b72 [#6:1]-[#35:2] 0.05 0.04 0.03 Bond length error (A) 0.02 0.01 0.00 -0.01-0.02-0.03

Sage 2.2.1

Sage 2.2.1-sdat&age 2.2.1-tm-sdata

Sage 2.1.0 (regroup)