

	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}	K	
	12	3	2	3	1	4	4	3	-20812	-0	-735	-111	-2	-0	-73	-122	-4	0	-0	-0	0	0	0	0	0	3
	3	6	3	3	2	8	5	5	-383	-0	22	-18	1	0	2	-1	0	-0	0	-0	0	0	0	0	0	5
	2	3	4	2	1	4	3	2	-1122	-0	-1213	-87	-1	-0	-41	-30	-0	0	-1	-0	0	0	0	0	0	3
	3	3	2	4	1	4	4	2	-2063	-0	-500	-271	-2	-0	-97	-117	-0	0	-0	-0	0	0	0	0	0	3
	1	2	1	1	2	4	3	2	-276	0	-23	-15	-1	0	-5	-8	-0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0	3
	4	8	4	4	4	12	8	8	-527	0	55	-10	1	0	7	14	0	0	-0	-0	0	-0	0	0	0	8
	4	5	3	4	3	8	8	5	-2598	-0	-457	-192	-2	-0	-169	-250	-0	0	-0	-0	0	0	-0	0	0	5
	3	5	2	2	2	8	5	6	-691	-0	88	9	0	-0	-19	-70	-0	0	0	0	0	0	0	0	-0	5
-20812	-383	-1122	-2063	-276	-527	-2598	-691	45876156	13	1314625	132612	4752	14	134351	242149	7912	3	6	95	-22	-10	-12	-57	-329	-3	
-0	-0	-0	-0	0	0	-0	-0	13	0	3	1	0	0	0	1	2	-0	0	0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	0
-735	22	-1213	-500	-23	55	-457	88	1314625	3	845677	55239	665	3	30309	30469	190	-2	354	59	4	-9	-11	-40	22	-7	
-111	-18	-87	-271	-15	-10	-192	9	132612	1	55239	44898	212	1	12440	16809	12	0	15	16	-1	-1	-4	-15	-7	-3	
-2	1	-1	-2	-1	1	-2	0	4752	0	665	212	8	0	166	268	1	-0	0	0	0	0	-0	0	-0	0	0
-0	0	-0	-0	0	0	-0	-0	14	0	3	1	0	0	0	1	2	-0	-0	0	-0	-0	-0	0	-0	0	0
-73	2	-41	-97	-5	7	-169	-19	134351	1	30309	12440	166	1	12517	16054	-2	-0	1	-2	-1	-1	1	-4	6	-3	
-122	-1	-30	-117	-8	14	-250	-70	242149	2	30469	16809	268	2	16054	55247	-3	1	-21	-24	-2	-1	-6	-11	11	-3	
-4	0	-0	-0	-0	0	-0	-0	7912	-0	190	12	1	-0	-2	-3	2	-0	-0	0	0	0	-0	0	0	-0	0
0	-0	0	0	0	0	0	0	3	0	-2	0	-0	-0	-0	1	-0	0	-0	-0	-0	-0	0	-0	0	0	0
-0	0	-1	-0	-0	-0	-0	0	6	0	354	15	0	0	1	-21	-0	-0	0	0	0	0	-0	-0	-0	-0	0
-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	0	95	-0	59	16	0	-0	-2	-24	0	-0	0	0	0	0	-0	0	0	-0	0
0	0	0	0	-0	0	0	0	-22	-0	4	-1	0	-0	-1	-2	0	-0	0	0	0	0	-0	-0	-0	-0	0
0	0	0	0	0	-0	0	0	-10	-0	-9	-1	-0	-0	-1	-1	-0	0	-0	-0	-0	-0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	-0	0	-12	-0	-11	-4	0	0	1	-6	0	-0	-0	0	-0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	-0	-57	-0	-40	-15	-0	-0	-4	-11	0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0	0
3	5	3	3	3	3	8	5	5	-329	0	22	-7	0	0	6	11	-0	0	-0	-0	0	0	0	0	0	5

(kcal/mol)²