,41E+05	8491	5,41	8,52	53,60	2,40E+07	3,50E+05	10533	4,53	8,96	56,29	1,16E+07	2,19E+05
5483	4,39	1,48	52,09	2,82E+07	9,01E+05	8492	4,90	2,71	53,60	7,63E+06	1,75E+05	10534	4,53	1,45	56,29	1,56E+07	2,61E+05
5484	4,38	6,95	52,09	1,60E+07	4,52E+05	8493	4,89	4,88	53,60	4,06E+08	6,74E+06	10535	4,52	0,93	56,29	3,44E+07	5,15E+05
5485	4,38	4,87	52,09	2,35E+07	4,93E+05	8494	4,85	6,35	53,60	1,01E+07	1,63E+05	10536	4,51	0,72	56,29	2,44E+07	3,83E+05
5486	4,38	4,35	52,09	8,23E+08	1,55E+07	8495	4,83	7,87	53,60	9,22E+06	1,84E+05	10537	4,51	0,54	56,29	1,18E+07	2,20E+05
5487	4,59	6,87	51,85	2,38E+07	4,44E+05	8496	4,82	5,18	53,60	1,29E+07	1,76E+05	10538	4,42	1,63	56,29	2,25E+07	2,28E+05
5488	4,48	1,92	51,85	2,14E+07	4,24E+05	8497	4,81	-0,54	53,60	1,51E+07	1,75E+05	10539	4,42	1,06	56,29	2,48E+07	3,16E+05
5489	4,41	8,51	51,85	2,31E+07	6,47E+05	8498	4,78	-0,50	53,60	1,43E+07	1,74E+05	10540	4,41	1,97	56,29	6,80E+07	7,70E+05
5490	4,08	4,09	51,85	2,30E+08	4,83E+06	8499	4,74	3,67	53,60	2,05E+07	3,14E+05	10541	4,40	4,40	56,29	2,93E+09	3,66E+07
5491	4,06	4,09	51,85	2,39E+08	4,78E+06	8500	4,74	2,93	53,60	1,88E+07	2,33E+05	10542	4,33	8,13	56,29	2,62E+07	2,98E+05
5492	5,23	9,21	51,60	2,23E+07	5,32E+05	8501	4,72	4,75	53,60	6,81E+08	7,61E+06	10543	4,19	1,71	56,29	5,22E+07	4,49E+05
5493	5,23	8,86	51,60	1,16E+07	5,11E+05	8502	4,71	1,76	53,60	1,14E+07	1,99E+05	10544	4,18	7,31	56,29	5,04E+07	1,08E+06
5494	5,22	5,22	51,60	3,36E+08	8,61E+06	8503	4,71	0,85	53,60	1,52E+07	2,87E+05	10545	4,18	6,31	56,29	1,13E+07	2,45E+05
5495	5,22	2,61	51,60	1,12E+07	4,79E+05	8504	4,60	3,06	53,60	1,38E+07	1,83E+05	10546	5,19	9,09	55,75	3,20E+07	7,04E+05
5496	3,99	4,00	51,35	2,54E+08	4,43E+06	8505	4,14	4,14	53,60	8,19E+08	8,07E+06	10547	5,19	5,18	55,75	1,23E+08	1,85E+06
5497	3,85	1,92	51,35	2,46E+07	5,55E+05	8506	4,04	4,06	53,60	7,43E+08	5,55E+06	10548	5,19	1,93	55,75	1,34E+07	2,42E+05
5498	3,84	3,83	51,11	3,75E+08	7,47E+06	8507	4,04	1,41	53,60	2,36E+07	2,09E+05	10549	4,67	8,65	55,75	1,19E+07	2,57E+05
5499	3,45	3,48	50,86	5,14E+07	8,97E+05	8508	5,91	9,09	53,06	2,05E+07	3,72E+05	10550	4,67	8,05	55,75	6,32E+07	5,93E+05
5500	2,96	2,96	50,86	6,97E+06	4,60E+05	8509	5,91	5,92	53,06	5,06E+07	8,93E+05	10551	4,66	1,63	55,75	1,88E+07	2,00E+05
5501	5,38	1,57	50,61	2,21E+07	6,05E+05	8510	5,31	5,31	53,06	1,89E+08	2,91E+06	10552	4,64	2,75	55,75	4,62E+07	5,97E+05
5502	5,36	9,21	50,61	5,62E+07	1,38E+06	8511	5,30	9,04	53,06	2,45E+07	5,00E+05	10554	4,62	8,65	55,75	1,10E+07	2,14E+05
5503	5,36	0,88	50,61	1,33E+07	4,27E+05	8512	5,30	7,35	53,06	8,60E+06	1,66E+05	10556	4,19	4,66	55,75	3,56E+07	2,43E+05
5504	5,10	5,13	50,61	1,93E+08	4,59E+06	8513	5,30	1,93	53,06	1,29E+07	1,77E+05	10557	4,19	3,19	55,75	1,93E+07	2,95E+05
5505	4,17	7,21	50,61	1,99E+07	4,57E+05	8514	5,30	1,76	53,06	1,43E+07	1,82E+05	10558	4,19	3,01	55,75	2,32E+07	3,49E+05
5506	4,17	4,18	50,61	3,96E+08	1,12E+07	8515	5,16	0,63	53,06	1,00E+07	2,00E+05	10559	4,19	0,89	55,75	1,70E+07	2,43E+05
5507	4,17	3,65	50,61	2,70E+07	6,90E+05	8516	5,15	9,04	53,06	1,94E+07	3,36E+05	10560	4,04	7,61	55,75	1,82E+07	4,32E+05
5508	4,17	3,31	50,61	2,22E+07	5,95E+05	8517	5,15	0,89	53,06	1,08E+07	1,61E+05	10561	3,99	4,62	55,75	2,28E+07	2,02E+05
5509	4,17	1,31	50,61	2,86E+07	8,59E+05	8518	5,13	5,36	53,06	4,29E+07	2,23E+05	10562	3,99	3,97	55,75	1,35E+09	1,94E+07
5510	4,17	0,70	50,61	1,70E+07	4,92E+05	8519	5,13	5,14	53,06	1,43E+08	1,42E+06	10563	4,86	6,01	55,21	4,32E+06	2,43E+05
5511	3,75	3,74	50,61	2,44E+08	3,46E+06	8520	5,01	5,36	53,06	1,22E+07	1,55E+05	10564	4,86	2,23	55,21	4,27E+06	2,27E+05
5512	5,36	5,39	50,37	2,02E+08	4,93E+06	8521	4,89	5,10	53,06	4,76E+07	2,42E+05	10565	4,79	6,01	55,21	6,98E+06	2,20E+05
5513	5,36	1,75	50,37	1,24E+07	3,85E+05	8522	4,86	-0,24	53,06	1,22E+07	1,87E+05	10566	4,70	6,05	55,21	3,94E+06	2,88E+05
5514	5,36	1,48	50,37	3,24E+07	6,19E+05	8523	4,78	7,87	53,06	1,06E+07	1,61E+05	10567	4,62	2,62	55,21	3,74E+07	3,83E+05
5515	4,59	4,61	50,37	1,47E+08	3,44E+06	8524	4,75	8,65	53,06	1,59E+07	1,56E+05	10568	4,62	1,37	55,21	2,46E+07	5,47E+05
5516	4,54	5,74	50,37	2,57E+07	4,50E+05	8525	4,72	2,67	53,06	9,74E+06	1,77E+05	10569	4,60	7,09	55,21	1,34E+07	2,85E+05
5517	3,82	4,70	50,12	1,95E+07	4,04E+05	8526	4,72	1,37	53,06	2,89E+07	2,36E+05	10571	4,42	9,22	55,21	3,20E+07	6,79E+05
5518	3,82	3,83	50,12	4,61E+08	7,65E+06	8527	4,71	9,00	53,06	2,51E+07	3,61E+05	10572	4,41	7,40	55,21	1,29E+07	2,20E+05
5519	3,74	4,00	50,12	2,67E+07	3,94E+05	8528	4,15	8,61	53,06	2,78E+07	6,13E+05	10573	4,41	0,85	55,21	3,11E+07	5,00E+05
5520	3,05	2,87	50,12	1,12E+07	4,03E+05	8529	4,15	1,41	53,06	3,67E+07	5,40E+05	10574	4,07	4,79	55,21	5,46E+07	1,13E+06
5521	3,88	4,78	49,88	1,59E+07	3,92E+05	8530	4,15	-0,67	53,06	5,34E+06	2,33E+05	10575	4,07	4,06	55,21	1,61E+09	2,63E+07
5522	3,58	3,57	49,88	5,72E+08	1,32E+07	8531	5,52	1,32	52,52	8,38E+06	1,70E+05	10576	4,07	2,06	55,21	2,75E+07	3,51E+05
5523	3,58	2,09	49,88	2,09													

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5537	3,73	4,44	49,38	2,85E+07	4,96E+05	8547	5,1910	21	51,98	1,90E+07	3,56E+05	10596	4,68	8,09	54,67	4,55E+07	4,99E+05
5538	3,72	3,74	49,38	1,03E+09	2,18E+07	8548	4,59	1,50	51,98	2,58E+07	6,75E+05	10597	4,68	2,67	54,67	3,99E+07	3,88E+05
5539	3,68	4,44	49,38	1,91E+07	4,23E+05	8549	4,57	7,92	51,98	1,70E+07	2,35E+05	10599	4,23	1,58	54,67	4,91E+07	9,64E+05
5540	3,68	3,65	49,38	1,09E+09	1,89E+07	8550	4,57	4,58	51,98	6,17E+08	1,00E+07	10600	4,22	8,26	54,67	2,13E+07	5,22E+05
5541	3,61	4,18	49,38	2,43E+07	5,91E+05	8551	4,40	8,52	51,98	1,59E+07	2,90E+05	10601	4,15	0,80	54,67	1,57E+07	2,26E+05
5542	3,27	4,09	49,38	3,49E+07	7,33E+05	8552	4,37	4,14	51,98	2,99E+07	2,26E+05	10602	4,14	7,96	54,67	1,28E+07	3,43E+05
5543	3,26	3,22	49,38	2,55E+08	6,98E+06	8553	4,37	1,45	51,98	2,85E+07	5,54E+05	10603	4,14	4,79	54,67	5,04E+07	4,42E+05
5544	3,26	0,70	49,38	1,64E+07	6,72E+05	8554	4,04	4,06	51,98	4,57E+08	6,41E+06	10604	4,14	1,41	54,67	5,34E+07	8,17E+05
5545	4,52	2,18	49,14	2,39E+07	3,85E+05	8555	5,20	8,78	51,44	1,16E+07	2,72E+05	10605	3,77	7,61	54,67	1,30E+07	3,57E+05
5546	4,02	4,00	49,14	1,58E+08	3,87E+06	8556	5,20	5,18	51,44	2,04E+08	3,28E+06	10606	3,77	3,75	54,67	2,95E+08	5,16E+06
5547	4,02	3,05	49,14	2,45E+07	4,46E+05	8557	5,20	3,27	51,44	8,44E+06	1,98E+05	10607	3,77	1,37	54,67	2,36E+07	6,05E+05
5548	3,44	3,39	49,14	4,64E+07	9,86E+05	8558	5,20	2,58	51,44	5,64E+06	1,66E+05	10608	3,77	0,72	54,67	2,20E+07	4,74E+05
5549	3,38	3,39	49,14	4,32E+07	8,26E+05	8559	4,93	4,92	51,44	1,04E+08	1,04E+06	10609	3,40	8,31	54,67	8,05E+06	2,11E+05
5550	3,27	0,96	49,14	1,80E+07	4,54E+05	8560	4,82	5,10	51,44	9,46E+06	1,70E+05	10613	4,87	3,10	54,13	3,07E+07	6,43E+05
5551	3,04	2,79	48,89	1,26E+07	4,27E+05	8561	3,99	5,10	51,44	6,44E+06	1,71E+05	10614	4,87	1,84	54,13	7,84E+06	2,36E+05
5552	4,44	4,44	48,64	4,82E+07	6,55E+05	8562	3,85	5,10	51,44	1,41E+07	2,67E+05	10615	4,86	4,84	54,13	6,26E+08	5,69E+06
5553	4,36	4,35	48,64	5,07E+07	5,71E+05	8563	3,85	1,89	51,44	1,42E+07	1,85E+05	10616	4,86	3,27	54,13	1,32E+07	3,25E+05
5554	4,59	2,87	48,40	1,59E+07	4,00E+05	8564	5,00	5,01	50,90	7,57E+07	8,47E+05	10617	4,86	0,76	54,13	5,71E+06	2,65E+05
5555	3,07	2,87	48,15	2,04E+07	5,00E+05	8565	4,94	7,01	50,90	7,06E+06	1,60E+05	10618	4,85	8,87	54,13	2,01E+07	3,91E+05
5556	4,44	4,44	47,66	3,94E+07	7,00E+05	8566	4,8610	13	50,90	1,15E+07	1,86E+05	10619	4,85	8,52	54,13	3,38E+06	2,32E+05
5557	4,29	4,00	47,66	6,70E+07	1,55E+06	8567	4,83	0,33	50,90	1,71E+07	1,85E+05	10620	4,79	3,27	54,13	1,24E+07	2,13E+05
5558	3,98	8,60	47,66	1,62E+07	4,48E+05	8568	4,82	7,01	50,90	8,15E+06	1,59E+05	10621	4,79	0,76	54,13	9,03E+06	2,10E+05
5559	3,98	7,99	47,66	1,35E+07	4,39E+05	8569	4,17	0,72	50,90	1,10E+07	1,73E+05	10622	4,78	8,87	54,13	2,28E+07	3,52E+05
5560	3,98	4,26	47,66	6,53E+07	1,59E+06	8570	4,14	3,93	50,90	3,63E+07	1,92E+05	10623	4,78	5,05	54,13	4,59E+07	2,72E+05
5561	3,05	3,31	47,66	1,83E+07	4,09E+05	8571	3,84	3,84	50,90	5,47E+08	5,99E+06	10624	4,72	5,10	54,13	1,54E+07	2,24E+05
5562	4,29	8,69	47,41	3,99E+07	1,04E+06	8572	3,43	3,45	50,90	7,94E+07	6,32E+05	10625	4,71	9,65	54,13	1,03E+07	2,05E+05
5563	4,29	4,26	47,41	1,86E+08	5,35E+06	8573	5,35	1,76	50,36	1,49E+07	1,85E+05	10626	4,70	3,10	54,13	1,87E+07	2,04E+05
5564	4,08	4,78	47,41	2,09E+07	6,72E+05	8574	5,35	1,50	50,36	1,48E+07	2,74E+05	10627	4,67	7,74	54,13	2,98E+07	5,39E+05
5565	4,08	4,09	47,41	2,22E+08	5,99E+06	8575	5,34	9,22	50,36	2,79E+07	5,38E+05	10628	4,67	4,66	54,13	1,87E+09	3,21E+07
5566	3,97	4,00	47,41	2,61E+08	6,39E+06	8576	5,34	9,04	50,36	1,10E+07	1,82E+05	10629	4,55	7,87	54,13	3,66E+07	7,77E+05
5567	3,88	4,78	47,41	2,01E+07	6,65E+05	8577	5,34	5,36	50,36	1,12E+08	2,10E+06	10630	4,55	7,61	54,13	1,02E+07	2,40E+05
5568	3,88	3,92	47,41	2,98E+08	8,17E+06	8578	5,08	5,10	50,36	1,15E+08	2,01E+06	10631	4,55	7,31	54,13	1,63E+07	3,79E+05
5569	3,24	3,39	47,16	1,90E+07	4,76E+05	8579	5,08	3,88	50,36	1,28E+07	2,82E+05	10632	4,55	2,58	54,13	2,10E+07	2,86E+05
5570	4,53	0,36	46,92	1,38E+07	3,84E+05	8580	4,64	4,66	50,36	7,07E+07	8,96E+05	10633	4,08	5,79	54,13	1,10E+07	2,98E+05
5571	3,36	3,22	46,92	1,46E+07	3,81E+05	8581	4,57	4,58	50,36	2,49E+08	2,05E+06	10634	4,08	1,80	54,13	1,78E+07	4,02E+05
5572	3,28	3,13	46,92	1,77E+07	4,23E+05	8582	4,18	3,27	50,36	1,10E+07	2,38E+05	10635	4,08	1,45	54,13	2,97E+07	3,14E+05
5573	4,49	8,86	46,67	1,75E+07	3,95E+05	8583	4,18	1,32	50,36	1,83E+07	3,90E+05	10636	4,07	8,44	54,13	1,06E+07	3,52E+05
5574	1,36	1,40	46,67	2,34E+08	3,83E+06	8584	4,17	4,19	50,36	2,37E+08	4,58E+06	10637	4,07	4,06	54,13	1,29E+09	8,79E+06
5575	1,36	0,88	46,67	3,47E+07	4,46E+05	8585	4,17	3,58	50,36	1,29E+07	3,01E+05	10638	3,40	1,02	54,13	1,20E+07	3,02E+05
5576	1,32	0,88	46,67	3,23E+07	4,97E+05	8586	3,80	3,80	50,36	5,42E+08	6,33E+06	10639	3,39	8,00	54,13	4,57E+07	1,15E+06
5577	1,31	1,31	46,67	1,99E+08	4,16E+06	8587	3,02	2,97	50,36	6,49E+07	6,10E+05	10640	3,39	7,14	54,13	1,62E+07	4,15E+05
5578	3,05	2,87	46,42	2,51E+07	8,42E+05	8588	2,94	2,93	50,36	2,94E+07	3,35E+05	10641	3,39	4,62	54,13	1,30E+07	3,11E+05
5579	3,03	3,48	46,42	1,30E+07	3,83E+05	8589	5,68	9,09	49,82	1,27E+07	1,64E+05	10642	3,39	3,41	54,13	1,70E+08	4,23E+06
5580	4,40	3,31	46,18	3,14E+07	9,54E+05	8590	5,68	5,70	49,82	1,17E+08	2,15E+06	10643	3,39	1,41	54,13	1,66E+07	5,81E+05
5581	3,33	4,44	46,18	3,49E+07	8,95E+05	8591	5,68	1,41	49,82	1,19E+07	2,09E+05	10644	3,36	1,19	54,13	1,09E+07	2,28E+05
5582	4,39	4,35	45,93	2,44E+08	5,46E+06	8592	5,68	1,06	49,82	2,22E+07	3,92E+05	10648	5,46	8,05	53,60	1,46E+07	2,76E+05
5583	4,07	3,22	45,93	4,96E+07	1,31E+06	8593	3,88	2,10	49,82	1,42E+07	2,29E+05	10649	5,45	8,52	53,60	3,09E+07	5,31E+05
5584	4,06	9,64	45,93	1,58E+07	4,96E+05	8594	3,87	4,71	49,82	2,04E+07	3,09E+05	10650	5,45	5,44	53,60	1,54E+08	1,97E+06
5585	3,33	9,12	45,93	1,83E+07	5,39E+05	8595	3,87	3,67	49,82	1,28E+08	8,63E+05	10651	4,93	2,75	53,60	6,36E+06	2,09E+05
5586	3,32	3,31	45,93	1,06E+08	2,93E+06	8596	3,81	2,02	49,82	1,65E+07	2,15E+05	10652	4,92	4,92	53,60	5,74E+08	1,05E+07
5587	3,23	4,09	45,93	3,78E+07	1,33E+06	8597	3,80	4,66	49,82	1,49E+07	2,68E+05	10653	4,92	2,93	53,60	2,05E+07	4,86E+05
5588	3,04	2,61	45,93	1,07E+07	3,89E+05	8598	3,69	3,32	49,82	1,71E+07	1,97E+05	10654	4,89	0,93	53,60	1,06E+07	2,66E+05
5589	4,53	4,52	45,68	4,63E+07	6,27E+05	8599	3,66	4,71	49,82	1,48E+07	2,70E+05	10655	4,82	0,89	53,60	1,54E+07	2,18E+05
5590	4,19	7,99	45,68	1,84E+07	4,52E+05	8600	3,66	2,97	49,82	1,87E+07	2,26E+05	10656	4,81	9,00	53,60	3,46E+07	3,63E+05
5591	3,65	7,99	45,68	3,40E+07	9,19E+05	8601	3,62	3,27	49,82	2,97E+07	4,78E+05	10657	4,74	9,00	53,60	2,71E+07	3,78E+05
5592	3,65	0,96	45,68	1,67E+07	4,04E+05	8602	3,56	4,66	49,82	1,10E+07	2,26E+05	10658	4,72	0,85	53,60	1,37E+07	2,18E+05
5593	3,23	9,64	45,68	2,73E+07	6,02E+05	8603	3,56	3,58	49,82	5,86E+08	8,10E+06	10659	4,64	6,61	53,60	7,12E+06	2,04E+05
5594	3,22	3,22	45,68	8,81E+07	3,09E+06	8604	3,56	1,89	49,82	2,24E+07	2,73E+05	10660	4,63	7,31	53,60	1,29E+07	2,69E+05
5595	1,85	1,40	45,68	2,71E+07	5,24E+05	8605	3,55	3,32	49,82	4,41E+07	2,09E+05	10661	4,63	3,10	53,60	2,13E+07	2,88E+05
5596	1,43	1,83	45,68	2,57E+07	5,74E+05	8606	3,55	2,36	49,82	6,25E+06	2,03E+05	10662	4,62	7,87	53,60	3,36E+07	2,26E+05
5597	4,19	4,18	45,44	7,80E+08	1,60E+07	8607	3,55	2,06	49,82	1,92E+07	3,17E+05	10667	5,94	9,13	53,06	2,85E+07	6,24E+05
5598	4,19	3,74	45,44	1,78E+08	2,88E+06	8608	3,40	3,67	49,82	3,43E+07	3,34E+05	10668	5,94	5,96	53,06	5,86E+07	1,20E+06
5599	3,70	4,18	45,44	1,													

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5613	4,39	7,73	44,94	2,01E+07	4,65E+05	8623	3,37	3,36	49,28	7,33E+07	7,55E+05	10688	4,71	-0,37	53,06	7,96E+06	2,13E+05
5614	4,24	0,88	44,94	1,52E+07	3,84E+05	8624	3,25	4,79	49,28	9,80E+06	2,12E+05	10689	4,68	3,06	53,06	1,70E+07	2,07E+05
5615	3,69	4,44	44,94	1,20E+08	2,01E+06	8625	3,25	4,14	49,28	2,41E+07	3,94E+05	10690	4,19	1,45	53,06	5,05E+07	8,81E+05
5616	3,69	3,65	44,94	6,63E+08	9,65E+06	8626	3,25	3,23	49,28	2,13E+08	4,32E+06	10691	4,18	8,61	53,06	3,27E+07	1,03E+06
5617	3,64	7,73	44,94	4,51E+07	1,06E+06	8627	3,25	1,32	49,28	9,82E+06	1,70E+05	10692	4,18	4,84	53,06	3,17E+07	3,58E+05
5618	3,64	3,65	44,94	5,77E+08	7,88E+06	8628	3,25	0,72	49,28	1,85E+07	3,67E+05	10694	5,54	8,74	52,52	2,97E+07	6,28E+05
5619	3,52	7,47	44,94	3,10E+07	8,96E+05	8629	4,29	3,97	47,67	3,31E+07	5,32E+05	10695	5,54	1,37	52,52	1,45E+07	3,49E+05
5620	3,52	0,88	44,94	2,71E+07	6,31E+05	8630	4,27	8,65	47,67	1,83E+07	4,66E+05	10696	5,54	0,93	52,52	1,09E+07	2,88E+05
5621	3,51	3,48	44,94	1,64E+08	4,47E+06	8631	4,27	4,27	47,67	1,10E+08	2,20E+06	10697	5,52	5,53	52,52	1,84E+08	3,07E+06
5622	3,17	1,75	44,94	2,96E+07	4,27E+05	8632	4,07	4,79	47,67	1,97E+07	3,38E+05	10698	5,52	1,67	52,52	1,14E+07	2,40E+05
5623	3,04	3,31	44,94	5,29E+07	1,18E+06	8633	3,97	8,09	47,67	1,29E+07	1,72E+05	10699	5,50	9,22	52,52	3,46E+07	6,52E+05
5624	3,03	4,78	44,94	1,72E+07	4,33E+05	8634	3,97	4,27	47,67	3,51E+07	5,87E+05	10700	5,37	1,02	52,52	1,37E+07	2,41E+05
5625	2,99	2,96	44,94	4,59E+07	2,39E+06	8635	3,96	8,65	47,67	8,58E+06	1,89E+05	10701	5,35	8,65	52,52	3,12E+07	5,20E+05
5626	0,66	2,09	44,94	1,99E+07	4,93E+05	8636	3,96	3,97	47,67	2,30E+08	2,86E+06	10702	5,35	1,76	52,52	1,71E+07	2,55E+05
5627	4,48	3,74	44,70	1,14E+08	2,33E+06	8637	3,88	4,06	47,67	1,05E+08	8,39E+05	10703	4,89	7,27	52,52	5,77E+06	2,31E+05
5628	4,39	4,35	44,70	3,89E+08	8,30E+06	8638	4,07	4,06	47,13	2,37E+08	1,89E+06	10704	4,87	6,92	52,52	1,08E+07	2,16E+05
5629	3,04	2,79	44,70	3,82E+07	1,02E+06	8639	3,88	4,79	47,13	1,69E+07	3,25E+05	10705	4,87	4,19	52,52	3,47E+06	2,04E+05
5630	2,08	0,70	44,70	2,13E+07	4,74E+05	8640	3,87	3,88	47,13	2,46E+08	3,41E+06	10706	4,85	8,44	52,52	1,23E+07	2,65E+05
5631	4,49	4,00	44,45	1,03E+08	2,88E+06	8641	1,37	0,67	46,59	1,94E+07	1,73E+05	10707	4,75	0,85	52,52	1,82E+07	2,27E+05
5632	4,47	4,44	44,45	7,50E+08	2,09E+07	8642	1,35	4,23	46,59	1,03E+07	1,91E+05	10708	4,62	8,48	52,52	2,06E+07	3,68E+05
5633	4,08	4,09	44,45	4,96E+08	5,69E+06	8643	1,35	1,37	46,59	1,90E+08	1,97E+06	10709	4,60	3,27	52,52	1,73E+07	3,95E+05
5634	4,02	4,52	44,45	8,17E+07	2,59E+06	8644	1,35	0,89	46,59	2,97E+07	2,59E+05	10710	4,60	2,84	52,52	1,44E+07	3,28E+05
5635	4,02	4,00	44,45	7,85E+08	1,54E+07	8645	1,31	0,63	46,59	1,93E+07	2,12E+05	10716	5,26	0,85	51,98	1,78E+07	2,15E+05
5636	3,75	3,74	44,45	3,48E+08	3,77E+06	8646	1,30	1,32	46,59	1,58E+08	2,22E+06	10717	5,23	10,21	51,98	2,09E+07	6,33E+05
5637	2,88	3,22	44,45	2,68E+07	8,19E+05	8647	1,30	0,89	46,59	2,78E+07	2,99E+05	10718	5,23	9,17	51,98	2,72E+07	3,59E+05
5638	2,06	2,09	44,45	5,49E+07	1,59E+06	8648	4,38	3,32	46,05	2,83E+07	3,34E+05	10719	5,23	7,44	51,98	9,10E+06	2,07E+05
5639	0,64	1,05	44,45	2,12E+07	4,68E+05	8649	4,06	3,23	46,05	2,61E+07	4,32E+05	10720	5,23	4,58	51,98	7,41E+06	2,14E+05
5640	0,64	0,62	44,45	8,82E+07	2,31E+06	8650	3,31	9,09	46,05	9,14E+06	2,46E+05	10721	5,23	2,10	51,98	1,49E+07	2,11E+05
5641	5,30	8,43	44,20	1,36E+07	4,19E+05	8651	3,31	4,40	46,05	2,83E+07	3,47E+05	10725	4,62	7,96	51,98	2,18E+07	4,54E+05
5642	4,49	10,25	44,20	1,58E+07	4,36E+05	8652	3,31	3,27	46,05	1,53E+08	1,38E+06	10726	4,62	4,62	51,98	7,71E+08	1,45E+07
5643	3,31	6,95	44,20	2,91E+07	4,92E+05	8653	3,24	4,06	46,05	3,53E+07	4,59E+05	10727	4,62	1,50	51,98	3,63E+07	1,03E+06
5644	3,31	4,78	44,20	2,78E+07	5,71E+05	8654	4,18	8,05	45,51	1,72E+07	2,35E+05	10728	4,44	8,52	51,98	2,33E+07	4,80E+05
5645	3,31	1,66	44,20	2,45E+07	3,86E+05	8655	4,18	3,67	45,51	9,30E+07	1,23E+06	10729	4,44	7,70	51,98	1,33E+07	2,94E+05
5646	3,31	1,05	44,20	2,33E+07	4,46E+05	8656	4,17	4,19	45,51	4,87E+08	6,63E+06	10730	4,44	2,49	51,98	1,69E+07	3,30E+05
5647	3,17	0,88	44,20	3,84E+07	7,30E+05	8657	3,80	4,14	45,51	6,49E+07	6,12E+05	10731	4,42	3,62	51,98	9,46E+06	2,31E+05
5648	2,88	9,38	44,20	2,51E+07	4,59E+05	8658	3,69	8,74	45,51	7,47E+06	2,10E+05	10732	4,41	7,57	51,98	1,08E+07	3,10E+05
5649	2,88	2,87	44,20	1,10E+08	3,90E+06	8659	3,67	4,19	45,51	8,25E+07	1,04E+06	10733	4,40	7,01	51,98	6,08E+06	2,22E+05
5650	2,88	0,79	44,20	2,88E+07	6,86E+05	8660	3,63	8,00	45,51	2,41E+07	4,16E+05	10734	4,40	1,50	51,98	3,73E+07	8,37E+05
5651	1,78	1,05	44,20	2,73E+07	5,31E+05	8661	3,21	9,15	45,51	1,00E+07	2,36E+05	10735	5,24	5,23	51,44	2,38E+08	4,52E+06
5652	1,03	1,75	44,20	3,77E+07	6,90E+05	8662	3,21	3,69	45,51	4,58E+07	2,44E+06	10737	5,24	3,32	51,44	6,10E+06	2,40E+05
5653	3,70	2,44	43,96	2,77E+07	5,40E+05	8663	1,85	1,45	45,51	2,64E+07	2,60E+05	10738	5,24	2,62	51,44	1,41E+07	3,10E+05
5654	3,30	1,92	43,96	3,62E+07	5,35E+05	8664	1,83	1,84	45,51	8,57E+07	1,22E+06	10739	5,23	8,83	51,44	1,54E+07	3,71E+05
5655	3,17	4,78	43,96	5,08E+07	9,97E+05	8665	1,83	1,58	45,51	3,05E+07	1,98E+05	10747	4,22	7,27	50,90	1,40E+07	2,60E+05
5656	3,16	1,75	43,96	4,05E+07	6,14E+05	8666	1,41	1,84	45,51	2,46E+07	2,75E+05	10748	4,21	3,62	50,90	2,12E+07	4,98E+05
5657	2,39	3,65	43,96	1,78E+07	4,56E+05	8667	1,40	1,41	45,51	1,34E+08	1,24E+06	10750	5,38	9,26	50,36	3,81E+07	9,30E+05
5658	1,76	1,75	43,96	7,75E+07	1,68E+06	8668	4,40	3,62	44,97	5,70E+07	6,73E+05	10751	5,38	5,36	50,36	1,27E+08	2,76E+06
5659	1,01	1,05	43,96	9,69E+07	2,47E+06	8669	4,38	4,14	44,97	3,06E+07	2,68E+05	10752	5,38	1,54	50,36	2,00E+07	4,62E+05
5660	5,37	3,39	43,71	2,03E+07	4,37E+05	8670	4,37	4,36	44,97	2,76E+08	3,49E+06	10753	5,37	1,76	50,36	1,48E+07	2,64E+05
5661	3,68	3,65	43,71	2,19E+08	2,41E+06	8671	4,23	3,54	44,97	4,66E+07	5,86E+05	10754	5,11	5,10	50,36	1,52E+08	2,83E+06
5662	3,22	1,92	43,71	2,53E+07	4,40E+05	8672	4,21	7,44	44,97	1,01E+07	2,04E+05	10755	5,11	4,01	50,36	2,02E+07	3,76E+05
5663	2,38	2,35	43,71	6,65E+07	1,77E+06	8673	3,99	3,75	44,97	1,18E+08	3,27E+05	10756	5,11	3,88	50,36	2,37E+07	4,26E+05
5664	4,41	4,44	43,47	4,66E+07	6,45E+05	8674	3,96	3,97	44,97	1,26E+09	2,06E+07	10757	4,89	4,40	50,36	5,96E+06	2,75E+05
5665	4,35	4,35	43,47	4,68E+07	6,86E+05	8675	3,78	8,18	44,97	1,75E+07	3,05E+05	10758	4,87	-0,37	50,36	3,38E+06	2,73E+05
5666	3,83	3,83	43,47	2,31E+08	6,76E+06	8676	3,78	3,80	44,97	3,59E+08	3,21E+06	10761	4,21	4,19	50,36	2,93E+08	6,09E+06
5667	3,56	3,13	43,47	3,91E+07	4,57E+05	8677	3,67	4,79	44,97	1,30E+07	1,58E+05	10762	4,21	3,32	50,36	1,84E+07	3,46E+05
5668	3,32	3,31	43,47	8,73E+08	1,58E+07	8678	3,67	4,45	44,97	6,69E+07	9,10E+05	10763	4,21	1,32	50,36	2,56E+07	6,65E+05
5669	3,23	3,74	43,47	2,27E+07	7,06E+05	8679	3,67	3,67	44,97	4,88E+08	5,80E+06	10764	4,21	0,76	50,36	7,68E+06	3,02E+05
5670	3,19	9,90	43,47	2,58E+07	4,25E+05	8680	3,62	7,74	44,97	2,12E+07	3,96E+05	10767	5,72	1,50	49,82	1,23E+07	2,13E+05
5671	3,16	3,83	43,47	1,97E+07	5,38E+05	8681	3,52	7,70	44,97	9,86E+06	1,59E+05	10768	5,72	1,11	49,82	2,47E+07	6,08E+05
5672	2,94	9,04	43,47	4,05E+07	4,32E+05	8682	3,52	4,23	44,97	3,94E+07	6,03E+05	10769	5,72	0,72	49,82	1,11E+07	2,06E+05
5673	5,34	3,22	43,22	2,09E+07	4,38E+05	8683	3,51	3,49	44,97	1,36E+08	2,16E+06	10770	5,71	8,52	49,82	4,57E+07	9,53E+05
5674	4,59	5,82	43,22	2,05E+07	3,98E+05	8684	3,51	0,89	44,97	1,48E+07	2,59E+05	10771	5,71	5,70	49,82	1,41E+08	3,23E+06
5675	4,25	4,26	43,22	3,62E+07	7,21E+												

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5689	3,13	3,13	43,22	3,52E+09	8,34E+07	8699	2,06	2,06	44,43	7,17E+07	9,95E+05	10791	3,28	1,93	49,82	2,01E+07	4,68E+05
5690	3,13	1,40	43,22	2,59E+07	7,63E+05	8700	2,06	0,98	44,43	1,56E+07	1,68E+05	10793	4,87	8,61	49,28	6,61E+06	2,20E+05
5691	3,12	9,99	43,22	2,61E+07	4,94E+05	8701	2,05	1,58	44,43	1,51E+07	1,67E+05	10794	4,87	6,48	49,28	8,22E+06	2,74E+05
5692	3,12	0,96	43,22	3,72E+07	5,34E+05	8702	1,76	0,98	44,43	2,25E+07	2,45E+05	10795	4,87	5,40	49,28	4,01E+06	2,23E+05
5693	2,98	9,99	43,22	1,69E+07	4,93E+05	8703	1,03	1,80	44,43	2,27E+07	2,99E+05	10796	4,04	4,84	49,28	1,26E+07	3,14E+05
5694	2,96	7,13	43,22	2,22E+07	5,36E+05	8704	0,70	1,11	44,43	6,55E+06	1,59E+05	10797	4,04	4,06	49,28	1,52E+08	2,18E+06
5695	2,96	5,22	43,22	8,35E+06	4,28E+05	8705	0,62	0,63	44,43	5,44E+07	1,10E+06	10798	4,04	3,27	49,28	1,38E+07	3,34E+05
5696	2,96	4,78	43,22	3,48E+07	9,44E+05	8706	3,70	2,36	43,89	1,23E+07	2,19E+05	10799	4,04	3,06	49,28	1,41E+07	2,23E+05
5697	2,96	2,96	43,22	2,27E+09	4,07E+07	8707	3,32	4,79	43,89	2,47E+07	3,28E+05	10800	4,04	1,06	49,28	1,09E+07	2,22E+05
5698	2,96	1,48	43,22	4,23E+07	8,48E+05	8708	3,29	6,83	43,89	1,07E+07	1,56E+05	10801	3,73	3,71	49,28	1,20E+09	1,86E+07
5699	2,61	3,31	43,22	4,19E+07	8,50E+05	8709	3,29	3,27	43,89	5,49E+08	5,37E+06	10802	3,73	2,06	49,28	4,74E+07	6,64E+05
5700	2,55	3,05	43,22	1,80E+07	5,94E+05	8710	3,29	1,93	43,89	2,65E+07	2,85E+05	10803	3,72	4,49	49,28	3,18E+07	5,82E+05
5701	2,24	2,27	43,22	1,48E+08	2,40E+06	8711	3,29	1,11	43,89	1,52E+07	2,31E+05	10807	3,29	4,84	49,28	8,92E+06	2,20E+05
5702	1,67	1,66	43,22	1,52E+08	3,63E+06	8712	3,28	1,67	43,89	1,32E+07	1,71E+05	10808	3,29	4,06	49,28	2,54E+07	3,67E+05
5703	1,45	1,48	43,22	1,98E+08	4,89E+06	8713	3,16	0,85	43,89	2,77E+07	3,28E+05	10809	3,29	0,98	49,28	2,03E+07	3,74E+05
5704	1,45	0,88	43,22	2,70E+07	5,68E+05	8714	3,14	1,76	43,89	6,01E+07	4,99E+05	10810	3,28	4,23	49,28	2,23E+07	3,84E+05
5705	4,08	4,09	42,97	5,51E+07	1,12E+06	8715	2,86	4,79	43,89	3,00E+07	1,60E+05	10811	3,28	3,27	49,28	2,33E+08	5,89E+06
5706	3,63	4,78	42,97	2,86E+07	6,39E+05	8716	2,72	3,14	43,89	3,77E+07	2,16E+05	10812	3,28	1,32	49,28	1,31E+07	3,20E+05
5707	3,63	3,39	42,97	4,38E+07	1,10E+06	8717	2,36	3,71	43,89	1,08E+07	1,74E+05	10813	3,28	0,76	49,28	2,61E+07	5,99E+05
5708	3,45	3,65	42,97	2,55E+07	9,11E+05	8718	2,36	2,36	43,89	7,86E+07	8,43E+05	10817	4,32	4,01	47,67	2,92E+07	6,33E+05
5709	3,31	8,86	42,97	2,94E+07	6,50E+05	8719	1,75	1,76	43,89	1,35E+08	1,16E+06	10818	4,30	8,70	47,67	2,58E+07	7,21E+05
5710	3,13	1,66	42,97	2,45E+07	4,06E+05	8720	1,00	0,98	43,89	1,04E+08	1,55E+06	10819	4,30	4,32	47,67	1,26E+08	2,88E+06
5711	3,12	9,82	42,97	3,39E+07	4,93E+05	8721	3,82	3,84	43,35	3,75E+08	8,48E+06	10820	4,11	4,79	47,67	3,17E+07	7,01E+05
5712	3,12	5,30	42,97	2,26E+07	5,07E+05	8722	3,65	2,97	43,35	1,01E+07	1,70E+05	10821	4,11	4,10	47,67	1,81E+08	2,78E+06
5713	3,10	4,78	42,97	3,87E+07	5,24E+05	8723	3,52	2,97	43,35	1,12E+07	1,67E+05	10822	4,11	3,93	47,67	6,61E+07	8,52E+05
5714	3,05	3,31	42,97	4,20E+07	2,15E+06	8724	3,31	2,62	43,35	2,10E+07	2,26E+05	10823	4,02	8,09	47,67	1,16E+07	2,54E+05
5715	2,99	3,65	42,97	5,06E+07	7,85E+05	8725	3,18	3,19	43,35	2,74E+09	4,68E+07	10824	4,02	4,32	47,67	4,32E+07	8,14E+05
5716	2,98	4,52	42,97	6,14E+06	4,22E+05	8726	3,17	3,54	43,35	3,06E+07	2,39E+05	10825	4,00	8,65	47,67	8,16E+06	2,53E+05
5717	2,60	0,96	42,97	1,60E+07	3,88E+05	8727	3,11	4,79	43,35	5,70E+07	7,52E+05	10826	4,00	4,01	47,67	1,61E+08	3,76E+06
5718	2,58	2,61	42,97	2,58E+08	5,60E+06	8728	3,11	3,49	43,35	2,63E+07	2,13E+05	10827	3,91	4,79	47,67	2,41E+07	7,09E+05
5719	2,53	4,78	42,97	1,57E+07	3,92E+05	8729	3,11	3,10	43,35	3,40E+09	4,73E+07	10828	3,91	4,10	47,67	7,53E+07	9,94E+05
5720	2,53	2,53	42,97	2,46E+08	4,48E+06	8730	3,11	1,41	43,35	2,92E+07	5,61E+05	10829	3,91	3,88	47,67	2,40E+08	4,48E+06
5721	4,58	4,61	42,73	3,19E+07	5,93E+05	8731	3,10	3,62	43,35	7,22E+06	1,81E+05	10832	1,40	8,65	46,59	1,77E+07	3,16E+05
5722	3,63	3,65	42,73	2,10E+08	5,55E+06	8732	3,10	2,58	43,35	1,78E+07	2,27E+05	10833	1,38	1,37	46,59	2,37E+08	2,81E+06
5723	3,44	6,87	42,73	3,38E+07	5,54E+05	8733	2,95	0,89	43,35	1,47E+07	1,83E+05	10834	1,38	0,89	46,59	3,10E+07	3,37E+05
5724	3,09	2,01	42,73	1,77E+07	6,14E+05	8734	2,60	3,27	43,35	2,54E+07	3,30E+05	10835	1,38	0,67	46,59	2,23E+07	2,63E+05
5725	3,07	4,00	42,73	4,50E+07	7,89E+05	8735	2,54	3,27	43,35	2,14E+07	1,93E+05	10836	1,34	1,32	46,59	1,82E+08	3,08E+06
5726	2,23	1,22	42,73	2,66E+07	5,15E+05	8736	2,24	2,23	43,35	1,40E+08	1,44E+06	10837	1,34	0,93	46,59	3,11E+07	3,98E+05
5727	1,25	2,27	42,73	2,93E+07	5,77E+05	8737	2,24	0,93	43,35	1,68E+07	1,65E+05	10838	1,34	0,67	46,59	1,01E+07	2,80E+05
5728	5,34	1,57	42,48	2,13E+07	3,98E+05	8738	2,21	2,58	43,35	2,34E+07	1,63E+05	10839	1,33	8,65	46,59	1,51E+07	2,38E+05
5729	4,52	7,04	42,48	2,15E+07	5,35E+05	8739	1,68	1,97	43,35	2,84E+07	1,85E+05	10840	4,41	3,32	46,05	2,18E+07	4,65E+05
5730	4,40	4,44	42,48	3,17E+07	5,23E+05	8740	1,68	1,45	43,35	7,95E+07	4,97E+05	10841	4,10	3,27	46,05	2,89E+07	5,58E+05
5731	4,38	4,35	42,48	3,60E+07	5,08E+05	8741	1,65	0,89	43,35	2,14E+07	1,95E+05	10842	3,78	3,80	46,05	3,43E+08	4,79E+06
5732	3,73	3,74	42,48	8,68E+07	2,42E+06	8742	1,46	1,67	43,35	7,93E+07	5,43E+05	10843	3,35	4,40	46,05	2,36E+07	4,91E+05
5733	3,47	3,48	42,48	1,96E+08	5,25E+06	8743	1,44	0,89	43,35	2,94E+07	3,12E+05	10844	3,33	9,13	46,05	1,45E+07	3,30E+05
5734	2,89	3,39	42,48	4,63E+07	4,76E+05	8744	3,62	4,79	42,82	1,20E+07	2,84E+05	10845	3,33	3,32	46,05	1,70E+08	1,84E+06
5735	2,75	3,48	42,48	2,57E+07	3,84E+05	8745	3,62	3,62	42,82	1,73E+08	1,88E+06	10846	3,27	4,10	46,05	3,16E+07	6,31E+05
5736	5,71	2,96	42,23	4,00E+07	6,08E+05	8746	3,62	2,97	42,82	6,18E+06	1,83E+05	10847	1,87	1,50	46,05	2,71E+07	3,89E+05
5737	4,40	7,13	42,23	1,97E+07	3,89E+05	8747	3,61	3,41	42,82	4,24E+07	4,21E+05	10848	1,86	0,85	46,05	8,50E+06	2,80E+05
5738	4,05	2,96	42,23	5,37E+07	8,19E+05	8748	3,56	2,93	42,82	6,24E+06	1,99E+05	10849	1,45	1,89	46,05	2,37E+07	3,93E+05
5739	3,97	2,96	42,23	4,29E+07	7,89E+05	8749	3,43	3,62	42,82	4,03E+07	4,38E+05	10850	4,22	8,05	45,51	1,45E+07	3,04E+05
5740	3,46	2,96	42,23	1,29E+08	1,84E+06	8750	3,43	1,76	42,82	7,88E+06	1,71E+05	10851	4,21	4,19	45,51	6,35E+08	9,25E+06
5741	3,38	3,39	42,23	2,62E+08	7,45E+06	8751	3,41	3,41	42,82	1,07E+08	1,37E+06	10852	4,21	3,71	45,51	1,05E+08	1,43E+06
5742	3,37	2,96	42,23	1,25E+08	1,85E+06	8752	3,29	8,78	42,82	1,17E+07	3,21E+05	10853	4,19	7,83	45,51	1,02E+07	2,22E+05
5743	3,26	2,96	42,23	8,28E+07	2,25E+06	8753	2,94	4,79	42,82	9,59E+07	9,51E+05	10854	4,17	8,22	45,51	1,41E+07	2,09E+05
5744	3,21	4,09	42,23	1,48E+07	3,83E+05	8754	2,57	0,93	42,82	1,79E+07	1,93E+05	10855	4,08	9,69	45,51	7,44E+06	2,27E+05
5745	3,14	1,83	42,23	2,99E+07	4,10E+05	8755	2,49	2,93	42,82	5,96E+07	6,25E+05	10856	3,82	4,19	45,51	5,60E+07	7,94E+05
5746	3,04	4,87	42,23	4,83E+07	1,38E+06	8756	2,49	2,49	42,82	3,29E+08	2,21E+06	10857	3,72	4,23	45,51	9,62E+07	1,40E+06
5747	3,04	1,22	42,23	3,74E+07	1,17E+06	8757	2,49	1,63	42,82	2,10E+07	2,51E+05	10858	3,67	8,00	45,51	3,30E+07	7,07E+05
5748	2,93	8,08	42,23	4,78E+07	6,41E+05	8758	2,47	4,79	42,82	1,73E+07	1,91E+05	10859	3,67	0,98	45,51	1,05E+07	2,16E+05
5749	2,93	1,66	42,23	1,41E+07	8,81E+05	8759	2,34	2,97	42,82	3,88E+07	3,85E+05	10860	3,24	9,69	45,51	1,39E+07	3,99E+05
5750	2,20	2,18	42,23	8,34E+07	1,71E+06	8760	2,23	1,24	42,82	1,92E+07	2,53E+05	10861	3,24	3,23	45,51	3,91E+08	2,38E+06
5751	2,04	3,13	42,23	1,22E+07	4,38E+05												

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5765	3,16	4,44	41,99	2,54E+07	4,64E+05	8775	2,91	1,63	42,28	1,34E+08	1,21E+06	10877	3,72	8,70	44,97	1,62E+07	2,82E+05
5766	3,14	1,57	41,99	4,24E+07	5,95E+05	8776	2,90	7,31	42,28	1,71E+07	1,57E+05	10878	3,72	4,79	44,97	2,64E+07	4,86E+05
5767	3,12	5,30	41,99	2,06E+07	4,40E+05	8777	2,90	1,32	42,28	5,38E+07	4,68E+05	10879	3,72	3,71	44,97	5,66E+08	7,42E+06
5768	3,10	4,44	41,99	2,00E+07	5,97E+05	8778	2,87	4,32	42,28	2,23E+07	1,82E+05	10880	3,70	4,49	44,97	6,77E+07	9,84E+05
5769	3,10	2,61	41,99	9,52E+07	1,71E+06	8779	2,31	2,71	42,28	3,46E+07	2,25E+05	10881	3,66	3,67	44,97	5,25E+08	5,93E+06
5770	3,08	1,75	41,99	2,47E+07	6,31E+05	8780	2,28	2,97	42,28	2,76E+07	4,13E+05	10882	3,65	7,74	44,97	3,15E+07	7,19E+05
5771	3,04	1,48	41,99	1,34E+07	5,59E+05	8781	2,15	2,75	42,28	2,08E+07	1,89E+05	10883	3,63	4,01	44,97	1,91E+07	3,24E+05
5772	3,03	3,57	41,99	1,52E+08	3,94E+06	8782	2,08	2,97	42,28	4,06E+07	6,23E+05	10884	3,55	4,27	44,97	4,18E+07	7,74E+05
5773	3,03	2,53	41,99	1,16E+08	3,77E+06	8783	2,04	-0,67	42,28	5,97E+06	1,81E+05	10885	3,54	7,48	44,97	2,16E+07	6,27E+05
5774	3,00	9,90	41,99	1,22E+08	2,40E+06	8784	1,87	3,01	42,28	1,52E+07	4,25E+05	10886	3,54	3,54	44,97	1,70E+08	3,14E+06
5775	3,00	8,86	41,99	1,43E+08	2,01E+06	8785	1,87	1,19	42,28	3,68E+07	5,34E+05	10887	3,54	0,93	44,97	2,11E+07	5,26E+05
5776	3,00	7,99	41,99	1,01E+08	1,61E+06	8786	1,44	2,06	42,28	1,88E+07	1,64E+05	10888	3,03	4,79	44,97	2,60E+07	3,52E+05
5777	3,00	7,21	41,99	2,17E+08	3,71E+06	8787	1,29	0,93	42,28	2,80E+07	1,67E+05	10889	2,12	0,67	44,97	1,00E+07	2,74E+05
5778	3,00	6,35	41,99	1,59E+08	2,83E+06	8788	1,23	2,19	42,28	1,90E+07	2,12E+05	10890	0,67	2,10	44,97	1,26E+07	3,12E+05
5779	3,00	5,30	41,99	6,40E+07	1,78E+06	8789	1,20	1,84	42,28	3,69E+07	5,25E+05	10891	4,51	4,06	44,43	5,26E+07	1,63E+06
5780	3,00	0,96	41,99	5,52E+07	7,48E+05	8790	1,20	1,19	42,28	2,18E+08	3,45E+06	10892	4,49	3,71	44,43	8,30E+07	1,42E+06
5781	2,99	2,96	41,99	1,85E+10	4,42E+08	8791	1,20	0,80	42,28	4,56E+07	4,35E+05	10893	4,48	4,79	44,43	1,57E+07	3,12E+05
5782	2,98	9,47	41,99	4,85E+07	8,06E+05	8792	3,22	2,45	41,74	2,38E+07	3,21E+05	10894	4,48	4,49	44,43	5,43E+08	1,63E+07
5783	2,98	8,60	41,99	1,70E+08	2,44E+06	8793	3,21	8,44	41,74	1,15E+07	1,59E+05	10895	4,06	4,49	44,43	6,37E+07	1,72E+06
5784	2,94	0,44	41,99	6,56E+07	1,12E+06	8794	3,06	1,80	41,74	3,95E+07	3,58E+05	10896	4,04	4,79	44,43	1,29E+07	3,77E+05
5785	2,90	1,31	41,99	2,17E+07	5,08E+05	8795	3,02	8,91	41,74	5,57E+06	1,58E+05	10897	4,04	3,75	44,43	3,15E+07	5,03E+05
5786	2,84	3,57	41,99	3,64E+07	5,86E+05	8796	3,02	5,49	41,74	9,94E+06	1,61E+05	10898	3,58	3,58	44,43	2,26E+08	3,68E+06
5787	2,80	3,48	41,99	3,88E+07	6,32E+05	8797	3,01	5,23	41,74	7,99E+06	2,21E+05	10899	3,33	6,87	44,43	1,04E+07	2,64E+05
5788	2,75	9,21	41,99	2,50E+07	4,37E+05	8798	3,01	3,80	41,74	2,58E+07	5,44E+05	10900	3,33	4,45	44,43	9,68E+06	2,32E+05
5789	2,74	7,65	41,99	3,54E+07	5,88E+05	8799	2,99	4,75	41,74	7,18E+07	7,85E+05	10901	3,20	0,89	44,43	2,73E+07	4,43E+05
5790	2,21	2,96	41,99	3,51E+07	8,51E+05	8800	2,99	3,23	41,74	9,94E+07	2,72E+06	10902	2,91	3,19	44,43	6,38E+07	5,01E+05
5791	2,02	9,04	41,99	2,00E+07	5,14E+05	8801	2,98	3,49	41,74	1,93E+07	4,18E+05	10903	2,90	4,79	44,43	2,51E+07	3,66E+05
5792	2,02	2,01	41,99	9,29E+07	2,55E+06	8802	2,98	3,36	41,74	2,05E+07	6,82E+05	10904	2,90	0,89	44,43	1,73E+07	4,19E+05
5793	1,86	8,08	41,99	2,07E+07	4,21E+05	8803	2,98	2,97	41,74	1,34E+10	2,75E+08	10905	2,88	1,97	44,43	1,98E+07	4,34E+05
5794	1,86	0,88	41,99	3,08E+07	4,54E+05	8804	2,98	2,75	41,74	2,81E+08	3,06E+06	10906	2,09	2,10	44,43	6,98E+07	1,25E+06
5795	1,82	3,13	41,99	1,52E+07	4,38E+05	8805	2,98	1,67	41,74	1,14E+08	1,60E+06	10907	2,08	1,06	44,43	1,40E+07	2,27E+05
5796	1,58	1,57	41,99	3,47E+08	4,94E+06	8806	2,98	0,93	41,74	2,18E+07	2,10E+05	10908	1,81	1,02	44,43	1,92E+07	3,25E+05
5797	1,21	1,22	41,99	2,84E+08	6,85E+06	8807	2,96	3,19	41,74	3,69E+08	2,90E+06	10909	1,04	1,80	44,43	2,10E+07	3,45E+05
5798	3,13	6,26	41,74	4,97E+07	7,16E+05	8808	2,96	1,89	41,74	3,14E+07	4,80E+05	10910	0,66	1,02	44,43	1,05E+07	2,63E+05
5799	3,12	7,21	41,74	4,44E+07	5,86E+05	8809	2,96	1,19	41,74	2,86E+07	3,03E+05	10911	0,66	0,67	44,43	6,72E+07	1,52E+06
5800	3,10	8,95	41,74	3,51E+07	4,53E+05	8810	2,95	3,62	41,74	2,72E+07	4,47E+05	10912	3,72	2,41	43,89	1,46E+07	2,94E+05
5801	3,10	3,13	41,74	2,98E+09	6,75E+07	8811	2,95	3,32	41,74	4,43E+07	6,35E+05	10913	3,47	3,27	43,89	3,76E+07	2,81E+05
5802	3,08	1,48	41,74	4,39E+07	5,95E+05	8812	2,95	2,58	41,74	9,11E+07	7,13E+05	10914	3,35	4,79	43,89	4,53E+07	7,57E+05
5803	3,04	1,66	41,74	1,24E+07	4,45E+05	8813	2,95	2,32	41,74	4,46E+06	2,64E+05	10915	3,33	1,97	43,89	3,19E+07	4,54E+05
5804	3,02	0,70	41,74	4,99E+07	1,31E+06	8814	2,90	3,27	41,74	7,39E+07	4,46E+05	10916	3,32	1,71	43,89	2,21E+07	3,59E+05
5805	2,95	4,87	41,74	5,47E+07	1,31E+06	8815	2,88	0,93	41,74	1,86E+07	2,16E+05	10917	3,32	1,11	43,89	1,52E+07	3,71E+05
5806	2,95	1,14	41,74	3,87E+07	9,12E+05	8816	2,87	1,63	41,74	9,29E+07	9,89E+05	10918	3,18	4,79	43,89	9,81E+07	1,50E+06
5807	2,91	3,92	41,74	3,50E+07	9,30E+05	8817	2,86	9,00	41,74	4,22E+06	1,62E+05	10919	3,18	1,80	43,89	8,35E+07	8,75E+05
5808	2,89	3,65	41,74	2,22E+07	5,88E+05	8818	2,86	4,79	41,74	7,38E+07	9,48E+05	10920	2,41	2,41	43,89	5,65E+07	1,02E+06
5809	2,89	2,09	41,74	3,87E+07	9,63E+05	8819	2,86	2,32	41,74	2,52E+07	2,30E+05	10921	1,79	0,89	43,89	1,95E+07	2,95E+05
5810	2,88	9,73	41,74	3,40E+07	4,08E+05	8820	2,77	3,58	41,74	1,82E+07	1,64E+05	10922	1,78	5,36	43,89	7,65E+06	2,03E+05
5811	2,88	4,78	41,74	6,50E+07	1,38E+06	8821	2,75	5,62	41,74	7,25E+06	1,77E+05	10923	1,03	1,02	43,89	8,87E+07	2,00E+06
5812	2,88	2,35	41,74	4,11E+07	7,81E+05	8822	2,75	2,75	41,74	2,96E+09	4,40E+07	10924	3,85	3,84	43,35	5,47E+08	1,75E+07
5813	2,88	1,66	41,74	3,35E+07	8,77E+05	8823	2,75	0,67	41,74	9,72E+06	1,55E+05	10925	3,58	3,23	43,35	2,52E+07	4,15E+05
5814	2,81	2,09	41,74	2,49E+07	5,82E+05	8824	2,73	4,79	41,74	5,88E+07	8,53E+05	10926	3,51	3,14	43,35	3,30E+07	3,79E+05
5815	2,75	8,43	41,74	2,32E+07	5,14E+05	8825	2,73	1,41	41,74	5,07E+07	7,32E+05	10927	3,37	1,58	43,35	1,58E+07	2,29E+05
5816	2,75	4,78	41,74	5,88E+07	1,59E+06	8826	2,71	1,63	41,74	4,82E+07	5,72E+05	10928	3,33	3,32	43,35	7,00E+08	8,51E+06
5817	2,75	2,79	41,74	3,87E+09	8,58E+07	8827	2,71	0,93	41,74	3,26E+07	4,12E+05	10929	3,33	2,62	43,35	1,59E+07	3,05E+05
5818	2,75	1,40	41,74	3,62E+07	1,24E+06	8828	2,68	2,32	41,74	3,92E+07	2,43E+05	10930	3,32	3,62	43,35	2,56E+07	4,51E+05
5819	2,75	0,62	41,74	3,61E+07	6,35E+05	8829	2,58	7,09	41,74	1,14E+07	1,97E+05	10931	3,22	3,88	43,35	2,18E+07	2,17E+05
5820	2,61	2,18	41,74	2,43E+07	4,15E+05	8830	2,58	4,79	41,74	2,26E+07	2,17E+05	10932	3,22	2,58	43,35	1,18E+07	4,22E+05
5821	2,47	3,13	41,74	4,07E+07	4,18E+05	8831	2,57	1,41	41,74	1,42E+07	1,65E+05	10933	3,21	3,19	43,35	4,66E+09	9,05E+07
5822	2,41	3,13	41,74	4,36E+07	6,91E+05	8832	2,41	3,19	41,74	2,50E+07	2,30E+05	10934	3,16	3,80	43,35	9,79E+06	3,00E+05
5823	2,33	3,05	41,74	3,94E+07	4,89E+05	8833	2,06	0,85	41,74	1,22E+07	1,73E+05	10935	3,16	2,45	43,35	1,14E+07	2,16E+05
5824	2,28	3,05	41,74	4,51E+07	6,66E+05	8834	2,01	9,04	41,74	7,91E+06	1,91E+05	10936	3,14	4,79	43,35	9,44E+07	1,47E+06
5825	1,85	1,83	41,74	4,03E+08	5,94E+06	8835	1,90	2,75	41,74	1,46E+07	1,65E+05	10937	3,14	3,14	43,35	4,30E+09	6,95E+07
5826	1,64	2,96	41,74	1,39E+07	5,28E+05	8836	1,90	0,89	41,74	2,46E+07	1,66E+05	10938	3,14	1,45	43,35	4,12E+07	8,83E+05
5827	4,50	4,87	41,49	2,30E+07	4,54E+05	8837	1,86	8,05	41,74	1,30E+07	1,97E+05	10939					

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5841	2,71	0,96	41,49	2,27E+07	6,41E+05	8851	2,57	2,58	41,20	1,21E+09	1,73E+07	10953	2,27	2,28	43,35	1,45E+08	1,68E+06
5842	2,53	3,22	41,49	4,97E+07	8,47E+05	8852	2,53	3,23	41,20	3,41E+07	3,63E+05	10954	2,27	0,93	43,35	1,44E+07	2,37E+05
5843	2,44	2,87	41,49	5,10E+07	5,56E+05	8853	2,50	7,61	41,20	1,41E+07	2,24E+05	10955	1,89	0,46	43,35	3,98E+06	2,01E+05
5844	2,44	2,44	41,49	4,73E+08	8,44E+06	8854	2,50	2,49	41,20	6,15E+08	5,20E+06	10956	1,72	1,50	43,35	8,00E+07	5,78E+05
5845	2,43	7,91	41,49	1,81E+07	4,34E+05	8855	2,49	4,40	41,20	9,11E+06	1,65E+05	10957	1,71	7,79	43,35	1,61E+07	2,61E+05
5846	2,41	2,87	41,49	4,58E+07	5,64E+05	8856	2,49	3,62	41,20	2,39E+07	3,66E+05	10958	1,71	2,02	43,35	2,57E+07	2,84E+05
5847	2,34	2,87	41,49	3,90E+07	4,53E+05	8857	2,43	2,45	41,20	3,83E+08	3,48E+06	10959	1,71	0,93	43,35	1,84E+07	2,52E+05
5848	2,08	2,79	41,49	2,29E+07	3,83E+05	8858	2,28	2,49	41,20	4,09E+07	3,29E+05	10960	1,49	1,71	43,35	6,45E+07	5,43E+05
5849	1,90	1,48	41,49	2,56E+07	5,80E+05	8859	2,28	2,28	41,20	8,54E+07	4,34E+05	10961	1,48	4,75	43,35	1,20E+07	2,26E+05
5850	1,80	7,73	41,49	2,24E+07	6,02E+05	8860	2,24	2,23	41,20	1,11E+08	7,00E+05	10962	1,48	1,50	43,35	3,59E+08	4,47E+06
5851	1,80	1,83	41,49	3,83E+08	7,75E+06	8861	1,78	3,97	41,20	8,49E+06	1,60E+05	10963	1,48	0,93	43,35	2,63E+07	4,44E+05
5852	1,66	7,73	41,49	2,33E+07	3,89E+05	8862	1,78	1,76	41,20	2,94E+08	3,69E+06	10964	3,65	4,79	42,82	3,39E+07	8,52E+05
5853	1,66	1,66	41,49	4,66E+08	1,02E+07	8863	1,78	0,89	41,20	2,19E+07	2,22E+05	10965	3,65	3,62	42,82	1,95E+08	2,65E+06
5854	1,53	1,92	41,49	5,82E+07	9,34E+05	8864	1,64	7,70	41,20	1,33E+07	1,63E+05	10966	3,46	4,79	42,82	1,70E+07	2,13E+05
5855	1,46	1,48	41,49	3,14E+08	4,86E+06	8865	1,64	4,06	41,20	7,08E+06	1,58E+05	10967	3,46	3,67	42,82	3,27E+07	4,90E+05
5856	1,45	1,05	41,49	2,60E+07	4,86E+05	8866	1,64	0,85	41,20	2,15E+07	2,50E+05	10968	3,46	3,45	42,82	1,30E+08	2,59E+06
5857	1,45	0,70	41,49	3,60E+07	6,69E+05	8867	1,50	7,61	41,20	9,35E+06	1,57E+05	10969	3,32	8,83	42,82	1,76E+07	4,47E+05
5858	4,58	7,65	41,25	1,73E+07	4,12E+05	8868	1,50	1,84	41,20	4,17E+07	3,84E+05	10970	2,52	1,67	42,82	2,09E+07	4,17E+05
5859	4,49	10,16	41,25	1,69E+07	4,24E+05	8869	1,49	1,50	41,20	3,27E+08	2,60E+06	10971	2,50	2,49	42,82	4,02E+08	2,90E+06
5860	4,36	4,35	41,25	2,28E+07	3,91E+05	8870	1,48	0,98	41,20	2,68E+07	2,40E+05	10972	2,27	1,28	42,82	1,75E+07	2,85E+05
5861	3,60	2,53	41,25	3,03E+07	7,81E+05	8871	1,45	0,72	41,20	4,18E+07	4,63E+05	10973	3,39	3,01	42,28	9,86E+07	1,98E+06
5862	3,24	7,56	41,25	2,74E+07	5,33E+05	8872	3,58	3,58	40,66	7,93E+07	1,30E+06	10974	3,16	2,36	42,28	1,54E+07	2,21E+05
5863	3,14	9,21	41,25	3,26E+07	4,26E+05	8873	2,90	7,31	40,66	1,49E+07	2,24E+05	10975	3,07	6,79	42,28	4,65E+06	2,02E+05
5864	2,83	4,09	41,25	2,15E+07	4,17E+05	8874	2,72	4,62	40,66	2,38E+07	1,96E+05	10976	3,07	4,06	42,28	1,09E+07	3,11E+05
5865	2,75	8,08	41,25	2,75E+07	3,89E+05	8875	2,57	8,09	40,66	1,70E+07	2,09E+05	10977	3,07	2,06	42,28	1,65E+07	5,03E+05
5866	2,60	6,78	41,25	4,85E+07	6,09E+05	8876	2,57	0,89	40,66	1,62E+07	1,97E+05	10978	3,05	6,09	42,28	8,46E+06	3,47E+05
5867	2,58	7,65	41,25	2,59E+07	5,55E+05	8877	2,02	1,32	40,66	2,75E+07	3,08E+05	10979	3,05	0,67	42,28	4,15E+06	2,30E+05
5868	2,57	8,17	41,25	1,66E+07	3,89E+05	8878	2,01	2,02	40,66	1,76E+08	1,56E+06	10980	3,03	8,83	42,28	2,28E+07	3,92E+05
5869	2,52	2,53	41,25	7,40E+08	9,37E+06	8879	2,00	8,00	40,66	2,76E+07	2,25E+05	10981	3,03	3,67	42,28	8,25E+07	1,96E+06
5870	2,51	3,65	41,25	2,12E+07	6,07E+05	8880	1,31	4,14	40,66	1,31E+07	1,58E+05	10982	3,02	8,70	42,28	1,71E+07	5,19E+05
5871	2,49	7,65	41,25	2,80E+07	5,40E+05	8881	1,31	2,02	40,66	3,00E+07	3,36E+05	10983	3,02	5,44	42,28	1,11E+07	3,88E+05
5872	2,27	2,27	41,25	4,95E+07	1,31E+06	8882	1,31	0,80	40,66	4,65E+07	3,66E+05	10984	3,02	3,01	42,28	1,73E+10	4,08E+08
5873	1,88	7,65	41,25	1,85E+07	4,92E+05	8883	1,30	1,32	40,66	1,84E+08	2,17E+06	10985	2,99	1,50	42,28	1,07E+08	7,15E+05
5874	1,49	1,48	41,25	3,17E+08	4,67E+06	8884	3,02	4,01	40,12	9,49E+06	1,64E+05	10986	2,95	4,79	42,28	1,66E+08	1,74E+06
5875	3,58	8,51	41,00	1,62E+07	4,45E+05	8885	3,01	4,45	40,12	9,75E+06	1,57E+05	10987	2,95	1,63	42,28	1,69E+08	1,80E+06
5876	3,58	3,57	41,00	1,52E+08	3,77E+06	8886	2,95	3,71	40,12	2,46E+07	2,17E+05	10988	2,95	1,41	42,28	9,75E+07	6,84E+05
5877	2,72	8,08	41,00	2,76E+07	4,55E+05	8887	2,92	4,79	40,12	3,67E+07	2,26E+05	10989	2,94	2,23	42,28	2,89E+07	3,96E+05
5878	2,58	2,61	41,00	1,45E+09	3,07E+07	8888	2,91	3,71	40,12	3,20E+07	2,52E+05	10990	2,23	0,76	42,28	1,29E+07	2,79E+05
5879	2,49	4,35	41,00	1,37E+07	4,25E+05	8889	2,91	2,93	40,12	2,62E+09	7,10E+06	10991	2,07	3,06	42,28	2,94E+07	4,21E+05
5880	2,04	1,31	41,00	3,22E+07	7,47E+05	8890	2,90	7,83	40,12	1,55E+07	1,92E+05	10992	2,05	9,09	42,28	1,05E+07	3,10E+05
5881	1,50	0,96	41,00	2,65E+07	3,95E+05	8891	2,90	7,09	40,12	1,93E+07	1,55E+05	10993	2,05	0,89	42,28	1,65E+07	2,08E+05
5882	1,34	2,01	41,00	5,18E+07	9,42E+05	8892	2,76	4,45	40,12	2,06E+07	1,65E+05	10994	1,89	3,88	42,28	5,84E+06	2,42E+05
5883	2,01	0,79	40,75	2,00E+07	4,38E+05	8893	2,73	7,09	40,12	2,00E+07	1,82E+05	10995	1,89	2,84	42,28	9,07E+06	2,11E+05
5884	4,58	7,47	40,51	2,64E+07	4,47E+05	8894	2,72	2,23	40,12	2,27E+07	1,86E+05	10996	1,89	1,24	42,28	3,81E+07	3,80E+05
5885	4,49	4,44	40,51	1,44E+07	4,60E+05	8895	2,71	7,79	40,12	1,70E+07	1,78E+05	10997	1,63	1,63	42,28	1,18E+09	1,45E+07
5886	4,44	4,44	40,51	2,35E+07	4,19E+05	8896	2,71	7,27	40,12	1,79E+07	1,83E+05	10998	1,26	2,19	42,28	1,28E+07	2,03E+05
5887	2,93	7,30	40,51	3,80E+07	5,63E+05	8897	2,32	1,97	40,12	1,87E+07	1,60E+05	10999	1,25	1,89	42,28	3,54E+07	7,30E+05
5888	2,91	4,78	40,51	3,19E+07	5,09E+05	8898	2,23	1,93	40,12	2,78E+07	1,57E+05	11000	1,23	1,24	42,28	2,27E+08	4,69E+06
5889	2,01	2,01	40,51	1,19E+08	3,25E+06	8899	1,37	7,27	40,12	1,38E+07	2,91E+05	11001	1,23	0,85	42,28	4,48E+07	6,53E+05
5890	1,32	0,88	40,51	4,54E+07	6,72E+05	8900	1,37	1,37	40,12	2,15E+08	2,64E+06	11002	3,28	3,62	41,74	7,27E+07	3,35E+05
5891	1,31	1,31	40,51	2,17E+08	4,42E+06	8901	1,37	0,63	40,12	3,49E+07	4,10E+05	11003	3,24	8,48	41,74	1,76E+07	3,26E+05
5892	4,40	4,44	40,26	2,89E+07	3,94E+05	8902	1,35	0,85	40,12	4,65E+07	4,59E+05	11004	3,17	3,62	41,74	3,33E+07	3,79E+05
5893	2,39	2,27	40,26	2,37E+07	4,50E+05	8903	3,67	3,67	39,58	5,28E+07	7,37E+05	11005	3,13	1,02	41,74	9,10E+06	2,11E+05
5894	1,38	0,62	40,26	3,44E+07	7,49E+05	8904	3,28	2,84	39,58	2,09E+07	4,99E+05	11006	3,12	1,84	41,74	6,24E+07	6,82E+05
5895	4,10	4,09	40,01	1,77E+07	4,19E+05	8905	3,26	4,79	39,58	7,46E+06	1,56E+05	11007	3,09	3,36	41,74	1,25E+07	5,05E+05
5896	3,92	3,92	40,01	1,92E+07	3,93E+05	8906	3,26	3,27	39,58	2,40E+08	3,39E+06	11008	3,09	1,54	41,74	3,91E+07	3,55E+05
5897	3,82	3,83	40,01	1,84E+07	3,87E+05	8907	3,06	3,06	39,58	8,67E+08	7,05E+06	11009	3,06	5,18	41,74	5,54E+06	2,65E+05
5898	3,64	3,65	40,01	1,26E+08	2,29E+06	8908	3,01	9,00	39,58	1,65E+07	2,37E+05	11010	3,05	9,04	41,74	3,00E+07	3,60E+05
5899	3,08	2,70	40,01	2,55E+07	6,68E+05	8909	3,01	1,84	39,58	2,44E+07	1,83E+05	11011	3,03	7,05	41,74	1,69E+07	3,26E+05
5900	3,07	4,61	40,01	1,92E+07	3,88E+05	8910	2,95	7,05	39,58	1,40E+07	1,58E+05	11012	3,03	4,23	41,74	4,44E+07	8,33E+05
5901	3,02	9,04	40,01	4,69E+07	8,07E+05	8911	2,91	9,04	39,58	1,13E+07	1,64E+05	11013	3,02	6,57	41,74	1,06E+07	5,07E+05
5902	2,93	9,04	40,01	2,09E+07	5,21E+05	8912	2,83	4,53	39,58	1,98E+07	2,34E+05	11014	3,02	4,79	41,74	1,37E+08	1,63E+06
5903	2,93	8,34	40,01	2,21E+07	4,84E+0												

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5917	2,95	7,39	39,77	3,94E+07	4,81E+05	8927	2,72	3,23	39,04	3,64E+07	3,58E+05	11029	2,88	8,96	41,74	8,08E+06	2,11E+05
5918	2,95	2,96	39,77	1,10E+09	1,41E+07	8928	2,47	2,49	39,04	1,27E+08	6,30E+05	11030	2,80	3,45	41,74	8,78E+06	2,24E+05
5919	2,95	2,35	39,77	2,04E+07	4,02E+05	8929	1,70	9,13	39,04	1,91E+07	2,47E+05	11031	2,80	0,76	41,74	2,07E+07	3,75E+05
5920	2,84	3,31	39,77	4,70E+07	1,09E+06	8930	1,68	1,67	39,04	2,34E+08	2,85E+06	11032	2,79	2,80	41,74	3,87E+09	6,05E+07
5921	2,75	2,79	39,77	1,20E+09	1,67E+07	8931	1,68	0,72	39,04	5,14E+07	5,88E+05	11033	2,77	4,79	41,74	9,94E+07	1,78E+06
5922	2,74	7,56	39,77	3,59E+07	5,99E+05	8932	1,53	0,85	39,04	2,57E+07	2,18E+05	11034	2,77	2,10	41,74	1,48E+07	2,87E+05
5923	2,72	7,82	39,77	3,03E+07	5,09E+05	8933	3,39	2,71	38,50	5,70E+06	1,56E+05	11035	2,77	1,41	41,74	6,86E+07	1,13E+06
5924	2,23	0,96	39,77	3,48E+07	6,90E+05	8934	2,92	2,71	38,50	1,82E+08	1,39E+06	11036	2,76	3,10	41,74	6,63E+07	5,51E+05
5925	0,85	0,88	39,77	4,95E+06	4,33E+05	8935	2,91	4,92	38,50	1,11E+07	1,75E+05	11037	2,73	1,93	41,74	1,92E+07	2,69E+05
5926	3,47	3,48	39,52	4,42E+07	9,72E+05	8936	2,83	2,80	38,50	9,83E+08	9,43E+06	11038	2,73	1,67	41,74	5,22E+07	8,68E+05
5927	3,38	3,39	39,52	7,39E+07	1,51E+06	8937	2,69	8,61	38,50	9,63E+06	2,33E+05	11039	2,73	0,98	41,74	2,91E+07	6,74E+05
5928	3,27	4,78	39,52	1,28E+07	3,90E+05	8938	1,97	7,40	38,50	1,80E+07	2,31E+05	11040	2,65	3,01	41,74	1,46E+08	2,16E+06
5929	3,27	3,31	39,52	3,88E+08	8,60E+06	8939	1,97	4,14	38,50	1,28E+07	1,59E+05	11041	2,61	7,09	41,74	1,57E+07	3,10E+05
5930	3,03	8,78	39,52	2,26E+07	4,33E+05	8940	1,97	1,97	38,50	6,60E+08	8,77E+06	11042	2,61	4,62	41,74	3,00E+07	4,47E+05
5931	3,02	0,79	39,52	3,12E+07	4,34E+05	8941	1,83	1,84	38,50	5,25E+08	6,53E+06	11043	2,57	3,27	41,74	4,32E+07	4,55E+05
5932	3,00	7,39	39,52	3,87E+07	4,80E+05	8942	1,52	7,01	38,50	1,08E+07	2,51E+05	11044	2,53	2,84	41,74	8,63E+07	5,60E+05
5933	2,83	7,56	39,52	2,81E+07	4,76E+05	8943	1,52	1,50	38,50	1,10E+08	1,51E+06	11045	2,45	7,87	41,74	1,12E+07	2,60E+05
5934	2,81	2,79	39,52	1,02E+09	1,45E+07	8944	1,52	1,06	38,50	1,83E+07	1,71E+05	11046	2,45	2,45	41,74	4,09E+08	5,80E+06
5935	2,79	4,35	39,52	1,76E+07	3,89E+05	8945	1,50	1,97	38,50	1,63E+07	1,69E+05	11047	2,43	3,23	41,74	5,20E+07	3,69E+05
5936	2,49	2,70	39,52	3,85E+07	4,04E+05	8946	1,49	0,80	38,50	2,48E+07	1,56E+05	11048	2,42	2,80	41,74	5,44E+07	5,34E+05
5937	2,20	2,18	39,52	6,44E+07	1,98E+06	8947	3,37	3,36	37,96	6,11E+07	1,10E+06	11049	2,41	4,10	41,74	8,75E+06	2,64E+05
5938	0,93	0,96	39,52	6,61E+07	1,79E+06	8948	2,90	2,88	37,96	6,73E+08	7,73E+06	11050	2,39	3,01	41,74	1,25E+07	2,29E+05
5939	4,40	0,79	39,27	2,17E+07	3,92E+05	8949	2,83	4,79	37,96	1,02E+07	2,36E+05	11051	2,32	3,06	41,74	1,19E+07	2,37E+05
5940	4,25	4,26	39,27	2,52E+07	3,93E+05	8950	2,83	4,27	37,96	8,93E+06	1,55E+05	11052	2,31	2,67	41,74	2,90E+07	2,36E+05
5941	3,09	8,69	39,27	3,14E+07	4,55E+05	8951	2,75	4,32	37,96	8,38E+06	1,56E+05	11053	2,17	2,80	41,74	1,61E+07	2,43E+05
5942	3,09	7,13	39,27	3,35E+07	3,95E+05	8952	2,75	3,41	37,96	2,51E+07	2,85E+05	11054	2,13	2,84	41,74	1,37E+07	2,18E+05
5943	3,04	7,13	39,27	3,85E+07	5,39E+05	8953	2,73	4,79	37,96	1,45E+07	2,11E+05	11055	1,93	3,01	41,74	2,10E+07	3,70E+05
5944	4,50	4,52	39,03	2,92E+07	5,16E+05	8954	2,73	2,75	37,96	1,13E+09	1,17E+07	11056	1,90	0,93	41,74	3,28E+07	3,50E+05
5945	3,24	2,70	39,03	5,36E+07	1,02E+06	8955	2,72	2,49	37,96	9,25E+07	2,85E+05	11057	1,89	8,05	41,74	2,11E+07	4,36E+05
5946	3,16	3,13	39,03	5,03E+08	7,75E+06	8956	2,64	2,28	37,96	2,61E+07	1,57E+05	11058	1,87	1,89	41,74	4,18E+08	5,00E+06
5947	2,75	8,60	39,03	2,49E+07	3,98E+05	8957	1,98	1,32	37,96	1,49E+07	1,83E+05	11059	1,87	0,80	41,74	3,06E+07	3,77E+05
5948	2,72	3,22	39,03	5,46E+07	1,02E+06	8958	1,97	1,11	37,96	2,17E+07	2,05E+05	11060	1,85	4,10	41,74	1,70E+07	2,01E+05
5949	2,57	2,53	39,03	9,18E+07	1,09E+06	8959	1,95	8,48	37,96	1,98E+07	2,49E+05	11061	1,82	7,79	41,74	2,33E+07	5,45E+05
5950	1,69	0,79	39,03	5,95E+07	9,28E+05	8960	1,95	8,13	37,96	1,75E+07	1,81E+05	11062	1,82	1,80	41,74	4,15E+08	5,66E+06
5951	1,68	1,66	39,03	2,19E+08	4,48E+06	8961	1,95	1,63	37,96	4,38E+07	3,17E+05	11063	1,72	2,80	41,74	1,44E+07	2,23E+05
5952	3,23	8,60	38,78	1,98E+07	4,03E+05	8962	1,95	0,89	37,96	1,02E+08	1,25E+06	11064	1,70	3,01	41,74	5,39E+07	1,62E+06
5953	3,23	3,22	38,78	3,89E+08	6,30E+06	8963	1,94	7,79	37,96	3,05E+07	4,65E+05	11065	1,68	7,74	41,74	1,91E+07	3,18E+05
5954	2,71	8,60	38,78	2,12E+07	4,19E+05	8964	1,94	4,40	37,96	8,58E+06	1,83E+05	11066	1,68	4,10	41,74	1,17E+07	2,68E+05
5955	1,71	9,12	38,78	2,10E+07	4,44E+05	8965	1,94	3,93	37,96	1,65E+07	2,08E+05	11067	1,67	8,05	41,74	7,50E+06	2,02E+05
5956	4,57	5,56	38,53	1,23E+07	4,06E+05	8966	3,01	7,14	37,43	6,33E+06	1,58E+05	11068	1,67	0,89	41,74	2,51E+07	3,50E+05
5957	4,50	1,40	38,53	1,33E+07	4,08E+05	8967	2,99	8,91	37,43	1,06E+07	1,58E+05	11069	1,23	4,10	41,74	7,25E+06	2,29E+05
5958	4,49	9,99	38,53	1,86E+07	4,09E+05	8968	2,99	0,89	37,43	1,29E+07	1,85E+05	11070	3,62	4,40	41,20	1,51E+07	2,18E+05
5959	4,44	4,44	38,53	2,51E+07	4,10E+05	8969	2,98	8,57	37,43	8,81E+06	2,23E+05	11071	3,61	8,57	41,20	1,70E+07	3,28E+05
5960	3,73	3,74	38,53	2,09E+07	4,34E+05	8970	2,75	2,23	37,43	2,59E+07	2,59E+05	11072	3,61	2,54	41,20	1,76E+07	3,48E+05
5961	2,71	2,70	38,53	1,09E+09	1,60E+07	8971	2,75	1,93	37,43	2,26E+07	2,43E+05	11073	3,59	3,58	41,20	1,10E+08	1,67E+06
5962	1,99	7,47	38,53	3,08E+07	5,67E+05	8972	1,95	2,75	37,43	1,86E+07	2,89E+05	11074	3,28	2,54	41,20	4,24E+07	4,96E+05
5963	1,99	4,18	38,53	1,98E+07	4,10E+05	8973	1,78	2,23	37,43	3,29E+07	2,76E+05	11075	3,25	7,61	41,20	1,56E+07	2,69E+05
5964	1,85	1,83	38,53	2,94E+08	5,86E+06	8974	3,17	2,54	36,89	2,82E+07	5,91E+05	11076	3,25	0,93	41,20	8,08E+06	2,04E+05
5965	1,53	7,04	38,53	2,18E+07	5,30E+05	8975	3,16	3,36	36,89	2,92E+07	1,60E+05	11077	3,22	9,17	41,20	1,52E+07	2,08E+05
5966	1,53	1,57	38,53	1,30E+08	2,62E+06	8976	3,14	7,53	36,89	1,04E+07	1,73E+05	11078	2,94	7,61	41,20	7,80E+06	2,03E+05
5967	1,53	0,79	38,53	2,56E+07	4,13E+05	8977	3,14	3,14	36,89	2,25E+08	4,85E+06	11079	2,75	2,06	41,20	2,04E+07	2,17E+05
5968	1,53	0,62	38,53	2,45E+07	4,88E+05	8978	2,96	2,23	36,89	8,45E+06	1,61E+05	11080	2,61	7,66	41,20	1,25E+07	2,04E+05
5969	4,52	0,62	38,29	1,22E+07	4,10E+05	8979	2,56	3,14	36,89	2,62E+07	5,89E+05	11081	2,61	2,62	41,20	1,94E+09	3,29E+07
5970	3,64	3,65	38,29	2,89E+07	4,25E+05	8980	2,54	2,54	36,89	2,83E+08	5,24E+06	11082	2,61	2,06	41,20	1,11E+07	2,00E+05
5971	3,40	2,79	38,29	3,27E+07	6,61E+05	8981	2,50	0,85	36,89	2,44E+07	4,49E+05	11083	2,61	1,50	41,20	8,82E+06	2,35E+05
5972	2,96	2,44	38,29	1,03E+07	3,81E+05	8982	1,82	1,41	36,89	2,39E+07	1,92E+05	11084	2,61	0,93	41,20	1,74E+07	3,66E+05
5973	2,91	2,87	38,29	8,93E+08	1,74E+07	8983	1,80	1,80	36,89	4,07E+08	2,85E+06	11085	2,60	1,93	41,20	8,01E+06	2,30E+05
5974	2,72	7,65	38,29	2,50E+07	3,80E+05	8984	1,80	0,72	36,89	4,15E+07	3,25E+05	11086	2,56	2,23	41,20	2,03E+07	2,29E+05
5975	2,55	2,53	38,29	4,56E+07	9,74E+05	8985	1,78	1,45	36,89	2,93E+07	1,71E+05	11087	2,54	4,79	41,20	1,66E+07	2,51E+05
5976	1,97	2,01	38,29	8,49E+08	1,64E+07	8986	1,70	2,10	36,89	2,52E+07	1,56E+05	11088	2,54	3,62	41,20	2,74E+07	5,04E+05
5977	3,58	3,57	38,04	2,77E+07	5,35E+05	8987	2,35	2,58	36,35	3,69E+07	6,24E+05	11089	2,53	8,57	41,20	1,55E+07	2,09E+05
5978	3,46	3,48	38,04	4,88E+07	9,33E+05	8988	2,35	2,36	36,35	1,84E+09	3,12E+07	11090	2,53	7,66	41,20	1,64E+07	3,33E+05
5979	2,84	2,87	38,04	9,01E+08	1,68E+07												

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
5993	3,00	8,60	37,30	3,12E+07	5,85E+05	9003	2,24	2,23	35,81	2,88E+09	3,32E+07	11105	1,48	0,72	41,20	5,36E+07	7,17E+05
5994	3,00	7,13	37,30	2,70E+07	5,14E+05	9004	2,24	2,02	35,81	4,61E+08	2,45E+06	11106	1,47	9,13	41,20	1,10E+07	3,16E+05
5995	3,00	3,05	37,30	4,65E+08	7,02E+06	9005	2,20	2,58	35,81	4,01E+07	1,79E+05	11107	3,59	4,45	40,66	9,80E+06	2,22E+05
5996	3,00	0,88	37,30	2,06E+07	4,66E+05	9006	2,10	7,61	35,81	9,03E+06	1,68E+05	11108	3,06	4,01	40,66	1,46E+07	2,95E+05
5997	3,30	3,31	37,06	6,53E+07	1,43E+06	9007	2,01	2,02	35,81	5,58E+08	4,24E+06	11109	3,02	4,01	40,66	1,38E+07	2,36E+05
5998	3,18	2,61	37,06	5,44E+07	1,41E+06	9008	2,00	1,63	35,81	3,96E+07	2,05E+05	11110	2,61	8,09	40,66	9,13E+06	2,62E+05
5999	2,57	3,22	37,06	5,35E+07	1,34E+06	9009	2,23	3,97	35,27	1,11E+07	2,06E+05	11111	2,61	4,40	40,66	1,64E+07	2,01E+05
6000	2,56	7,82	37,06	1,20E+07	3,82E+05	9010	2,09	0,72	35,27	6,26E+07	5,15E+05	11112	2,05	0,85	40,66	2,85E+07	3,10E+05
6001	2,41	2,70	37,06	1,27E+07	5,88E+05	9011	2,01	0,80	35,27	5,78E+07	3,30E+05	11113	2,04	7,40	40,66	1,44E+07	2,65E+05
6002	4,44	4,44	36,81	2,26E+07	4,03E+05	9012	1,90	0,85	35,27	7,22E+07	5,11E+05	11114	2,04	2,02	40,66	2,28E+08	2,15E+06
6003	3,17	7,56	36,81	2,06E+07	4,20E+05	9013	1,89	5,23	35,27	9,81E+06	1,67E+05	11115	1,36	2,06	40,66	2,42E+07	4,45E+05
6004	3,16	3,13	36,81	4,08E+08	1,14E+07	9014	1,63	1,02	35,27	2,47E+07	1,66E+05	11116	1,34	4,14	40,66	1,42E+07	2,75E+05
6005	2,55	2,53	36,81	4,62E+08	1,11E+07	9015	2,21	8,96	34,73	1,98E+07	2,81E+05	11117	1,34	2,23	40,66	1,60E+07	2,54E+05
6006	2,51	0,88	36,81	4,42E+07	9,64E+05	9016	2,20	1,32	34,73	1,95E+07	1,68E+05	11118	1,34	1,32	40,66	2,23E+08	3,15E+06
6007	1,81	1,83	36,81	2,40E+08	5,40E+06	9017	2,20	0,80	34,73	3,77E+07	3,07E+05	11119	1,34	0,85	40,66	4,68E+07	5,02E+05
6008	1,81	0,70	36,81	4,29E+07	8,57E+05	9018	2,09	9,52	34,73	5,77E+06	1,62E+05	11120	3,09	4,62	40,12	1,97E+07	2,05E+05
6009	2,28	8,08	36,56	4,80E+07	5,73E+05	9019	2,00	8,09	34,73	1,52E+07	2,70E+05	11121	3,03	9,04	40,12	2,93E+07	3,72E+05
6010	2,28	7,04	36,56	2,86E+07	3,87E+05	9020	2,00	4,75	34,73	1,89E+07	1,60E+05	11122	3,03	8,31	40,12	1,21E+07	2,10E+05
6011	2,23	8,08	36,56	4,86E+07	5,76E+05	9021	1,76	0,72	34,73	5,68E+07	5,15E+05	11123	3,03	4,49	40,12	1,82E+07	2,45E+05
6012	2,11	2,09	36,56	6,21E+08	1,07E+07	9022	1,75	7,83	34,73	1,20E+07	1,89E+05	11124	3,03	1,02	40,12	1,45E+07	2,69E+05
6013	2,04	0,88	36,56	2,61E+07	3,86E+05	9023	1,65	0,89	34,73	3,07E+07	2,00E+05	11125	3,01	4,45	40,12	1,80E+07	2,40E+05
6014	2,28	7,91	36,32	4,36E+07	4,94E+05	9024	1,63	1,63	34,73	4,75E+08	2,65E+06	11126	2,99	1,84	40,12	1,72E+07	2,57E+05
6015	2,28	2,27	36,32	3,31E+09	6,04E+07	9025	1,61	0,80	34,73	2,93E+07	2,43E+05	11127	2,97	3,71	40,12	2,65E+07	4,44E+05
6016	0,94	2,27	36,32	3,18E+07	3,97E+05	9026	1,44	1,67	34,73	7,30E+07	3,78E+05	11128	2,97	2,97	40,12	3,58E+09	9,51E+06
6017	2,48	2,87	36,07	2,22E+07	4,55E+05	9027	1,42	1,41	34,73	1,34E+08	1,08E+06	11129	2,95	7,57	40,12	1,39E+07	2,08E+05
6018	2,37	8,78	36,07	1,62E+07	4,21E+05	9028	1,42	0,85	34,73	2,54E+07	1,76E+05	11130	2,95	3,93	40,12	3,40E+07	4,29E+05
6019	2,37	6,95	36,07	2,06E+07	4,35E+05	9029	3,01	1,80	34,19	2,53E+07	2,87E+05	11131	2,94	9,04	40,12	2,52E+07	3,65E+05
6020	2,35	7,99	36,07	3,83E+07	7,17E+05	9030	2,98	3,01	34,19	9,49E+07	1,49E+06	11132	2,94	8,31	40,12	1,85E+07	2,90E+05
6021	2,35	2,35	36,07	3,00E+09	7,61E+07	9031	2,95	1,93	34,19	1,17E+07	1,56E+05	11133	2,94	7,31	40,12	2,54E+07	3,11E+05
6022	2,33	8,34	36,07	3,94E+07	5,72E+05	9032	2,75	2,45	34,19	1,53E+07	1,85E+05	11134	2,94	4,40	40,12	1,38E+07	2,01E+05
6023	2,27	8,43	36,07	3,66E+07	3,91E+05	9033	2,53	1,97	34,19	1,13E+07	1,96E+05	11135	2,80	8,35	40,12	9,45E+06	2,18E+05
6024	2,11	0,79	36,07	3,37E+07	6,97E+05	9034	1,91	7,79	34,19	1,96E+07	2,01E+05	11136	2,80	4,79	40,12	5,89E+07	3,30E+05
6025	2,04	0,79	36,07	3,03E+07	3,96E+05	9035	1,86	2,36	34,19	2,79E+07	1,65E+05	11137	2,75	7,31	40,12	2,42E+07	4,15E+05
6026	2,01	2,01	36,07	5,09E+08	8,14E+06	9036	1,85	3,01	34,19	1,47E+07	2,03E+05	11138	2,73	7,79	40,12	1,37E+07	2,77E+05
6027	1,88	2,27	36,07	1,15E+08	1,09E+06	9037	3,11	2,67	33,65	8,50E+06	1,72E+05	11139	1,41	4,19	40,12	9,39E+06	2,74E+05
6028	1,77	2,27	36,07	9,74E+07	1,02E+06	9038	2,99	0,93	33,65	1,53E+07	2,05E+05	11140	1,41	0,67	40,12	4,95E+07	7,16E+05
6029	1,72	2,27	36,07	8,77E+07	8,40E+05	9039	2,66	3,10	33,65	1,18E+07	1,96E+05	11141	1,40	7,31	40,12	2,38E+07	5,60E+05
6030	1,67	2,27	36,07	7,54E+07	8,01E+05	9040	2,56	7,61	33,65	7,54E+06	1,55E+05	11142	1,40	1,41	40,12	2,66E+08	3,85E+06
6031	1,57	2,27	36,07	6,54E+07	7,49E+05	9041	2,56	2,54	33,65	5,86E+08	8,18E+06	11143	1,40	0,89	40,12	5,14E+07	6,73E+05
6032	1,46	2,27	36,07	4,67E+07	5,93E+05	9042	2,56	2,23	33,65	4,83E+07	4,72E+05	11144	0,99	2,23	40,12	1,11E+07	2,77E+05
6033	1,40	2,27	36,07	3,82E+07	4,00E+05	9043	2,45	4,27	33,65	7,54E+06	1,59E+05	11145	3,73	3,71	39,58	6,07E+07	1,03E+06
6034	1,30	2,27	36,07	3,40E+07	3,84E+05	9044	2,36	0,85	33,65	2,36E+07	2,58E+05	11146	3,32	2,88	39,58	4,94E+07	8,82E+05
6035	1,16	2,35	36,07	3,66E+07	4,60E+05	9045	2,32	2,32	33,65	1,22E+09	1,11E+07	11147	3,29	7,57	39,58	5,07E+06	2,41E+05
6036	1,13	2,27	36,07	4,48E+07	4,66E+05	9046	2,31	7,01	33,65	6,90E+06	1,65E+05	11148	3,29	4,79	39,58	1,78E+07	3,55E+05
6037	1,08	2,27	36,07	4,51E+07	4,47E+05	9047	1,90	9,22	33,65	1,42E+07	1,64E+05	11149	3,29	4,58	39,58	1,05E+07	3,72E+05
6038	1,05	2,27	36,07	4,54E+07	4,52E+05	9048	1,89	0,85	33,65	9,28E+07	5,97E+05	11150	3,29	3,27	39,58	3,56E+08	5,54E+06
6039	0,99	2,27	36,07	4,14E+07	5,05E+05	9049	1,67	1,15	33,65	2,85E+07	2,14E+05	11151	3,20	2,75	39,58	2,52E+07	2,17E+05
6040	2,25	4,09	35,82	2,24E+07	4,10E+05	9050	1,60	1,11	33,65	3,49E+07	2,73E+05	11152	3,09	3,10	39,58	1,26E+09	1,11E+07
6041	2,11	7,65	35,82	1,46E+07	4,43E+05	9051	1,48	0,85	33,65	3,10E+07	1,61E+05	11153	3,02	3,01	39,58	1,82E+09	7,77E+06
6042	1,91	1,92	35,33	2,08E+08	4,45E+06	9052	1,41	0,67	33,65	1,67E+07	1,58E+05	11154	2,99	7,05	39,58	2,89E+07	4,41E+05
6043	1,91	0,88	35,33	4,66E+07	7,87E+05	9053	3,07	3,10	33,11	1,15E+08	1,23E+06	11155	2,94	7,87	39,58	1,83E+07	2,66E+05
6044	5,32	3,31	35,08	3,54E+06	3,90E+05	9054	2,65	2,62	33,11	1,83E+08	1,02E+06	11156	2,87	4,62	39,58	1,57E+07	2,63E+05
6045	2,74	2,87	35,08	5,60E+07	7,45E+05	9055	2,43	2,45	33,11	1,69E+09	3,46E+07	11157	2,87	3,32	39,58	5,23E+07	8,17E+05
6046	2,23	8,95	35,08	2,95E+07	4,86E+05	9056	2,43	2,02	33,11	4,03E+07	6,20E+05	11158	2,86	7,57	39,58	1,85E+07	3,62E+05
6047	2,01	8,08	35,08	2,30E+07	4,74E+05	9057	2,05	2,06	33,11	2,15E+09	2,55E+07	11159	2,84	3,49	39,58	1,58E+07	2,29E+05
6048	2,01	2,01	35,08	4,19E+08	6,86E+06	9058	2,02	9,22	33,11	1,62E+07	1,64E+05	11160	2,84	0,85	39,58	1,39E+07	2,60E+05
6049	2,01	0,96	35,08	3,59E+07	6,04E+05	9059	1,98	9,22	33,11	1,76E+07	1,72E+05	11161	2,82	4,36	39,58	2,87E+07	2,64E+05
6050	1,78	1,83	35,08	2,73E+08	4,57E+06	9060	1,80	1,80	33,11	2,32E+09	2,15E+07	11162	2,77	7,57	39,58	1,57E+07	3,59E+05
6051	1,78	0,70	35,08	5,29E+07	1,01E+06	9061	1,75	1,45	33,11	1,25E+08	1,19E+06	11163	2,77	4,49	39,58	3,20E+07	3,66E+05
6052	5,33	4,00	34,84	1,24E+07	3,86E+05	9062	1,68	8,48	33,11	1,52E+07	2,34E+05	11164	2,76	7,09	39,58	1,83E+07	2,06E+05
6053	3,47	3,48	34,84	1,88E+07	4,13E+05	9063	1,68	1,67	33,11	1,05E+09	1,76E+07	11165	2,73	9,87	39,58	9,22E+06	2,03E+05
6054	2,74	2,61	34,84	3,72E+07	4,99E+05	9064	1,45	1,71	33,11	1,03E+08	9,44E+05	11166	2,38	2,36	39,58	5,49E+07	3,79E+05
6055	2,21	0,79	34,84	2,43E+07	4,71E+05												

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6069	3,30	3,31	34,10	2,92E+07	7,09E+05	9079	1,44	1,45	32,57	4,03E+08	5,53E+06	11181	2,53	2,54	39,04	2,08E+08	1,57E+06
6070	3,02	3,05	34,10	2,56E+08	4,41E+06	9080	1,42	9,95	32,57	4,19E+06	1,60E+05	11182	2,24	1,84	39,04	1,84E+07	2,10E+05
6071	3,00	0,96	34,10	1,74E+07	4,17E+05	9081	1,25	1,93	32,57	1,90E+07	2,01E+05	11183	1,74	9,13	39,04	2,06E+07	3,84E+05
6072	2,23	2,27	34,10	9,31E+08	1,64E+07	9082	1,22	1,58	32,57	3,11E+07	1,79E+05	11184	1,72	9,30	39,04	1,61E+07	2,82E+05
6073	1,94	7,82	34,10	1,30E+07	4,32E+05	9083	1,16	0,89	32,57	4,33E+07	2,25E+05	11185	1,72	4,01	39,04	1,09E+07	2,03E+05
6074	3,00	0,53	33,85	1,50E+07	3,92E+05	9084	2,76	0,80	32,04	8,69E+06	1,56E+05	11186	1,72	1,71	39,04	2,97E+08	4,23E+06
6075	2,57	7,65	33,85	2,03E+07	4,59E+05	9085	2,75	2,75	32,04	1,02E+08	1,88E+06	11187	1,72	0,76	39,04	5,98E+07	8,70E+05
6076	2,56	2,53	33,85	9,35E+08	1,75E+07	9086	2,54	2,19	32,04	3,10E+07	2,12E+05	11188	1,56	0,85	39,04	2,00E+07	2,65E+05
6077	2,52	2,53	33,85	1,24E+09	1,80E+07	9087	2,47	2,06	32,04	2,84E+07	3,11E+05	11189	3,25	8,61	38,50	9,16E+06	2,33E+05
6078	2,34	2,35	33,85	1,21E+09	2,10E+07	9088	2,36	4,45	32,04	2,09E+07	2,45E+05	11190	3,12	2,10	38,50	1,29E+07	2,23E+05
6079	1,86	2,35	33,85	6,63E+07	7,21E+05	9089	2,36	1,97	32,04	1,27E+08	1,28E+06	11191	2,94	4,92	38,50	1,97E+07	3,37E+05
6080	1,66	2,35	33,85	3,91E+07	4,61E+05	9090	2,20	0,85	32,04	9,21E+07	8,72E+05	11192	2,94	2,93	38,50	1,15E+09	1,41E+07
6081	3,10	2,70	33,60	2,55E+07	7,75E+05	9091	2,19	9,22	32,04	1,39E+07	2,07E+05	11193	2,86	2,84	38,50	1,51E+09	1,82E+07
6082	2,88	2,87	33,60	7,69E+07	1,27E+06	9092	2,17	2,71	32,04	3,60E+07	3,98E+05	11194	2,73	8,61	38,50	1,70E+07	3,04E+05
6083	2,77	2,79	33,60	1,07E+08	2,02E+06	9093	2,17	2,19	32,04	1,39E+09	1,23E+07	11195	2,13	1,80	38,50	1,90E+07	2,10E+05
6084	2,71	3,13	33,60	3,94E+07	6,86E+05	9094	2,08	4,36	32,04	2,04E+07	1,72E+05	11196	2,02	4,19	38,50	1,76E+07	3,32E+05
6085	2,44	6,87	33,60	2,81E+07	4,58E+05	9095	2,02	2,67	32,04	2,21E+07	1,71E+05	11197	2,01	7,44	38,50	2,53E+07	5,24E+05
6086	2,37	0,88	33,60	2,36E+07	4,18E+05	9096	2,00	4,45	32,04	2,30E+07	1,94E+05	11198	2,01	2,02	38,50	8,64E+08	1,30E+07
6087	2,05	2,09	33,60	1,55E+09	3,36E+07	9097	1,98	8,39	32,04	3,41E+07	2,38E+05	11199	2,01	1,19	38,50	1,78E+07	2,92E+05
6088	1,92	9,21	33,60	2,01E+07	4,21E+05	9098	1,98	3,93	32,04	3,02E+07	2,98E+05	11200	1,87	1,89	38,50	9,15E+08	1,41E+07
6089	1,92	2,44	33,60	6,50E+07	6,78E+05	9099	1,97	2,32	32,04	1,40E+08	1,40E+06	11201	1,56	7,05	38,50	1,70E+07	3,98E+05
6090	1,90	1,40	33,60	2,82E+07	3,93E+05	9100	1,97	1,58	32,04	1,32E+08	6,63E+05	11202	1,56	0,63	38,50	1,81E+07	3,39E+05
6091	1,90	0,88	33,60	6,74E+07	9,65E+05	9101	1,93	7,53	32,04	2,29E+07	2,89E+05	11203	1,55	1,54	38,50	1,13E+08	2,00E+06
6092	1,87	8,86	33,60	1,69E+07	4,12E+05	9102	1,90	8,00	32,04	3,10E+07	3,46E+05	11204	1,55	1,19	38,50	1,48E+07	2,00E+05
6093	1,82	1,83	33,60	1,58E+09	3,19E+07	9103	1,85	4,32	32,04	2,75E+07	1,95E+05	11205	3,43	2,80	37,96	1,48E+07	3,04E+05
6094	1,77	2,44	33,60	5,15E+07	4,82E+05	9104	1,79	3,97	32,04	2,70E+07	2,13E+05	11206	3,42	3,41	37,96	8,29E+07	1,65E+06
6095	1,72	2,44	33,60	4,39E+07	5,37E+05	9105	1,70	2,06	32,04	1,02E+08	4,38E+05	11207	3,09	2,75	37,96	2,99E+07	2,13E+05
6096	1,60	1,14	33,60	2,03E+07	4,85E+05	9106	1,44	0,80	32,04	4,86E+07	4,66E+05	11208	2,86	4,79	37,96	1,57E+07	3,29E+05
6097	1,35	1,83	33,60	7,39E+07	7,03E+05	9107	1,42	8,13	32,04	1,40E+07	2,02E+05	11209	2,86	4,32	37,96	8,32E+06	2,67E+05
6098	1,12	1,66	33,60	5,63E+07	6,51E+05	9108	1,37	0,76	32,04	3,56E+07	1,88E+05	11210	2,77	4,79	37,96	3,24E+07	4,15E+05
6099	3,31	3,31	33,36	2,86E+07	5,72E+05	9109	1,22	0,85	32,04	4,26E+07	2,09E+05	11211	2,77	4,32	37,96	2,23E+07	3,41E+05
6100	3,08	3,05	33,36	2,30E+08	4,25E+06	9110	0,82	1,41	32,04	2,87E+07	3,42E+05	11212	2,77	3,45	37,96	2,26E+07	2,83E+05
6101	2,70	2,70	33,36	2,12E+08	4,78E+06	9111	0,81	0,80	32,04	1,87E+08	2,14E+06	11213	2,76	6,92	37,96	9,84E+06	2,03E+05
6102	2,44	7,82	33,36	3,32E+07	5,67E+05	9112	3,07	4,84	31,50	9,28E+06	1,68E+05	11214	2,00	2,75	37,96	2,80E+07	3,61E+05
6103	1,68	1,66	33,36	1,35E+09	2,47E+07	9113	2,62	1,93	31,50	3,48E+07	3,89E+05	11215	1,98	8,52	37,96	2,60E+07	4,83E+05
6104	1,35	2,01	33,36	5,94E+07	5,92E+05	9114	2,53	1,97	31,50	3,29E+07	2,14E+05	11216	1,98	8,18	37,96	2,52E+07	3,59E+05
6105	1,32	1,83	33,36	8,00E+07	6,94E+05	9115	2,35	2,36	31,50	9,58E+08	8,61E+06	11217	1,98	7,79	37,96	5,21E+07	9,31E+05
6106	1,27	1,83	33,36	7,52E+07	6,57E+05	9116	2,30	4,36	31,50	3,38E+07	3,80E+05	11218	1,98	4,45	37,96	2,06E+07	2,69E+05
6107	1,22	1,75	33,36	6,73E+07	6,23E+05	9117	2,30	0,93	31,50	4,46E+07	4,90E+05	11219	1,98	4,01	37,96	1,88E+07	4,25E+05
6108	1,13	1,83	33,36	6,47E+07	5,53E+05	9118	2,27	2,28	31,50	1,20E+09	1,32E+07	11220	1,98	2,58	37,96	1,47E+07	2,02E+05
6109	1,11	1,14	33,36	6,93E+07	1,75E+06	9119	2,27	1,89	31,50	1,73E+08	1,42E+06	11221	1,98	0,89	37,96	1,50E+08	2,07E+06
6110	1,10	7,99	33,36	1,72E+07	3,88E+05	9120	2,25	8,91	31,50	1,67E+07	1,66E+05	11222	1,97	1,63	37,96	3,07E+07	2,97E+05
6111	1,07	1,75	33,36	5,73E+07	5,08E+05	9121	2,24	2,62	31,50	3,13E+07	2,42E+05	11223	3,03	8,61	37,43	1,67E+07	2,90E+05
6112	0,44	0,44	33,36	1,33E+07	4,67E+05	9122	2,24	2,23	31,50	1,31E+09	1,24E+07	11224	3,02	4,40	37,43	9,74E+06	2,09E+05
6113	4,52	4,52	33,11	1,95E+07	4,53E+05	9123	2,23	4,40	31,50	4,14E+07	4,10E+05	11225	3,02	3,01	37,43	4,30E+08	3,47E+06
6114	2,44	2,44	33,11	2,34E+09	7,03E+07	9124	2,21	8,87	31,50	1,09E+07	2,17E+05	11226	3,02	0,85	37,43	1,67E+07	3,03E+05
6115	2,14	2,18	33,11	7,40E+08	8,29E+06	9125	2,20	1,28	31,50	1,36E+07	1,71E+05	11227	3,01	7,18	37,43	1,66E+07	2,54E+05
6116	1,69	8,51	33,11	4,45E+07	6,87E+05	9126	2,19	3,88	31,50	1,73E+07	1,73E+05	11228	3,01	1,02	37,43	1,26E+07	2,40E+05
6117	1,36	1,40	33,11	7,30E+07	1,52E+06	9127	2,17	2,54	31,50	4,32E+07	2,73E+05	11229	2,76	4,62	37,43	1,52E+07	2,64E+05
6118	1,20	1,22	33,11	3,22E+07	1,23E+06	9128	2,15	8,13	31,50	2,33E+07	2,80E+05	11230	2,76	2,02	37,43	2,59E+07	3,45E+05
6119	0,99	1,75	33,11	4,36E+07	4,32E+05	9129	2,15	7,74	31,50	1,31E+07	1,96E+05	11231	2,23	1,80	37,43	2,44E+07	3,34E+05
6120	5,36	4,09	32,86	7,16E+06	4,06E+05	9130	2,15	0,89	31,50	8,63E+07	6,28E+05	11232	1,83	2,15	37,43	3,01E+07	2,49E+05
6121	4,58	0,79	32,86	1,86E+07	3,80E+05	9131	2,06	8,52	31,50	2,78E+07	3,61E+05	11233	0,73	4,84	37,43	5,14E+06	2,41E+05
6122	4,43	4,44	32,86	1,60E+07	4,10E+05	9132	2,02	0,89	31,50	6,37E+07	3,16E+05	11234	3,20	2,58	36,89	4,54E+07	1,09E+06
6123	3,21	3,22	32,86	4,44E+07	8,27E+05	9133	1,98	8,91	31,50	1,87E+07	2,06E+05	11235	3,18	7,57	36,89	1,08E+07	3,01E+05
6124	2,00	0,79	32,86	3,88E+07	6,89E+05	9134	1,93	7,31	31,50	1,75E+07	1,65E+05	11236	3,18	3,19	36,89	3,21E+08	7,48E+06
6125	1,74	1,75	32,86	1,69E+09	2,48E+07	9135	1,93	1,93	31,50	3,38E+09	2,85E+07	11237	2,75	2,23	36,89	2,36E+07	2,48E+05
6126	1,46	1,75	32,86	1,56E+08	2,19E+06	9136	1,91	8,74	31,50	2,10E+07	2,84E+05	11238	2,60	4,58	36,89	1,54E+07	2,66E+05
6127	1,35	1,75	32,86	8,00E+07	7,53E+05	9137	1,91	8,35	31,50	5,10E+07	3,92E+05	11239	2,60	3,19	36,89	4,92E+07	1,04E+06
6128	1,01	1,22	32,86	2,61E+07	3,94E+05	9138	1,91	3,84	31,50	4,14E+07	3,50E+05	11240	2,57	2,58	36,89	3,59E+08	8,15E+06
6129	2,08	8,08	32,62	3,21E+07	4,87E+05	9139	1,90	7,79	31,50	5,14E+07	4,95E+05	11241	2,54	5,70	36,89	1,28E+07	2,66E+05
6130	2,08	2,09	32,62	1,51E+09	2,10E+07	9140	1,90	4,06	31,50	5,01E+07	3,79E+05	11242	2,53	0,89	36,89	3,81E+07	7,28E+05
6131	1,45	1,48	32,62	3,80E+08	8,10E+06												

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6145	0,99	1,92	32,12	6,20E+07	6,13E+05	9155	1,82	7,70	30,96	3,25E+07	2,43E+05	11257	2,39	1,76	36,35	8,72E+06	2,73E+05
6146	2,53	2,87	31,88	9,27E+06	3,87E+05	9156	1,80	3,97	30,96	2,94E+07	1,81E+05	11258	2,32	2,88	36,35	2,13E+07	2,49E+05
6147	2,21	0,79	31,88	1,04E+08	1,70E+06	9157	1,80	1,80	30,96	2,66E+09	1,65E+07	11259	2,31	1,58	36,35	1,22E+07	2,09E+05
6148	2,18	2,18	31,88	1,49E+09	2,46E+07	9158	1,79	1,39	30,96	2,77E+07	1,84E+05	11260	2,30	4,10	36,35	4,04E+07	4,68E+05
6149	2,13	1,66	31,88	1,77E+07	4,19E+05	9159	1,76	2,41	30,96	4,34E+07	2,63E+05	11261	2,30	2,28	36,35	4,20E+09	6,14E+07
6150	2,00	3,92	31,88	2,96E+07	4,49E+05	9160	1,75	0,72	30,96	5,17E+07	3,05E+05	11262	2,16	2,49	36,35	4,08E+07	2,39E+05
6151	1,99	8,95	31,88	3,52E+07	4,75E+05	9161	1,74	6,22	30,96	1,43E+07	1,55E+05	11263	2,15	2,15	36,35	9,11E+08	9,16E+06
6152	1,97	2,35	31,88	1,74E+08	2,59E+06	9162	1,68	6,27	30,96	8,83E+06	2,12E+05	11264	2,08	0,89	36,35	6,83E+07	3,76E+05
6153	1,97	2,01	31,88	2,88E+09	4,22E+07	9163	3,09	3,10	30,42	2,65E+08	2,35E+06	11265	2,07	8,78	36,35	1,47E+07	2,98E+05
6154	1,92	7,56	31,88	5,54E+07	6,07E+05	9164	2,39	4,14	30,42	9,29E+06	1,55E+05	11266	2,07	5,36	36,35	9,44E+06	2,20E+05
6155	1,91	8,34	31,88	9,05E+07	9,36E+05	9165	2,39	1,89	30,42	7,68E+07	9,47E+05	11267	2,07	4,79	36,35	1,84E+07	2,36E+05
6156	1,91	8,08	31,88	4,85E+07	7,02E+05	9166	2,39	0,89	30,42	1,59E+07	1,85E+05	11268	2,07	1,54	36,35	1,15E+07	2,13E+05
6157	1,46	0,88	31,88	3,81E+07	8,37E+05	9167	2,38	2,36	30,42	6,07E+08	4,68E+06	11269	2,39	2,97	35,81	1,59E+07	2,98E+05
6158	0,93	1,92	31,88	5,65E+07	5,18E+05	9168	1,89	4,79	30,42	2,74E+07	1,94E+05	11270	2,38	8,18	35,81	9,83E+06	2,69E+05
6159	0,92	1,48	31,88	4,56E+07	7,60E+05	9169	1,87	2,36	30,42	1,15E+08	7,85E+05	11271	2,35	8,39	35,81	2,15E+07	3,54E+05
6160	0,00	1,92	31,88	3,15E+07	3,83E+05	9170	1,83	8,26	30,42	2,76E+07	1,58E+05	11272	2,34	8,00	35,81	1,05E+07	2,09E+05
6161	2,35	4,44	31,63	2,95E+07	5,52E+05	9171	1,70	0,80	30,42	5,82E+07	3,00E+05	11273	2,34	2,75	35,81	9,00E+06	2,09E+05
6162	2,35	2,35	31,63	1,12E+09	2,20E+07	9172	1,63	8,57	30,42	1,16E+07	2,03E+05	11274	2,28	8,39	35,81	2,63E+07	2,55E+05
6163	2,21	4,44	31,63	5,87E+07	7,87E+05	9173	1,61	0,50	30,42	2,46E+07	2,06E+05	11275	2,27	4,79	35,81	1,23E+07	2,76E+05
6164	2,16	8,17	31,63	4,45E+07	7,35E+05	9174	1,40	0,89	30,42	4,51E+07	1,96E+05	11276	2,27	4,06	35,81	3,99E+07	4,08E+05
6165	2,05	2,53	31,63	6,27E+07	7,30E+05	9175	1,31	7,61	30,42	1,04E+07	2,11E+05	11277	2,27	2,97	35,81	1,96E+07	3,17E+05
6166	2,00	8,08	31,63	3,59E+07	4,64E+05	9176	1,31	0,02	30,42	6,42E+06	1,83E+05	11278	2,27	1,58	35,81	2,05E+07	2,58E+05
6167	1,81	4,35	31,63	2,40E+07	4,54E+05	9177	0,99	3,97	30,42	1,16E+07	1,84E+05	11279	2,17	2,58	35,81	2,85E+07	2,18E+05
6168	1,45	1,92	31,63	1,43E+08	1,31E+06	9178	0,96	0,93	30,42	3,10E+08	2,88E+06	11280	2,13	7,70	35,81	1,72E+07	3,69E+05
6169	1,45	1,48	31,63	2,97E+08	6,08E+06	9179	0,93	1,67	30,42	2,57E+07	2,27E+05	11281	2,13	4,84	35,81	2,66E+07	4,11E+05
6170	1,29	1,92	31,63	1,08E+08	9,49E+05	9180	2,71	2,71	29,88	3,66E+07	2,78E+05	11282	2,13	0,76	35,81	8,61E+07	7,41E+05
6171	1,05	1,92	31,63	7,28E+07	6,90E+05	9181	2,17	4,14	29,88	1,87E+07	1,64E+05	11283	2,04	2,02	35,81	6,63E+08	6,13E+06
6172	0,89	0,88	31,63	1,77E+08	4,44E+06	9182	2,16	1,63	29,88	2,32E+07	2,29E+05	11284	2,02	4,79	35,81	2,30E+07	2,45E+05
6173	0,64	1,92	31,63	5,10E+07	5,64E+05	9183	2,05	8,39	29,88	2,86E+07	2,82E+05	11285	2,26	8,96	35,27	3,18E+07	4,59E+05
6174	0,55	1,92	31,63	4,40E+07	4,66E+05	9184	2,02	8,09	29,88	2,52E+07	2,29E+05	11286	2,04	8,09	35,27	2,06E+07	3,81E+05
6175	0,40	1,92	31,63	3,49E+07	3,97E+05	9185	1,91	8,09	29,88	2,25E+07	2,39E+05	11287	2,04	4,62	35,27	1,62E+07	2,49E+05
6176	3,30	3,31	31,39	3,55E+07	6,93E+05	9186	1,89	-0,46	29,88	6,40E+06	1,61E+05	11288	2,04	0,93	35,27	6,94E+07	5,23E+05
6177	3,17	4,78	31,39	2,07E+07	4,89E+05	9187	1,87	4,23	29,88	3,35E+07	3,27E+05	11289	1,94	5,27	35,27	8,23E+06	2,52E+05
6178	2,32	0,96	31,39	4,67E+07	8,49E+05	9188	1,87	0,85	29,88	1,34E+08	1,25E+06	11290	1,93	8,74	35,27	9,40E+06	2,56E+05
6179	2,28	8,69	31,39	2,25E+07	3,82E+05	9189	1,86	8,31	29,88	2,75E+07	1,65E+05	11291	1,93	0,85	35,27	8,70E+07	6,49E+05
6180	2,28	1,83	31,39	4,02E+07	1,66E+06	9190	1,86	8,05	29,88	2,17E+07	2,05E+05	11292	1,90	1,19	35,27	1,15E+07	2,26E+05
6181	2,27	4,44	31,39	6,01E+07	7,56E+05	9191	1,86	7,27	29,88	1,60E+07	1,81E+05	11293	1,87	0,72	35,27	7,14E+07	3,33E+05
6182	2,27	2,27	31,39	1,50E+09	2,31E+07	9192	1,86	0,41	29,88	9,42E+06	1,90E+05	11294	1,81	0,76	35,27	6,77E+07	7,60E+05
6183	2,08	8,51	31,39	4,04E+07	8,25E+05	9193	1,85	1,84	29,88	2,78E+09	1,95E+07	11295	1,68	0,85	35,27	2,59E+07	2,75E+05
6184	2,08	0,88	31,39	5,31E+07	6,36E+05	9194	1,83	4,79	29,88	2,69E+07	2,84E+05	11296	1,67	1,67	35,27	4,75E+08	3,85E+06
6185	1,95	1,48	31,39	9,84E+07	1,12E+06	9195	1,67	4,79	29,88	2,55E+07	2,13E+05	11297	1,64	0,80	35,27	2,32E+07	2,51E+05
6186	1,95	0,88	31,39	6,95E+07	1,24E+06	9196	1,52	2,15	29,88	2,11E+07	1,61E+05	11298	1,47	1,71	35,27	2,46E+07	2,70E+05
6187	1,94	8,78	31,39	5,50E+07	7,88E+05	9197	1,46	1,19	29,88	1,17E+08	7,87E+05	11299	2,24	1,32	34,73	2,03E+07	3,08E+05
6188	1,94	3,83	31,39	3,88E+07	7,17E+05	9198	1,46	0,89	29,88	5,83E+07	3,40E+05	11300	2,24	0,85	34,73	4,46E+07	4,59E+05
6189	1,92	1,92	31,39	3,25E+09	4,38E+07	9199	1,45	2,75	29,88	1,39E+07	1,91E+05	11301	2,20	1,63	34,73	2,25E+07	2,65E+05
6190	1,91	8,43	31,39	9,49E+07	9,32E+05	9200	1,45	1,45	29,88	5,40E+08	4,99E+06	11302	2,12	9,52	34,73	1,21E+07	3,03E+05
6191	1,87	2,27	31,39	2,51E+08	2,52E+06	9201	1,19	1,45	29,88	1,17E+08	1,05E+06	11303	2,12	0,72	34,73	7,60E+07	8,06E+05
6192	1,82	2,27	31,39	2,13E+08	2,45E+06	9202	1,18	1,19	29,88	2,84E+08	3,45E+06	11304	2,11	0,93	34,73	5,99E+07	4,21E+05
6193	1,60	0,88	31,39	3,86E+07	6,22E+05	9203	1,18	0,93	29,88	8,76E+07	4,65E+05	11305	1,92	2,93	34,73	1,37E+07	2,03E+05
6194	1,57	1,92	31,39	1,79E+08	1,58E+06	9204	1,16	4,79	29,88	8,88E+06	2,20E+05	11306	1,87	8,26	34,73	9,00E+06	2,14E+05
6195	1,38	1,92	31,39	1,24E+08	1,09E+06	9205	1,07	1,28	29,88	8,81E+07	2,58E+05	11307	1,81	7,87	34,73	1,35E+07	2,17E+05
6196	1,34	1,92	31,39	1,17E+08	9,95E+05	9206	0,84	1,89	29,88	5,13E+07	7,63E+05	11308	1,64	0,46	34,73	5,43E+06	2,07E+05
6197	1,22	1,92	31,39	1,01E+08	9,09E+05	9207	0,82	3,54	29,88	1,36E+07	1,61E+05	11309	1,47	9,22	34,73	1,40E+07	2,23E+05
6198	1,19	1,92	31,39	9,60E+07	8,77E+05	9208	0,82	1,19	29,88	3,01E+07	2,22E+05	11310	1,47	1,45	34,73	1,58E+08	1,55E+06
6199	1,15	1,92	31,39	8,85E+07	8,02E+05	9209	0,81	0,80	29,88	3,59E+08	4,41E+06	11311	3,03	1,89	34,19	2,48E+07	4,67E+05
6200	1,08	1,92	31,39	7,86E+07	7,03E+05	9210	3,33	3,32	29,34	6,54E+07	9,08E+05	11312	3,03	0,67	34,19	1,13E+07	2,66E+05
6201	0,96	1,92	31,39	6,25E+07	5,26E+05	9211	2,99	1,67	29,34	2,20E+07	7,38E+05	11313	3,02	3,01	34,19	6,85E+07	1,55E+06
6202	0,87	1,92	31,39	5,81E+07	5,39E+05	9212	2,91	2,19	29,34	7,02E+06	1,59E+05	11314	3,02	0,93	34,19	1,17E+07	2,45E+05
6203	0,71	1,92	31,39	5,32E+07	5,34E+05	9213	2,90	2,88	29,34	6,26E+07	1,30E+06	11315	2,53	2,02	34,19	1,78E+07	2,26E+05
6204	0,12	1,92	31,39	3,73E+07	3,97E+05	9214	2,51	2,23	29,34	1,17E+07	1,70E+05	11316	2,50	7,66	34,19	1,09E+07	2,00E+05
6205	3,16	3,13	31,14	3,09E+08	4,81E+06	9215	2,35	2,10	29,34	1,02E+08	6,59E+05	11317	2,34	8,87	34,19	1,47E+07	2,44E+05
6206	3,07	3,05	31,14	3,36E+08	5,95E+06	9216	2,21	2,88	29,34	1,74E+07	2,56E+05	11318	2,34	8,48	34,19	7,63E+06	2,02E+05
6207	2,94	2,96	31,14	8,68E+07	1,15E+06												

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6221	0,74	1,92	31,14	5,49E+07	5,30E+05	9231	1,37	1,63	29,34	1,96E+08	1,40E+06	11333	2,58	2,58	33,65	8,03E+08	1,31E+07
6222	0,56	1,83	31,14	4,61E+07	4,74E+05	9232	0,81	0,46	29,34	1,79E+07	1,64E+05	11334	2,54	4,79	33,65	1,19E+07	2,49E+05
6223	2,14	0,79	30,89	6,40E+07	9,51E+05	9233	2,69	2,71	28,80	1,99E+07	2,68E+05	11335	2,54	2,54	33,65	1,27E+09	1,07E+07
6224	1,77	8,34	30,89	4,32E+07	4,63E+05	9234	2,47	1,67	28,80	1,05E+07	3,82E+05	11336	2,49	4,36	33,65	1,13E+07	2,53E+05
6225	3,47	3,48	30,65	1,55E+07	4,01E+05	9235	2,21	7,61	28,80	1,34E+07	2,51E+05	11337	2,46	4,79	33,65	1,65E+07	2,62E+05
6226	1,83	7,73	30,65	4,22E+07	5,20E+05	9236	2,21	4,36	28,80	1,37E+07	1,70E+05	11338	2,41	4,62	33,65	1,65E+07	2,47E+05
6227	1,73	6,26	30,65	3,02E+07	4,12E+05	9237	2,20	2,19	28,80	8,80E+08	9,42E+06	11339	2,39	8,96	33,65	1,97E+07	2,58E+05
6228	1,72	7,73	30,65	2,81E+07	4,19E+05	9238	2,06	7,83	28,80	1,17E+07	2,26E+05	11340	2,39	0,89	33,65	3,21E+07	4,22E+05
6229	1,71	0,79	30,65	3,11E+07	4,34E+05	9239	2,06	4,01	28,80	3,87E+07	4,60E+05	11341	2,37	2,36	33,65	1,75E+09	1,76E+07
6230	1,69	6,26	30,65	2,50E+07	3,99E+05	9240	2,05	8,83	28,80	2,85E+07	4,48E+05	11342	1,94	9,00	33,65	1,76E+07	2,08E+05
6231	1,63	0,53	30,65	3,10E+07	5,41E+05	9241	2,05	2,06	28,80	2,74E+09	2,30E+07	11343	1,93	9,22	33,65	2,70E+07	3,73E+05
6232	0,99	1,75	30,65	6,16E+07	6,60E+05	9242	2,00	1,71	28,80	1,90E+08	8,80E+05	11344	1,92	0,89	33,65	1,07E+08	7,94E+05
6233	3,31	3,31	30,40	4,79E+07	7,67E+05	9243	1,71	0,80	28,80	6,68E+07	3,61E+05	11345	1,89	1,45	33,65	4,16E+07	3,41E+05
6234	2,41	1,92	30,40	4,66E+07	1,72E+06	9244	1,67	2,45	28,80	2,48E+07	2,27E+05	11346	1,89	-0,11	33,65	3,77E+06	2,02E+05
6235	1,87	2,44	30,40	1,40E+08	1,75E+06	9245	1,67	1,67	28,80	7,16E+09	1,05E+08	11347	1,87	8,91	33,65	2,14E+07	2,47E+05
6236	1,63	8,60	30,40	4,01E+07	5,04E+05	9246	1,67	1,45	28,80	1,18E+09	4,15E+06	11348	1,87	2,45	33,65	2,31E+07	2,63E+05
6237	1,32	7,65	30,40	2,22E+07	4,33E+05	9247	1,65	2,97	28,80	7,37E+07	7,79E+05	11349	1,79	2,10	33,65	3,39E+07	2,42E+05
6238	1,13	1,92	30,40	8,67E+07	7,50E+05	9248	1,65	1,89	28,80	7,01E+08	1,84E+06	11350	1,71	7,74	33,65	1,46E+07	2,21E+05
6239	0,97	0,96	30,40	1,83E+08	4,65E+06	9249	1,64	2,32	28,80	2,36E+07	2,49E+05	11351	1,70	4,23	33,65	1,74E+06	2,20E+05
6240	0,94	1,75	30,40	6,35E+07	5,24E+05	9250	1,64	0,41	28,80	8,55E+06	1,67E+05	11352	1,63	1,15	33,65	1,80E+07	2,72E+05
6241	0,65	1,92	30,40	4,89E+07	4,18E+05	9251	1,61	0,98	28,80	9,33E+07	7,95E+05	11353	1,38	1,80	33,65	2,30E+07	2,55E+05
6242	0,60	1,92	30,40	4,82E+07	4,52E+05	9252	1,35	1,37	28,80	8,48E+08	7,64E+06	11354	1,38	1,67	33,65	1,44E+07	2,92E+05
6243	0,52	1,83	30,40	4,25E+07	3,88E+05	9253	1,30	1,32	28,80	7,53E+08	6,44E+06	11355	1,14	1,58	33,65	1,82E+07	2,61E+05
6244	2,39	2,44	30,15	5,57E+08	1,08E+07	9254	1,05	1,50	28,80	7,14E+07	4,78E+05	11356	1,12	1,45	33,65	1,44E+07	2,06E+05
6245	1,90	0,88	30,15	1,29E+08	2,08E+06	9255	0,99	1,58	28,80	6,73E+07	5,60E+05	11357	3,10	3,10	33,11	1,75E+08	1,78E+06
6246	1,32	1,31	30,15	2,06E+08	2,97E+06	9256	0,88	1,67	28,80	4,70E+07	5,08E+05	11358	2,46	3,14	33,11	6,74E+06	2,96E+05
6247	1,21	1,92	30,15	1,06E+08	9,70E+05	9257	2,01	4,79	28,26	1,55E+07	1,84E+05	11359	2,46	2,45	33,11	2,33E+09	5,20E+07
6248	0,70	1,92	30,15	5,08E+07	4,35E+05	9258	1,97	9,35	28,26	1,48E+07	2,64E+05	11360	2,46	2,02	33,11	5,76E+07	5,58E+05
6249	2,79	2,79	29,91	5,43E+07	1,09E+06	9259	1,97	8,87	28,26	1,68E+07	2,33E+05	11361	2,43	2,75	33,11	1,75E+07	3,09E+05
6250	2,69	2,70	29,91	1,06E+08	1,85E+06	9260	1,94	3,93	28,26	1,76E+07	1,75E+05	11362	2,43	2,10	33,11	9,27E+07	5,54E+05
6251	2,15	7,30	29,91	2,74E+07	5,11E+05	9261	2,53	2,54	27,72	5,17E+07	1,10E+06	11363	2,34	2,75	33,11	2,26E+07	2,53E+05
6252	1,94	9,04	29,91	1,81E+07	3,87E+05	9262	2,10	3,84	27,72	2,57E+07	2,00E+05	11364	2,09	2,71	33,11	1,79E+07	2,54E+05
6253	1,92	8,17	29,91	6,16E+07	6,89E+05	9263	2,05	0,76	27,72	1,97E+07	1,69E+05	11365	2,08	4,62	33,11	2,31E+07	2,06E+05
6254	1,92	4,26	29,91	4,48E+07	4,71E+05	9264	1,95	1,58	27,72	9,31E+07	5,65E+05	11366	2,08	4,10	33,11	1,24E+07	2,35E+05
6255	1,91	1,92	29,91	2,46E+09	3,33E+07	9265	1,94	4,79	27,72	2,05E+07	1,78E+05	11367	2,08	2,06	33,11	3,31E+09	4,02E+07
6256	1,88	7,30	29,91	5,04E+07	6,70E+05	9266	1,93	3,23	27,72	1,80E+07	1,67E+05	11368	2,07	4,75	33,11	1,95E+07	2,59E+05
6257	1,88	6,43	29,91	1,81E+07	3,93E+05	9267	1,75	3,14	27,72	1,90E+07	1,60E+05	11369	2,05	9,26	33,11	2,20E+07	3,57E+05
6258	1,87	8,34	29,91	7,18E+07	8,13E+05	9268	1,61	4,79	27,72	2,43E+07	1,91E+05	11370	2,02	0,80	33,11	7,86E+07	5,07E+05
6259	1,87	4,18	29,91	4,20E+07	5,73E+05	9269	1,59	2,41	27,72	1,45E+07	1,79E+05	11371	1,85	1,84	33,11	3,58E+09	3,55E+07
6260	1,46	1,48	29,91	5,44E+08	8,83E+06	9270	1,30	0,89	27,72	1,43E+08	1,06E+06	11372	1,79	1,50	33,11	1,37E+08	1,20E+06
6261	1,34	1,92	29,91	1,18E+08	1,03E+06	9271	1,26	2,02	27,72	2,86E+07	1,73E+05	11373	1,78	3,14	33,11	8,58E+06	2,31E+05
6262	1,20	1,22	29,91	3,27E+08	6,43E+06	9272	0,86	1,32	27,72	7,95E+07	7,10E+05	11374	1,77	4,10	33,11	2,28E+07	2,78E+05
6263	0,85	1,92	29,91	1,30E+08	1,91E+06	9273	0,71	1,28	27,72	3,27E+07	1,63E+05	11375	1,72	8,52	33,11	2,62E+07	4,72E+05
6264	0,84	0,88	29,91	4,12E+08	8,95E+06	9274	2,09	3,67	27,18	3,07E+07	3,41E+05	11376	1,71	1,71	33,11	2,22E+09	2,96E+07
6265	0,56	1,92	29,91	4,35E+07	4,72E+05	9275	2,06	3,67	27,18	3,68E+07	3,47E+05	11377	1,70	1,37	33,11	5,35E+07	3,53E+05
6266	5,33	2,70	29,66	1,65E+07	4,24E+05	9276	2,02	2,02	27,18	2,64E+09	2,68E+07	11378	1,49	1,80	33,11	4,45E+07	9,23E+05
6267	2,01	8,17	29,66	7,38E+07	8,79E+05	9277	1,98	8,26	27,18	2,53E+07	2,10E+05	11379	1,48	3,10	33,11	9,79E+06	2,20E+05
6268	2,00	4,09	29,66	2,82E+07	4,31E+05	9278	1,95	7,27	27,18	2,03E+07	2,69E+05	11380	1,21	1,24	33,11	3,12E+07	6,82E+05
6269	2,00	2,01	29,66	1,98E+09	2,66E+07	9279	1,83	0,80	27,18	1,08E+08	1,46E+06	11381	1,12	8,09	33,11	1,16E+07	2,29E+05
6270	1,88	0,44	29,66	2,26E+07	4,35E+05	9280	1,78	7,74	27,18	1,71E+07	1,77E+05	11382	1,12	1,11	33,11	5,77E+07	1,10E+06
6271	1,71	3,74	29,66	2,59E+07	4,36E+05	9281	1,78	1,28	27,18	4,65E+07	2,48E+05	11383	2,79	2,23	32,57	2,22E+07	4,78E+05
6272	1,62	4,78	29,66	1,97E+07	5,16E+05	9282	1,74	4,01	27,18	2,51E+07	2,57E+05	11384	2,54	2,10	32,57	1,06E+07	2,21E+05
6273	1,38	1,92	29,66	1,26E+08	9,44E+05	9283	1,72	0,85	27,18	8,31E+07	5,31E+05	11385	2,22	2,80	32,57	3,46E+07	4,93E+05
6274	1,03	1,92	29,66	7,64E+07	6,66E+05	9284	1,60	7,40	27,18	1,47E+07	1,87E+05	11386	2,19	2,19	32,57	2,18E+09	1,98E+07
6275	0,85	1,40	29,66	3,38E+07	4,03E+05	9285	1,60	1,15	27,18	9,79E+07	1,10E+06	11387	2,13	4,40	32,57	1,04E+07	2,04E+05
6276	2,91	2,27	29,41	1,03E+07	5,59E+05	9286	1,59	1,58	27,18	3,06E+09	2,16E+07	11388	2,12	9,52	32,57	1,86E+07	3,45E+05
6277	2,21	2,87	29,41	2,73E+07	5,67E+05	9287	1,57	3,19	27,18	2,00E+07	2,34E+05	11389	2,11	8,09	32,57	2,80E+07	2,50E+05
6278	2,15	4,00	29,41	2,17E+07	3,96E+05	9288	1,55	4,75	27,18	1,42E+07	1,59E+05	11390	2,11	0,93	32,57	6,64E+07	3,90E+05
6279	2,15	2,18	29,41	1,28E+09	1,79E+07	9289	1,53	2,19	27,18	2,04E+07	1,58E+05	11391	2,02	7,40	32,57	1,03E+07	2,33E+05
6280	1,82	1,83	29,41	2,19E+09	3,74E+07	9290	1,48	4,75	27,18	9,17E+06	1,64E+05	11392	1,77	1,76	32,57	2,97E+09	2,67E+07
6281	1,62	4,00	29,41	1,73E+07	4,05E+05	9291	1,45	2,10	27,18	1,95E+07	1,68E+05	11393	1,68	2,23	32,57	2,04E+07	2,36E+05
6282	1,60	2,87	29,41	3,53E+07	7,82E+05	9292	1,45	1,19	27,18	2,16E+08	1,57E+06	11394	1,48	1,45	32,57	4,76E+08	7,34E+06
6283	3,35	3,31	29,17	1,14E+08	2,09E+06	9293	1,44	0,85	27,18	9,21E+07	4,97E+05						

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6297	1,72	1,22	28,92	6,63E+07	1,39E+06	9307	0,97	6,92	27,18	1,41E+07	2,40E+05	11409	2,22	1,54	32,04	2,80E+07	3,07E+05
6298	1,49	2,01	28,92	1,10E+08	8,04E+05	9308	0,97	1,80	27,18	5,31E+07	4,43E+05	11410	2,15	2,67	32,04	2,60E+07	2,20E+05
6299	1,48	1,05	28,92	4,15E+07	9,05E+05	9309	0,97	0,98	27,18	1,60E+09	1,63E+07	11411	2,11	1,54	32,04	3,70E+07	2,41E+05
6300	1,36	1,40	28,92	8,23E+08	1,41E+07	9310	0,96	2,93	27,18	2,07E+07	1,76E+05	11412	2,02	3,97	32,04	4,40E+07	5,01E+05
6301	1,31	1,66	28,92	2,85E+08	3,26E+06	9311	0,96	1,32	27,18	9,58E+07	5,34E+05	11413	2,01	1,41	32,04	6,56E+07	4,48E+05
6302	1,31	1,31	28,92	6,57E+08	1,13E+07	9312	0,79	1,15	27,18	7,57E+07	4,68E+05	11414	2,00	4,45	32,04	3,18E+07	2,91E+05
6303	0,24	1,66	28,92	5,22E+07	5,78E+05	9313	0,79	0,80	27,18	1,34E+09	1,23E+07	11415	2,00	2,41	32,04	8,52E+07	7,37E+05
6304	2,06	8,86	28,67	5,23E+07	1,03E+06	9314	0,78	1,84	27,18	6,16E+07	1,44E+06	11416	1,98	1,97	32,04	4,12E+09	4,14E+07
6305	1,99	2,01	28,67	1,99E+09	2,53E+07	9315	0,78	1,58	27,18	1,83E+07	2,16E+05	11417	1,97	4,23	32,04	6,00E+07	5,63E+05
6306	1,68	8,60	28,67	1,12E+08	1,32E+06	9316	0,75	1,41	27,18	3,62E+07	2,07E+05	11418	1,96	7,57	32,04	4,28E+07	5,98E+05
6307	1,68	7,65	28,67	9,57E+07	1,10E+06	9317	0,63	1,32	27,18	7,76E+07	7,30E+05	11419	1,93	8,39	32,04	5,83E+07	5,26E+05
6308	1,66	9,56	28,67	3,88E+07	5,39E+05	9318	0,59	1,11	27,18	3,29E+07	1,72E+05	11420	1,93	8,05	32,04	4,60E+07	5,08E+05
6309	1,62	1,05	28,67	5,59E+07	1,32E+06	9319	0,58	6,57	27,18	8,35E+06	1,78E+05	11421	1,90	3,97	32,04	4,62E+07	4,16E+05
6310	1,36	1,66	28,67	3,23E+08	3,44E+06	9320	2,06	0,72	26,65	1,16E+07	1,86E+05	11422	1,89	7,66	32,04	4,75E+07	3,55E+05
6311	1,20	1,66	28,67	1,82E+08	2,08E+06	9321	2,02	8,31	26,65	2,46E+07	2,50E+05	11423	1,89	7,35	32,04	7,78E+06	2,67E+05
6312	1,06	1,05	28,67	1,83E+08	3,46E+06	9322	2,02	0,72	26,65	1,39E+07	1,81E+05	11424	1,89	4,79	32,04	3,42E+07	2,80E+05
6313	1,01	1,66	28,67	2,09E+08	2,86E+06	9323	1,95	3,97	26,65	2,41E+07	2,19E+05	11425	1,89	0,93	32,04	7,44E+07	2,56E+05
6314	2,77	2,79	28,43	3,52E+07	6,21E+05	9324	1,86	1,40	26,65	2,06E+07	2,10E+05	11426	1,81	4,06	32,04	3,27E+07	3,64E+05
6315	1,97	8,86	28,43	3,73E+07	6,38E+05	9325	1,86	3,88	26,65	1,69E+07	1,77E+05	11427	1,75	2,15	32,04	6,56E+07	4,69E+05
6316	1,69	6,69	28,43	2,90E+07	4,12E+05	9326	1,85	1,84	26,65	9,88E+08	8,69E+06	11428	1,47	0,85	32,04	3,99E+07	6,91E+05
6317	1,67	3,92	28,43	2,05E+07	4,36E+05	9327	1,82	4,10	26,65	2,00E+07	1,72E+05	11429	1,45	8,18	32,04	1,52E+07	3,43E+05
6318	1,59	3,92	28,43	3,32E+07	3,95E+05	9328	1,80	7,31	26,65	1,08E+07	1,85E+05	11430	1,45	3,88	32,04	1,46E+07	3,22E+05
6319	5,34	2,44	28,18	6,56E+06	4,81E+05	9329	1,79	1,80	26,65	1,09E+09	9,61E+06	11431	0,95	2,06	32,04	5,57E+06	2,48E+05
6320	1,58	3,74	28,18	4,04E+07	4,00E+05	9330	1,76	1,76	26,65	1,13E+09	9,33E+06	11432	0,84	1,45	32,04	2,27E+07	5,17E+05
6321	4,58	7,56	27,93	2,91E+07	4,46E+05	9331	1,57	0,85	26,65	1,09E+08	1,05E+06	11433	0,82	0,80	32,04	2,11E+08	3,46E+06
6322	2,09	2,61	27,93	3,32E+07	4,23E+05	9332	1,48	0,50	26,65	2,70E+07	2,94E+05	11434	3,20	4,84	31,50	1,57E+07	3,00E+05
6323	1,63	2,53	27,93	1,56E+07	3,91E+05	9333	1,46	0,72	26,65	7,59E+07	6,01E+05	11435	3,10	4,84	31,50	2,02E+07	3,18E+05
6324	1,31	0,88	27,93	1,20E+08	1,82E+06	9334	1,45	1,45	26,65	1,47E+09	1,31E+07	11436	2,65	2,02	31,50	3,58E+07	5,67E+05
6325	0,89	1,31	27,93	1,04E+08	1,94E+06	9335	1,29	1,89	26,65	4,81E+07	3,11E+05	11437	2,60	2,28	31,50	2,21E+07	2,04E+05
6326	4,57	2,96	27,69	2,47E+07	3,86E+05	9336	1,23	0,41	26,65	2,15E+07	1,73E+05	11438	2,56	9,30	31,50	1,29E+07	2,53E+05
6327	3,21	3,22	27,69	3,64E+07	5,98E+05	9337	1,05	1,45	26,65	8,91E+07	6,46E+05	11439	2,54	1,93	31,50	3,22E+07	3,08E+05
6328	2,89	2,87	27,69	2,89E+07	5,52E+05	9338	0,86	2,23	26,65	1,37E+07	1,77E+05	11440	2,50	2,19	31,50	4,10E+07	2,30E+05
6329	2,69	2,70	27,69	3,35E+07	7,68E+05	9339	0,86	1,54	26,65	6,56E+07	7,77E+05	11441	2,34	2,62	31,50	3,55E+07	2,12E+05
6330	2,52	2,53	27,69	9,17E+07	1,82E+06	9340	0,85	1,24	26,65	9,15E+07	5,79E+05	11442	2,34	0,98	31,50	6,22E+07	9,35E+05
6331	1,97	8,43	27,69	4,18E+07	4,76E+05	9341	0,63	0,63	26,65	6,92E+08	1,07E+07	11443	2,32	4,40	31,50	5,86E+07	7,74E+05
6332	1,97	2,01	27,69	2,34E+09	2,81E+07	9342	0,47	1,45	26,65	3,04E+07	3,76E+05	11444	2,31	2,32	31,50	1,62E+09	2,14E+07
6333	0,87	0,62	27,69	3,57E+07	1,07E+06	9343	0,45	1,24	26,65	2,88E+07	2,90E+05	11445	2,30	1,89	31,50	1,40E+08	1,54E+06
6334	4,59	2,96	27,44	3,19E+07	4,17E+05	9344	0,45	0,67	26,65	1,17E+08	7,19E+05	11446	2,28	4,40	31,50	6,88E+07	7,56E+05
6335	4,49	7,56	27,44	2,58E+07	4,72E+05	9345	1,52	3,10	26,11	7,78E+06	1,72E+05	11447	2,24	8,91	31,50	1,77E+07	3,68E+05
6336	2,94	2,96	27,44	4,42E+07	4,99E+05	9346	1,38	2,19	26,11	1,50E+07	1,76E+05	11448	2,23	3,84	31,50	1,68E+07	2,55E+05
6337	2,77	2,79	27,44	3,92E+07	7,59E+05	9347	1,37	3,10	26,11	1,72E+07	1,62E+05	11449	2,19	8,13	31,50	4,08E+07	5,16E+05
6338	2,61	2,61	27,44	5,71E+07	1,21E+06	9348	1,35	2,84	26,11	2,75E+07	2,16E+05	11450	2,19	7,79	31,50	2,97E+07	4,36E+05
6339	2,46	2,44	27,44	6,15E+07	1,33E+06	9349	1,25	2,88	26,11	8,00E+06	1,56E+05	11451	2,13	9,04	31,50	2,18E+07	2,58E+05
6340	2,41	2,44	27,44	5,30E+07	1,43E+06	9350	0,90	1,24	26,11	1,02E+08	4,74E+05	11452	2,09	8,57	31,50	3,38E+07	5,71E+05
6341	2,33	2,35	27,44	1,19E+08	2,48E+06	9351	0,89	0,41	26,11	2,71E+07	2,21E+05	11453	2,09	0,85	31,50	8,28E+07	5,11E+05
6342	2,11	3,65	27,44	1,79E+07	4,76E+05	9352	0,85	6,92	26,11	1,24E+07	1,91E+05	11454	2,05	4,71	31,50	3,27E+07	2,73E+05
6343	1,60	8,60	27,44	3,57E+07	4,13E+05	9353	0,85	0,85	26,11	3,00E+09	2,00E+07	11455	2,01	2,62	31,50	4,24E+07	4,18E+05
6344	1,60	1,14	27,44	1,09E+08	2,23E+06	9354	0,43	1,80	26,11	6,14E+06	1,81E+05	11456	2,00	8,91	31,50	3,89E+07	4,08E+05
6345	1,59	3,13	27,44	1,76E+07	4,07E+05	9355	0,43	0,41	26,11	4,13E+08	8,03E+06	11457	1,97	8,35	31,50	7,08E+07	6,53E+05
6346	1,36	0,62	27,44	1,44E+08	1,90E+06	9356	1,33	1,32	25,57	2,10E+09	1,37E+07	11458	1,97	1,50	31,50	9,44E+07	6,38E+05
6347	1,05	9,04	27,44	2,96E+07	5,22E+05	9357	1,31	4,01	25,57	1,46E+07	2,25E+05	11459	1,97	0,89	31,50	1,34E+08	1,04E+06
6348	0,99	1,83	27,44	1,27E+08	1,26E+06	9358	1,31	3,14	25,57	7,77E+06	1,61E+05	11460	1,96	8,78	31,50	3,69E+07	4,79E+05
6349	0,98	3,22	27,44	2,62E+07	5,06E+05	9359	0,92	1,45	25,57	6,79E+07	4,29E+05	11461	1,96	4,79	31,50	4,25E+07	3,75E+05
6350	0,98	2,35	27,44	2,51E+07	4,30E+05	9360	0,90	1,84	25,57	7,39E+07	9,13E+05	11462	1,96	3,84	31,50	5,21E+07	6,17E+05
6351	0,98	0,96	27,44	1,67E+09	3,20E+07	9361	0,81	2,02	25,57	2,52E+07	1,89E+05	11463	1,96	3,01	31,50	3,16E+07	3,24E+05
6352	0,74	2,01	27,44	4,32E+07	5,23E+05	9362	0,81	0,80	25,57	2,67E+09	1,87E+07	11464	1,94	7,83	31,50	7,72E+07	8,60E+05
6353	0,61	1,40	27,44	1,15E+08	1,81E+06	9363	0,79	1,28	25,57	5,34E+07	2,74E+05	11465	1,94	1,93	31,50	4,91E+09	3,99E+07
6354	5,57	1,14	27,19	1,41E+07	3,96E+05	9364	0,78	1,45	25,57	3,96E+07	2,30E+05	11466	1,93	4,10	31,50	7,41E+07	6,09E+05
6355	5,42	4,35	27,19	1,27E+07	3,94E+05	9365	1,90	1,45	25,03	2,64E+07	1,87E+05	11467	1,89	4,45	31,50	2,19E+07	2,20E+05
6356	5,39	3,57	27,19	1,18E+07	4,24E+05	9366	1,75	1,50	25,03	1,05E+08	6,66E+05	11468	1,87	2,28	31,50	1,54E+08	1,37E+06
6357	5,33	0,96	27,19	2,33E+07	3,85E+05	9367	1,74	1,76	25,03	4,93E+08	3,83E+06	11469	1,86	4,01	31,50	4,41E+07	2,36E+05
6358	4,54	10,16	27,19	1,36E+07	4,16E+05	9368	0,77	2,02	25,03	3,07E+07	1,93E+05	11470	1,83	4,40	31,50	1,98E+07	2,84E+05
6359	3,04	3,05	27,19	5,5													

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6373	1,39	0,96	27,19	8,48E+07	9,06E+05	9383	1,27	0,89	24,49	1,19E+08	6,17E+05	11485	1,79	8,35	30,96	2,79E+07	2,86E+05
6374	1,38	1,40	27,19	8,76E+08	1,16E+07	9384	1,12	1,37	24,49	7,35E+07	3,89E+05	11486	1,79	3,01	30,96	2,30E+07	2,34E+05
6375	1,36	6,61	27,19	1,42E+07	3,99E+05	9385	0,64	1,45	24,49	2,77E+07	1,83E+05	11487	1,78	0,76	30,96	5,04E+07	4,10E+05
6376	1,26	0,79	27,19	1,17E+08	1,09E+06	9386	0,56	1,32	24,49	1,56E+07	1,62E+05	11488	1,74	7,79	30,96	1,40E+07	2,92E+05
6377	1,24	2,01	27,19	9,79E+07	8,89E+05	9387	1,23	1,24	23,95	1,27E+09	7,35E+06	11489	1,74	3,19	30,96	2,69E+07	2,91E+05
6378	1,15	1,57	27,19	1,75E+08	2,72E+06	9388	0,90	7,14	23,95	1,43E+07	1,97E+05	11490	1,72	6,27	30,96	1,71E+07	2,93E+05
6379	1,13	7,47	27,19	1,65E+07	3,91E+05	9389	0,86	1,80	23,95	9,96E+07	6,92E+05	11491	1,71	0,76	30,96	4,63E+07	3,19E+05
6380	1,13	1,14	27,19	9,85E+08	2,06E+07	9390	1,67	0,85	23,41	5,17E+07	4,28E+05	11492	1,67	8,22	30,96	1,11E+07	2,05E+05
6381	1,05	1,83	27,19	1,27E+08	1,33E+06	9391	1,34	0,85	23,41	8,69E+07	4,73E+05	11493	3,21	3,19	30,42	3,15E+08	3,61E+06
6382	1,03	1,66	27,19	1,33E+08	1,12E+06	9392	0,84	-0,28	23,41	5,94E+06	1,56E+05	11494	3,12	3,10	30,42	3,76E+08	4,15E+06
6383	1,03	1,05	27,19	1,82E+09	3,38E+07	9393	0,75	5,31	23,41	1,68E+07	2,44E+05	11495	2,42	4,71	30,42	8,13E+06	2,25E+05
6384	1,02	2,96	27,19	3,33E+07	5,17E+05	9394	0,75	1,71	23,41	7,20E+07	6,17E+05	11496	2,42	1,89	30,42	1,06E+08	1,09E+06
6385	0,99	7,04	27,19	2,67E+07	4,03E+05	9395	0,74	0,76	23,41	3,84E+09	2,70E+07	11497	2,42	0,98	30,42	1,66E+07	2,57E+05
6386	0,98	6,87	27,19	2,39E+07	4,02E+05	9396	0,73	3,93	23,41	2,06E+07	2,75E+05	11498	2,42	0,76	30,42	1,34E+07	2,81E+05
6387	0,80	1,83	27,19	9,81E+07	2,54E+06	9397	0,73	2,02	23,41	6,67E+07	5,12E+05	11499	2,41	3,58	30,42	1,03E+07	2,09E+05
6388	0,69	2,01	27,19	3,38E+07	4,63E+05	9398	1,50	0,85	22,87	6,51E+07	5,07E+05	11500	2,41	2,41	30,42	7,99E+08	7,31E+06
6389	0,60	0,62	27,19	5,39E+08	7,44E+06	9399	0,89	7,74	22,87	2,57E+07	2,28E+05	11501	2,41	1,41	30,42	2,08E+07	2,45E+05
6390	0,59	1,83	27,19	4,71E+07	5,49E+05	9400	0,89	6,96	22,87	2,33E+07	2,26E+05	11502	1,93	1,93	30,42	4,53E+09	3,42E+07
6391	2,94	2,96	26,95	4,41E+07	4,98E+05	9401	0,89	5,66	22,87	1,15E+07	2,34E+05	11503	1,90	2,41	30,42	1,27E+08	1,09E+06
6392	2,04	8,25	26,95	5,53E+07	7,10E+05	9402	0,88	2,49	22,87	3,59E+07	4,14E+05	11504	1,87	3,58	30,42	1,85E+07	3,38E+05
6393	1,85	0,79	26,95	7,86E+07	1,83E+06	9403	0,86	8,52	22,87	4,00E+07	5,19E+05	11505	1,87	2,84	30,42	1,74E+07	2,43E+05
6394	1,81	1,83	26,95	1,55E+09	2,09E+07	9404	0,85	3,19	22,87	4,01E+07	3,78E+05	11506	1,78	4,19	30,42	1,85E+07	2,44E+05
6395	1,76	0,88	26,95	7,78E+07	8,25E+05	9405	0,84	7,70	22,87	2,72E+07	2,16E+05	11507	1,77	6,27	30,42	1,80E+07	2,74E+05
6396	1,74	1,75	26,95	1,59E+09	2,01E+07	9406	0,82	3,67	22,87	3,11E+07	3,48E+05	11508	1,64	8,61	30,42	1,35E+07	2,28E+05
6397	1,73	7,56	26,95	3,98E+07	4,06E+05	9407	0,66	2,06	22,87	6,22E+07	3,93E+05	11509	1,64	0,50	30,42	1,80E+07	2,61E+05
6398	1,49	0,70	26,95	1,01E+08	1,45E+06	9408	0,60	1,32	22,87	3,81E+07	1,62E+05	11510	1,51	0,89	30,42	3,32E+07	2,66E+05
6399	1,46	1,48	26,95	1,08E+09	1,88E+07	9409	2,04	2,06	22,33	1,41E+08	2,75E+05	11511	1,36	7,66	30,42	1,12E+07	2,96E+05
6400	1,31	1,31	26,95	8,09E+08	1,16E+07	9410	2,01	1,19	22,33	1,24E+07	1,95E+05	11512	1,36	0,02	30,42	1,35E+07	2,59E+05
6401	1,24	1,22	26,95	5,87E+08	9,82E+06	9411	1,95	1,19	22,33	1,02E+07	1,56E+05	11513	1,23	8,00	30,42	2,52E+07	2,48E+05
6402	1,21	1,92	26,95	9,44E+07	8,84E+05	9412	1,80	1,24	22,33	9,27E+06	1,93E+05	11514	1,00	4,06	30,42	1,27E+07	2,95E+05
6403	1,13	0,88	26,95	8,09E+07	1,74E+06	9413	1,74	1,24	22,33	9,53E+06	1,63E+05	11515	1,00	0,98	30,42	2,25E+08	2,80E+06
6404	0,82	1,48	26,95	9,43E+07	8,37E+05	9414	1,70	1,19	22,33	1,35E+07	1,96E+05	11516	3,37	3,36	29,88	1,18E+08	2,04E+06
6405	0,80	0,79	26,95	1,11E+09	2,42E+07	9415	1,59	1,19	22,33	3,13E+07	3,32E+05	11517	3,37	1,19	29,88	1,19E+07	2,11E+05
6406	0,50	1,48	26,95	5,84E+07	9,41E+05	9416	1,50	7,57	22,33	1,20E+07	2,52E+05	11518	3,09	5,10	29,88	9,45E+06	2,11E+05
6407	0,46	1,83	26,95	4,22E+07	4,32E+05	9417	1,50	4,49	22,33	1,88E+07	3,07E+05	11519	2,64	5,14	29,88	4,62E+06	2,42E+05
6408	4,54	3,92	26,70	1,36E+07	4,29E+05	9418	1,50	1,89	22,33	1,62E+07	2,23E+05	11520	2,19	7,74	29,88	3,46E+07	2,77E+05
6409	4,50	3,92	26,70	1,83E+07	4,16E+05	9419	1,50	1,50	22,33	1,17E+09	1,10E+07	11521	2,17	8,96	29,88	1,39E+07	2,08E+05
6410	2,99	2,87	26,70	2,38E+07	4,26E+05	9420	1,50	1,28	22,33	1,80E+08	8,03E+05	11522	2,17	4,14	29,88	3,41E+07	3,06E+05
6411	2,89	2,87	26,70	3,39E+07	4,97E+05	9421	1,49	4,19	22,33	1,51E+07	2,61E+05	11523	2,16	7,31	29,88	8,83E+06	2,34E+05
6412	2,05	0,70	26,70	2,23E+07	5,14E+05	9422	1,04	8,13	22,33	2,59E+07	4,07E+05	11524	2,15	4,79	29,88	2,21E+07	3,30E+05
6413	1,87	1,92	26,70	1,25E+09	1,57E+07	9423	1,04	3,75	22,33	2,84E+07	3,63E+05	11525	2,13	7,79	29,88	3,89E+07	3,67E+05
6414	1,78	7,73	26,70	4,31E+07	5,33E+05	9424	1,04	2,15	22,33	1,74E+07	4,69E+05	11526	2,08	2,58	29,88	2,73E+07	2,81E+05
6415	1,74	7,73	26,70	4,31E+07	5,25E+05	9425	0,93	8,96	22,33	2,44E+07	2,11E+05	11527	1,94	9,09	29,88	2,01E+07	2,29E+05
6416	1,69	7,65	26,70	4,25E+07	4,58E+05	9426	0,93	4,58	22,33	3,76E+07	3,28E+05	11528	1,94	8,13	29,88	4,42E+07	4,28E+05
6417	1,66	1,66	26,70	1,83E+09	2,23E+07	9427	0,90	3,80	22,33	4,28E+07	3,72E+05	11529	1,94	4,06	29,88	4,54E+07	2,93E+05
6418	1,58	0,88	26,70	1,02E+08	1,61E+06	9428	0,88	4,75	22,33	5,03E+07	3,98E+05	11530	1,94	-0,37	29,88	1,54E+07	2,15E+05
6419	1,48	1,05	26,70	7,57E+07	1,19E+06	9429	0,86	4,10	22,33	8,06E+07	6,98E+05	11531	1,93	8,48	29,88	3,82E+07	3,00E+05
6420	1,07	1,48	26,70	1,23E+08	1,54E+06	9430	0,86	1,80	22,33	1,55E+08	1,04E+06	11532	1,93	1,37	29,88	5,13E+07	3,60E+05
6421	0,66	1,40	26,70	9,19E+07	1,05E+06	9431	0,86	1,37	22,33	1,69E+08	1,09E+06	11533	1,90	9,00	29,88	2,06E+07	2,27E+05
6422	0,47	1,22	26,70	3,85E+07	5,11E+05	9432	0,86	0,85	22,33	1,34E+10	1,13E+08	11534	1,90	7,31	29,88	2,00E+07	2,86E+05
6423	5,43	0,96	26,45	1,99E+07	4,48E+05	9433	0,85	8,83	22,33	2,59E+07	2,78E+05	11535	1,90	4,27	29,88	4,14E+07	4,68E+05
6424	1,81	7,39	26,45	2,90E+07	4,91E+05	9434	0,85	8,35	22,33	3,62E+07	3,99E+05	11536	1,90	0,89	29,88	1,34E+08	1,43E+06
6425	0,87	1,57	26,45	1,17E+08	2,03E+06	9435	0,85	2,19	22,33	1,24E+08	8,06E+05	11537	1,90	0,50	29,88	2,07E+07	3,54E+05
6426	0,87	0,88	26,45	1,91E+09	3,72E+07	9436	0,84	10,26	22,33	2,16E+07	2,15E+05	11538	1,89	6,44	29,88	1,19E+07	2,58E+05
6427	0,65	0,62	26,45	9,36E+08	2,15E+07	9437	0,84	4,40	22,33	5,54E+07	5,66E+05	11539	1,89	4,79	29,88	4,10E+07	5,10E+05
6428	0,45	0,44	26,45	6,40E+08	1,56E+07	9438	0,82	1,19	22,33	2,41E+08	1,38E+06	11540	1,89	3,84	29,88	1,28E+07	2,24E+05
6429	5,37	6,95	26,21	9,29E+06	3,84E+05	9439	0,82	0,46	22,33	1,37E+08	8,32E+05	11541	1,89	-0,46	29,88	1,61E+07	3,70E+05
6430	4,53	0,88	26,21	1,55E+07	3,81E+05	9440	0,77	10,26	22,33	1,53E+07	1,93E+05	11542	1,87	8,31	29,88	2,72E+07	3,15E+05
6431	0,85	2,18	26,21	2,65E+07	5,09E+05	9441	0,60	1,19	22,33	2,60E+07	2,20E+05	11543	1,72	3,80	29,88	1,56E+07	3,19E+05
6432	5,51	6,35	25,96	1,13E+07	3,92E+05	9442	0,47	1,19	22,33	1,87E+07	2,01E+05	11544	1,67	2,75	29,88	3,38E+07	3,99E+05
6433	5,34	5,22	25,96	1,97E+07	4,55E+05	9443	1,27	10,26	21,79	1,04E+07	1,86E+05	11545	1,56	2,84	29,88	1,65E+07	2,01E+05
6434	5,32	1,05	25,96	1,71E+07	4,69E+05	9444	1,22	7,83	21,79	6,36E+06	1,60E+05	11546	1,51	4,84	29,88	1,36E+07	2,33E+05
6435	4,54	6,08	25,96	2,41E													

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6449	4,55	5,04	25,71	2,17E+07	4,14E+05	9459	1,08	5,66	21,79	1,87E+07	3,60E+05	11561	2,17	8,13	29,34	3,52E+07	4,20E+05
6450	4,53	8,34	25,71	2,40E+07	4,58E+05	9460	1,07	8,44	21,79	2,18E+07	3,93E+05	11562	2,17	3,97	29,34	3,33E+07	3,13E+05
6451	4,50	4,52	25,71	1,57E+07	4,17E+05	9461	1,03	6,70	21,79	1,12E+07	2,13E+05	11563	2,09	8,18	29,34	5,18E+07	6,43E+05
6452	2,94	2,96	25,71	3,11E+07	4,33E+05	9462	1,03	4,79	21,79	2,76E+07	3,45E+05	11564	2,09	7,66	29,34	2,27E+07	2,50E+05
6453	1,87	0,88	25,71	5,30E+07	9,69E+05	9463	1,03	4,40	21,79	2,86E+07	3,77E+05	11565	2,07	8,39	29,34	4,16E+07	4,54E+05
6454	1,41	0,88	25,71	5,77E+07	5,60E+05	9464	1,03	4,06	21,79	4,09E+07	4,13E+05	11566	2,04	4,06	29,34	5,09E+07	3,78E+05
6455	0,92	2,18	25,71	1,49E+07	4,14E+05	9465	1,03	1,54	21,79	3,66E+07	2,75E+05	11567	2,02	2,02	29,34	3,21E+09	2,15E+07
6456	4,59	7,56	25,47	3,93E+07	4,87E+05	9466	1,03	1,02	21,79	4,37E+09	4,68E+07	11568	1,92	7,79	29,34	3,07E+07	2,44E+05
6457	4,52	6,78	25,47	2,13E+07	4,04E+05	9467	0,93	8,26	21,79	2,88E+07	3,31E+05	11569	1,85	3,10	29,34	4,50E+07	4,71E+05
6458	4,52	5,04	25,47	1,88E+07	4,09E+05	9468	0,93	1,63	21,79	8,20E+07	5,10E+05	11570	1,85	1,84	29,34	2,72E+09	2,64E+07
6459	4,50	7,56	25,47	2,92E+07	5,67E+05	9469	0,92	6,79	21,79	2,06E+07	1,79E+05	11571	1,83	2,93	29,34	3,84E+07	2,74E+05
6460	4,39	6,52	25,47	7,95E+06	3,85E+05	9470	0,92	3,10	21,79	2,70E+07	1,85E+05	11572	1,78	0,80	29,34	4,47E+07	2,97E+05
6461	2,51	2,53	25,47	5,08E+07	9,12E+05	9471	0,88	10,21	21,79	2,23E+07	2,45E+05	11573	1,75	4,79	29,34	4,07E+07	3,57E+05
6462	2,41	2,44	25,47	3,03E+07	5,79E+05	9472	0,86	7,27	21,79	3,89E+07	3,12E+05	11574	1,75	0,80	29,34	5,08E+07	2,95E+05
6463	1,34	1,31	25,47	1,43E+09	2,17E+07	9473	0,86	2,88	21,79	3,31E+07	2,54E+05	11575	1,64	4,01	29,34	2,50E+07	2,92E+05
6464	5,32	4,44	25,22	3,03E+07	5,04E+05	9474	0,81	7,87	21,79	2,58E+07	1,63E+05	11576	1,64	2,93	29,34	8,42E+07	1,07E+06
6465	4,54	5,39	25,22	1,85E+07	3,87E+05	9475	0,77	4,75	21,79	4,22E+07	3,09E+05	11577	1,64	2,19	29,34	3,27E+07	4,21E+05
6466	4,52	4,18	25,22	1,41E+07	4,07E+05	9476	0,77	2,84	21,79	2,72E+07	1,95E+05	11578	1,63	4,79	29,34	3,95E+07	5,50E+05
6467	2,61	2,61	25,22	2,65E+07	5,83E+05	9477	0,75	8,31	21,79	2,53E+07	2,00E+05	11579	2,30	1,67	28,80	1,83E+07	2,86E+05
6468	2,33	2,35	25,22	5,37E+07	9,50E+05	9478	0,70	8,52	21,79	1,77E+07	1,90E+05	11580	2,26	7,61	28,80	2,14E+07	5,00E+05
6469	2,25	2,27	25,22	8,33E+07	1,25E+06	9479	0,69	3,14	21,79	2,52E+07	2,55E+05	11581	2,24	4,36	28,80	1,98E+07	3,41E+05
6470	1,07	0,79	25,22	2,84E+07	5,11E+05	9480	0,45	1,28	21,79	2,57E+07	2,01E+05	11582	2,24	2,23	28,80	1,06E+09	1,41E+07
6471	0,93	7,56	25,22	2,34E+07	4,63E+05	9481	0,43	2,84	21,79	1,60E+07	2,79E+05	11583	2,19	1,67	28,80	4,41E+07	3,89E+05
6472	0,80	0,79	25,22	1,86E+09	3,74E+07	9482	0,43	0,63	21,79	2,80E+08	1,41E+06	11584	2,11	7,87	28,80	2,78E+07	3,09E+05
6473	0,79	2,01	25,22	1,18E+07	4,27E+05	9483	0,43	-0,46	21,79	2,28E+07	3,39E+05	11585	2,11	1,67	28,80	6,75E+07	4,93E+05
6474	5,48	3,13	24,98	1,65E+07	3,93E+05	9484	1,65	1,50	21,25	8,46E+07	3,36E+05	11586	2,09	4,06	28,80	6,15E+07	7,54E+05
6475	5,34	0,79	24,98	2,08E+07	3,85E+05	9485	1,49	7,96	21,25	1,91E+07	3,12E+05	11587	2,09	2,10	28,80	3,49E+09	3,13E+07
6476	4,58	3,83	24,98	2,54E+07	4,21E+05	9486	1,49	4,58	21,25	2,95E+07	4,02E+05	11588	2,09	0,89	28,80	2,99E+07	2,15E+05
6477	4,58	0,44	24,98	3,06E+07	4,83E+05	9487	1,49	0,67	21,25	1,60E+07	2,49E+05	11589	2,08	8,87	28,80	4,06E+07	6,81E+05
6478	4,54	7,65	24,98	2,91E+07	4,63E+05	9488	1,25	7,44	21,25	8,13E+06	1,71E+05	11590	2,05	4,79	28,80	4,29E+07	4,27E+05
6479	4,48	7,56	24,98	3,46E+07	4,98E+05	9489	1,23	4,32	21,25	6,77E+07	7,34E+05	11591	2,00	8,87	28,80	2,47E+07	3,68E+05
6480	2,69	2,70	24,98	2,14E+07	4,56E+05	9490	1,23	2,15	21,25	1,65E+07	2,30E+05	11592	1,90	8,78	28,80	1,14E+07	2,01E+05
6481	2,15	2,18	24,98	7,50E+07	1,41E+06	9491	1,22	3,97	21,25	5,07E+07	6,92E+05	11593	1,77	2,28	28,80	5,17E+07	4,23E+05
6482	1,74	1,75	24,98	4,46E+08	9,10E+06	9492	1,20	1,89	21,25	3,51E+07	2,83E+05	11594	1,72	7,74	28,80	2,07E+07	2,06E+05
6483	1,50	7,82	24,98	1,93E+07	3,93E+05	9493	1,20	1,19	21,25	7,12E+09	9,40E+07	11595	1,72	3,01	28,80	1,01E+08	1,22E+06
6484	1,01	0,70	24,98	7,14E+06	4,05E+05	9494	1,19	2,93	21,25	1,02E+07	1,56E+05	11596	1,71	7,83	28,80	1,95E+07	2,41E+05
6485	0,89	8,43	24,98	3,38E+07	4,04E+05	9495	1,10	4,23	21,25	3,67E+07	2,69E+05	11597	1,71	7,35	28,80	1,83E+07	4,17E+05
6486	0,71	0,70	24,98	1,23E+09	2,80E+07	9496	1,10	1,89	21,25	3,19E+07	2,20E+05	11598	1,71	2,41	28,80	1,68E+07	4,32E+05
6487	5,46	4,35	24,73	2,20E+07	4,50E+05	9497	0,96	1,89	21,25	8,58E+07	7,62E+05	11599	1,71	1,71	28,80	9,69E+09	1,70E+08
6488	5,37	4,44	24,73	3,28E+07	4,26E+05	9498	0,95	4,10	21,25	5,90E+07	3,64E+05	11600	1,70	1,02	28,80	9,92E+07	5,95E+05
6489	5,36	4,00	24,73	1,39E+07	4,27E+05	9499	0,95	3,71	21,25	4,34E+07	3,58E+05	11601	1,66	7,83	28,80	2,26E+07	2,25E+05
6490	4,59	2,96	24,73	4,03E+07	5,26E+05	9500	0,95	3,19	21,25	1,67E+07	1,88E+05	11602	1,66	1,02	28,80	1,08E+08	1,03E+06
6491	4,52	1,22	24,73	2,01E+07	4,05E+05	9501	0,81	9,13	21,25	4,84E+07	3,19E+05	11603	1,62	7,79	28,80	1,26E+07	2,10E+05
6492	4,50	7,91	24,73	3,64E+06	5,08E+05	9502	0,81	5,23	21,25	2,82E+07	2,42E+05	11604	1,52	0,85	28,80	4,24E+07	2,58E+05
6493	4,49	2,96	24,73	3,14E+07	5,09E+05	9503	0,79	7,35	21,25	2,88E+07	2,22E+05	11605	1,40	1,41	28,80	1,03E+09	1,06E+07
6494	4,49	1,22	24,73	2,01E+07	4,05E+05	9504	0,79	4,19	21,25	3,83E+07	2,65E+05	11606	1,36	1,89	28,80	3,27E+07	2,10E+05
6495	2,08	2,09	24,73	1,24E+08	1,70E+06	9505	0,79	3,19	21,25	4,17E+07	2,82E+05	11607	1,34	1,37	28,80	8,94E+08	8,16E+06
6496	1,85	1,83	24,73	2,61E+08	4,82E+06	9506	0,78	8,70	21,25	1,82E+07	2,16E+05	11608	1,10	1,50	28,80	7,67E+07	6,77E+05
6497	1,57	2,27	24,73	3,23E+07	4,65E+05	9507	0,69	4,79	21,25	3,29E+07	2,58E+05	11609	1,10	0,67	28,80	3,75E+07	3,04E+05
6498	0,70	2,09	24,73	3,21E+07	5,94E+05	9508	0,69	1,89	21,25	1,26E+08	9,54E+05	11610	1,03	1,63	28,80	6,24E+07	7,32E+05
6499	5,34	4,52	24,48	2,95E+07	4,47E+05	9509	0,69	1,45	21,25	2,91E+07	6,82E+05	11611	1,01	7,83	28,80	1,62E+07	2,75E+05
6500	4,59	2,01	24,48	2,90E+07	4,21E+05	9510	0,67	7,79	21,25	3,20E+07	3,80E+05	11612	2,00	9,35	28,26	3,01E+07	3,53E+05
6501	4,58	5,13	24,48	2,37E+07	4,03E+05	9511	0,67	6,96	21,25	1,64E+07	1,85E+05	11613	1,92	9,39	28,26	1,04E+07	2,86E+05
6502	4,57	2,96	24,48	3,38E+07	4,68E+05	9512	0,67	4,49	21,25	6,08E+07	5,90E+05	11614	1,63	9,13	28,26	1,66E+07	2,63E+05
6503	4,54	10,25	24,48	4,19E+07	6,50E+05	9513	0,67	4,06	21,25	1,63E+07	2,29E+05	11615	1,04	2,36	28,26	1,07E+07	2,27E+05
6504	4,53	2,96	24,48	3,65E+07	5,44E+05	9514	0,67	0,67	21,25	5,26E+09	5,46E+07	11616	2,11	2,62	27,72	3,91E+07	3,07E+05
6505	4,53	2,01	24,48	3,33E+07	5,41E+05	9515	0,66	4,27	21,25	1,46E+07	1,85E+05	11617	2,07	3,88	27,72	4,40E+07	3,94E+05
6506	4,52	5,39	24,48	2,32E+07	4,48E+05	9516	0,51	1,32	21,25	2,18E+07	1,58E+05	11618	2,05	8,44	27,72	3,70E+07	2,66E+05
6507	4,45	2,01	24,48	1,64E+07	3,93E+05	9517	0,43	1,89	21,25	3,43E+07	3,37E+05	11619	2,05	4,36	27,72	1,74E+07	2,33E+05
6508	4,40	8,43	24,48	2,78E+07	3,94E+05	9518	0,41	7,66	21,25	1,59E+07	1,77E+05	11620	2,00	8,44	27,72	1,65E+07	2,14E+05
6509	4,40	5,13	24,48	2,09E+07	4,03E+05	9519	0,41	0,41	21,25	1,19E+09	1,59E+07	11621	1,98	3,27	27,72	1,48E+07	2,01E+05
6510	1,94	1,92	24,48	1,79E+08	3,15E+06	9520	0,40	1,32	21,25	3,13E+07	3,09E+05	11622	1,97	1,67	27,72	1,39E+08	7,27E+05
6511	1,63	1,05	24,48	3,51E+07	4,05E+												

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6525	1,16	0,88	24,48	3,49E+07	9,72E+05	9535	0,90	1,41	20,72	9,94E+07	5,84E+05	11637	1,96	7,31	27,18	2,14E+07	2,94E+05
6526	1,07	1,40	24,48	7,94E+07	1,03E+06	9536	0,89	4,06	20,72	6,87E+07	4,21E+05	11638	1,87	2,45	27,18	2,00E+07	2,32E+05
6527	0,99	1,40	24,48	1,00E+08	1,29E+06	9537	0,89	2,02	20,72	1,10E+08	6,63E+05	11639	1,86	8,05	27,18	1,05E+07	2,35E+05
6528	0,91	0,36	24,48	2,19E+07	6,05E+05	9538	0,84	10,26	20,72	1,57E+07	1,96E+05	11640	1,83	3,19	27,18	1,83E+07	2,82E+05
6529	0,82	1,48	24,48	1,23E+08	1,19E+06	9539	0,84	8,87	20,72	3,47E+07	2,56E+05	11641	1,81	4,79	27,18	2,81E+07	2,88E+05
6530	0,79	1,40	24,48	1,29E+08	1,15E+06	9540	0,82	3,75	20,72	1,69E+07	1,88E+05	11642	1,77	4,10	27,18	2,54E+07	3,61E+05
6531	0,74	1,40	24,48	1,18E+08	1,01E+06	9541	0,81	5,01	20,72	1,96E+07	1,94E+05	11643	1,74	9,04	27,18	1,97E+07	2,11E+05
6532	0,65	1,40	24,48	7,58E+07	8,27E+05	9542	0,78	6,79	20,72	1,36E+07	1,73E+05	11644	1,64	4,79	27,18	3,74E+07	3,70E+05
6533	0,63	0,88	24,48	6,85E+07	5,83E+05	9543	0,78	5,23	20,72	2,68E+07	2,43E+05	11645	1,63	2,19	27,18	3,97E+07	3,38E+05
6534	0,13	0,88	24,48	3,27E+07	4,28E+05	9544	0,78	4,53	20,72	6,01E+07	4,54E+05	11646	1,63	1,19	27,18	6,93E+07	1,20E+06
6535	0,10	1,40	24,48	2,69E+07	4,09E+05	9545	0,78	1,67	20,72	1,20E+08	7,16E+05	11647	1,62	7,44	27,18	2,16E+07	3,34E+05
6536	0,09	0,88	24,48	2,01E+07	4,13E+05	9546	0,77	8,48	20,72	3,30E+07	2,81E+05	11648	1,62	3,19	27,18	2,61E+07	3,76E+05
6537	5,32	7,91	24,24	2,04E+07	4,22E+05	9547	0,77	7,79	20,72	3,06E+07	3,10E+05	11649	1,62	1,63	27,18	3,93E+09	3,73E+07
6538	4,55	8,34	24,24	4,75E+07	5,96E+05	9548	0,77	3,19	20,72	3,56E+07	3,03E+05	11650	1,62	0,85	27,18	9,88E+07	1,03E+06
6539	4,48	5,39	24,24	2,63E+07	4,56E+05	9549	0,77	1,89	20,72	1,61E+08	1,30E+06	11651	1,56	1,24	27,18	9,37E+07	4,33E+05
6540	4,48	2,01	24,24	2,72E+07	4,54E+05	9550	0,77	1,45	20,72	1,08E+08	6,04E+05	11652	1,52	4,79	27,18	2,42E+07	3,13E+05
6541	4,47	8,34	24,24	3,59E+07	4,73E+05	9551	0,77	0,76	20,72	8,48E+09	7,76E+07	11653	1,49	2,23	27,18	1,51E+07	2,44E+05
6542	4,35	8,43	24,24	3,39E+07	4,38E+05	9552	0,75	9,17	20,72	4,89E+07	3,30E+05	11654	1,40	4,79	27,18	2,05E+07	2,35E+05
6543	1,66	0,88	24,24	3,83E+07	4,74E+05	9553	0,75	3,93	20,72	2,41E+07	2,19E+05	11655	1,40	2,84	27,18	2,19E+07	2,30E+05
6544	1,48	0,88	24,24	8,43E+07	9,20E+05	9554	0,74	0,24	20,72	2,44E+07	1,75E+05	11656	1,37	0,67	27,18	1,32E+08	1,14E+06
6545	1,45	3,83	24,24	2,54E+07	4,42E+05	9555	0,73	-0,41	20,72	1,96E+07	1,96E+05	11657	1,30	2,23	27,18	1,78E+07	2,83E+05
6546	1,38	1,40	24,24	3,35E+09	6,70E+07	9556	0,71	10,26	20,72	1,53E+07	2,02E+05	11658	1,19	1,19	27,18	1,34E+09	2,19E+07
6547	1,36	10,25	24,24	3,41E+07	6,60E+05	9557	0,70	2,36	20,72	4,25E+07	2,38E+05	11659	1,18	1,63	27,18	5,22E+07	1,09E+06
6548	1,36	9,04	24,24	3,13E+07	4,32E+05	9558	0,69	9,22	20,72	4,51E+07	4,68E+05	11660	1,16	7,44	27,18	1,54E+07	4,27E+05
6549	1,32	3,74	24,24	3,14E+07	4,14E+05	9559	0,69	4,97	20,72	1,86E+07	2,46E+05	11661	1,16	0,85	27,18	1,15E+08	1,18E+06
6550	0,94	0,44	24,24	6,50E+07	8,77E+05	9560	0,67	3,75	20,72	1,81E+07	2,78E+05	11662	1,15	4,23	27,18	8,35E+06	2,15E+05
6551	0,89	8,43	24,24	5,33E+07	5,76E+05	9561	0,60	2,10	20,72	5,41E+07	2,72E+05	11663	1,15	1,84	27,18	2,02E+07	2,25E+05
6552	0,89	1,83	24,24	5,80E+07	1,28E+06	9562	0,48	8,61	20,72	1,42E+07	1,99E+05	11664	1,06	9,00	27,18	9,34E+06	2,09E+05
6553	0,88	9,47	24,24	4,65E+07	6,67E+05	9563	0,48	2,97	20,72	6,06E+06	1,58E+05	11665	1,06	7,18	27,18	1,84E+07	2,91E+05
6554	0,88	3,22	24,24	3,80E+07	6,42E+05	9564	0,48	1,63	20,72	1,68E+07	2,94E+05	11666	1,06	4,40	27,18	1,11E+07	2,59E+05
6555	0,88	0,88	24,24	6,47E+09	1,11E+08	9565	0,48	0,46	20,72	9,23E+08	1,05E+07	11667	1,06	3,01	27,18	2,37E+07	4,00E+05
6556	0,87	2,96	24,24	3,79E+07	5,31E+05	9566	0,37	7,61	20,72	1,26E+07	2,11E+05	11668	1,06	2,10	27,18	3,95E+07	4,27E+05
6557	0,87	2,09	24,24	4,00E+07	7,97E+05	9567	0,37	3,06	20,72	1,41E+07	2,57E+05	11669	1,06	1,06	27,18	1,40E+09	1,94E+07
6558	5,33	0,79	23,99	8,74E+06	3,99E+05	9568	2,02	2,02	20,18	6,30E+08	1,33E+07	11670	1,01	1,02	27,18	1,62E+09	1,91E+07
6559	4,52	8,43	23,99	4,08E+07	5,33E+05	9569	2,02	0,85	20,18	1,39E+07	3,62E+05	11671	1,00	4,06	27,18	9,21E+06	2,19E+05
6560	4,47	9,21	23,99	2,41E+07	3,80E+05	9570	1,93	2,02	20,18	2,05E+08	2,03E+06	11672	1,00	2,41	27,18	1,66E+07	2,40E+05
6561	4,39	9,21	23,99	2,84E+07	3,94E+05	9571	1,78	1,84	20,18	7,41E+06	1,80E+05	11673	1,00	1,89	27,18	8,11E+07	7,84E+05
6562	4,35	9,12	23,99	2,52E+07	5,33E+05	9572	0,89	9,09	20,18	3,43E+07	3,07E+05	11674	1,00	0,46	27,18	2,51E+07	3,31E+05
6563	4,29	8,43	23,99	3,19E+07	4,48E+05	9573	0,88	1,89	20,18	1,05E+08	6,84E+05	11675	0,99	3,93	27,18	1,16E+07	2,07E+05
6564	3,03	3,05	23,99	4,12E+07	5,94E+05	9574	0,78	6,92	20,18	1,93E+07	1,96E+05	11676	0,97	1,41	27,18	7,82E+07	4,87E+05
6565	0,92	7,30	23,99	2,25E+07	3,90E+05	9575	0,74	8,83	20,18	3,03E+07	3,57E+05	11677	0,82	1,89	27,18	5,12E+07	9,71E+05
6566	0,92	5,48	23,99	2,32E+07	4,22E+05	9576	1,82	1,45	19,64	4,50E+06	1,59E+05	11678	0,82	1,67	27,18	2,10E+07	2,32E+05
6567	0,92	5,13	23,99	2,34E+07	4,49E+05	9577	1,42	4,14	19,64	3,85E+07	3,82E+05	11679	0,82	0,80	27,18	1,32E+09	1,45E+07
6568	0,91	2,18	23,99	4,90E+07	7,55E+05	9578	1,42	-0,67	19,64	1,12E+07	4,29E+05	11680	0,66	1,37	27,18	8,09E+07	8,56E+05
6569	0,87	4,09	23,99	1,60E+07	4,79E+05	9579	0,78	10,21	19,64	1,35E+07	2,06E+05	11681	0,62	1,76	27,18	1,84E+07	2,05E+05
6570	5,38	4,44	23,74	1,98E+07	4,18E+05	9580	0,03	0,37	19,64	1,62E+07	3,29E+05	11682	2,08	1,37	26,65	2,48E+07	2,19E+05
6571	4,58	4,78	23,74	5,51E+07	6,65E+05	9581	0,02	3,06	19,64	8,97E+06	1,76E+05	11683	2,08	0,76	26,65	3,03E+07	5,24E+05
6572	4,54	3,39	23,74	2,49E+07	4,86E+05	9582	0,02	1,32	19,64	9,95E+06	2,66E+05	11684	2,07	8,31	26,65	3,05E+07	3,67E+05
6573	4,35	0,70	23,74	3,10E+07	4,54E+05	9583	0,02	0,63	19,64	6,34E+06	2,11E+05	11685	2,00	4,01	26,65	2,62E+07	2,43E+05
6574	4,33	8,34	23,74	3,17E+07	4,14E+05	9584	0,02	0,02	19,64	4,94E+08	8,98E+06	11686	1,90	3,93	26,65	2,06E+07	2,68E+05
6575	2,62	2,61	23,74	2,08E+07	4,51E+05	9585	-0,43	3,97	19,64	1,03E+07	1,58E+05	11687	1,90	3,27	26,65	9,10E+06	2,01E+05
6576	0,92	9,38	23,74	4,95E+07	5,92E+05	9586	-0,43	1,84	19,64	1,65E+07	2,44E+05	11688	1,89	1,89	26,65	1,14E+09	1,17E+07
6577	0,66	1,22	23,74	5,98E+07	6,02E+05	9587	-0,45	0,41	19,64	1,94E+07	2,99E+05	11689	1,87	4,14	26,65	2,50E+07	3,26E+05
6578	4,55	0,79	23,50	5,63E+07	5,91E+05	9588	-0,45	-0,46	19,64	4,50E+08	7,58E+06	11690	1,85	7,40	26,65	1,55E+07	3,18E+05
6579	4,54	4,96	23,50	4,58E+07	5,23E+05	9589	-0,46	6,44	19,64	1,27E+07	2,14E+05	11691	1,85	1,32	26,65	2,70E+07	2,30E+05
6580	2,57	2,61	23,50	1,43E+07	3,91E+05	9590	1,55	1,89	19,10	2,33E+07	1,91E+05	11692	1,83	0,89	26,65	1,17E+08	1,10E+06
6581	2,41	2,44	23,50	1,19E+07	3,81E+05	9591	1,53	9,22	19,10	8,70E+06	2,19E+05	11693	1,81	1,80	26,65	1,39E+09	1,35E+07
6582	1,66	0,88	23,50	4,71E+07	5,10E+05	9592	1,53	2,36	19,10	1,17E+07	1,72E+05	11694	1,79	7,79	26,65	2,23E+07	4,32E+05
6583	0,88	9,47	23,50	6,34E+07	7,57E+05	9593	1,50	6,92	19,10	2,98E+07	4,59E+05	11695	1,78	0,89	26,65	1,10E+08	9,03E+05
6584	0,83	5,39	23,50	1,94E+07	3,91E+05	9594	1,50	5,36	19,10	1,16E+07	2,06E+05	11696	1,72	8,96	26,65	1,75E+07	2,53E+05
6585	0,77	5,30	23,50	2,50E+07	5,17E+05	9595	1,50	2,02	19,10	1,25E+07	1,64E+05	11697	1,68	4,79	26,65	3,40E+07	3,27E+05
6586	0,77	1,75	23,50	3,09E+07	1,03E+06	9596	1,49	4,36	19,10	2,85E+07	3,78E+05	11698	1,67	3,14	26,65	2,89E+07	2,60E+05
6587	0,77	0,79	23,50	2,80E+09	4,86E+07	9597	1,49	1,50	19,10	3,52E+09	3,74E+07	116					

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6601	0,75	9,64	23,25	5,98E+07	6,25E+05	9611	1,38	1,37	18,56	4,66E+09	3,96E+07	11713	0,47	1,28	26,65	2,77E+07	3,21E+05
6602	0,73	2,79	23,25	3,35E+07	3,92E+05	9612	1,37	7,14	18,56	3,16E+07	3,40E+05	11714	1,27	1,84	26,11	4,78E+07	2,51E+05
6603	0,55	0,53	23,25	3,82E+07	4,75E+05	9613	1,37	4,58	18,56	1,85E+07	1,58E+05	11715	0,92	2,41	26,11	2,01E+07	2,39E+05
6604	2,37	2,35	23,00	1,98E+07	4,41E+05	9614	1,37	4,10	18,56	4,76E+07	3,73E+05	11716	0,88	1,63	26,11	4,99E+07	6,21E+05
6605	2,25	2,27	23,00	4,21E+07	8,00E+05	9615	1,37	2,10	18,56	2,20E+07	1,83E+05	11717	0,88	1,32	26,11	5,92E+07	3,25E+05
6606	0,88	8,51	23,00	1,11E+08	1,55E+06	9616	1,35	7,96	18,56	2,41E+07	2,99E+05	11718	0,88	0,89	26,11	3,71E+09	2,60E+07
6607	0,87	3,22	23,00	6,00E+07	8,07E+05	9617	1,30	7,92	18,56	1,21E+07	1,79E+05	11719	0,88	0,11	26,11	1,27E+07	2,34E+05
6608	0,85	2,09	23,00	6,49E+07	8,15E+05	9618	0,85	2,49	18,56	2,45E+07	2,52E+05	11720	0,86	6,96	26,11	1,44E+07	2,82E+05
6609	0,79	2,35	23,00	4,96E+07	4,12E+05	9619	0,77	0,76	18,56	3,82E+09	2,07E+07	11721	0,85	6,48	26,11	9,36E+06	2,02E+05
6610	0,69	0,70	23,00	2,14E+09	3,18E+07	9620	0,73	3,75	18,56	1,16E+07	1,61E+05	11722	0,47	0,46	26,11	4,58E+08	9,60E+06
6611	0,68	2,09	23,00	4,45E+07	7,15E+05	9621	1,52	8,22	18,02	2,31E+07	2,94E+05	11723	1,67	8,09	25,57	1,10E+07	2,32E+05
6612	0,50	0,53	23,00	2,44E+07	5,94E+05	9622	1,38	0,72	18,02	1,97E+07	2,35E+05	11724	1,37	4,84	25,57	1,63E+07	2,37E+05
6613	3,04	3,05	22,76	3,38E+07	4,85E+05	9623	1,37	2,28	18,02	1,61E+07	1,73E+05	11725	1,37	3,14	25,57	1,80E+07	2,74E+05
6614	2,67	2,70	22,76	1,83E+07	4,20E+05	9624	1,35	7,57	18,02	2,60E+07	2,78E+05	11726	1,36	4,01	25,57	2,47E+07	3,47E+05
6615	0,94	0,44	22,76	6,29E+07	9,10E+05	9625	1,35	4,36	18,02	2,79E+07	2,04E+05	11727	1,36	2,93	25,57	3,50E+07	3,50E+05
6616	0,89	6,95	22,76	6,47E+07	8,18E+05	9626	1,35	3,71	18,02	2,32E+07	2,54E+05	11728	0,96	1,50	25,57	7,53E+07	5,04E+05
6617	0,89	2,44	22,76	6,78E+07	1,02E+06	9627	1,34	2,15	18,02	1,64E+07	1,81E+05	11729	0,93	1,84	25,57	1,13E+08	9,30E+05
6618	0,68	9,56	22,76	4,85E+07	6,42E+05	9628	1,33	1,84	18,02	2,53E+07	1,73E+05	11730	0,92	6,96	25,57	2,69E+07	2,49E+05
6619	0,38	0,36	22,76	1,67E+07	6,20E+05	9629	1,33	0,72	18,02	1,97E+07	2,57E+05	11731	0,91	1,37	25,57	6,23E+07	3,24E+05
6620	4,59	0,88	22,51	5,86E+07	6,08E+05	9630	1,31	7,18	18,02	3,15E+07	2,43E+05	11732	0,84	1,54	25,57	3,45E+07	3,59E+05
6621	4,52	0,88	22,51	4,95E+07	4,53E+05	9631	0,89	7,31	18,02	3,14E+07	2,72E+05	11733	0,82	2,06	25,57	3,72E+07	3,83E+05
6622	2,09	2,09	22,51	6,38E+07	1,12E+06	9632	0,89	3,84	18,02	2,08E+07	1,89E+05	11734	0,82	1,84	25,57	6,80E+07	5,04E+05
6623	1,53	4,18	22,51	1,99E+07	5,05E+05	9633	0,88	4,66	18,02	1,72E+07	1,65E+05	11735	0,82	1,32	25,57	4,09E+07	3,37E+05
6624	1,52	7,56	22,51	2,56E+07	5,89E+05	9634	0,86	4,27	18,02	2,12E+07	1,92E+05	11736	1,89	0,93	25,03	5,58E+07	5,18E+05
6625	1,52	4,78	22,51	2,19E+07	3,98E+05	9635	0,85	8,78	18,02	1,74E+07	2,26E+05	11737	1,78	2,10	25,03	2,59E+07	2,26E+05
6626	1,52	1,48	22,51	8,27E+08	1,88E+07	9636	0,85	2,23	18,02	3,11E+07	2,96E+05	11738	1,77	1,76	25,03	6,85E+08	6,06E+06
6627	0,99	8,95	22,51	1,96E+07	5,11E+05	9637	0,82	2,49	18,02	2,36E+07	2,16E+05	11739	1,66	9,04	25,03	1,14E+07	2,13E+05
6628	0,99	0,62	22,51	6,13E+07	1,73E+06	9638	0,75	1,80	18,02	3,80E+07	2,62E+05	11740	1,55	8,52	25,03	1,33E+07	2,46E+05
6629	0,98	2,27	22,51	3,21E+07	5,53E+05	9639	0,74	4,75	18,02	1,75E+07	1,64E+05	11741	1,53	2,19	25,03	2,38E+07	2,18E+05
6630	0,89	7,30	22,51	4,42E+07	5,86E+05	9640	0,70	1,84	18,02	3,02E+07	2,83E+05	11742	1,37	0,89	25,03	5,07E+07	2,42E+05
6631	0,87	6,26	22,51	4,08E+07	5,34E+05	9641	1,57	8,22	17,48	2,39E+07	2,91E+05	11743	0,82	0,80	25,03	3,09E+09	2,34E+07
6632	4,58	4,78	22,26	3,36E+07	3,87E+05	9642	1,57	4,19	17,48	2,10E+07	2,96E+05	11744	0,74	2,23	25,03	2,48E+07	2,96E+05
6633	2,62	2,61	22,26	1,65E+07	4,62E+05	9643	1,52	4,19	17,48	2,40E+07	2,58E+05	11745	0,74	1,28	25,03	3,12E+07	2,64E+05
6634	2,33	2,35	22,26	2,76E+07	6,23E+05	9644	1,38	3,93	17,48	3,27E+07	3,69E+05	11746	0,73	4,36	25,03	4,52E+06	2,00E+05
6635	1,94	0,88	22,26	3,06E+07	3,91E+05	9645	1,37	8,52	17,48	3,30E+07	4,14E+05	11747	0,73	2,02	25,03	2,65E+07	3,80E+05
6636	1,53	0,88	22,26	1,05E+08	9,24E+05	9646	1,34	7,27	17,48	2,69E+07	2,93E+05	11748	0,73	1,89	25,03	2,45E+07	4,26E+05
6637	1,20	1,57	22,26	2,94E+07	1,17E+06	9647	1,33	4,19	17,48	2,99E+07	3,21E+05	11749	0,73	0,72	25,03	1,53E+09	1,63E+07
6638	1,20	0,88	22,26	1,86E+08	2,28E+06	9648	1,33	3,97	17,48	3,15E+07	2,75E+05	11750	1,97	1,97	24,49	2,36E+08	2,31E+06
6639	1,06	3,74	22,26	7,06E+06	3,91E+05	9649	1,27	1,93	17,48	1,31E+07	1,81E+05	11751	1,86	1,45	24,49	3,57E+07	3,23E+05
6640	0,93	8,34	22,26	6,89E+07	6,89E+05	9650	1,23	7,61	17,48	1,86E+07	2,09E+05	11752	1,83	0,89	24,49	5,95E+07	3,59E+05
6641	0,93	6,95	22,26	5,72E+07	5,96E+05	9651	1,19	1,19	17,48	7,28E+08	7,97E+06	11753	1,71	1,45	24,49	9,37E+07	1,15E+06
6642	0,92	6,35	22,26	2,52E+07	4,33E+05	9652	1,18	8,57	17,48	1,50E+07	1,60E+05	11754	1,70	0,85	24,49	2,36E+07	2,04E+05
6643	0,88	0,88	22,26	1,16E+10	1,80E+08	9653	1,18	7,61	17,48	1,74E+07	2,48E+05	11755	1,60	1,58	24,49	1,35E+09	1,24E+07
6644	0,87	2,96	22,26	6,47E+07	6,95E+05	9654	1,18	3,62	17,48	1,06E+07	1,68E+05	11756	1,49	1,93	24,49	8,72E+07	8,28E+05
6645	0,85	9,73	22,26	1,09E+08	1,15E+06	9655	1,16	4,01	17,48	2,13E+07	2,75E+05	11757	1,49	0,89	24,49	4,47E+07	4,39E+05
6646	0,84	7,04	22,26	5,18E+07	4,76E+05	9656	1,12	8,57	17,48	1,18E+07	1,64E+05	11758	1,48	4,79	24,49	1,20E+07	2,00E+05
6647	0,84	4,44	22,26	2,49E+07	7,35E+05	9657	0,96	1,67	17,48	2,30E+07	1,86E+05	11759	1,48	3,01	24,49	2,73E+07	4,52E+05
6648	0,07	0,79	22,26	2,01E+07	3,83E+05	9658	0,95	1,58	17,48	2,15E+07	1,78E+05	11760	1,47	3,84	24,49	1,12E+07	2,39E+05
6649	4,49	8,43	22,02	2,87E+07	4,31E+05	9659	0,93	0,54	17,48	3,01E+07	2,00E+05	11761	1,47	1,45	24,49	4,09E+09	5,25E+07
6650	4,35	0,88	22,02	4,53E+07	4,50E+05	9660	0,92	7,74	17,48	1,51E+07	1,80E+05	11762	1,41	1,41	24,49	4,34E+09	5,96E+07
6651	4,33	0,96	22,02	3,51E+07	4,15E+05	9661	0,92	4,19	17,48	2,10E+07	2,04E+05	11763	1,21	0,89	24,49	8,45E+07	4,66E+05
6652	2,84	0,88	22,02	3,20E+07	3,87E+05	9662	0,92	2,93	17,48	1,18E+07	1,83E+05	11764	0,91	0,24	24,49	1,29E+07	3,74E+05
6653	2,51	2,53	22,02	2,63E+07	4,54E+05	9663	0,92	1,93	17,48	7,88E+07	8,34E+05	11765	0,91	-0,37	24,49	7,49E+06	2,47E+05
6654	2,21	0,88	22,02	4,64E+07	5,26E+05	9664	0,89	1,67	17,48	4,10E+07	3,61E+05	11766	1,78	0,89	23,95	2,36E+07	2,95E+05
6655	1,62	0,88	22,02	9,37E+07	8,84E+05	9665	0,88	4,19	17,48	2,34E+07	1,86E+05	11767	1,60	0,85	23,95	2,99E+07	3,26E+05
6656	1,27	3,13	22,02	2,06E+07	4,31E+05	9666	0,88	0,89	17,48	4,72E+09	5,02E+07	11768	1,41	2,02	23,95	1,75E+07	2,30E+05
6657	1,07	1,75	22,02	6,37E+07	8,71E+05	9667	0,84	3,80	17,48	1,34E+07	2,06E+05	11769	1,40	0,72	23,95	1,71E+07	2,83E+05
6658	1,05	9,21	22,02	4,93E+07	6,17E+05	9668	0,82	7,40	17,48	1,77E+07	1,74E+05	11770	0,95	5,53	23,95	9,06E+06	2,53E+05
6659	1,05	9,04	22,02	4,91E+07	6,05E+05	9669	0,82	1,58	17,48	4,22E+07	3,69E+05	11771	0,93	1,37	23,95	1,16E+08	1,12E+06
6660	1,05	8,17	22,02	3,53E+07	6,79E+05	9670	0,79	4,27	17,48	1,64E+07	1,90E+05	11772	0,92	5,14	23,95	7,28E+06	2,27E+05
6661	1,05	2,27	22,02	2,04E+07	8,24E+05	9671	0,79	2,19	17,48	3,27E+07	2,72E+05	11773	0,91	1,84	23,95	1,51E+08	1,16E+06
6662	1,05	1,05	22,02	5,08E+09	1,02E+08	9672	0,74	1,45	17,48	4,20E+07	4,03E+05	11774	0,88	2,88	23,95	1,97E+07	2,27E+05
6663	0,97	0,44	22,02	9,40E+07													

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6677	4,52	7,39	21,77	2,66E+07	5,01E+05	9687	2,19	2,41	15,86	7,80E+07	4,89E+05	11789	1,72	0,93	22,87	2,22E+07	2,19E+05
6678	2,15	2,18	21,77	5,31E+07	9,60E+05	9688	2,19	2,19	15,86	7,47E+08	1,76E+07	11790	1,56	4,19	22,87	1,99E+07	2,89E+05
6679	1,90	1,92	21,77	6,78E+07	1,62E+06	9689	2,19	0,89	15,86	1,41E+07	3,23E+05	11791	1,55	4,79	22,87	1,72E+07	3,66E+05
6680	1,85	1,05	21,77	9,17E+06	3,84E+05	9690	2,17	6,92	15,86	5,65E+06	1,65E+05	11792	1,55	1,54	22,87	1,32E+09	1,28E+07
6681	1,67	0,88	21,77	7,95E+07	9,89E+05	9691	2,17	1,84	15,86	1,91E+07	1,96E+05	11793	1,53	0,85	22,87	4,53E+07	4,34E+05
6682	1,59	1,92	21,77	2,99E+07	4,05E+05	9692	1,86	3,80	15,86	1,24E+07	1,80E+05	11794	0,93	9,95	22,87	1,06E+07	2,18E+05
6683	1,29	3,83	21,77	3,62E+07	7,44E+05	9693	1,86	0,93	15,86	1,55E+07	3,78E+05	11795	0,92	7,01	22,87	5,66E+07	5,86E+05
6684	1,24	4,78	21,77	4,40E+07	1,21E+06	9694	1,85	4,79	15,86	6,90E+06	1,56E+05	11796	0,92	5,70	22,87	2,12E+07	4,36E+05
6685	1,10	5,74	21,77	2,12E+07	6,59E+05	9695	1,85	2,32	15,86	9,03E+06	1,57E+05	11797	0,92	2,49	22,87	5,33E+07	6,81E+05
6686	1,08	8,43	21,77	3,20E+07	8,03E+05	9696	1,85	1,84	15,86	9,78E+08	1,73E+07	11798	0,91	8,57	22,87	5,59E+07	7,18E+05
6687	1,06	6,78	21,77	2,18E+07	4,05E+05	9697	1,85	0,41	15,86	9,03E+06	1,92E+05	11799	0,89	8,78	22,87	4,90E+07	3,91E+05
6688	1,05	3,48	21,77	4,54E+07	6,26E+05	9698	1,83	0,72	15,86	1,28E+07	2,33E+05	11800	0,89	7,61	22,87	3,92E+07	3,53E+05
6689	1,03	9,99	21,77	4,54E+07	7,72E+05	9699	1,44	1,80	15,86	1,42E+07	1,58E+05	11801	0,88	6,48	22,87	3,81E+07	5,62E+05
6690	1,03	4,44	21,77	3,74E+07	8,24E+05	9700	0,67	3,97	15,86	1,63E+07	2,75E+05	11802	0,85	3,67	22,87	3,35E+07	6,20E+05
6691	1,01	9,30	21,77	5,11E+07	4,33E+05	9701	0,67	1,50	15,86	3,58E+07	2,75E+05	11803	0,70	2,10	22,87	6,94E+07	5,35E+05
6692	0,96	8,25	21,77	4,00E+07	7,50E+05	9702	0,67	0,67	15,86	1,17E+09	1,04E+07	11804	0,70	1,54	22,87	4,98E+07	2,11E+05
6693	0,91	5,91	21,77	4,91E+07	5,48E+05	9703	0,67	-0,41	15,86	7,42E+06	1,81E+05	11805	0,69	9,52	22,87	9,35E+06	2,60E+05
6694	0,87	2,09	21,77	1,09E+08	1,80E+06	9704	0,59	7,74	15,86	6,81E+06	1,69E+05	11806	2,37	2,36	22,33	1,52E+07	3,83E+05
6695	0,78	7,65	21,77	3,83E+07	5,48E+05	9705	0,59	0,98	15,86	1,13E+07	2,78E+05	11807	2,28	2,28	22,33	2,40E+07	5,02E+05
6696	0,75	-0,42	21,77	1,34E+07	4,11E+05	9706	1,71	2,28	15,33	1,43E+07	2,25E+05	11808	2,24	2,23	22,33	3,68E+07	5,44E+05
6697	0,70	3,22	21,77	3,86E+07	6,63E+05	9707	1,71	1,71	15,33	5,36E+08	1,42E+07	11809	2,05	2,06	22,33	2,52E+08	6,87E+05
6698	0,04	1,22	21,77	4,84E+07	6,15E+05	9708	1,71	0,85	15,33	6,86E+06	1,91E+05	11810	1,85	0,89	22,33	3,49E+07	3,01E+05
6699	-0,43	1,22	21,77	3,17E+07	4,56E+05	9709	1,71	0,63	15,33	1,25E+07	3,69E+05	11811	1,75	1,76	22,33	4,91E+07	5,77E+05
6700	5,30	1,22	21,52	1,44E+07	4,04E+05	9710	0,82	1,45	15,33	3,39E+07	4,64E+05	11812	1,55	7,57	22,33	1,55E+07	3,47E+05
6701	4,59	0,62	21,52	4,64E+07	6,32E+05	9711	0,81	0,80	15,33	2,27E+09	1,58E+07	11813	1,55	4,53	22,33	3,54E+07	3,63E+05
6702	4,49	0,70	21,52	4,84E+07	5,59E+05	9712	0,77	4,45	15,33	1,30E+07	1,92E+05	11814	1,53	1,84	22,33	6,81E+07	4,11E+05
6703	3,98	0,70	21,52	3,32E+07	4,01E+05	9713	1,90	3,88	14,79	6,88E+06	1,84E+05	11815	1,44	0,93	22,33	6,20E+07	3,13E+05
6704	3,94	0,88	21,52	4,21E+07	4,01E+05	9714	1,90	2,93	14,79	7,34E+06	2,10E+05	11816	1,22	3,84	22,33	2,44E+07	2,91E+05
6705	3,79	0,62	21,52	2,18E+07	3,82E+05	9715	1,90	2,62	14,79	8,18E+06	2,08E+05	11817	1,16	2,19	22,33	2,04E+07	2,05E+05
6706	3,00	0,70	21,52	3,58E+07	4,26E+05	9716	1,90	1,89	14,79	8,98E+08	2,10E+07	11818	1,08	2,19	22,33	4,58E+07	7,70E+05
6707	2,93	0,70	21,52	3,29E+07	4,24E+05	9717	1,90	0,89	14,79	6,54E+06	2,42E+05	11819	1,07	8,13	22,33	2,03E+07	5,70E+05
6708	2,77	0,88	21,52	3,88E+07	4,42E+05	9718	1,19	1,19	14,25	1,36E+07	2,36E+05	11820	1,07	3,80	22,33	3,08E+07	6,08E+05
6709	2,70	0,79	21,52	3,64E+07	4,00E+05	9719	1,19	0,76	13,71	3,84E+07	4,05E+05	11821	0,96	10,00	22,33	1,17E+07	2,14E+05
6710	2,08	0,79	21,52	6,04E+07	5,53E+05	9720	1,11	0,80	13,71	4,10E+07	4,87E+05	11822	0,95	9,17	22,33	4,11E+07	2,08E+05
6711	1,94	0,70	21,52	3,98E+07	3,88E+05	9721	0,90	0,50	13,71	2,02E+07	1,58E+05	11823	0,95	4,58	22,33	4,97E+07	5,10E+05
6712	1,81	1,83	21,52	8,52E+07	2,12E+06	9722	0,89	3,93	13,71	1,87E+07	2,99E+05	11824	0,93	6,70	22,33	5,27E+07	3,71E+05
6713	1,78	1,05	21,52	1,90E+07	4,01E+05	9723	0,89	3,49	13,71	9,59E+06	1,95E+05	11825	0,92	8,91	22,33	4,22E+07	5,89E+05
6714	1,73	1,75	21,52	1,35E+08	3,07E+06	9724	0,89	1,89	13,71	4,74E+07	5,28E+05	11826	0,92	7,79	22,33	4,01E+07	3,32E+05
6715	1,38	1,40	21,52	7,24E+08	1,76E+07	9725	0,89	0,89	13,71	1,85E+09	2,00E+07	11827	0,92	4,75	22,33	7,08E+07	7,49E+05
6716	1,35	4,00	21,52	2,43E+07	3,86E+05	9726	0,82	4,06	13,71	1,52E+07	1,57E+05	11828	0,92	3,88	22,33	6,81E+07	6,01E+05
6717	1,31	2,01	21,52	1,11E+08	1,70E+06	9727	0,82	0,46	13,71	2,40E+07	1,78E+05	11829	0,92	-0,24	22,33	1,37E+07	2,76E+05
6718	1,29	1,31	21,52	6,87E+09	1,33E+08	9728	0,81	1,58	13,71	5,38E+07	5,49E+05	11830	0,91	10,21	22,33	7,39E+06	2,35E+05
6719	1,29	0,79	21,52	2,84E+08	3,19E+06	9729	0,48	0,76	13,71	5,60E+07	4,20E+05	11831	0,91	9,13	22,33	4,69E+07	3,67E+05
6720	1,27	9,04	21,52	1,02E+08	1,12E+06	9730	0,82	1,93	13,17	6,11E+07	7,88E+05	11832	0,91	8,35	22,33	6,52E+07	6,57E+05
6721	1,26	6,69	21,52	2,96E+07	4,71E+05	9731	0,82	0,80	13,17	3,31E+09	3,48E+07	11833	0,91	6,74	22,33	4,98E+07	3,83E+05
6722	1,25	2,18	21,52	2,06E+07	6,26E+05	9732	0,67	1,84	13,17	2,74E+07	3,62E+05	11834	0,91	2,19	22,33	1,87E+08	1,29E+06
6723	1,25	1,92	21,52	1,45E+08	2,05E+06	9733	0,67	1,37	13,17	8,42E+07	1,01E+06	11835	0,91	2,02	22,33	2,26E+08	1,43E+06
6724	1,24	8,08	21,52	1,13E+08	1,32E+06	9734	0,67	0,67	13,17	2,38E+09	3,39E+07	11836	0,91	1,84	22,33	1,90E+08	1,46E+06
6725	1,24	4,35	21,52	6,31E+07	1,25E+06	9735	0,49	0,67	13,17	7,45E+07	4,65E+05	11837	0,91	1,54	22,33	2,04E+08	1,56E+06
6726	1,22	9,12	21,52	1,21E+08	1,63E+06	9736	0,41	1,67	13,17	1,25E+07	3,20E+05	11838	0,91	1,45	22,33	1,92E+08	1,54E+06
6727	1,22	1,22	21,52	9,97E+09	2,00E+08	9737	0,41	0,41	13,17	4,44E+08	9,61E+06	11839	0,91	0,24	22,33	5,58E+07	7,07E+05
6728	1,21	10,08	21,52	5,46E+07	1,13E+06	9738	0,40	1,32	13,17	1,34E+07	2,61E+05	11840	0,89	7,31	22,33	4,87E+07	4,33E+05
6729	1,21	3,65	21,52	1,15E+07	5,14E+05	9739	0,67	4,19	12,63	1,69E+07	1,57E+05	11841	0,89	4,14	22,33	1,12E+08	1,20E+06
6730	1,17	1,83	21,52	8,32E+07	1,06E+06	9740	0,67	2,23	11,55	8,25E+06	1,84E+05	11842	0,89	0,89	22,33	1,58E+10	1,50E+08
6731	1,15	8,17	21,52	5,99E+07	7,29E+05	9741	0,66	0,02	11,55	9,74E+06	1,58E+05	11843	0,88	9,78	22,33	7,91E+06	2,33E+05
6732	1,15	7,30	21,52	3,17E+07	5,01E+05							11844	0,86	4,45	22,33	6,61E+07	8,83E+05
6733	1,13	9,99	21,52	4,48E+07	8,69E+05							11845	0,85	1,19	22,33	2,50E+08	1,26E+06
6734	1,13	9,04	21,52	9,04E+07	1,12E+06							11846	0,84	9,22	22,33	4,53E+07	4,43E+05
6735	1,13	4,44	21,52	4,76E+07	1,30E+06							11847	0,84	7,61	22,33	2,59E+07	2,68E+05
6736	1,13	1,14	21,52	6,72E+09	1,26E+08							11848	0,84	0,50	22,33	1,54E+08	9,56E+05
6737	1,12	2,44	21,52	1,22E+07	4,82E+05							11849	0,82	8,31	22,33	3,96E+07	2,89E+05
6738	1,02	4,09	21,52	4,08E+07	7,62E+05							11850	0,82	1,80	22,33	1,89E+08	1,04E+06
6739	0,92	9,38	21,52	8,69E+07	6,74E+05							11851	1,89	1,11	21,79	7,97E+06	2,10E+05
6740	0,87	6,78	21,52	1,89E+07	4,34E+05							11852	1,85	1,84	21,79	3,96E+07	4,62E+05

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6753	0,44	-0,42	21,52	3,49E+07	7,72E+05							11865	1,26	4,79	21,79	1,12E+08	1,89E+06
6754	0,05	0,79	21,52	2,12E+07	4,13E+05							11866	1,26	-0,59	21,79	1,40E+07	2,85E+05
6755	5,77	0,88	21,28	3,71E+07	4,00E+05							11867	1,25	3,01	21,79	1,07E+07	2,70E+05
6756	4,57	0,88	21,28	5,70E+07	5,23E+05							11868	1,25	0,89	21,79	2,56E+08	1,66E+06
6757	4,50	3,48	21,28	1,20E+07	4,07E+05							11869	1,23	6,87	21,79	1,79E+07	3,62E+05
6758	4,45	0,79	21,28	5,23E+07	4,66E+05							11870	1,22	1,54	21,79	1,34E+08	6,89E+05
6759	4,39	0,88	21,28	5,06E+07	5,19E+05							11871	1,19	1,71	21,79	2,38E+07	3,51E+05
6760	4,27	0,70	21,28	4,93E+07	4,15E+05							11872	1,18	6,83	21,79	1,25E+07	2,06E+05
6761	4,22	0,70	21,28	4,54E+07	5,02E+05							11873	1,18	1,80	21,79	1,32E+07	3,56E+05
6762	3,87	0,88	21,28	4,67E+07	4,68E+05							11874	1,18	1,19	21,79	6,84E+09	8,79E+07
6763	3,79	0,88	21,28	4,13E+07	4,02E+05							11875	1,16	8,44	21,79	3,19E+07	3,65E+05
6764	3,09	0,70	21,28	4,00E+07	4,36E+05							11876	1,16	7,74	21,79	1,52E+07	3,18E+05
6765	3,05	3,05	21,28	1,97E+07	5,27E+05							11877	1,16	4,79	21,79	4,98E+07	7,65E+05
6766	2,13	0,79	21,28	6,09E+07	6,11E+05							11878	1,16	4,45	21,79	6,35E+07	1,22E+06
6767	1,88	0,79	21,28	3,66E+07	4,01E+05							11879	1,16	4,06	21,79	4,05E+07	6,08E+05
6768	1,81	0,70	21,28	3,46E+07	4,28E+05							11880	1,16	0,46	21,79	1,01E+07	2,26E+05
6769	1,64	1,66	21,28	1,79E+08	4,26E+06							11881	1,11	5,70	21,79	2,87E+07	6,41E+05
6770	1,49	0,70	21,28	1,06E+08	1,30E+06							11882	1,11	1,41	21,79	1,55E+08	9,93E+05
6771	1,40	1,83	21,28	6,09E+07	6,93E+05							11883	1,10	8,44	21,79	4,16E+07	7,55E+05
6772	1,34	9,82	21,28	2,39E+07	4,19E+05							11884	1,07	7,74	21,79	1,38E+07	2,21E+05
6773	1,27	7,13	21,28	4,41E+07	4,23E+05							11885	1,07	4,45	21,79	4,22E+07	7,64E+05
6774	1,24	6,95	21,28	3,30E+07	5,20E+05							11886	1,07	4,10	21,79	5,15E+07	7,65E+05
6775	1,22	7,21	21,28	4,26E+07	5,57E+05							11887	1,07	1,06	21,79	4,67E+09	6,60E+07
6776	1,22	6,61	21,28	3,24E+07	4,39E+05							11888	1,07	0,37	21,79	1,16E+07	2,81E+05
6777	1,20	2,44	21,28	7,22E+06	4,62E+05							11889	1,06	6,70	21,79	2,34E+07	5,30E+05
6778	1,19	6,69	21,28	2,65E+07	3,82E+05							11890	1,06	4,79	21,79	4,12E+07	6,68E+05
6779	1,17	2,09	21,28	1,23E+07	4,07E+05							11891	1,04	1,37	21,79	1,22E+08	6,70E+05
6780	1,12	3,39	21,28	2,61E+07	5,21E+05							11892	0,99	1,32	21,79	6,31E+07	5,13E+05
6781	0,83	7,30	21,28	3,43E+07	6,72E+05							11893	0,97	8,22	21,79	5,72E+07	6,40E+05
6782	0,82	5,22	21,28	3,64E+07	6,20E+05							11894	0,96	4,79	21,79	4,52E+07	6,33E+05
6783	0,70	1,22	21,28	3,01E+08	3,67E+06							11895	0,91	-0,33	21,79	9,80E+06	2,68E+05
6784	0,69	9,56	21,28	1,01E+08	1,42E+06							11896	0,89	2,88	21,79	4,20E+07	5,17E+05
6785	0,69	8,60	21,28	9,53E+07	1,23E+06							11897	0,88	3,27	21,79	2,25E+07	3,42E+05
6786	0,69	7,73	21,28	3,78E+07	1,00E+06							11898	0,81	4,79	21,79	6,79E+07	5,79E+05
6787	0,69	6,78	21,28	1,87E+07	4,08E+05							11899	0,80	2,84	21,79	2,69E+07	3,65E+05
6788	0,69	6,00	21,28	4,04E+07	4,78E+05							11900	0,80	1,80	21,79	1,94E+08	1,09E+06
6789	0,69	2,01	21,28	1,18E+08	1,87E+06							11901	0,80	0,11	21,79	2,61E+07	2,14E+05
6790	0,69	0,70	21,28	6,32E+09	1,15E+08							11902	0,78	8,26	21,79	3,02E+07	2,92E+05
6791	0,68	2,79	21,28	5,87E+07	7,43E+05							11903	0,73	8,57	21,79	2,73E+07	2,99E+05
6792	0,66	6,26	21,28	2,99E+07	4,50E+05							11904	0,73	6,96	21,79	2,28E+07	3,01E+05
6793	0,42	2,70	21,28	3,28E+07	4,77E+05							11905	0,73	3,19	21,79	2,27E+07	5,17E+05
6794	0,42	1,83	21,28	4,05E+07	6,22E+05							11906	0,73	3,01	21,79	2,54E+07	2,80E+05
6795	0,42	1,22	21,28	9,48E+07	1,55E+06							11907	0,70	6,35	21,79	1,51E+07	2,55E+05
6796	5,56	0,79	21,03	3,28E+07	4,29E+05							11908	0,47	1,63	21,79	1,87E+07	2,09E+05
6797	5,30	5,56	21,03	1,30E+07	4,27E+05							11909	0,47	-0,41	21,79	2,58E+07	6,57E+05
6798	4,50	0,88	21,03	5,74E+07	7,31E+05							11910	0,46	6,44	21,79	7,76E+06	2,07E+05
6799	4,45	7,30	21,03	2,53E+07	4,27E+05							11911	0,46	2,84	21,79	1,85E+07	4,89E+05
6800	4,33	0,79	21,03	5,68E+07	5,59E+05							11912	1,75	0,85	21,25	3,30E+07	2,38E+05
6801	4,12	0,79	21,03	4,54E+07	4,67E+05							11913	1,36	1,67	21,25	3,79E+06	2,42E+05
6802	4,02	0,88	21,03	4,06E+07	4,02E+05							11914	1,29	7,48	21,25	2,33E+07	4,76E+05
6803	3,72	0,79	21,03	4,59E+07	4,70E+05							11915	1,27	8,83	21,25	1,34E+07	2,52E+05
6804	3,49	0,79	21,03	4,05E+07	3,85E+05							11916	1,26	7,79	21,25	2,69E+07	3,67E+05
6805	3,30	0,79	21,03	4,09E+07	4,13E+05							11917	1,26	7,22	21,25	1,48E+07	2,33E+05
6806	2,93	0,79	21,03	3,89E+07	3,98E+05							11918	1,26	4,36	21,25	9,45E+07	1,34E+06
6807	2,83	0,88	21,03	4,03E+07	4,30E+05							11919	1,26	2,49	21,25	1,58E+07	3,15E+05
6808	2,28	0,88	21,03	3,27E+07	4,94E+05							11920	1,26	1,89	21,25	5,23E+07	8,22E+05
6809	1,58	0,79	21,03	1,01E+08	1,21E+06							11921	1,26	0,02	21,25	1,18E+07	2,46E+05
6810	1,52	0,79	21,03	1,29E+08	1,29E+06							11922	1,25	4,01	21,25	8,11E+07	1,15E+06
6811	1,49	7,99	21,03	4,77E+07	1,02E+06							11923	1,25	1,24	21,25	9,13E+09	1,53E+08
6812	1,49	4,61	21,03	3,64E+07	1,12E+06							11924	1,23	9,39	21,25	1,15E+07	3,83E+05
6813	1,49	1,48	21,03	1,45E+09	4,67E+07							11925	1,23	7,01	21,25	2,52E+07	2,35E+05
6814	1,30	9,82	21,03	2,77E+07	4,13E+05							11926	1,22	0,89	21,25	2,85E+08	1,68E+06
6815	1,21	5,65	21,03	3,36E+07	5,28E+05							11927	1,15	8,70	21,25	1,07E+07	2,18E+05
6816	1,21	3,31	21,03	1,98E+07	4,96E+05							11928	1,11	4,23	21,25	3,92E+07	4,45E+05
6817	1,11	7,39	21,03	3,21E+07	4,39E+05							11929	1,11	2,02	21,25	2,06E+07	2,45E+05
6818	1,10	4,18	21,03	4,15E+07	7,37E+05							11930	1,00	4,10	21,25	5,94E+07	5,13E+05
6819	1,10	2,01	21,03	1,59E+07	4,42E+05							11931	0,99	7,14	21,25	3,49E+07	3,34E+05
6820	1,10	1,75	21,03	6,60E+07	6,45E+05							11932	0,99	1,97	21,25	1,17E+08	9,25E+05
6821	1,08	3,39	21,03	4,94E+07	6,96E+05							11933	0,97	7,66	21,25	3,19E+07	2,87E+05
6822	0,97	1,92	21,03	4,43E+07	1,03E+06							11934	0,95	3,23	21,25	4,88E+06	2,11E+05
6823	0,96	5,56	21,03	2,23E+07	3,99E+05							11935	0,84	8,74	21,25	5,03E+07	5,40E+05
6824	0,96	4,26	21,03	5,19E+07	7,16E+05							11936	0,84	5,23	21,25	2,90E+07	3,59E+05
6825	0,91	5,91	21,03	5,88E+07	6,84E+05							11937	0,84	1,67	21,25	1,58E+08	9,17E+05
6826	0,91	-0,42	21,03	1,47E+07	5,67E+05							11938	0,82	3,27	21,25	9,47E+06	2,75E+05
6827	0,80	4,61	21,03	3,20E+07	4,79E+05							11939	0,73	1,28	21,25	9,16E+07	8,13E+05
6828	0,40	3,05	21,03	3,58E+07	6,24E+05							11940	0,73	0,07	21,25	1,35E+07	3,45E+05

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6829	4,24	0,88	20,78	4,43E+07	4,75E+05							11941	0,71	7,83	21,25	4,03E+07	6,46E+05
6830	4,08	0,79	20,78	4,00E+07	3,96E+05							11942	0,71	4,53	21,25	8,87E+07	8,99E+05
6831	3,22	0,79	20,78	3,98E+07	4,07E+05							11943	0,71	4,32	21,25	3,08E+07	2,65E+05
6832	3,14	0,79	20,78	4,32E+07	4,23E+05							11944	0,71	4,10	21,25	2,86E+07	4,49E+05
6833	2,51	2,53	20,78	2,52E+07	5,77E+05							11945	0,71	1,93	21,25	1,50E+08	1,55E+06
6834	2,46	2,44	20,78	1,85E+07	4,41E+05							11946	0,71	1,45	21,25	8,99E+07	1,08E+06
6835	2,41	2,44	20,78	1,60E+07	5,91E+05							11947	0,71	0,72	21,25	5,98E+09	7,67E+07
6836	2,33	2,35	20,78	3,26E+07	8,86E+05							11948	0,70	8,05	21,25	1,25E+07	3,12E+05
6837	2,25	0,88	20,78	4,42E+07	5,11E+05							11949	0,65	2,23	21,25	3,55E+07	3,25E+05
6838	2,14	0,79	20,78	5,34E+07	6,33E+05							11950	0,65	1,76	21,25	5,22E+07	3,39E+05
6839	1,73	0,96	20,78	4,46E+07	1,01E+06							11951	0,63	6,70	21,25	7,33E+06	2,53E+05
6840	1,07	2,35	20,78	3,23E+07	5,55E+05							11952	0,46	1,89	21,25	4,50E+07	6,07E+05
6841	1,02	2,27	20,78	2,03E+07	4,11E+05							11953	0,44	0,46	21,25	1,28E+09	1,97E+07
6842	0,97	0,44	20,78	1,33E+08	2,34E+06							11954	0,43	1,32	21,25	3,16E+07	4,40E+05
6843	0,94	9,21	20,78	6,58E+07	1,04E+06							11955	0,21	0,20	21,25	1,86E+07	2,41E+05
6844	0,94	7,39	20,78	4,84E+07	8,91E+05							11956	2,17	2,15	20,72	8,42E+07	1,97E+06
6845	0,93	9,47	20,78	7,94E+07	1,08E+06							11957	2,05	8,65	20,72	8,99E+06	2,89E+05
6846	0,93	0,96	20,78	1,27E+10	2,28E+08							11958	2,05	3,10	20,72	2,15E+07	5,50E+05
6847	0,92	2,18	20,78	1,32E+08	2,85E+06							11959	2,05	2,06	20,72	6,90E+08	1,96E+07
6848	0,91	9,73	20,78	8,88E+07	1,32E+06							11960	2,05	0,85	20,72	5,61E+07	8,85E+05
6849	0,91	6,87	20,78	4,81E+07	5,64E+05							11961	2,05	0,46	20,72	2,28E+07	5,04E+05
6850	0,84	7,04	20,78	3,82E+07	4,19E+05							11962	1,90	0,93	20,72	2,52E+07	4,03E+05
6851	0,80	6,17	20,78	5,18E+07	4,24E+05							11963	1,81	0,89	20,72	2,97E+07	2,69E+05
6852	0,79	7,65	20,78	7,18E+07	1,06E+06							11964	1,70	0,93	20,72	2,75E+07	3,05E+05
6853	0,79	0,79	20,78	1,05E+10	1,74E+08							11965	1,64	0,89	20,72	3,34E+07	2,85E+05
6854	0,78	9,56	20,78	1,03E+08	1,43E+06							11966	1,51	8,00	20,72	2,67E+07	6,00E+05
6855	0,78	8,51	20,78	1,63E+08	1,80E+06							11967	1,51	4,62	20,72	4,13E+07	8,60E+05
6856	0,78	6,00	20,78	5,50E+07	5,76E+05							11968	1,51	1,50	20,72	2,60E+09	2,34E+07
6857	0,78	3,22	20,78	7,79E+07	1,27E+06							11969	1,51	0,89	20,72	6,46E+07	4,59E+05
6858	0,78	2,01	20,78	1,87E+08	2,99E+06							11970	1,51	0,76	20,72	5,62E+07	5,08E+05
6859	0,77	4,61	20,78	4,57E+07	5,08E+05							11971	1,42	0,93	20,72	6,66E+07	7,61E+05
6860	0,75	6,17	20,78	5,44E+07	6,99E+05							11972	1,11	3,62	20,72	1,45E+07	3,37E+05
6861	0,75	2,79	20,78	6,12E+07	6,50E+05							11973	1,11	3,32	20,72	1,18E+07	3,88E+05
6862	0,73	4,52	20,78	5,49E+07	6,32E+05							11974	1,00	3,36	20,72	1,46E+07	2,10E+05
6863	0,70	3,13	20,78	5,29E+07	6,23E+05							11975	0,96	9,22	20,72	5,00E+07	6,89E+05
6864	0,64	3,83	20,78	3,01E+07	4,46E+05							11976	0,96	3,80	20,72	5,83E+07	6,18E+05
6865	0,50	8,60	20,78	1,84E+07	4,85E+05							11977	0,96	2,19	20,72	1,38E+08	1,65E+06
6866	0,50	2,96	20,78	3,17E+07	4,70E+05							11978	0,96	1,58	20,72	1,30E+08	1,32E+06
6867	0,50	0,96	20,78	8,64E+07	1,39E+06							11979	0,96	0,28	20,72	5,21E+07	1,02E+06
6868	0,50	0,53	20,78	1,22E+09	2,51E+07							11980	0,96	-0,28	20,72	2,22E+07	4,69E+05
6869	0,49	1,92	20,78	4,88E+07	5,34E+05							11981	0,95	8,65	20,72	2,72E+07	5,22E+05
6870	0,49	1,66	20,78	1,84E+07	6,04E+05							11982	0,95	7,35	20,72	4,15E+07	4,66E+05
6871	0,40	7,65	20,78	2,35E+07	5,60E+05							11983	0,95	6,96	20,72	3,29E+07	3,06E+05
6872	0,13	0,88	20,78	4,39E+07	9,19E+05							11984	0,95	6,57	20,72	3,16E+07	6,72E+05
6873	5,65	0,79	20,54	3,03E+07	3,84E+05							11985	0,95	4,19	20,72	8,41E+07	5,40E+05
6874	5,52	0,79	20,54	3,30E+07	4,23E+05							11986	0,95	2,58	20,72	1,63E+07	2,05E+05
6875	5,48	0,88	20,54	3,25E+07	4,16E+05							11987	0,95	0,93	20,72	1,66E+10	2,42E+08
6876	5,41	0,96	20,54	2,99E+07	4,03E+05							11988	0,92	4,10	20,72	9,46E+07	5,62E+05
6877	3,36	0,88	20,54	3,35E+07	3,95E+05							11989	0,86	2,97	20,72	2,20E+07	2,22E+05
6878	3,07	0,79	20,54	3,80E+07	4,14E+05							11990	0,86	1,28	20,72	1,65E+08	9,79E+05
6879	2,25	2,27	20,54	4,34E+07	1,29E+06							11991	0,85	6,48	20,72	2,82E+07	3,04E+05
6880	2,15	2,18	20,54	1,81E+08	6,31E+06							11992	0,84	5,05	20,72	2,93E+07	3,22E+05
6881	2,02	8,25	20,54	1,63E+07	4,20E+05							11993	0,82	9,13	20,72	5,82E+07	5,25E+05
6882	2,02	2,01	20,54	1,19E+09	3,99E+07							11994	0,82	7,53	20,72	3,44E+07	2,88E+05
6883	2,02	0,79	20,54	9,69E+07	1,78E+06							11995	0,82	1,32	20,72	1,49E+08	9,68E+05
6884	2,02	0,44	20,54	3,16E+07	6,87E+05							11996	0,81	7,61	20,72	3,65E+07	2,81E+05
6885	1,85	0,79	20,54	3,02E+07	4,58E+05							11997	0,81	4,79	20,72	7,03E+07	6,11E+05
6886	1,76	2,01	20,54	3,95E+07	9,08E+05							11998	0,81	4,58	20,72	7,83E+07	7,52E+05
6887	1,66	2,01	20,54	4,11E+07	6,50E+05							11999	0,81	4,23	20,72	4,20E+07	5,22E+05
6888	1,59	2,01	20,54	4,82E+07	5,71E+05							12000	0,81	1,93	20,72	2,19E+08	1,86E+06
6889	1,38	2,01	20,54	4,96E+07	5,75E+05							12001	0,81	1,54	20,72	1,16E+08	8,78E+05
6890	1,06	8,43	20,54	3,96E+07	4,12E+05							12002	0,81	0,80	20,72	9,36E+09	1,07E+08
6891	1,02	8,51	20,54	4,89E+07	4,99E+05							12003	0,80	8,52	20,72	4,53E+07	4,67E+05
6892	0,98	2,53	20,54	5,47E+07	6,60E+05							12004	0,80	7,83	20,72	4,08E+07	5,01E+05
6893	0,94	6,43	20,54	2,36E+07	5,66E+05							12005	0,80	6,44	20,72	2,11E+07	2,96E+05
6894	0,93	5,56	20,54	2,52E+07	4,29E+05							12006	0,80	0,11	20,72	2,98E+07	4,28E+05
6895	0,92	3,22	20,54	7,61E+07	1,47E+06							12007	0,78	3,19	20,72	9,01E+06	2,32E+05
6896	0,78	4,87	20,54	2,39E+07	5,40E+05							12008	0,78	1,19	20,72	1,47E+08	8,41E+05
6897	0,70	2,09	20,54	1,57E+08	1,53E+06							12009	0,76	6,87	20,72	2,96E+07	2,33E+05
6898	0,69	9,21	20,54	1,77E+07	5,34E+05							12010	0,73	8,39	20,72	2,54E+07	2,44E+05
6899	0,69	4,96	20,54	2,02E+07	3,96E+05							12011	0,73	-0,37	20,72	1,52E+07	2,15E+05
6900	0,68	3,74	20,54	3,60E+07	6,70E+05							12012	0,71	9,22	20,72	6,61E+07	8,60E+05
6901	0,54	2,09	20,54	3,98E+07	5,34E+05							12013	0,71	5,05	20,72	1,53E+07	2,73E+05
6902	4,58	2,61	20,29	2,68E+07	4,87E+05							12014	0,71	4,79	20,72	4,34E+07	4,03E+05
6903	3,03	3,05	20,29	2,58E+07	4,24E+05							12015	0,71	3,80	20,72	2,43E+07	4,31E+05
6904	2,61	2,61	20,29	2,27E+07	4,66E+05							12016	0,66	0,33	20,72	3,26E+07	4,00E+05

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6905	2,01	3,05	20,29	1,41E+07	6,39E+05							12017	0,63	1,28	20,72	1,32E+07	2,10E+05
6906	0,92	6,69	20,29	3,54E+07	6,36E+05							12018	0,52	8,65	20,72	1,30E+07	3,73E+05
6907	0,88	4,09	20,29	3,16E+07	6,45E+05							12019	0,52	1,67	20,72	3,74E+07	5,16E+05
6908	0,80	10,16	20,29	7,95E+06	4,30E+05							12020	0,51	4,53	20,72	8,60E+06	2,44E+05
6909	0,78	6,78	20,29	3,43E+07	6,12E+05							12021	0,51	0,50	20,72	1,04E+09	1,52E+07
6910	0,69	7,65	20,29	4,85E+07	5,68E+05							12022	0,50	0,93	20,72	6,50E+07	5,56E+05
6911	0,69	4,78	20,29	2,89E+07	4,18E+05							12023	0,41	3,06	20,72	2,46E+07	4,50E+05
6912	4,55	2,61	20,04	2,76E+07	4,40E+05							12024	0,40	7,66	20,72	1,73E+07	4,27E+05
6913	2,51	2,53	20,04	2,49E+07	5,38E+05							12025	0,40	0,07	20,72	3,57E+07	5,62E+05
6914	1,59	1,83	20,04	1,19E+07	5,21E+05							12026	0,32	1,24	20,72	1,95E+07	2,02E+05
6915	1,13	1,40	20,04	2,20E+07	8,56E+05							12027	0,26	0,24	20,72	1,55E+07	3,66E+05
6916	1,01	9,38	20,04	4,36E+07	3,82E+05							12028	0,93	5,23	20,18	4,53E+06	2,03E+05
6917	0,66	4,96	20,04	3,16E+07	3,95E+05							12029	0,93	2,71	20,18	8,57E+06	2,16E+05
6918	2,16	2,18	19,55	4,17E+07	7,50E+05							12030	0,92	9,09	20,18	4,47E+07	6,42E+05
6919	1,44	4,18	19,55	1,56E+07	6,58E+05							12031	0,92	1,97	20,18	1,39E+08	1,17E+06
6920	1,21	1,92	19,55	1,10E+07	4,06E+05							12032	0,88	-0,02	20,18	6,46E+06	2,25E+05
6921	1,19	9,21	19,55	2,73E+07	4,72E+05							12033	0,82	10,21	20,18	1,36E+07	3,72E+05
6922	1,19	1,22	19,55	1,44E+09	4,77E+07							12034	0,81	7,01	20,18	3,55E+07	3,76E+05
6923	0,97	5,56	19,55	2,47E+07	4,00E+05							12035	0,81	6,79	20,18	3,28E+07	3,48E+05
6924	0,94	9,64	19,55	3,11E+07	4,15E+05							12036	0,78	9,48	20,18	1,87E+07	2,12E+05
6925	0,94	3,22	19,55	2,78E+07	3,96E+05							12037	0,78	8,83	20,18	4,37E+07	7,16E+05
6926	0,79	5,91	19,55	2,88E+07	4,39E+05							12038	0,70	2,45	20,18	1,79E+07	2,32E+05
6927	0,04	0,88	19,55	3,32E+07	7,73E+05							12039	0,21	0,20	20,18	2,16E+07	3,02E+05
6928	0,04	0,70	19,55	4,22E+07	8,48E+05							12040	1,47	8,61	19,64	1,12E+07	3,30E+05
6929	0,03	1,31	19,55	3,67E+07	9,01E+05							12041	1,47	4,75	19,64	1,59E+07	2,35E+05
6930	0,03	0,01	19,55	7,53E+08	2,17E+07							12042	1,47	4,19	19,64	5,07E+07	8,64E+05
6931	0,96	7,30	19,31	2,93E+07	8,05E+05							12043	1,47	-0,67	19,64	2,10E+07	1,11E+06
6932	0,96	2,27	19,31	3,42E+07	7,88E+05							12044	1,45	1,76	19,64	3,08E+07	2,48E+05
6933	0,96	0,96	19,31	2,69E+09	5,30E+07							12045	1,21	1,19	19,64	3,00E+09	1,86E+07
6934	0,65	4,70	19,31	2,80E+07	4,40E+05							12046	1,01	0,33	19,64	3,54E+07	2,13E+05
6935	-0,43	6,43	19,55	2,15E+07	6,26E+05							12047	0,99	1,76	19,64	3,36E+07	2,73E+05
6936	-0,43	-0,42	19,55	7,48E+08	1,92E+07							12048	0,93	2,93	19,64	7,72E+06	2,12E+05
6937	-0,43	0,10	19,31	1,82E+07	3,92E+05							12049	0,81	3,97	19,64	3,36E+07	3,76E+05
6938	-0,44	1,92	19,31	2,61E+07	5,69E+05							12050	0,67	2,67	19,64	1,19E+07	2,43E+05
6939	-0,44	0,70	19,31	3,05E+07	7,16E+05							12051	0,06	6,27	19,64	1,01E+07	3,73E+05
6940	-0,44	0,44	19,31	3,20E+07	8,49E+05							12052	0,06	3,10	19,64	1,47E+07	4,00E+05
6941	1,97	2,01	19,06	1,22E+07	6,97E+05							12053	0,06	1,32	19,64	4,07E+07	7,95E+05
6942	1,90	1,92	19,06	3,16E+07	1,14E+06							12054	0,06	0,72	19,64	2,87E+07	6,90E+05
6943	1,82	1,83	19,06	6,73E+07	1,92E+06							12055	0,06	0,41	19,64	2,29E+07	5,34E+05
6944	1,53	5,39	19,06	1,81E+07	4,98E+05							12056	0,06	0,07	19,64	6,15E+08	1,63E+07
6945	1,49	4,35	19,06	1,20E+07	6,74E+05							12057	0,05	0,93	19,64	3,34E+07	5,77E+05
6946	1,03	1,48	19,06	1,26E+08	1,37E+06							12058	-0,40	6,44	19,64	1,67E+07	4,37E+05
6947	0,94	3,22	19,06	2,31E+07	3,89E+05							12059	-0,40	2,88	19,64	1,80E+07	3,39E+05
6948	0,64	9,21	19,06	1,26E+07	4,04E+05							12060	-0,40	0,46	19,64	3,33E+07	7,48E+05
6949	0,64	0,62	19,06	9,91E+08	2,40E+07							12061	-0,40	-0,41	19,64	5,67E+08	1,32E+07
6950	0,45	1,48	19,06	3,84E+07	4,96E+05							12062	-0,42	1,89	19,64	2,29E+07	4,86E+05
6951	0,12	1,48	19,06	3,20E+07	4,20E+05							12063	-0,42	0,72	19,64	3,86E+07	7,01E+05
6952	1,73	1,75	18,81	1,24E+08	2,90E+06							12064	1,89	1,89	19,10	3,52E+07	5,00E+05
6953	1,63	1,66	18,81	2,80E+08	6,30E+06							12065	1,86	1,50	19,10	2,50E+07	2,63E+05
6954	1,53	7,73	18,81	3,61E+07	6,40E+05							12066	1,72	1,71	19,10	4,35E+07	6,02E+05
6955	1,53	4,00	18,81	1,42E+07	4,10E+05							12067	1,70	1,50	19,10	5,99E+07	4,78E+05
6956	1,53	0,79	18,81	1,74E+08	4,07E+06							12068	1,64	1,45	19,10	2,30E+08	6,44E+05
6957	1,52	8,60	18,81	3,50E+07	6,61E+05							12069	1,56	2,10	19,10	2,64E+07	4,64E+05
6958	1,52	6,95	18,81	7,43E+07	1,54E+06							12070	1,55	9,22	19,10	1,92E+07	4,70E+05
6959	1,52	1,48	18,81	3,66E+09	8,37E+07							12071	1,55	7,35	19,10	1,77E+07	2,73E+05
6960	1,50	9,21	18,81	2,14E+07	4,85E+05							12072	1,53	7,18	19,10	2,36E+07	2,95E+05
6961	1,36	8,95	18,81	3,41E+07	4,91E+05							12073	1,53	6,96	19,10	3,30E+07	7,18E+05
6962	0,78	9,56	18,81	3,18E+07	4,93E+05							12074	1,53	5,40	19,10	2,30E+07	4,71E+05
6963	0,78	7,56	18,81	2,03E+07	4,87E+05							12075	1,53	4,62	19,10	1,71E+07	3,00E+05
6964	0,78	6,69	18,81	2,24E+07	4,89E+05							12076	1,53	1,54	19,10	3,96E+09	6,27E+07
6965	0,78	2,01	18,81	2,17E+07	7,64E+05							12077	1,52	7,57	19,10	8,16E+06	2,35E+05
6966	0,78	0,79	18,81	2,21E+09	4,13E+07							12078	1,51	4,40	19,10	4,39E+07	9,57E+05
6967	1,40	4,09	18,57	1,56E+07	5,64E+05							12079	1,41	1,41	19,10	5,33E+09	7,00E+07
6968	1,39	1,40	18,57	5,10E+09	8,82E+07							12080	0,97	7,35	19,10	5,03E+07	6,86E+05
6969	1,38	7,13	18,57	5,69E+07	1,31E+06							12081	0,97	4,36	19,10	7,12E+06	2,38E+05
6970	1,38	3,39	18,57	1,98E+07	6,79E+05							12082	0,96	4,14	19,10	4,81E+07	4,16E+05
6971	1,36	10,25	18,57	3,94E+07	6,77E+05							12083	0,81	8,09	19,10	2,63E+07	5,19E+05
6972	1,39	7,91	18,32	8,71E+07	1,38E+06							12084	0,81	2,06	19,10	7,94E+07	6,23E+05
6973	1,36	8,78	18,32	3,46E+07	4,22E+05							12085	0,66	9,22	19,10	3,30E+07	4,50E+05
6974	1,36	2,61	18,32	9,73E+06	4,05E+05							12086	0,66	4,75	19,10	1,41E+07	3,56E+05
6975	0,89	8,51	18,32	4,11E+07	3,87E+05							12087	0,66	1,71	19,10	3,87E+07	5,03E+05
6976	0,87	0,36	18,32	2,04E+07	5,64E+05							12088	0,66	1,19	19,10	2,20E+07	2,01E+05
6977	0,84	8,78	18,32	3,57E+07	9,15E+05							12089	-0,43	4,01	19,10	1,17E+07	3,04E+05
6978	0,74	3,74	18,32	2,21E+07	5,45E+05							12090	1,55	2,19	18,56	2,15E+07	4,77E+05
6979	0,91	7,30	18,07	4,45E+07	8,55E+05							12091	1,55	0,85	18,56	1,53E+08	2,99E+06
6980	0,84	2,44	18,07	5,43E+07	6,74E+05							12092	1,53	4,06	18,56	2,35E+07	2,45E+05

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
6981	0,77	8,51	18,07	3,96E+07	3,85E+05							12093	1,41	7,96	18,56	2,77E+07	6,53E+05
6982	0,73	8,60	18,07	3,30E+07	4,19E+05							12094	1,41	4,14	18,56	5,98E+07	7,21E+05
6983	0,71	1,83	18,07	2,71E+07	6,73E+05							12095	1,40	7,18	18,56	5,56E+07	8,72E+05
6984	1,82	1,83	17,83	6,56E+07	2,07E+06							12096	1,40	4,62	18,56	2,84E+07	4,87E+05
6985	1,73	1,75	17,83	1,17E+08	3,02E+06							12097	1,40	3,41	18,56	3,01E+07	5,54E+05
6986	1,57	8,60	17,83	1,83E+07	5,12E+05							12098	1,11	1,11	18,56	4,24E+08	2,96E+06
6987	1,57	8,25	17,83	2,06E+07	9,37E+05							12099	0,86	2,49	18,56	3,08E+07	4,70E+05
6988	1,57	4,18	17,83	2,62E+07	9,58E+05							12100	0,80	7,57	18,56	1,50E+07	2,26E+05
6989	1,57	1,57	17,83	1,97E+09	4,69E+07							12101	0,80	4,79	18,56	2,56E+07	4,10E+05
6990	1,40	0,88	17,83	1,21E+08	1,37E+06							12102	0,78	6,74	18,56	2,07E+07	2,32E+05
6991	1,38	1,40	17,83	5,26E+09	8,13E+07							12103	1,41	4,79	18,02	2,93E+07	4,14E+05
6992	1,36	7,65	17,83	2,95E+07	7,52E+05							12104	1,40	3,75	18,02	4,50E+07	8,85E+05
6993	1,36	3,74	17,83	6,32E+07	1,06E+06							12105	1,40	2,06	18,02	2,86E+07	4,30E+05
6994	1,26	0,70	17,83	3,75E+07	4,83E+05							12106	1,40	0,72	18,02	7,09E+07	9,94E+05
6995	1,21	8,08	17,83	2,09E+07	4,24E+05							12107	1,38	7,61	18,02	4,24E+07	8,58E+05
6996	1,20	7,65	17,83	2,07E+07	7,52E+05							12108	1,38	4,36	18,02	2,75E+07	3,16E+05
6997	1,12	1,40	17,83	2,03E+08	2,40E+06							12109	0,95	4,62	18,02	1,46E+07	2,05E+05
6998	0,91	9,47	17,83	4,85E+07	6,62E+05							12110	0,93	7,31	18,02	4,91E+07	5,94E+05
6999	0,91	2,35	17,83	3,10E+07	6,63E+05							12111	0,93	2,36	18,02	4,20E+07	4,30E+05
7000	0,89	0,36	17,83	2,12E+07	3,83E+05							12112	0,92	3,84	18,02	2,75E+07	5,40E+05
7001	0,88	2,79	17,83	2,36E+07	3,81E+05							12113	0,91	2,75	18,02	9,49E+06	2,03E+05
7002	0,88	1,57	17,83	1,36E+08	1,49E+06							12114	0,86	9,74	18,02	7,34E+06	2,07E+05
7003	0,84	1,48	17,83	1,57E+08	1,64E+06							12115	0,86	8,78	18,02	2,28E+07	5,12E+05
7004	0,83	9,64	17,83	5,44E+07	6,22E+05							12116	0,86	7,35	18,02	3,17E+07	3,99E+05
7005	0,83	2,18	17,83	6,83E+07	1,09E+06							12117	0,86	4,32	18,02	2,16E+07	3,43E+05
7006	0,79	9,82	17,83	3,69E+07	4,68E+05							12118	0,86	4,01	18,02	2,15E+07	2,29E+05
7007	0,74	1,40	17,83	1,63E+08	2,04E+06							12119	0,86	2,28	18,02	4,02E+07	5,74E+05
7008	0,73	9,56	17,83	3,12E+07	4,75E+05							12120	0,86	1,54	18,02	5,39E+07	7,79E+05
7009	0,73	0,70	17,83	2,36E+09	4,32E+07							12121	0,85	9,17	18,02	5,96E+06	2,46E+05
7010	0,71	2,18	17,83	2,33E+07	5,02E+05							12122	0,85	9,00	18,02	1,31E+06	2,45E+05
7011	0,47	1,31	17,83	2,91E+07	3,80E+05							12123	0,76	0,76	18,02	2,57E+09	3,11E+07
7012	1,64	0,88	17,58	4,56E+07	5,22E+05							12124	0,74	3,80	18,02	1,40E+07	3,53E+05
7013	1,59	2,27	17,58	1,30E+07	3,99E+05							12125	0,74	1,84	18,02	4,82E+07	6,59E+05
7014	1,58	1,05	17,58	4,96E+07	6,75E+05							12126	2,46	2,45	17,48	1,08E+07	3,61E+05
7015	1,39	8,51	17,58	4,04E+07	1,38E+06							12127	1,59	8,26	17,48	3,66E+07	1,01E+06
7016	1,39	3,92	17,58	4,89E+07	8,86E+05							12128	1,59	7,31	17,48	1,75E+07	2,37E+05
7017	1,38	8,78	17,58	3,68E+07	4,70E+05							12129	1,59	4,23	17,48	2,95E+07	8,45E+05
7018	1,35	9,12	17,58	3,07E+07	4,21E+05							12130	1,59	4,06	17,48	2,45E+07	3,29E+05
7019	1,32	7,99	17,58	3,40E+07	3,87E+05							12131	1,59	1,58	17,48	1,93E+09	2,57E+07
7020	1,32	7,21	17,58	5,34E+07	1,03E+06							12132	1,59	0,93	17,48	3,55E+07	2,66E+05
7021	1,32	4,18	17,58	1,75E+07	8,25E+05							12133	1,41	8,57	17,48	4,99E+07	1,19E+06
7022	1,20	8,60	17,58	1,18E+07	4,35E+05							12134	1,41	3,97	17,48	4,31E+07	9,49E+05
7023	1,20	4,00	17,58	3,04E+07	8,73E+05							12135	1,38	2,49	17,48	1,22E+07	3,07E+05
7024	1,20	3,65	17,58	2,92E+07	6,62E+05							12136	1,34	7,27	17,48	4,49E+07	7,90E+05
7025	1,20	1,22	17,58	1,43E+09	3,25E+07							12137	1,34	4,19	17,48	3,27E+07	8,23E+05
7026	0,99	8,43	17,58	3,70E+07	4,59E+05							12138	1,34	3,32	17,48	2,72E+07	3,57E+05
7027	0,97	0,44	17,58	6,63E+07	1,03E+06							12139	1,31	0,98	17,48	5,19E+07	4,68E+05
7028	0,96	8,43	17,58	4,66E+07	5,12E+05							12140	1,27	0,93	17,48	5,46E+07	4,60E+05
7029	0,96	2,70	17,58	3,15E+07	4,84E+05							12141	1,22	8,57	17,48	1,58E+07	4,12E+05
7030	0,96	2,53	17,58	3,57E+07	4,33E+05							12142	1,22	7,66	17,48	3,17E+07	7,72E+05
7031	0,92	6,87	17,58	2,56E+07	3,89E+05							12143	1,22	4,79	17,48	7,89E+06	2,26E+05
7032	0,92	2,01	17,58	1,06E+08	1,55E+06							12144	1,22	4,06	17,48	3,20E+07	8,16E+05
7033	0,91	0,88	17,58	6,10E+09	9,98E+07							12145	1,22	3,67	17,48	2,16E+07	5,52E+05
7034	0,89	9,73	17,58	5,48E+07	6,00E+05							12146	1,22	1,76	17,48	1,83E+07	3,16E+05
7035	0,89	8,43	17,58	4,60E+07	5,51E+05							12147	1,22	1,24	17,48	9,17E+08	1,70E+07
7036	0,88	3,22	17,58	4,96E+07	5,58E+05							12148	1,21	1,54	17,48	2,36E+07	2,38E+05
7037	0,85	8,51	17,58	4,84E+07	5,32E+05							12149	0,96	3,41	17,48	1,65E+07	3,39E+05
7038	0,83	4,26	17,58	2,80E+07	5,41E+05							12150	0,95	7,05	17,48	1,53E+07	2,05E+05
7039	0,74	9,30	17,58	8,54E+06	3,92E+05							12151	0,95	2,02	17,48	1,31E+08	1,58E+06
7040	0,74	8,60	17,58	3,39E+07	3,87E+05							12152	0,95	0,28	17,48	2,62E+07	4,94E+05
7041	0,74	4,78	17,58	1,81E+07	4,11E+05							12153	0,95	-0,24	17,48	1,19E+07	2,37E+05
7042	0,63	7,65	17,58	2,50E+07	6,36E+05							12154	0,93	8,09	17,48	1,38E+07	2,41E+05
7043	0,63	1,40	17,58	9,69E+07	1,52E+06							12155	0,93	4,23	17,48	3,59E+07	5,78E+05
7044	0,63	0,62	17,58	1,20E+09	3,24E+07							12156	0,93	1,58	17,48	7,42E+07	7,51E+05
7045	0,93	3,39	17,33	3,85E+07	6,45E+05							12157	0,93	0,93	17,48	6,10E+09	1,02E+08
7046	0,96	9,47	17,09	3,77E+07	4,47E+05							12158	0,92	8,65	17,48	1,26E+07	2,13E+05
7047	1,48	1,48	16,35	1,40E+09	4,30E+07							12159	0,91	6,57	17,48	1,55E+07	2,64E+05
7048	1,46	2,70	16,35	1,04E+07	4,47E+05							12160	0,89	7,83	17,48	1,90E+07	2,62E+05
7049	1,46	2,53	16,35	9,92E+06	4,22E+05							12161	0,76	4,79	17,48	2,39E+07	3,40E+05
7050	0,63	7,73	16,35	1,94E+07	4,05E+05							12162	0,76	1,45	17,48	6,33E+07	1,01E+06
7051	0,61	6,17	16,35	1,30E+07	2,45E+05							12163	0,74	9,35	17,48	9,18E+06	2,92E+05
7052	0,63	9,47	16,10	7,28E+08	3,04E+05							12164	0,65	7,70	17,48	1,84E+07	2,95E+05
7053	0,61	3,74	16,10	1,48E+07	4,29E+05							12165	0,65	4,19	17,48	1,38E+07	2,80E+05
7054	0,61	1,48	16,10	3,71E+07	7,25E+05							12166	0,65	1,41	17,48	5,34E+07	8,77E+05
7055	0,61	0,62	16,10	8,97E+08	2,31E+07							12167	0,65	0,63	17,48	1,48E+09	2,09E+07
#Ile144 hgme												12169	0,40	1,93	17,48	5,52E+06	2,06E+05

N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.	N.	HC	H	C	Integral	Intens.
7056	0,60	5,13	16,10	8,07E+06	2,65E+05							12170	0,99	8,52	16,94	6,17E+06	2,03E+05
7057	2,24	4,00	16,10	1,05E+07	2,48E+05							12171	0,97	8,13	16,94	1,14E+07	2,29E+05
7058	2,21	3,22	16,10	5,34E+08	2,86E+05							12172	0,97	3,67	16,94	1,21E+07	2,66E+05
7059	2,20	7,04	15,85	2,61E+07	5,57E+05							12173	0,97	2,75	16,94	1,73E+07	4,18E+05
7060	2,20	4,78	15,85	1,78E+07	5,18E+05							12174	0,95	7,74	16,94	2,04E+07	3,40E+05
7061	2,20	2,70	15,85	3,14E+07	9,92E+05							12175	2,22	2,54	16,40	1,45E+07	2,15E+05
7062	2,20	2,18	15,85	1,15E+09	3,80E+07							12176	2,12	2,10	16,40	8,17E+08	2,03E+07
#Met ce												12177	1,98	-0,50	16,40	5,90E+06	2,07E+05
7063	2,20	0,88	15,85	4,34E+07	1,05E+06							12178	1,55	2,15	16,40	9,23E+06	2,88E+05
7064	1,86	1,83	15,61	1,30E+09	3,51E+07							12179	1,53	2,58	16,40	6,43E+06	2,30E+05
#Met ce												12180	1,53	1,54	16,40	1,12E+09	2,44E+07
7065	1,86	0,88	15,61	3,47E+07	8,73E+05							12181	0,65	1,54	16,40	3,07E+07	5,25E+05
7066	1,86	0,70	15,61	1,97E+07	6,94E+05							12182	0,63	7,74	16,40	1,95E+07	3,26E+05
7067	1,85	0,44	15,61	7,85E+06	4,13E+05							12183	0,63	3,75	16,40	7,12E+06	2,20E+05
7068	1,72	1,75	15,61	1,01E+09	3,07E+07							12184	2,23	4,79	15,86	1,42E+07	3,48E+05
#Met ce												12185	2,23	4,01	15,86	5,58E+06	2,33E+05
7069	1,72	0,88	15,61	3,03E+07	5,12E+05							12186	2,23	3,27	15,86	1,04E+07	2,64E+05
7070	1,72	0,70	15,61	3,34E+07	7,46E+05							12187	2,23	2,80	15,86	2,18E+07	5,83E+05
7071	0,80	1,75	15,61	4,72E+07	6,90E+05							12188	2,23	2,23	15,86	6,51E+08	1,94E+07
#Ile14 hgme												12189	2,23	0,89	15,86	3,13E+07	7,56E+05
7072	0,78	2,18	15,61	3,91E+07	6,54E+05							12190	1,90	2,45	15,86	1,39E+07	2,33E+05
7073	0,78	9,56	15,36	2,29E+07	4,17E+05							12191	1,89	4,79	15,86	8,53E+06	3,73E+05
7074	0,70	1,48	15,85	3,69E+07	6,12E+05							12192	1,89	3,84	15,86	1,32E+07	3,67E+05
7075	0,69	6,95	15,61	1,06E+07	3,94E+05							12193	1,89	3,14	15,86	9,89E+06	3,39E+05
7076	0,69	4,00	15,61	1,07E+07	3,94E+05							12194	1,89	2,58	15,86	6,07E+06	2,36E+05
7077	0,69	1,75	15,61	3,10E+07	5,15E+05							12195	1,89	1,89	15,86	1,09E+09	2,34E+07
7078	0,69	0,70	15,61	9,28E+08	2,23E+07							12196	1,89	1,24	15,86	1,83E+07	5,13E+05
#Ile14 hd												12197	1,89	0,93	15,86	3,91E+07	6,93E+05
7079	0,68	1,92	15,36	2,67E+07	4,12E+05							12198	1,89	0,76	15,86	2,58E+07	5,00E+05
7080	0,84	1,48	15,36	6,84E+07	1,21E+06							12199	1,89	0,46	15,86	1,20E+07	3,19E+05
7081	0,83	0,79	15,36	1,86E+09	3,18E+07							12200	1,87	1,45	15,86	1,70E+07	3,36E+05
#Ile144 hd												12201	1,75	4,79	15,86	4,26E+06	2,11E+05
7082	1,92	7,47	15,11	1,36E+07	2,57E+05							12202	1,75	2,06	15,86	3,05E+07	3,94E+05
7083	1,92	6,35	15,11	7,99E+06	2,57E+05							12203	1,75	1,76	15,86	6,21E+08	1,55E+07
7084	1,92	2,61	15,11	1,97E+07	6,20E+05							12204	1,75	0,63	15,86	2,31E+07	5,00E+05
7085	1,91	8,34	15,11	2,26E+07	5,00E+05							12205	0,85	1,28	15,86	4,85E+07	2,88E+05
7086	1,91	1,92	15,11	1,55E+09	4,62E+07							12206	0,82	4,45	15,86	1,61E+07	2,60E+05
#Met ce												12207	0,82	1,71	15,86	2,83E+07	3,45E+05
7087	1,91	0,88	15,11	2,16E+07	6,32E+05							12208	0,81	9,22	15,86	7,88E+06	2,28E+05
7088	1,91	4,35	14,87	8,05E+06	3,61E+05							12209	0,81	2,80	15,86	1,55E+07	2,69E+05
7089	1,90	3,92	14,87	9,63E+06	3,08E+05							12210	0,71	7,01	15,86	1,24E+07	2,80E+05
7090	0,91	4,00	13,88	1,33E+07	4,13E+05							12211	0,71	4,01	15,86	1,56E+07	2,81E+05
7091	0,91	3,48	13,88	1,48E+07	4,14E+05							12212	0,71	1,71	15,86	2,66E+07	3,42E+05
7092	0,91	1,92	13,88	4,64E+07	9,40E+05							12213	0,71	1,50	15,86	3,82E+07	4,79E+05
7093	0,91	0,44	13,63	3,75E+07	5,75E+05							12214	0,71	0,72	15,86	1,17E+09	1,30E+07
7094	0,89	0,88	13,63	2,44E+09	3,62E+07							12215	0,70	7,18	15,86	9,58E+06	2,23E+05
#Ile72 hd												12216	0,70	-0,41	15,86	1,37E+07	3,23E+05
7095	0,80	9,56	13,88	3,42E+07	5,21E+05							12217	0,62	1,11	15,86	1,46E+07	3,74E+05
7096	0,79	2,01	13,88	3,27E+07	8,40E+05							12218	1,94	2,62	15,33	1,56E+07	4,01E+05
7097	0,79	0,79	13,88	2,72E+09	5,19E+07							12219	1,94	1,93	15,33	1,11E+09	2,15E+07
#Ile166 hd												12220	1,94	1,32	15,33	1,91E+07	4,05E+05
7098	0,84	1,57	13,88	8,16E+07	1,22E+06							12221	1,94	0,89	15,33	2,43E+07	3,56E+05
7099	0,84	0,88	13,63	3,28E+09	4,31E+07							12222	1,89	7,70	15,33	6,14E+06	2,05E+05
#Ile105/ Ile163 hd												12223	1,75	2,32	15,33	1,83E+07	3,43E+05
7100	0,83	2,96	13,63	2,95E+07	5,22E+05							12224	1,74	2,80	15,33	1,37E+07	2,76E+05
7101	0,88	0,36	13,39	2,98E+07	5,24E+05							12225	1,74	0,85	15,33	1,48E+07	3,44E+05
7102	0,84	8,51	13,39	3,41E+07	4,98E+05							12226	0,86	3,97	15,33	2,05E+07	2,33E+05
7103	0,84	1,92	13,39	7,59E+07	1,27E+06							12227	0,85	1,97	15,33	5,50E+07	3,39E+05
7104	0,69	9,64	12,90	2,44E+07	4,67E+05							12228	0,85	1,50	15,33	6,13E+07	8,88E+05
7105	0,69	1,31	12,90	1,10E+08	1,78E+06							12229	0,85	0,85	15,33	2,40E+09	1,95E+07
7106	0,69	0,70	12,90	2,54E+09	5,16E+07							12230	0,84	2,88	15,33	2,05E+07	2,50E+05
#Ile19 hd												12231	0,82	2,19	15,33	1,69E+07	2,50E+05
7107	0,60	0,62	12,90	2,78E+08	2,81E+06							12232	1,93	4,40	14,79	8,26E+06	2,35E+05
7108	0,41	0,44	13,14	6,74E+08	1,64E+07							12233	1,93	3,97	14,79	1,04E+07	2,55E+05
#Ile37 hd												12234	1,92	2,97	14,79	9,45E+06	2,22E+05
7109	0,41	1,31	12,90	1,07E+07	3,94E+05							12235	1,81	1,97	14,79	6,82E+06	2,73E+05
7110	0,40	1,66	12,90	2,41E+07	6,64E+05							12238	1,16	1,15	13,71	6,35E+07	6,57E+05
7111	0,68	1,83	12,65	2,86E+07	5,70E+05							12239	1,15	0,85	13,71	3,58E+07	3,30E+05
7112	0,69	2,18	11,91	1,69E+07	4,49E+05							12240	1,11	1,11	13,71	3,48E+07	4,38E+05
7113	0,69	1,22	11,91	6,79E+07	1,19E+06							12241	0,95	1,45	13,71	2,19E+07	2,28E+05
7114	0,69	9,47	11,66	1,32E+07	4,63E+05							12242	0,95	0,28	13,71	1,43E+07	2,17E+05
7115	0,69	0,70	11,66	1,68E+09	3,89E+07							12243	0,93	7,79	13,71	1,84E+07	2,54E+05
#Ile9 hd												12244	0,93	1,58	13,71	3,11E+07	2,17E+05
7116	0,68	1,83	11,66	1,74E+07	4,50E+05							12245	0,92	3,97	13,71	2,27E+07	3,61E+05
												12246	0,89	3,62	13,71	1,43E+07	2,11E+05
												12247	0,86	7,18	13,71	1,41E+07	2,09E+05

<u>N.</u>	<u>HC</u>	<u>H</u>	<u>C</u>	<u>Integral</u>	<u>Intens.</u>	<u>N.</u>	<u>HC</u>	<u>H</u>	<u>C</u>	<u>Integral</u>	<u>Intens.</u>	<u>N.</u>	<u>HC</u>	<u>H</u>	<u>C</u>	<u>Integral</u>	<u>Intens.</u>
												12248	0,86	3,01	13,71	1,41E+07	2,44E+05
												12249	0,86	1,97	13,71	9,77E+07	1,13E+06
												12250	0,85	1,58	13,71	6,77E+07	7,53E+05
												12251	0,82	1,15	13,71	1,34E+08	8,71E+05
												12252	0,78	0,46	13,71	9,11E+06	2,16E+05
												12253	0,47	1,37	13,71	2,07E+07	3,34E+05
												12254	1,12	0,89	13,17	3,38E+07	3,44E+05
												12255	0,86	8,52	13,17	1,66E+07	2,42E+05
												12256	0,86	4,01	13,17	1,04E+07	2,56E+05
												12257	0,73	4,19	13,17	1,53E+07	2,32E+05
												12258	0,71	7,01	13,17	9,70E+06	2,16E+05
												12259	0,71	1,37	13,17	1,13E+08	1,41E+06
												12260	0,71	0,72	13,17	2,42E+09	3,41E+07
												12261	0,71	0,07	13,17	1,81E+07	3,52E+05
												12262	0,46	1,71	13,17	2,55E+07	4,57E+05
												12263	0,46	0,46	13,17	4,99E+08	1,04E+07
												12266	0,71	1,84	12,63	3,91E+07	4,62E+05
												12267	0,73	2,28	12,09	1,61E+07	2,02E+05
												12268	0,71	0,02	11,55	2,54E+07	3,20E+05
												12269	0,69	2,23	11,55	1,46E+07	2,28E+05

2.4 Konformationelle Abstände aus andere Quellen

Kopplungskonstanten (demo.cco) [127]

IIB^{Man} Kopplungskonstanten aus Ruths Daten

4	ASN	HN	HA	6,0	99	VAL	HN	HA	4,8
5	ASP-	HN	HA	7,4	103	VAL	HN	HA	6,4
6	TYR	HN	HA	6,1	104	LYS+	HN	HA	5,6
8	VAL	HN	HA	8,0	105	ILE	HN	HA	7,4
9	ILE	HN	HA	6,8	108	VAL	HN	HA	8,9
11	LEU	HN	HA	5,7	110	VAL	HN	HA	8,1
12	ALA	HN	HA	6,8	113	MET	HN	HA	6,0
13	ARG+	HN	HA	7,3	116	ARG+	HN	HA	6,8
14	ILE	HN	HA	7,4	119	LYS+	HN	HA	8,0
15	ASP-	HN	HA	6,0	120	THR	HN	HA	9,8
16	ASP-	HN	HA	6,1	121	GLN	HN	HA	4,7
33	VAL	HN	HA	8,5	122	VAL	HN	HA	8,3
34	SER	HN	HA	8,8	123	ASN	HN	HA	4,4
35	ARG+	HN	HA	10,5	125	ALA	HN	HA	7,9
36	ILE	HN	HA	5,1	127	SER	HN	HA	8,8
37	ILE	HN	HA	6,8	128	VAL	HN	HA	8,8
38	VAL	HN	HA	7,9	129	ASP-	HN	HA	7,9
39	VAL	HN	HA	8,6	131	LYS+	HN	HA	6,3
40	SER	HN	HA	4,7	135	ALA	HN	HA	5,4
42	GLU-	HN	HA	4,6	137	LYS+	HN	HA	4,9
48	VAL	HN	HA	6,6	141	ALA	HN	HA	3,8
51	THR	HN	HA	7,7	142	ARG+	HN	HA	6,6
54	THR	HN	HA	7,2	144	ILE	HN	HA	7,0
55	GLN	HN	HA	5,5	145	GLU-	HN	HA	5,8
56	VAL	HN	HA	8,7	146	LEU	HN	HA	7,4
62	THR	HN	HA	9,2	147	GLU-	HN	HA	6,7
65	VAL	HN	HA	8,2	149	ARG+	HN	HA	6,6
66	VAL	HN	HA	7,5	150	LYS+	HN	HA	5,9
67	ASP-	HN	HA	6,5	151	VAL	HN	HA	9,1
70	LYS+	HN	HA	4,9	153	THR	HN	HA	8,7
76	ASN	HN	HA	7,3	154	ASP-	HN	HA	4,0
83	GLU-	HN	HA	5,4	156	LYS+	HN	HA	4,3
86	MET	HN	HA	7,3	157	LEU	HN	HA	8,5
87	LEU	HN	HA	7,0	158	LYS+	HN	HA	6,1
88	LEU	HN	HA	8,0	161	ASP-	HN	HA	5,9
89	PHE	HN	HA	8,0	163	ILE	HN	HA	6,3
90	THR	HN	HA	10,8	164	SER	HN	HA	5,9
93	THR	HN	HA	7,1	165	LYS+	HN	HA	6,9
95	VAL	HN	HA	7,4	166	ILE	HN	HA	7,2
97	ARG+	HN	HA	5,8	167	ASN	HN	HA	6,6
98	LEU	HN	HA	5,2	168	LYS+	HN	HA	7,9

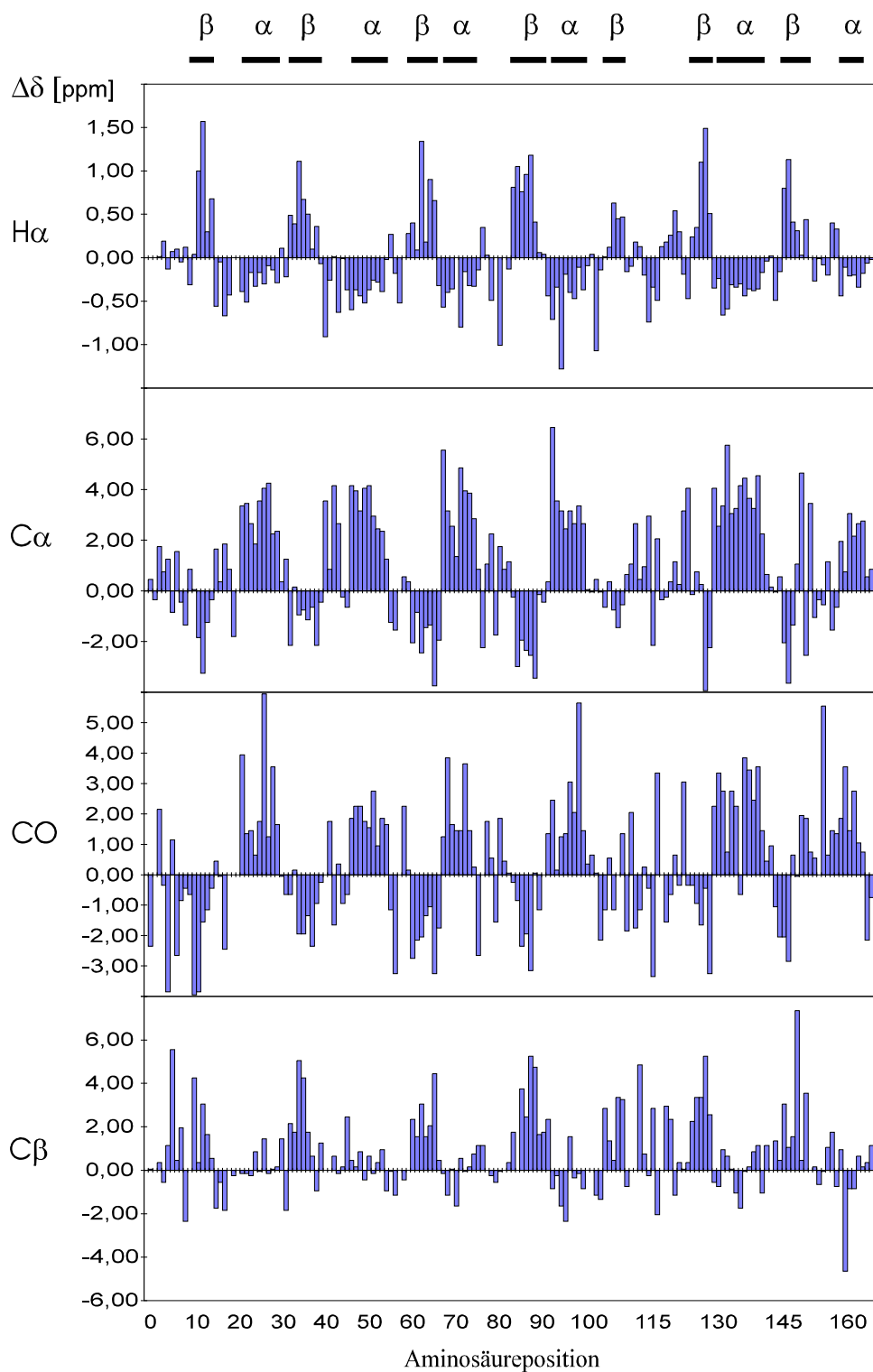
Wasserstoffbrücken (hbonds.upl)

#β-Faltblätter					
11 LEU	HN	85 VAL	O	2,50	5
11 LEU	O	87 LEU	HN	2,50	5
12 ALA	HN	107 SER	O	2,50	5
12 ALA	O	109 ASN	HN	2,50	5
13 ARG+	HN	87 LEU	O	2,50	5
13 ARG+	O	89 PHE	HN	2,50	5
14 ILE	HN	109 ASN	O	2,50	5
14 ILE	O	111 GLY	HN	2,50	5
15 ASP-	HN	89 PHE	O	2,50	5
15 ASP-	O	91 ASN	HN	2,50	5
34 SER	O	62 THR	HN	2,50	5
35 ARG+	HN	84 ARG+	O	2,50	5
35 ARG+	O	86 MET	HN	2,50	5
36 ILE	HN	62 THR	O	2,50	5
36 ILE	O	64 HIS	HN	2,50	5
37 ILE	HN	86 MET	O	2,50	5
37 ILE	O	88 LEU	HN	2,50	5
38 VAL	HN	64 HIS	O	2,50	5
38 VAL	O	66 VAL	HN	2,50	5
39 VAL	HN	88 LEU	O	2,50	5
39 VAL	O	90 THR	HN	2,50	5
40 SER	HN	66 VAL	O	2,50	5
108 VAL	HN	145 GLU-	O	2,50	5
108 VAL	O	147 GLU-	HN	2,50	5
110 VAL	HN	147 GLU-	O	2,50	5
110 VAL	HN	149 ARG+	HN	2,50	5
119 LYS+	HA	129 ASP-	HA	2,50	5
121 GLN	HA	127 SER	HA	2,50	5
#α-Helices					
# 22 GLN	O	26 ARG+	HN	3	2
# 23 VAL	O	27 TRP	HN	3	2
# 24 ALA	O	28 THR	HN	3	2
# 25 THR	O	29 LYS	HN	3	2
26 ARG+	O	30 GLU-	HN	3	5
# 42 GLU-	O	46 ASN	HN	3	2
# 43 VAL	O	47 THR	HN	3	2
# 44 ALA	O	48 VAL	HN	3	2
# 45 ALA	O	49 ARG+	HN	3	2
46 ASN	O	50 LYS+	HN	3	2
47 THR	O	51 THR	HN	3	2
48 VAL	O	52 LEU	HN	3	5
49 ARG+	O	53 LEU	HN	3	5
50 LYS+	O	54 THR	HN	3	5
# 51 THR	O	55 GLN	HN	3	2
70 LYS+	O	74 VAL	HN	3	5
71 MET	O	75 TYR	HN	3	5
93 THR	O	97 ARG+	HN	3	2
94 ASP-	O	98 LEU	HN	3	2
95 VAL	O	99 VAL	HN	3	2
96 GLU-	O	100 GLU-	HN	3	2
97 ARG+	O	101 GLY	HN	3	2
# Achtung !!! 114-120 CSI-Konsensus/ Nicht von Ruths Daten					
129 ASP-	O	133 ILE	HN	3	2
130 GLU-	O	134 GLU-	HN	3	2
131 LYS+	O	135 ALA	HN	3	2
132 ASP-	O	136 PHE	HN	3	2
133 ILE	O	137 LYS+	HN	3	2
134 GLU-	O	138 LYS+	HN	3	2
135 ALA	O	139 LEU	HN	3	2
136 PHE	O	140 ASN	HN	3	2
137 LYS+	O	141 ALA	HN	3	2
159 MET	O	163 ILE	HN	3	5
160 MET	O	164 SER	HN	3	5

3 IIB^{Man}-Literaturdaten

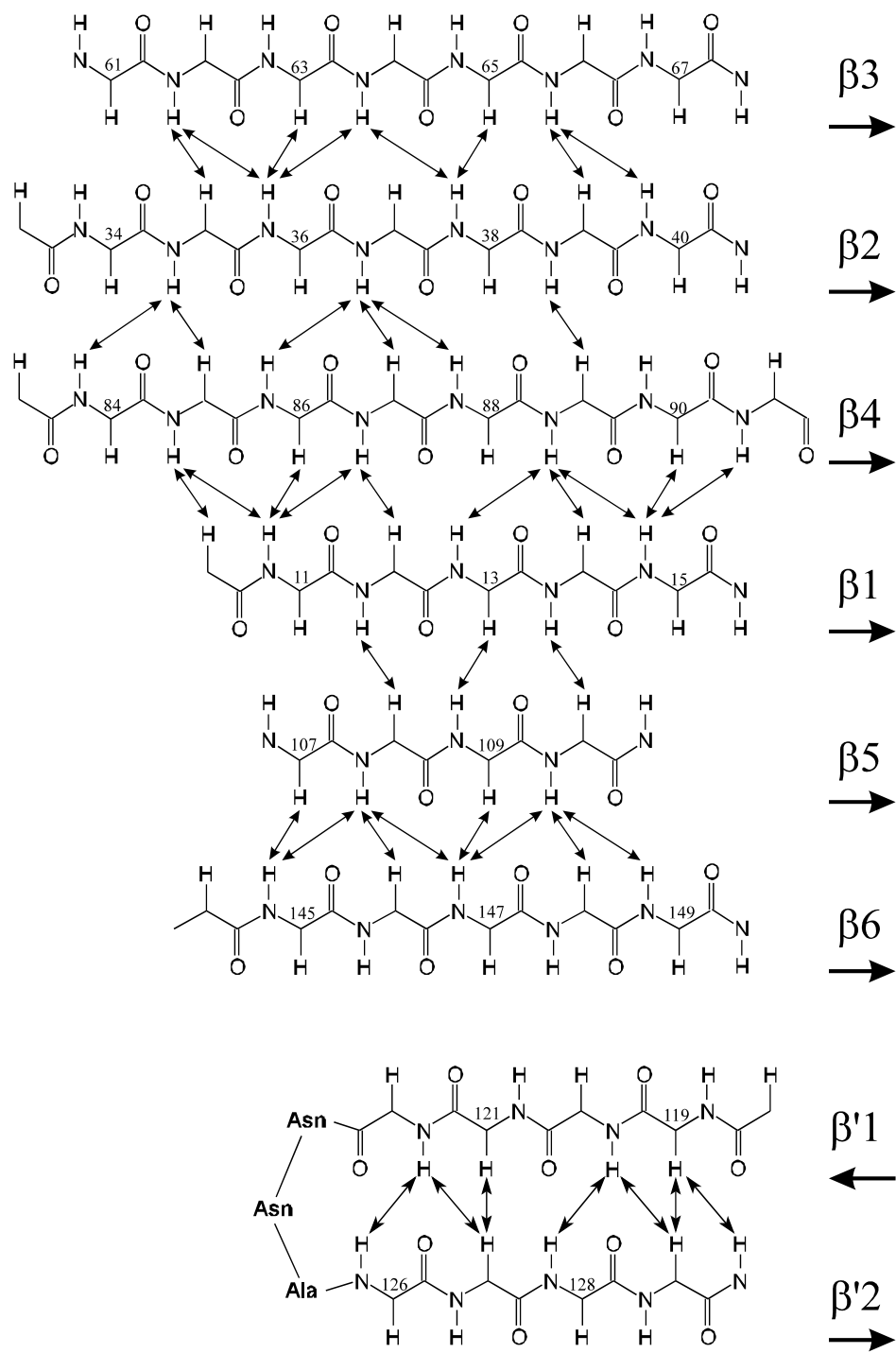
3.1 CSI-Daten aus vorhandenen Literatur [127].

Graphische Darstellung der Abweichungen der chemischen Verschiebungen in IIB^{Man} von den *random-coil*-Werten für die betreffende Aminosäure. Ganz oben ist die aus einer gewichteten Mittelung der Einzeldaten ermittelte Konsensus-Sekundärstruktur abgebildet.



3.2 Abbildung aus [127] zur Ableitung der hbonds.upl-Datei.

Schematische Darstellung des zentralen sechssträngigen parallelen β -Faltblatts β 1- β 6 und der zweisträngigen antiparallelen β -Faltblattregion β '1- β '2. Die Pfeile repräsentieren die experimentell beobachteten NOEs zwischen den verschiedenen Strängen. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurden die Seitenketten nicht dargestellt. Die jeweilige Aminosäurenummer ist an der C $^{\alpha}$ -Position angegeben.



4 Pulsprogramme

2D- und 3D-Experimente, die für die Erzeugung der Listen für CYANA an der deuterierten Probe von IIB^{Man} verwendet wurden (in den Seiten 59 und 60 schon angegeben). Abweichungen, Gradientenprogramme, -stärke, etc. sowie Literaturreferenzen und Standardwerte für die Längen der verschiedenen Kopplungsdelays sind bei den einzelnen Programmen als Kommentare angegeben. Diese Pulsprogramme wurden in Zusammenarbeit mit PD Dr. G. Gemmecker implementiert. Sie wurden aus Modifizierungen von Referenzprogrammen des Arbeitskreises bzw. aus deren Modifikationen (hauptsächlich vom PD Dr. G. Gemmecker und Dr. T. Diercks) erzeugt.

Experiment	Parameter und Bemerkungen	Spektrometer
¹³ C-HSQC	NS 8; TD (¹³ C/F2) 384; SW (¹³ C) 63,1 ppm	DMX 750
¹⁵ N-HSQC	NS 8; TD (¹⁵ N/F2) 192; SW (¹⁵ N) 29 ppm (gefaltet)	DMX 750
¹⁵ N-HSQC	NS 8; TD (¹⁵ N/F2) 192; SW (¹⁵ N) 60,4 ppm	DMX 750
H(CCCO)NH	$\tau_{\text{mix}} = 16,1$ ms (DIPSI-2 mit 28 μs 90°-Puls); NS 32; TD (¹⁵ N/F2) 58; (¹ H/F1) 108; SW (¹⁵ N) 29 ppm; SW (¹ H) 8 ppm	DMX 600
HC(C)H-COSY	NS 16; TD (¹³ C/F2) 144; (¹ H/F1) 112, SW (¹³ C) 63,7 ppm; SW (¹ H) 11,1 ppm	DMX 600
HC(C)H-TOCSY	$\tau_{\text{mix}} = 18,9$ ms (DIPSI-3 mit 29 μs 90°-Puls); NS 16; TD (¹ H/F2) 128; (¹³ C/F1) 160; SW (¹ H) 11,1 ppm; SW (¹³ C) 63,1 ppm	DMX 750
¹³ C-NOESY-HSQC (hchnoesy)	$\tau_{\text{mix}} = 50$ ms; NS 24; TD (¹ H/F3) 1024; TD (¹ H/F2) 120; (¹³ C/F1) 160; SW (¹ H) 11,1 ppm; SW (¹³ C) 63,1 ppm	DMX 750
¹³ C-NOESY-HSQC (hchnoesy600)	$\tau_{\text{mix}} = 50$ ms; NS 16; TD (¹ H/F3) 1024; TD (¹ H/F2) 96; (¹³ C/F1) 224; SW (¹ H) 11,1 ppm; SW (¹³ C) 138 ppm	DMX 600
¹³ C-NOESY-HSQC (hchnoesy_last)	$\tau_{\text{mix}} = 70$ ms; NS 16; TD (¹ H/F3) 1024; TD (¹ H/F2) 128; (¹³ C/F1) 240; SW (¹ H) 11,1 ppm; SW (¹³ C) 138 ppm	DMX 600

13C-HSQC

```

;13C & 13CO on (:f2)
;2D HSQC with coherence selection via gradients (echo/antiecho)
;with {1H,13CO,15N} decoupling during F1
;F1 phase homogeneity slightly better without 13CO decoupling
;Better phase homogeneity than with sensitivity enhancement!
;Avance.incl, version 99/08/02
;Grad.incl, version 99/02/19

define list<gradient> EA=<EA>

##### Info #####
;nd0 = 2
;NS >= 4
;DS = 2*NS*x
;use gradient program (GRDPROG) :                               4sineeama
;use gradient ratios: 25 : 80 : 35 : -20 : 25 : 80 : 35 : 20   for 13C
;mc2 = echo/antiecho
;REVERSE=false in both dimensions

##### pulses/ delays #####
;p1                               ;90 high power pulse on 1H (F1, p11)
;p3                               ;90 high power pulse on 13C (F2, p12)
;p6                               ;selective 180hermite on CO (F2, sp3)
;p8                               ;180deg high power pulse on 15N (F4, p14)
;p16= ca. 800us                  ;gradient pulse length
;pcpd2 ca. 80us                  ;90 low power pulse on F2 (13C, p112) for cpd2
;d0                               ;= 3u for maximum intensity
                                ;= 1/2J(HX) for inverted XH2 groups
;d1                               ;relaxation delay
;d4                               ;<=1/4J for HX
;d16=200u                        ;gradient recovery delay

"p2=p1*2"
"p4=p3*2"

define delay cen42
define delay cen62
define delay cen68
"cen42=(p4-p2)/2"
"cen62=(p6-p2)/2"
"cen68=(p6-p8)/2"
"d11=10m"                        ;I/O delay
"d20=p16+d16"
"d22=d0"
"d24=d4-p16-4u"
"l3=(td1/2)"

```

```

1 ze
2 d1 do:f2
3 d11*3
4 (p1 ph0):f1
  d4 p12:f2
  (cen42 p2 ph0):f1 (p4 ph3):f2
  d4 setnmr2|0 setnmr0|34
  (p1 ph7):f1
  p16:ngrad:c34
  d16
  (p3 ph3):f2
  d20 ;NOTE: use of second encoding gradient shows quad images!
  d0
  (cen62 p2 ph6):f1 (p6:sp3 ph0):f2 (cen68 p8 ph0):f4
  d0
  (p4 ph4):f2
  d22
  (cen62 p2 ph16):f1 (p6:sp3 ph0):f2 (cen68 p8 ph0):f4 ;Bloch-Siegert comp.
  p16:ngrad:c34
  d16 p12:f2
  d22
  (p3 ph0):f2 ;cycling without effect
  p16:ngrad:c34
  d16
  (p1 ph0):f1 ;cycling without effect
  d4 ;NOTE: use of second read gradient deteriorates phases!
  (cen42 p2 ph9):f1 (p4 ph8):f2 ;cycling without effect
  p16:ngrad:c34
  d24 p12:f2
  4u setnmr2^0 setnmr0^34
  go=2 ph31 cpd2:f2
  d1 do:f2 wr #0 if #0 zd
  lo to 3 times 2
  d11 id0
  d11 ip3*2
  d11 ip31*2
  lo to 4 times l3
exit

ph0=0
ph3=0 2 ;axial peak suppression in F1
ph4=0 0 1 1 2 2 3 3 ;phase purge in F1 essential!
ph6={0}*4 {2}*4 ;suppresses MQC in F1
ph7={1}*4 {3}*4
ph8={0}*8 {2}*8 ;optional
ph9={0}*8 {1}*8
ph16={0}*8 {2}*8
ph31=0 2 2 0 2 0 0 2 2 0 0 2 0 2 2 0

```

15N-HSQC

```

;15N on (:f4) + gs
;2D HSQC with coherence selection via gradients (echo/antiecho)
;with decoupling during acquisition
;Better phase homogeneity than with sensitivity enhancement!
;Avance.incl, version 99/08/02
;Grad.incl, version 99/02/19

define list<gradient> EA=<EA>

##### Info #####
;nd0=2
;DS = 2*NS*x
;use gradient program (GRDPROG):                               5sineeama
;use gradient ratios:
; 25 : -50 : 30 : -35 : -20 : 25 : -50 : 30 : -35 : 20       for 13C
;-55 : -60 : 40 : -35 : -10 : -55 : -60 : 40 : -35 : 10      for 15N

;selection rules:
;1) X coherence selection: (cnst22-cnst23)*gX = cnst25*gH
;2) water flip-back: cnst21 = (cnst22+cnst23+cnst24)

;mc2 = echo/antiecho
;REVERSE=false in both dimensions

##### pulses/ delays #####
;p1=                                                            ;90 degree hard pulse on 1H (f1) at pl1
"p2=p1*2"
;p7=                                                            ;90 degree hard pulse on X (f2) at pl2
"p8=p7*2"
;p16=1ms                                                        ;gradient pulse length
;pcpd4                                                           ;90 degree soft pulse on X (f2) at pl12
;d0                                                             ;= 3u for maximum intensity
                                                             ;= 1/2J(HX) for inverted XH2 groups
;d1                                                             ;relaxation delay
;d4                                                             ;<=1/4J for HX
;d16=300u                                                       ;gradient recovery delay

"d11=10m"                                                       ;I/O delay
"d28=(p8-p2)/2"
"d22=p2+d0*2"
"d21=d4-p16-4u"
"l3=(td1/2)"

```

```

1 ze
2 d1 do:f4
3 d11*3
4 (p1 ph0):f1
  d4 p14:f4
  (d28 p2 ph0):f1 (p8 ph3):f4
  d4 setnmr2|0 setnmr0|34
  (p1 ph7):f1
  p16:ngrad:c34
  d16
  (p7 ph3):f4
  d0
  (p2 ph6):f1
  d0
  p16:ngrad:c34
  d16
  (p8 ph4):f4
  d22
  p16:ngrad:c34
  d16
  (p7 ph5):f4                                     ;cycling without effect
  p16:ngrad:c34
  d16
  (p1 ph0):f1                                     ;cycling without effect
  d4
  (d28 p2 ph9):f1 (p8 ph8):f4                     ;cycling without effect
  p16:ngrad:c34
  d21 p114:f4
  4u setnmr2^0 setnmr0^34
  go=2 ph31 cpd4:f4
  d1 do:f4 wr #0 if #0 zd
  lo to 3 times 2
  d11 id0
  d11 ip3*2
  d11 ip31*2
  lo to 4 times l3
exit

ph0=0
ph3=0 2                                           ;axial peak suppression in F1
ph4=0                                           ;phase purge in F1
ph5=0
ph6={0}*2 {2}*2                                   ;suppresses MQC in F1
ph7={1}*2 {3}*2
ph8={0}*4 {2}*4
ph9={0}*4 {1}*4
ph31=0 2 2 0 2 0 0 2

```

HCCCONH

```
;3D sequence with
;   inverse correlation for triple resonance using
;   dipsi2 and inept transfer steps
;   F1(H,t1) -> F2(Caliph. -> Ca) -> F3(C=O) -> F4(N,t2) -> F1(H,t3)
;on/off resonance Ca and C=O pulses using shaped pulse (:f2)
;deuterium decoupling (:f3)
;phase sensitive using States-TPPI (t1)
;phase sensitive using Echo/Antiecho-TPPI gradient selection (t2)
;using semi-constant time in t1
;using constant time in t2
;Avance.incl, version 99/08/02
;Grad.incl, version 99/02/19
;Delay.incl, version 99/02/19

;G.T. Montelione, B.A. Lyons, S.D. Emerson & M. Tashiro,
; J. Am. Chem. Soc. 114, 10974-75 (1992)
;S. Grzesiek, J. Anglister & A. Bax, J. Magn. Reson. 101 B, 114-9 (1993)
;B.A. Lyons & G.T. Montelione, J. Magn. Reson. 101 B, 206-9 (1993)
;T.M. Logan, E.T. Olejniczak, R.X. Xu & S.W. Fesik,
; J. Biomol. NMR 3, 225-31 (1993)
;R.T. Clowes, W. Boucher, C.H. Hardman, P.J. Domaille & E.D. Laue,
; J. Biomol. NMR 3, 349-354 (1993)
;T. Carlomagno, M. Maurer, M. Sattler, M.G. Schwendinger, S.J. Glaser
; & C. Griesinger, J. Biomol. NMR 8, 161-170 (1996)

;p10 : 0dB
;p11 : f1 channel - power level for pulse (default)
;p14 : f4 channel - power level for pulse (default)
;p115: f2 channel - power level for TOCSY-spinlock
;p116: f4 channel - power level for CPD/BB decoupling
;p119: f1 channel - power level for CPD/BB decoupling
;sp2: f2 channel - shaped pulse 90 degree (C=O on resonance)
;sp3: f2 channel - shaped pulse 180 degree (C=O on resonance)
;sp5: f2 channel - shaped pulse 180 degree (C=O off resonance)
;sp7: f2 channel - shaped pulse 180 degree (Ca off resonance)
;sp8: f2 channel - shaped pulse 90 degree (Ca offresonance)
;   for time reversed pulse
;sp9: f2 channel - shaped pulse 180 degree (Ca off resonance)
;   sp9 might require higher selectivity than sp3
;p1 : f1 channel - 90 degree high power pulse
;p2 : f1 channel - 180 degree high power pulse
;p3 : (p12) 90 deg. 13C(ali.) hard pulse (O2P ca. 42 ppm)
;p4 : (p12) 180 deg. 13C(ali.) hard pulse (O2P ca. 42 ppm)
;p13: (sp7) 90 deg. 13Ca rectangular pulse (55 us at 600 MHz))
;p14: (sp8) 180 deg. 13Ca rectangular pulse (55 us at 600 MHz))
;p12: (sp2) 180 deg. 13Ca G3 pulse (800 us at 600 MHz))
;p9 : (p115) 13C(ali) pulse for TOCSY spinlock (ca. 28 us)
;p15: (sp5) 90 deg. 13CO Seduce-1 pulse (200 us at 600 MHz))
;p18: (sp6) 180 deg. 13CO Seduce-1 pulse (200 us at 600 MHz))
```

```

;p16: homospoil/gradient pulse [1 msec]
;p21: f4 channel - 90 degree high power pulse
;p22: f4 channel - 180 degree high power pulse
;p24: f2 channel - 180 degree shaped pulse (sp9)
;p26: f1 channel - 90 degree pulse at p119
;d0 : incremented delay (F1 in 3D) = d4
;d1 : relaxation delay; 1-5 * T1
;d3 : 1/(6J(CH)) [1.1 msec]
;d4: 1/(4J(CH)) [1.7 msec]
;d10: incremented delay (F2 in 3D) [3 usec]
;d11: delay for disk I/O [30 msec]
;d12: delay for power switching [20 usec]
;d13: short delay [4 usec]
;d16: delay for homospoil/gradient recovery
;d20: incremented delay (F1 in 3D) [3 usec]
;d21: 1/(2J(CaCO)) [3.6 msec]
;d22: 1/(2J(CaCO)) [4.4 msec]
;d23: constant time delay T(N) = 1/(4J'(NCO)) [12.4 msec]
;d25: 1/(2J'(NH)) [5.5 msec]
;d26: 1/(4J'(NH)) [2.3 msec]
;d29: decremented delay (F1 in 3D) = d4+p14+d20
;d30: decremented delay (F2 in 3D) = d23-d25-3u-p26
;l1: loop for DIPSI2 cycle: ((p6*115.112) * 11) = mixing time [3]
;l3: loop for phase sensitive 3D using States-TPPI : l3 = td1/2
;l13: loop for phase sensitive 3D using E/A method : l13 = td2/2
;in0: 1/(2 * SW(H)) = DW(H)
;nd0: 2
;in10: 1/(2 * SW(N)) = DW(N)
;nd10: 2
;in20: = in0 - in29
;in29: = d29 / td1(max)
;in30: = in10
;NS: 16 * n
;DS: >= 16
;td1: number of experiments in F1
;td2: number of experiments in F2 td2 max = 2 * d30 / in30
;MC2: States-TPPI in F1
;MC2: echo-antiecho in F2
;cpds1: decoupling according to sequence defined by cpdprg1
;cpd3: decoupling according to sequence defined by cpdprg3
;pcpd1: f1 channel - 90 degree pulse for decoupling sequence
;pcpd3: f4 channel - 90 degree pulse for decoupling sequence

;define FQ1LIST (list has to be stored)
; set on Haliph. for first part and for second either on H2O
; (better water suppression) or NH (better sensitivity)

;define FQ2LIST (list has to be stored)
; set on Caliph. for DIPSI transfer but on C=O during transfer to C=O

```



```

;use gradient ratio:
;      gp 1 : gp 2 : gp 3 : gp 4
;      50  : -30 : 80  : 8.1

;for z-only gradients:
;gpz1: 50%
;gpz2: -30%
;gpz3: 80%
;gpz4: 8.1%

;use gradient files:
;gpnam1: SINE.100
;gpnam2: SINE.100
;gpnam3: SINE.100
;gpnam4: SINE.100

define list<gradient> EA=<EA>
define list<gradient> MQ=<MQ>

;general delays

define delay DELTA
define delay DELTA1
define delay DELTA2
define delay DELTA3
define delay DELTA4
define delay DELTA5
define delay DELTA6
define delay DELTA7
define delay DELTA8

define delay TAU
define delay TAU1
define delay TAU2
define delay TAU3
define delay TAU4
define delay TAU5

;delays for centering pulses

define delay CEN_HN1
define delay CEN_HN2
define delay CEN_HN3

define delay CEN_HC1
define delay CEN_HC2
define delay CEN_HC3
define delay CEN_HC4
define delay CEN_CN1
define delay CEN_CN2

;loop counters

define loopcounter COUNTER
define loopcounter SCALEF
define loopcounter FACTOR1
define loopcounter FACTOR2
define loopcounter FACTOR3

"d3=1.1m"
"d4=1.7m"
"d21=3.6m"
"d22=4.4m"
"d23=12.4m"
"d25=4.2m"
"d26=2.3m"

"d0=d4"
"d20=3u"
"d29=d4+p4+d20"
"d30=d23-d25-10u-p26"

"DELTA=d1-d11*9-12m"
"DELTA1=d21+3u-20u-p23"
"DELTA2=d23+4u-d22"
"DELTA3=d23-d10-p14"
"DELTA4=d25-p16-d16"
"DELTA5=p16+d16+7u"

"CEN_HN1=(p21-p1)/2"
"CEN_HN2=(p22-p2)/2"
"CEN_HC2=(p4-p2)/2"
"CEN_CN2=(p18-p22)/2"

"l3=(td1/2)"
"l13=(td2/2)"

aqseq 321

```

1 ze	(p9*2.722 ph23):f2
d1	(p9*4.167 ph25):f2
d11 pl16:f4	(p9*2.944 ph23):f2
2 d11 do:f4	(p9*4.111 ph25):f2
6m	
3 d11*2	(p9*3.556 ph25):f2
6m	(p9*4.556 ph23):f2
4 d11*2	(p9*3.222 ph25):f2
5 d11*3	(p9*3.167 ph23):f2
6 d11 fq1:f1	(p9*0.333 ph25):f2
DELTA	(p9*2.722 ph23):f2
50u setnmr2 0 setnmr0 34	(p9*4.167 ph25):f2
10u pl1:f1	(p9*2.944 ph23):f2
10u pl2:f2	(p9*4.111 ph25):f2
10u pl3:f3	
10u pl4:f4	(p9*3.556 ph23):f2
	(p9*4.556 ph25):f2
(p1 ph3):f1	(p9*3.222 ph23):f2
d0	(p9*3.167 ph25):f2
(p4 ph1):f2	(p9*0.333 ph23):f2
d20	(p9*2.722 ph25):f2
(p2 ph1):f1	(p9*4.167 ph23):f2
d29	(p9*2.944 ph25):f2
(p1 ph2):f1	(p9*4.111 ph23):f2
	lo to 7 times l1
4u	
p16:gp1	10u pl2:f2
d16	(p23 ph21):f3;2H decoupling start
	10u cpds3:f3
(p3 ph4):f2	(p18:sp6 ph1):f2
d3	DELTA1
4u	(p12:sp2 ph1):f2
(CEN_HC2 p2 ph1):f1 (p4 ph1):f2	3u
4u	(p18:sp6 ph1):f2
d3 pl15:f2 setnmr8 4	d21
	(p13:sp7 ph1):f2
7 (p9*3.556 ph23):f2	10u do:f3
(p9*4.556 ph25):f2	(p23 ph22):f3 ;2H decoupling stop
(p9*3.222 ph23):f2	10u pl19:f1
(p9*3.167 ph25):f2	10u cpds1:f1
(p9*0.333 ph23):f2	(p15:sp5 ph5):f2
(p9*2.722 ph25):f2	d22 setnmr8^4
(p9*4.167 ph23):f2	(p14:sp8 ph1):f2
(p9*2.944 ph25):f2	DELTA2 pl4:f4
(p9*4.111 ph23):f2	(p18:sp6 ph1):f2 (CEN_CN2 p22 ph8):f4
	d23
(p9*3.556 ph25):f2	(p14:sp8 ph1):f2
(p9*4.556 ph23):f2	4u
(p9*3.222 ph25):f2	(p15:sp5 ph1):f2
(p9*3.167 ph23):f2	
(p9*0.333 ph25):f2	4u

```

4u do:f1
(p23 ph23):f3      ;2H decoupling stop

(p26 ph10):f1
4u
p16:gp2
d16 fq1:f1
(p26 ph2):f1
4u cpds1:f1 ph1

(p21 ph6):f4
d10
(p14:sp8 ph1):f2
DELTA3
(p18:sp6 ph1):f2 (CEN_CN2 p22 ph1):f4
d30
10u do:f1
(p26 ph9):f1
DELTA4
p16:gp3*EA
d16 pl1:f1

(CEN_HN1 p1 ph1):f1 (p21 ph1):f4
d26
(CEN_HN2 p2 ph1):f1 (p22 ph1):f4
d26
(CEN_HN1 p1 ph2):f1 (p21 ph7):f4
d26
(CEN_HN2 p2 ph1):f1 (p22 ph1):f4
d26
(p1 ph1):f1
DELTA5
(p2 ph1):f1
3u
p16:gp4

d16 pl16:f4
4u setnmr2^0 setnmr0^34
go=2 ph31 cpd4:f4
d11 do:f4 wr #0 if #0 zd
6m ip7*2 igrad EA
lo to 3 times 2
d11 id10 ip6*2
d11 dd30 ip8*2
6m ip31*2
lo to 4 times l13
d11 rd10 ip3
d11 rd30
lo to 5 times 2
d11 id0
d11 id20
d11 dd29
lo to 6 times l3

exit

ph1=0
ph2=1
ph3=0 0 0 0 2 2 2 2
ph4=0 0 2 2
ph5=0 0 0 0 0 0 0 0 2 2 2 2 2 2 2 2
ph6=0 2
ph7=3
ph8=0
ph9=3
ph10=2
ph21= 1
ph22= 3
ph23=0
ph25=2
ph31=0 2 2 0 2 0 0 2 2 0 0 2 0 2 2 0

```

HCCH-COSY

```
;15N on (:f4) and 2H dec. on (:f3) + gs
;3D sequence with
;  inverse correlation using multiple inept transfer and
;
;  F1(H,t1) -> F2(C,t2) -> F2(C') -> F1(H',t3)
;
;off resonance C=O pulse using shaped pulse
;phase sensitive using States-TPPI
;Avance.incl, version 99/08/02
;Grad.incl, version 99/02/19

;L.E. Kay, G.Y. Xu, A.U. Singer, D.R. Muhandiram & J. D. Forman-Kay
;JMR, 101 B, 333-337, 1993
```

```
define list<gradient> EA=<EA>
```

```
##### Info #####
;p10 : 120dB
;p11 : f1 channel - power level for pulse (default)
;p12 : f2 channel - power level for pulse (default)
;p14 : f4 channel - power level for pulse (default)
;p112: f2 channel - power level for CPD/BB decoupling
;sp5: f2 channel - shaped pulse 180 degree (C=O off resonance)
;p1 : f1 channel - 90 degree high power pulse
;p2 : f1 channel - 180 degree high power pulse
;p3 : f2 channel - 90 degree high power pulse
;p4 : f2 channel - 180 degree high power pulse
;p14: f2 channel - 180 degree shaped pulse
;p16: homospoil/gradient pulse [500 usec]
;p17: f1 channel - trim pulse [1 msec]
;p19: gradient pulse 2 [2 msec]
;p22: f4 channel - 180 degree high power pulse
;p27: f2 channel - trim pulse [2 msec]
;p29: gradient pulse 3 [300 usec]
;p30: gradient pulse 4 [5 msec]
;p31: gradient pulse 5 [4.4 msec]
;d0 : incremented delay (F1 in 3D) [3 usec]
;d4 : 1/(4J(CH)) - tau a [1.6 msec]
;d10: incremented delay (F2 in 3D) [3 usec]
;d11: delay for disk I/O [30 msec]
;d12: delay for power switching [20 usec]
;d16: delay for homospoil/gradient recovery
;d21: 1/(6J'(CH)) - tau c [1.1 msec]
;d22: d22+d23*2+t2max*0.5 = 1/(4J(CC)) : 3.6m-d23*2-(in10*113/2)
;d23: tau b [475 usec]
;d24: 1/(4J(CC)) [3.6 msec]
;l3: loop for phase sensitive 3D using States-TPPI : l3 = td1/2
;l13: loop for phase sensitive 3D using States-TPPI : l13 = td2/2
;in0: 1/(2 * SW(H)) = DW(H)
```

```

;nd0: 2
;in10: 1/(2 * SW(C)) = DW(C)
;nd10: 2
;NS: 16 * n
;DS: 32
;td1: number of experiments in F1
;td2: number of experiments in F2
;MC2: States-TPPI in F1
;MC2: States-TPPI in F2
;cpd2: decoupling according to sequence defined by cpdprg2
;pcpd2: f2 channel - 90 degree pulse for decoupling sequence

;use gradient program (GRDPROG) : Hcchco
;use gradient ratio: cnst21 : cnst22 : cnst23
;                16 : 30 : 60

;general delays
define delay DELTA
define delay DELTA1
define delay DELTA2
define delay DELTA3
define delay DELTA4
define delay DELTA5
define delay DELTA6
define delay DELTA7
define delay DELTA8

define delay TAU
define delay TAU1
define delay TAU2
define delay TAU3
define delay TAU4
define delay TAU5

;delays for centering pulses
define delay CEN_HN1
define delay CEN_HN2
define delay CEN_HN3
define delay CEN_HC1
define delay CEN_HC2
define delay CEN_HC3
define delay CEN_HC4
define delay CEN_CN1
define delay CEN_CN2

;loop counters
define loopcounter COUNTER
define loopcounter SCALEF

```

```

define loopcounter FACTOR1
define loopcounter FACTOR2
define loopcounter FACTOR3

"d0=3u"
"d10=3u"
"d11=30m"
"d12=20u"
"d4=1.6m"
"d21=1.1m"
"d23=475u"
"d24=3.6m"

"DELTA1=d4-p16-d16-4u"
"DELTA2=d4-p16-d16-4u+d0*2+p4"
"DELTA3=d23-p29-d16"
"DELTA4=p22+p2+d10*2-6u"
"DELTA5=d24-p29-d16-4u"
"DELTA6=d21-p16-d16-4u"
"DELTA7=d4-p16-d16-p3*2-7u+p1"

"TAU=(p3*2+3u)-p1"

"CEN_HC1=(p3-p1)/2"
"CEN_HC2=(p4-p2)/2"

"l3=(td1/2)"
"l13=(td2/2)"
"d22=3.6m-d23*2-(in10*l13/2)"

aqseq 312

```

1 d11 ze	(p14:sp5 ph1):f2
d11 pl12:f2	4u
2 d11 do:f2	p29:ngrad:c34
d11	d16
3 d11	DELTA3 pl2:f2 cpds3:f3 ;2H dec. restart
4 d11	d22
5 d11	(p3 ph1):f2
6 d1	4u do:f3 ;2H dec. interrupt
50u setnmr2 0 setnmr0 34	p29:ngrad:c34
50u setnmr8 4	d16
d12 pl1:f1	DELTA5 cpds3:f3 ;2H dec. restart
d12 pl3:f3	(p4 ph1):f2
(p1 ph3)	4u do:f3 ;2H dec. interrupt
4u	p29:ngrad:c34
p16:ngrad:c34	d16 cpds3:f3 ;2H dec. restart
d16	DELTA5
DELTA1 pl2:f2	(p3 ph2):f2
d0	10u do:f3 ;2H dec. stop
(p4 ph1):f2	(p23 ph23):f3
d0	(p17 ph1)
(p2 ph1)	(p17*2 ph2)
4u	4u
p16:ngrad:c34	p30:ngrad:c34
d16	d16
DELTA2 pl4:f4	(p1 ph1)
(p1 ph2)	4u
p19:ngrad:c34	p31:ngrad:c34
d16	d16
(p23 ph21):f3	(p3 ph2):f2
10u cpds3:f3 ;2H dec. start	4u
(p3 ph4):f2	p16:ngrad:c34
d10	d16
(p22 ph1):f4	DELTA6 pl2:f2
4u do:f3 ;2H dec. interrupt	(CEN_HC2 p2 ph1) (p4 ph1):f2
p29:ngrad:c34	4u
d16	p16:ngrad:c34
DELTA3 pl0:f2	d16
(p14:sp5 ph1):f2	DELTA6
4u	(CEN_HC1 p1 ph1) (p3 ph1):f2
p29:ngrad:c34	4u
d16	p16:ngrad:c34
DELTA3 pl2:f2 cpds3:f3 ;2H dec. restart	d16
p2 ph1	DELTA1
d10	(CEN_HC2 p2 ph1) (p4 ph1):f2
d22	4u
(p4 ph1):f2	p16:ngrad:c34
DELTA4	d16 setnmr8^4
10u do:f3 ;2H dec. interrupt	DELTA7
p29:ngrad:c34	(TAU p1 ph1) (p3 ph1 3u p3 ph5):f2
d16	4u pl12:f2
DELTA3	4u setnmr2^0 setnmr0^34

go=2 ph31 cpd2:f2	exit
d11 do:f2 wr #0 if #0 zd	
d11 ip3	ph1 = 0
lo to 3 times 2	ph2 = 1
d11 id0	ph3 = 0 2
lo to 4 times l3	ph4 = 0 0 2 2
d11 rd0 ip4	ph5 = 0 0 0 0 2 2 2 2
lo to 5 times 2	ph21= 1
d11 id10	ph23= 3
lo to 6 times l13	ph31= 0 2 2 0

HCCH-TOCSY

```

;echo/antiecho detection with gradient coherence selection
;uses Shared Incrementation Time (SHIT) module for H (F2) and C(F1)
;13C AND 13CO on (:f2), 2H dec. on (:f3)
;frequency jump on (:f2) currently DISABLED
;Avance.incl, version 99/08/02
;Grad.incl, version 99/02/19

;Kay, Ikura & Bax JACS 1990
;JMR, 101 B, 333-337, 1993

define list<gradient> EA=<EA>

;Care about heat dissipation and hardware (13C SpinLock!)
;Use p9>=28us and d9<=25ms! Use longer d1 (>1s)
;and many DS for heat equilibration! Correct Shimming during DS!
;Uses Shared Incrementation Time module in F1 and F2!
;The increments must be set manually as follows:
;in0= 2*DW(13C)
;in10=2*DW(H)
;in20=IN20 !!! This value changes as in10 changes
;in21=IN21 !!! This value changes as td2 changes
;in22=IN22 !!! This value changes as td2 changes
;in25=IN25 !!! This value changes as in0 changes
;in26=IN26 !!! This value changes as td1 changes
;in27=IN27 !!! This value changes as td1 changes

;FQLIST2:
;1. entry: center of all C aliphatic
;2. entry: center of observe window in C (folded)
;3. entry: identical to 1. entry
;grdprog = 6sineeama
;cnst21:cnst22:cnst23:cnst24:cnst25:cnst26:cnst27
; 15 : 50 : 30 : 80 : 40 : 20 : -20

```

;NOTES:

;cnst24/cnst26 and cnst24/cnst27 perform coherence selection

;cnst21 is most critical z-spoil for water suppression

;cpdprg2 = garp

;DS = 2n*NS, but minimum of 512! (for temperation!)

;#### pulses/ delays ####

;pulse ;degree;nucl.(channel) ;power ;shapes and length

;p1 ;90 ;H(F1) ;p11

;p3 ;90 ;C(F2) ;p12

;p6 ;180 ;CO(F2) ;sp3 ;SEDUCE-1, ca.260u

;p8 ;180 ;N(F4) ;p14

;p9 ;90 ;C(F2) ;p122 ;p122 >=3! for DIPSI3 mixing

;p16 ;gradient pulse length, ca. 700-800us (cf d28 in SHIT!)

;pcpd2 ;90 ;C(F2) ;p112 ;ca. 100us

;d1 ;relaxation delay

;d16>=100u ;gradient recovery delay (cf d28 in SHIT!)

;d4 <=1/4JHC ;H=>C: ca. 1.5 - 1.9ms (=100%)

;d14<=1/4JHC ;C=>H: ca. 0.9 - 1.2ms

;d9 ca. 20-25ms ;CC mixing (d19 is the efficient mixing time)

;#### fixed parameters ####

"p2=2*p1" ; 90 deg. 1H (f1), p11

"p4=2*p3" ; 90 deg. 13C (f2), p12

define delay cen24

define delay cen214

define delay cen68

"cen24=(p4-p2)/2"

"cen214=(p4*2+6u-p2)/2"

"cen68=(p6-p8)/2"

"d24=d4-p16"

"d11=10m"

"d18=p9*217.32"

;duration of one DIPSI3 loop

"l1=(d9/d18)+0.5"

"l3=td1/2"

"l4=td2/2"

define delay IN20

define delay IN21

define delay IN22

define delay IN25

define delay IN26

define delay IN27

"d20=5u"

"d21=d4-p4*2-6u-d20*2"

"d22=d4"

"IN20=in10/2-d4/(l4+1)"

;=increment in20!!!

"IN21=d4/(l4+1)"

;=increment in21!!!

"IN22=d4/(l4+1)"

;=decrement in22!!!

"d25=5u"

"d26=5u"

"d28=d14-p2-d25*2-p6-d26-p16-d16"

"d27=d14-p6-5u"

"IN25=in0/2-(d14-p6)/(l3+1)"

;=increment in25!!!

"IN26=(d14-p6)/(l3+1)"

;=increment in26!!!

"IN27=(d14-p6)/(l3+1)"

;=decrement in27!!!

"d19=l1*d18"

1 ze	(p9*4.000 ph21):f2
IN20	(p9*2.722 ph23):f2
IN21	(p9*4.111 ph21):f2
IN22	(p9*3.778 ph23):f2
IN25	(p9*3.889 ph21):f2
IN26	(p9*2.889 ph23):f2
IN27	(p9*3.000 ph21):f2
d18	(p9*0.333 ph23):f2
d19	(p9*2.500 ph21):f2
2 10u setnmr2^0 setnmr0^34	(p9*4.056 ph23):f2
d1 do:f2	(p9*2.833 ph21):f2
3 d11*5	(p9*4.389 ph23):f2
4 d11*3	(p9*2.722 ph23):f2
5 d11*4	(p9*4.389 ph21):f2
6 10u p1:f1	(p9*2.778 ph23):f2
10u p2:f2	(p9*3.056 ph21):f2
10u p3:f3	(p9*0.333 ph23):f2
10u p4:f4	(p9*2.556 ph21):f2
; d11 fq2:f2 ;jump to all Caliph	(p9*4.000 ph23):f2
50u setnmr2 0 setnmr0 34	(p9*2.722 ph21):f2
(p1 ph5):f1 ;Start of t1 (SHIT)	(p9*4.111 ph23):f2
d21 p2:f2	(p9*3.778 ph21):f2
d20	(p9*3.889 ph23):f2
(p3 ph0 3u p4 ph1 3u p3 ph0):f2	(p9*2.889 ph21):f2
d20	(p9*3.000 ph23):f2
(p2 ph6):f1	(p9*0.333 ph21):f2
d22	(p9*2.500 ph23):f2
(p1 ph1):f1 ;End of t1	(p9*4.056 ph21):f2
p16:ngrad:c34 ;z-spoil	(p9*2.833 ph23):f2
d16 setnmr8 4	(p9*4.389 ph21):f2
(p23 ph21):f3 ;2H decoupling start	(p9*2.722 ph23):f2
10u cpds3:f3	(p9*4.389 ph21):f2
(p3 ph8):f2	(p9*2.778 ph23):f2
d14	(p9*3.056 ph21):f2
(cen24 p2 ph0):f1 (p4 ph10):f2	(p9*0.333 ph23):f2
d14	(p9*2.556 ph21):f2
(p3 ph1):f2	(p9*4.000 ph23):f2
10u do:f3	(p9*2.722 ph21):f2
(p23 ph23):f3 ;2H decoupling interrupt	(p9*4.111 ph23):f2
p16:ngrad:c34 ;z-spoil	(p9*3.778 ph21):f2
d16 pl22:f2	(p9*3.889 ph23):f2
(p23 ph21):f3 ;2H decoupling restart	(p9*2.889 ph21):f2
10u cpds3:f3	(p9*3.000 ph23):f2
;*****	(p9*0.333 ph21):f2
;DIPS13 mixing (in z)	(p9*2.500 ph23):f2
9 (p9*2.722 ph21):f2	(p9*4.056 ph21):f2
(p9*4.389 ph23):f2	(p9*2.833 ph23):f2
(p9*2.778 ph21):f2	(p9*4.389 ph21):f2
(p9*3.056 ph23):f2	(p9*2.722 ph21):f2
(p9*0.333 ph21):f2	(p9*4.389 ph23):f2
(p9*2.556 ph23):f2	(p9*2.778 ph21):f2

```

(p9*3.056 ph23):f2
(p9*0.333 ph21):f2
(p9*2.556 ph23):f2
(p9*4.000 ph21):f2
(p9*2.722 ph23):f2
(p9*4.111 ph21):f2
(p9*3.778 ph23):f2
(p9*3.889 ph21):f2
(p9*2.889 ph23):f2
(p9*3.000 ph21):f2
(p9*0.333 ph23):f2
(p9*2.500 ph21):f2
(p9*4.056 ph23):f2
(p9*2.833 ph21):f2
(p9*4.389 ph23):f2
lo to 9 times l1
;*****
10u do:f3
(p23 ph23):f3 ;2H decoupling interrupt
p16:ngrad:c34 ;z-spoil
; 5m fq2:f2 ;jump to selected C window
20u p12:f2
(p23 ph21):f3 ;2H decoupling restart
10u cpds3:f3
(p3 ph3):f2 ;Start of t2 (SHIT)
d27
(p6:sp3 ph0):f2 (cen68 p8 ph0):f4
;Bloch-Siegert-Comp.
5u p12:f2
(p4 ph4):f2
d25 p12:f2
(p2 ph0):f1
d26
(p6:sp3 ph0):f2 (cen68 p8 ph0):f4
d28 p12:f2 ;coherence selection!
d25 do:f3 ;2H decoupling stop
p16:ngrad:c34
d16 setnmr8^4
(p3 ph1):f2 ;End of t2
(p23 ph23):f3
p16:ngrad:c34 ;z-spoil
; 5m fq2:f2 ;jump to all Caliph
(p1 ph0):f1
d4
(cen214 p2 ph0):f1 (p3 ph0 3u p4 ph1 3u p3
ph0):f2
p16:ngrad:c34 ;coherence selection
d24 p12:f2
go=2 ph31 cpd2:f2
10u setnmr2^0 setnmr0^34
d1 do:f2 wr #0 if #0 zd
lo to 3 times 2
d11 id25
d11 id26
d11 dd27
d11 ip3*2
d11 ip31*2
lo to 4 times l3
d11 rd25 ip5
d11 rd26
d11 rd27
lo to 5 times 2
d11 id20
d11 id21
d11 dd22
d11 ip31*2
lo to 6 times l4
exit

```

```

ph0 = 0
ph1 = 1
ph2 = 2
ph3 = 0 2 ;axial peak suppression in F1, States Phase
ph4 = {0}*2 {1}*2 {2}*2 {3}*2 ;essential for quad and phase purge in F1!!
ph5 = {0}*4 {2}*4 ;axial peak suppression in F2, States Phase
ph6 = 0 ;phase purge in F2
ph8 = {0}*8 {2}*8
ph10= {0}*16 {1}*16 {2}*16 {3}*16
ph21= 1
ph23= 3
ph31= 0 2 2 0 2 0 2 0 2 2 0 0 2 0 2 2 0
2 0 0 2 0 2 2 0 0 2 2 0 2 0 0 2

```

13C-NOESY-HSQC (hchnoesy)

;13C & 13CO (:f2), 2H dec. (:f3), gs

;using 45deg shifted proton inversion pulse to balance

;water presaturation

;Avance.incl, version 99/08/02

;Grad.incl, version 99/02/19

define list<gradient> EA=<EA>

;##### Info #####

;nd0 = 2 for 13C

;nd10 = 2 (=DW) for 1H

;NS: 4 * n

;DS: 2 * NS * m!!!

;MC2: echo-antiecho (in F1)

; STATES (in F2)

;PhC0 in F1 = 135 Deg!

;Reverse = False in F1

;cpd2: garp

;use gradient program (GRDPROG) : 4sineama

;use gradient ratio: cnst21 : cnst22 : cnst23 :cnst24 :

; 15 : 48 : -48 24

; 15 : 48 : -48 -24

;##### pulses, delays and loops #####

; p1 ;90 high power pulse on 1H (F1, p11)

; p3 ;90 high power pulse on 13C (F2, p12)

; p6 ;selective 180hermite on CO (F2, sp2, offset2!)

; p8 ;180deg high power pulse on 15N (F4, p14)

; p16 = ca. 800us ;gradient pulse length

; pcpd2 ca. 80us ;90 low power pulse on F2 (13C, p12) for cpd2

; d1 = 1-5*T1(HN) ;the longer, the better

; d4 ca.1.3m ;ca. 0.7/(4JCH)

; d8 ;NOE mixing time ca. 50-80m

; d16=200u ;recovery delay for gradients

;##### fixed parameters #####

"p2=p1*2"

"p4=p3*2"

"d0=5u"

;"d10=in10-p1*0.64-p8*0.5"

"d10=3u"

"d20=d0*2-5u+p16+d16"

"d21=d10*2+p8"

"d11=10m"

"d18=d8-p16-50u-d16"

"d14=d4-p16"

define delay cen42

define delay cen62

define delay cen68

define delay cen84

define delay cen31

"cen42=p4+3u-p1"

"cen62=(p6-p2)/2"

"cen68=(p6-p8)/2"

"cen84=p8*0.5-p4-3u"

"cen31=(p3-p1)/2"

"i3=(td1/2)"

"i4=(td2/2)"

```

1 ze
2 5u setnmr2^0 setnmr0^34
  d1 do:f2
3 d11*4
4 d11*2
5 d11*2
6 d11 p1:f1
  d11 p2:f2
  d11 p3:f3
  d11 p4:f4
  (p1 ph5):f1
  d10
  (cen84 p3 ph0 3u p4 ph1 3u p3 ph0):f2 (p8 ph0):f4
  d10
  (p2 ph10)
  d21
  (p1 ph6):f1
  d18
25u setnmr2|0 setnmr0|34
25u setnmr8|4
  p16:ngrad:c34
  d16
  (p1 ph11):f1
  d4
  (cen42 p2 ph0):f1 (p3 ph4 3u p4 ph14 3u p3 ph4):f2
  d4
  (p1 ph1):f1
  p16:ngrad:c34
  d16
2u
  (p23 ph21):f3 ; start 2H dec.
  10u cpds3:f3
  (p3 ph4):f2
  d0
  (cen62 p2 ph7):f1 (p6:sp3 ph0):f2 (cen68 p8 ph0):f4
  d0
  10u do:f3
  (p23 ph23):f3 ; stop 2H dec.
  p16:ngrad:c34
  d16 p12:f2
  (p4 ph8):f2
  (p23 ph21):f3 ; start 2H dec.
  10u cpds3:f3
  d20
  (cen62 p2 ph0):f1 (p6:sp3 ph0):f2 (cen68 p8 ph0):f4 ;Bloch-Siegert comp.
  5u p12:f2
  (p3 ph0):f2
  10u do:f3
  (p23 ph23):f3 ; stop 2H dec.
2u
  (p1 ph0):f1

```

```
d4 setnmr8^4
(cen42 p2 ph0):f1 (p3 ph1 3u p4 ph0 3u p3 ph1):f2
p16:ngrad:c34
d14 pl12:f2
go=2 ph31 cpd2:f2
5u setnmr2^0 setnmr0^34
d1 do:f2 wr #0 if #0 zd
lo to 3 times 2
d11 id0
d11 ip4*2
d11 ip14*2
d11 ip31*2
lo to 4 times l3
d11 rd0
d11 ip5
lo to 5 times 2
d11 id10
d11 ip31*2
lo to 6 times l4
exit
```

```
ph0 = 0
ph1 = 1
ph2 = 2
ph3 = 3
ph4 = 0 0 2 2
ph5 = 0 2
ph6 = (8) 1
ph7 = 0 2
ph8 = {0}*4 {1}*4 {2}*4 {3}*4
ph10= 0
ph11= {0}*8 {2}*8
ph14= 1 1 3 3
ph21= 1
ph23= 3
ph31= 0 2 2 0 2 0 0 2 2 0 0 2 0 2 2 0
      ;2 0 0 2 0 2 2 0 0 2 2 0 2 0 0 2
```

```
;axial peak suppression in F1
;incrementable STATES/phase for F2
```

```
;suppression of MQC in F1
;phase purge in F1
;phase purge in F2
```

13C-NOESY-HSQC (hchnoesy600)

So wie 13C-NOESY-HSQC (siehe oben) mit folgende Änderungen:

```
;use gradient ratio:  cnst21 : cnst22 : cnst23 :cnst24 :  
;                    10   :  30   :  96   :  24  
;                    10   :  30   :  96   : -24
```

und noch eine Gradiente nach der Delay nach der Deuterium Entkopplung (Zeile 51):

```
p16:ngrad:c34  
d16
```

13C-NOESY-HSQC (hchnoesy_last)

```
; 1H in F2 und X in F1; harte Pulse fuer 13C; Entkopplerpulse fuer 15N  
; 13CO (shape) ergaenzt  
; pl2:f2 - statt pl0  
; ein 3. Gradient in die Mischzeit  
; Ergebnis: ziemlich gute Wasserunterdrueckung (RG=16K mit p28=1m!)  
; 3D sequence with  
; homonuclear correlation via dipolar coupling  
; dipolar coupling may be due to noe or chemical exchange.  
; H-1/X correlation via double inept transfer  
; using sensitivity improvement  
; phase sensitive using States-TPPI (t1)  
; phase sensitive using Echo/Antiecho-TPPI gradient selection (t2)  
; using trim pulses in inept transfer  
; with decoupling during acquisition  
; using shaped pulses for inversion on f2 – channel
```

```
; A.L. Davis, J. Keeler, E.D. Laue & D. Moskau, J. Magn. Reson. 98,  
; 207-216 (1992)  
; A.G. Palmer III, J. Cavanagh, P.E. Wright & M. Rance, J. Magn.  
; Reson. 93, 151-170 (1991)  
; L.E. Kay, P. Keifer & T. Saarinen, J. Am. Chem. Soc. 114,  
; 10663-5 (1992)  
; J. Schleucher et al., Angew. Chem. 114(10), 1518 (1993)
```

```
;Avance.incl, version 99/08/02  
;Grad.incl, version 99/02/19  
;Delay.incl, version 99/02/19
```

```
define list<gradient> EA=<EA>  
define list<gradient> MQ=<MQ>
```

```
;general delays
```

```
define delay DELTA
define delay DELTA1
define delay DELTA2
define delay DELTA3
define delay DELTA4
define delay DELTA5
define delay DELTA6
define delay DELTA7
define delay DELTA8
```

```
define delay TAU
define delay TAU1
define delay TAU2
define delay TAU3
define delay TAU4
define delay TAU5
```

```
;delays for centering pulses
```

```
define delay CEN_HN1
define delay CEN_HN2
define delay CEN_HN3
define delay CEN_HC1
define delay CEN_HC2
define delay CEN_HC3
define delay CEN_HC4
define delay CEN_CN1
define delay CEN_CN2
```

```
aqseq 312
```

```
1 ze
  d11
2 d1 do:f2
  3m
3 d11
  18m
4 13m
5 16m
6 d12 pl2:f2
  (p1 ph7)
  DELTA
  (p2 ph9)
  d10
  (CEN_CN1 p4 ph1):f2 (p8 ph1):f4
  d10
  (p1 ph8):f1
```

```
;loop counters
```

```
define loopcounter COUNTER
define loopcounter SCALEF
define loopcounter FACTOR1
define loopcounter FACTOR2
define loopcounter FACTOR3
```

```
"p2=p1*2"
"p4=p3*2"
"d0=3u"
"d4=1s/(cnst2*4)"
"d10=3u"
"d11=30m"
"d12=20u"
"d18=d8-p16-d16"

"DELTA=p8+d10*2"
"DELTA1=p16+d16+d0*2-10u"
"DELTA2=d4-p4/2-p16-8u"
"DELTA3=d4-p4/2"
```

```
"CEN_HC1=(p3-p1)"
"CEN_HC2=(p4-p2)/2"
"CEN_CN1=(p8-p4)/2"
"CEN_CN2=(p14-p8)/2"
"CEN_HC3=(p14-p2)/2"

"l3=(td1/2)"
"l4=(td2/2)"
```

```

d18
p16:gp1
d16
(p1 ph1):f1
DELTA3
4u
(CEN_HC2 p2 ph1) (p4 ph6):f2
4u
DELTA3 setnmr2|0 setnmr0|34
p28 ph1
4u
(p1 ph2) (p3 ph3):f2
d0
(CEN_HC3 p2 ph5):f1 (p14:sp3 ph1):f2 (CEN_CN2 p8 ph1):f4
d0
p16:gp2*EA
d16 pl2:f2
(p4 ph4):f2
DELTA1
(p14:sp3 ph1):f2
10u pl2:f2
(CEN_HC1 p1 ph1) (p3 ph4):f2
DELTA3
(CEN_HC2 p2 ph1) (p4 ph1):f2
4u
p16:gp3
DELTA2 pl12:f2
4u setnmr2^0 setnmr0^34
go=2 ph3 l cpd2:f2
d1 do:f2 wr #0 if #0 zd
3m igrad EA
lo to 3 times 2
d11 id0
6m ip3*2
6m ip6*2
6m ip31*2
lo to 4 times l3
10m rd0
3m ip7
lo to 5 times 2
10m id10
6m ip31*2
lo to 6 times l4

```

```

exit

```

```

ph1 = 0
ph2 = 1
ph3 = 0 2
ph4 = 0 0 0 0 0 0 0 0 2 2 2 2 2 2 2 2
ph5 = 0 0 2 2
ph6 = 0
ph7 = 0 0 0 0 2 2 2 2
ph8 = 0
ph9 = 1 1 1 1 3 3 3 3 0 0 0 0 2 2 2 2
ph31= 0 2 0 2 2 0 2 0 0 2 0 2 2 2 0 2 0
;ph31= 0 2 0 2 2 0 2 0 2 0 2 0 2 0 2 0 2

```



```
;p10 : 120dB
;p11 : f1 channel - power level for pulse (default)
;p12 : f2 channel - power level for pulse (default)
;p112 : f2 channel - power level for CPD/BB decoupling
;sp3 : f2 channel - shaped pulse 180 degree
;p1 : f1 channel - 90 degree high power pulse
;p2 : f1 channel - 180 degree high power pulse
;p3 : f2 channel - 90 degree high power pulse
;p4 : f2 channel - 180 degree high power pulse
;p14 : f2 channel - 180 degree shaped pulse for inversion
;p16 : homospoil/ gradient pulse
;p28 : f1 channel - trim pulse
;d0 : incremented delay (F1 in 3D) [3 usec]
;d1 : relaxation delay; 1-5 * T1
;d4 : 1/(4J)XH
;d8 : mixing time
;d10 : incremented delay (F2 in 3D) [3 usec]
;d11 : delay for disk I/O [30 msec]
;d12 : delay for power switching [20 usec]
;d16 : delay for homospoil/gradient recovery
;cnst2 = J(XH)
;l3: loop for phase sensitive 3D using States-TPPI : l3 = td1/2
;l13: loop for phase sensitive 3D using E/A method : l13 = td2/2
;in0: 1/(2 * SW(X)) = DW(X)
;nd0: 2
;in10: 1/(2 * SW(H)) = DW(H)
;nd10: 2
;NS: 16 * n - mit 8 gibt's haessliche quadimages in F2 (1H)!!!
;DS: >= 16
;td1: number of experiments in F1
;td2: number of experiments in F2
;MC2: echo-antiecho in F1
;MC2: States in F2
;cpd2: decoupling according to sequence defined by cpdprg2
;pcpd2: f2 channel - 90 degree pulse for decoupling sequence

;use gradient ratio: gp 1 : gp 2 : gp 3
;                   7 : 80 : 20.1      for C-13
;                   20 : 80 : 8.1      for N-15 (gp1 not tested!)

;for z-only gradients:
;gpz1: 80%
;gpz2: 20.1% for C-13, 8.1% for N-15

;use gradient files:
;gpnam1: SINE.100
;gpnam2: SINE.100
```

Literaturverzeichnis

- [1] J.D. Watson, F.H.C. Crick, *Nature* **1953**, 171, 737-738.
- [2] J.B. Fenn, K. Tanaka, K. Wüthrich, *Nobel Lectures 2002, Angew. Chem., Int. Ed.* **2003**, 42.
- [3] K. Wüthrich, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2003**, 42, 3340-3363.
- [4] P.C. Lauterbur, P.S. Mansfield, *Nobel Lectures* **2003**.
- [5] P. Agre, R. MacKinnon, *Nobel Lectures* **2003**.
- [6] P. Güntert, *Prog. NMR Spectrosc.* **2003**, 43, 105-125.
- [7] P. Güntert, *CYANA version 1.0*, **2002**, http://www.las.jp/index_eg.html.
- [8] F. Bloch, W.W. Hansen, M. Packard, *Phys. Rev.* **1946**, 69, 127.
- [9] E.M. Purcell, H.C. Torrey, R.V. Pound, *Phys. Rev.* **1946**, 69, 37-38.
- [10] R.R. Ernst, W.A. Anderson, *Rev. Sci. Instrum.* **1966**, 37, 93-102.
- [11] J.N.S. Evans, *Biomolecular NMR Spectroscopy* Oxford University Press, Oxford **1995**.
- [12] K. Wüthrich, *NMR of Proteins and Nucleic Acids* Wiley, New York **1986**.
- [13] W.R. Croasmun, R.M.K. Carlson, *Two-Dimensional NMR Spectroscopy* VCH Publishers, Inc., New York **1994**.
- [14] P.C. Lauterbur, *Nature* **1973**, 242, 190-191.
- [15] H. Friebolin, *Ein- und zweidimensional NMR-Spektroskopie: eine Einführung*. Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim **1999**.
- [16] H. Kessler, M. Gehrke, C. Griesinger, *Angew. Chem.* **1988**, 100, 507-554.
- [17] J. Jeener, *Ampère Int. Summerschool II*, Basko Polje, Jugoslavia **1971**.
- [18] W.P. Aue, E. Bartholdi, R.R. Ernst, *J. Chem. Phys.* **1976**, 64, 2229-2246.
- [19] R.R. Ernst, G. Bodenhausen, A. Wokaun, *Principles of Nuclear Magnetic Resonance in one and two Dimensions* Clarendon Press, Oxford **1987**.
- [20] D. Neuhaus, M.P. Williamson, *The Nuclear Overhauser Effect in Structural and Conformational Analysis* Verlag Chemie, Weinheim **1989**.
- [21] M. Karplus, *J. Am. Chem. Soc.* **1963**, 85, 2870-2871.
- [22] V.F. Bystrov, *Prog. NMR Spectrosc.* **1976**, 10, 41-81.
- [23] G. Wagner, *J. Biomol. NMR* **1993**, 3, 375-385.

- [24] L.E. Kay, K.H. Gardner, *Curr. Opin. Struct. Biol.* **1997**, *7*, 722-731.
- [25] A. Bax, S. Grzesiek, *Acc. Chem. Res.* **1993**, *26*, 131-138.
- [26] G. Wider, *Prog. NMR Spectrosc.* **1998**, *32*, 193-275.
- [27] G. Otting, K. Wüthrich, *Q. Rev. Biophys.* **1990**, *23*, 39-96.
- [28] S. Grzesiek, J. Anglister, H. Ren, A. Bax, *J. Am. Chem. Soc.* **1993**, *115*, 4369-4370.
- [29] T. Yamazaki, W. Lee, M. Revington, D.L. Mattiello, F.W. Dahlquist, C.H. Arrowsmith, L.E. Kay, *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 6464-6465.
- [30] H.L. Crespi, R.M. Rosenberg, J.J. Katz, *Science* **1968**, *161*, 795-796.
- [31] J.L. Markley, I. Putter, O. Jardetzky, *Science* **1968**, *161*, 1249-1251.
- [32] A. Abragam, *The Principles of Nuclear Magnetism* (S. 309), Clarendon Press, Oxford **1961**.
- [33] R.E. London, *J. Mag. Reson.* **1990**, *86*, 410-415.
- [34] A.C. Wang, S. Grzesiek, R. Tschudin, P.J. Lodi, A. Bax, *J. Biomol. NMR* **1995**, *5*, 376-382.
- [35] T.F. Havel, K. Wüthrich, *Bull. Math. Biol.* **1984**, *46*, 673-698.
- [36] P. Güntert, *Q. Rev. Biophys.* **1998**, *31*, 145-237.
- [37] C. Rölz, *Dissertation*, Technische Universität München, **2000**.
- [38] W. Braun, C. Bosch, L.R. Brown, N. Gö, K. Wüthrich, *Biochim. Biophys. Acta* **1981**, *667*, 377-396.
- [39] A.M. Gronenborn, G.M. Clore, *Prog. NMR Spectrosc.* **1985**, *17*, 1-32.
- [40] H. Günther, *NMR-Spektroskopie* Thieme, Stuttgart **1992**.
- [41] C.A.G. Haasnoot, F.A.A.M. de Leeuw, C. Altona, *Tetrahedron* **1980**, *36*, 2783-2792.
- [42] IUPAC-IUB, *Biochemistry* **1970**, *9*, 3471-3479.
- [43] Y. Kim, J.H. Prestegard, *J. Magn. Reson.* **1989**, *84*, 9-13.
- [44] C. Griesinger, O.W. Soerensen, R.R. Ernst, *J. Am. Chem. Soc.* **1985**, *107*, 6394-6396.
- [45] L. Müller, *J. Magn. Reson.* **1987**, *72*, 191-196.
- [46] M. Llinas, M.P. Klein, *J. Am. Chem. Soc.* **1975**, *97*, 4731-4737.
- [47] H. Kessler, *Angewandte Chemie, International Edition* **1982**, *21*, 512-523.
- [48] T.E.R. Brandau, *Dissertation*, Johann Wolfgang Goethe-Universität, **2000**.
- [49] T.F. Havel, K. Wüthrich, *J. Mol. Biol.* **1985**, *182*, 281-294.

- [50] Kuszewski, M. Nilges, A.T. Brünger, *J. Biomol. NMR* **1992**, 2, 33-56.
- [51] T.F. Havel, *Biopolymers* **1990**, 29, 1565-1585.
- [52] T.F. Havel, *Prog. Biophys. Mol. Biol.* **1991**, 56, 43-78.
- [53] G.M. Crippen, *J. Comput. Chem.* **1982**, 3, 471-476.
- [54] R. Kaptein, R. Boelens, R.M. Scheek, W.F. van Gunsteren, *Biochemistry* **1988**, 27, 5389-5395.
- [55] J. Kemmink, C.P. van Mierlo, R.M. Scheek, T.E. Creighton, *J. Mol. Biol.* **1993**, 230, 312-322.
- [56] D.F. Mierke, R.M. Scheek, H. Kessler, *Biopolymers* **1994**, 34, 559-563.
- [57] W. Braun, N. Gö, *J. Mol. Biol.* **1985**, 186, 611-626.
- [58] M. Nilges, J. Kuszewski, A.T. Brünger, *Computational aspects of the study of biological macromolecules by nuclear magnetic resonance spectroscopy* (S. 451-461), Plenum Press, New York **1991**.
- [59] A.T. Brünger, M. Nilges, *Q. Rev. Biophys.* **1993**, 26, 49-125.
- [60] A.T. Brünger, *X-PLOR Manual. Version 3.1*. Yale University Press, Cambridge, MA **1992**.
- [61] C. Mumenthaler, P. Güntert, W. Braun, K. Wüthrich, *J. Biomol. NMR* **1997**, 10, 351-362.
- [62] P. Güntert, K.D. Berndt, K. Wüthrich, *J. Biomol. NMR* **1993**, 3, 601-606.
- [63] T. Herrmann, P. Güntert, K. Wüthrich, *J. Mol. Biol.* **2002**, 319, 209-227.
- [64] P. Güntert, C. Mumenthaler, K. Wüthrich, *J. Mol. Biol.* **1997**, 273, 283-298.
- [65] C. Bartels, T.H. Xia, M. Billeter, P. Güntert, K. Wüthrich, *J. Biomol. NMR* **1995**, 6, 1-10.
- [66] M. Nilges, *Proteins: Struc. Funct. Genet.* **1993**, 17, 297-309.
- [67] M. Nilges, S.I. O'Donoghue, *Prog. NMR Spectrosc.* **1998**, 32, 107-139.
- [68] P. Güntert, W. Braun, K. Wüthrich, *J. Mol. Biol.* **1991**, 217, 517-530.
- [69] E.G. Stein, L.M. Rice, A.T. Brünger, *J. Magn. Reson.* **1997**, 124, 154-164.
- [70] H. Abe, W. Braun, T. Noguti, N. Gö, *Comput. Chem.* **1984**, 8, 239-247.
- [71] Aus <http://www.toxinfo.org/>, Toxik. Abteilung II, Med. Klinik der Techn. Univ. München, abgerufen am 15. April **2004**.
- [72] Aus <http://www.bioimages.org.uk/>, abgerufen am 21. Januar **2000**.

- [73] M. Badi, *Dissertation*, Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, **2001**.
- [74] A. Mayer, H. Anke, O. Sterner, *Natural Product Letters* **1997**, *10*, 25-32.
- [75] E. Büchel, U. Martini, A. Mayer, H. Anke, O. Sterner, *Tetrahedron* **1998**, *54*, 5345-5352.
- [76] A. Mayer, M. Kilian, B. Hoster, O. Sterner, H. Anke, *Pestic. Sci.* **1999**, *55*, 27-30.
- [77] O. Sterner, W. Etzel, A. Mayer, H. Anke, *Natural Product Letters* **1997**, *10*, 33-38.
- [78] E. Büchel, A. Mayer, U. Martini, H. Anke, O. Sterner, *Pestic. Sci.* **1998**, *54*, 309-311.
- [79] B. Thern, J. Rudolph, G. Jung, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2002**, *41*, 2307-2309.
- [80] Aus <http://www.apsnet.org/>, The American Phytopathological Society, abgerufen am 24. Januar **2000**.
- [81] L. Braunschweiler, R.R. Ernst, *J. Magn. Reson.* **1983**, *53*, 521-528.
- [82] J. Jeener, B.H. Meier, P. Bachmann, R.R. Ernst, *J. Chem. Phys.* **1979**, *71*, 4546-4553.
- [83] M. Rance, O.W. Sorensen, G. Bodenhausen, G. Wagner, R.R. Ernst, K. Wuthrich, *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **1983**, *117*, 479-485.
- [84] M. Nilges, G.M. Clore, A.M. Gronenborn, *FEBS Lett.* **1988**, *239*, 129-136.
- [85] A.E. Torda, R.M. Scheek, W.F. van Gunsteren, *Chem. Phys. Lett.* **1989**, *157*, 289-294.
- [86] A.E. Torda, R.M. Scheek, W.F. van Gunsteren, *J. Mol. Biol.* **1990**, *214*, 223-230.
- [87] D.A. Pearlman, P.A. Kollmann, *J. Mol. Biol.* **1991**, *220*, 457-479.
- [88] A.P. Nanzer, W.F. van Gunsteren, A.E. Torda, *J. Biomol. NMR* **1995**, *6*, 313-320.
- [89] J.S. Richardson, *Adv. Protein Chem.* **1981**, *34*, 167-339.
- [90] N.D. Meadow, D.K. Fox, S. Roseman, *Annu. Rev. Biochem.* **1990**, *59*, 497-542.
- [91] M.H. Saier, *Microbiol. Rev.* **1989**, *53*, 109-120.
- [92] B. Erni, *Int. Rev. Cytol.* **1992**, *137A*, 127-148.
- [93] P.W. Postma, J.W. Lengeler, G.R. Jacobson, *Microbiol. Rev.* **1993**, *57*, 543-594.
- [94] M.H. Saier, J. Reizer, *Mol. Microbiol.* **1994**, *13*, 755-764.
- [95] M.H. Saier, S. Chauvaux, J. Deutscher, J. Reizer, J.-J. Ye, *Trends Biochem. Sci.* **1995**, *20*, 267-271.
- [96] M. Segovia, C. Vicente, *J. Plant Physiol.* **1995**, *146*, 437-444.

- [97] H. Nikaido, M.H. Saier, Jr., *Science* **1992**, 258, 936-942.
- [98] R. Lux, K. Jahreis, K. Bettenbrock, J.S. Parkinson, J.W. Lengeler, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **1995**, 92, 11583-11587.
- [99] J.W. Lengeler, K. Jahreis, U.F. Wehmeier, *Biochim. Biophys. Acta* **1994**, 1188, 1-28.
- [100] D.I. Liao, E. Silverton, Y.J. Seok, B.R. Lee, A. Peterkofsky, D.R. Davies, *Structure* **1996**, 4, 861-872.
- [101] D.S. Garrett, Y.J. Seok, D.I. Liao, A. Peterkofsky, A.M. Gronenborn, G.M. Clore, *Biochemistry* **1997**, 36, 2517-2530.
- [102] O. Herzberg, P. Reddy, S. Sutrina, M.H. Saier, Jr., J. Reizer, G. Kapadia, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **1992**, 89, 2499-2503.
- [103] Z. Jia, J.W. Quail, E.B. Waygood, L.T.J. Delbaere, *J. Biol. Chem.* **1993**, 268, 22490-22501.
- [104] Z. Jia, M. Vandonselaar, W. Hengstenberg, J.W. Quail, L.T.J. Delbaere, *J. Mol. Biol.* **1994**, 236, 1341-1355.
- [105] M. Wittekind, P. Rajagopal, B.R. Branchini, J. Reizer, M.H. Saier, Jr., R.E. Klevit, *Protein Sci.* **1992**, 1, 1363-1376.
- [106] N.A.J. van Nuland, J. Grötzinger, K. Dijkstra, R.M. Scheek, G.T. Robillard, *Eur. J. Biochem.* **1992**, 210, 881-891.
- [107] H.R. Kalbitzer, W. Hengstenberg, *Eur. J. Biochem.* **1993**, 216, 205-214.
- [108] D.I. Liao, G. Kapadia, P. Reddy, M.H. Saier, Jr., J. Reizer, O. Herzberg, *Biochemistry* **1991**, 30, 9583-9594.
- [109] D. Worthylake, N.D. Meadow, S. Roseman, D.I. Liao, O. Herzberg, S.J. Remington, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **1991**, 88, 10382-10386.
- [110] J.H. Hurley, H.R. Faber, D. Worthylake, N.D. Meadow, S. Roseman, D.W. Pettigrew, S.J. Remington, *Science* **1993**, 259, 673-677.
- [111] W.J. Fairbrother, G.P. Gippert, J. Reizer, M.H. Saier, Jr., P.E. Wright, *FEBS Lett.* **1992**, 296, 148-152.
- [112] P. Sliz, R. Engelmann, W. Hengstenberg, E.F. Pai, *Structure* **1997**, 5, 775-788.
- [113] R.S. Nunn, Z. Markovic-Housley, J.C. Génovésio-Taverne, K. Flükiger, P.J. Rizkallah, J.N. Jansonius, T. Schirmer, B. Erni, *J. Mol. Biol.* **1996**, 259, 502-511.
- [114] M. Eberstadt, S. Golic-Grdadolnik, G. Gemmecker, H. Kessler, A. Buhr, B. Erni, *Biochemistry* **1996**, 35, 11286-11292.
- [115] E. Ab, G.K. Schuurman-Wolters, M.H. Saier, J. Reizer, M. Jacuinod, P. Roepstorff, K. Dijkstra, R.M. Scheek, G.T. Robillard, *Protein Sci.* **1994**, 3, 282-290.

- [116] S. Seip, R. Lanz, R. Gutknecht, K. Flükiger, B. Erni, *Eur. J. Biochem.* **1997**, *243*, 306-314.
- [117] S. Seip, J. Balbach, S. Behrens, H. Kessler, K. Flükiger, R. de Meyer, B. Erni, *Biochemistry* **1994**, *33*, 7174-7183.
- [118] G.L. Orriss, B. Erni, T. Schirmer, *J. Mol. Biol.* **2003**, *327*, 1111-1119.
- [119] B. Erni, B. Zanolari, *J. Biol. Chem.* **1985**, *260*, 15495-15503.
- [120] B. Erni, B. Zanolari, H.P. Kocher, *J. Biol. Chem.* **1987**, *262*, 5238-5247.
- [121] I. Martin-Verstraete, M. Debarbouille, A. Klier, G. Rapoport, *J. Mol. Biol.* **1990**, *214*, 657-671.
- [122] U.F. Wehmeier, B.M. Woehrl, J.W. Lengeler, *Mol. Gen. Genet.* **1995**, *246*, 610-618.
- [123] S. Mukhija, B. Erni, *J. Biol. Chem.* **1996**, *271*, 14819-14824.
- [124] B. Erni, B. Zanolari, P. Graff, H.P. Kocher, *J. Biol. Chem.* **1989**, *264*, 18733-18741.
- [125] Z. Markovic-Housley, A. Cooper, A. Lustig, K. Flükiger, B. Stolz, B. Erni, *Biochemistry* **1994**, *33*, 10977-10984.
- [126] R.M. Gschwind, G. Gemmecker, M. Leutner, H. Kessler, R. Gutknecht, R. Lanz, K. Flükiger, B. Erni, *FEBS Lett.* **1997**, *404*, 45-50.
- [127] D.S. Wishart, C.G. Bigam, J. Yao, F. Abildgaard, H.J. Dyson, E. Oldfield, J.L. Markley, B.D. Sykes, *J. Biomol. NMR* **1995**, *6*, 135-140.
- [128] R.M. Gschwind, *Dissertation*, Techn. Univ. München, **1997**.
- [129] G.M. Clore, A.M. Gronenborn, *Prog. NMR Spectrosc.* **1991**, *23*, 43-92.
- [130] H. Oschkinat, T. Müller, T. Dieckmann, *Angew. Chem.* **1994**, *106*, 284-300.
- [131] D.S. Wishart, B.D. Sykes, *J. Biomol. NMR* **1994**, *4*, 171-180.
- [132] S.W. Englander, N.R. Kallenbach, *Q. Rev. Biophys.* **1983**, *16*, 521-655.
- [133] S. Linse, O. Teleman, T. Drakenberg, *Biochemistry* **1990**, *29*, 5925-5934.
- [134] G.D. Henry, B.D. Sykes, *Biochemistry* **1990**, *29*, 6303-6313.
- [135] G. Gemmecker, W. Jahnke, H. Kessler, *J. Am. Chem. Soc.* **1993**, *115*, 11620-11621.
- [136] M. Coles, *persönliche Mitteilung*.
- [137] A.M.J.J. Bovin, *persönliche Mitteilung*.
- [138] T. Herrmann, P. Güntert, K. Wüthrich, *J. Biomol. NMR* **2002**, *24*, 171-189.

“Vita brevis, ars longa, occasio praeceps, experimentum periculosum, iudicium difficile”

Hippocratis

“La vida es breve, el camino del arte largo, el instante fugaz, la experiencia engañosa y el discernimiento problemático”

Hipócrates

“Life is short, the art long, opportunity fleeting, experiment treacherous, judgment difficult.”

Hippocrates

“Das Leben ist kurz, die Kunst lang, die Gelegenheit flüchtig, die Erfahrung trügerisch, das Urteil schwierig“

Hippokrates

Lebenslauf

Vorname:

Eva Gloria

Name:

Villarreal y López

Geburtsdatum:

29.10.1970

Geburtsort:

Málaga, Spanien



Ausbildung:

Juni 1988 Abitur in Naturwissenschaft, Málaga, Spanien.
1988-1995 Chemiestudium an der Universität Málaga.
1994 Abschluss „Licenciada en ciencias químicas“ (Diplomchemikerin).
1995-1997 Vorbereitungskurse für die Promotion. Universität Málaga.
1999-2004 Promotion bei Prof. Dr. H. Kessler, Technische Universität München.
2001-2004 Aufbaustudium „Umweltschutztechnik“. T. U. München.

Praktika, Beruf-/wissenschaftliche Erfahrung:

09.-12. 1994 Umweltamt Malaga. Technische Abteilung. Praktikantin.
10. 1995 Universität Malaga. Abteilung für Biochemie, molekular Biologie und organische Chemie. Wissenschaftliche Hilfskraft.
01.-03. 1997 Michael Huber München GmbH. Abteilung Umweltschutz und Produktsicherheit. Praktikantin bei Dr. P. Reißmann.
10.1997 - 01.1998 Technische Universität München. Institut für organische Chemie und Biochemie. Bei Prof. P. Lemmen. Wissenschaftliche Hilfskraft.
03.-12. 1998 Technische Universität München. Anorganisch-Chemisches Institut. Lehrstuhl Prof. W.A. Herrmann. Wissenschaftliche Mitarbeiterin.
Seit 01. 1999 Technische Universität München. Institut für organische Chemie und Biochemie. Lehrstuhl Prof. H. Kessler. Wiss. Mitarbeiterin.

Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und nur die in Abschnitt IV angegebene Literatur und folgende Hilfsmittel dafür verwendet zu haben:

LEO: Online Wörterbuch der Fakultät für Informatik der Technischen Universität München.
Die neue deutsche Rechtschreibung, CD-ROM mit Wörterbuch,
Grammatik der deutschen Sprache, Bertelsmann Lexikon Verlag,
Langenscheidts Handwörterbuch, Spanisch-Deutsch

Dissertationen alter Mitarbeiter des Instituts für organische Chemie und Biochemie, besonders die von Ruth Gschwind, Christian Rölz, Angelika Kühlewein und Adriane Gröger, so wie die Dissertationsmuster der Technische Universität München wurden als Beispiel für Formatierung und Darstellung der Dissertation hergenommen.

Abbildungen, die aus anderen Arbeiten übernommen wurden sind gekennzeichnet. Sonst wurden alle Abbildungen selbständig erzeugt oder auf der Vorlage einiger im Arbeitskreis existierender Dateien (benutzte Abbildungen von Christian Rölz und Ruth Gschwind) weiterbearbeitet bzw. modifiziert.

Eva Gloria Villarreal y López

Juni 2004