

	$\alpha_{\text{Br}}$	$\alpha_{\text{C}}$	$\alpha_{\text{Cl}}$	$\alpha_{\text{F}}$	$\alpha_{\text{H}}$	$\alpha_{\text{N}}$	$\alpha_{\text{O}}$	$\alpha_{\text{S}}$	$\beta_{\text{Br}}$	$\beta_{\text{C}}$	$\beta_{\text{Cl}}$	$\beta_{\text{F}}$	$\beta_{\text{H}}$	$\beta_{\text{N}}$	$\beta_{\text{O}}$	$\beta_{\text{S}}$	$\gamma_{\text{Br}}$	$\gamma_{\text{C}}$	$\gamma_{\text{Cl}}$	$\gamma_{\text{F}}$	$\gamma_{\text{H}}$	$\gamma_{\text{N}}$	$\gamma_{\text{O}}$	$\gamma_{\text{S}}$	
	2	0	0	0	0	1	1	0	-3555	-2	-251	-31	-0	-3	-14	-9	-0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0
	0	1	0	0	0	1	1	1	8	-1	-5	-6	0	-1	-3	-7	0	-0	0	-0	0	0	0	0	0
	0	0	1	0	0	1	0	0	-446	-1	-408	-15	-0	-2	-7	8	-0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0
	0	0	0	1	0	1	1	0	-385	-2	-97	-31	-0	-2	-9	-2	-0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	1	0	0	-153	0	-10	-1	-0	1	1	4	-0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0
	1	1	1	1	1	2	1	1	-6	-1	-5	-5	0	-1	-4	-3	0	0	-0	-0	-0	0	-0	0	0
	1	1	0	1	0	1	1	1	-369	-3	-72	-17	-0	-4	-17	-18	0	0	-0	-0	-0	0	0	-0	0
	0	1	0	0	0	1	1	1	79	-1	57	5	0	-0	0	-26	0	0	0	0	0	0	0	0	-0
-3555	8	-446	-385	-153	-6	-369	79	10548066	5670	522517	58740	1227	7055	32131	29190	1203	-3	69	8	35	-6	-5	-24		
-2	-1	-1	-2	0	-1	-3	-1	5670	58	1224	276	2	52	197	537	-0	0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0
-251	-5	-408	-97	-10	-5	-72	57	522517	1224	425909	13007	157	1651	5948	-5557	69	-1	103	13	3	-2	-1	-11		
-31	-6	-15	-31	-1	-5	-17	5	58740	276	13007	5352	19	277	1227	852	7	-0	3	1	0	-0	-0	-0	-2	
-0	0	-0	-0	-0	0	-0	0	1227	2	157	19	1	3	12	12	0	-0	0	0	0	0	-0	0	-0	-0
-3	-1	-2	-2	1	-1	-4	-0	7055	52	1651	277	3	80	273	463	0	-0	0	-0	-0	-0	-0	0	-0	-0
-14	-3	-7	-9	1	-4	-17	0	32131	197	5948	1227	12	273	1396	911	1	-0	0	0	-0	-0	-0	0	-1	
-9	-7	8	-2	4	-3	-18	-26	29190	537	-5557	852	12	463	911	19532	-7	-0	-9	-7	-0	-0	-2	-2		
-0	0	-0	-0	-0	0	0	0	1203	-0	69	7	0	0	1	-7	0	-0	0	0	0	0	-0	0	-0	-0
0	-0	0	0	0	0	0	0	-3	0	-1	-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	0	-0	-0	-0	-0	0	0	0
-0	0	-0	-0	-0	-0	-0	0	69	-0	103	3	0	0	0	-9	0	-0	0	0	0	0	-0	0	-0	-0
-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	0	8	-0	13	1	0	-0	0	-7	0	-0	0	0	0	0	-0	0	-0	-0
-0	0	-0	0	-0	0	0	0	35	-0	3	0	0	0	-0	-0	-0	0	-0	0	0	0	-0	-0	-0	0
0	0	0	0	0	0	-0	0	0	-6	-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	-5	-0	-1	-0	0	0	0	-2	0	0	0	0	-0	-0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	-0	-24	-0	-11	-2	-0	-0	-1	-2	-0	0	-0	-0	-0	-0	0	0	0
0	1	0	0	0	0	1	1	1	78	0	15	0	0	1	1	5	0	0	-0	-0	0	0	0	0	0

(kcal/mol)^2