

	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}	
	22	4	3	3	2	6	5	4	-36497	-14	-645	-30	-4	-0	-52	-107	-7	0	-0	-0	0	0	0	0	0
	4	9	4	5	3	12	8	8	-1200	-18	-208	-128	0	-0	-45	-115	0	-0	0	-0	0	0	0	0	0
	3	4	9	4	2	6	5	3	-1650	-22	-4617	-215	-3	-0	-89	1	0	0	-2	-0	-0	0	0	0	0
	3	5	4	7	2	6	6	3	-2238	-41	-1272	-624	-4	-0	-147	-123	-0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0
	2	3	2	2	3	5	4	3	-374	-1	-117	-38	-3	-0	-12	-13	0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0
	6	12	6	6	5	18	11	11	-787	5	200	-9	2	0	14	38	-0	0	-0	-0	0	-0	0	0	0
	5	8	5	6	4	11	11	7	-2299	-40	-882	-284	-4	-0	-200	-255	0	0	-0	-0	0	0	-0	0	0
	4	8	3	3	3	11	7	8	-967	-9	406	40	1	-0	-7	-198	-0	0	0	0	0	0	0	0	-0
-36497	-1200	-1650	-2238	-374	-787	-2299	-967	71618533	29400	1138345	-36307	8081	11	108082	237785	11766	-3	69	291	-85	-15	-19	-24	-483	
-14	-18	-22	-41	-1	5	-40	-9	29400	950	16881	5684	68	0	2820	6526	-4	0	-0	-2	-0	-0	-1	-1	4	
-645	-208	-4617	-1272	-117	200	-882	406	1138345	16881	4194756	129399	2480	8	61559	-3454	35	-10	1121	179	31	-41	-20	-97	97	
-30	-128	-215	-624	-38	-9	-284	40	-36307	5684	129399	105317	519	2	19007	20093	-16	-1	31	18	3	-4	-8	-28	-7	
-4	0	-3	-4	-3	2	-4	1	8081	68	2480	519	26	0	288	453	1	-0	1	0	1	-0	-0	-0	1	
-0	-0	-0	-0	-0	0	-0	-0	11	0	8	2	0	0	1	2	-0	-0	0	-0	0	-0	0	-0	0	0
-52	-45	-89	-147	-12	14	-200	-7	108082	2820	61559	19007	288	1	15289	14695	-6	-1	5	2	1	-4	1	-6	12	
-107	-115	1	-123	-13	38	-255	-198	237785	6526	-3454	20093	453	2	14695	142431	-12	1	-66	-61	1	-4	-16	-23	29	
-7	0	0	-0	0	-0	0	-0	11766	-4	35	-16	1	-0	-6	-12	3	0	-0	0	-0	0	0	0	0	-0
0	-0	0	0	0	0	0	0	-3	0	-10	-1	-0	-0	-1	1	0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0	0
-0	0	-2	-0	-0	-0	-0	0	69	-0	1121	31	1	0	5	-66	-0	-0	1	0	0	-0	0	-0	-0	-0
-0	-0	-0	-0	-0	-0	-0	0	291	-2	179	18	0	-0	2	-61	0	-0	0	0	0	-0	0	-0	-0	-0
0	0	-0	-0	-0	0	0	0	-85	-0	31	3	1	0	1	1	-0	-0	0	0	0	-0	-0	-0	-0	0
0	0	0	0	0	-0	0	0	-15	-0	-41	-4	-0	-0	-4	-4	0	0	-0	-0	-0	-0	0	-0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	-0	0	-19	-1	-20	-8	-0	0	1	-16	0	0	0	0	-0	-0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	-0	-24	-1	-97	-28	-0	-0	-6	-23	0	0	-0	-0	-0	0	0	0	0
4	8	4	4	4	4	12	8	7	-483	4	97	-7	1	0	12	29	-0	0	-0	-0	0	0	0	0	0

(kcal/mol)^2