

	$\alpha_{\text{Br}}$	$\alpha_{\text{C}}$	$\alpha_{\text{Cl}}$	$\alpha_{\text{F}}$	$\alpha_{\text{H}}$	$\alpha_{\text{N}}$	$\alpha_{\text{O}}$	$\alpha_{\text{S}}$	$\beta_{\text{Br}}$	$\beta_{\text{C}}$	$\beta_{\text{Cl}}$	$\beta_{\text{F}}$	$\beta_{\text{H}}$	$\beta_{\text{N}}$	$\beta_{\text{O}}$	$\beta_{\text{S}}$	$\gamma_{\text{Br}}$	$\gamma_{\text{C}}$	$\gamma_{\text{Cl}}$	$\gamma_{\text{F}}$	$\gamma_{\text{H}}$	$\gamma_{\text{N}}$	$\gamma_{\text{O}}$	$\gamma_{\text{S}}$	
	19	3	2	3	1	4	4	2	-39908	-33	-821	-220	-5	-0	-56	-87	-5	0	-0	0	0	0	0	0	0
	3	6	3	3	2	7	5	4	-2647	-32	-363	-47	-1	-0	-44	-82	-0	-0	-0	0	0	0	0	0	0
	2	3	6	2	1	3	3	2	-2771	-21	-3694	-90	-2	-0	-45	77	-0	0	-1	0	0	0	0	0	0
	3	3	2	4	1	4	3	2	-3260	-10	-464	-198	-1	-0	-22	16	-0	0	-0	-0	0	0	0	0	0
	1	2	1	1	2	3	2	2	-873	-4	-99	-16	-2	-0	-9	-9	-0	0	-0	-0	-0	-0	-0	0	0
	4	7	3	4	3	11	7	6	-1331	6	49	-18	1	0	4	47	-0	0	-0	-0	0	-0	0	0	0
	4	5	3	3	2	7	6	4	-3094	-33	-506	-60	-3	-0	-106	-47	-0	0	-0	0	0	0	-0	0	0
	2	4	2	2	2	6	4	5	-886	-7	363	21	0	0	6	-168	-0	0	0	0	0	0	0	0	-0
-39908	-2647	-2771	-3260	-873	-1331	-3094	-886	94817254	79472	1402300	434157	12406	14	126166	253665	10289	-12	388	-631	-83	-20	-45	-147	-864	-5
-33	-32	-21	-10	-4	6	-33	-7	79472	1811	18984	1655	97	0	2324	6029	1	-0	-0	-3	0	-0	-2	-1	5	3
-821	-363	-3694	-464	-99	49	-506	363	1402300	18984	3868170	58943	1990	5	33778	-60886	162	-4	680	-19	9	-24	-14	-62	38	2
-220	-47	-90	-198	-16	-18	-60	21	434157	1655	58943	23242	167	0	3232	1704	67	-0	19	-18	0	-1	-1	-10	-12	4
-5	-1	-2	-1	-2	1	-3	0	12406	97	1990	167	25	0	179	298	1	-0	0	-0	0	0	-0	-0	-0	1
-0	-0	-0	-0	-0	0	-0	0	14	0	5	0	0	0	0	1	1	0	-0	0	-0	0	-0	0	-0	0
-56	-44	-45	-22	-9	4	-106	6	126166	2324	33778	3232	179	1	8485	943	6	-0	4	-3	1	-4	0	-2	5	3
-87	-82	77	16	-9	47	-47	-168	253665	6029	-60886	1704	298	1	943	120743	5	-1	-49	-16	4	1	-10	-13	32	2
-5	-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	10289	1	162	67	1	0	6	5	2	0	0	-0	-0	-0	0	-0	-0	-0
0	-0	0	0	0	0	0	0	-12	-0	-4	-0	-0	-0	-0	-0	-1	0	0	-0	0	-0	0	0	0	0
-0	-0	-1	-0	-0	-0	-0	0	388	-0	680	19	0	0	4	-49	0	-0	0	-0	0	-0	0	-0	0	-0
0	0	0	-0	-0	-0	0	0	-631	-3	-19	-18	-0	-0	-3	-16	-0	0	-0	0	0	0	-0	0	-0	-0
0	0	0	0	-0	0	0	0	-83	0	9	0	0	0	0	1	4	-0	-0	0	0	0	-0	-0	-0	0
0	0	0	0	-0	-0	0	0	-20	-0	-24	-1	0	-0	-4	1	-0	0	-0	-0	-0	-0	0	-0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	-0	0	-45	-2	-14	-1	-0	0	0	-10	0	0	0	0	-0	-0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	-0	-147	-1	-62	-10	-0	-0	-2	-13	-0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0
3	5	2	3	2	7	5	4	-864	5	38	-12	1	0	5	32	-0	0	-0	-0	0	0	0	0	0	0

(kcal/mol)^2