

	α_{Br}	α_{C}	α_{Cl}	α_{F}	α_{H}	α_{N}	α_{O}	α_{S}	β_{Br}	β_{C}	β_{Cl}	β_{F}	β_{H}	β_{N}	β_{O}	β_{S}	γ_{Br}	γ_{C}	γ_{Cl}	γ_{F}	γ_{H}	γ_{N}	γ_{O}	γ_{S}	
	2	0	0	0	0	1	0	0	-3740	-3	-240	-21	-1	-4	-8	-9	-0	0	-0	0	-0	0	0	0	0
	0	1	0	0	0	1	1	1	-173	-4	-17	-2	0	-2	-5	-9	0	-0	-0	-0	0	0	0	0	0
	0	0	1	0	0	0	0	0	-594	-1	-236	-5	-0	-2	-3	5	-0	0	-0	0	-0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	-434	-0	-29	-10	-0	-0	-1	0	-0	0	-0	-0	-0	-0	0	0	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	-199	0	-15	-2	-1	0	-0	-1	-0	0	-0	0	-0	0	0	0	0
	1	1	0	0	0	1	1	1	-238	-2	-22	-3	0	-4	-6	-7	-0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0
	0	1	0	0	0	1	1	1	-341	-4	-38	-4	-0	-6	-16	-12	-0	0	-0	0	0	0	0	-0	0
	0	1	0	0	0	1	1	1	23	-0	22	1	0	0	1	-14	0	0	0	0	0	0	0	0	-0
-3740	-173	-594	-434	-199	-238	-341	23	9628029	8407	526565	45341	2522	10905	18676	26460	1114	-2	46	-103	21	-12	-8	-31	-31	-31
-3	-4	-1	-0	0	-2	-4	-0	8407	182	1186	85	6	157	304	640	-0	0	0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0
-240	-17	-236	-29	-15	-22	-38	22	526565	1186	172830	3718	226	1657	2724	-699	71	-0	35	-7	2	-2	-2	-5	-5	-5
-21	-2	-5	-10	-2	-3	-4	1	45341	85	3718	804	19	113	235	291	7	-0	1	-1	0	-0	-0	-0	-1	-1
-1	0	-0	-0	-1	0	-0	0	2522	6	226	19	10	10	15	46	0	-0	0	-0	0	-0	-0	-0	-0	-0
-4	-2	-2	-0	0	-4	-6	0	10905	157	1657	113	10	261	429	703	0	-0	0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0
-8	-5	-3	-1	-0	-6	-16	1	18676	304	2724	235	15	429	1374	692	1	-0	0	-1	-0	-0	-0	0	-0	-0
-9	-9	5	0	-1	-7	-12	-14	26460	640	-699	291	46	703	692	11489	-1	-0	-3	-1	0	-1	-1	-1	-1	-1
-0	0	-0	-0	-0	-0	-0	0	1114	-0	71	7	0	0	1	-1	0	-0	0	-0	0	-0	0	-0	0	-0
0	-0	0	0	0	0	0	0	-2	0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	0	-0	-0	-0	-0	0	0	0
-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	0	46	0	35	1	0	0	0	-3	0	-0	0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0
0	-0	0	-0	0	-0	0	0	-103	-0	-7	-1	-0	-0	-0	-1	-1	-0	-0	-0	0	-0	0	0	-0	-0
-0	0	-0	-0	-0	0	0	0	21	-0	2	0	0	0	-0	-0	0	0	-0	-0	-0	0	-0	-0	-0	-0
0	0	0	0	0	0	0	0	-12	-0	-2	-0	-0	-0	-0	-0	-1	-0	0	-0	0	-0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	-0	0	-8	-0	-2	-0	-0	-0	0	-1	0	0	-0	0	-0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	-0	-31	-0	-5	-1	-0	-0	-0	-1	-0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0
0	1	0	0	0	0	1	1	1	-31	1	4	-0	0	1	1	4	0	0	-0	-0	0	0	0	0	0

(kcal/mol)^2