

用扩展的 Istomin-Palm 模型估算双向延伸化合物 R1-Y-R2 生成焓

曹晨忠^{1,*} 武亚新^{1,2}

(¹湖南科技大学化学化工学院, 理论化学与分子模拟教育部重点实验室, 分子构效关系湖南省普通高校重点实验室, 湖南 湘潭 411201; ²中南大学化学化工学院, 长沙 410083)

An Extended Istomin-Palm Model for Estimating the Enthalpies of Formation of the Two-Direction Extending Compounds R1-Y-R2

CAO Chen-Zhong^{1,*} WU Ya-Xin^{1,2}

(*1Hunan Provincial University Key Laboratory of QSAR/QSPR, Key Laboratory of Theoretical Chemistry and Molecular Simulation of Ministry of Education, School of Chemistry and Chemical Engineering, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan 411201, Hunan Province, P. R. China; 2School of Chemistry and Chemical Engineering, Central South University, Changsha 410083, P. R. China*)

*Corresponding author. Email: czcao@hnust.edu.cn; Tel: +86-731-58291336.

Table 1 The $\Delta_f H^\circ(\text{g})$ (kJ/mol), $N_{C(R1)}$, $N_{C(R2)}$, IPI(X), PEI(R1), PEI(R2), $\Delta\text{PEI}(R1)$, $\Delta\text{PEI}(R2)$, TSEI(R1), TSEI(R2), $\Delta\text{TSEI}(R1)$, and $\Delta\text{TSEI}(R2)$ values for some R1-Y-R2 (Y=S, NH, O, and CO)

No.	R1-Y-R2			$\Delta_f H^\circ(\text{g})_{\text{exp.}}^a$	$\Delta_f H^\circ(\text{g})_{\text{calc.}}^b$	$\Delta_f H^\circ(\text{Me-Y-Me,g})$	IPI(X) ^c	$N_{C(R1)}$	PEI(R1)	$\Delta\text{PEI}(R1)$	TSEI(R1)	$\Delta\text{TSEI}(R1)$	$N_{C(R2)}$	PEI(R2)	$\Delta\text{PEI}(R2)$	TSEI(R2)	$\Delta\text{TSEI}(R2)$
	R1	Y	R2														
1	C1	S	C1	-37.4	-38.3	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
2	C1	S	C2	-59.6	-61.3	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
3	C1	S	C3	-82.2	-82.9	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
4	C1	S	C4	-102.4	-104.0	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
5	C1	S	C5	-121.8	-125.0	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
6	C1	S	1mC2	-90.5	-90.8	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
7	C1	S	1mC3	-	-114.1	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
8	C1	S	1mC4	-	-135.9	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
9	C1	S	1eC3	-	-138.1	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
10	C1	S	2mC3	-	-106.1	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
11	C1	S	2mC4	-	-128.0	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
12	C1	S	3mC4	-	-125.9	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
13	C1	S	1m1mC2	-121.3	-122.0	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
14	C1	S	1m1mC3	-	-146.0	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
15	C1	S	1m2mC3	-	-138.0	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
16	C1	S	2m2mC3	-	-130.1	-37.4	-22.5082	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
17	C2	S	C2	-83.5	-84.9	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
18	C2	S	C3	-104.8	-106.6	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
19	C2	S	C4	-127.8	-127.9	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
20	C2	S	C5	-	-149.0	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
21	C2	S	1mC2	-118.3	-115.0	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
22	C2	S	1mC3	-	-138.4	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
23	C2	S	1mC4	-	-160.4	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
24	C2	S	1eC3	-	-162.6	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
25	C2	S	2mC3	-	-130.1	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
26	C2	S	2mC4	-	-152.0	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
27	C2	S	3mC4	-	-149.8	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
28	C2	S	1m1mC2	-	-146.8	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
29	C2	S	1m1mC3	-	-170.9	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
30	C2	S	1m2mC3	-	-162.6	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
31	C2	S	2m2mC3	-	-154.3	-37.4	-22.5082	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
32	C3	S	C3	-125.4 ^d	-128.5	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
33	C3	S	C4	-	-149.7	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
34	C3	S	C5	-	-170.8	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
35	C3	S	1mC2	-	-136.9	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
36	C3	S	1mC3	-	-160.5	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
37	C3	S	1mC4	-	-182.4	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
38	C3	S	1eC3	-	-184.7	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
39	C3	S	2mC3	-	-152.0	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
40	C3	S	2mC4	-	-174.0	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
41	C3	S	3mC4	-	-171.7	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076

42	C3	S	1m1mC2	-	-168.9	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
43	C3	S	1m1mC3	-	-193.1	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
44	C3	S	1m2mC3	-	-184.7	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
45	C3	S	2m2mC3	-	-176.2	-37.4	-22.5082	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
46	C4	S	C4	-167.7	-171.0	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
47	C4	S	C5	-	-192.1	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
48	C4	S	1mC2	-	-158.3	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
49	C4	S	1mC3	-	-181.8	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
50	C4	S	1mC4	-	-203.8	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
51	C4	S	1eC3	-	-206.1	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
52	C4	S	2mC3	-	-173.3	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
53	C4	S	2mC4	-	-195.3	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
54	C4	S	3mC4	-	-193.0	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
55	C4	S	1m1mC2	-	-190.3	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
56	C4	S	1m1mC3	-	-214.6	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
57	C4	S	1m2mC3	-	-206.1	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
58	C4	S	2m2mC3	-	-197.6	-37.4	-22.5082	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
59	C5	S	C5	-204.9	-213.2	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
60	C5	S	1mC2	-	-179.4	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
61	C5	S	1mC3	-	-203.0	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
62	C5	S	1mC4	-	-225.0	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
63	C5	S	1eC3	-	-227.3	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
64	C5	S	2mC3	-	-194.4	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
65	C5	S	2mC4	-	-216.4	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
66	C5	S	3mC4	-	-214.1	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
67	C5	S	1m1mC2	-	-211.5	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
68	C5	S	1m1mC3	-	-235.8	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
69	C5	S	1m2mC3	-	-227.3	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
70	C5	S	2m2mC3	-	-218.7	-37.4	-22.5082	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
71	1mC2	S	1mC2	-142.0	-145.1	-37.4	-22.5082	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
72	1mC2	S	1mC3	-	-168.6	-37.4	-22.5082	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
73	1mC2	S	1mC4	-	-190.6	-37.4	-22.5082	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
74	1mC2	S	1eC3	-	-192.8	-37.4	-22.5082	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
75	1mC2	S	2mC3	-	-160.4	-37.4	-22.5082	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
76	1mC2	S	2mC4	-	-182.4	-37.4	-22.5082	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
77	1mC2	S	3mC4	-	-180.2	-37.4	-22.5082	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
78	1mC2	S	1m1mC2	-	-174.2	-37.4	-22.5082	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
79	1mC2	S	1m1mC3	-	-198.4	-37.4	-22.5082	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
80	1mC2	S	1m2mC3	-	-192.8	-37.4	-22.5082	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
81	1mC2	S	2m2mC3	-	-183.9	-37.4	-22.5082	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
82	1mC3	S	1mC3	-	-192.2	-37.4	-22.5082	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
83	1mC3	S	1mC4	-	-214.2	-37.4	-22.5082	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
84	1mC3	S	1eC3	-	-216.4	-37.4	-22.5082	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
85	1mC3	S	2mC3	-	-184.0	-37.4	-22.5082	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
86	1mC3	S	2mC4	-	-206.0	-37.4	-22.5082	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290

87	1mC3	S	3mC4	-	-203.8	-37.4	-22.5082	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
88	1mC3	S	1m1mC2	-	-197.2	-37.4	-22.5082	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
89	1mC3	S	1m1mC3	-	-221.4	-37.4	-22.5082	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
90	1mC3	S	1m2mC3	-	-216.4	-37.4	-22.5082	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
91	1mC3	S	2m2mC3	-	-207.3	-37.4	-22.5082	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
92	1mC4	S	1mC4	-	-236.3	-37.4	-22.5082	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
93	1mC4	S	1eC3	-	-238.5	-37.4	-22.5082	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
94	1mC4	S	2mC3	-	-206.0	-37.4	-22.5082	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
95	1mC4	S	2mC4	-	-228.0	-37.4	-22.5082	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
96	1mC4	S	3mC4	-	-225.8	-37.4	-22.5082	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
97	1mC4	S	1m1mC2	-	-219.0	-37.4	-22.5082	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
98	1mC4	S	1m1mC3	-	-243.2	-37.4	-22.5082	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
99	1mC4	S	1m2mC3	-	-238.5	-37.4	-22.5082	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
100	1mC4	S	2m2mC3	-	-229.2	-37.4	-22.5082	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
101	1eC3	S	1eC3	-	-240.7	-37.4	-22.5082	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
102	1eC3	S	2mC3	-	-208.3	-37.4	-22.5082	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
103	1eC3	S	2mC4	-	-230.3	-37.4	-22.5082	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
104	1eC3	S	3mC4	-	-228.1	-37.4	-22.5082	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
105	1eC3	S	1m1mC2	-	-220.5	-37.4	-22.5082	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
106	1eC3	S	1m1mC3	-	-244.7	-37.4	-22.5082	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
107	1eC3	S	1m2mC3	-	-240.7	-37.4	-22.5082	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
108	1eC3	S	2m2mC3	-	-231.3	-37.4	-22.5082	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
109	2mC3	S	2mC3	-180.5	-175.6	-37.4	-22.5082	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
110	2mC3	S	2mC4	-	-197.6	-37.4	-22.5082	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
111	2mC3	S	3mC4	-	-195.3	-37.4	-22.5082	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
112	2mC3	S	1m1mC2	-	-191.9	-37.4	-22.5082	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
113	2mC3	S	1m1mC3	-	-216.1	-37.4	-22.5082	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
114	2mC3	S	1m2mC3	-	-208.3	-37.4	-22.5082	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
115	2mC3	S	2m2mC3	-	-199.6	-37.4	-22.5082	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
116	2mC4	S	2mC4	-	-219.6	-37.4	-22.5082	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
117	2mC4	S	3mC4	-	-217.3	-37.4	-22.5082	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
118	2mC4	S	1m1mC2	-	-213.7	-37.4	-22.5082	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
119	2mC4	S	1m1mC3	-	-237.9	-37.4	-22.5082	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
120	2mC4	S	1m2mC3	-	-230.3	-37.4	-22.5082	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
121	2mC4	S	2m2mC3	-	-221.6	-37.4	-22.5082	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
122	3mC4	S	3mC4	-221.5	-215.0	-37.4	-22.5082	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
123	3mC4	S	1m1mC2	-	-212.2	-37.4	-22.5082	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
124	3mC4	S	1m1mC3	-	-236.4	-37.4	-22.5082	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
125	3mC4	S	1m2mC3	-	-228.1	-37.4	-22.5082	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
126	3mC4	S	2m2mC3	-	-219.5	-37.4	-22.5082	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
127	1m1mC2	S	1m1mC2	-188.8	-183.6	-37.4	-22.5082	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
128	1m1mC2	S	1m1mC3	-	-207.0	-37.4	-22.5082	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
129	1m1mC2	S	1m2mC3	-	-220.5	-37.4	-22.5082	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
130	1m1mC2	S	2m2mC3	-	-209.6	-37.4	-22.5082	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
131	1m1mC3	S	1m1mC3	-	-230.3	-37.4	-22.5082	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638

132	1m1mC3	S	1m2mC3	-	-244.7	-37.4	-22.5082	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
133	1m1mC3	S	2m2mC3	-	-233.6	-37.4	-22.5082	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
134	1m2mC3	S	1m2mC3	-	-240.6	-37.4	-22.5082	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
135	1m2mC3	S	2m2mC3	-	-231.3	-37.4	-22.5082	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
136	2m2mC3	S	2m2mC3	-	-222.1	-37.4	-22.5082	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
137	C1	NH	C1	-18.8	-20.1	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
138	C1	NH	C2	-	-43.6	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
139	C1	NH	C3	-	-65.3	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
140	C1	NH	C4	-	-86.5	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
141	C1	NH	C5	-	-107.6	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
142	C1	NH	1mC2	-	-73.5	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
143	C1	NH	1mC3	-	-97.0	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
144	C1	NH	1mC4	-	-118.9	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
145	C1	NH	1eC3	-	-121.1	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
146	C1	NH	2mC3	-	-88.7	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
147	C1	NH	2mC4	-	-110.6	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
148	C1	NH	3mC4	-	-108.4	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
149	C1	NH	1m1mC2	-	-105.2	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
150	C1	NH	1m1mC3	-	-129.3	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
151	C1	NH	1m2mC3	-	-121.1	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
152	C1	NH	2m2mC3	-	-112.8	-18.8	-27.1200	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
153	C2	NH	C2	-72.2	-67.7	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
154	C2	NH	C3	-	-89.7	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
155	C2	NH	C4	-	-111.0	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
156	C2	NH	C5	-	-132.1	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
157	C2	NH	1mC2	-	-98.4	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
158	C2	NH	1mC3	-	-122.0	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
159	C2	NH	1mC4	-	-144.1	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
160	C2	NH	1eC3	-	-146.4	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
161	C2	NH	2mC3	-	-113.3	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
162	C2	NH	2mC4	-	-135.4	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
163	C2	NH	3mC4	-	-133.0	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
164	C2	NH	1m1mC2	-	-130.7	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
165	C2	NH	1m1mC3	-	-155.1	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
166	C2	NH	1m2mC3	-	-146.4	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
167	C2	NH	2m2mC3	-	-137.7	-18.8	-27.1200	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
168	C3	NH	C3	-116.0	-111.7	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
169	C3	NH	C4	-	-133.1	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
170	C3	NH	C5	-	-154.2	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
171	C3	NH	1mC2	-	-120.5	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
172	C3	NH	1mC3	-	-144.3	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
173	C3	NH	1mC4	-	-166.4	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
174	C3	NH	1eC3	-	-168.7	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
175	C3	NH	2mC3	-	-135.4	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
176	C3	NH	2mC4	-	-157.5	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290

177	C3	NH	3mC4	-	-155.1	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
178	C3	NH	1m1mC2	-	-153.1	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
179	C3	NH	1m1mC3	-	-177.6	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
180	C3	NH	1m2mC3	-	-168.7	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
181	C3	NH	2m2mC3	-	-159.9	-18.8	-27.1200	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
182	C4	NH	C4	-156.6	-154.5	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
183	C4	NH	C5	-	-175.6	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
184	C4	NH	1mC2	-	-142.0	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
185	C4	NH	1mC3	-	-165.8	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
186	C4	NH	1mC4	-	-187.9	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
187	C4	NH	1eC3	-	-190.3	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
188	C4	NH	2mC3	-	-156.9	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
189	C4	NH	2mC4	-	-179.0	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
190	C4	NH	3mC4	-	-176.6	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
191	C4	NH	1m1mC2	-	-174.7	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
192	C4	NH	1m1mC3	-	-199.2	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
193	C4	NH	1m2mC3	-	-190.3	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
194	C4	NH	2m2mC3	-	-181.3	-18.8	-27.1200	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
195	C5	NH	C5	-	-196.8	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
196	C5	NH	1mC2	-	-163.2	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
197	C5	NH	1mC3	-	-187.0	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
198	C5	NH	1mC4	-	-209.1	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
199	C5	NH	1eC3	-	-211.5	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
200	C5	NH	2mC3	-	-178.0	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
201	C5	NH	2mC4	-	-200.1	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
202	C5	NH	3mC4	-	-197.7	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
203	C5	NH	1m1mC2	-	-196.0	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
204	C5	NH	1m1mC3	-	-220.5	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
205	C5	NH	1m2mC3	-	-211.5	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
206	C5	NH	2m2mC3	-	-202.5	-18.8	-27.1200	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
207	1mC2	NH	1mC2	-	-129.2	-18.8	-27.1200	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
208	1mC2	NH	1mC3	-	-153.0	-18.8	-27.1200	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
209	1mC2	NH	1mC4	-	-175.1	-18.8	-27.1200	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
210	1mC2	NH	1eC3	-	-177.4	-18.8	-27.1200	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
211	1mC2	NH	2mC3	-	-144.3	-18.8	-27.1200	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
212	1mC2	NH	2mC4	-	-166.4	-18.8	-27.1200	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
213	1mC2	NH	3mC4	-	-164.1	-18.8	-27.1200	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
214	1mC2	NH	1m1mC2	-	-159.0	-18.8	-27.1200	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
215	1mC2	NH	1m1mC3	-	-183.4	-18.8	-27.1200	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
216	1mC2	NH	1m2mC3	-	-177.4	-18.8	-27.1200	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
217	1mC2	NH	2m2mC3	-	-168.0	-18.8	-27.1200	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
218	1mC3	NH	1mC3	-	-176.8	-18.8	-27.1200	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
219	1mC3	NH	1mC4	-	-198.9	-18.8	-27.1200	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
220	1mC3	NH	1eC3	-	-201.3	-18.8	-27.1200	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
221	1mC3	NH	2mC3	-	-168.1	-18.8	-27.1200	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213

222	1mC3	NH	2mC4	-	-190.3	-18.8	-27.1200	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
223	1mC3	NH	3mC4	-	-187.9	-18.8	-27.1200	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
224	1mC3	NH	1m1mC2	-	-182.2	-18.8	-27.1200	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
225	1mC3	NH	1m1mC3	-	-206.7	-18.8	-27.1200	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
226	1mC3	NH	1m2mC3	-	-201.3	-18.8	-27.1200	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
227	1mC3	NH	2m2mC3	-	-191.6	-18.8	-27.1200	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
228	1mC4	NH	1mC4	-	-221.1	-18.8	-27.1200	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
229	1mC4	NH	1eC3	-	-223.4	-18.8	-27.1200	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
230	1mC4	NH	2mC3	-	-190.2	-18.8	-27.1200	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
231	1mC4	NH	2mC4	-	-212.4	-18.8	-27.1200	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
232	1mC4	NH	3mC4	-	-210.0	-18.8	-27.1200	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
233	1mC4	NH	1m1mC2	-	-204.1	-18.8	-27.1200	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
234	1mC4	NH	1m1mC3	-	-228.6	-18.8	-27.1200	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
235	1mC4	NH	1m2mC3	-	-223.4	-18.8	-27.1200	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
236	1mC4	NH	2m2mC3	-	-213.7	-18.8	-27.1200	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
237	1eC3	NH	1eC3	-	-225.8	-18.8	-27.1200	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
238	1eC3	NH	2mC3	-	-192.6	-18.8	-27.1200	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
239	1eC3	NH	2mC4	-	-214.8	-18.8	-27.1200	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
240	1eC3	NH	3mC4	-	-212.4	-18.8	-27.1200	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
241	1eC3	NH	1m1mC2	-	-205.8	-18.8	-27.1200	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
242	1eC3	NH	1m1mC3	-	-230.3	-18.8	-27.1200	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
243	1eC3	NH	1m2mC3	-	-225.7	-18.8	-27.1200	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
244	1eC3	NH	2m2mC3	-	-215.9	-18.8	-27.1200	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
245	2mC3	NH	2mC3	-	-159.2	-18.8	-27.1200	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
246	2mC3	NH	2mC4	-	-181.3	-18.8	-27.1200	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
247	2mC3	NH	3mC4	-	-179.0	-18.8	-27.1200	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
248	2mC3	NH	1m1mC2	-	-176.4	-18.8	-27.1200	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
249	2mC3	NH	1m1mC3	-	-200.9	-18.8	-27.1200	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
250	2mC3	NH	1m2mC3	-	-192.6	-18.8	-27.1200	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
251	2mC3	NH	2m2mC3	-	-183.5	-18.8	-27.1200	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
252	2mC4	NH	2mC4	-	-203.5	-18.8	-27.1200	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
253	2mC4	NH	3mC4	-	-201.1	-18.8	-27.1200	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
254	2mC4	NH	1m1mC2	-	-198.3	-18.8	-27.1200	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
255	2mC4	NH	1m1mC3	-	-222.8	-18.8	-27.1200	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
256	2mC4	NH	1m2mC3	-	-214.8	-18.8	-27.1200	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
257	2mC4	NH	2m2mC3	-	-205.6	-18.8	-27.1200	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
258	3mC4	NH	3mC4	-	-198.7	-18.8	-27.1200	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
259	3mC4	NH	1m1mC2	-	-196.7	-18.8	-27.1200	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
260	3mC4	NH	1m1mC3	-	-221.2	-18.8	-27.1200	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
261	3mC4	NH	1m2mC3	-	-212.4	-18.8	-27.1200	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
262	3mC4	NH	2m2mC3	-	-203.4	-18.8	-27.1200	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
263	1m1mC2	NH	1m1mC2	-	-169.2	-18.8	-27.1200	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
264	1m1mC2	NH	1m1mC3	-	-192.8	-18.8	-27.1200	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
265	1m1mC2	NH	1m2mC3	-	-205.8	-18.8	-27.1200	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
266	1m1mC2	NH	2m2mC3	-	-194.4	-18.8	-27.1200	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798

267	1m1mC3	NH	1m1mC3	-	-216.4	-18.8	-27.1200	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
268	1m1mC3	NH	1m2mC3	-	-230.3	-18.8	-27.1200	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
269	1m1mC3	NH	2m2mC3	-	-218.6	-18.8	-27.1200	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
270	1m2mC3	NH	1m2mC3	-	-225.7	-18.8	-27.1200	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
271	1m2mC3	NH	2m2mC3	-	-215.9	-18.8	-27.1200	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
272	2m2mC3	NH	2m2mC3	-	-206.2	-18.8	-27.1200	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
273	C1	O	C1	-184.1	-188.9	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
274	C1	O	C2	-216.4	-215.9	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
275	C1	O	C3	-238.1	-238.8	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
276	C1	O	C4	-258.1	-260.7	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
277	C1	O	C5	-	-282.1	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
278	C1	O	1mC2	-252.0	-249.4	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
279	C1	O	1mC3	-	-274.1	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
280	C1	O	1mC4	-	-296.6	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
281	C1	O	1eC3	-	-299.5	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
282	C1	O	2mC3	-	-263.5	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
283	C1	O	2mC4	-	-286.0	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
284	C1	O	3mC4	-	-283.2	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
285	C1	O	1m1mC2	-283.7	-284.7	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
286	C1	O	1m1mC3	-	-310.1	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
287	C1	O	1m2mC3	-	-299.5	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
288	C1	O	2m2mC3	-	-288.8	-184.1	-63.8984	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
289	C2	O	C2	-252.1	-244.6	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
290	C2	O	C3	-272.0	-268.1	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
291	C2	O	C4	-	-290.2	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
292	C2	O	C5	-	-311.8	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
293	C2	O	1mC2	-	-279.8	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
294	C2	O	1mC3	-	-305.0	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
295	C2	O	1mC4	-	-327.8	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
296	C2	O	1eC3	-	-330.9	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
297	C2	O	2mC3	-	-293.3	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
298	C2	O	2mC4	-	-316.1	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
299	C2	O	3mC4	-	-313.0	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
300	C2	O	1m1mC2	-313.9	-316.7	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
301	C2	O	1m1mC3	-	-342.6	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
302	C2	O	1m2mC3	-	-330.9	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
303	C2	O	2m2mC3	-	-319.2	-184.1	-63.8984	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
304	C3	O	C3	-293.0	-291.8	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
305	C3	O	C4	-	-314.0	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
306	C3	O	C5	-	-335.6	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
307	C3	O	1mC2	-	-303.8	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
308	C3	O	1mC3	-	-329.3	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
309	C3	O	1mC4	-	-352.2	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
310	C3	O	1eC3	-	-355.4	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
311	C3	O	2mC3	-	-317.2	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213

312	C3	O	2mC4	-	-340.1	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
313	C3	O	3mC4	-	-336.9	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
314	C3	O	1m1mC2	-	-341.3	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
315	C3	O	1m1mC3	-	-367.4	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
316	C3	O	1m2mC3	-	-355.4	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
317	C3	O	2m2mC3	-	-343.3	-184.1	-63.8984	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
318	C4	O	C4	-332.8	-336.2	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
319	C4	O	C5	-	-357.9	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
320	C4	O	1mC2	-	-326.2	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
321	C4	O	1mC3	-	-351.7	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
322	C4	O	1mC4	-	-374.7	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
323	C4	O	1eC3	-	-378.0	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
324	C4	O	2mC3	-	-339.5	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
325	C4	O	2mC4	-	-362.4	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
326	C4	O	3mC4	-	-359.2	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
327	C4	O	1m1mC2	-	-364.0	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
328	C4	O	1m1mC3	-	-390.2	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
329	C4	O	1m2mC3	-	-377.9	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
330	C4	O	2m2mC3	-	-365.7	-184.1	-63.8984	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
331	C5	O	C5	-	-379.6	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
332	C5	O	1mC2	-	-348.0	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
333	C5	O	1mC3	-	-373.5	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
334	C5	O	1mC4	-	-396.5	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
335	C5	O	1eC3	-	-399.8	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
336	C5	O	2mC3	-	-361.2	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
337	C5	O	2mC4	-	-384.1	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
338	C5	O	3mC4	-	-380.9	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
339	C5	O	1m1mC2	-	-385.9	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
340	C5	O	1m1mC3	-	-412.1	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
341	C5	O	1m2mC3	-	-399.8	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
342	C5	O	2m2mC3	-	-387.4	-184.1	-63.8984	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
343	1mC2	O	1mC2	-319.2	-316.1	-184.1	-63.8984	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
344	1mC2	O	1mC3	-	-341.7	-184.1	-63.8984	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
345	1mC2	O	1mC4	-	-364.8	-184.1	-63.8984	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
346	1mC2	O	1eC3	-	-368.1	-184.1	-63.8984	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
347	1mC2	O	2mC3	-	-329.5	-184.1	-63.8984	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
348	1mC2	O	2mC4	-	-352.5	-184.1	-63.8984	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
349	1mC2	O	3mC4	-	-349.2	-184.1	-63.8984	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
350	1mC2	O	1m1mC2	-358.1	-351.4	-184.1	-63.8984	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
351	1mC2	O	1m1mC3	-	-377.7	-184.1	-63.8984	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
352	1mC2	O	1m2mC3	-	-368.0	-184.1	-63.8984	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
353	1mC2	O	2m2mC3	-	-355.0	-184.1	-63.8984	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
354	1mC3	O	1mC3	-360.6	-367.6	-184.1	-63.8984	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
355	1mC3	O	1mC4	-	-390.7	-184.1	-63.8984	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
356	1mC3	O	1eC3	-	-394.0	-184.1	-63.8984	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383

357	1mC3	O	2mC3	-	-355.1	-184.1	-63.8984	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
358	1mC3	O	2mC4	-	-378.2	-184.1	-63.8984	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
359	1mC3	O	3mC4	-	-374.9	-184.1	-63.8984	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
360	1mC3	O	1m1mC2	-	-376.8	-184.1	-63.8984	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
361	1mC3	O	1m1mC3	-	-403.3	-184.1	-63.8984	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
362	1mC3	O	1m2mC3	-	-394.0	-184.1	-63.8984	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
363	1mC3	O	2m2mC3	-	-380.6	-184.1	-63.8984	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
364	1mC4	O	1mC4	-	-413.8	-184.1	-63.8984	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
365	1mC4	O	1eC3	-	-417.2	-184.1	-63.8984	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
366	1mC4	O	2mC3	-	-378.1	-184.1	-63.8984	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
367	1mC4	O	2mC4	-	-401.2	-184.1	-63.8984	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
368	1mC4	O	3mC4	-	-397.8	-184.1	-63.8984	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
369	1mC4	O	1m1mC2	-	-399.8	-184.1	-63.8984	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
370	1mC4	O	1m1mC3	-	-426.4	-184.1	-63.8984	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
371	1mC4	O	1m2mC3	-	-417.2	-184.1	-63.8984	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
372	1mC4	O	2m2mC3	-	-403.6	-184.1	-63.8984	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
373	1eC3	O	1eC3	-	-420.6	-184.1	-63.8984	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
374	1eC3	O	2mC3	-	-381.4	-184.1	-63.8984	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
375	1eC3	O	2mC4	-	-404.5	-184.1	-63.8984	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
376	1eC3	O	3mC4	-	-401.1	-184.1	-63.8984	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
377	1eC3	O	1m1mC2	-	-402.6	-184.1	-63.8984	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
378	1eC3	O	1m1mC3	-	-429.2	-184.1	-63.8984	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
379	1eC3	O	1m2mC3	-	-420.6	-184.1	-63.8984	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
380	1eC3	O	2m2mC3	-	-406.7	-184.1	-63.8984	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
381	2mC3	O	2mC3	-	-342.8	-184.1	-63.8984	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
382	2mC3	O	2mC4	-	-365.8	-184.1	-63.8984	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
383	2mC3	O	3mC4	-	-362.5	-184.1	-63.8984	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
384	2mC3	O	1m1mC2	-369.0	-366.8	-184.1	-63.8984	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
385	2mC3	O	1m1mC3	-	-393.0	-184.1	-63.8984	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
386	2mC3	O	1m2mC3	-	-381.3	-184.1	-63.8984	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
387	2mC3	O	2m2mC3	-	-368.8	-184.1	-63.8984	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
388	2mC4	O	2mC4	-	-388.8	-184.1	-63.8984	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
389	2mC4	O	3mC4	-	-385.4	-184.1	-63.8984	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
390	2mC4	O	1m1mC2	-	-389.8	-184.1	-63.8984	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
391	2mC4	O	1m1mC3	-	-416.1	-184.1	-63.8984	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
392	2mC4	O	1m2mC3	-	-404.5	-184.1	-63.8984	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
393	2mC4	O	2m2mC3	-	-391.8	-184.1	-63.8984	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
394	3mC4	O	3mC4	-	-382.2	-184.1	-63.8984	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
395	3mC4	O	1m1mC2	-	-387.0	-184.1	-63.8984	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
396	3mC4	O	1m1mC3	-	-413.3	-184.1	-63.8984	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
397	3mC4	O	1m2mC3	-	-401.1	-184.1	-63.8984	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
398	3mC4	O	2m2mC3	-	-388.7	-184.1	-63.8984	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
399	1m1mC2	O	1m1mC2	-362.0	-368.1	-184.1	-63.8984	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
400	1m1mC2	O	1m1mC3	-	-393.9	-184.1	-63.8984	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
401	1m1mC2	O	1m2mC3	-	-402.6	-184.1	-63.8984	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383

402	1m1mC2	O	2m2mC3	-	-387.0	-184.1	-63.8984	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
403	1m1mC3	O	1m1mC3	-	-419.8	-184.1	-63.8984	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
404	1m1mC3	O	1m2mC3	-	-429.2	-184.1	-63.8984	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
405	1m1mC3	O	2m2mC3	-	-413.1	-184.1	-63.8984	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
406	1m2mC3	O	1m2mC3	-	-420.6	-184.1	-63.8984	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
407	1m2mC3	O	2m2mC3	-	-406.7	-184.1	-63.8984	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
408	2m2mC3	O	2m2mC3	-	-393.4	-184.1	-63.8984	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
409	C1	CO	C1	-217.1	-216.1	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
410	C1	CO	C2	-238.5	-236.9	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
411	C1	CO	C3	-258.8	-257.7	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
412	C1	CO	C4	-278.9	-278.5	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
413	C1	CO	C5	-	-299.2	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
414	C1	CO	1mC2	-262.6	-264.2	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
415	C1	CO	1mC3	-	-286.7	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
416	C1	CO	1mC4	-	-308.2	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
417	C1	CO	1eC3	-	-309.9	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
418	C1	CO	2mC3	-	-280.2	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
419	C1	CO	2mC4	-	-301.7	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
420	C1	CO	3mC4	-	-299.9	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
421	C1	CO	1m1mC2	-290.6	-293.2	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
422	C1	CO	1m1mC3	-	-316.4	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
423	C1	CO	1m2mC3	-	-309.9	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
424	C1	CO	2m2mC3	-	-303.4	-217.1	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
425	C2	CO	C2	-257.9	-257.7	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
426	C2	CO	C3	-277.6	-278.5	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
427	C2	CO	C4	-297.1	-299.2	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
428	C2	CO	C5	-	-320.0	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
429	C2	CO	1mC2	-286.0	-284.9	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
430	C2	CO	1mC3	-	-307.5	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
431	C2	CO	1mC4	-	-328.9	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
432	C2	CO	1eC3	-	-330.7	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
433	C2	CO	2mC3	-	-301.0	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
434	C2	CO	2mC4	-	-322.4	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
435	C2	CO	3mC4	-	-320.7	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
436	C2	CO	1m1mC2	-313.6	-314.0	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
437	C2	CO	1m1mC3	-	-337.2	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
438	C2	CO	1m2mC3	-	-330.7	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
439	C2	CO	2m2mC3	-	-324.2	-217.1	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
440	C3	CO	C3	-298.3	-299.2	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
441	C3	CO	C4	-	-320.0	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
442	C3	CO	C5	-	-340.8	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
443	C3	CO	1mC2	-	-305.7	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
444	C3	CO	1mC3	-	-328.3	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
445	C3	CO	1mC4	-	-349.7	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
446	C3	CO	1eC3	-	-351.5	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383

447	C3	CO	2mC3	-	-321.8	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
448	C3	CO	2mC4	-	-343.2	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
449	C3	CO	3mC4	-	-341.5	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
450	C3	CO	1m1mC2	-	-334.8	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
451	C3	CO	1m1mC3	-	-358.0	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
452	C3	CO	1m2mC3	-	-351.5	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
453	C3	CO	2m2mC3	-	-345.0	-217.1	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
454	C4	CO	C4	-344.9	-340.8	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
455	C4	CO	C5	-	-361.6	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
456	C4	CO	1mC2	-	-326.5	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
457	C4	CO	1mC3	-	-349.1	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
458	C4	CO	1mC4	-	-370.5	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
459	C4	CO	1eC3	-	-372.3	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
460	C4	CO	2mC3	-	-342.6	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
461	C4	CO	2mC4	-	-364.0	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
462	C4	CO	3mC4	-	-362.3	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
463	C4	CO	1m1mC2	-	-355.5	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
464	C4	CO	1m1mC3	-	-378.8	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
465	C4	CO	1m2mC3	-	-372.3	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
466	C4	CO	2m2mC3	-	-365.8	-217.1	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
467	C5	CO	C5	-	-382.4	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
468	C5	CO	1mC2	-	-347.3	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
469	C5	CO	1mC3	-	-369.8	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
470	C5	CO	1mC4	-	-391.3	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
471	C5	CO	1eC3	-	-393.1	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
472	C5	CO	2mC3	-	-363.3	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
473	C5	CO	2mC4	-	-384.8	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
474	C5	CO	3mC4	-	-383.1	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
475	C5	CO	1m1mC2	-	-376.3	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
476	C5	CO	1m1mC3	-	-399.5	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
477	C5	CO	1m2mC3	-	-393.0	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
478	C5	CO	2m2mC3	-	-386.5	-217.1	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
479	1mC2	CO	1mC2	-311.3	-311.7	-217.1	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
480	1mC2	CO	1mC3	-	-334.1	-217.1	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
481	1mC2	CO	1mC4	-	-355.5	-217.1	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
482	1mC2	CO	1eC3	-	-357.1	-217.1	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
483	1mC2	CO	2mC3	-	-328.1	-217.1	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
484	1mC2	CO	2mC4	-	-349.6	-217.1	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
485	1mC2	CO	3mC4	-	-348.0	-217.1	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
486	1mC2	CO	1m1mC2	-338.3	-337.5	-217.1	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
487	1mC2	CO	1m1mC3	-	-360.5	-217.1	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
488	1mC2	CO	1m2mC3	-	-357.1	-217.1	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
489	1mC2	CO	2m2mC3	-	-350.4	-217.1	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
490	1mC3	CO	1mC3	-	-356.5	-217.1	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
491	1mC3	CO	1mC4	-	-377.9	-217.1	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170

492	1mC3	CO	1eC3	-	-379.5	-217.1	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
493	1mC3	CO	2mC3	-	-350.6	-217.1	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
494	1mC3	CO	2mC4	-	-372.0	-217.1	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
495	1mC3	CO	3mC4	-	-370.5	-217.1	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
496	1mC3	CO	1m1mC2	-	-359.1	-217.1	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
497	1mC3	CO	1m1mC3	-	-382.1	-217.1	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
498	1mC3	CO	1m2mC3	-	-379.5	-217.1	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
499	1mC3	CO	2m2mC3	-	-372.7	-217.1	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
500	1mC4	CO	1mC4	-	-399.3	-217.1	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
501	1mC4	CO	1eC3	-	-400.9	-217.1	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
502	1mC4	CO	2mC3	-	-372.1	-217.1	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
503	1mC4	CO	2mC4	-	-393.5	-217.1	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
504	1mC4	CO	3mC4	-	-391.9	-217.1	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
505	1mC4	CO	1m1mC2	-	-380.2	-217.1	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
506	1mC4	CO	1m1mC3	-	-403.2	-217.1	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
507	1mC4	CO	1m2mC3	-	-400.9	-217.1	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
508	1mC4	CO	2m2mC3	-	-394.0	-217.1	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
509	1eC3	CO	1eC3	-	-402.4	-217.1	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
510	1eC3	CO	2mC3	-	-373.8	-217.1	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
511	1eC3	CO	2mC4	-	-395.2	-217.1	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
512	1eC3	CO	3mC4	-	-393.7	-217.1	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
513	1eC3	CO	1m1mC2	-	-381.0	-217.1	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
514	1eC3	CO	1m1mC3	-	-404.0	-217.1	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
515	1eC3	CO	1m2mC3	-	-402.4	-217.1	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
516	1eC3	CO	2m2mC3	-	-395.5	-217.1	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
517	2mC3	CO	2mC3	-	-344.3	-217.1	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
518	2mC3	CO	2mC4	-	-365.7	-217.1	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
519	2mC3	CO	3mC4	-	-364.0	-217.1	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
520	2mC3	CO	1m1mC2	-	-356.4	-217.1	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
521	2mC3	CO	1m1mC3	-	-379.5	-217.1	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
522	2mC3	CO	1m2mC3	-	-373.8	-217.1	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
523	2mC3	CO	2m2mC3	-	-367.2	-217.1	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
524	2mC4	CO	2mC4	-	-387.2	-217.1	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
525	2mC4	CO	3mC4	-	-385.5	-217.1	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
526	2mC4	CO	1m1mC2	-	-377.5	-217.1	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
527	2mC4	CO	1m1mC3	-	-400.6	-217.1	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
528	2mC4	CO	1m2mC3	-	-395.2	-217.1	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
529	2mC4	CO	2m2mC3	-	-388.6	-217.1	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
530	3mC4	CO	3mC4	-	-383.8	-217.1	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
531	3mC4	CO	1m1mC2	-	-376.7	-217.1	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
532	3mC4	CO	1m1mC3	-	-399.9	-217.1	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
533	3mC4	CO	1m2mC3	-	-393.7	-217.1	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
534	3mC4	CO	2m2mC3	-	-387.1	-217.1	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
535	1m1mC2	CO	1m1mC2	-	-343.0	-217.1	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
536	1m1mC2	CO	1m1mC3	-	-364.9	-217.1	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638

537	1m1mC2	CO	1m2mC3	-	-381.0	-217.1	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
538	1m1mC2	CO	2m2mC3	-	-372.7	-217.1	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
539	1m1mC3	CO	1m1mC3	-	-386.8	-217.1	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
540	1m1mC3	CO	1m2mC3	-	-404.0	-217.1	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
541	1m1mC3	CO	2m2mC3	-	-395.6	-217.1	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
542	1m2mC3	CO	1m2mC3	-	-402.4	-217.1	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
543	1m2mC3	CO	2m2mC3	-	-395.5	-217.1	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
544	2m2mC3	CO	2m2mC3	-	-388.5	-217.1	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798

^a The experimental enthalpies of formation are taken from Ref. (Haynes, W. M. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 91st ed.; CRC Press: Boca Raton, FL, 2010-2011), as training samples in the text; ^b Calculated by Eq. 19; ^c The Interaction Potential Index IPI(X) (X=SH, NH₂, OH, CHO), taken from Ref. (Wu, Y. X.; Cao, C. Z.; Yuan, H. *Chinese J. Chem. Phys.* **2012**, 25(2), 153); ^d The experimental enthalpies of formation are taken from Ref. (Domalski, E. S.; Hearing, E. D. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **1993**, 22, 805), as training samples in the text.

Table 2 The $\Delta_f H^\circ(\text{g})$ (kJ/mol), $N_{C(R1)}$, $N_{C(R2)}$, PEI(R1), PEI(R2), Δ PEI(R1), Δ PEI(R2), TSEI(R1), TSEI(R2), Δ TSEI(R1), and Δ TSEI(R2) values for some R1-COO-R2

No.	R1	R2	$\Delta_f H^\circ(\text{g})_{\text{exp.}}^{\text{a}}$	$\Delta_f H^\circ(\text{g})_{\text{calc.}}^{\text{b}}$	$N_{C(R1)}$	PEI(R1)	Δ PEI(R1)	TSEI(R1)	Δ TSEI(R1)	$N_{C(R2)}$	PEI(R2)	Δ PEI(R2)	TSEI(R2)	Δ TSEI(R2)
1	C1	C1	-413.3	-412.6	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
2	C1	C2	-443.6	-441.3	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
3	C1	C3	-	-464.6	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
4	C1	C4	-485.3	-486.4	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
5	C1	C5	-	-507.6	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
6	C1	1mC2	-481.6	-478.3	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
7	C1	1mC3	-	-503.7	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
8	C1	1mC4	-	-526.4	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
9	C1	1eC3	-	-530.0	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
10	C1	2mC3	-	-490.0	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
11	C1	2mC4	-	-512.7	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
12	C1	3mC4	-	-509.1	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
13	C1	1m1mC2	-516.5	-517.4	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
14	C1	1m1mC3	-	-543.7	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
15	C1	1m2mC3	-	-530.0	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
16	C1	2m2mC3	-	-516.3	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
17	C2	C1	-432.5 ^c	-432.6	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
18	C2	C2	-463.4	-465.4	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
19	C2	C3	-	-490.0	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
20	C2	C4	-	-512.5	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
21	C2	C5	-	-534.1	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
22	C2	1mC2	-	-506.3	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
23	C2	1mC3	-	-533.1	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
24	C2	1mC4	-	-556.4	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170

25	C2	1eC3	-	-560.7	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
26	C2	2mC3	-	-516.8	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
27	C2	2mC4	-	-540.1	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
28	C2	3mC4	-	-535.8	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
29	C2	1m1mC2	-	-549.3	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
30	C2	1m1mC3	-	-577.0	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
31	C2	1m2mC3	-	-560.7	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
32	C2	2m2mC3	-	-544.4	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
33	C3	C1	-	-452.9	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
34	C3	C2	-	-487.0	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
35	C3	C3	-	-512.1	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
36	C3	C4	-	-534.8	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
37	C3	C5	-	-556.5	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
38	C3	1mC2	-	-529.3	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
39	C3	1mC3	-	-556.5	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
40	C3	1mC4	-	-580.1	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
41	C3	1eC3	-	-584.7	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
42	C3	2mC3	-	-539.4	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
43	C3	2mC4	-	-562.9	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
44	C3	3mC4	-	-558.3	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
45	C3	1m1mC2	-	-573.7	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
46	C3	1m1mC3	-	-601.8	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
47	C3	1m2mC3	-	-584.6	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
48	C3	2m2mC3	-	-567.5	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
49	C4	C1	-471.1	-473.3	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
50	C4	C2	-505.9	-508.0	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
51	C4	C3	-533.6	-533.3	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
52	C4	C4	560.2	-556.1	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
53	C4	C5	-	-577.9	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
54	C4	1mC2	-544.9	-550.9	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
55	C4	1mC3	-573.2	-578.4	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
56	C4	1mC4	-	-602.1	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
57	C4	1eC3	-	-606.8	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
58	C4	2mC3	-568.6	-560.8	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
59	C4	2mC4	-	-584.5	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
60	C4	3mC4	-	-579.8	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
61	C4	1m1mC2	-	-596.0	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
62	C4	1m1mC3	-	-624.4	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
63	C4	1m2mC3	-	-606.8	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383

64	C4	2m2mC3	-	-589.2	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
65	C5	C1	-492.2	-493.6	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
66	C5	C2	-	-528.8	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
67	C5	C3	-	-554.2	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
68	C5	C4	-	-577.1	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
69	C5	C5	-	-598.9	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
70	C5	1mC2	-	-572.1	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
71	C5	1mC3	-	-599.7	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
72	C5	1mC4	-	-623.4	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
73	C5	1eC3	-	-628.2	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
74	C5	2mC3	-	-581.8	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
75	C5	2mC4	-	-605.6	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
76	C5	3mC4	-	-600.8	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
77	C5	1m1mC2	-	-617.5	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
78	C5	1m1mC3	-	-646.0	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
79	C5	1m2mC3	-	-628.2	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
80	C5	2m2mC3	-	-610.3	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
81	1mC2	C1	-	-460.9	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
82	1mC2	C2	-	-497.6	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
83	1mC2	C3	-	-523.5	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
84	1mC2	C4	-	-546.7	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
85	1mC2	C5	-	-568.7	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
86	1mC2	1mC2	-	-506.1	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
87	1mC2	1mC3	-	-525.5	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
88	1mC2	1mC4	-	-546.3	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
89	1mC2	1eC3	-	-542.5	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
90	1mC2	2mC3	-542.9	-542.9	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
91	1mC2	2mC4	-	-563.7	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
92	1mC2	3mC4	-	-567.5	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
93	1mC2	1m1mC2	-	-327.6	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
94	1mC2	1m1mC3	-	-344.6	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
95	1mC2	1m2mC3	-	-542.5	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
96	1mC2	2m2mC3	-	-506.5	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
97	1mC3	C1	-	-483.3	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
98	1mC3	C2	-	-521.4	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
99	1mC3	C3	-	-547.8	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
100	1mC3	C4	-	-571.2	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
101	1mC3	C5	-	-593.3	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
102	1mC3	1mC2	-	-522.5	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880

103	1mC3	1mC3	-	-540.2	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
104	1mC3	1mC4	-	-560.5	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
105	1mC3	1eC3	-	-554.8	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
106	1mC3	2mC3	-	-565.5	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
107	1mC3	2mC4	-	-585.8	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
108	1mC3	3mC4	-	-591.5	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
109	1mC3	1m1mC2	-	-290.7	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
110	1mC3	1m1mC3	-	-305.3	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
111	1mC3	1m2mC3	-	-554.8	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
112	1mC3	2m2mC3	-	-513.8	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
113	1mC4	C1	-	-504.5	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
114	1mC4	C2	-	-543.2	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
115	1mC4	C3	-	-569.9	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
116	1mC4	C4	-	-593.4	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
117	1mC4	C5	-	-615.6	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
118	1mC4	1mC2	-	-541.8	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
119	1mC4	1mC3	-	-559.0	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
120	1mC4	1mC4	-	-579.1	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
121	1mC4	1eC3	-	-572.8	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
122	1mC4	2mC3	-	-587.1	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
123	1mC4	2mC4	-	-607.2	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
124	1mC4	3mC4	-	-613.5	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
125	1mC4	1m1mC2	-	-291.0	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
126	1mC4	1m1mC3	-	-304.8	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
127	1mC4	1m2mC3	-	-572.8	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
128	1mC4	2m2mC3	-	-529.8	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
129	1eC3	C1	-	-506.6	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
130	1eC3	C2	-	-546.1	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
131	1eC3	C3	-	-573.0	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
132	1eC3	C4	-	-596.5	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
133	1eC3	C5	-	-618.8	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
134	1eC3	1mC2	-	-536.6	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
135	1eC3	1mC3	-	-551.8	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
136	1eC3	1mC4	-	-571.3	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
137	1eC3	1eC3	-	-563.0	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
138	1eC3	2mC3	-	-588.2	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
139	1eC3	2mC4	-	-607.7	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
140	1eC3	3mC4	-	-616.0	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
141	1eC3	1m1mC2	-	-231.8	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348

142	1eC3	1m1mC3	-	-243.0	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
143	1eC3	1m2mC3	-	-563.0	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
144	1eC3	2m2mC3	-	-515.4	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
145	2mC3	C1	-	-475.4	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
146	2mC3	C2	-	-510.8	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
147	2mC3	C3	-	-536.4	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
148	2mC3	C4	-	-559.3	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
149	2mC3	C5	-	-581.2	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
150	2mC3	1mC2	-	-545.6	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
151	2mC3	1mC3	-	-571.2	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
152	2mC3	1mC4	-	-594.2	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
153	2mC3	1eC3	-	-596.9	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
154	2mC3	2mC3	-	-562.0	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
155	2mC3	2mC4	-	-585.0	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
156	2mC3	3mC4	-	-582.3	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
157	2mC3	1m1mC2	-	-536.8	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
158	2mC3	1m1mC3	-	-562.5	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
159	2mC3	1m2mC3	-	-596.9	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
160	2mC3	2m2mC3	-	-574.7	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
161	2mC4	C1	-	-496.6	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
162	2mC4	C2	-	-532.7	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
163	2mC4	C3	-	-558.5	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
164	2mC4	C4	-	-581.5	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
165	2mC4	C5	-	-603.4	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
166	2mC4	1mC2	-	-565.0	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
167	2mC4	1mC3	-	-590.0	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
168	2mC4	1mC4	-	-612.9	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
169	2mC4	1eC3	-	-614.9	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
170	2mC4	2mC3	-	-583.5	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
171	2mC4	2mC4	-	-606.3	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
172	2mC4	3mC4	-	-604.3	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
173	2mC4	1m1mC2	-	-537.1	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
174	2mC4	1m1mC3	-	-562.0	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
175	2mC4	1m2mC3	-	-614.9	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
176	2mC4	2m2mC3	-	-590.8	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
177	3mC4	C1	-	-494.5	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
178	3mC4	C2	-	-529.9	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
179	3mC4	C3	-	-555.4	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
180	3mC4	C4	-	-578.3	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000

181	3mC4	C5	-	-600.2	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
182	3mC4	1mC2	-	-570.3	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
183	3mC4	1mC3	-	-597.3	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
184	3mC4	1mC4	-	-620.8	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
185	3mC4	1eC3	-	-624.8	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
186	3mC4	2mC3	-	-582.4	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
187	3mC4	2mC4	-	-605.9	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
188	3mC4	3mC4	-	-601.8	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
189	3mC4	1m1mC2	-	-596.6	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
190	3mC4	1m1mC3	-	-624.1	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
191	3mC4	1m2mC3	-	-624.8	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
192	3mC4	2m2mC3	-	-605.3	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
193	1m1mC2	C1	-491.2	-491.3	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
194	1m1mC2	C2	-536.0	-531.9	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
195	1m1mC2	C3	-	-559.3	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
196	1m1mC2	C4	-	-583.0	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
197	1m1mC2	C5	-	-605.4	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
198	1m1mC2	1mC2	-	-318.9	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
199	1m1mC2	1mC3	-	-285.0	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
200	1m1mC2	1mC4	-	-286.7	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
201	1m1mC2	1eC3	-	-229.1	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
202	1m1mC2	2mC3	-	-525.4	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
203	1m1mC2	2mC4	-	-527.1	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
204	1m1mC2	3mC4	-	-585.1	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
205	1m1mC2	1m1mC2	-	1257.2	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
206	1m1mC2	1m1mC3	-	1313.1	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
207	1m1mC2	1m2mC3	-	-229.1	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
208	1m1mC2	2m2mC3	-	-84.1	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
209	1m1mC3	C1	-	-514.6	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
210	1m1mC3	C2	-	-556.6	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
211	1m1mC3	C3	-	-584.4	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
212	1m1mC3	C4	-	-608.4	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
213	1m1mC3	C5	-	-630.9	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
214	1m1mC3	1mC2	-	-332.9	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
215	1m1mC3	1mC3	-	-296.6	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
216	1m1mC3	1mC4	-	-297.5	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
217	1m1mC3	1eC3	-	-237.3	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
218	1m1mC3	2mC3	-	-548.1	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
219	1m1mC3	2mC4	-	-549.0	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290

220	1m1mC3	3mC4	-	-609.6	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
221	1m1mC3	1m1mC2	-	1316.1	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
222	1m1mC3	1m1mC3	-	1375.5	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
223	1m1mC3	1m2mC3	-	-237.2	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
224	1m1mC3	2m2mC3	-	-85.7	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
225	1m2mC3	C1	-	-506.6	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
226	1m2mC3	C2	-	-546.0	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
227	1m2mC3	C3	-	-573.0	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
228	1m2mC3	C4	-	-596.5	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
229	1m2mC3	C5	-	-618.8	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
230	1m2mC3	1mC2	-	-536.5	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
231	1m2mC3	1mC3	-	-551.8	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
232	1m2mC3	1mC4	-	-571.3	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
233	1m2mC3	1eC3	-	-563.0	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
234	1m2mC3	2mC3	-	-588.2	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
235	1m2mC3	2mC4	-	-607.7	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
236	1m2mC3	3mC4	-	-616.0	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
237	1m2mC3	1m1mC2	-	-231.8	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
238	1m2mC3	1m1mC3	-	-243.0	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
239	1m2mC3	1m2mC3	-	-563.0	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
240	1m2mC3	2m2mC3	-	-515.4	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798
241	2m2mC3	C1	-	-498.7	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	1	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000
242	2m2mC3	C2	-	-535.5	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	2	1.1405	0.0000	1.1250	0.0000
243	2m2mC3	C3	-	-561.5	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	3	1.1887	0.0000	1.1620	0.0000
244	2m2mC3	C4	-	-584.7	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	4	1.2122	0.0000	1.1777	0.0000
245	2m2mC3	C5	-	-606.7	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.2260	0.0000	1.1857	0.0000
246	2m2mC3	1mC2	-	-506.3	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	3	1.2810	0.0923	1.2500	0.0880
247	2m2mC3	1mC3	-	-516.5	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	4	1.3292	0.1170	1.2870	0.1093
248	2m2mC3	1mC4	-	-534.0	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.3527	0.1267	1.3027	0.1170
249	2m2mC3	1eC3	-	-521.1	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.3774	0.1514	1.3240	0.1383
250	2m2mC3	2mC3	-	-571.7	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	4	1.2368	0.0246	1.1990	0.0213
251	2m2mC3	2mC4	-	-589.2	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.2603	0.0343	1.2147	0.0290
252	2m2mC3	3mC4	-	-602.2	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.2357	0.0097	1.1933	0.0076
253	2m2mC3	1m1mC2	-	-92.6	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	4	1.4215	0.2093	1.8125	0.6348
254	2m2mC3	1m1mC3	-	-97.2	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.4697	0.2437	1.8495	0.6638
255	2m2mC3	1m2mC3	-	-521.1	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.3773	0.1513	1.3240	0.1383
256	2m2mC3	2m2mC3	-	-467.2	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798	5	1.2849	0.0589	1.3655	0.1798

^aThe experimental enthalpies of formation are taken from Ref. (Haynes, W. M. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 91st ed.; CRC Press: Boca Raton, FL, 2010-2011), as training samples in the text; ^b Calculated by Eq. 20; ^cThe experimental enthalpies of formation are taken from Ref. (Domalski, E. S.; Hearing, E. D. *J. Phys. Chem. Ref.*

Data 1993, 22, 805), as training samples in the text.