

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

**“PARAMETRIZAÇÃO DE LIGANTES EM Co(SALEN)
APLICADOS NA DESPOLIMERIZAÇÃO DE LIGNINAS”**

Mateus Oliveira Costa*

Dissertação apresentada como
parte dos requisitos para
obtenção do título de MESTRE
EM QUÍMICA, área de
concentração: QUÍMICA
ORGÂNICA.

Orientador: Marco Antonio Barbosa Ferreira

* bolsista CAPES

**São Carlos - SP
2022**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Química

Folha de Aprovação

Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Mateus Oliveira Costa, realizada em 26/05/2022.

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Marco Antonio Barbosa Ferreira (UFSCar)

Prof. Dr. Leandro Helgueira de Andrade (USP)

Prof. Dr. Atualpa Albert Carmo Braga (USP)

O Relatório de Defesa assinado pelos membros da Comissão Julgadora encontra-se arquivado junto ao Programa de Pós-Graduação em Química.

"Nothing in life is to be feared, it is only to be understood. Now is the time to understand more, so that we may fear less"

Marie Curie

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente aos meus pais, por todo o apoio e confiança que depositaram em mim, sempre acreditando que eu sou capaz de correr atrás dos meus sonhos, sendo os suportes que preciso.

Ao Prof. Dr. Marco Antonio Barbosa Ferreira, por sua excelente orientação, paciência e amizade. Nove anos me guiando no âmbito acadêmico e pessoal me moldou como pesquisador e como pessoa.

À minha consorte Nathaelly Boni, por todo o carinho e companheirismo, especialmente nesse período tão difícil de pandemia. Quero também agradecer a ajuda (direta e indireta) que me deu em diversos momentos do mestrado.

Aos colegas de laboratório, do LQBO e do SintCatMol, pelas mais diversas ajudas, sugestões, conversas e comemorações.

Às minhas amigas Beatriz, Franciana, Renata e Yasmin por serem amigas tão fiéis e sempre ouvirem desabafar e me animarem inclusive em momentos que eu me encontrava sem esperança.

Ao CNPq, CAPES, FAPESP e GSK pelo apoio financeiro.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

LISTA DE ABREVIATURAS

2,6-DMQB - 2,6-dimetoxi-benzoquinona

DABCO - 1,4-diazobicyclo[2,2,2]octano

DBU - 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-eno

DIPA - di-isopropil-amina

DIPEA - di-isopropil-etil-amina

DMSO - dimetilsulfoxido

ESI - ionização por eletrospray

GC - MS - cromatografia gasosa acoplada com espectro de massas

HPLC - cromatografia líquida de alta eficiência

HRMS - espectrometria de massas de alta resolução

HOMO - orbital molecular ocupado de maior energia

IV - infravermelho

LUMO - orbital molecular vazio de menor energia

MeOH - metanol

MP - material de partida

pCHO - paraformaldeído

Pd - padrão interno

PR - produto da reação

py - piridina

RMN - ressonância magnética nuclear

TA - temperatura ambiente

TEA - trietilamina

THF - tetraidrofurano

LISTA DE TABELAS

| | |
|--|----|
| Tabela 1.1 : Alguns tipos de catálise para a despolimerização da lignina | 8 |
| Tabela 1.2: Resumo com as melhores performances da oxidação de modelos de lignina usando catalisadores de Co(salen)..... | 27 |
| Tabela 3.1 Parâmetros analisados..... | 40 |
| Tabela 3.2: Reações preliminares..... | 54 |
| Tabela 3.3: Exploração de condições reacionais..... | 55 |
| Tabela 5.1: Detalhamento dos parâmetros utilizados..... | 89 |
| Tabela 5.2: Dados para os catalisadores s01-s13..... | 91 |
| Tabela 5.3: Dados para os catalisadores s14-s26 (catalisador completo). | 91 |
| Tabela 5.4: Dados para os catalisadores s14-s26 (catalisador simplificado). .. | 93 |

LISTA DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| Figura 1.1: Dados sobre fontes fósseis e energias renováveis. | 1 |
| Figura 1.2: Biorrefinaria integrada. | 2 |
| Figura 1.3: Monômeros da lignina e sua estrutura genérica. *A cada 100 unidades propilfenol (monômeros de lignina). | 4 |
| Figura 1.4: Pré-tratamentos que podem ser utilizados na biomassa para separar a lignina da celulose e hemi-celulose. | 6 |
| Figura 1.5: Processos de despolimerização utilizados na lignina (na abcissa a temperatura tipicamente empregada em cada tipo de processo). | 7 |
| Figura 3.1: Regiões e átomos utilizados para a obtenção dos descritores..... | 41 |
| Figura 3.2: Correlação entre Rendimento e Largura do substituinte da posição orto | 42 |
| Figura 3.3 Correlação entre parâmetros estérico com eletrônico do G1 | 43 |
| Figura 3.4: Correlação univariada entre parâmetro estérico com rendimento nos catalisadores do G2 | 44 |
| Figura 3.5: (A) Conversão do modelo S. (B) Conversão em 5 minutos com e sem piridina. (C) Rendimento e conversão em 30 minutos sem piridina. (D) Rendimento e conversão em 30 minutos com piridina. | 56 |
| Figura 3.6: Correlações com a conversão em 5 minutos para os dois grupos de resultados | 59 |
| Figura 3.7: Correlações entre rendimentos de cada grupo. | 61 |
| Figura 3.8: Intercorrelações entre os descritores do modelo encontrado com descritores quimicamente compreensíveis..... | 63 |
| Figura 3.9: Representação do orbital LUMO de uma molécula genérica de catalisador | 64 |

LISTA DE ESQUEMAS

| | |
|---|----|
| Esquema 1.1: Catálises heterogênea e homogênea..... | 9 |
| Esquema 1.2: Clivagem catalítica homogênea de modelos de lignina pela via reductiva. | 11 |
| Esquema 1.3: Catálises homogêneas oxidativas desenvolvidas por Biannic e Bozell..... | 12 |
| Esquema 1.4: Vitamina B12 e representação do complexo presente na hemoglobina..... | 13 |
| Esquema 1.5: Reações mediadas por Cobalto utilizando oxigênio como oxidante. | 14 |
| Esquema 1.6: Preparação de complexos metálicos de salen e algumas aplicações..... | 15 |
| Esquema 1.7: Primeiro trabalho envolvendo oxidação de modelos de lignina com Co(salen)..... | 16 |
| Esquema 1.8: Mecanismo geral da reação de oxidação dos modelos S e G da lignina..... | 17 |
| Esquema 1.9: Mecanismo de formação do aldeído a partir dos modelos S e G. | 18 |
| Esquema 1.10: Variação de bases coordenantes na reação de oxidação do modelo S. | 20 |
| Esquema 1.11: Variação de bases volumosas na oxidação do modelo G. | 21 |
| Esquema 1.12: Valores de R ² entre descritores eletrônicos e geométricos do Co(salen) e rendimento da reação de oxidação do modelo S. | 22 |
| Esquema 1.13: Reação de oxidação do modelo S catalisada por diferentes catalisadores de segunda geração desenvolvidos por Bozell. | 23 |
| Esquema 1.14: Catalisadores de Co(salen) contendo piperazinas substituídas como base coordenante intramolecular. | 24 |
| Esquema 1.15: Avaliação da desativação da atividade catalítica do Co(salen) frente a utilização de quinonas..... | 26 |
| Esquema 1.16 : Produtos da oxidação da lignina técnica catalisada por Co(salen) de segunda geração..... | 28 |
| Esquema 1.17: Aplicações para a 2,6-dimetoxibenzoquinona. | 29 |

| | |
|---|----|
| Esquema 1.18: Epoxidação enantiosseletiva catalisada por Mn(salen)..... | 31 |
| Esquema 1.19: Síntese regiosseletiva de 3-arilpiridinas a partir de α -clorodiazirinas..... | 32 |
| Esquema 1.20: Parametrização da reação de metátese catalisada por Tungstênio..... | 34 |
| Esquema 1.21: Fluxo de trabalho da obtenção dos dados para a parametrização de reações..... | 35 |
| Esquema 3.1: Dados obtidos da literatura e catalisadores investigados | 37 |
| Esquema 3.2: Equilíbrios dos catalisadores em suas conformações de menor energia com o Metanol..... | 39 |
| Esquema 3.3: Resultados da parametrização com modelo multivariado de predição de rendimento para os catalisadores da literatura e representações gráficas dos descritores do modelo encontrado em moléculas genéricas do catalisador..... | 45 |
| Esquema 3.4: Rota geral de síntese dos catalisadores utilizados (em vermelho, o catalisador que não foi possível confirmar a síntese)..... | 47 |
| Esquema 3.5: Substituição aromática eletrofílica | 48 |
| Esquema 3.6: Etapa de formilação..... | 49 |
| Esquema 3.7: Resolução cinética da ciclohexildiamina..... | 50 |
| Esquema 3.8: Etapa de condensação..... | 51 |
| Esquema 3.9: Etapa de metalação..... | 52 |
| Esquema 3.10: Substratos utilizados nas reações de oxidação..... | 53 |
| Esquema 3.11: Resultados da parametrização com modelo multivariado de predição de rendimento para os catalisadores sintetizados (a esfera verde representando a molécula de base ou catalisador)..... | 62 |
| Esquema 3.12: Modelagem do grupo B usando uma estrutura simplificada do catalisador | 65 |
| Esquema 3.13: Correlações univariadas entre rendimento e carga..... | 66 |
| Esquema 3.14: Reações otimizadas com diferentes catalisadores para os modelos S e G. *K ₃ PO ₄ no lugar de trietilamina (TEA)..... | 67 |
| Esquema 3.15: Oxidações sob condições otimizadas. *K ₃ PO ₄ no lugar de py .. | 68 |

RESUMO

PARAMETRIZAÇÃO DE LIGANTES EM Co(SALEN) APLICADOS NA DESPOLIMERIZAÇÃO DE LIGNINAS. Desde a revolução industrial, fontes fósseis como petróleo, gás natural ou carvão se tornaram recursos indispensáveis para o desenvolvimento humano com seus mais diversos usos: desde geração de energia até a produção de fármacos e utensílios domésticos. Apesar de possuímos grandes reservas dessas fontes, elas não são renováveis e nossas reservas indicam um fim relativamente próximo. A utilização de fontes renováveis e não tóxicas, como a biomassa, traz uma interessante saída para essa dependência do petróleo e similares. A obtenção de produtos de química fina a partir da lignina se mostra uma alternativa interessante para a valorização da biomassa, mas obter isso de maneira eficiente, barata e quimicamente verde se mostra um desafio. No presente trabalho, buscamos investigar reações de oxidação de modelos de lignina catalisadas por complexos de Co(salen) a fim de entender quais parâmetros influenciam na eficiência da reação. Para tanto, dados da literatura foram utilizados para criar um modelo estatístico que nos guiou na síntese de catalisadores para serem utilizados nesse tipo de química, os quais foram avaliados mediante capacidade de conversão e rendimento. As reações feitas com os modelos de lignina foram parametrizadas nos dando informações sobre as influências de propriedades estéricas e eletrônicas que os ligantes do catalisador devem possuir para levar à maximização da eficiência catalítica.

Palavras-chaves: Lignina, Cobalto, Catálise, Parametrização, Sustentável.

ABSTRACT

Co(SALEN) LIGAND PARAMETRIZATION APPLIED IN LIGNINS DEPOLYMERIZATION. Since the industrial revolution, fossil sources such as oil, natural gas or coal have become indispensable resources for human development with a variety of uses: from energy generation to drugs production and household items. Nowadays, we possess large reserves of these sources but they are not renewable and studies indicate few decades to run out of them. The use of renewable and non-toxic sources, as biomass, provides an interesting alternative for this dependence on oil and similar. Obtaining fine chemical products from lignin is an interesting alternative for the valorization of biomass, but to achieve it in an efficient, cheap and chemically sustainable way is a challenge. In the present work, we investigate oxidation reactions of lignin models catalyzed by Co(salen) complexes trying to understand which parameters influence the reaction efficiency. Therefore, we used data from the literature to create a statistical model that guided us to the synthesis of catalysts further used in this kind of chemistry, which were evaluated by means of conversion and yield. The reactions performed with the lignin models were parameterized, giving us information about the influences on steric and electronic properties the catalyst ligands must have to maximize the catalytic efficiency.

Keywords: Lignin, Cobalt, Catalysis, Parametrization, Sustainable.

Sumário

| | |
|--|-----------|
| 1. Introdução | 1 |
| 1.1. Biomassa | 1 |
| 1.2. Lignina..... | 3 |
| 1.3. Despolimerização da lignina | 6 |
| 1.4. Oxidação utilizando Co(salen)..... | 12 |
| 2. Objetivos..... | 35 |
| 3. Resultados e discussão..... | 36 |
| 3.1. Parametrização de dados da literatura | 36 |
| 3.2. Síntese dos catalisadores | 46 |
| 3.3. Reações de oxidação envolvendo os modelos de lignina | 53 |
| 3.4. Parametrização dos catalisadores sintetizados | 58 |
| 3.5. Parametrização dos catalisadores sintetizados-Modelo reduzido | 64 |
| 3.6. Otimização da reação | 66 |
| 4. Conclusão..... | 69 |
| 5. Procedimento experimental | 70 |
| 5.1. Materiais e métodos | 70 |
| 5.2. Procedimento representativo para etapa de substituição aromática eletrofílica..... | 70 |
| 5.3. Procedimento Representativo para a Reação de Formilação de Vilsmeier-Haack | 71 |
| 5.4. Procedimento Representativo para a Reação de Etapa de formilação..... | 72 |
| 5.5. Resolução cinética | 73 |
| 5.6. Procedimento Representativo para a Etapa de condensação | 74 |
| 5.7. Procedimento Representativo para a Etapa de metalação | 80 |

| | |
|---|------------|
| 5.8. Procedimento Representativo para a Síntese dos substratos | 83 |
| 5.9. Procedimento genérico da oxidação do substrato | 85 |
| 5.10. Quantificação por GC-MS | 87 |
| 5.11. Descrição dos parâmetros | 88 |
| 5.12. Dados computacionais | 90 |
| 6. Referências Bibliográficas..... | 94 |
| 7. Apêndices..... | 101 |
| Energias dos confôrmeros calculados. | 101 |
| Coordenadas das estruturas calculadas | 104 |
| Espectros de RMN | 172 |
| Espectrometrias de massas de alta resolução..... | 195 |
| Espectroscopias no Infravermelho | 199 |
| Dados quantitativos dos experimentos de GC-MS | 203 |
| Curvas de calibração | 205 |

1. Introdução

1.1. Biomassa

Desde a revolução industrial, o petróleo, o carvão e o gás natural têm provado a sua enorme importância para o desenvolvimento humano e nos tornado altamente dependentes dos seus usos visto o baixo custo e a versatilidade de aplicações, desde a geração de energia por simples queima, bem como a produção de fármacos e utensílios domésticos. Apesar de possuímos grandes reservas dessas fontes fósseis, o consumo desenfreado possui um limite de exploração, com previsões de somente meio século de extração de petróleo (**Figura 1.1A**). Por conta da futura escassez, fontes renováveis têm sido empregadas cada vez mais na produção de energia primária e os investimentos nessa área têm aumentado significativamente nos últimos anos (**Figura 1.1B,C**).

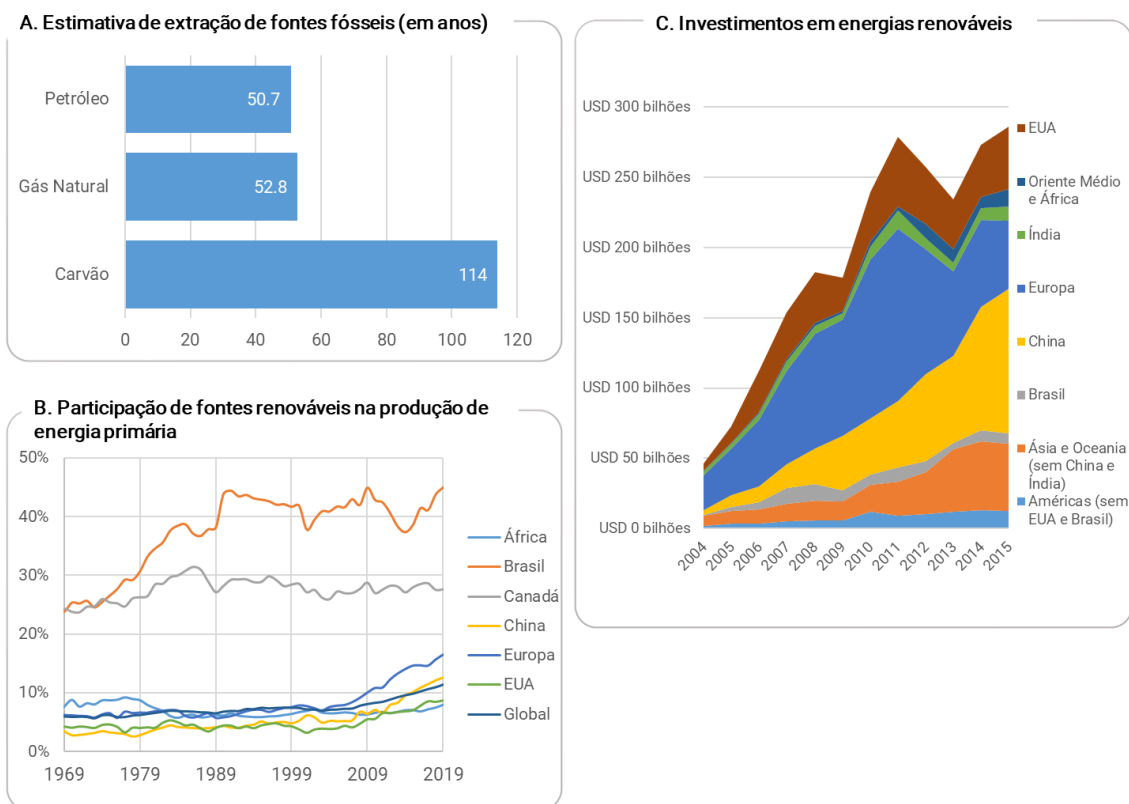


Figura 1.1: Dados sobre fontes fósseis e energias renováveis¹.

Além de ser uma fonte não renovável, a utilização de matérias primas fósseis traz sérios problemas ambientais consigo. Segundo o relatório climático divulgado pelo Painel Intergovernamental sobre Mudança Climática (IPCC) em Agosto de 2021, as emissões de gases a partir da queima de combustíveis fósseis estão colocando a humanidade em risco e a Organização das Nações Unidas (ONU) clama para que os investimentos em fontes renováveis tripliquem até 2030 para que possamos diminuir a dependência dessas fontes tão problemáticas.² Um dos maiores desafios do século XXI é justamente substituir fontes fósseis por fontes renováveis, de modo que essas sejam neutras em termos de geração de CO₂, amplamente disponíveis e que não impactem na produção de alimentos.

Uma alternativa viável ao uso de fontes fósseis como base de carbono e energética seria a utilização de uma base biológica renovável, como a biomassa, que atenderia aos requisitos mínimos para substituir o petróleo, carvão ou gás natural onde, em paralelo com a indústria petroquímica, poderia ser processada em biorrefinarias integradas que gerariam produtos mais valiosos, como biocombustíveis, materiais em geral e até mesmo energia através da queima dessa fonte (Figura 1.2)³.

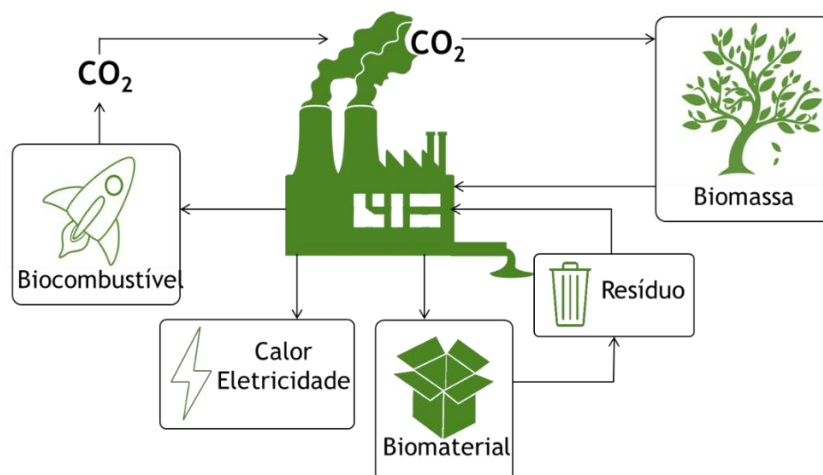


Figura 1.2: Biorrefinaria integrada.

A biomassa vegetal é um material extremamente diverso, prontamente disponível na forma de resíduos agrícolas e florestais que somam mais de 180

bilhões de toneladas produzidas globalmente, composta majoritariamente de polímeros de celulose, hemicelulose, lignina e em menor quantidade outros compostos como pigmentos, triglicerídeos e óleos essenciais. Ao contrário do petróleo, a biomassa é uma substância altamente oxigenada, sólida e heterogênea e, devido à sua complexidade, tentar obter hidrocarbonetos a partir de uma matriz tão diversa se torna economicamente inviável e não competitivo com as fontes fósseis nas tecnologias atuais. Porém, são uma fonte de moléculas plataforma de grande interesse para as indústrias químicas e farmacêuticas, visto que devido à alta funcionalização, seria possível realizar modificações químicas posteriores.

A porção celulósica da biomassa possui menor complexidade e, pela facilidade de separar as pentoses e hexoses da hemicelulose e celulose, vem sendo aplicada na produção de açúcares e biocombustível na forma de etanol de maneira competitiva economicamente. Já a lignina que chega a constituir até metade da massa da biomassa seca é subutilizada e comumente sendo considerada um subproduto ou resíduo não desejado em indústrias, como a do papel e do bioetanol, tendo como destino final a queima para a geração de energia, com baixo valor agregado⁴.

Apesar de receber um destino tão simples, a lignina possui um potencial de exploração grandioso sendo a única fonte de carbono aromático renovável, se tornando uma importante fonte de moléculas plataforma para a indústria química e farmacêutica. Porém, explorar essa fonte tão valiosa é uma tarefa desafiadora por conta da variabilidade da constituição dessa importante fração da biomassa.

1.2. Lignina

A lignina é um polímero amorfo tridimensional, um dos componentes da parede celular de plantas, que confere dureza e proteção contra oxidações e ataques de microrganismos aos tecidos vegetais (**Figura 1.3**). Esse polímero é constituído por três tipos de monômeros derivados de fenóis, chamados de

monolignóis, sendo eles: álcool cumarílico (chamado de tipo H); álcool coniferílico (tipo G) e álcool siríngico (tipo S). A proporção que eles são encontrados na lignina varia bastante com o tipo de vegetal, assim como a maneira que esses monolignóis se fundem ao polimerizar, sendo o tipo de ligação mais comum a chamada beta-aryl-éter (β -O-4), presente em cerca de metade das ligações entre unidades fenólicas.⁵

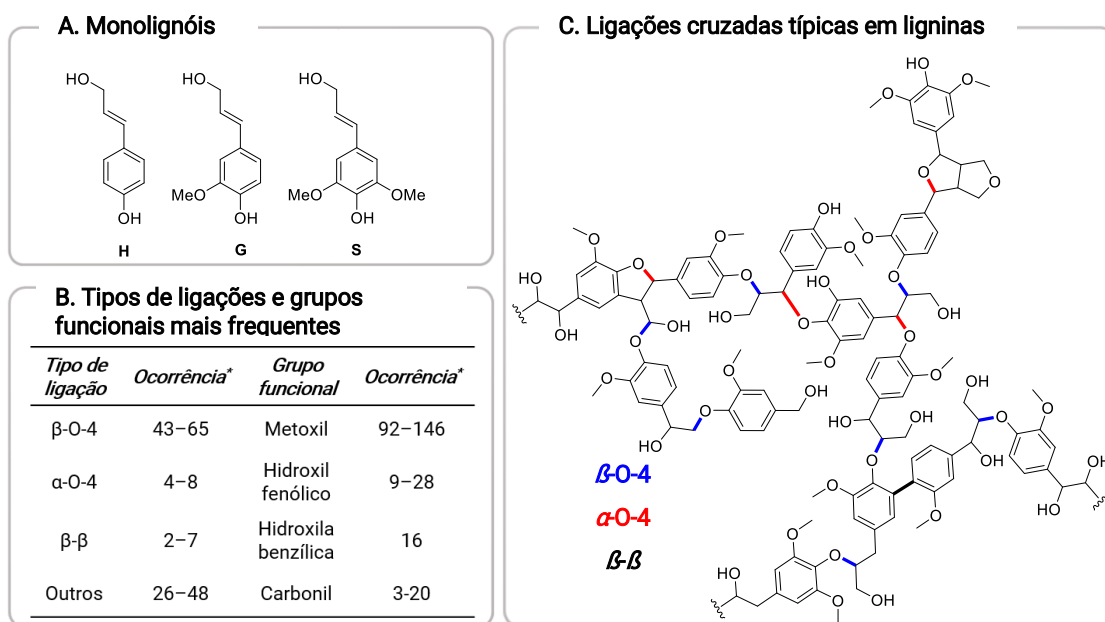


Figura 1.3: Monômeros da lignina e sua estrutura genérica.*A cada 100 unidades propilfenol (monômeros de lignina).

A grande diversidade de fenóis e de ligações entre eles é o que faz esse substrato ser tão complicado. Encontrar uma maneira simples e economicamente viável para quebrar um polímero complexo em moléculas plataforma, de maneira seletiva, é um verdadeiro desafio.

O primeiro desafio de trabalhar com a lignina está no pré-tratamento da biomassa lignocelulósica para aumentar a sua disponibilidade e separá-la da celulose e hemicelulose. Há processos físicos, químicos e biológicos para esse fim (**Figura 1.4**). Tem-se exemplos como: a moagem que diminui o tamanho de partícula e também a cristalinidade da celulose, porém possui alto custo energético para a biomassa oriunda de madeiras; a hidrotérmica que possui

reatores de baixo custo, com boa digestibilidade e recuperação de açúcares, porém com demandas altas de água e energia; por irradiação com micro-ondas ou ultrassonicação, eficientes mas com um alto custo para grandes escalas; hidrólise ácida ou básica, que possuem eficiência moderada na extração da lignina, mas com problemas de corrosão de reatores e neutralização do meio; ozonólise, que é possível fazer sob pressão e temperatura ambiente, porém implica em altos custos pela grande quantidade de ozônio e ainda a alta inflamabilidade e toxicidade desse gás; através de solventes orgânicos e líquidos iônicos, que mostram uma grande vantagem de extrair a celulose e solubilizar a hemicelulose e lignina com alto rendimento e pouca modificação estrutural, necessitando somente de um sistema de recuperação de solvente, mas com certa periculosidade em larga escala devido ao perigo de explosão e incêndio; oxidação úmida, que é capaz de remover a lignina de maneira eficiente, mas com alta degradação da celulose e hemicelulose; tratamento por sulfeto (processo Kraft), que é um dos mais utilizados (em especial na indústria de papel) e apresenta um baixo custo, mas causa modificações estruturais profundas na lignina e o seu enriquecimento com enxofre contribui para aumentar a complexidade em usos posteriores; enzimas e microrganismos, que são capazes de degradar seletivamente a lignina, com condições amenas e ambientalmente verdes, mas possuem um alto custo, são desativadas facilmente e precisam de um controle minucioso das condições reacionais^{6,7}.

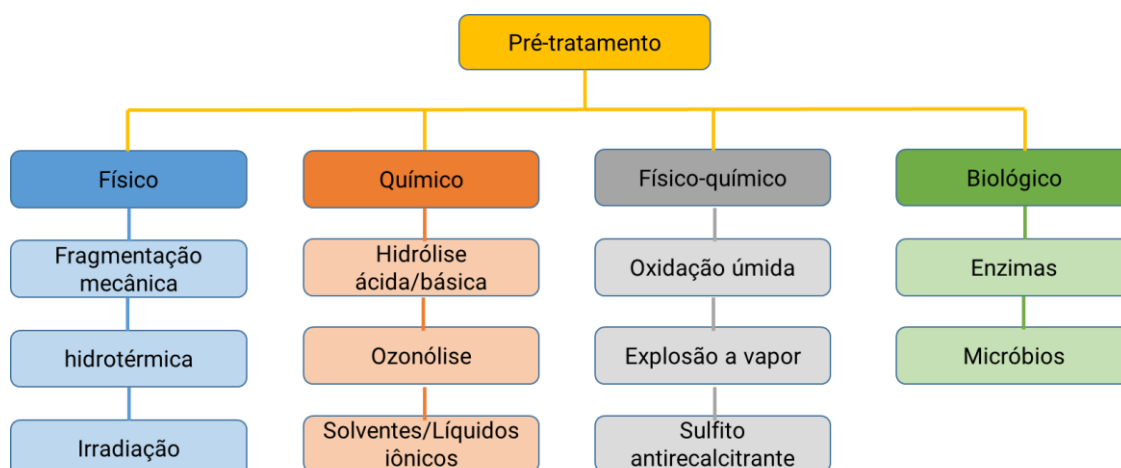


Figura 1.4: Pré-tratamentos que podem ser utilizados na biomassa para separar a lignina da celulose e hemi-celulose.

Durante o pré-tratamento, a lignina pode vir a despolimerizar em partes e polimerizar novamente (recalcitrar), diminuindo a quantidade de ligações C-O (menor energia) e aumentando a quantidade de ligações C-C (maior energia), tornando o processo de quebra de ligações para a obtenção de moléculas plataforma mais dispendioso⁸.

1.3. Despolimerização da lignina

Além da queima, a lignina isolada da biomassa possui algumas aplicações ao sofrer pequenas modificações, como emulsificante, aditivo em materiais de construção, resina epóxi e até mesmo como componente principal de materiais termoplásticos. Porém, para a melhor exploração desse potencial substituto de fontes fósseis, se torna necessário a despolimerização desse substrato para aproveitar o seu rico conteúdo oxigenado e fenólico como fonte de moléculas-plataforma altamente funcionalizadas.

Na literatura é possível encontrar reações de despolimerização da lignina das mais diversas naturezas, como as vias oxidativas (utilizando como agentes oxidantes oxigênio gasoso, peróxido de hidrogênio, ácido peracético e até mesmo ar atmosférico), neutras ou redutivas (utilizando gás hidrogênio ou solventes doadores de prótons como agentes redutores), com o objetivo de obter

desde produtos menos refinados (bio-óleos) a produtos mais específicos (fenóis, aldeídos e ácidos) ou mesmo gás de síntese (monóxido de carbono e gás hidrogênio). Esses processos estão resumidos na **Figura 1.5** abaixo⁷.

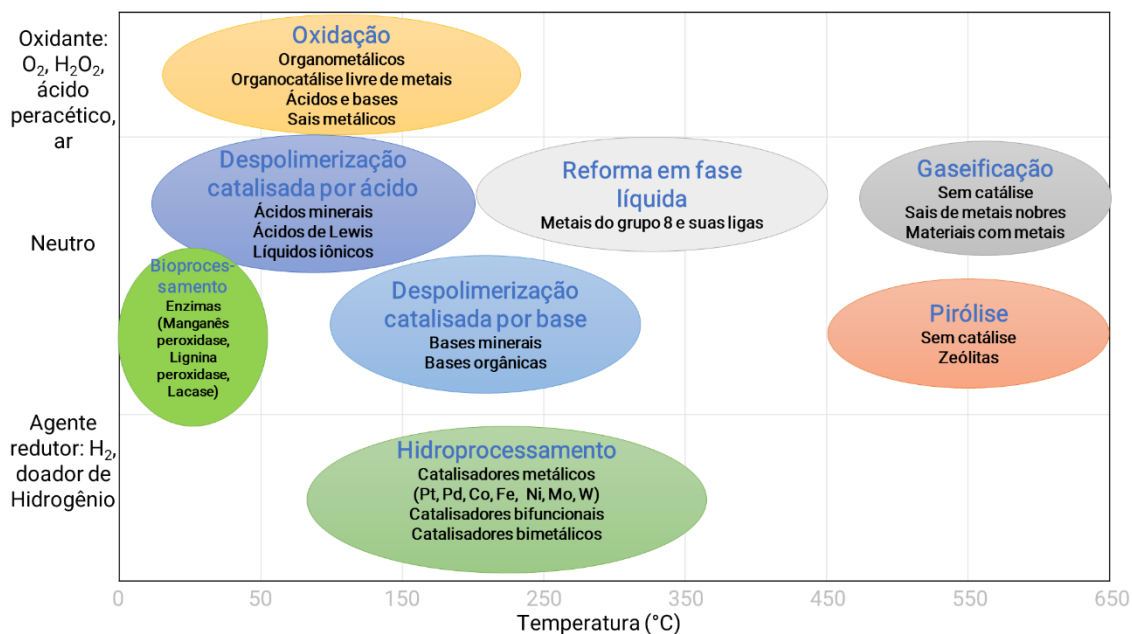


Figura 1.5: Processos de despolimerização utilizados na lignina (na abcissa a temperatura tipicamente empregada em cada tipo de processo).

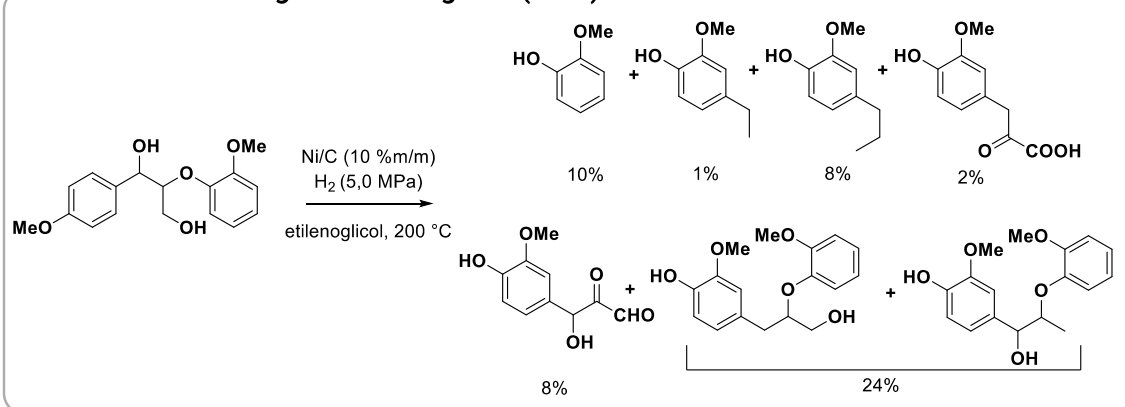
Os processos conduzidos por ácidos ou bases apresentam, em sua vasta maioria, condições drásticas como alta pressão ou temperaturas muito elevadas, tornando insustentável a obtenção de produtos de forma seletiva e controlada (**Tabela 1.1**). Já a biocatálise, com a utilização de enzimas para o processamento, apesar de possuir condições amenas como temperatura ambiente e sem a utilização de pressão, demanda tempos de reação muito longos (de dias a meses), além de gerar produtos de valor agregado muito baixos para terem alguma relevância econômica, como os bio-óleos⁹.

Tabela 1.1 : Alguns tipos de catálise para a despolimerização da lignina

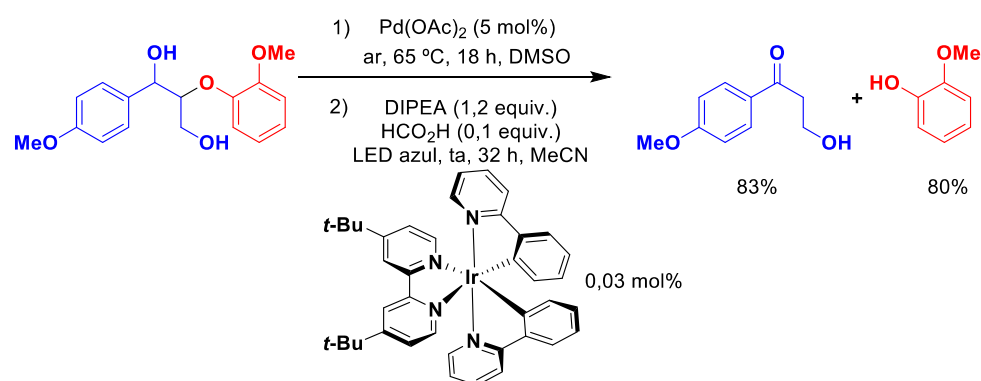
| Tipo | Catalisador | Condições reacionais | Substrato | Produto |
|---------------|--|--|---|----------------------------------|
| Básica | NaOt-Bu | <i>m</i> -xileno, 100 °C | veratrilglicerol- β -guaicil éter | guaiacol |
| | NaOH | H ₂ O, 180 °C | serragem de álamo | compostos fenólicos |
| Ácida | NiCl ₂ , FeCl ₃ | H ₂ O, 305 °C | lignina Organosolv | produtos éter-solúveis |
| | Ácido mineral | Refluxo em mistura 9:1 dioxano-água, HCl 0,2 N | lignina Björkman | produtos éter-solúveis |
| Hidrogenólise | Ni heterogêneo | 120 °C, <i>m</i> -xileno, H ₂ | éter difenílico | benzeno e cicloexanol |
| | Ni-TiN | 150 °C, H ₂ , 12 atm, EtOH | éter difenílico | benzeno e fenol |
| Pirólise | ZnCl ₂ | 450-600 °C | diferentes ligninas | Guaiacol e produtos carbonilados |
| Biocatálise | <i>P. sórdida</i> YK-624 | CaCO ₃ , 30 °C, 60 dias | Madeira de faia | lipídios |

Na catálise heterogênea temos a grande vantagem da possibilidade de reuso do catalisador, o que ajuda a reduzir custos e gera menos resíduos provenientes do catalisador. Porém, devido a lignina ser esse material polimérico tão diverso, a catálise pela via heterogênea possui baixa seletividade nos produtos obtidos, pois esse material polimérico leva a um comprometimento da atividade desses catalisadores por conta da dificuldade de aproximação do centro reativo e bloqueio dos sítios disponíveis pelos produtos gerados no meio reacional¹⁰. Por essa via heterogênea, usamos como exemplo a utilização de um catalisador de níquel disperso carvão ativado, onde Wang e Xu, utilizando um modelo de lignina, conseguiram a clivagem do substrato ao utilizar gás hidrogênio em alta pressão e temperatura, gerando diversos produtos com pouca seletividade (Esquema 1.1A)¹¹.

A. Catálise heterogênea de Wang e Xu (2012)



B. Catálise homogênea de Stephenson (2019)

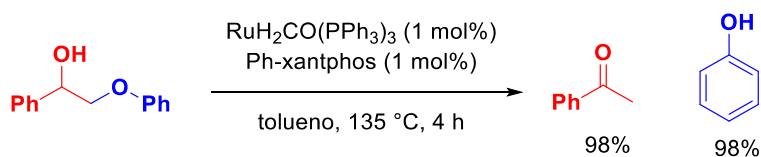
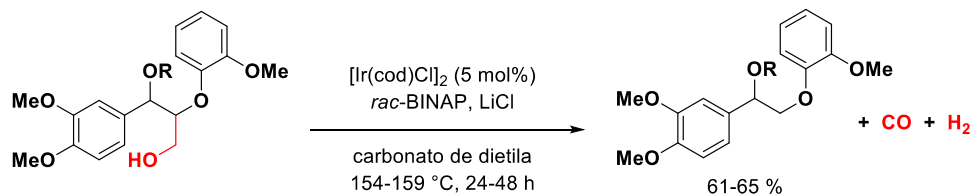


Esquema 1.1: Catálises heterogênea e homogênea

Nesse contexto, uma catálise de alta seletividade e eficiência se mostra necessária para que a lignina possa ser explorada de maneira economicamente viável. A catálise homogênea se adequa a este contexto, pois apesar de possuir a limitação de ter somente um uso único ou ser de difícil recuperação desse catalisador, apresenta ferramentas mais interessantes para a obtenção de produtos de forma mais seletiva, com maior complexidade estrutural, em condições mais amenas e de maior reatividade do que a catálise. Nessa via homogênea, Stephenson utilizou catalisadores de Paládio e Irídio para clivar o modelo de lignina com excelente rendimento utilizando condições brandas, como ar como oxidante, além de ser também fotocatalisada (**Esquema 1.1B**)¹². Nesse trabalho também foram explorados diferentes modelos de lignina e até

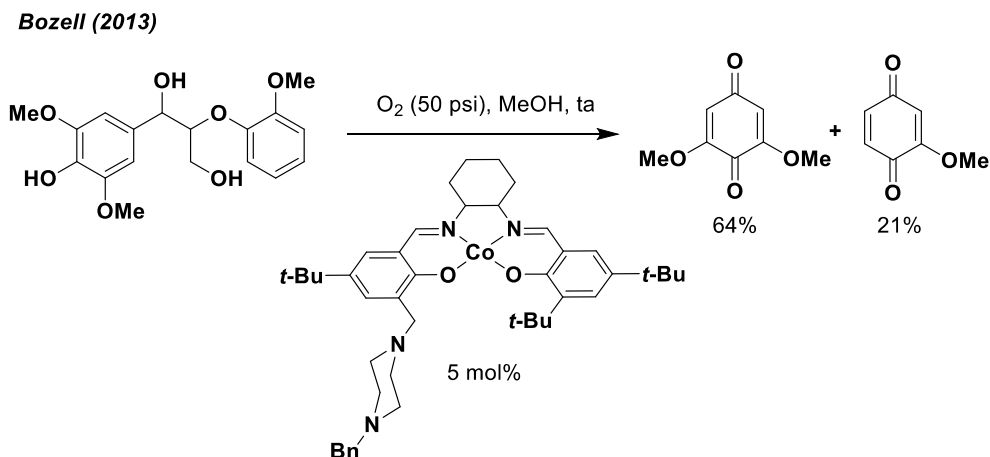
mesmo uma versão polimérica, sendo eficientemente oxidada utilizando luz solar como fonte de fótons. Apesar de excelentes resultados, essa metodologia possui um grande entrave econômico, por utilizar reagentes de custo muito elevado.

Seguindo o caminho da catálise homogênea, temos reações oxidativas e redutivas para despolimerizar a lignina. Utilizando a catálise homogênea pela via redutiva, Bergman e Ellman utilizaram um catalisador de rutênio que levou a quebra de ligações do tipo β -O-4 em modelos de lignina e obtiveram os produtos de clivagem da ligação C-O em rendimentos excelentes, porém em sistemas mais complexos contendo hidroxilas na posição γ -benzílico (presente em ligninas reais) acaba desativando o catalisador devido a formação de quelatos com o centro metálico, tornando ineficaz a aplicação prática (**Esquema 1.2A**)¹³. Um outro importante exemplo foi descrito por Deuss e colaboradores, que desenvolveram uma metodologia de produção de gás de síntese (CO e H₂) a partir da quebra de γ -carbinóis através da catálise homogênea utilizando um complexo de Irídio, levando a formação de produtos que também poderiam ser utilizados na metodologia de Bergman e Ellman (**Esquema 1.2B**)¹⁴. Apesar do custo elevado para a aplicação de tais metodologias devido à utilização de metais nobres, é possível notar um grande potencial de como uma biorrefinaria integrada combinando processos pode ser interessante.

A. Catálise homogênea redutiva de Bergman e Ellman (2010)

B. Catálise homogênea redutiva de Deuss (2020)


Esquema 1.2: Clivagem catalítica homogênea de modelos de lignina pela via redutiva.

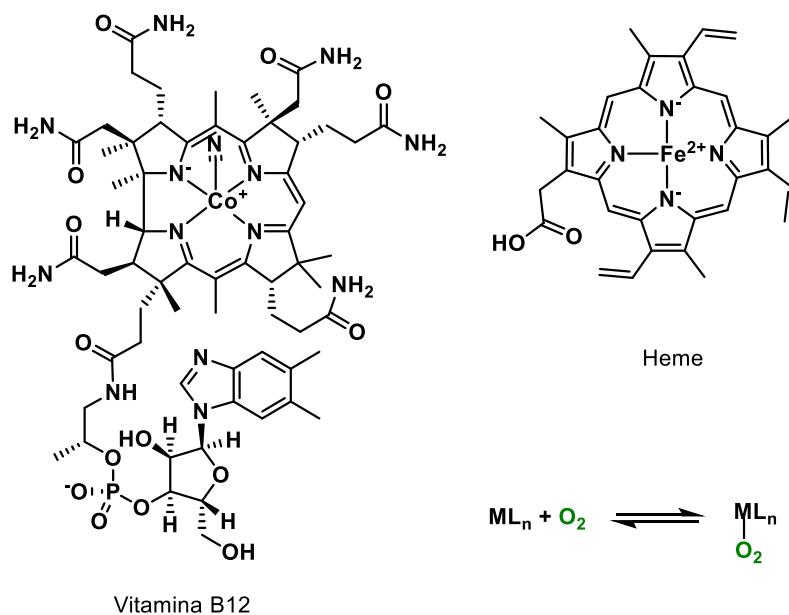
Com um catalisador de um metal de baixo custo, alinhado ao uso de um solvente de baixo impacto ambiental e utilizando gás oxigênio como único oxidante, Biannic e Bozell apresentaram uma metodologia muito promissora para a despolimerização da lignina pela via oxidativa onde, além de mostrar atividade em diversos modelos mimetizando as ligações β -O-4, o catalisador também mostrou atividade na própria lignina isolada, trazendo um caminho interessante para a obtenção de moléculas plataforma de maneira sustentável¹⁵.



Esquema 1.3: Catálises homogêneas oxidativas desenvolvidas por Biannic e Bozell.

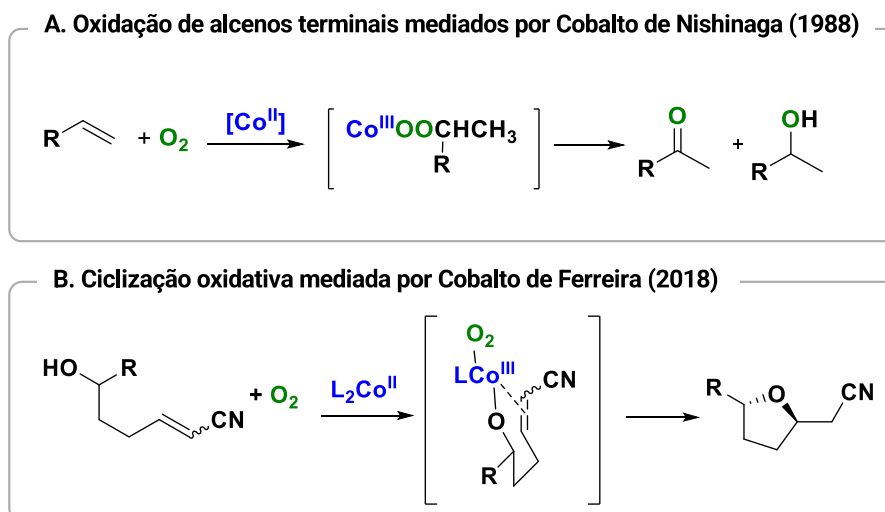
1.4. Oxidação utilizando Co(salen)

O uso do gás oxigênio como único oxidante mediado por metais de transição tem sido uma estratégia em síntese orgânica muito explorada nas últimas décadas. O design desses sistemas foi bioinspirado nos complexos porfirinóides metálicos naturais, a exemplo da cobalamina (ou vitamina B12) que é a única vitamina que possui o íon metálico cobalto, e que age realizando oxidações com o auxílio do oxigênio (**Esquema 1.4**). Esse centro metálico pentacoordenado é estabilizado por um imidazol substituído presente na própria vitamina e a utilização dessa base nitrogenada serviu de inspiração para trabalhos envolvendo oxidações mediadas por cobalto, a serem mostradas nessa seção. Ademais, tem-se também o clássico exemplo presente no nosso sangue, onde o ferro (II) presente na hemoglobina faz o transporte de oxigênio para as células a partir da respiração.



Esquema 1.4: Vitamina B12 e representação do complexo presente na hemoglobina.

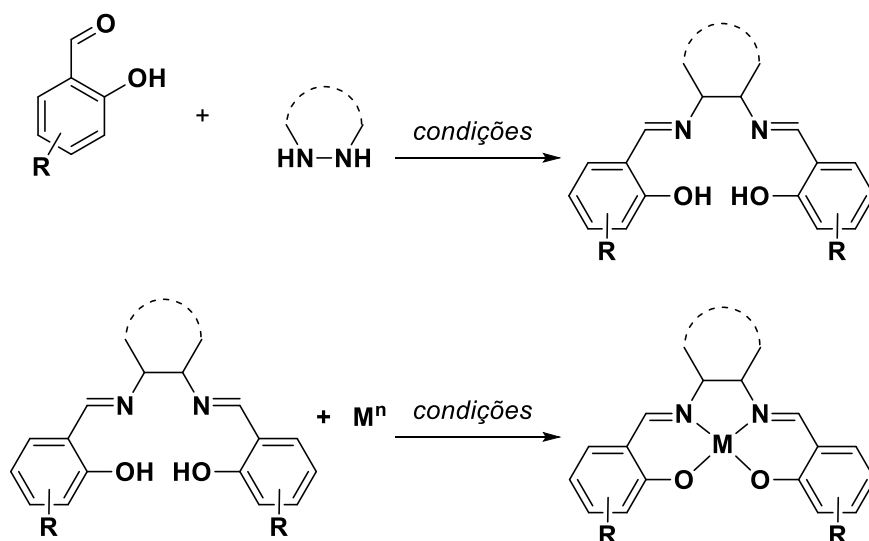
Nishinaga em 1988 apresentou um trabalho onde um complexo de cobalto (II) utiliza o gás oxigênio para oxidar duplas terminais a álcoois e cetonas, mostrando a viabilidade de utilizar reagentes simples para fazer essa transformação importante (**Esquema 1.5A**)¹⁶. O Cobalto também pode agir como agente de ciclização, em um trabalho desenvolvido pelo nosso grupo de pesquisa, Ferreira em 2018 apresenta ciclizações de álcoois bis-alílicos para a formação de tetrahydrofuranos mediadas por um complexo de cobalto ativado com auxílio do oxigênio, mostrando a versatilidade desse metal de baixo custo (**Esquema 1.5B**)¹⁷.



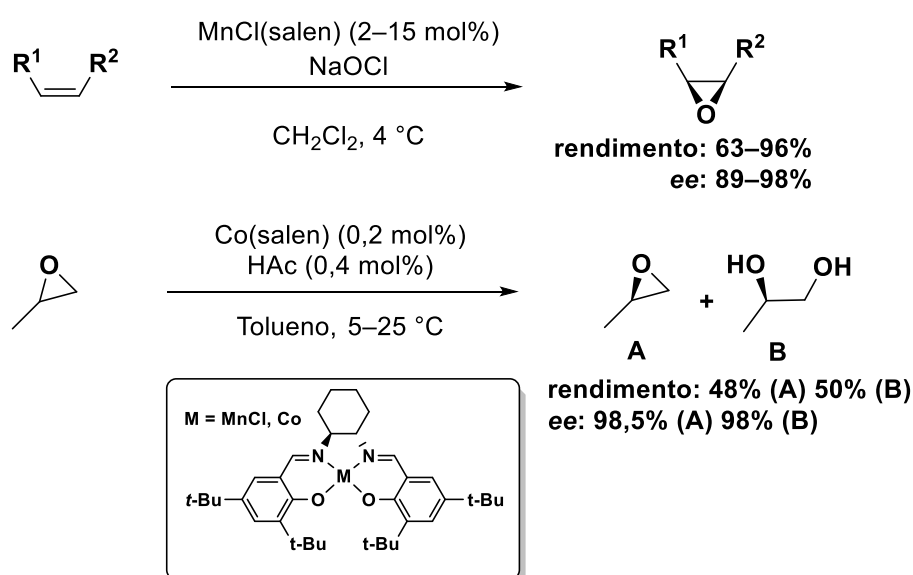
Esquema 1.5: Reações mediadas por Cobalto utilizando oxigênio como oxidante.

Bases de Schiff como os ligantes do tipo salen têm sido extensivamente utilizados em diversos trabalhos devido à excelente atividade catalítica quando se combinam com íons metálicos, os complexos gerados costumam ter alta estabilidade, seja em temperaturas elevadas ou mesmo na presença de umidade¹⁸. Além disso, complexos metálicos com salen são compostos de fácil síntese e com vasta possibilidade de modificação, seja na porção fenólica do anel aromático, na diamina que une as porções aromáticas ou também no metal utilizado para a complexação, possibilitando versões que atuem até mesmo em catálises enantiosseletivas. Com tamanha versatilidade, é possível realizar catálises com metais mais baratos e menos nobres, fazendo as alterações necessárias na vizinhança e periferia do centro metálico para torná-lo mais reativo ou seletivo, tornando possível o uso de manganês complexado no salen¹⁹ ao invés de complexos com porfirinas de difícil síntese²⁰ em epoxidações assimétricas e usando cobalto²¹ ao invés do nobre ródio²² em resoluções cinéticas (**Esquema 1.6**).

A. Esquema genérico de síntese de complexo metálicos com ligante do tipo salen



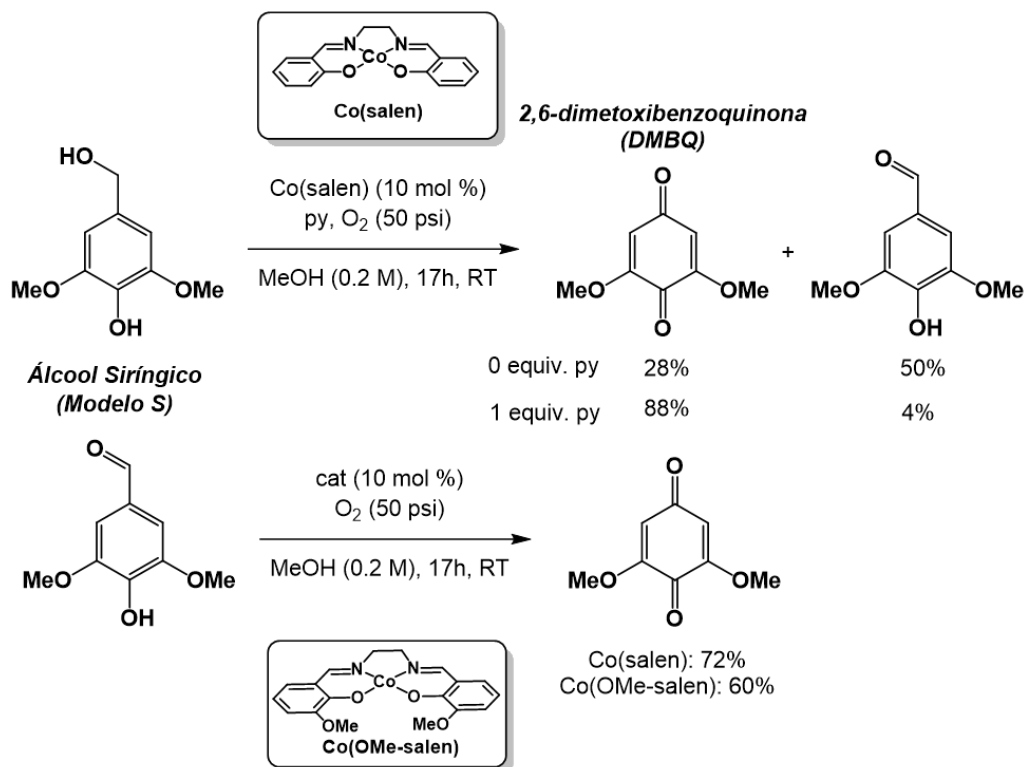
B. Reações de epoxidação e abertura de epóxido catalisadas por M(salen)



Esquema 1.6: Preparação de complexos metálicos de salen e algumas aplicações.

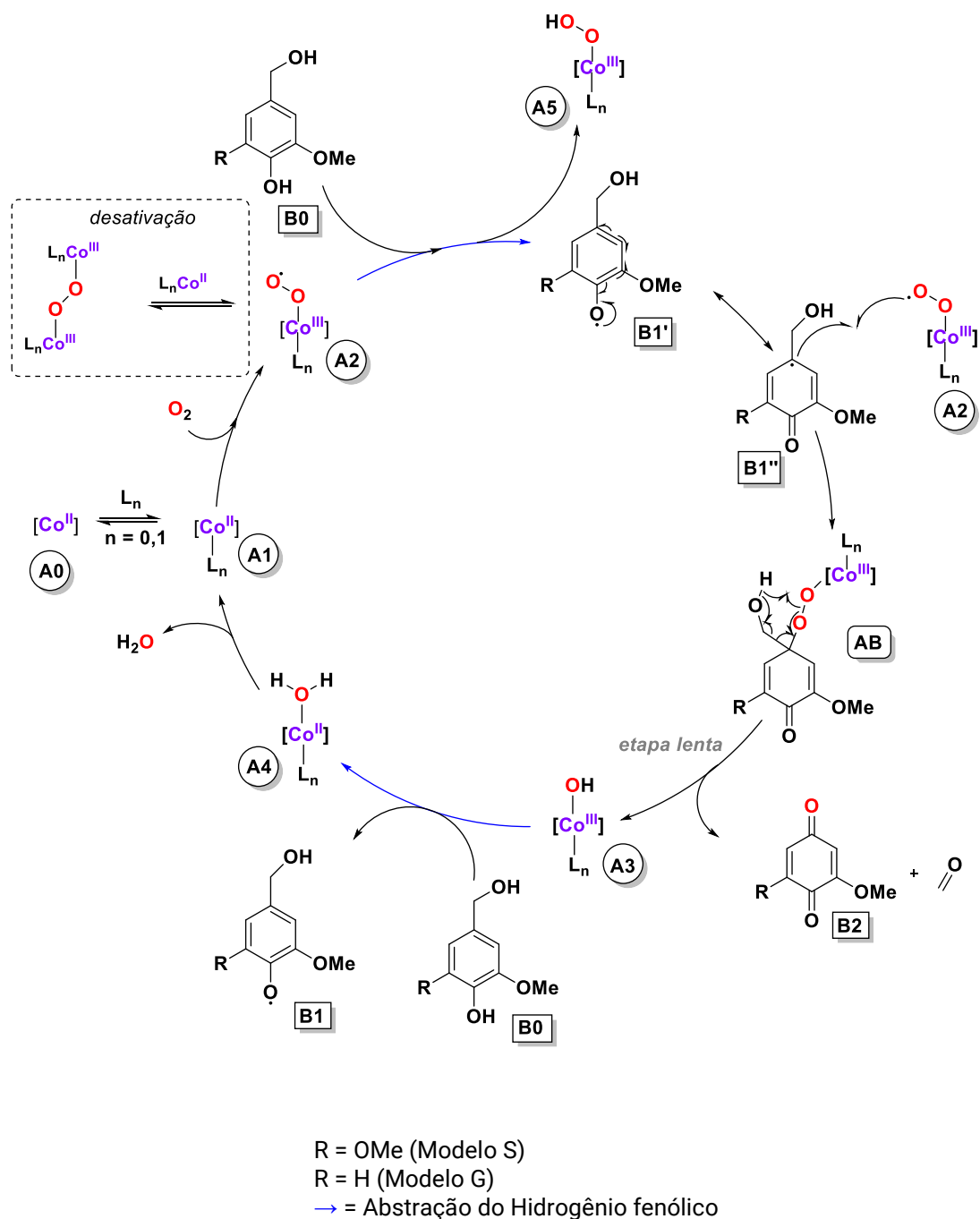
A busca pela produção de moléculas plataforma a partir da lignina utilizando complexos de bases de Schiff com cobalto foi reportada pela primeira vez em 1995 com o trabalho de Bozell e colaboradores onde, utilizando diversos

fenóis para-substituídos para simular moléculas presentes na porção aromática da biomassa, avaliou a formação de benzoquinonas através da oxidação mediada por cobalto (**Esquema 1.7**)²³.



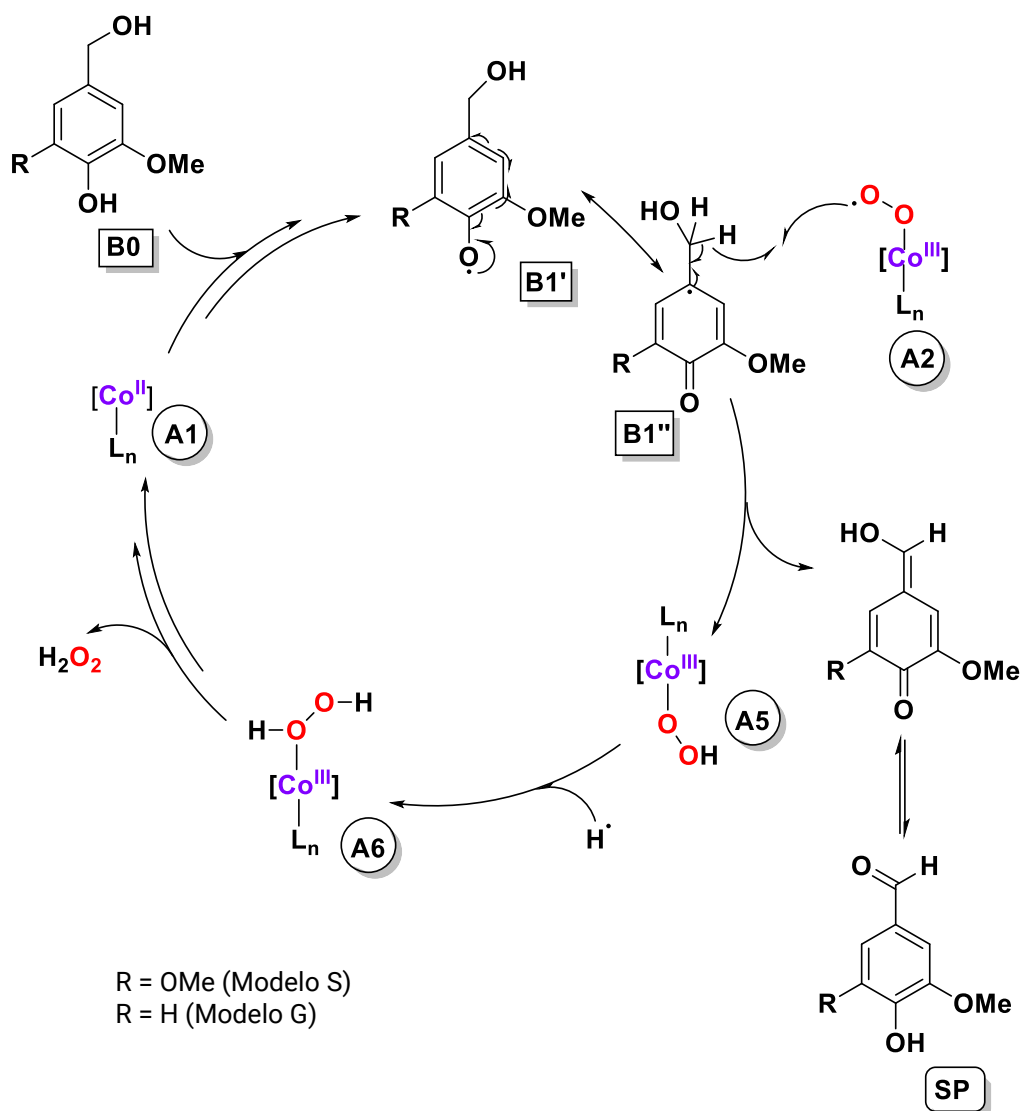
Esquema 1.7: Primeiro trabalho envolvendo oxidação de modelos de lignina com Co(salen).

A elucidação do mecanismo envolvido na oxidação de lignina usando complexos de Co(salen) foi explorado posteriormente e foi postulado que se inicia através da complexação do oxigênio no cobalto, levando a um aduto superóxido (Co^{III}/O₂) que abstrai o hidrogênio fenólico levando a formação do radical fenoxil (**Esquema 1.8**)²⁴. Em seguida, um segundo aduto ataca o radical fenoxil, levando à clivagem da ligação C-C do álcool benzílico eliminado na forma de formaldeído e gerando a benzoquinona como produto final. O catalisador pode ser regenerado ao abstrair outro hidrogênio fenólico de mais um substrato, que reduz o cobalto, possibilitando o ciclo catalítico ocorrer novamente.



Esquema 1.8: Mecanismo geral da reação de oxidação dos modelos S e G da lignina.

Nesse processo pode ser gerado o aldeído oriundo do álcool primário como subproduto quando o segundo aduto, ao invés de atacar o carbono 4, abstrai um hidrogênio do carbono α ao anel benzênico, diminuindo o rendimento da reação principal (**Esquema 1.9**).



Esquema 1.9: Mecanismo de formação do aldeído a partir dos modelos S e G.

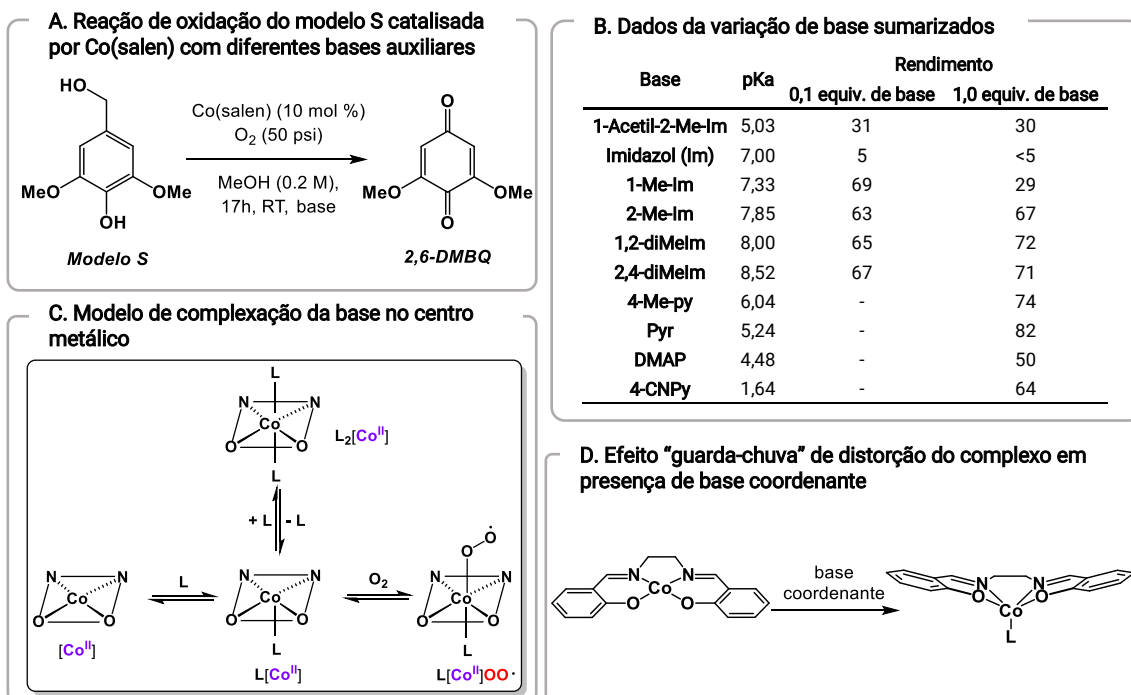
Além da formação do subproduto, outras hipóteses de diminuição de reatividade seria a formação de dímeros de Co(salen) ligados por O_2 e também a oxidação do centro metálico (Co^{II} para Co^{III})²⁵.

No estudo seminal de oxidação de modelos de lignina por Co(salen)²³, foi encontrado que a utilização de uma base axial (piridina) melhorava significativamente o rendimento da reação e a seletividade da formação da benzoquinona frente ao aldeído. A melhora no rendimento é justificada pelo fato de que a piridina ao se ligar ao cobalto levaria a uma estabilização maior do aduto Co/ O_2 formado. Foi também avaliado o efeito do solvente ao utilizar

metanol ou diclorometano e os autores sugerem uma participação do solvente na estabilização de cargas na etapa da extração do hidrogênio fenólico. Por fim, nesse mesmo trabalho Bozell investigou uma pequena modificação no ligante salen a fim de provar a hipótese de que com a adição de um grupo doador ao anel aromático do catalisador (como o grupo metoxila) diminuiria a acidez de Lewis do centro metálico, tornando o aduto Co/O_2 mais instável e com isso obtendo um rendimento menor.

No ano seguinte Bozell também reportou que a substituição dos hidrogênios fenólicos nas posições 2 e 6 por metoxilas levaria a uma maior ativação do substrato por conta do abaixamento da energia de dissociação radicalar do hidrogênio fenólico, que foi indicado como a etapa determinante para a oxidação, estabilizando o radical fenoxila formado²⁶. Dessa maneira o substrato do modelo S seria mais ativado que o modelo G e por sua vez o modelo H seria o mais desativado. Devido à menor reatividade e também pela baixa presença de derivados do modelo H na lignina natural, esse modelo não foi explorado nos estudos subsequentes.

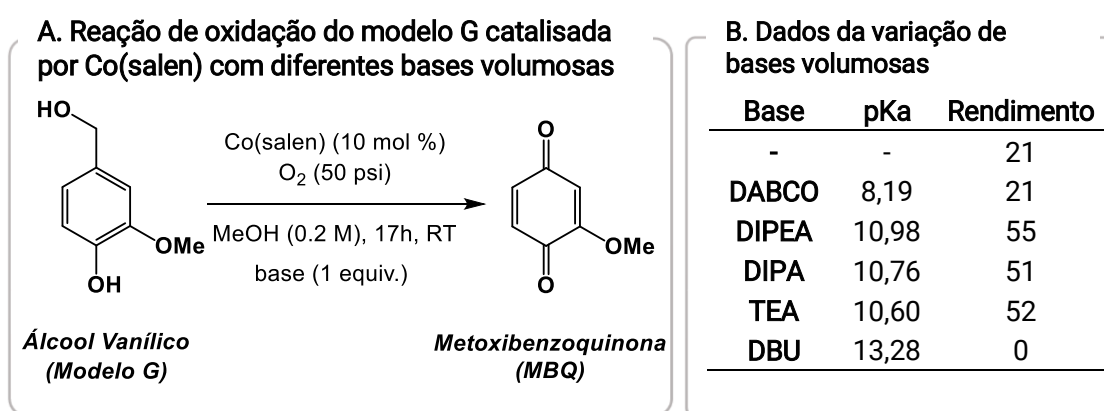
Mais de 15 anos depois, Bozell voltou a reportar novos estudos sobre a oxidação de modelos de lignina catalisada por $\text{Co}(\text{salen})$, dessa vez variando as bases axiais que se complexam no catalisador e também como essa variação alterava o rendimento da reação (**Esquema 1.10A**)²⁷. Utilizando diversos derivados de imidazóis e piridinas como base auxiliares na oxidação do modelo S de lignina, foram avaliadas as diferenças no rendimento que a utilização de 0,1 e 1,0 equivalente de base em relação ao substrato poderiam causar (**Esquema 1.10B**). Foi identificado que utilizar imidazóis pouco volumosos seria preferível em pequena quantidade. Apesar de suas propriedades como ligantes doadores poderem auxiliar na complexação do O_2 ao centro metálico, o aumento da quantidade de imidazol levou a uma queda no rendimento possivelmente devido a formação do aduto de bis-imidazol, com a base ocupando os dois sítios do cobalto para a complexação do oxigênio, impedindo assim a formação do complexo superóxido ($\text{L}(\text{Co}^{\text{II}})\text{OO}\cdot$) (**Esquema 1.10C**).



Esquema 1.10: Variação de bases coordenantes na reação de oxidação do modelo S.

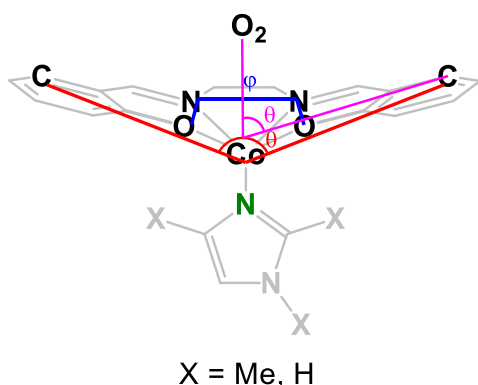
Ao utilizar imidazóis volumosos, a formação do $L(\text{Co}^{\text{II}})\text{OO}\cdot$ não é impedida mesmo em concentrações mais elevadas de base pois, ao complexar tais imidazóis, ocorre uma distorção na geometria piramidal quadrada do cobalto ao puxá-lo para fora do plano em direção à base (efeito "guarda-chuva"), tornando improvável a aproximação de uma segunda molécula de imidazol por razões estéricas (**Esquema 1.10D**). Dessa maneira, diminuindo a concentração de base prejudica o rendimento pois deslocaria o equilíbrio da formação do $L(\text{Co}^{\text{II}})\text{OO}\cdot$. Por fim, Bozell mostra que existe uma certa correlação entre o pKa do imidazol utilizado com o rendimento obtido, mas ao utilizar piridina e seus derivados como base axial, o pKa já não parece importar. Foi notado também que a utilização de quantidades equimolares de base (em relação ao substrato) não atrapalham a formação do complexo superóxido, aparentemente a desativação do catalisador devido a formação do aduto de bis-piridina não ocorre por conta da capacidade doadora reduzida desse tipo de ligante (comparado com os imidazóis).

Também em 2012, Bozell e colaboradores exploraram a oxidação de um modelo de lignina de menor reatividade (modelo G), onde a utilização de uma base ligante se mostra ineficiente (apenas 21% de rendimento) (**Esquema 1.11**). Bozell variou diferentes bases volumosas incapazes de complexar no centro metálico e constatou que seria possível oxidar satisfatoriamente o modelo G dentro de um limite de basicidade da base empregada. Bases de pKa intermediárias como DIPEA e TEA teriam a basicidade necessária para promover o referido processo reativo a partir da formação do fenolato, podendo, segundo os autores, sofrer o processo de oxidação mais facilmente do que o fenol.



Esquema 1.11: Variação de bases volumosas na oxidação do modelo G.

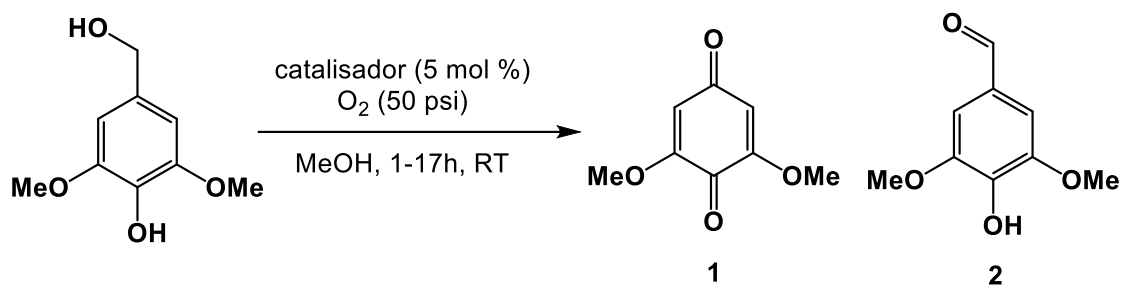
Em 2013, Bozell e colaboradores utilizaram métodos computacionais para tentar achar alguma correlação entre propriedades geométricas ou eletrônicas do catalisador com o rendimento da oxidação do modelo S ou pKa das bases (imidazóis e derivados) empregadas em cada reação (**Esquema 1.12**)²⁸. Eles obtêm correlações interessantes que indicam a relevância de fatores como: a distorção causada pela base; carga do cobalto; deformação da planaridade; etapa da formação do superóxido. É indicado que fatores estéricos em torno do centro metálico são fundamentais para o aumento da reatividade do catalisador, mas que devido à natureza multietapas dessa reação seria mais adequado uma análise multifatorial pois levaria em conta dois ou mais fatores e teria um modelo mais adequado para a elucidação e otimização da reação de oxidação catalisada por Co(salen).



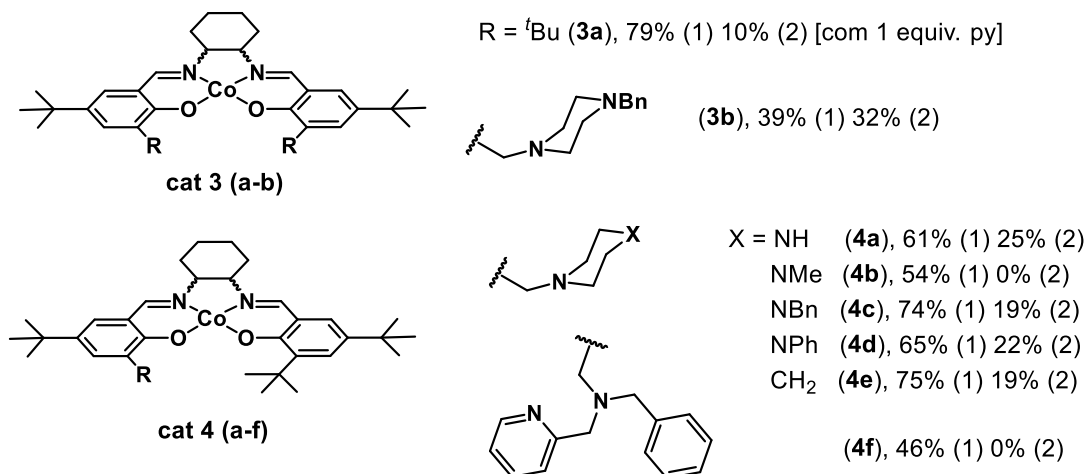
| Descritor | Correlação (R ²) entre descritor e rendimento | |
|--|---|----------------------|
| | L[Co ^{II}]OO· | L[Co ^{II}] |
| Ângulo C-Co-C | 0,73 | 0,47 |
| Ângulo C-Co-O ₂ | 0,60 | - |
| Diedro O-N-N-O | 0,79 | 0,44 |
| Carga Co | 0,65 | 0,55 |
| Carga N (base) | 0,67 | 0,62 |
| Energia da etapa de formação do superóxido | 0,68 | - |
| Energia total | 0,53 | - |

Esquema 1.12: Valores de R² entre descritores eletrônicos e geométricos do Co(salen) e rendimento da reação de oxidação do modelo S.

Também em 2013, Bozell e colaboradores trouxeram uma nova geração de catalisadores de Co(salen) que buscavam suprir a necessidade de se utilizar uma base externa como aditivo para aumentar o rendimento da reação (Esquema 1.13)²⁹. A solução encontrada foi adicionar uma base nitrogenada volumosa no próprio ligante salen que favoreceria a formação do superóxido, ao passo que levaria à formação do fenolato, permitindo pela primeira vez tanto a oxidação do modelo S (maior reatividade) quando do modelo G (menor reatividade) sob as mesmas condições com bons rendimentos. É interessante notar que, além de abdicar do uso de uma base externa, foi possível reduzir a quantidade de catalisador utilizado (de 10 mol% para 5 mol%) e que a utilização concomitante de uma base externa como a piridina levou à redução do rendimento da reação.



catalisadores:



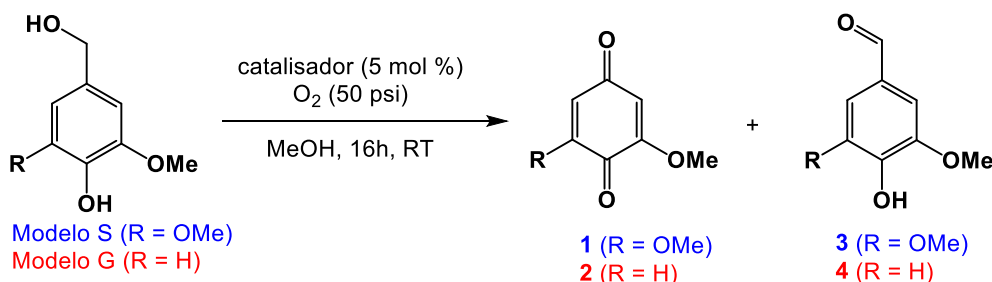
Esquema 1.13: Reação de oxidação do modelo S catalisada por diferentes catalisadores de segunda geração desenvolvidos por Bozell.

Em 2014 Bozell e colaboradores reportaram uma terceira geração de complexos de Co(salen) para oxidação de modelos de lignina (**Esquema 1.14A**)³⁰. A diferença da geração anterior consistiu na posição das piperazinas que, ao invés de estarem ligadas no anel aromático do salen, foram desenhadas na porção etilenodiamina que une as porções aromáticas do ligante. Dessa maneira, o nitrogênio da piperazina mais próximo do cobalto poderia auxiliar doando densidade eletrônica para o mesmo, estabilizando a formação do intermediário superóxido. No entanto, essa aproximação e estabilização leva a tempos de reação mais longos, devido a obstrução de um dos sítios de complexação do O₂ no centro metálico.

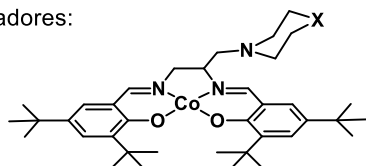
Nesse mesmo trabalho de 2014, foi explorado como a basicidade da piperazina influencia o rendimento da oxidação, onde verificou-se que ao utilizar-se um grupo de proteção, ou efetuar a remoção do nitrogênio mais distante, não houve mudança significativa no modelo mais reativo (**Esquema 1.14A, 5e,f**).

Porém, no modelo G, o rendimento cai drasticamente supostamente devido a supressão da etapa de abstração do próton para a formação do fenolato. Através de cálculos DFT em fase gasosa, foi também postulado que o nitrogênio da piperazina proximal leva a uma estabilização em 11,2 kcal/mol quando está a uma distância de 2,45 Å (típica de coordenação) do cobalto (Esquema 1.14B).

A. Reações de oxidação dos modelo S e G catalisadas pelos catalisadores de Bozell de terceira geração



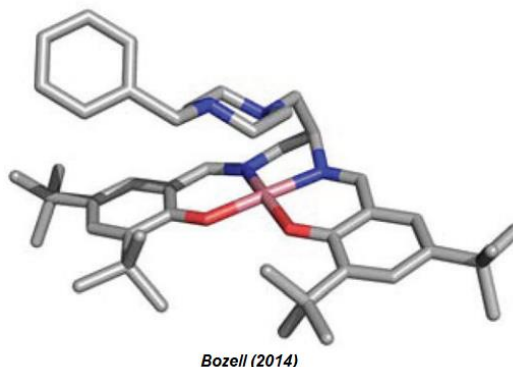
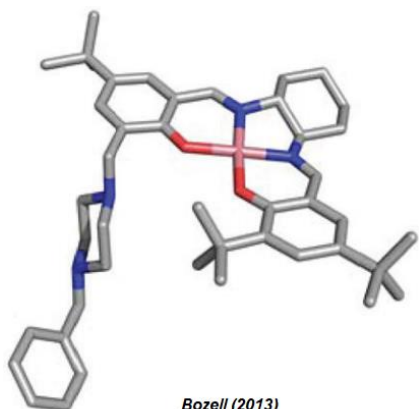
catalisadores:



cat 5 (a-f)

| | |
|------------------------------------|---------------------------------------|
| X = NBn | (5a), 71% (1) 72% (2) 11% (3) 5% (4) |
| N(C ₈ H ₁₇) | (5b), 67% (1) 68% (2) 25% (3) 0% (4) |
| NMe | (5c), 41% (1) 59% (2) 31% (3) 22% (4) |
| NPh | (5d), 51% (1) 54% (2) 33% (3) 15% (4) |
| CH ₂ | (5e), 42% (1) 16% (2) 7% (3) 0% (4) |
| NBoc | (5f), 45% (1) 13% (2) 12% (3) 0% (4) |

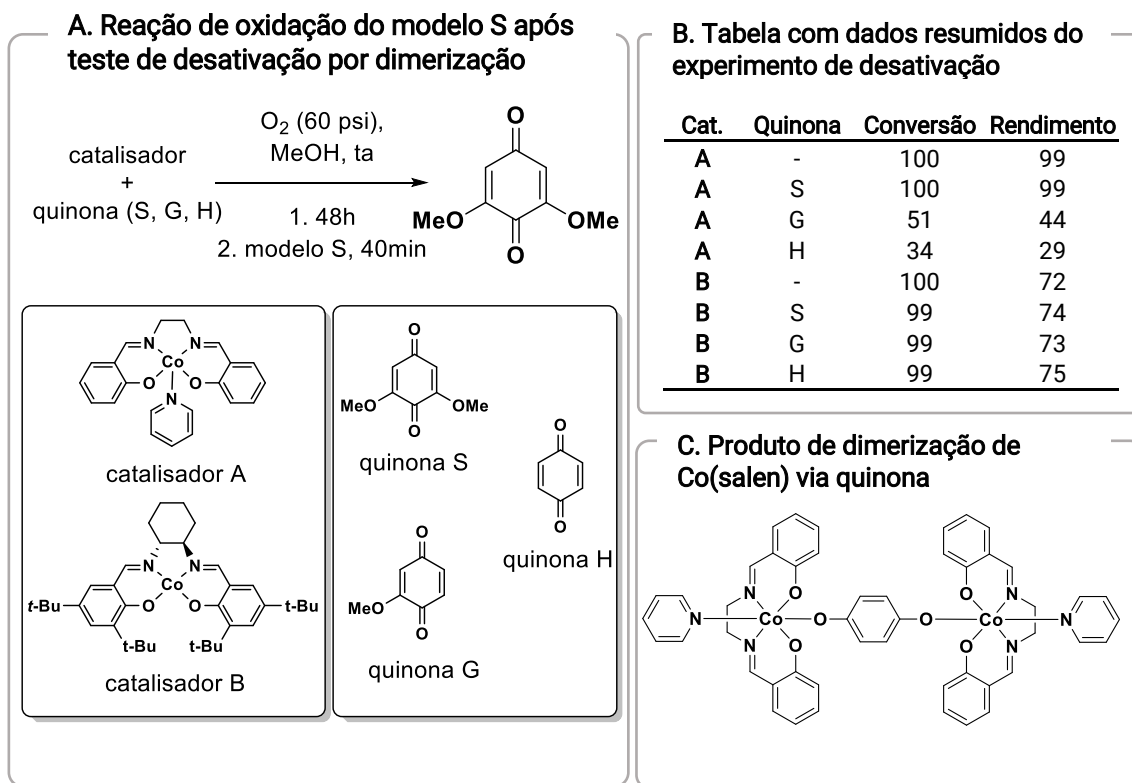
B. Modelos 3D dos catalisadores de segunda e terceira geração desenvolvidos por Bozell



Esquema 1.14: Catalisadores de Co(salen) contendo piperazinas substituídas como base coordenante intramolecular.

Em um trabalho mais recente, Bozell e colaboradores apresentaram diversos dados computacionais envolvendo o complexo metálico, que corroboram os experimentais obtidos até então, onde tentam racionalizar como o equilíbrio entre a reatividade do catalisador e a desativação do mesmo pode levar à maximização do rendimento da reação para a obtenção das benzoquinonas³¹. A reatividade mostrou-se diretamente relacionada a energia do orbital d_{z^2} do cobalto, em que aumentando a sua energia, haveria uma melhor sobreposição junto com os orbitais apropriados do O_2 . Averiguou-se que catalisadores com baixa energia do d_{z^2} levam a reação a produzir pouca ou nenhuma quantidade de benzoquinona.

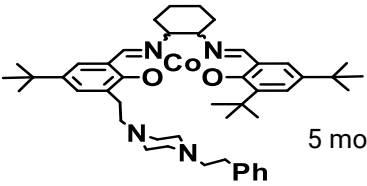
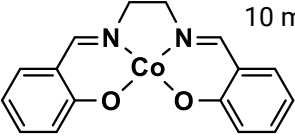
Reportado em 2020, Bozell e colaboradores mostraram que um dos caminhos para a desativação do catalisador se dá pela formação do dímero de catalisadores unidos pelo próprio produto da reação, a benzoquinona (**Esquema 1.15A,C**)³². Foi avaliado que o produto do modelo S (2,6-dimetoxibenzoquinona) não leva a formação desse dímero devido à baixa solubilidade do produto em metanol. Porém, as outras benzoquinonas testadas (oriundas dos modelos G e H) mostraram uma significativa redução no rendimento, sugerindo a desativação do catalisador (**Esquema 1.15B**). Essa desativação é maior no Co(salen) estericamente menos impedido (Catalisador A). No entanto, os efeitos estéricos não são os únicos fatores determinantes neste caso. Dados eletroquímicos também indicam que os potenciais redox dos catalisadores estejam mais relacionados com a formação de dímeros com a benzoquinona, pois quanto mais baixo o potencial de redução do catalisador, mais facilmente a benzoquinona seria capaz de desativar o catalisador ao oxidá-lo³². Nesse mesmo estudo é mostrado que a presença de grupos metoxilas nas benzoquinonas é responsável por as conferir um potencial de redução mais baixo, ou seja, para o modelo mais ativado (modelo S) essa desativação por dimerização é menos expressiva.



Esquema 1.15: Avaliação da desativação da atividade catalítica do Co(salen) frente a utilização de quinonas.

Na Tabela 1.2 abaixo, foram resumidos os dados mais relevantes envolvendo a química de Co(salen) desenvolvida por Bozell e colaboradores na valorização da biomassa. Utilizando piridina como base externa é possível oxidar o modelo S em excelente rendimento usando um sistema catalítico de relativa simplicidade, amplamente explorado na literatura inclusive com aplicações industriais. Porém, uma metodologia universal que permita a sua utilização eficiente tanto para o modelo S quanto para o modelo G, além de altas cargas catalíticas (10 mol% de catalisador) são aspectos a serem melhorados nesta metodologia. Já utilizando uma base intramolecular, foram obtidos resultados mais interessantes, indicando maior robustez do catalisador que, apesar do rendimento para o modelo S ser menor que o catalisador anterior, é capaz de oxidar ambos os modelos em bons rendimentos, utilizando metade da quantidade de catalisador (5 mol%). Outra vantagem do catalisador de segunda geração é a sua aplicação na lignina técnica, onde foi possível obter (ainda que em baixas quantidades) alguns dos produtos de oxidação de interesse.

Tabela 1.2: Resumo com as melhores performances da oxidação de modelos de lignina usando catalisadores de Co(salen).

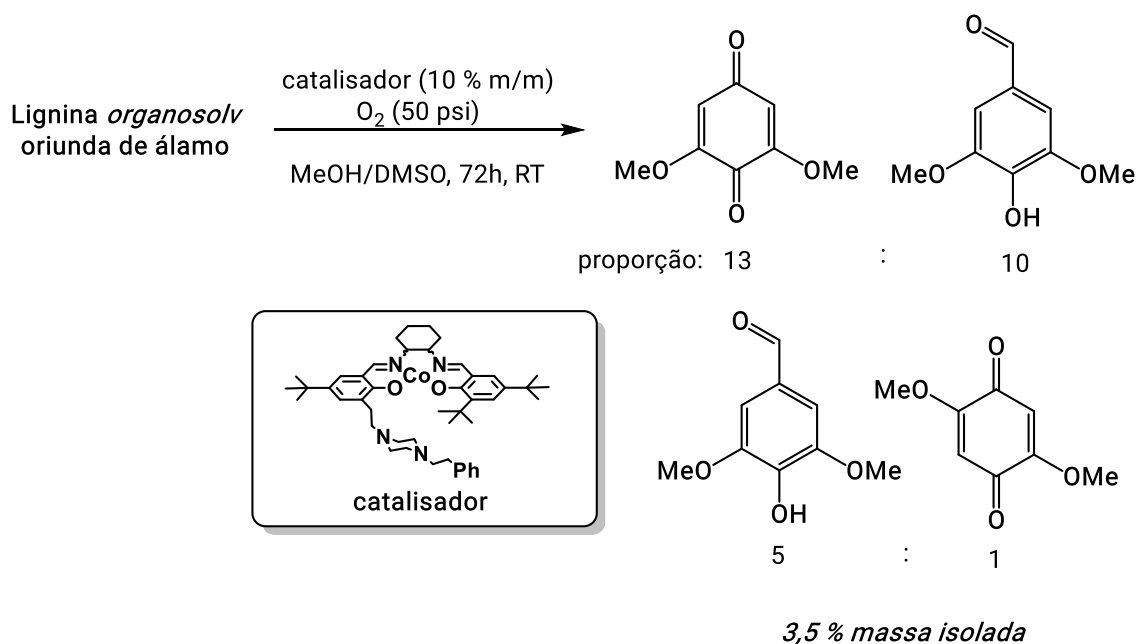
| Catalisador | Condições | Rendimento | | |
|--|--|------------|------------------|--------------------|
| | | Modelo S | Modelo G | Lignina Organosolv |
|  5 mol% | O ₂ (50 psi), 17 h, MeOH, TA | 74% | 83% | 3,5% ^a |
|  10 mol% | O ₂ (60 psi), 1 h, MeOH, TA | 99% | 68% ^b | - |

^a Reação conduzida utilizando 10 % em massa de catalisador, em MeOH/DMSO, por 72h.

^b Rendimento obtido após 22h de reação.

1.5. Aplicações

A catálise oxidativa de ligninas (ou modelos de ligninas) mediadas por catalisadores de Co(salen) podem levar a formação de produtos de moléculas plataforma de grande interesse e aplicações diversas. O **Esquema 1.16** a seguir mostra alguns desses produtos obtidos diretamente a partir da lignina técnica (extraída da biomassa), sendo a 2,6-benzoquinona (2,6-DMBQ) o produto majoritário do material isolado.

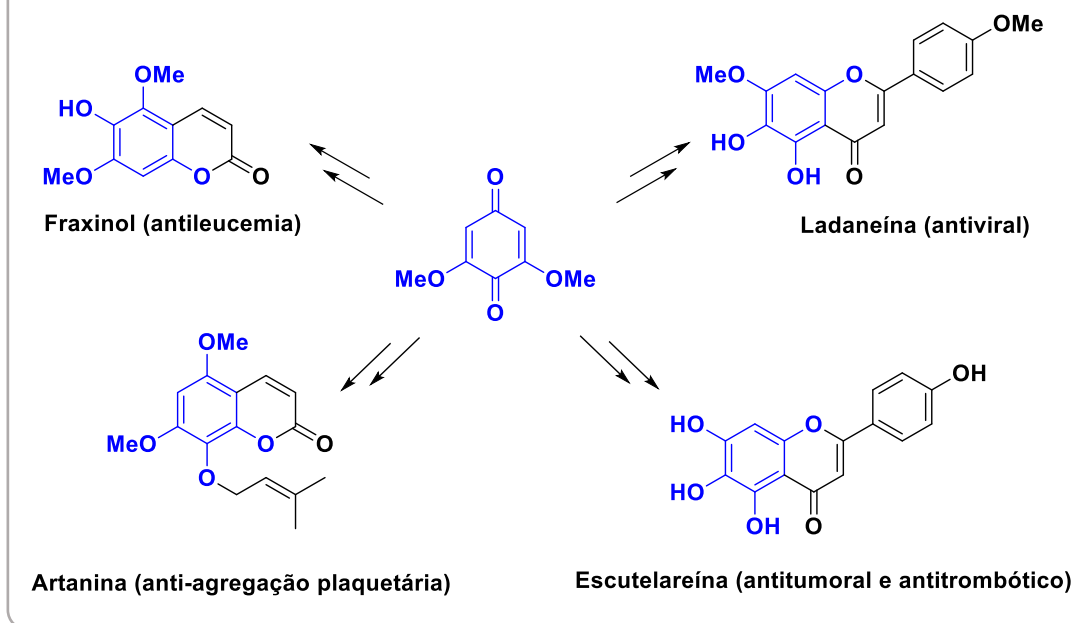


Esquema 1.16 : Produtos da oxidação da lignina técnica catalisada por Co(salen) de segunda geração.

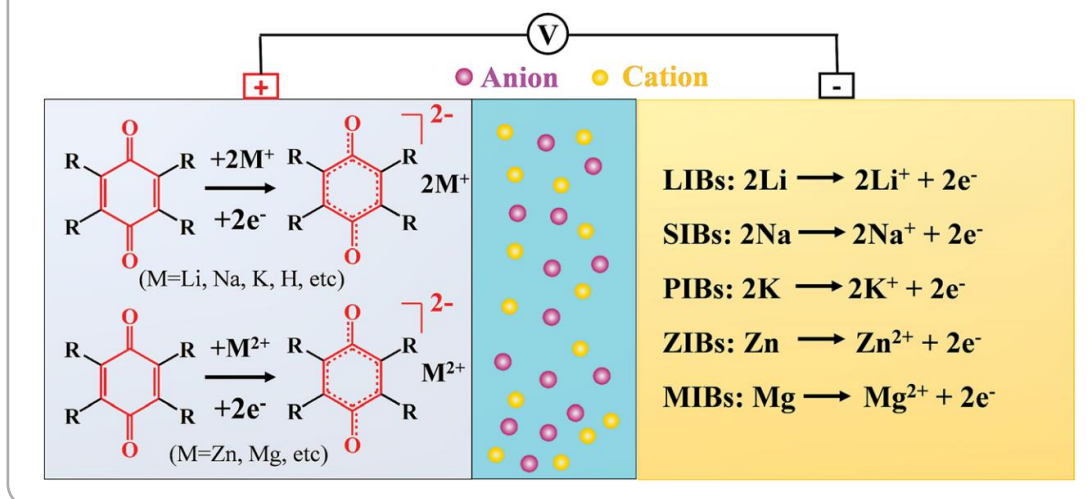
Há diversos exemplos na literatura cuja 2,6-DMBQ é parte fundamental na síntese de moléculas bioativas de grande interesse farmacológico, onde em poucas etapas é possível converter esse produto obtido a partir da biomassa em potenciais antivirais, antileucêmicos e antitumorais^{33a-c} (**Esquema 1.17A**). Além disso, devido às suas excelentes propriedades eletroquímicas como sua excelente reversibilidade, essa e outras benzoquinonas podem ser utilizadas como promissores materiais eletroativos no armazenamento de energia, oferecendo uma alternativa de baixo custo, sustentável e de alta densidade energética³⁴(**Esquema 1.17B**).

Por fim, também é possível encontrar na literatura benzoquinonas (incluindo a 2,6-DMBQ) atuando como importantes co-oxidantes em catálises utilizando metais, como rutênio e paládio, para usos diversos como dehidrogenação e acoplamentos oxidativos^{35a-b}.

A. Moléculas bioativas que podem ser sintetizadas a partir da 2,6-DMBQ



B. Diagrama genérico mostrando mecanismo de reação de quinonas baseado em equipamentos de armazenamento de energia eletroquímica



Esquema 1.17: Aplicações para a 2,6-dimetoxibenzoquinona.

1.6. Parametrização

Apesar de Bozzel e colaboradores explorarem extensivamente o uso de diferentes bases, sejam elas ligadas ao catalisador ou não, bem como efetuar variações estruturais diversas nos ligantes salen, não há uma racionalização clara e inequívoca dos efeitos que de fato levam ao aumento da eficiência catalítica. Fatores como tamanho dos ligantes empregados, bem como pKa das

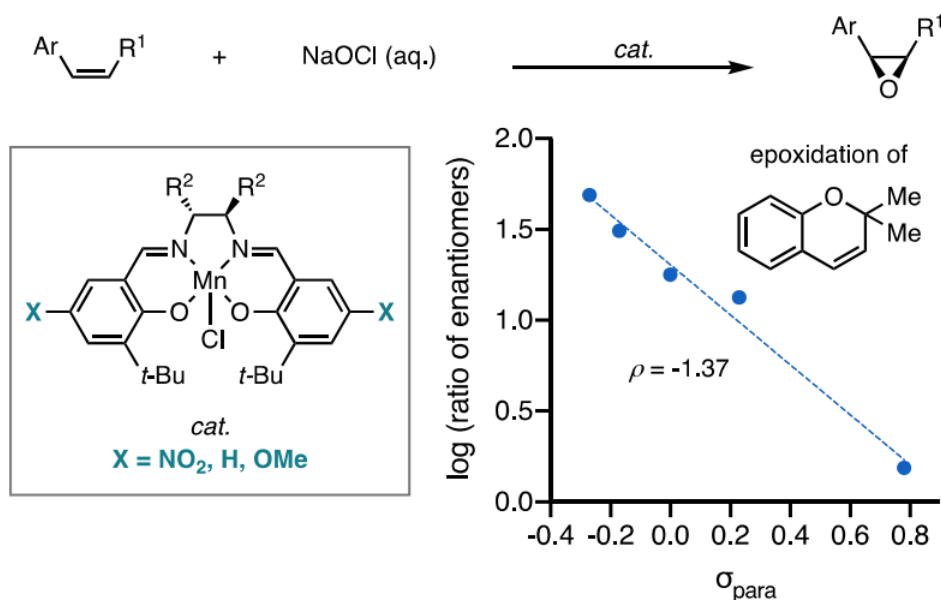
bases utilizadas não foram explorados de maneira sistemática a ponto de trazer informações capazes de prever as características necessárias para aumentar a eficiência do sistema catalítico. Por outro lado, o uso de ferramentas estatísticas poderiam ajudar a apontar os fatores que maximizam o rendimento para esse tipo de reação.

Métodos estatísticos com a habilidade de prever com precisão a relação entre estrutura do catalisador e sua reatividade tem impactado profundamente no desenvolvimento de novas reações. Tanto a atividade quanto a seletividade do catalisador empregado em reações orgânicas estão fundamentalmente e diretamente relacionados a seus aspectos estruturais e eletrônicos. Os modelos obtidos fornecem informações rápidas e estimativas relevantes sobre a estrutura e respectiva atividade/seletividade de novas moléculas que são resumidamente identificadas em descritores estruturais que influenciam na atividade desejada³⁶³⁷.

No campo da catálise, Sigman (University of UTAH) adaptou esta abordagem pioneiramente e tem usado para o desenvolvimento de novos catalisadores através da relação quantitativa de estrutura e seletividade (QSSR) através da seleção e o emprego de descritores moleculares quimicamente significativos. Importante notar que é possível, através desta abordagem, a investigação do mecanismo reacional já nos estágios iniciais do processo. Em geral, as propriedades eletrônicas utilizadas como descritores englobam a energia eletrônica de orbitais moleculares (NBO), tensores de blindagem (RMN), cargas atômicas (Natural, Mulliken, etc), polarizabilidade, valores de Hammett (σ) entre outras. Já em relação aos descritores estéricos, os tipicamente utilizados são o ângulo cônico de Tolman (para fosfinas), valor A (baseado no ciclohexano), parâmetros de Taff, parâmetros de Charton e os parâmetros Sterimol³⁷.

Na literatura é possível encontrar diversos exemplos de como ferramentas estatísticas podem nos trazer informações importantes para o aumento de enantiosseletividade, rendimento, eficiência catalítica e outras respostas de interesse³⁸. Uma das grandes ferramentas existentes está

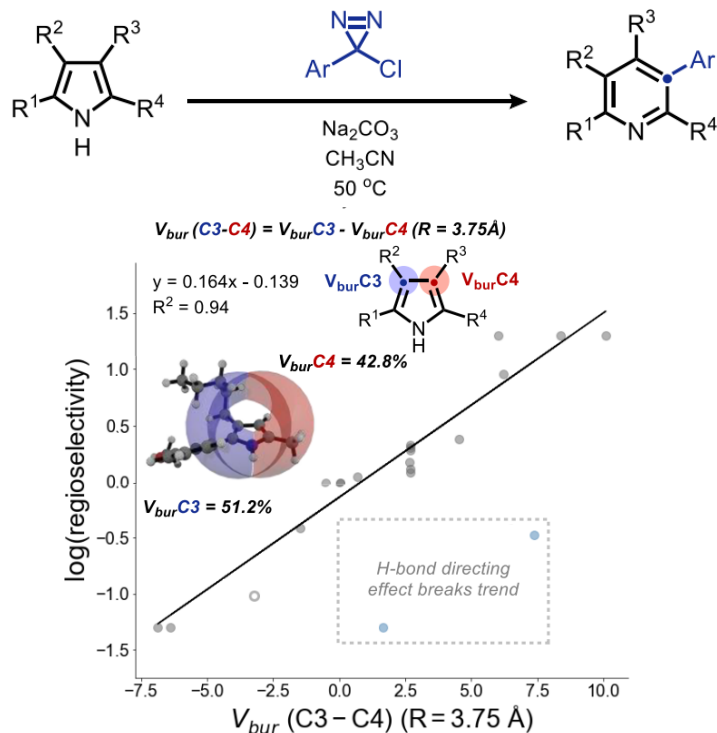
relacionada às relações lineares de energia livre (*Linear Free Energy Relationships - LFERs*) com determinados tipos de parâmetros como por exemplo as correlações com o parâmetro σ de Hammett, derivados da acidez de ácidos benzóicos substituídos³⁹. Como um exemplo seminal deste tipo de abordagem em catálise, a epoxidação enantiosseletiva de olefinas mediada por catalisadores de Mn(salen) foi explorada por Jacobsen usando tais ferramentas, onde foi possível correlacionar o excesso enantiomérico com um parâmetro de Hammett, onde valores de σ_{para} mais negativos (grupos mais eletro doadores) aumentam o excesso enantiomérico da reação (**Esquema 1.18**). Com essas informações, é possível fazer o design de catalisadores mais específicos, melhorando a enantiosseletividade da reação^{38c}.



Esquema 1.18: Epoxidação enantiosseletiva catalisada por Mn(salen).

Parâmetros estéricos também podem ser utilizados para a racionalização e predição, como no modelo utilizado por Levin e colaboradores onde foi possível descrever não somente a regioseletividade da reação de inserção de carbono em pirróis trissubstituídos como também prever a baixa seletividade de determinados substratos (**Esquema 1.19**). Nesse estudo, foi observado que as diferenças estéricas entre os carbonos 3 e 4 do pirrol utilizado como substrato seria diretamente responsável pela regioseletividade da

aproximação do clorocarbênio oriundo da respectiva α -clorodiazirina, onde quanto maior o ambiente estérico em torno do carbono 4 (e menor no carbono 3), maior a seletividade da reação⁴⁰.

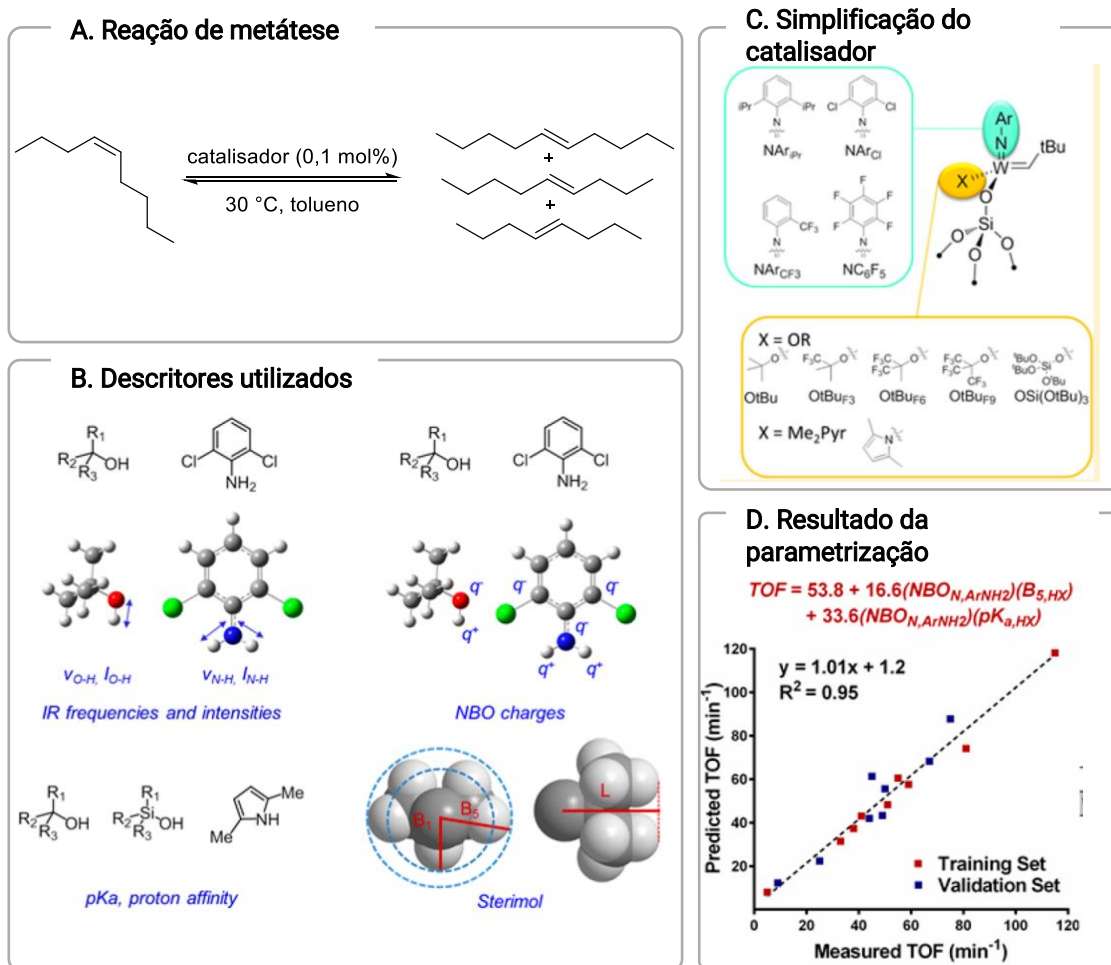


Esquema 1.19: Síntese regioseletiva de 3-arilpiridinas a partir de α -clorodiazirinas.

Embora nos exemplos dos Esquema 1.18 e Esquema 1.19 as reações tenham sido descritas de maneira satisfatória utilizando descritores eletrônicos ou estéricos, em sistemas mais complexos essas análises diretas que dependem somente de um fator (univariadas) podem não ser o suficiente para chegar a uma racionalização precisa, de modo a ser possível prever resultados de interesse (como rendimento ou seletividade). Uma solução para essa limitação seria a combinação de dois fatores ou mais (análise multivariada), sejam estéricos e/ou eletrônicos, ponderando as suas contribuições para chegar em um modelo descritivo de maior acurácia.

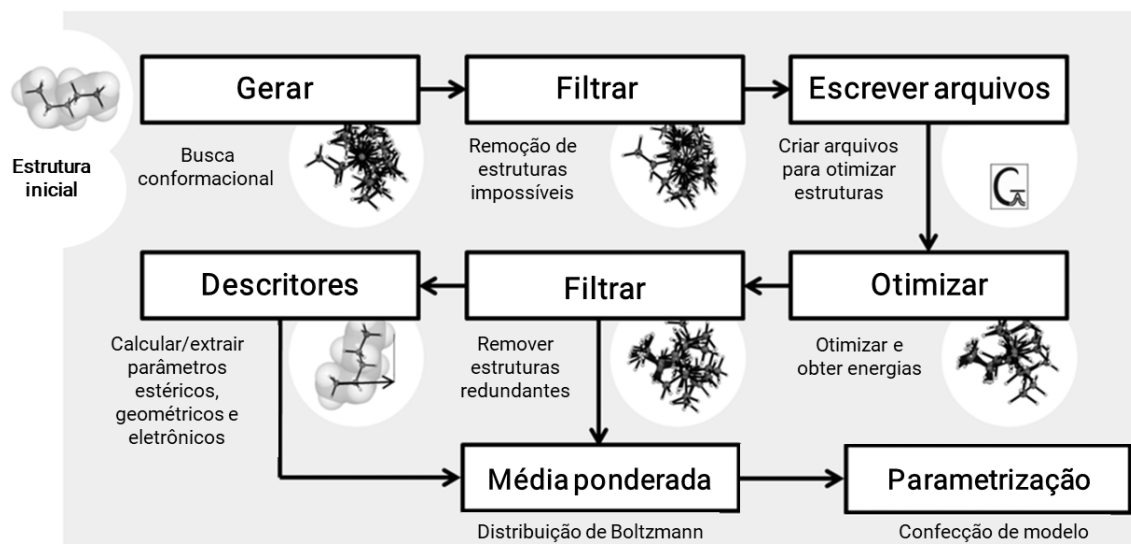
Como exemplo desta estratégia, o uso de um modelo multivariado foi explorado por Copéret e colaboradores ao estudarem a reação de metátese de olefinas catalisada por Tungstênio, a qual possui um mecanismo bem elucidado

(Esquema 1.20A). Porém, as inúmeras etapas e equilíbrios elevam a complexidade no design de ligantes para aumentar a eficiência catalítica dessa reação. Utilizando métodos estatísticos e análises multivariadas, foi possível obter um modelo que leva em consideração a combinação de fatores eletrônicos e estéricos (como a energia de orbitais e o tamanho de substituintes) para a maximização de resultados ⁴¹. Para isso, foi necessária a utilização de descritores moleculares nesses ligantes, que podem ser de naturezas energéticas, eletrônicas ou estéricas (Esquema 1.20B), para correlacionar com a resposta que eles queriam maximizar: a frequência de rotatividade (*Turnover Frequency*-TOF) do catalisador, que é um indicador de atividade catalítica que pode ser interpretado como o número de vezes que o catalisador completa o ciclo catalítico em um determinado tempo (Esquema 1.20D). De forma surpreendente, nesse trabalho de Coperét e colaboradores, foram considerados os ligantes individualmente, e não complexados ao centro metálico (derivados de anilina e álcoois) (Esquema 1.20C). Essa estratégia possui a excelente vantagem de reduzir drasticamente o custo computacional, em comparação a abordagem computacional tradicional na elucidação mecanística que envolveria o cálculo de várias etapas elementares do processo (estados de transição e intermediários reacionais), e considerando neste caso cada um dos catalisadores completos.



Esquema 1.20: Parametrização da reação de metátese catalisada por Tungstênio.

O fluxo de trabalho utilizado para este tipo de abordagem está resumido no **Esquema 1.21**. Inicialmente é gerada a estrutura inicial a ser estudada, a qual é submetida a uma busca conformacional, normalmente usando um nível de teoria de baixo custo computacional. Em seguida as estruturas redundantes e também de energias muito elevadas são removidas, sendo em seguida otimizadas em um nível de teoria mais elevado permitindo o fornecimento de energias e propriedades confiáveis. Na sequência, são aplicadas diversas ferramentas para extrair informações eletrônicas, estéricas e geométricas para usar como parâmetros de correlação e, por fim, esses dados são então ponderados de acordo com a energia dos confôrmeros. Por fim, são feitas as análises estatísticas e geração de modelos preditivos.



Esquema 1.21: Fluxo de trabalho da obtenção dos dados para a parametrização de reações.

2. Objetivos

O objetivo geral desse trabalho está centrado na parametrização de ligantes tipo salen em complexos de cobalto para a oxidação de modelos de lignina de modo a investigar a relação estrutura/propriedade destes complexos, permitindo encontrar catalisadores de melhor eficiência em termos de reatividade e seletividade.

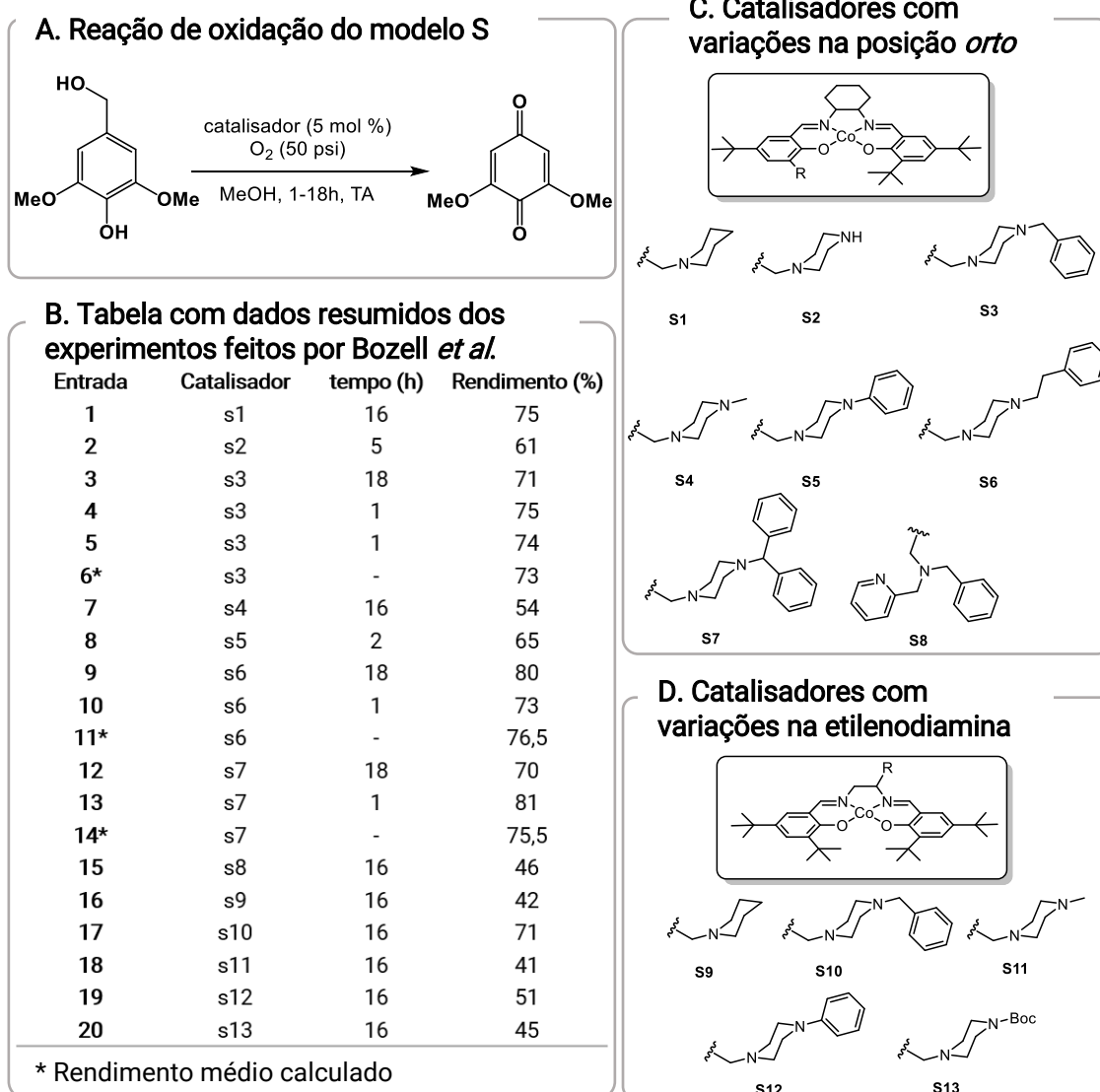
Os objetivos específicos são:

- ✓ Parametrizar os dados da literatura para usar como ponto de partida para o desenvolvimento de novos catalisadores.
- ✓ Executar o desenvolvimento sistemático dos ligantes e avaliar a conversão, rendimento e seletividade na reação de oxidação de modelos de lignina, seguido de sua parametrização.
- ✓ Explorar condições reacionais que se enquadrem melhor a aplicações em larga escala.

3. Resultados e discussão

3.1. Parametrização de dados da literatura

Para esse trabalho de parametrização, foram reunidos todos os dados comparáveis dos trabalhos desenvolvidos por Bozell e colaboradores²³⁻³¹, isso é, todas as reações feitas sob condições similares (atmosfera, pressão, temperatura, quantidade de catalisador, concentração e solvente iguais) e os catalisadores utilizados foram agrupados em espécies que continham variações estruturais na posição *orto* da parte aromática do catalisador e também em espécies que possuíam variações na ponte de etilenodiamina (**Esquema 3.1**). Devido à falta de informações mais detalhadas sobre a reação em alguns trabalhos (seletividade, conversão ou formação de subprodutos), utilizamos o rendimento médio das reações como resposta para fazer a parametrização. Vale ressaltar que, apesar da nomenclatura oficial sugerir a utilização da posição *orto* como sendo a posição do Carbono que possui o Oxigênio ligado ao Cobalto, neste trabalho a posição *orto* foi adotada como sendo a posição do Carbono 6 referente a esse Oxigênio, pois é sabido que, nesse tipo de ligante, a influência eletrônica do Oxigênio no centro metálico costuma ser mais forte do que a influência da imina.



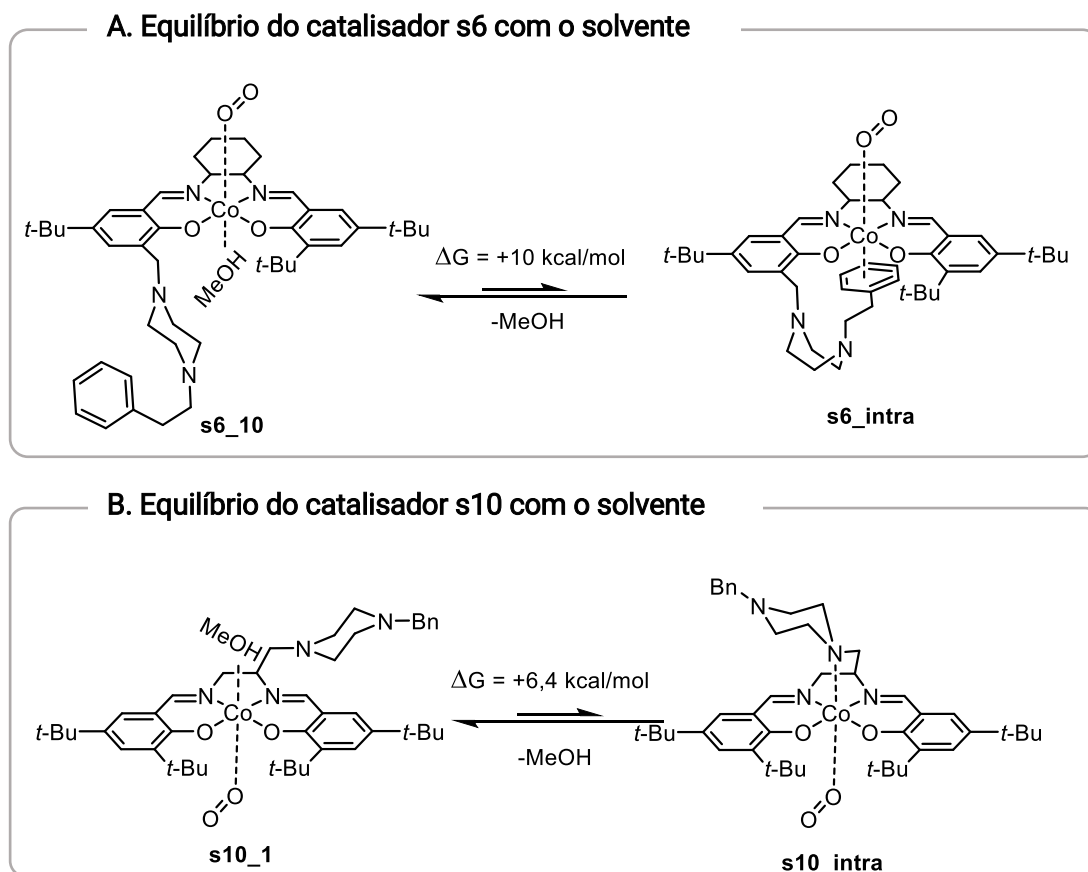
Esquema 3.1: Dados obtidos da literatura e catalisadores investigados

Devido aos dois grupos distintos de catalisadores apresentarem diferenças estruturais entre si que poderiam influenciar de maneiras diferentes a ativação do centro metálico, tivemos dificuldades em simplificar a representação do catalisador a fim de modelar com um custo computacional menor e a partir desses extrair informações com descritores, como no trabalho apresentado anteriormente⁴¹. Dessa forma, foi necessário a modelagem do sistema completo, sem nenhuma simplificação estrutural.

Foram feitas buscas conformacionais em todos os catalisadores utilizando o software *Macromodel*⁴² usando o campo de força OPLS_2005 sem

solventes, com um limite energético de estruturas de 5 kcal/mol e após separar em grupos por similaridade, os confôrmeros representativos de cada grupo foram selecionados para posterior otimização usando cálculos de mecânica quântica. Todos os cálculos de otimização subsequentes, incluindo frequência e análise NBO foram realizados no software *Gaussian16* versão B.01⁴³ e NBO6.0⁴⁴ utilizando a teoria do funcional da densidade (*Density Functional Theory*-DFT) no nível de teoria m06/def2svp⁴⁵.

Seguindo a sequência de passos apresentados no **Esquema 1.21**, a primeira parte do trabalho seria gerar as estruturas iniciais para extrair as informações, onde optamos por incluir a molécula de oxigênio juntamente com a molécula de metanol (solvente) complexadas nos sítios axiais do cobalto. Vale ressaltar que a literatura propõe interações internas das piperazinas presentes no ligante com o cobalto, a partir de cálculos DFT, ocasionando um aumento de estabilidade da espécie superóxido³⁰. Neste sentido, escolhemos dois sistemas modelo e, a partir das equações presentes no **Esquema 3.2**, buscamos avaliar a propensão das referidas interações intramoleculares considerando que esta interação levaria a descoordenação do metanol. A literatura sugere¹⁵ que o anel aromático presente na piperazina do catalisador S6 poderia interagir com o centro metálico para trazer estabilização do superóxido, porém o ambiente estérico nessa aproximação leva a um aumento de energia superior à estabilização que o próprio MeOH poderia fornecer (**Esquema 3.2A**). Também foi avaliada a complexação do nitrogênio da piperazina na etilenodiamina ao cobalto do catalisador s10. Ao otimizar essa estrutura e realizar o cálculo de energia, foi encontrado que o ganho energético nessa complexação interna também é superior a complexação do metanol no metal, indicando ser improvável que essa conformação seja relevante no nosso trabalho (**Esquema 3.2B**). Acreditamos que os dados apresentados no **Esquema 3.2** entram em discordância com os dados da literatura pois os mesmos não levaram em consideração que o MeOH poderia participar da complexação desse metal, com os cálculos sendo performados no vácuo.



Esquema 3.2: Equilíbrios dos catalisadores em suas conformações de menor energia com o Metanol

Após busca conformacional, otimização e seleção das estruturas estudadas, o próximo passo do *workflow* foi extrair os parâmetros moleculares das moléculas modeladas usando os descritores apropriados. Para esse trabalho, foram utilizados os descritores resumidos na **Tabela 3.1**, sendo eles nomeados como: moleculares (como dipolo); eletrônicos, incluindo dos átomos em torno do metal (como carga, energia de orbitais, densidade de spin, energia dos orbitais HOMO e LUMO); estéricos (na região de variação de ligantes e também na molécula como um todo), além do volume ocupado em torno do cobalto. Cada parâmetro foi extraído e separado em quatro grupos: média ponderada dos confôrmeros de um dado catalisador a partir da distribuição de Boltzmann (BOLTZ); valor máximo encontrado nos confôrmeros de cada catalisador (MAX); valor mínimo encontrado nos confôrmeros de cada catalisador (MIN) e; valor do confôrmero de menor energia de cada catalisador

(MC). Para facilitar o entendimento, os descritores serão referidos em conjunto com a devida distribuição adotada, por exemplo: a densidade de spin do cobalto no confômero de menor energia será retratada como Spin(Co)_{MC}.

Tabela 3.1 Parâmetros analisados

| A. Descritores utilizados na parametrização | |
|---|--|
| Descritor | Detalhes |
| Dipolo | Momento dipolar molecular |
| HOMO | Energia do orbital HOMO |
| LUMO | Energia do orbital LUMO |
| Ângulo | Ângulo AÊC entre os átomos genéricos A-E-G |
| Carga | Carga eletrônica de um dado átomo (Co, N ^x , O ^x) |
| LP,σ, π, LP*, σ*, π* | Energias dos orbitais NBO próximos ao centro metálico (LP: <i>Lone Pair</i> -Par de elétrons não-ligante) |
| Spin | Densidade de spin de um dado átomo (Co, N ^x , O ^x) |
| Spin ^F | Densidade de spin de um dado átomo (Co, N ^x , O ^x) normalizada pela soma dos spins dos átomos não hidrogenoides da molécula |
| L, B ^{min} e B ^{max} | Parâmetros Sterimol (L: comprimento do ligante, B ^{min} : largura mínima, B ^{max} : largura máxima) |
| BV ^r | Porcentagem de uma esfera ocupada por uma parte do catalisador em um determinado raio <i>r</i> |

B. Valores dos descritores obtidos a partir dos diferentes confômeros

| Distribuição | Detalhes |
|--------------|--|
| BOLTZ | Distribuição de Boltzmann: média ponderada dos descritores com base na energia dos diferentes confômeros de um mesmo catalisador |
| MAX | Maior valor do descritor dentre todos os confômeros da mesmo catalisador |
| MIN | Menor valor do descritor dentre todos os confômeros da mesmo catalisador |
| MC | Menor confômero: valor do descritor no confômero de menor energia de um dado catalisador |

As regiões/átomos que foram estudados para a obtenção dos descritores supracitados, com suas respectivas cores indicativas, podem ser visualizados na **Figura 3.1** abaixo:

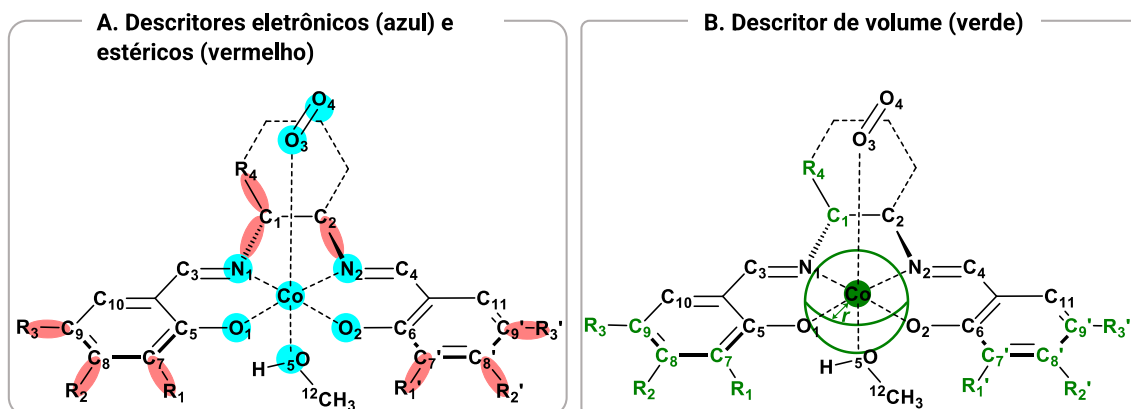


Figura 3.1: Regiões e átomos utilizados para a obtenção dos descritores

Antes de analisar todos os catalisadores simultaneamente, o conjunto de dados foi dividido em dois grupos para identificar possíveis tendências univariadas. O primeiro grupo (G1) é constituído dos catalisadores s1 a s8, que possuem substituição na posição *orto* em relação ao oxigênio (**Esquema 3.1C**) e o segundo grupo (G2) possui os catalisadores s9 a s13, que possuem a ponte de etilenodiamina substituída (**Esquema 3.1D**).

No G1, foi notado que há também uma correlação inversamente proporcional entre o menor valor da largura do ligante na posição *orto* ($L(\text{Orto})_{\text{MIN}}$) e o rendimento, mostrando que quanto maior a largura do ligante nessa posição, menor o rendimento obtido (**Figura 3.2**). É interessante notar que apesar da literatura discutir a influência positiva do aumento do volume para prevenir a desativação do catalisador³², nossa análise demonstra que este aumento quando muito exacerbado leva a uma inibição da atividade catalítica. Este fato pode ser interpretado devido ao efeito estérico causado pela piperazina

tão próxima ao centro reativo, atrapalhando a aproximação do substrato com o catalisador (como já indicado por Bozell e colaboradores³¹).

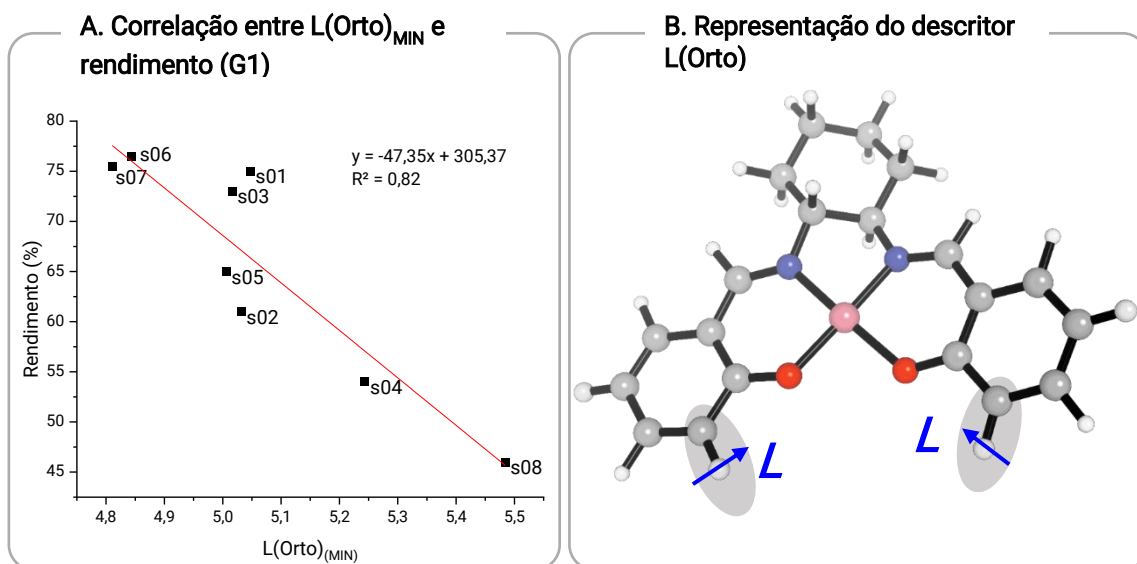


Figura 3.2: Correlação entre Rendimento e Largura do substituinte da posição orto

Curiosamente, é possível notar uma relação forte de colinearidade entre os parâmetros $\text{Spin}(N^1)_{\text{MAX}}$ versus $L(\text{Orto})_{\text{MIN}}$ (Figura 3.3A,B) indicando que o aumento de volume leva também a uma maior densidade de spin no nitrogênio ligado ao cobalto. É interessante notar como esses parâmetros eletrônico e estérico se intercorrelacionam, mostrando que, embora na literatura tenham sido feitas modificações estruturais focando efeitos estéricos relacionados a desativação, os efeitos eletrônicos acabam sendo afetados de maneira indireta e possuem grande participação nesse tipo de catálise. A interpretação desta intercorrelação pode ser entendida a partir do gráfico na Figura 3.3C,D, em que revela que o aumento do $L(\text{Orto})_{\text{MIN}}$ ocasiona uma pior sobreposição orbitalar entre o Co e O_2 , como pode ser verificado pela variação no ângulo Co-O-O, e com isso afetando a reatividade do intermediário superóxido.

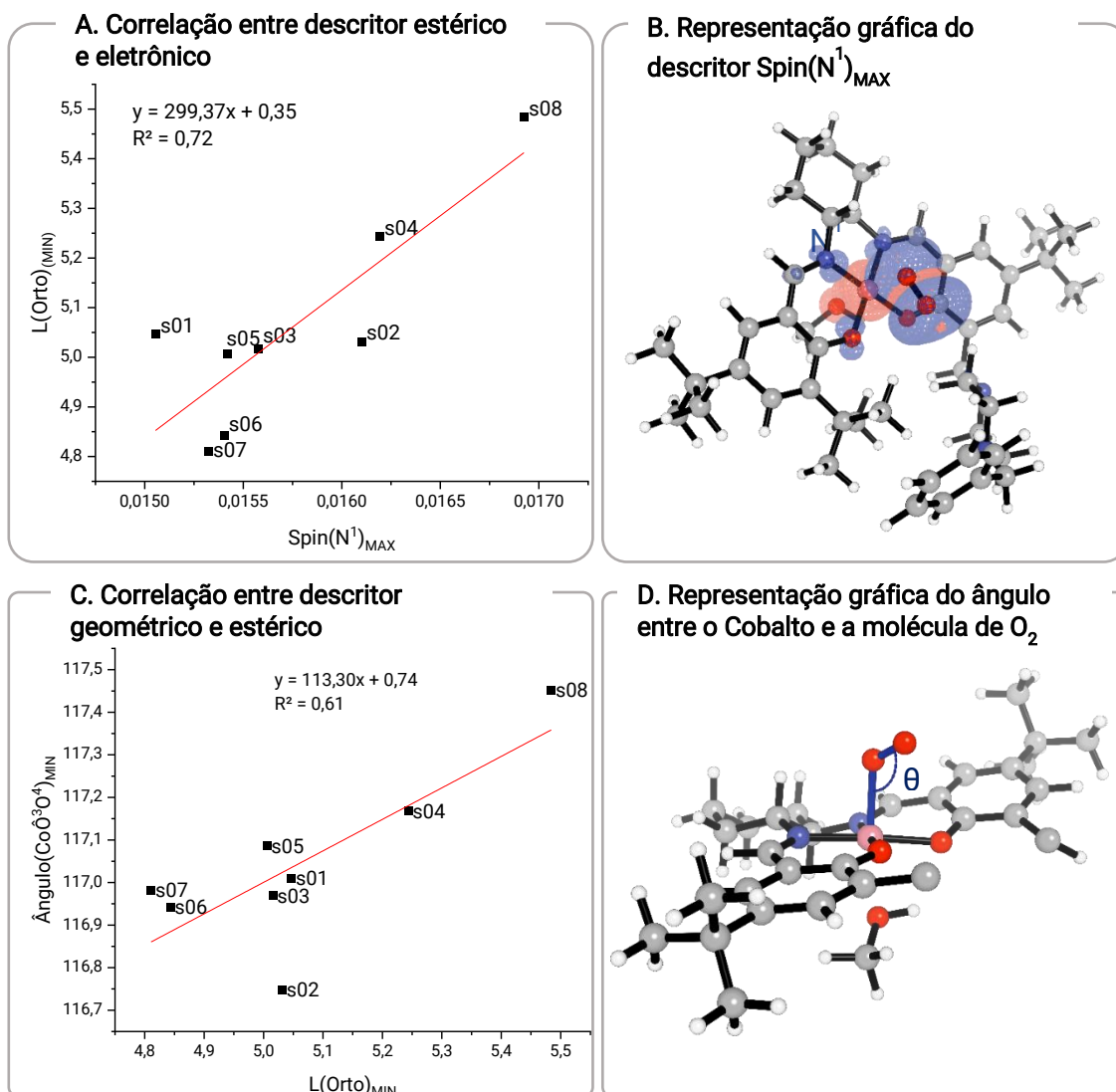


Figura 3.3 Correlação entre parâmetros estérico com eletrônico do G1

No G2 foi identificada uma influência inversa entre fator estérico e rendimento do que o encontrado no G1, pois quanto maior o comprimento do substituinte da etilenodiamina ($B^{\text{max}}(N^1-C^1)_{\text{MAX}}$) maior o rendimento obtido (Figura 3.4). Esse resultado nos indica que, na falta de um volume moderado como a ciclohexildiamina (presente no G1), esse aumento do tamanho pode ajudar na inibição de processos de desativação, descrito na literatura³².

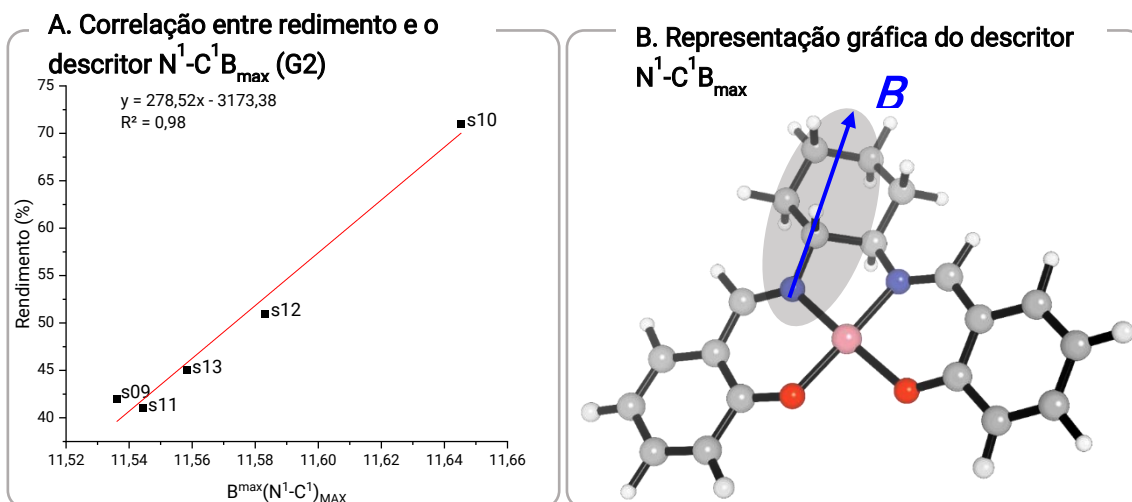
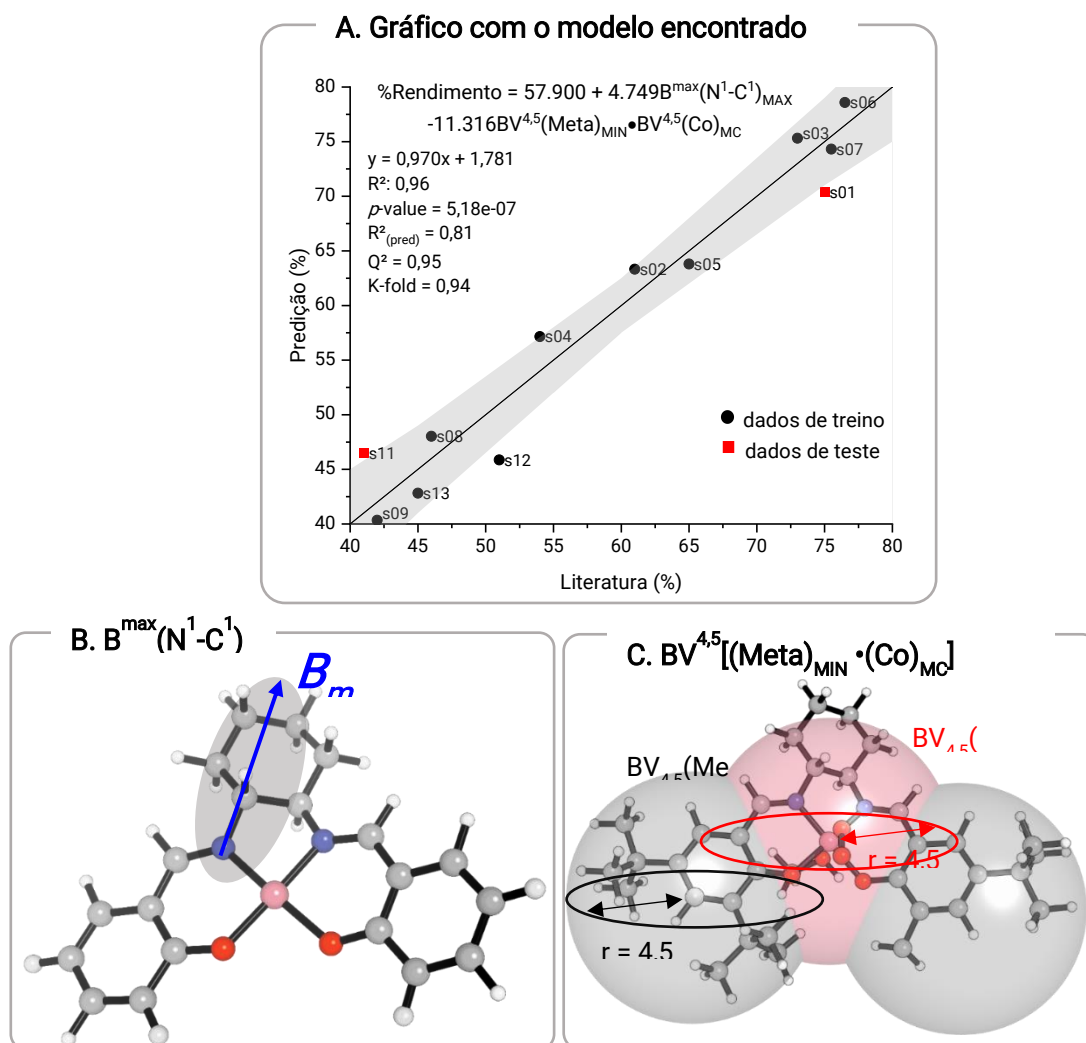


Figura 3.4: Correlação univariada entre parâmetro estérico com rendimento nos catalisadores do G2

Apesar de análises univariadas descreverem bem os dois grupos de catalisadores isoladamente, ao unir os grupos essas análises não foram o suficiente para chegar a um modelo estatisticamente satisfatório. Neste sentido, uma análise multivariada foi realizada utilizando o Matlab⁴⁶. O modelo preditivo que apresentou maior relevância estatística está apresentado no **Esquema 3.3** abaixo onde, utilizando somente parâmetros estéricos, foi possível chegar a um modelo com excelente correlação ($R^2 = 0,96$), com dois catalisadores para validação do modelo. O catalisador s10 não foi bem descrito pelo modelo e apresentou-se como um *outlier*, podendo este fato ser atribuído a alguma interação que não pôde ser captada na modelagem. É muito interessante notar que nesse modelo foi possível incorporar o termo de melhor correlação univariada com o G2 ($B^{max}(N^1-C^1)_{MAX}$) que descreve a variação do volume na posição da diamina, e um termo estérico de interação que está centrado na variação de volume no sítio reacional pois captura a porcentagem de uma esfera de raio 4,5 Å ocupada pelo ligante centrada nos carbonos envolvidos nas posições *meta* ($BV^{4,5}(Meta)_{MIN}$: C^8 , R^2 , $C^{8'}$ e $R^{2'}$) combinado com a porcentagem de uma esfera de raio 4,5 Å ocupada pelo ligante centrada no Cobalto ($BV^{4,5}(Co)_{MC}$). Enquanto o termo $BV^{4,5}(Meta)_{MIN}$ pode ser interpretado como um termo estérico relacionado unicamente a substituição na porção aromática, o

termo $BV^{4,5}(Co)_{MC}$ seria um termo híbrido que também seria capaz de enxergar a variação estérica da porção diamina e do anel aromático.



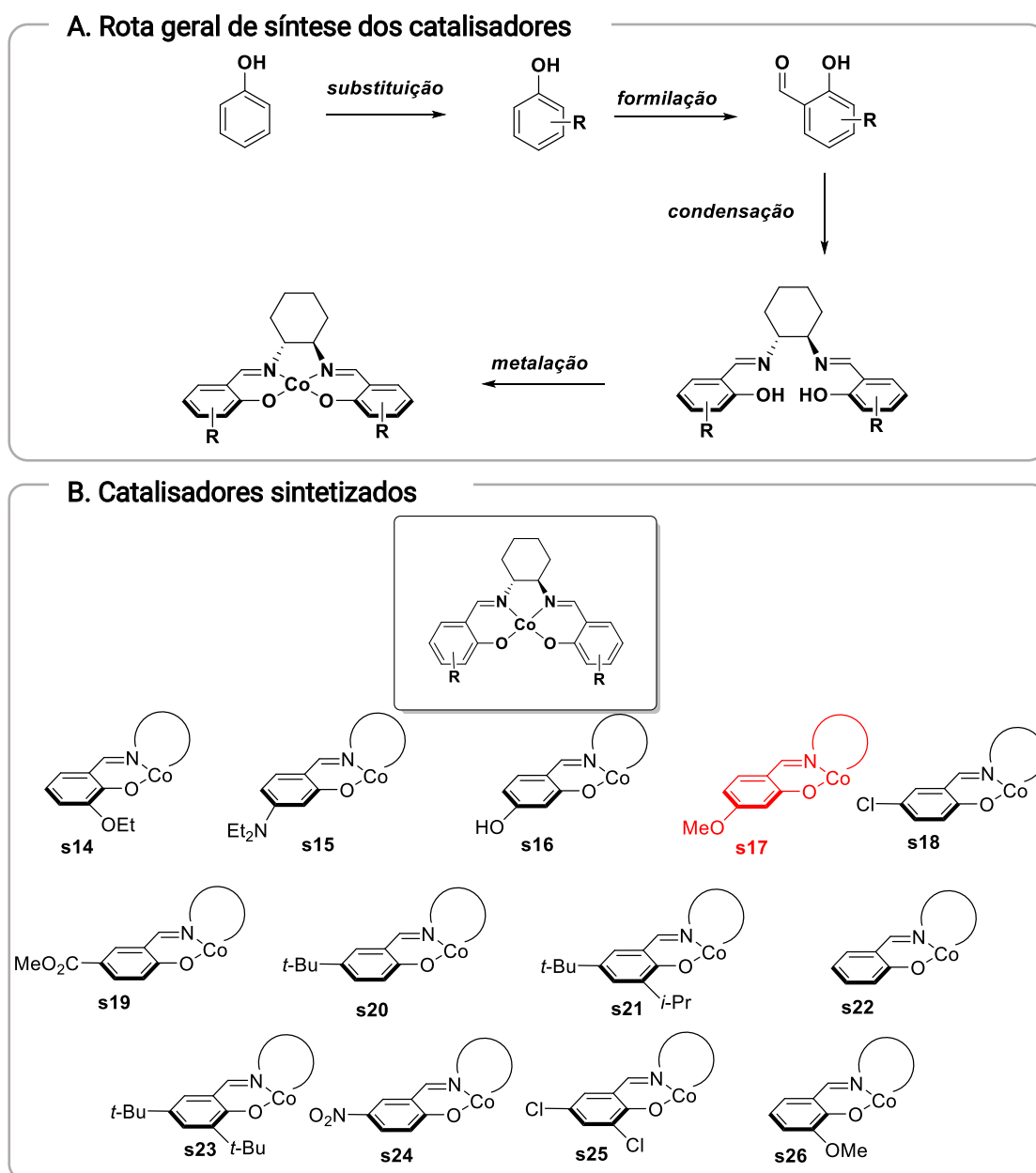
Esquema 3.3: Resultados da parametrização com modelo multivariado de predição de rendimento para os catalisadores da literatura e representações gráficas dos descritores do modelo encontrado em moléculas genéricas do catalisador.

Assim como nos modelos univariados por grupos, esse modelo multivariado indica que para a maximização do rendimento é necessário ter um ligante grande na ponte de diamina bem como a utilização de substituintes pouco volumosos no anel aromático. Essa exigência essencialmente estérica pode ser justificada pelo aumento da reatividade de acordo com a aproximação do substrato, como indica o trabalho (desenvolvido por Jacobsen e

colaboradores) que explica a enantiosseletividade desse tipo de catalisador, o qual apresenta diferentes aproximações do substrato com o centro reativo e substituições volumosas na posição *orto* diminuem a reatividade, enquanto a aproximação do substrato não sofre grande impedimento quando há a presença de grupos volumosos na ponte de etilenodiamina⁴⁷.

3.2. Síntese dos catalisadores

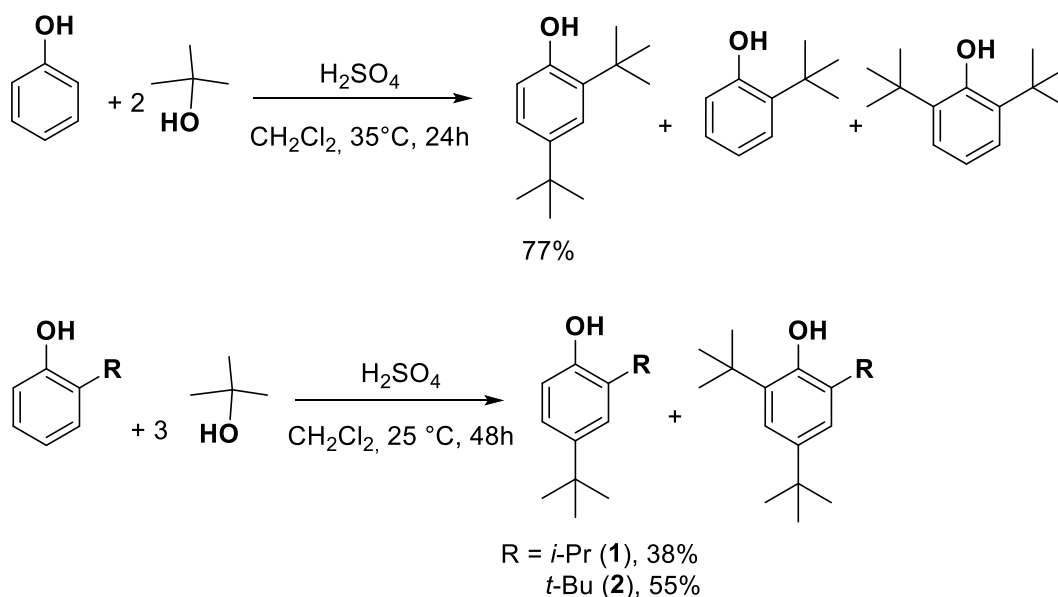
Com a informação obtida nos modelos da literatura a respeito do ambiente estérico na porção diamina, bem como na posição *orto*, foi dado início ao planejamento e síntese e aplicação de novos catalisadores do tipo Co(salen). Decidimos manter a ponte de ciclohexildiamina que fornece o ambiente estérico necessário para prevenir a desativação. Porém, planejamos novas e sistemáticas variações nas posições *orto*, *meta* e *para* da parte aromática do ligante, buscando principalmente auxiliar o entendimento de como a variação na parte eletrônica (com grupos retiradores e doadores de densidade eletrônica) poderia influenciar este processo catalítico. Conjuntamente, a variação do volume também foi feita nessas posições, com o intuito de provar que volumes elevados próximos ao oxigênio fenólico reduziria o rendimento da reação, de acordo com o obtido na primeira parte desse trabalho. A rota geral e os catalisadores sintetizados estão sumarizados no **Esquema 3.4** abaixo:



Esquema 3.4: Rota geral de síntese dos catalisadores utilizados (em vermelho, o catalisador que não foi possível confirmar a síntese).

A etapa de substituição aromática eletrofílica foi necessária para os catalisadores **s21** e **s23**, onde a obtenção dos produtos *para* substituídos a partir dos respectivos fenóis foi alcançada usando álcool *tert*-butílico em meio ácido e diclorometano. O ácido é responsável pela formação do carbocátion do álcool *tert*-butílico por desidratação, que posteriormente é atacado pelo fenol de maneira não seletiva, podendo levar a produtos mono-, di- ou mesmo tri-

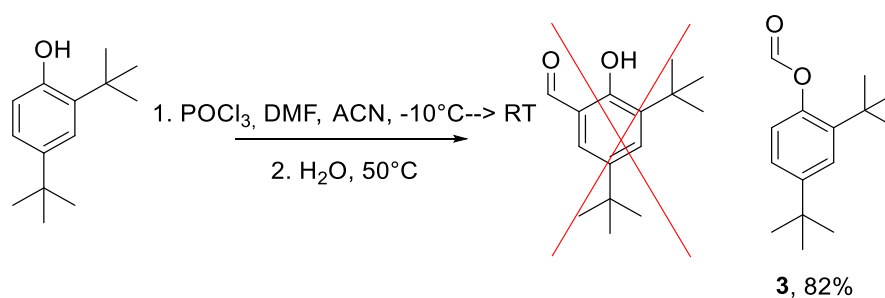
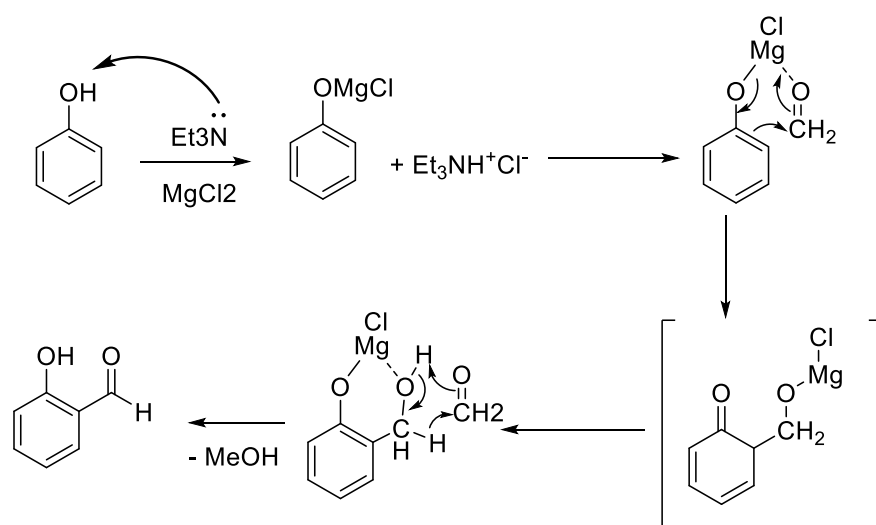
alquilados⁴⁸. Devido à dificuldade de separação dos produtos obtidos por cromatografia (em especial do mono-alquilado do di-alquilado quando utilizado 2 equivalentes do álcool, optou-se por utilizar 3 equivalentes do álcool para que majoritariamente fosse obtido produtos di- e tri-substituídos (**Esquema 3.5**), já que o tri-substituído não reage na etapa posterior e, dessa forma, seriam facilmente separados.



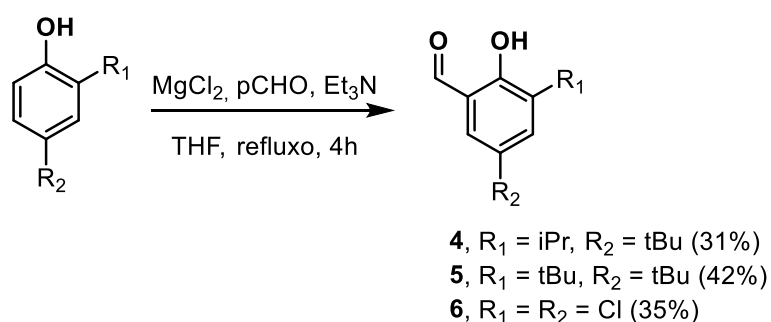
Esquema 3.5: Substituição aromática eletrofílica .

A etapa seguinte seria a de formilação do fenol, e foi necessária para a formação dos catalisadores **s21**, **s22**, **s24** e **s25**. Primeiramente o substrato foi submetido à condição de Vilsmeier-Haack, porém o produto de formilação não foi obtido, mas sim o formiato correspondente (**Esquema 3.6A**). Devido à falta de seletividade do método anterior, empregamos o método de orto-formilação descrito por Hofsløkken e Skattebøl, que envolve como etapa inicial a abstração do próton fenólico pela trietilamina, seguido da complexação no magnésio. O magnésio dirige o paraformaldeído deixando-o próximo da posição orto, permitindo a formilação seletiva nessa posição⁴⁹. Apesar do baixo rendimento obtido, a escala empregada permitiu o prosseguimento da síntese, e não nos preocupamos neste momento com a otimização das referidas reações.

A. Reação de Vilsmeier-Haack

B. Formilação *orto*-seletiva

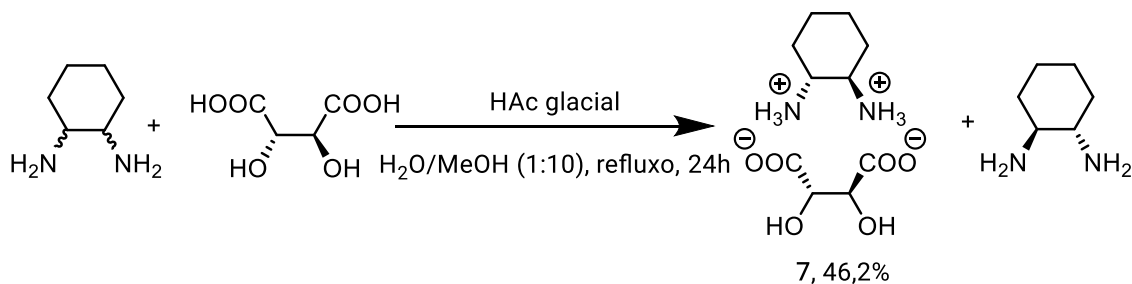
C. Produtos obtidos com a formilação



Esquema 3.6: Etapa de formilação.

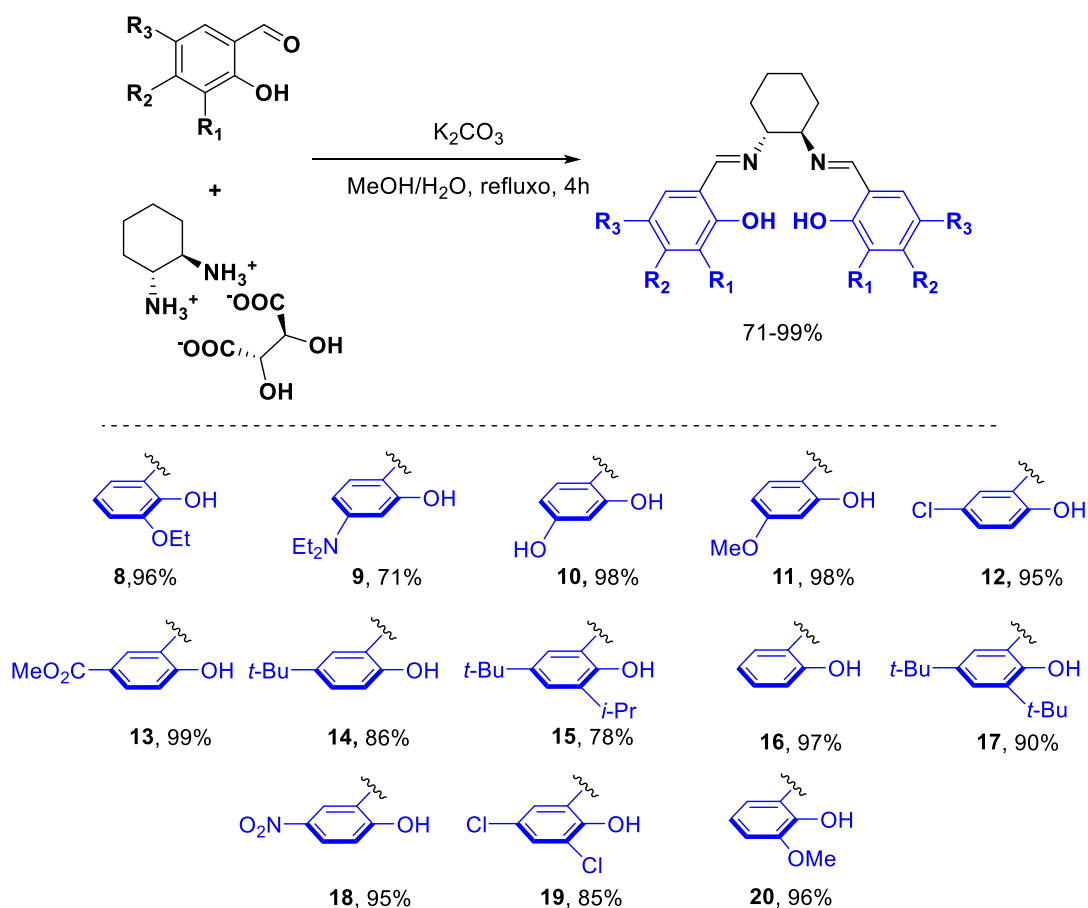
Para a etapa de condensação entre o salicilaldeído e a ciclohexildiamina, adotamos uma metodologia onde se utiliza o sal da diamina, por maior conveniência devido a estabilidade desse sal, podendo ser armazenado por vários meses sem ocorrer a degradação ou necessidade de tratamento. Para a

obtenção desse sal foi feita uma resolução cinética da diamina racêmica com o ácido L-(+)-tartárico (**Esquema 3.7**)⁵⁰.



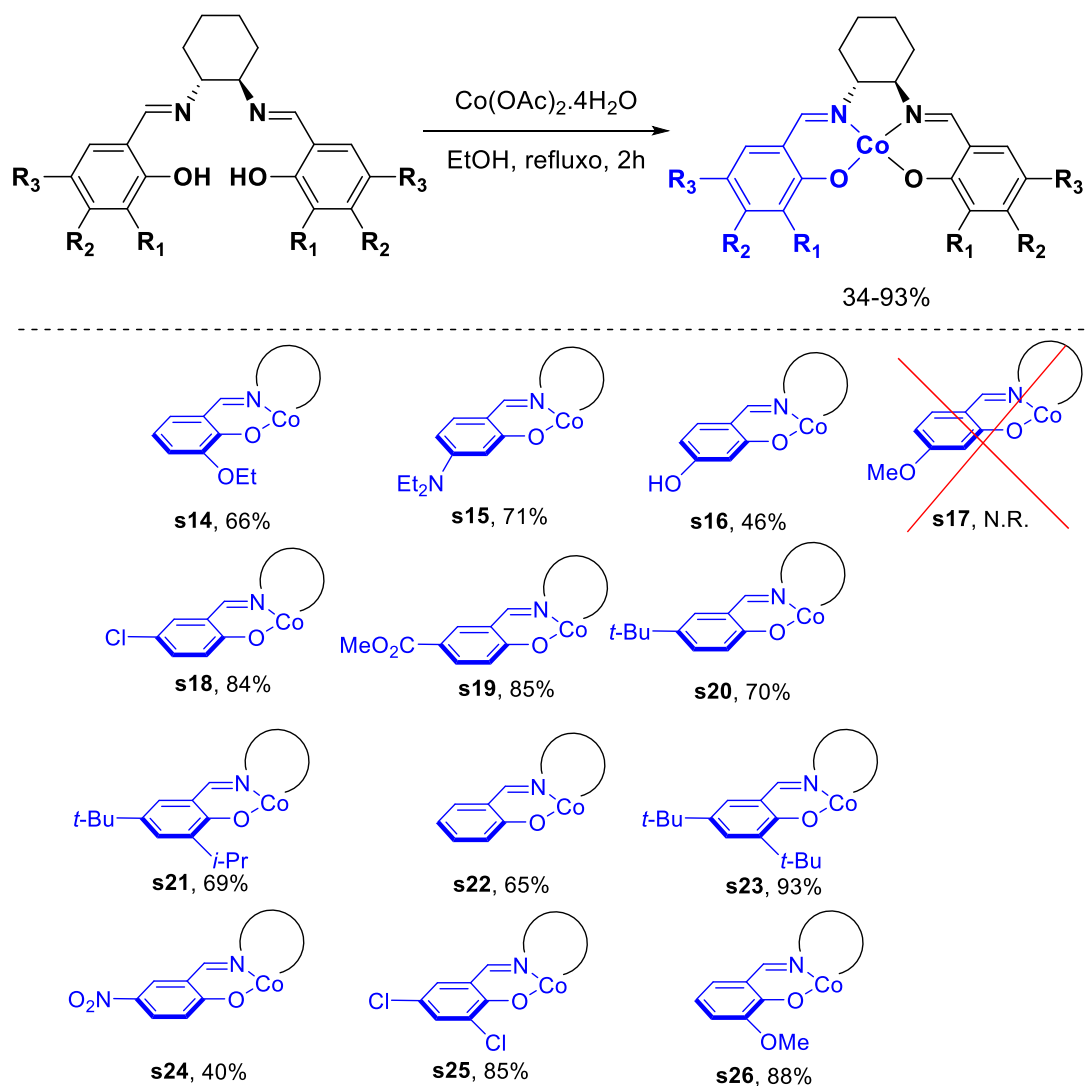
Esquema 3.7: Resolução cinética da ciclohexildiamina.

A etapa de condensação foi necessária para a síntese de todos os catalisadores, que consistiu na reação entre o salicilaldeído e a diamina **7** para a formação do ligante salen, uma reação simples e com excelentes rendimentos (**Esquema 3.8**)⁵¹.



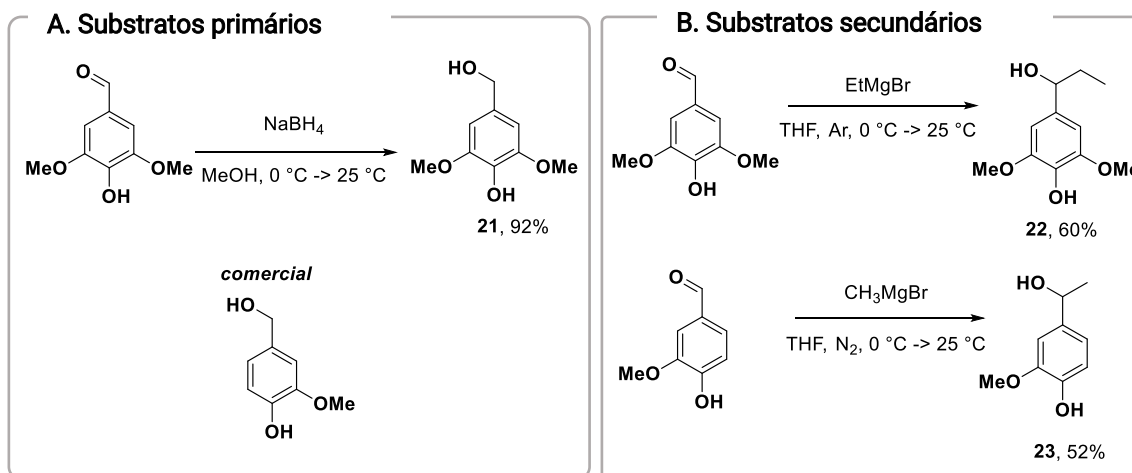
Esquema 3.8: Etapa de condensação.

Por fim, para a síntese do catalisador foi necessário submeter o ligante do tipo salen em uma etapa de metalação, usando um sal de cobalto(II) (Esquema 3.9)²⁸. A reação teve rendimentos de baixos a excelentes, o que experimentalmente esteve relacionado com a qualidade do acetato de cobalto empregado. Entretanto, apenas o catalisador **s17** não foi obtido, apesar de ter sido isolado um sólido de características similares aos outros complexos, exceto pela cor verde que destoava dos outros catalisadores (com cores variando de laranja a marrom, passando pelo vermelho). Usamos como confirmação estrutural nesta etapa a análise de massas de alta resolução.



Esquema 3.9: Etapa de metalação.

Na sequência, fizemos a síntese dos modelos da lignina (**Esquema 3.10**). Para o modelo S, partiu-se do aldeído correspondente e, usando boridreto de sódio, foi reduzido o aldeído ao álcool. Para o modelo G, foi necessário somente purificar o material obtido comercialmente. Para a obtenção dos álcoois secundários, foi utilizando o reagente de Grignard correspondente para adicionar à carbonila, gerando os álcoois secundários de interesse.

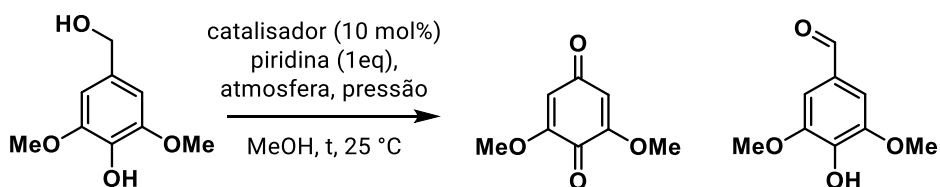


Esquema 3.10: Substratos utilizados nas reações de oxidação.

3.3. Reações de oxidação envolvendo os modelos de lignina

O uso de pressões de 4 atm ou superiores foram relatadas em todo o histórico das publicações desta química. Neste sentido, buscamos averiguar inicialmente a real necessidade de altas pressões para a sua execução, visando condições mais seguras, e de maior simplicidade. Procuramos inicialmente reproduzir a literatura com a utilização de reator sob alta pressão (4 atm, **Tabela 3.2**, entradas 1 e 3) e em paralelo, a reação usando 1 atm e um balão de fundo redondo de vidro (**Tabela 3.2**, entradas 2 e 4). Foi constatado que não houve perda significativa no rendimento a partir de mínimos ajustes do tempo reacional. Foi avaliada também a utilização de uma bexiga com ar atmosférico à pressão ambiente, e surpreendentemente a reação teve uma performance satisfatória. A disponibilidade de oxigênio parece influenciar somente no tempo de reação, porém, outros estudos seriam necessários para uma conclusão mais sólida.

Tabela 3.2: Reações preliminares.



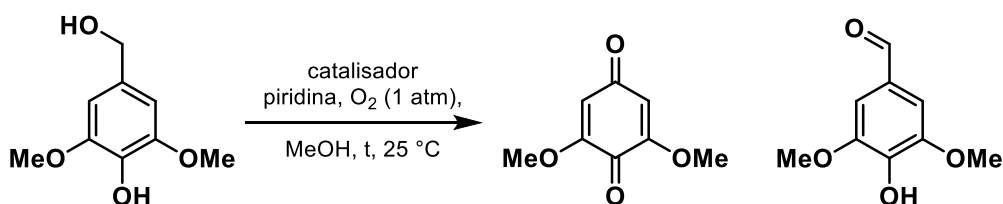
| Entrada | Catalisador (10 mol%) | Atmosfera | Pressão ²⁴ (atm) | Tempo (h) | Rendimento (%) |
|---------|-----------------------|----------------|-----------------------------|-----------|-----------------------|
| 1 | s23 | O ₂ | 4 | 0,66 | 92 ^a |
| 2 | s23 | O ₂ | 1 | 24 | 82 (91 ^b) |
| 3 | s21 | O ₂ | 4 | 1 | 92 |
| 4 | s21 | O ₂ | 1 | 24 | 78 |
| 5 | s23 | AR | 1 | 24 | 66 |

a. Resultado da literatura, rendimento por HPLC.

b. rendimento por GC-MS

Para poder comparar os diferentes catalisadores, do mais ativo para o menos ativo, buscou-se uma condição capaz de proporcionar tempo hábil para acompanhar a atividade catalítica inicial e a reação consolidada. Com isso, decidimos reduzir a quantidade de catalisador e também de piridina, visto que, ao utilizar as estequiometrias relatadas pela literatura (Tabela 3.3, entradas 1-3) enquanto os catalisadores **s14** e **s23** tiveram desempenho apenas satisfatório, **s18** em menos de 15 minutos levou a completa conversão do substrato ao produto esperado. A redução da carga catalítica de **s18** para 5 mol%, e uso de 0,5 equiv. de piridina mostrou a mais adequada para os nossos objetivos, levando a quase completa conversão do substrato ao produto apenas após 40 min (Tabela 3.3, entrada 5).

Tabela 3.3: Exploração de condições reacionais.



| Entrada | Cat. | Quant. (mol%) | Piridina (equiv.) | Tempo (min) | Rendimento ^a (%) | Conv. ^a (%) |
|---------|------|---------------|-------------------|-------------|-----------------------------|------------------------|
| 1 | s14 | 10 | 1.0 | 30 | 35 | 41 |
| 2 | s23 | 10 | 1.0 | 30 | 28 | 37 |
| 3 | s20 | 10 | 1.0 | 15 | 99 | >99 |
| 4 | s20 | 5 | 1.0 | 30 | 97 | 97 |
| 5 | s20 | 5 | 0.5 | 40 | 96 | 98 |
| 6 | s20 | 2.5 | 0.5 | 90 | 49 | 54 |
| 7 | s20 | 5 | 0.1 | 960 | 55 | 89 |

a. Obtido via GC-MS

Com as condições definidas, o substrato foi submetido à oxidação com todos os catalisadores sintetizados (**Figura 3.6A**). Foi medida a conversão do substrato no tempo de cinco minutos para medir a atividade inicial do catalisador. Nesse curto tempo de reação assumimos ser possível desprezar os possíveis efeitos de desativação catalítica⁵². Medimos também o rendimento e conversão em 30 minutos, podendo assim mensurar sua produtividade. O substrato foi submetido a testes tanto sem o uso da piridina (0,0 py) quanto usando 0,5 equivalentes de piridina (0,5 py) em relação ao substrato. Todas as reações foram acompanhadas por GC-MS para realizar a quantificação da conversão do material de partida bem como a formação do produto de interesse (benzoquinona), além de terem sido feitas em replicata (Tabelas 7.1 e 7.2 do apêndice), sendo os resultados apresentados no texto principal referentes a média aritmética.

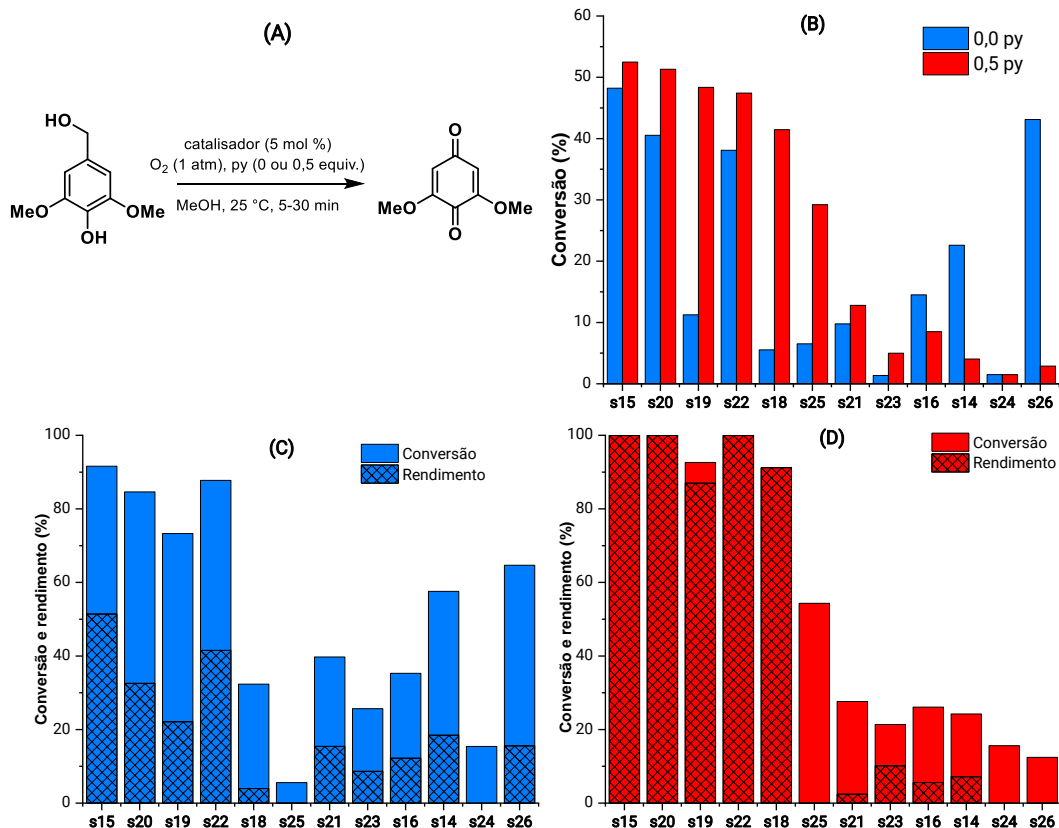


Figura 3.5: (A) Conversão do modelo S. (B) Conversão em 5 minutos com e sem piridina. (C) Rendimento e conversão em 30 minutos sem piridina. (D) Rendimento e conversão em 30 minutos com piridina.

Sem o uso da piridina, foi constatado três catalisadores com conversão em cinco minutos muito interessante: um com um forte grupo doador de densidade eletrônica na posição *meta* (dietilamina, catalisador **s15**), um com um grupo volumoso na posição *para* (*tert*-butil, catalisador **s20**) e um sem substituinte nenhum (catalisador **s22**) (Figura 3.5B). Quanto aos catalisadores que apresentaram uma baixa atividade inicial, é possível notar que substituintes retiradores de densidade eletrônica (**s18** e **s19**) e substituintes volumosos na posição *orto* (**s21** e **s23**) se destacaram. Com exceção dos catalisadores **s14** e **s26**, um aumento expressivo da atividade ocorreu com a introdução da 0,5 equivalentes da piridina (Figura 3.5B). Esses resultados indicam uma possível relação eletrônica com a atividade catalítica, onde um ajuste fino destas propriedades parece ter sido alcançado.

Por outro lado, uma situação de maior complexidade foi notada ao analisarmos os resultados de conversão e rendimento para trinta minutos (**Figura 3.5C,D**). Ao analisar o perfil relativo de conversão entre os catalisadores, nota-se que pouco se alteraram com relação a atividade inicial (**Figura 3.5B**) e após 30 minutos, indicando que a desativação do catalisador não é um fator preocupante para os catalisadores sintetizados, especialmente se considerar o tempo de reação empregado (**Figura 3.5C,D**). Devido à alta similaridade dos resultados de conversão em 5 minutos e em 30 minutos, a conversão em trinta minutos não foi modelada.

Obviamente, melhores conversões foram alcançadas em tempos superiores, e com o uso de piridina. Por outro lado, os rendimentos em trinta minutos foram fortemente impactados com o uso da piridina (**Figura 3.5C,D**), ocorrendo um expressivo aumento, em especial com o uso dos catalisadores **s15, s19, s20 e s22**. Enquanto o catalisador mais ativo (**s15**) apresenta conversão e rendimentos quantitativos quando é mediado por piridina, na ausência da piridina a conversão se mantém alta, porém a formação da benzoquinona cai pela metade. Esse resultado se repete para a maioria dos catalisadores, exceto os de volume estérico elevado (**s21 e s23**) e ou quando presentes um substituinte oxigênio ligado ao fenol (**s14 e s26**), onde a presença da piridina reduz a eficiência da reação. Por fim, vale notar que o catalisador com substituinte nitro na posição *para* (**s24**) não apresentou formação de produto.

Quanto a seletividade destes estudos, nos atentamos em tentar identificar os subprodutos de conversão diferentes da benzoquinona e, para a maioria dos casos, apenas o benzaldeído foi caracterizado via GC-MS. Para a grande maioria dos casos não houve um balanço de massas final, havendo inclusive a formação de produtos de polimerização não identificáveis por GC-MS, ou mesmo formação de outros produtos de oxidação do álcool benzílico, como é o caso de derivados do ácido benzóico.

3.4. Parametrização dos catalisadores sintetizados

Embora seja possível notar algumas tendências pontuais que influenciam a reação (como discutido anteriormente), uma análise mais aprofundada, em especial que leve em consideração a modulação que a piridina exerce sobre a reatividade do sistema, é desejável. Usando ferramentas estatísticas, procurou-se encontrar correlações com os dados obtidos experimentalmente em função de parâmetros moleculares teóricos com significância físico-química (como feito na primeira parte do trabalho).

Em termos de atividade catalítica, a literatura demonstra que a conversão se mostra a mais adequada como parâmetro de resposta, especialmente em tempos iniciais de reação por não levar em consideração possíveis efeitos de desativação catalítica⁵². Para nosso sistema, essa afirmação encontra respaldo primeiramente por estarmos utilizando um modelo da lignina bastante simples, que apresenta o álcool benzílico muito suscetível a reações de oxidação.

Achar uma correlação univariada envolvendo todos os dados obtidos experimentalmente não foi possível, mas, para facilitar a visualização dos efeitos envolvidos, os dados foram separados primeiramente em dois grupos: ausência de piridina (grupo A) e com o uso de piridina (grupo B). Nestas análises, os catalisadores **s25** sem o uso da piridina e **s26** com o uso da base, apresentaram-se como *outliers* e foram retirados da modelagem, bem como o catalisador **s24** de ambos os grupos. Uma característica importante a acrescentar desses catalisadores foi a ausência de formação do produto desejado (benzoquinona) e baixas conversões, o que poderia indicar uma mudança no regime catalítico desses sistemas, em comparação aos outros catalisadores.

No grupo A (na ausência de piridina), foi possível identificar que a atividade dos catalisadores tem uma razoável correlação com o a energia do orbital correspondente ao par de elétrons do oxigênio fenólico complexado no cobalto, onde quanto maior essa energia maior a atividade, indicando uma relação entre um fenolato mais rico em elétrons levando a uma maior conversão (**Figura 3.7A**). A interpretação para este fato pode estar associada a uma maior

estabilização da espécie superóxido, e conseqüentemente seu aumento de atividade, em conformidade com conclusões já discutidas na literatura^{24,32}.

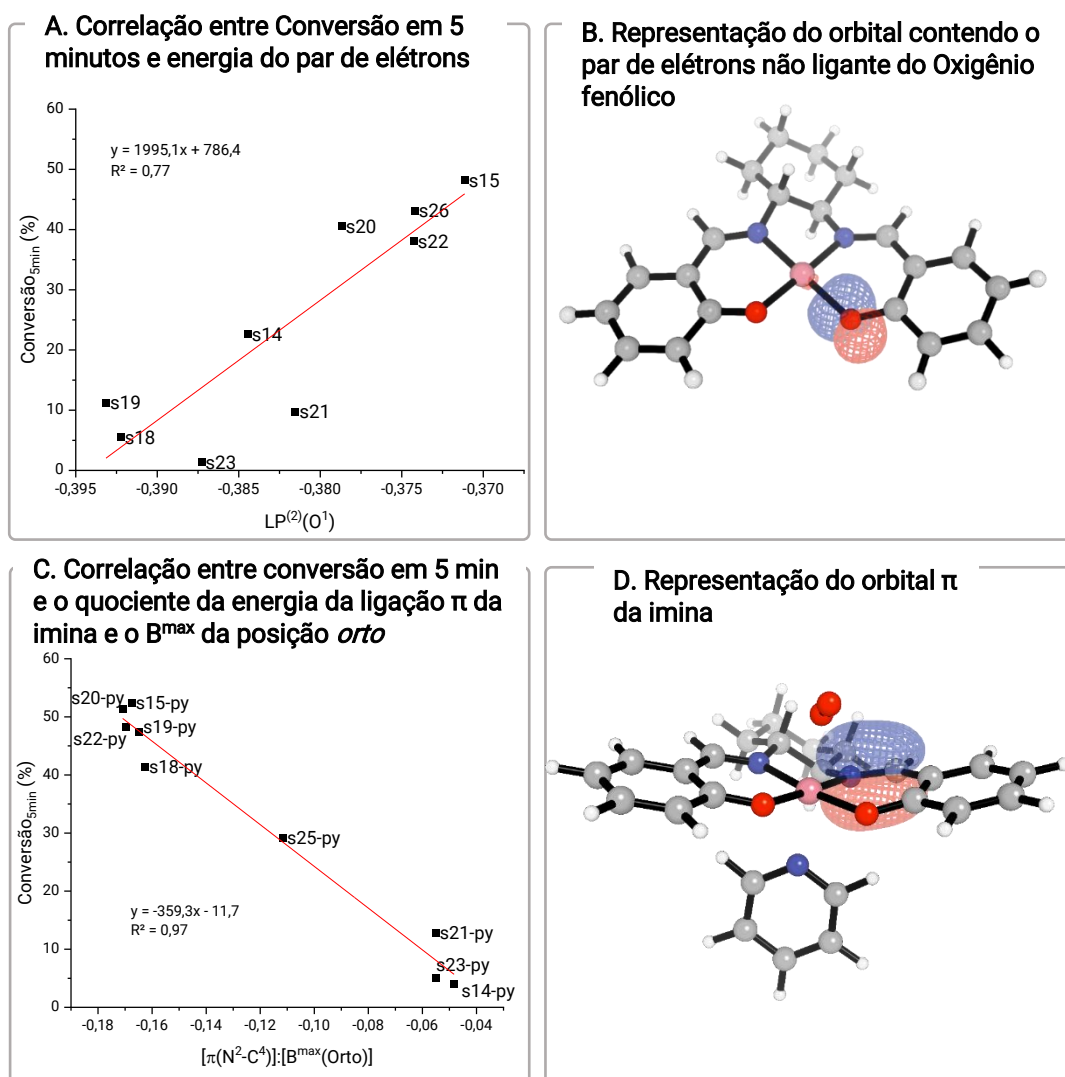


Figura 3.6: Correlações com a conversão em 5 minutos para os dois grupos de resultados

No grupo B, só foi possível encontrar uma correlação entre a conversão a partir de um termo de interação, portanto de maior complexidade interpretativa, que leva em consideração um termo eletrônico $\pi(N^2-C^4)$ (a energia do orbital π da imina) em função do comprimento máximo do substituinte em *orto* do anel aromático ($B^{\max}(\text{Orto})$) (Figura 3.7C). Neste caso, valores mais negativos de energia do orbital bem como valores menores de B^{\max} aumentam a conversão. Essa relação indica em parte o que já foi elucidado anteriormente. Com relação

aos dados da literatura, verificamos que quanto maior a contribuição estérica em *orto*, mais baixa é a atividade catalítica. Além disso, para uma energia mais negativa do orbital π da imina, é esperado que substituintes que doam densidade eletrônica para esse nitrogênio favoreçam esse cenário (como é o caso do catalisador extremamente ativo **s15**, que está exatamente em uma relação em *para* com respeito a essa imina). Portanto, esse termo eletrônico também está em conformidade com as características eletrônicas do substituinte fenólico anteriormente citadas. Concluímos, portanto, que este termo de interação expõe o fato de que a presença da piridina complexada ao centro metálico reduz parcialmente a necessidade do ajuste fino eletrônico para formação do superóxido fornecido pelos ligantes fenólicos anteriormente observado no Grupo A e, assim, dá espaço para que fatores estéricos também influenciem a conversão.

Buscamos uma correlação univariada também o rendimento em 30 minutos de cada grupo (**Figura 3.7**). No grupo A, foi encontrada uma correlação para o rendimento com o mesmo parâmetro utilizado para a conversão, no caso o oxigênio fenólico ($LP^{(2)}(O^1)$), portanto, de mesma interpretabilidade. Para o grupo B, a melhor correlação encontrada está fortemente enviesada pela não uniformidade e agrupamento de vários pontos, gerando de certa forma um termo classificador de reatividade. Foi constatado que o aumento da densidade de spin no oxigênio fenólico contribui para o aumento do rendimento da reação.

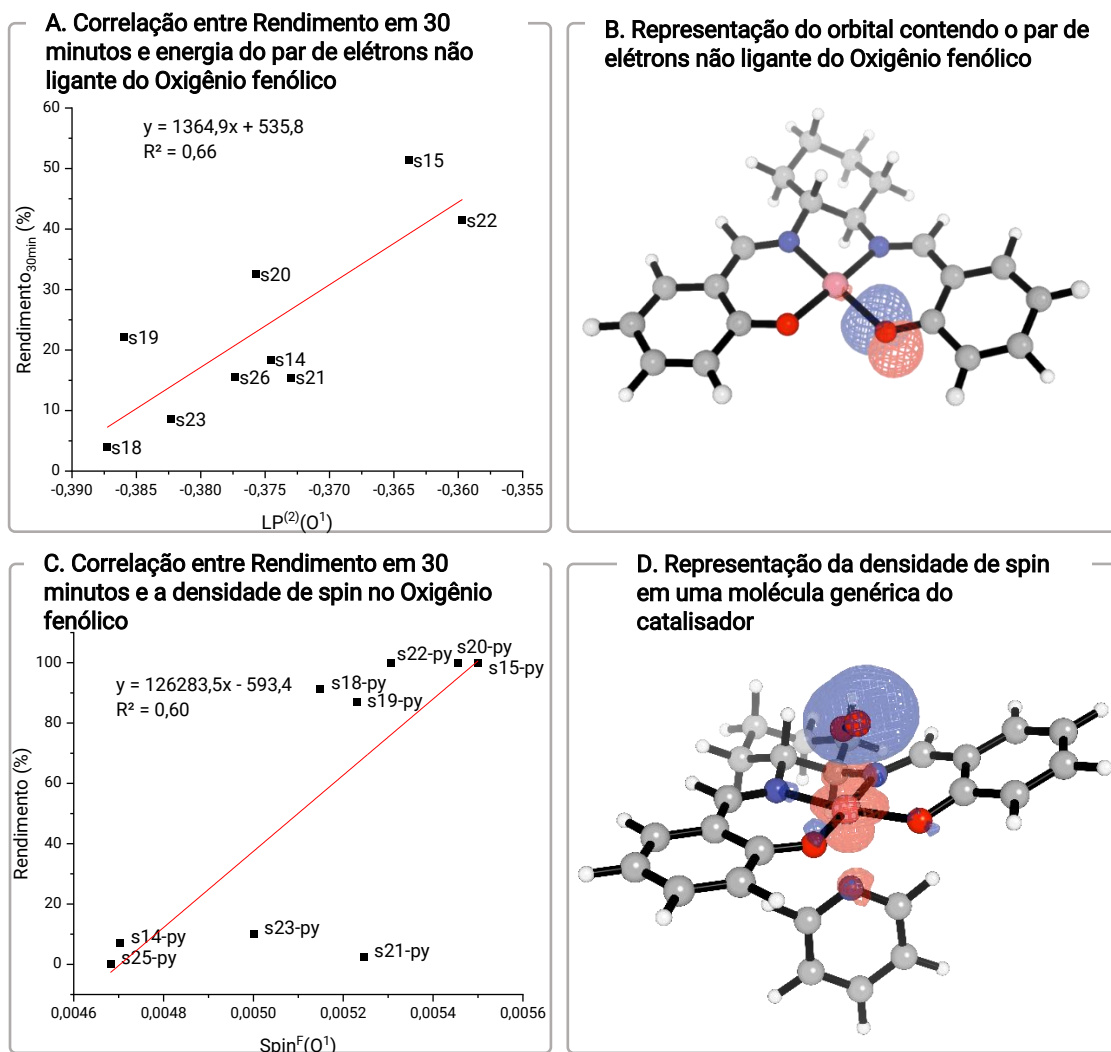
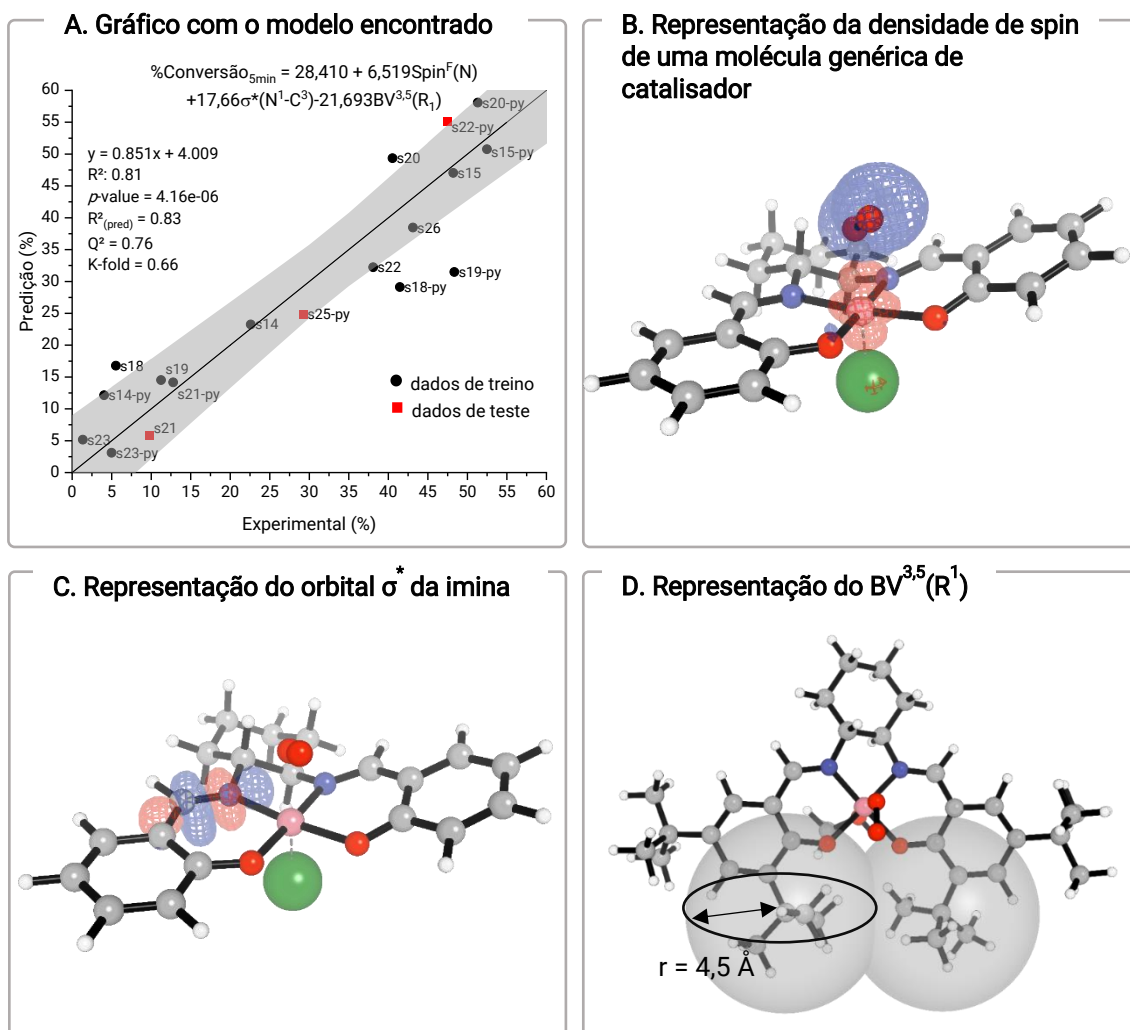


Figura 3.7: Correlações entre rendimentos de cada grupo.

Por fim, buscamos um modelo multivariado que pudesse combinar dados de conversão em cinco minutos dos Grupos A e B. O modelo de maior significância estatística (**Esquema 3.11A**) incluiu termos eletrônicos (densidade de spin normalizada do Nitrogênio (**Esquema 3.11B**)- $N_{\text{SPIN-FRAC}}$ e energia do orbital σ^* da imina (**Esquema 3.11C**)- $\sigma^*(N^1-C^3)$ e estérico (volume do catalisador ocupado por uma esfera de raio 3,5 Å ao redor do substituinte da posição R^1 (**Esquema 3.11D**)). O contribuinte estérico em uma posição relativa a substituição em *orto* mais uma vez se mostrou presente (bem como em quase todas as correlações), indicando a grande relevância desse termo, que por possuir o sinal negativo demonstra que quanto maior o ambiente estérico nessa posição, menor a conversão obtida.



Esquema 3.11: Resultados da parametrização com modelo multivariado de predição de rendimento para os catalisadores sintetizados (a esfera verde representando a molécula de base ou solvente coordenado).

Quanto a parte eletrônica do modelo, a interpretação direta desses descritores não foi tão simples. A análise da matriz de intercorrelação entre os dados eletrônicos mostram que a $Spin^F(N)$ possui uma forte correlação com a densidade de spin normalizada do Cobalto ($Spin^F(Co)$) (Figura 3.8A). É possível supor que este termo esteja fortemente correlacionado com o caráter radicalar dos oxigênios da molécula de superóxido, como representado na parte A da Figura 3.6. Podemos afirmar que este caráter é importante para a reatividade radicalar do complexo, sendo suscetível a variações de acordo com alteração da densidade eletrônica proporcionada pelos ligantes fenólicos. Além disso,

podemos também afirmar pelo sinal positivo no modelo, que quanto maior este caráter radicalar, maior a atividade do catalisador.

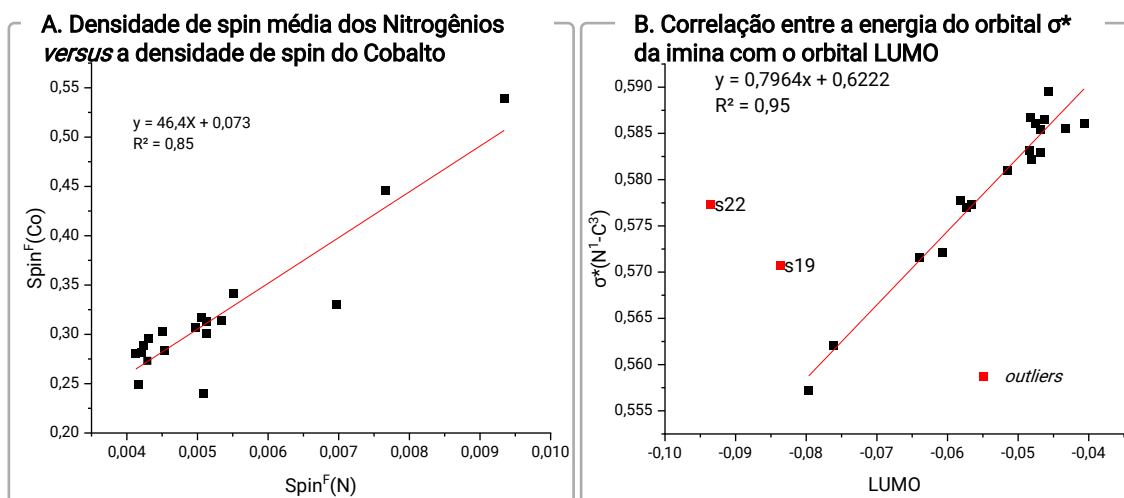


Figura 3.8: Intercorrelações entre os descritores do modelo encontrado com descritores quimicamente compreensíveis.

Já o orbital $\sigma^*(N^1-C^3)$ da imina apresenta uma excelente correlação com a energia do orbital LUMO do complexo (**Figura 3.8B**), representado na **Figura 3.9**. Este orbital parece ser majoritariamente composto pelo orbital dx^2-dy^2 do cobalto, que é o orbital que tem a maior interação entre os pares de elétrons dos oxigênios e nitrogênios do salen e, portanto, diretamente afetado pela variação da densidade eletrônica. Podemos afirmar, portanto, que um aumento da densidade eletrônica leva a um aumento de energia destes orbitais, e conseqüentemente o aumento da reatividade, conforme discutido em modelos anteriores.

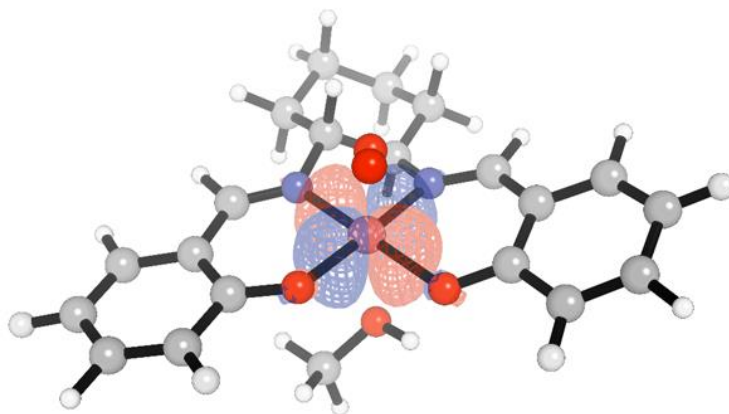
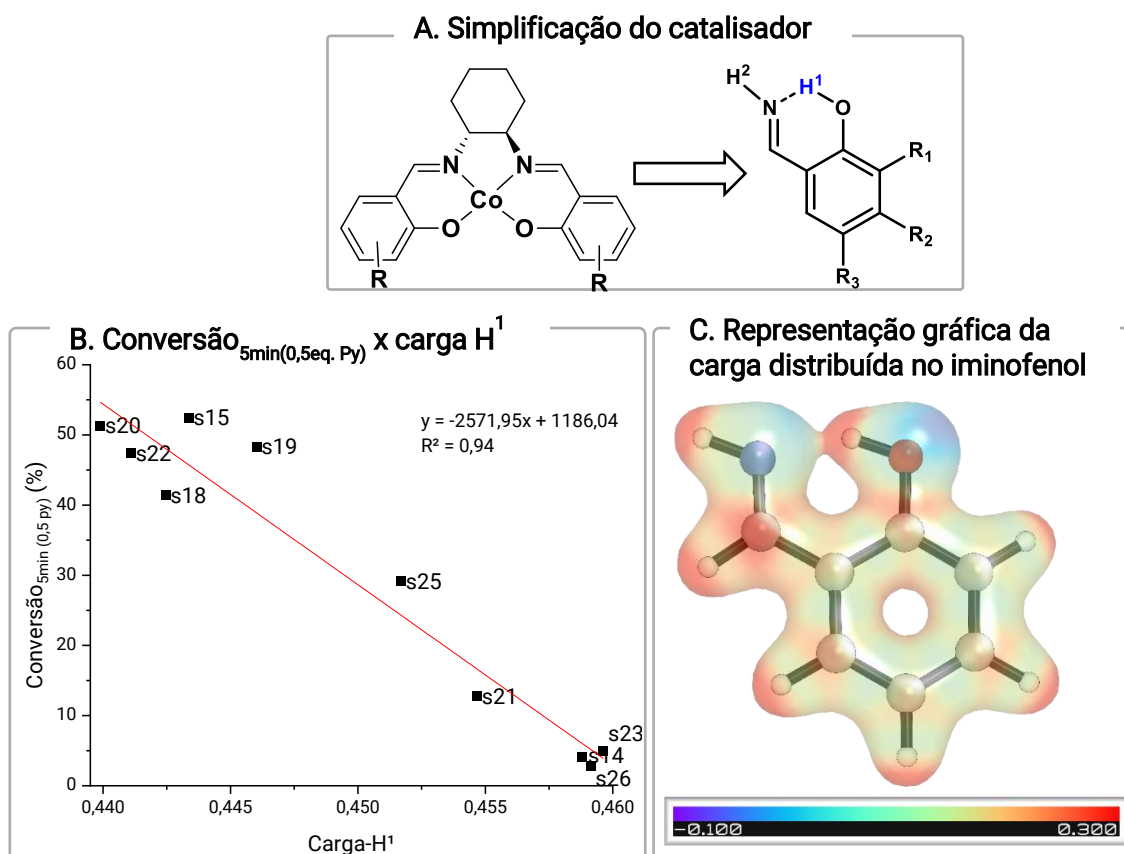


Figura 3.9: Representação do orbital LUMO de uma molécula genérica de catalisador

Por fim, um modelo multivariado para o rendimento em 30 minutos também foi explorado. Porém, nenhum que tivesse significância estatística foi obtido. Atribuímos este fato novamente a não uniformidade dos pontos em função do rendimento, com regiões muito agrupadas com baixo e alto rendimento.

3.5. Parametrização dos catalisadores sintetizados-Modelo reduzido

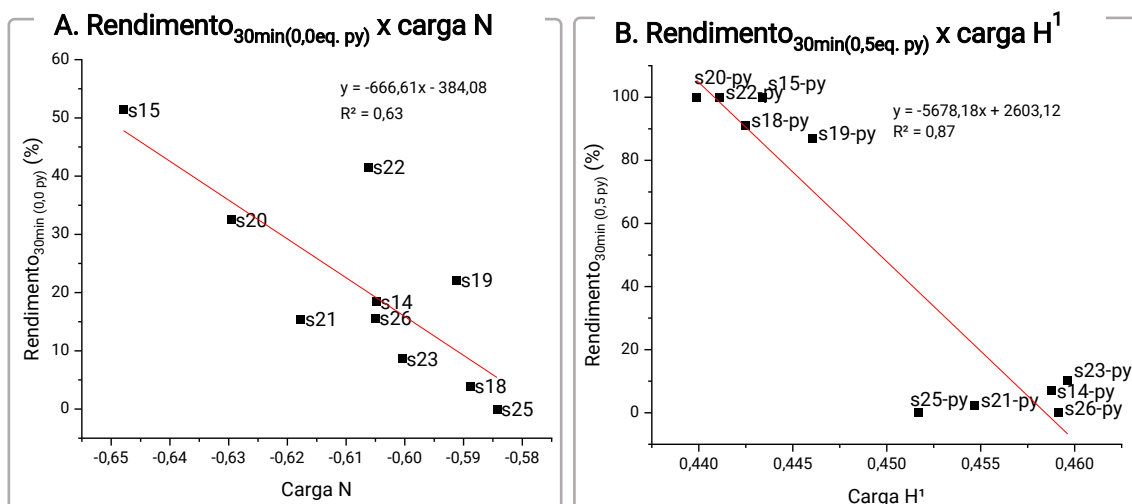
Buscando simplificar o sistema catalítico estudado, como prova de conceito investigamos também a parametrização de apenas uma parte do catalisador. Essa estrutura reduzida seria capaz de descrever o sistema de maneira simplificada, conseqüentemente com um menor custo computacional sem prejudicar consideravelmente as informações que poderiam ser extraídas. A partir dessa abordagem, teríamos uma plataforma mais eficiente para que fosse possível executar um *virtual screening* para o desenvolvimento de novos catalisadores. Neste sentido, consideramos o uso de unidades mínimas iminofenólicas, envolvendo uma ligação de hidrogênio intramolecular, conforme representado no **Esquema 3.12A**.



Esquema 3.12: Modelagem do grupo B usando uma estrutura simplificada do catalisador

Com o modelo reduzido, foi possível uma correlação univariada com o grupo B. Dos diversos descritores calculados, foi encontrada uma correlação univariada entre a carga do hidrogênio fenólico (H¹) e a conversão em cinco minutos de reação na presença de 0,5 equivalente de piridina, mostrando mais uma vez a relevância da parte eletrônica na reatividade. Na estrutura simplificada proposta, o H¹ possui o papel de mimetizar a influência que o anel aromático possui sobre o cobalto, pois tanto o metal quanto esse hidrogênio estão ligados ao oxigênio e, por ligação de hidrogênio ao nitrogênio. A correlação apresentada no **Esquema 3.12** mostra que quanto mais positivo o H¹ maior a conversão do substrato estudado. Esta tendência segue a reatividade em função da densidade eletrônica anteriormente elucidada. A modelagem com a estrutura reduzida utilizando a conversão em 5 minutos sem a presença de piridina não retornou resultados estatisticamente significativos.

Ao modelarmos os dados referentes ao rendimento da reação, foi possível encontrar correlações envolvendo cargas atômicas, tanto para o grupo A quanto grupo B (**Esquema 3.13**). No grupo A, é possível inferir que ao reduzir a carga do nitrogênio da imina é possível alcançar maiores rendimentos, levando a conclusão que grupos doadores de densidade eletrônica tornam esse nitrogênio mais negativo em carga, conseqüentemente uma capacidade maior de estabilização do centro metálico por doação de densidade eletrônica (favorecendo a atividade do superóxido). No grupo B, foi possível achar uma correlação para o rendimento com o mesmo parâmetro utilizado na correlação com a conversão, sendo, portanto, de interpretabilidade similar.

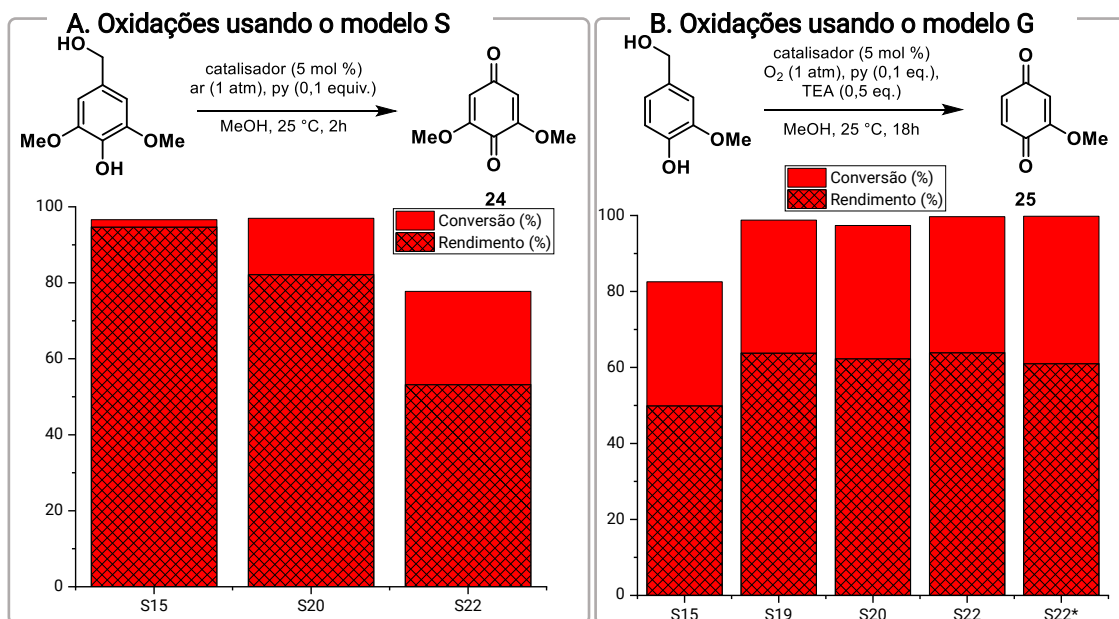


Esquema 3.13: Correlações univariadas entre rendimento e carga.

3.6. Otimização da reação

Como tivemos mais de um catalisador com excelente atividade, procurou-se otimizar a reação usando ar atmosférico e somente 0,1 equivalente de piridina (**Esquema 3.14A**). Nessas condições apresentadas, obtivemos conversões e rendimentos excelentes para o modelo S. Esses resultados mostram um ganho expressivo de sustentabilidade e segurança da reação, onde anteriormente era feito utilizando 10 mol% de catalisador, 1,0 equivalente de piridina e sob atmosfera de 4 atm de Oxigênio²⁴.

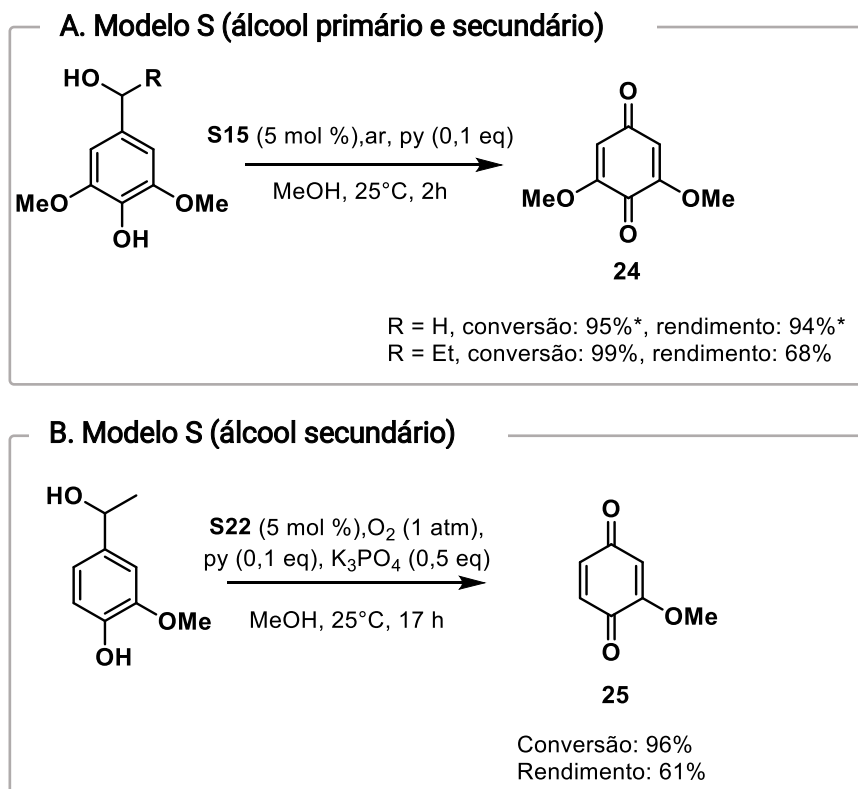
Em seguida, buscamos a mesma eficiência em um substrato mais desativado. Na literatura, foi mostrado a dependência do uso de 1,0 equivalente de base volumosa para se obter rendimentos em torno de 50%. Mesmo utilizando metade da quantidade de catalisador e base, foi possível obter conversões excelentes com rendimentos satisfatórios (**Esquema 3.14B**) usando uma combinação de base volumosa (TEA) com base coordenante (piridina). Em busca de uma química cada vez mais sustentável, foi possível substituir o uso de uma base orgânica de considerável toxicidade por uma base inorgânica (K_3PO_4) sem queda na conversão e rendimento, deixando a reação muito mais atrativa para ser escalonada⁵³. Atribuímos que essa troca foi possível devido ao K_3PO_4 possuir o pKa na faixa intermediária de basicidade mostrada no trabalho de Bozell e colaboradores²⁷.



Esquema 3.14: Reações otimizadas com diferentes catalisadores para os modelos S e G. * K_3PO_4 no lugar de trietilamina (TEA).

Por fim, os melhores catalisadores foram submetidos a condições otimizadas com substratos contendo álcoois primários e secundários e em todos os casos a conversão se manteve excelente. No modelo mais ativado, o álcool primário apresentou rendimento elevado, porém com o álcool secundário correspondente não foi possível obter o mesmo rendimento expressivo, além de

não ter sido possível identificar a formação de subprodutos (**Esquema 3.15A**). No modelo menos ativado, o álcool primário e secundário performaram de maneira muito similar, utilizando a base inorgânica para a desprotonação do fenol (**Esquema 3.15B**).



Esquema 3.15: Oxidações sob condições otimizadas. *K₃PO₄ no lugar de py

Da mesma maneira que foi substituída a TEA pelo K₃PO₄ sem a perda de eficiência catalítica, foi observado que a substituição da piridina pela mesma base inorgânica também não mostrou queda na qualidade da oxidação, tornando esse sistema catalítico extremamente atraente. Essa substituição ter levado ao aumento do rendimento da benzoquinona (produto principal) pode ser atribuído ao fato do aldeído (subproduto), ao ser desprotonado, torna-se mais suscetível a sofrer a oxidação, pois estará como fenolato^{24,27}, e o subproduto sendo utilizado para a formação do produto principal eleva a seletividade da reação.

4. Conclusão

No presente trabalho foi possível sintetizar catalisadores para desenvolver a parametrização da reação de oxidação de modelos de lignina, utilizando também dados disponíveis na literatura, de modo a entender de maneira mais completa os fatores que levam ao aumento da atividade catalítica. Foi possível entender melhor como as modificações eletrônicas são fundamentais para o aumento da atividade catalítica e o quanto questões estéricas levam a inibição da atividade catalítica. Conseguimos uma melhora na seletividade, condições mais brandas e redução na quantidade de reagentes. Apesar de serem resultados preliminares, as condições encontradas na otimização mostram que a reação se provou robusta e ainda passíveis de melhoramentos.

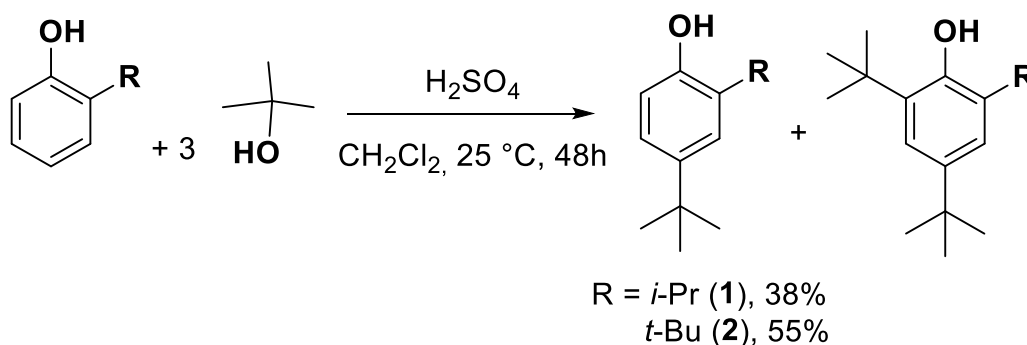
Como perspectivas temos a intenção de aumentar a biblioteca de ligantes, com catalisadores que tenham as propriedades necessárias para maximizar conversão e rendimento da reação e incluir esses dados na parametrização e, com mais entradas, aumentar a acurácia do modelo. Também temos interesse em testar o melhor catalisador em modelos mais complexos, como dímeros e também em ligninas pouco processadas, além de imobilizar o catalisador a fim de recuperá-lo trazer mais sustentabilidade para essa metodologia.

5. Procedimento experimental

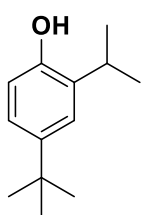
5.1. Materiais e métodos

As pesagens foram realizadas em balança analítica eletrônica marca Mettler Toledo, modelo MS204S. Os solventes e reagentes foram tratados quando necessário de acordo com a literatura⁵⁴. Os reagentes, quando não sintetizados, foram obtidos comercialmente através das empresas fornecedoras: Sigma-Aldrich, Merck, Fluka, Acros etc. As reações foram acompanhadas por análises de cromatografia em camada delgada (CCD) utilizando placas de alumínio Merck DC Kieselgel 60 (230-400 mesh); revestidas com sílica tratada fluorescente e reveladas sob luz UV (254 nm) e em vanilina ou solução de permanganato de potássio. As purificações dos compostos sintetizados foram feitas por cromatografia *flash*, utilizando sílica gel 60 Å, 70-230 mesh Aldrich Co. Os solventes orgânicos foram evaporados sob pressão reduzida em um evaporador rotatório da Büchi. Espectros de RMN de ¹H (400 MHz) e ¹³C (101 MHz) foram obtidos em espectrômetro da Bruker modelo Advance 400 e os espectros de RMN de ¹H (60 MHz) foram obtidos em espectrômetro da Nanalysis modelo NMReady, as análises foram realizadas empregando D₂O, DMSO-*d*₆ ou CDCl₃ como solvente, utilizando tetrametilsilano (TMS) como referência, sendo os deslocamentos químicos dados em ppm e as constantes de acoplamento (J) em Hertz (Hz). Abreviações utilizadas para anotar a multiplicidade dos sinais: s = singleto; d = duplete; t = tripleto; q = quadruplete; dd = duplo duplete; m = multiplete; hept = hepteto; as = singleto aparente.

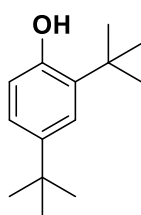
5.2. Procedimento representativo para etapa de substituição aromática eletrofílica⁵⁵.



Em um balão de 100 mL, foram adicionados 40 mL de CH₂Cl₂, 20 mmol do fenol correspondente, 65 mmol do álcool terc-butílico e em seguida adicionado lentamente sob agitação constante 1,5 mL de H₂SO₄. Após 48 horas, foi feita a lavagem da reação utilizando uma mistura CH₂Cl₂/água e a fase orgânica foi seca utilizando Na₂SO₄ e concentrada em um evaporador rotatório.

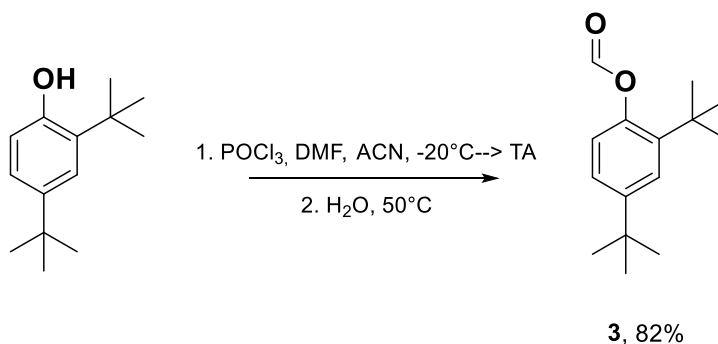


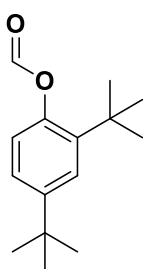
4-(terc-butil)-2-isopropilfenol (1)⁵⁶: Foi obtido um óleo amarelado com cerca de 38% de rendimento (1,035 g; 5,382 mmol), rendimento aproximado obtido pela proporção dos sinais aromáticos no espectro de RMN. **Rf** = 0,6 (Hexano 100%) **¹H RMN (60 MHz, CDCl₃)** δ 11,62 (s, 1H); 9,85 (s, 1H); 7,59 (d, *J* = 2,5 Hz, 1H); 7,33 (d, *J* = 2,4 Hz, 1H); 3,43 (s, 1H); 1,42 (s, 9H); 1,32 (s, 6H).



2,4-di-terc-butilfenol (2)⁵⁷: Foi obtido um óleo amarelado com cerca de 55% de rendimento (1,050 g; 113,5 mmol). **Rf** = 0,6 (Hexano 100%). **¹H RMN (400 MHz, CDCl₃)** δ 7,30 (d, *J* = 2,4 Hz, 1H); 7,07 (dd, *J* = 8,3, 2,4 Hz, 1H); 6,59 (dd, *J* = 8,3, 1,0 Hz, 1H); 4,75 (s, 1H); 1,42 (s, 9H); 1,29 (s, 9H).

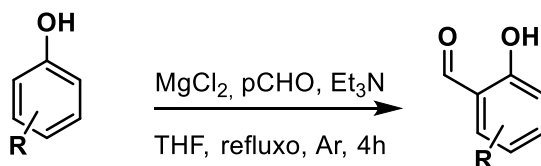
5.3. Procedimento Representativo para a Reação de Formilação de Vilsmeier-Haack





2,4-di-*tert*-butilfenil formiato (3)⁵⁸: Em um balão de 25 mL, foi adicionado o DMF anidro (760 μ L; 9,81 mmol) e 5 mL de ACN anidra. Ao longo de 20 minutos, foi adicionado o POCl₃ (781 μ L; 8,35 mmol) durante 1 hora, mantendo a temperatura abaixo de 25 °C. Após a adição, o sistema foi resfriado a -20 °C para a adição de uma solução do fenol (1,5 g; 7,3 mmol) em 5 mL de ACN. Após a adição, a agitação foi mantida por 2 h a -15 °C e mais 1 h a 30 °C. Por fim, a reação foi finalizada com a adição de água e aquecida a 50 °C para degradar os reagentes. O conteúdo do balão foi concentrado em um evaporador rotatório e em seguida o restante foi extraído com acetato de etila, seco com Na₂SO₄ e purificado por cromatografia *flash*, obtendo um óleo incolor com rendimento de 82% (960,2 mg; 192,1 mmol). R_f = 0,2 (Hexano/AcOEt 9,5:0,5). ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃) δ 8,21 (s, 1H); 7,28 (s, 1H); 7,09 (d, *J* = 8,2 Hz, 1H); 6,76 (d, *J* = 8,2 Hz, 1H); 1,22 (s, 9H); 1,17 (s, 9H). ¹³C RMN (101 MHz, CDCl₃) δ 160,4; 148,9; 146,4; 140,3; 124,5; 124,0; 122,3; 31,5; 30,3.

5.4. Procedimento Representativo para a Reação de Etapa de formilação

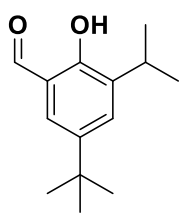


R = 2-*i*Pr-4-*t*Bu (**4**), 31%

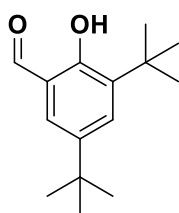
2,4-di-*t*Bu (**5**), 42%

2,4-di-Cl (**6**), 70% (2x)

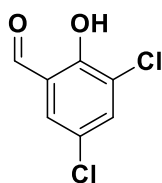
Em um balão duas bocas contendo 15 mL de THF, foi adicionado o fenol correspondente (5,0 mmol), MgCl₂ (10 mmol) e paraformaldeído (15 mmol) e mantido sob agitação e atmosfera inerte de argônio. Em seguida foi adicionado trietilamina (1,5 mL; 10 mmol) gota a gota e a solução passou a ter uma coloração esverdeada. O sistema foi mantido sob leve refluxo por 4 horas. Após esse tempo, a reação foi finalizada com a adição de uma solução saturada de NH₄Cl e levada a um funil de separação, a fase orgânica foi seca com Na₂SO₄, concentrada em um evaporador rotatório e purificada por cromatografia *flash* (Hexano/AcOEt 9,5:0,5).



5-(*tert*-butil)-2-hidroxi-3-isopropilbenzaldeído (4)⁵⁹: Foi obtido um sólido branco com rendimento de 31% (0,893 g; 68,3 mmol). *R_f* = 0,5 (Hexano/AcOEt 9:1). ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃) δ 9,78 (s, 1H); 7,63 (d, *J* = 2,0 Hz, 1H); 7,58 (d, *J* = 2,0 Hz, 1H); 5,78 (s, 1H); 3,02 (sept, *J* = 6,8 Hz, 1H); 1,38 (s, 9H); 1,25 (d, *J* = 6,8 Hz, 6H). ¹³C RMN (101 MHz, CDCl₃) δ 191,9; 157,6; 136,4; 134,3; 129,2; 127,5; 126,1; 34,7; 29,6; 26,8; 22,6.

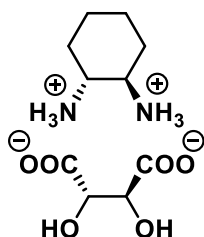
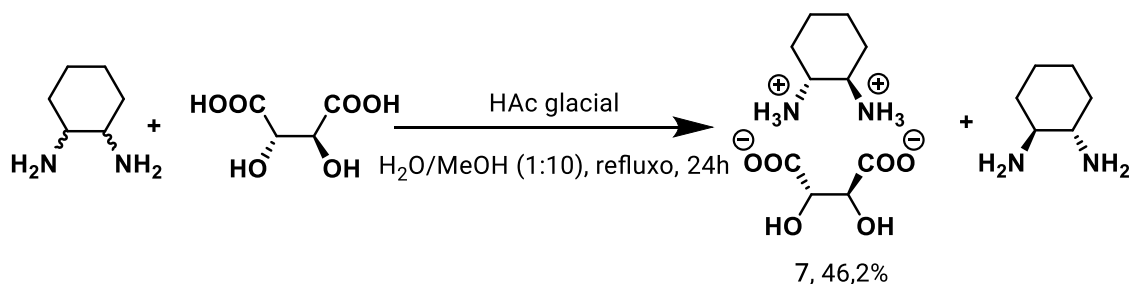


3,5-di-*tert*-butil-2-hidroxi-benzaldeído (5)⁶⁰: Foi obtido um óleo incolor com rendimento de 42% (0,9913g; 98,4 mmol). *R_f* = 0,6 (Hexano/AcOEt 9:1).



3,5-dicloro-2-hidroxi-benzaldeído (6)⁶¹: Após a concentração no evaporador rotatório, foi submetido novamente às mesmas condições reacionais a fim de aumentar o rendimento. Foi obtido um sólido levemente amarelo com rendimento somado de 70% (0,815 g; 133,7 mmol). *R_f* = 0,6 (Hexano/AcOEt 9:1). ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃) δ 11,31 (s, 1H); 9,79 (s, 1H); 7,55 (d, *J* = 2,5 Hz, 1H); 7,43 (d, *J* = 2,5 Hz, 1H). ¹³C RMN (101 MHz, CDCl₃) δ 195,1; 155,9; 136,5; 131,1; 124,7; 123,4; 121,4.

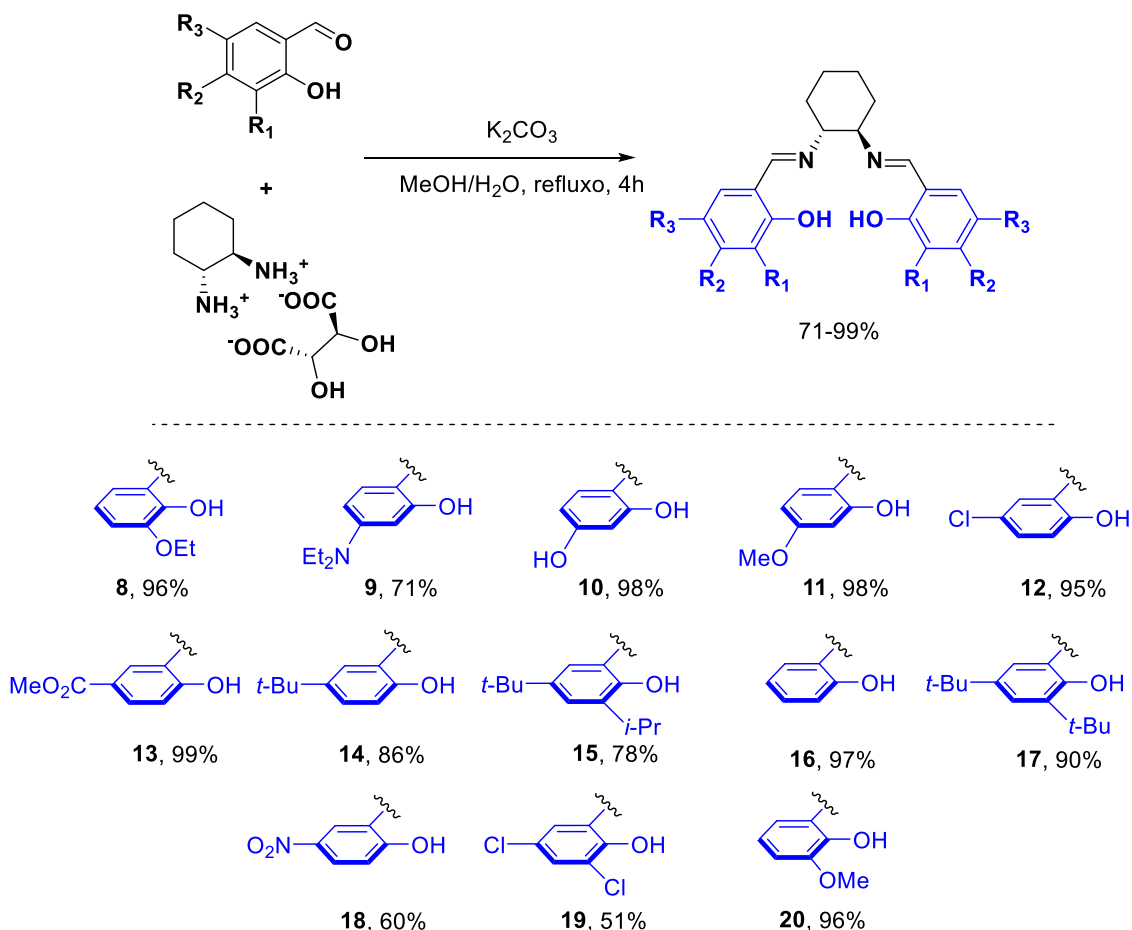
5.5. Resolução cinética



L-Tartarato de (1*R*,2*R*)-(+)-1,2-diaminociclohexano (7)⁵⁰: Em um balão de 2 bocas, com um condensador de refluxo, funil de adição e barra magnética, ciclohexildiamina (5,71 g; 50,0 mmol) foi dissolvida numa mistura de água (10 mL) e metanol (80 mL).

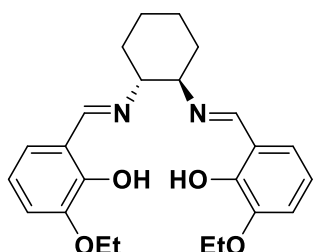
Em seguida foi adicionado lentamente o ácido acético glacial (3,72 mL; 3,90 g; 65,0 mmol) ao balão de duas bocas, seguido de uma solução do L-(+)-ácido tartárico (3,755 g; 25,0 mmol) em metanol (15 mL) e por fim o funil de adição foi rinsado com 5 mL de metanol. A mistura foi mantida sob agitação em refluxo durante 24h. Após este período a mistura reacional foi filtrada e lavada com metanol, obtendo-se um sólido cinza. Rendimento: 46,2% (de 50% possível). ^1H RMN (400 MHz, D_2O) δ 4,35 (s, 2H); 3,43-3,33 (m, 2H); 2,17 (dd, $J = 11,3; 3,0$ Hz; 2H); 1,90-1,78 (m, 2H); 1,54 (qd, $J = 9,8; 3,0$ Hz, 2H); 1,44-1,31 (m, 2H). ^{13}C RMN (101 MHz, D_2O) δ 178,5; 73,8; 52,1; 29,3; 22,8. $[\alpha]_{\text{D}}^{20} +10,70^\circ$ (c 0,935, H_2O).

5.6. Procedimento Representativo para a Etapa de condensação



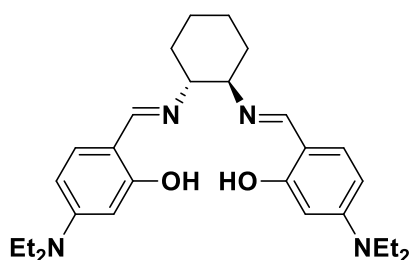
A diamina (0,317 g; 1,20 mmol) e o K_2CO_3 (0,166 mg; 1,20 mmol) foram dissolvidos em água (0,8 mL). Em seguida foi adicionado o metanol (20 mL) e solução foi aquecida e mantida sob refluxo. Em seguida, uma solução do salicilaldeído correspondente (2,4 mmol) em metanol (3 mL) foi adicionada

lentamente ao balão contendo a diamina. A mistura foi refluxada por 2 horas e em seguida a solução foi concentrada em um evaporador rotatório e extraída com acetato de etila (3 x 15 mL) e água (50 mL).



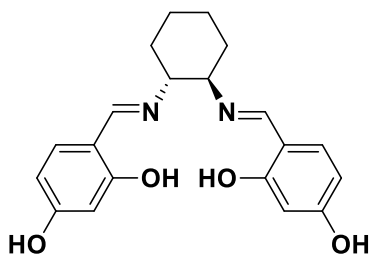
6,6'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)bis(azaneililideno))bis(metanoililideno))bis(2-etóxfenol) (8)⁶²: Foi obtido um sólido amarelo com 96% de rendimento (0,402 g; 394 mmol). *R_f* = 0,7 (Hexano/AcOEt 6:4). ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃) δ 13,86

(s, 2H); 8,16 (s, 2H); 6,78 (dd, *J* = 7,8, 1,6 Hz, 2H); 6,70 (dd, *J* = 7,8, 1,6 Hz, 2H); 6,63 (t, *J* = 7,8 Hz, 2H); 3,99 (q, *J* = 7,0 Hz, 4H); 3,28-3,16 (m, 2H); 1,91-1,81 (m, 2H); 1,82-1,75 (m, 2H); 1,65-1,56 (m, 2H); 1,44-1,36 (m, 8H), ¹³C RMN (101 MHz, CDCl₃) δ 164,7; 151,6; 147,5; 123,1; 118,4; 117,8; 114,9; 77,3; 72,4; 64,2; 33,0; 24,0; 14,9.



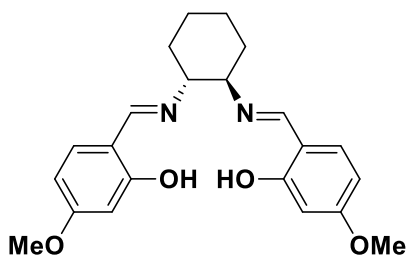
6,6'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)bis(azaneililideno))bis(metanoililideno))bis(3-(dietilamino)fenol) (9)⁶³: Foi obtido um sólido amarelo com 71% de rendimento (0,2635 g; 329,9 mmol) após purificação por cromatografia *flash*.

R_f = 0,6 (Hexano/AcOEt 6:4). ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃) δ 13,75 (s, 2H); 7,85 (s, 2H); 6,81 (d, *J* = 8,7 Hz, 2H); 5,98 (d, *J* = 8,7 Hz, 2H); 5,95 (s, 2H); 3,24 (q, *J* = 6,9 Hz, 8H); 3,07 (d, *J* = 8,8 Hz, 2H); 1,85 (d, *J* = 12,3 Hz, 2H); 1,79-1,68 (m, 2H); 1,62-1,48 (m, 2H); 1,33 (t, *J* = 8,8 Hz, 2H); 1,06 (t, *J* = 6,9 Hz, 12H). ¹³C RMN (101 MHz, CDCl₃) δ 166,2; 162,7; 151,4; 133,1; 108,2; 102,9; 98,1; 70,7; 44,4; 33,2; 24,3; 12,7.



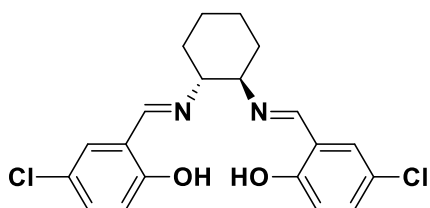
4,4'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)bis(azaneililideno))bis(metanoililideno))bis(benzeno-1,3-diol) (10)⁶³: Foi obtido um sólido amarelo com 98% de rendimento (0,4133 g; 347,3 mmol). *R_f* = 0,5 (Hexano/AcOEt 6:4). ¹H RMN (400

MHz, DMSO-*d*₆) δ 13,66 (s, 2H); 8,26 (s, 2H); 7,09 (d, J = 8,4 Hz, 2H); 6,22 (d, J = 8,5 Hz, 2H); 6,12 (s, 2H); 3,29-3,23 (m, 2H); 1,85 (d, J = 12,5 Hz, 2H); 1,77 (d, J = 8,0 Hz, 2H); 1,62-1,49 (m, 2H); 1,42 (t, J = 9,0 Hz, 2H). ¹³C RMN (101 MHz, DMSO) δ 164,5; 164,2; 162,0; 133,6; 111,5; 107,3; 102,8; 70,9; 33,2; 24,2.



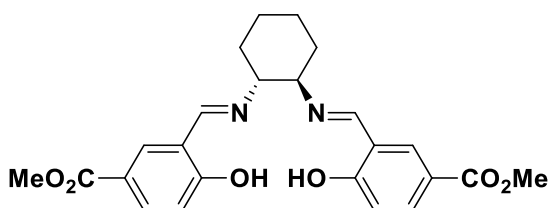
6,6'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)bis(azaneililideno))bis(metanoililideno))bis(3-metoxifenol) (11)⁶³: Foi obtido um sólido amarelo com 98% de rendimento (0,3405 g; 374,8 mmol).

R_f = 0,7 (Hexano/AcOEt 6:4). ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃) δ 13,75 (s, 2H); 8,02 (s, 2H); 6,92 (d, J = 8,5 Hz, 2H); 6,28 (s, 2H); 6,24 (d, J = 8,5 Hz, 2H); 3,69 (s, 6H); 3,19-3,10 (m, 2H); 1,89 (d, J = 14,6 Hz, 2H); 1,83-1,75 (m, 2H); 1,67-1,55 (m, 2H); 1,38 (t, J = 9,8 Hz, 2H). ¹³C RMN (101 MHz, CDCl₃) δ 164,9; 163,7; 163,4; 132,7; 112,2; 106,2; 101,1; 71,5; 55,3; 33,0; 24,2.



2,2'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)bis(azaneililideno))bis(metanoililideno))bis(4-clorofenol) (12)⁶⁴: Foi obtido um sólido amarelo com 95% de rendimento (0,4424 g; 371,7 mmol).

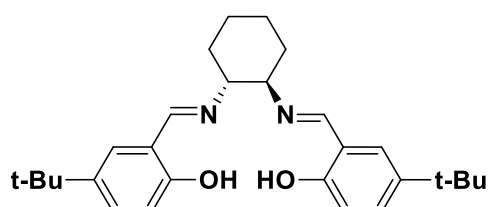
R_f = 0,8 (Hexano/AcOEt 6:4). ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃) δ 13,15 (s, 2H); 8,11 (s, 2H); 7,12 (dd, J = 8,8, 2,6 Hz, 2H); 7,05 (d, J = 2,6 Hz, 2H); 6,77 (d, J = 8,8 Hz, 2H); 3,31-3,19 (m, 2H); 1,84 (tt, J = 12,0, 3,0 Hz, 4H); 1,64 (dd, J = 16,5, 8,2 Hz, 2H); 1,40 (ddd, J = 12,0, 8,2, 3,0 Hz, 2H). ¹³C RMN (101 MHz, CDCl₃) δ 163,5; 159,5; 132,1; 130,5; 123,2; 119,2; 118,4; 72,6; 32,9; 24,0.



3,3'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)bis(azaneililideno))bis(metanoililideno))bis(metanoililideno))bis(4-hidroxiacetato) (13)⁶⁵: Foi obtido um

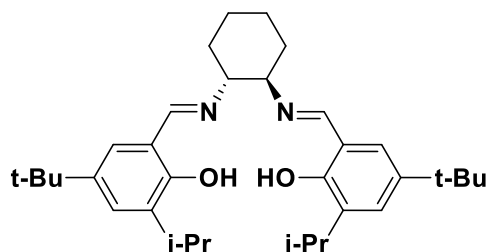
sólido amarelo com 99% de rendimento (0,5300 g; 434,1 mmol). R_f = 0,6 (Hexano/AcOEt 6:4). ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃) δ 13,97 (s, 2H); 8,31 (s, 2H); 7,94

(dd, $J = 8,6, 2,1$ Hz, 2H); 7,91 (d, $J = 2,1$ Hz, 2H); 6,92 (d, $J = 8,6$ Hz, 2H); 3,87 (s, 6H); 3,44-3,33 (m, 2H); 1,99 (d, $J = 14,6$ Hz, 2H); 1,93 (d, $J = 9,8$ Hz, 2H); 1,81-1,70 (m, 2H); 1,51 (t, $J = 9,8$ Hz, 2H). ^{13}C RMN (101 MHz, CDCl_3) δ 166,3; 165,4; 164,3; 133,8; 133,7; 120,6; 117,8; 117,2; 72,3; 51,9; 32,9; 24,0.



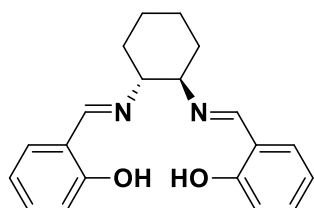
2,2'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)-bis(azaneililideno))-bis(metanoililideno))bis(4-(terc-butil)fenol) (14)⁶⁴: Foi obtido um sólido amarelo com

86% de rendimento (0,2986 g; 373,8 mmol). $R_f = 0,8$ (Hexano/AcOEt 6:4). ^1H RMN (400 MHz, CDCl_3) δ 13,14 (s, 2H); 8,26 (s, 2H); 7,28 (dd, $J = 8,6, 2,4$ Hz, 2H); 7,12 (d, $J = 2,4$ Hz, 2H); 6,83 (d, $J = 8,6$ Hz, 2H); 3,35-3,24 (m, 2H); 1,92-1,85 (m, 4H); 1,77-1,66 (m, 2H); 1,46 (t, $J = 9,9$ Hz, 2H); 1,23 (s, 18H). ^{13}C RMN (101 MHz, CDCl_3) δ 165,0; 158,6; 141,2; 129,4; 127,9; 117,9; 116,2; 72,8; 33,9; 33,2; 31,4; 24,2.



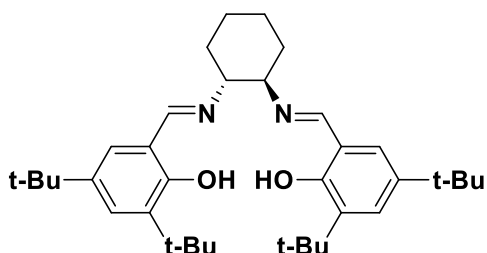
6,6'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)-bis(azaneililideno))-bis(metanoililideno))bis(4-(terc-butil)-2-isopropilfenol) (15): Foi obtido um sólido amarelo com 78% de rendimento (1,0091 g;

404,7 mmol). $R_f = 0,8$ (Hexano/AcOEt 6:4). ^1H RMN (400 MHz, CDCl_3) δ 13,74 (s, 2H); 8,34 (s, 2H); 7,34 (s, 2H); 7,02 (s, 2H); 3,41-3,31 (m, 2H); 1,98 (d, $J = 13,8$ Hz, 2H); 1,91 (d, $J = 9,0$ Hz, 2H); 1,83-1,72 (m, 2H); 1,53-1,48 (m, 2H); 1,44 (s, 18H); 1,27 (s, 12H). ^{13}C RMN (101 MHz, CDCl_3) δ 165,8; 158,0; 139,9; 136,3; 126,8; 126,0; 117,8; 72,3; 34,9; 34,0; 33,2; 31,4; 29,4; 24,3.



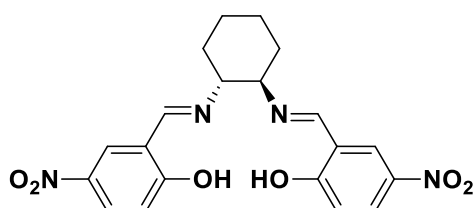
2,2'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)-bis(azaneililideno))-bis(metanoililideno))difenol (16)⁶⁴: Foi obtido um sólido amarelo com 97% de rendimento (0,3952 g; 312,7 mmol). $R_f = 0,8$

(Hexano/AcOEt 6:4). $^1\text{H RMN}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 13,26 (s, 2H); 8,18 (s, 2H); 7,21-7,12 (m, 2H); 7,07 (dd, $J = 7,6, 1,5$ Hz, 2H); 6,81 (d, $J = 8,3$ Hz, 2H); 6,72 (t, $J = 7,6$ Hz, 2H); 3,30-3,19 (m, 2H); 1,91-1,83 (m, 2H); 1,84-1,77 (m, 2H); 1,72-1,59 (m, 2H); 1,40 (t, $J = 9,7$ Hz, 2H). $^{13}\text{C RMN}$ (101 MHz, CDCl_3) δ 164,7; 160,9; 132,1; 131,4; 118,6; 116,7; 72,6; 33,1; 24,1.



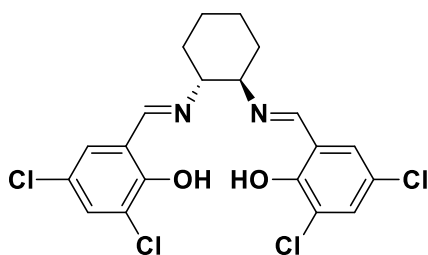
6,6'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)-bis(azaneililideno))-bis(metanoililideno))bis(2,4-di-terc-butilfenol) (17)⁶⁴: Foi obtido um sólido amarelo com 90% de rendimento (0,6880 g;

492,1 mmol) após purificação utilizando cromatografia *flash*. $R_f = 0,8$ (Hexano/AcOEt 6:4). $^1\text{H RMN}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 13,76 (s, 2H); 8,33 (s, 2H); 7,33 (d, $J = 2,4$ Hz, 2H); 7,01 (d, $J = 2,4$ Hz, 2H); 3,39-3,30 (m, 2H); 1,97 (d, $J = 14,4$ Hz, 2H); 1,90 (d, $J = 9,7$ Hz, 2H); 1,82-1,70 (m, 2H); 1,49 (t, $J = 9,7$ Hz, 2H); 1,44 (s, 18H); 1,26 (s, 18H). $^{13}\text{C RMN}$ (101 MHz, CDCl_3) δ 165,8; 158,0; 139,8; 136,3; 126,7; 126,0; 117,8; 72,4; 34,9; 34,0; 33,3; 31,4; 29,4; 24,3. $[\alpha]_D^{20} -331,55^\circ$ (c 0,9970, CH_2Cl_2).



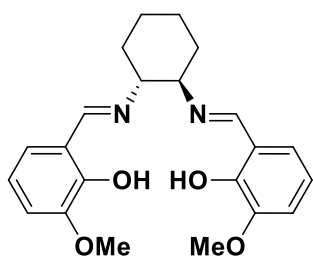
2,2'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)-bis(azaneililideno))-bis(metanoililideno))bis(4-nitrofenol) (18)⁶⁴:

Foi obtido um sólido amarelo com 60% de rendimento (0,1970 g). $R_f = 0,7$ (Hexano/AcOEt 6:4). $^1\text{H RMN}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 14,26 (s, 2H); 8,29 (s, 2H); 8,09-8,03 (m, 4H); 6,86 (d, $J = 9,0$ Hz, 2H); 3,47-3,35 (m, 2H); 2,00-1,91 (m, 2H); 1,91-1,82 (m, 2H); 1,76-1,62 (m, 2H); 1,49-1,40 (m, 2H). $^{13}\text{C RMN}$ (101 MHz, CDCl_3) δ 167,6; 163,7; 139,3; 128,1; 128,0; 118,4; 117,0; 71,7; 32,6; 23,9,



6,6'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)-bis(azaneililideno))bis(metanoililideno))bis(2,4-diclorofenol) (19)⁶⁴: Foi obtido um sólido amarelo com 51% de rendimento (0,1884 g; 247,4 μmol). $R_f = 0,3$ (Hexano/AcOEt 9:1). ^1H

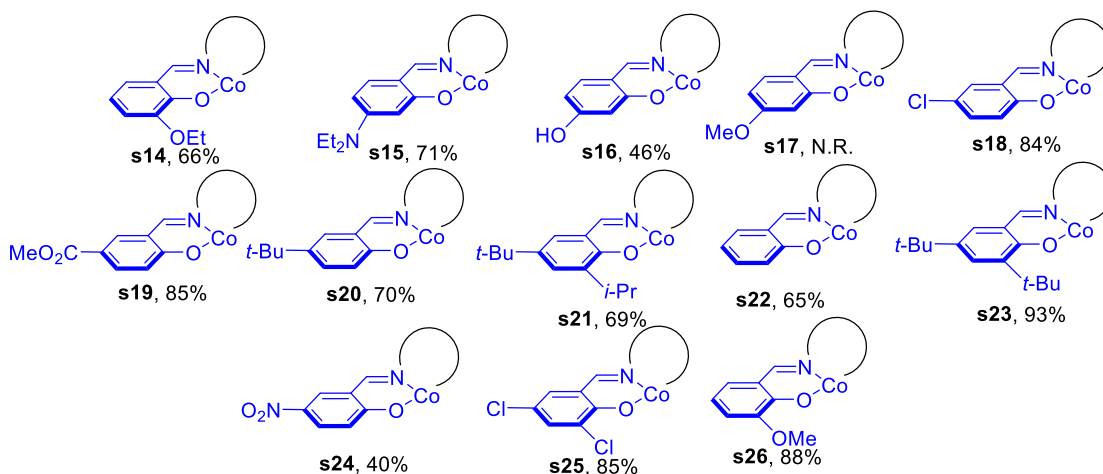
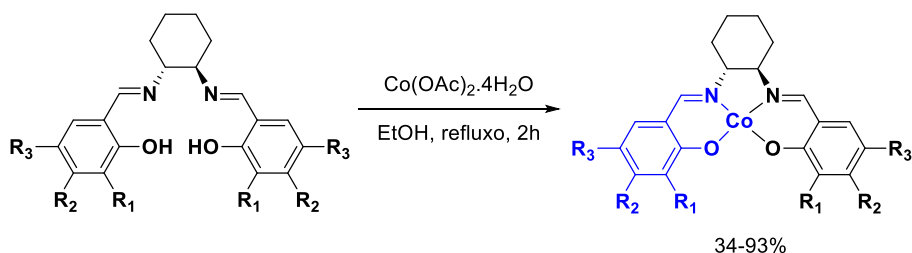
RMN (400 MHz, CDCl_3) δ 14,13 (s, 2H); 8,11 (s, 2H); 7,29 (d, $J = 2,5$ Hz, 2H); 7,01 (d, $J = 2,5$ Hz, 2H); 3,35-3,24 (m, 2H); 1,93-1,79 (m, 4H); 1,64 (q, $J = 11,2$ Hz, 2H); 1,46-1,35 (m, 2H). ^{13}C RMN (101 MHz, CDCl_3) δ 163,4; 156,3; 132,3; 129,2; 122,9; 122,6; 119,2; 72,1; 32,8; 23,9.



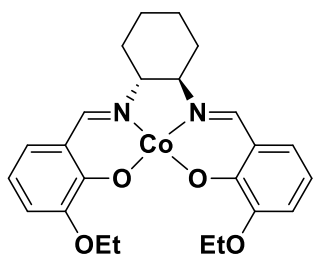
6,6'-((1E,1'E)-(((1R,2R)-cicloexano-1,2-diil)-bis(azaneililideno))bis(metanoililideno))bis(2-metoxifenol) (20)⁶²: Foi obtido um sólido amarelo com 96% de rendimento (0,5 g; 367,2 μmol). $R_f = 0,6$ (Hexano/AcOEt 6:4). ^1H RMN (400 MHz, CDCl_3) δ 13,79

(s, 2H); 8,17 (s, 2H); 6,78 (dd, $J = 7,8, 1,6$ Hz, 2H); 6,72 (dd, $J = 7,8, 1,6$ Hz, 2H); 6,65 (t, $J = 7,8$ Hz, 2H); 3,80 (s, 6H); 3,29-3,20 (m, 2H); 1,89-1,79 (m, 4H); 1,64 (q, $J = 11,2$ Hz, 2H); 1,41 (t, $J = 10,6$ Hz, 2H). ^{13}C RMN (101 MHz, CDCl_3) δ 164,7; 151,5; 148,2; 123,1; 118,3; 117,8; 113,7; 72,4; 56,0; 33,0; 24,0.

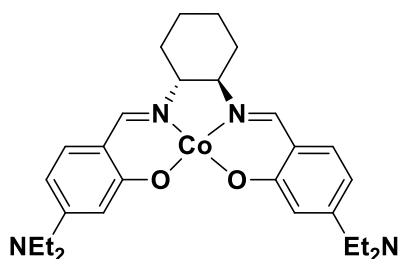
5.7. Procedimento Representativo para a Etapa de metalacção



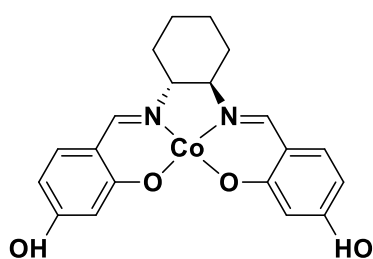
Em um balão com 12 mL de etanol anidro e degaseificado, foi adicionado o salen correspondente (1,0 mmol) e mantido sob agitação em atmosfera inerte. Em outro balão, foi dissolvido o $\text{Co(OAc)}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (0,2491 g; 1,000 mmol) em 4 mL de etanol quente e então a solução adicionada lentamente, com auxílio de uma cânula, ao balão contendo o salen sob agitação. Após 1h, o conteúdo do balão foi filtrado em um funil de Büchner e o sólido obtido lavado com etanol gelado, e seco.



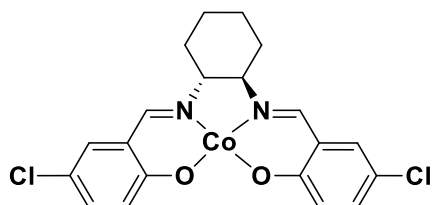
Co(salen) s14: Sólido marrom, 66% de rendimento (144,1 mg; 308,5 μmol). **HRSM (ESI) m/z**: $[\text{M}+\text{Na}]^+$ Calculada para $\text{C}_{24}\text{H}_{28}\text{CoN}_2\text{O}_4\text{Na}^+$: 490,1279; Encontrada: 490,1292. **IV** (pastilha KBr, cm^{-1}) 3430, 3052, 2978, 2933, 2864, 2367, 1637, 1601, 1469, 1390, 1323, 1224, 1177, 1083, 1037, 905, 851, 734, 679, 565, 458.



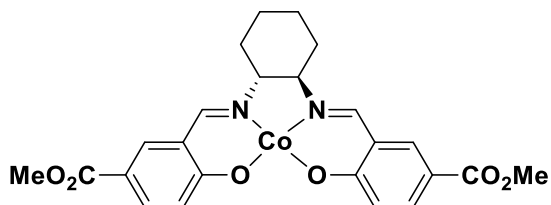
Co(salen) s15: Sólido laranja, 71% de rendimento (193,0 mg; 370,3 mmol). **PF** 297 °C. **HRSM (ESI)** m/z: [M]⁺ Calculada para C₂₈H₃₈CoN₄O₂: 521,2321; Encontrada: 521,2316. **IV** (pastilha KBr, cm⁻¹) 3430, 2967, 2929, 2863, 2363, 1590, 1506, 1353, 1248, 1135, 1076, 1014, 822, 774, 714, 443.



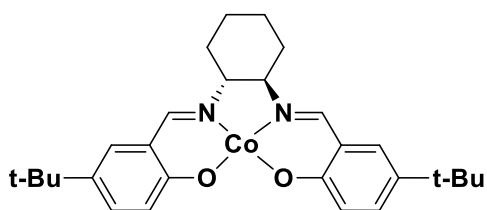
Co(salen) s16: Sólido marrom, 46% de rendimento (77,8 mg; 189 mmol). **HRSM (ESI)** m/z: [M]⁺ Calculada para C₂₀H₂₀CoN₂O₄: 411,0749; Encontrada: 411,0749. **IV** (pastilha KBr, cm⁻¹) 3449, 3200, 2937, 2862, 2365, 1607, 1449, 1342, 1230, 1183, 1127, 1042, 988, 848, 800, 760, 645, 548, 465.



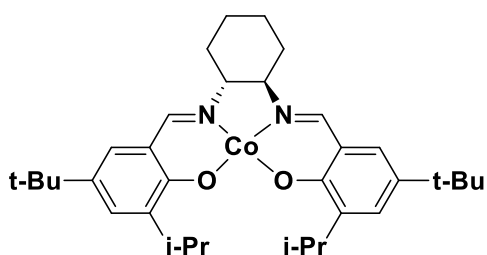
Co(salen) s18: Sólido laranja, 84% de rendimento (168,3 mg; 376,5 mmol). **PF** 389 °C. **HRSM (ESI)** m/z: [M+Na]⁺ Calculada para C₂₀H₁₈Cl₂CoN₂O₂Na⁺: 469,9969; Encontrada: 469,9951. **IV** (pastilha KBr, cm⁻¹) 3551, 3449, 2931, 2855, 1721, 1605, 1536, 1479, 1432, 1354, 1279, 1232, 1191, 1107, 1044, 940, 842, 771, 720, 658, 584, 537, 442.



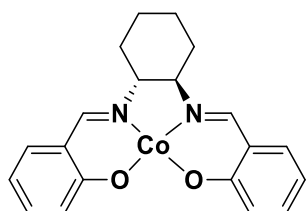
Co(salen) s19: Sólido marrom, 85% de rendimento (208,5 mg; 421,1 mmol). **PF** 376 °C. **HRSM (ESI)** m/z: [M]⁺ Calculada para C₂₄H₂₄CoN₂O₆: 495,096; Encontrada: 495,0948. **IV** (pastilha KBr, cm⁻¹) 3429, 3054, 2936, 2856, 2363, 1876, 1601, 1521, 1447, 1374, 1315, 1245, 1184, 1130, 1083, 1040, 926, 823, 736, 667, 585, 535, 444, 341.



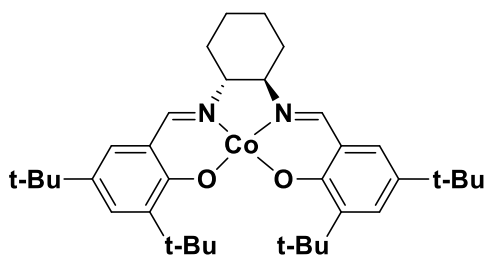
Co(salen) s20: Sólido vermelho, 70% de rendimento (168,9 mg; 344,0 mmol). PF 336-342 °C. HRSM (ESI) m/z: [M]⁺ Calculada para C₂₈H₃₆CoN₂O₂: 491,2103; Encontrada: 491,2092. IV (pastilha KBr, cm⁻¹) 3431, 3050, 3018, 2929, 2855, 2363, 1602, 1530, 1444, 1389, 1319, 1201, 1147, 1025, 908, 846, 808, 755, 569, 516, 443.



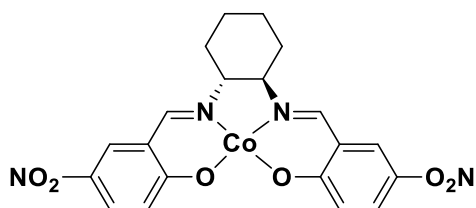
Co(salen) s21: Sólido alaranjado, 69% de rendimento (575,3 mg; 397,2 mmol). PF 380-392 °C. HRSM (ESI) m/z: [M+K]⁺ Calculada para C₃₄H₄₈CoN₂O₂: 614,2679; Encontrada: 614,2635. IV (pastilha KBr, cm⁻¹) 2954, 2865, 1596, 1525, 1463, 1427, 1358, 1319, 1253, 1174, 1131, 1047, 934, 868, 835, 785, 746, 641, 571.



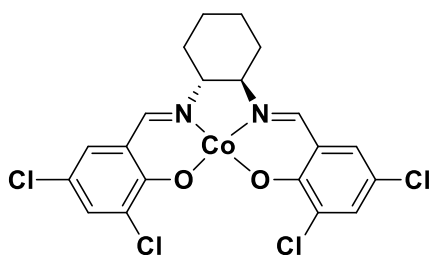
Co(salen) s22: Sólido vermelho, 65% de rendimento (379,0 mg; 246,5 mmol). PF 365 °C HRSM (ESI) m/z: [M+Na]⁺ Calculada para C₂₀H₂₀CoN₂O₂Na⁺: 402,0749; Encontrada: 402,0750. IV (pastilha KBr, cm⁻¹) 3427, 2951, 2862, 2363, 1612, 1527, 1466, 1316, 1257, 1183, 1039, 935, 831, 735, 672, 615, 552, 452, 360.



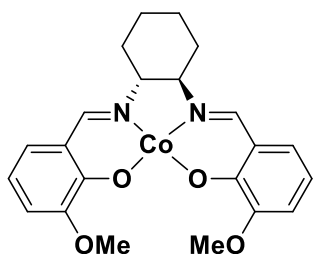
Co(salen) s23: Sólido laranja, 93% de rendimento (338,8 mg; 561,5 mmol). HRSM (ESI) m/z: [M]⁺ Calculada para C₃₆H₅₂CoN₂O₂: 603,3355; Encontrada: 603,3346. IV (pastilha KBr, cm⁻¹) 3430, 2952, 2865, 2375, 1595, 1525, 1460, 1427, 1359, 1320, 1253, 1175, 1130, 1046, 936, 868, 835, 786, 636, 572, 302.



Co(salen) s24: Sólido marrom, 40% de rendimento (88,1 mg; 188 μmol). **HRSM (ESI) m/z:** $[\text{M}]^+$ Calculada para $\text{C}_{20}\text{H}_{18}\text{CoN}_4\text{O}_6$: 469,0552; Encontrada: 469,0539. **IV** (pastilha KBr, cm^{-1}) 3433, 2938, 2862, 2413, 1641, 1599, 1549, 1493, 1441, 1386, 1332, 1305, 1246, 1198, 1153, 1131, 1100, 1042, 946, 835, 755, 728, 660, 539, 442.

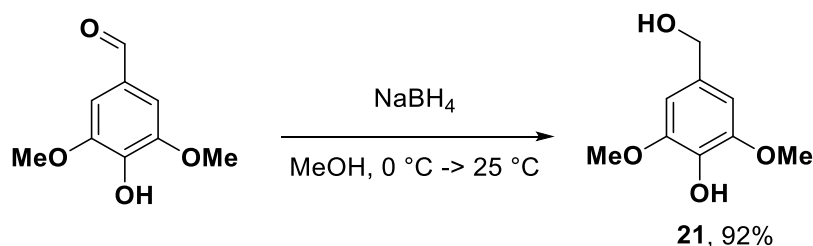


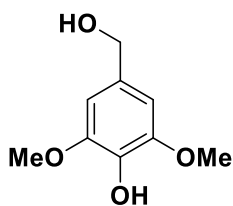
Co(salen) s25: Sólido vermelho, 85% de rendimento (514,9 mg; 439,5 μmol). **HRSM (ESI) m/z:** $[\text{M}+\text{Na}]^+$ Calculada para $\text{C}_{20}\text{H}_{16}\text{Cl}_4\text{CoN}_2\text{O}_2\text{Na}^+$: 537,9190; Encontrada: 537,9167. **IV** (pastilha KBr, cm^{-1}) 3433, 2935, 2860, 1602, 1560, 1436, 1325, 1212, 1177, 1103, 1033, 971, 928, 864, 765, 675, 615, 587, 556, 481, 447.



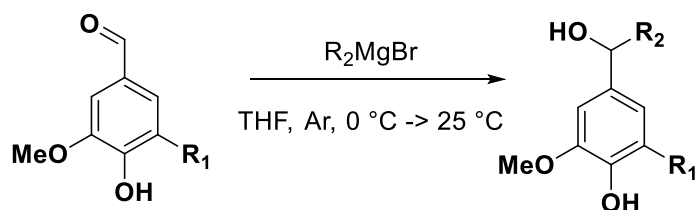
Co(salen) s26: Sólido marrom, 88% de rendimento (169,8 mg; 386,6 μmol). **HRSM (ESI) m/z:** $[\text{M}]^+$ Calculada para $\text{C}_{28}\text{H}_{38}\text{CoN}_4\text{O}_2$: 439,1063; Encontrada: 439,1066. **IV** (pastilha KBr, cm^{-1}) 3430, 3271, 3055, 2938, 2862, 1719, 1640, 1604, 1474, 1448, 1375, 1326, 1223, 1171, 1083, 1039, 979, 925, 865, 822, 729, 677, 646, 566, 490, 461, 377, 352.

5.8. Procedimento Representativo para a Síntese dos substratos



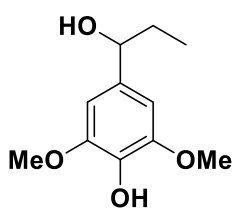


4-(hidroximetil)-2,6-dimetoxifenol (21)⁶⁶: Em um balão de 100 mL, foi adicionado 50 mL de metanol e o aldeído (2,0 g; 0,011 mol) e agitado em um banho de gelo por 5 minutos. Em seguida, pequenas porções de NaBH₄ foram adicionadas até somar 1,25 g (0,033 mol) e então foi retirado do banho de gelo e mantido agitando por 30 minutos a temperatura ambiente. Após esse período, foi adicionado 30 mL de uma solução saturada de NH₄Cl e agitou-se por mais 30 minutos. Ao fim da reação, o metanol foi evaporado e o produto foi extraído com acetato de etila e purificado por cromatografia *flash*, onde foi obtido um sólido branco. R_f = 0,6 (Hexano/AcOEt/MeOH 4:4:2). ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃) δ 6,63 (s, 2H); 5,55 (s, 1H); 4,63 (s, 2H); 3,92 (s, 6H). ¹³C RMN (101 MHz, CDCl₃) δ 147,1; 134,1; 132,0; 103,8; 65,7; 56,3.



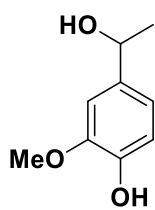
R₁ = H, R₂ = Et (**22**), 60%
R₁ = OMe, R₂ = Me (**23**), 52%

Em um balão de 50 mL, foi adicionado o aldeído síringico (0,910 g; 5 mmol) em THF (25 mL) e mantido sob agitação a 0°C. Adicionou-se o brometo de alquil magnésio correspondente (5 mL; 15 mmol; 3 M) gota a gota e manteve-se sob agitação por 1 hora. Em seguida, foi adicionado 5 mL de uma solução de HCl a 10% e 30 mL de água. Por fim, a fase orgânica foi extraída com DCM, concentrada em um evaporador rotatório e purificada por cromatografia *flash* (hexano/AcOEt 1:1).



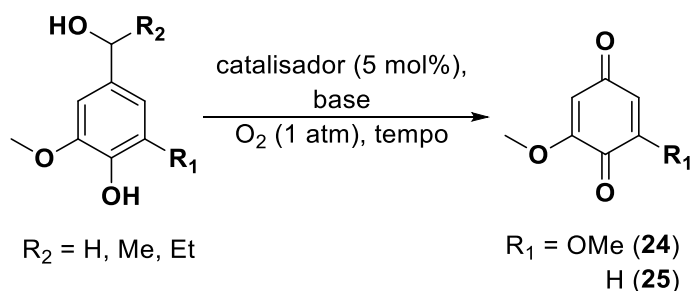
4-(1-hidroxipropil)-2,6-dimetoxifenol (22)⁶⁷: Sólido branco, 60% de rendimento (0,580 mg; 127,3 mmol). R_f: 0,4 (hexano/AcOEt 1:1). ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃) δ 6,60 (d, J = 3,7 Hz, 2H); 5,53 (d, J = 10,5 Hz, 1H); 4,53 (q, J = 6,2, 5,3 Hz, 1H); 3,91 (d, J = 4,0

Hz, 6H); 1,87-1,68 (m, 2H); 0,93 (td, $J = 7,4, 2,9$ Hz, 3H). ^{13}C RMN (101 MHz, CDCl_3) δ 146,9; 135,9; 133,9; 102,5; 76,3; 56,2; 31,9; 10,3.

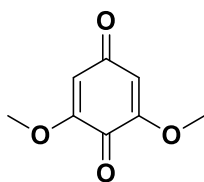


4-(1-hidroxietyl)-2-metoxifenol (23)⁶⁸ : Sólido branco, 52% de rendimento (0,526 mg, 87,5 mmol). Rf: 0,4 (hexano/AcOEt 1:1). ^1H RMN (400 MHz, CDCl_3) δ 6,85 (d, $J = 1,8$ Hz, 1H); 6,80 (d, $J = 8,1$ Hz, 1H); 6,75 (dd, $J = 8,1, 1,9$ Hz, 1H); 5,62 (s, 1H); 4,76 (q, $J = 6,4$ Hz, 1H); 3,82 (s, 3H); 1,88 (s, 1H); 1,40 (d, $J = 6,4$ Hz, 3H). ^{13}C RMN (101 MHz, CDCl_3) δ 146,6; 144,9; 137,9; 118,3; 114,1; 107,9; 70,3; 55,9; 25,1.

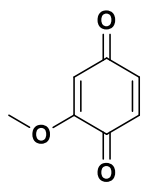
5.9. Procedimento genérico da oxidação do substrato



Em um vial de 5 mL, foram adicionados o catalisador (10 μmol ; 5 mol%) e a base correspondente, em seguida, foi adicionado 1 mL de uma solução a 0,2 M do fenol correspondente e o sistema foi fechado sob atmosfera de oxigênio (1 atm) e mantido sob agitação pelo tempo definido.



2,6-dimetoxicicloexa-2,5-dieno-1,4-diona (24)²⁷: Sólido amarelo. Rf: 0,6 (DCM/AcOEt 6:4) ^1H RMN (400 MHz, CDCl_3) δ 5,79 (s, 2H); 3,76 (s, 6H). ^{13}C RMN (101 MHz, CDCl_3) δ 186,8; 176,6; 157,3; 107,4; 56,4.



2-metoxicicloexa-2,5-dieno-1,4-diona (25)²⁷: Sólido alaranjado. Rf: 0,7 (DCM/AcOEt 7:3). ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃) δ 6,67 (s, 2H); 5,88 (s, 1H); 3,81 (s, 3H).

5.10. Quantificação por GC-MS

As análises no GC-MS foram feitas em um cromatógrafo a gás da Shimadzu modelo GC-2010 Plus acoplado em um espectrômetro de massas modelo QP-2010SE contendo um analisador de íons quadrupolo e uma ionização por impacto de elétrons. O equipamento possui um injetor capilar do tipo Split e um autoinjetor modelo AOC-20i. A coluna utilizada para a separação é do modelo SHRtx-5MS, da Shimadzu (5% difenil/95% dimetilpolisiloxano, de dimensões 30 m x 0,25 mm x 0,25 mm) com Hélio como gás eluente (fluxo de 1,69 mL/min). A interface entre o cromatógrafo e o espectrômetro de massas foi mantido a 300 °C e a fonte de ionização a 260 °C. O método de análise consistiu nos seguintes parâmetros com um aquecimento gradual do forno: 50 °C durante 5 minutos, seguido de um aquecimento até 250 °C a uma taxa de 25 °C/min, com a temperatura final mantida por 1 minuto. O espectrômetro de massas monitorou os íons no modo *scan*, usando uma janela de análise de massas de 55-500 *m/z*, com uma velocidade de varredura de 1666 e tempo de aquisição de 3 a 8 minutos.

A quantificação da conversão foi feita utilizando uma solução estoque contendo o padrão interno (Pd) e o material de partida (MP) como valor inicial. Para a injeção no GC-MS em tempos menores do que o tempo final, foi retirada uma alíquota de 40 µL da reação (em duplicata) e diluída em um balão volumétrico de 1 mL em DCM. Para a injeção no tempo final de reação, o conteúdo da reação foi transferido para um balão volumétrico de 25 mL e completado com DCM. O vial utilizado na injeção foi preenchido com o conteúdo do balão volumétrico.

A concentração não padronizada dos analitos foram calculadas seguindo a fórmula:

$$[Cn] = \frac{\text{Área}}{a}$$

A padronização foi feita seguindo a fórmula:

$$[Cn_{analito-Pd}] = [Cn] * \frac{\text{Área}_{Pd-estoque}}{\text{Área}_{Pd-analito}}$$

Onde,

Cn: concentração molar

Área: integral do pico referente

a: valor obtido da curva de calibração

analito-Pd: analito padronizado

Pd-estoque: padrão interno da solução estoque

Pd-analito: padrão interno da solução a ser analisada

O rendimento foi calculado seguindo a fórmula $R = \frac{Cn_{PR-Pd}}{Cn_{MP-estoque}} \times 100\%$

A conversão foi calculada seguindo a fórmula $C = \frac{Cn_{MP-Pd}}{Cn_{MP-estoque}} \times 100\%$

A seletividade foi calculada seguindo a fórmula $S = \frac{R}{C} \times 100\%$

Onde,

R: rendimento

PR-Pd: produto padronizado

MP-estoque: material de partida da solução estoque

C: conversão

MP-Pd: material de partida padronizado

S: seletividade

Os dados obtidos estão sumarizados no apêndice.

5.11. Descrição dos parâmetros

Para os catalisadores **s01-s13**, a contagem dos átomos para os parâmetros foi feita usando o modelo abaixo (**Figura 5.1**):

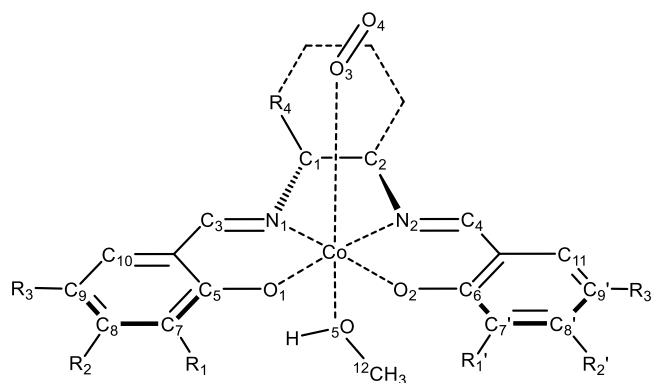


Figura 5.1: Contagem dos átomos para os catalisadores s01 a s13

Tabela 5.1: Detalhamento dos parâmetros utilizados.

| Parâmetro | Abreviação |
|---|------------------------|
| Momento de Dipolo | Dipolo |
| Highest Occupied Molecular Orbital | HOMO |
| Lowest Unoccupied Molecular Orbital | LUMO |
| Buried Volume (volume ocupado pelo ligante em uma determinada esfera de raio r em um determinado átomo A) | $BV^r(A)$ |
| Sterimol B1 (Largura Mínima de um vetor com origem no átomo A para o átomo B) | $B^{\min}(A-B)$ |
| Sterimol B5 (Largura Máxima) | $B^{\max}(A-B)$ |
| Sterimol L (Comprimento Total) | $L(A-B)$ |
| Carga de Mulliken | Carga(A) |
| Densidade de spin de Mulliken | Spin(A) |
| Densidade de spin de Mulliken normalizada excluindo os hidrogênios | $Spin^F(A)$ |
| Carga natural | Carga ^N (A) |
| Densidade de spin natural | Spin ^N (A) |
| Energia da ligação sigma (σ) ou pi (π), ligante ou antiligante (*) | $\sigma^*(A-B)$ |
| Lone Pair (par de elétrons não ligante) | LP(A) |
| Lone Vacancy (orbital vazio) | LV(A) |
| Átomos considerados no cálculo da média | Abreviação |
| C^7-R^1 e $C^{7'}-R^{1'}$ | Orto |
| C^8-R^2 e $C^{8'}-R^{2'}$ | Meta |
| C^9-R^3 e $C^{9'}-R^{3'}$ | Para |
| C^1-N^1 e C^2-N^2 | R^4 |

Para os catalisadores **s14-s26** sem piridina (A) e com piridina (B) e reduzido (C), a contagem dos átomos para os parâmetros foi feita usando os modelos da **Figura 5.2**:

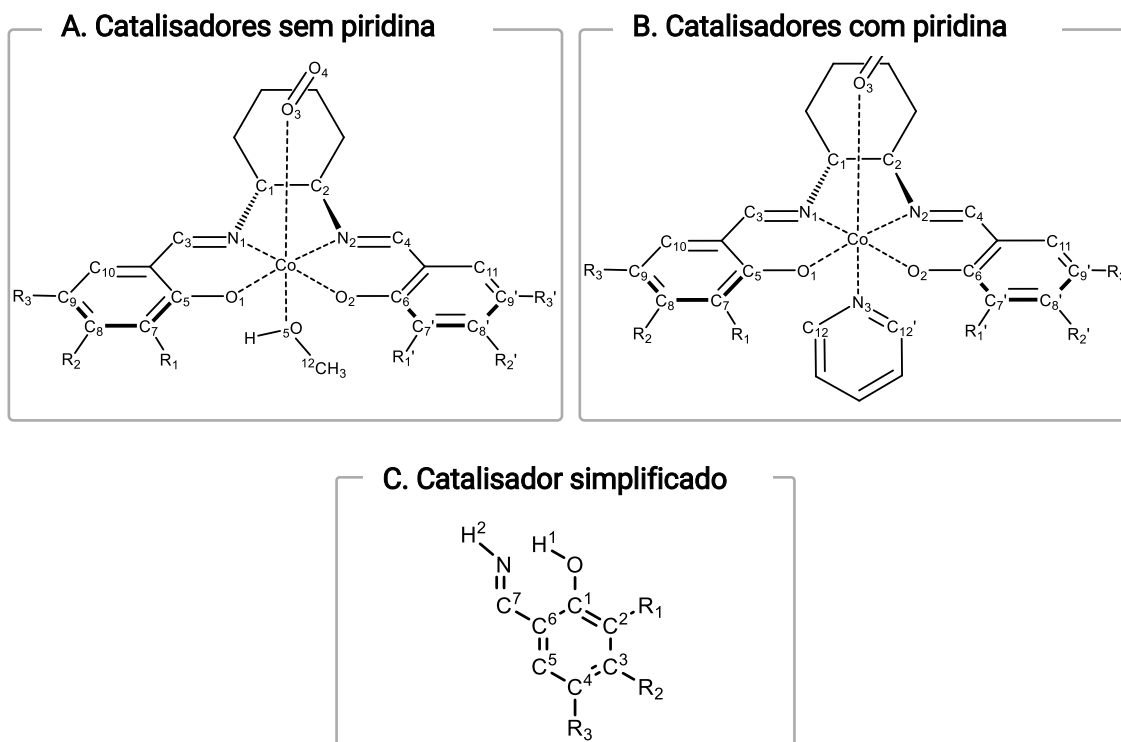


Figura 5.2: Contagem de átomos para os catalisadores **s14 a s26**

5.12. Dados computacionais

Todos cálculos de otimização e energia (exceto para os iminofenóis) foram realizados no nível de teoria m06/def2svp⁴⁵, com grid de integração ultrafino (int=ultrafine), sem modelo de solvatação, sem simetria (nosymm) e com 600 ciclos máximos de SCF (scf=maxcycle=600). Todas as estruturas calculadas foram verificadas de modo que não houvesse valores negativos para as frequências, caracterizando um estado estacionário. Após a otimização, as estruturas foram submetidas aos cálculos de NBO⁴⁴ (pop=nbo6read) em cálculos separados.

Para as estruturas iminofenólicas, a otimização, o NBO⁴⁴ (pop=nbo6read) e a energia foram feitos no mesmo cálculo, usando o nível de teoria b3lyp/6-31+g(d,p)^{69, 70} com grid de integração ultrafino, modelo de

solvatação levando em conta o metanol como solvente ($scr_f=(\text{solvent}=\text{metanol})$) e fator de dispersão empírica de Grimme ($\text{empiricaldispersion}=\text{gd}3$)⁷¹.

Os parâmetros eletrônicos foram obtidos diretamente dos cálculos realizados com o software *Gaussian16* versão B.01, usando scripts autorais na linguagem *Shell*. Os parâmetros estéricos foram obtidos por meio dos *scripts* DBSTEP (Sterimol: B^{min} , B^{max} e L), desenvolvidos por Paton e colaboradores⁷², e *SambVca 2.1* (BV^r), desenvolvido por Cavallo e colaboradores⁷³. Os parâmetros geométricos (ângulo, distância e diedro) foram obtidos através de *script* autoral na linguagem *python*.

Todos os parâmetros calculados para cada conformero estão disponíveis em um repositório disponível no endereço eletrônico bit.ly/DadosComputacionaisMateusCosta. Os dados utilizados nos gráficos e modelos apresentados estão dispostos nas Tabela 5.2 a Tabela 5.4:

Tabela 5.2: Dados para os catalisadores s01-s13.

| | Rendimento | Predição | $B^{\text{max}}(N^1-C^1)_{\text{MAX}}$ | $BV^{4,5}(\text{Meta}) \cdot (Co)_{\text{MC}}$ | Ângulo $(Co\hat{O}O)_{\text{MIN}}$ | $L(\text{Orto})_{\text{MIN}}$ | $\text{Spin}(N^1)_{\text{MAX}}$ |
|-----|------------|----------|--|--|------------------------------------|-------------------------------|---------------------------------|
| s01 | 75,0 | 70,4 | 11,66181 | 0,41929 | 117,01060 | 5,04704 | 0,01506 |
| s02 | 61,0 | 63,3 | 11,65713 | 0,42493 | 116,74771 | 5,03160 | 0,01610 |
| s03 | 73,0 | 75,3 | 13,95676 | 0,42329 | 116,96933 | 5,01599 | 0,01558 |
| s04 | 54,0 | 57,1 | 11,65763 | 0,42988 | 117,16833 | 5,24356 | 0,01619 |
| s05 | 65,0 | 63,8 | 11,65295 | 0,42453 | 117,08690 | 5,00600 | 0,01542 |
| s06 | 76,5 | 78,6 | 14,76714 | 0,42348 | 116,94257 | 4,84314 | 0,01540 |
| s07 | 75,5 | 74,3 | 12,93117 | 0,42053 | 116,98233 | 4,81064 | 0,01532 |
| s08 | 46,0 | 48,0 | 13,27258 | 0,44279 | 117,45209 | 5,48404 | 0,01692 |
| s09 | 42,0 | 40,3 | 11,53606 | 0,44293 | - | - | - |
| s10 | 71,0 | 46,3 | 11,64536 | 0,43853 | - | - | - |
| s11 | 41,0 | 46,5 | 11,54423 | 0,43803 | - | - | - |
| s12 | 51,0 | 45,9 | 11,58311 | 0,43866 | - | - | - |
| s13 | 45,0 | 42,8 | 11,55822 | 0,44102 | - | - | - |

Tabela 5.3: Dados para os catalisadores s14-s26 (catalisador completo).

| Conversão em 5 min | Predição Conversão em 5min | Rendimento 30 min | $\sigma^*(N^1-C^3)$ | $BV^{3,5}(R_1)$ | ELUMO | $\text{Spin}^F(N)$ | $\text{Spin}^F(Co)$ | $[\text{Ir}(N^2-C^4)]_i$: $[B^{\text{max}}(\text{Orto})]$ | $\text{Spin}^F(O^1)$ | $LP^{(2)}(O^1)$ |
|--------------------|----------------------------|-------------------|---------------------|-----------------|-------|--------------------|---------------------|--|----------------------|-----------------|
|--------------------|----------------------------|-------------------|---------------------|-----------------|-------|--------------------|---------------------|--|----------------------|-----------------|

| | s14 | s15 | s18 | s19 | s20 | s21 | s22 | s23 | s26 | s14-py | s15-py | s18-py | s19-py |
|---|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| | -0.38445 | -0.37114 | -0.39225 | -0.39315 | -0.37869 | -0.38153 | -0.37427 | -0.38729 | -0.37421 | - | - | - | - |
| | - | - | - | - | - | - | - | - | - | 0.0047 | 0.00550 | 0.00515 | 0.00523 |
| | - | - | - | - | - | - | - | - | - | -0.04829 | -0.16749 | -0.16254 | -0.16972 |
| | 0.53873 | 0.33026 | 0.31727 | 0.34155 | 0.30708 | 0.30076 | 0.31274 | 0.44623 | 0.31381 | 0.24938 | 0.23988 | 0.28887 | 0.30331 |
| 5 | 0.00934 | 0.00696 | 0.00505 | 0.0055 | 0.00497 | 0.00512 | 0.00512 | 0.00767 | 0.00534 | 0.00417 | 0.00509 | 0.00424 | 0.00451 |
| | -0.05824 | -0.04067 | -0.06073 | -0.08372 | -0.04838 | -0.04691 | -0.0936 | -0.04809 | -0.04334 | -0.05152 | -0.04568 | -0.05734 | -0.05659 |
| | 0.627094 | 0.555931 | 0.397672 | 0.398113 | 0.402243 | 0.728808 | 0.402296 | 0.806874 | 0.55264 | 0.603425 | 0.542862 | 0.386554 | 0.386013 |
| | 0.57775 | 0.58602 | 0.57217 | 0.57077 | 0.58311 | 0.58292 | 0.57731 | 0.58223 | 0.58555 | 0.58097 | 0.58952 | 0.57695 | 0.57729 |
| | 0.184312 | 0.513996 | 0.039542 | 0.221216 | 0.325391 | 0.154227 | 0.415108 | 0.086276 | 0.155594 | 0.071419 | 0.999995 | 0.912102 | 0.869611 |
| | 23.25279 | 47.03414 | 16.77259 | 14.51922 | 49.34592 | 5.83305 | 32.23967 | 5.1658 | 38.46475 | 12.14375 | 50.76131 | 29.12523 | 31.4786 |
| | 22.59609 | 48.2218 | 5.53824 | 11.25384 | 40.53961 | 9.77995 | 38.0917 | 1.35695 | 43.11308 | 4.04655 | 52.47815 | 41.45931 | 48.35569 |

| | s20-py | s21-py | s22-py | s23-py | s25-py |
|--|----------|----------|----------|----------|----------|
| | - | - | - | - | - |
| | 0,00545 | 0,00525 | 0,00531 | 0,00500 | 0,00468 |
| | -0.1709 | -0.05502 | -0.16478 | -0.05502 | -0.1115 |
| | 0.2811 | 0.28413 | 0.28193 | 0.27328 | 0.29602 |
| | 0.00413 | 0.00453 | 0.00421 | 0.00429 | 0.0043 |
| | -0.04634 | -0.04758 | -0.04684 | -0.04826 | -0.06401 |
| | 0.386607 | 0.719024 | 0.386706 | 0.808383 | 0.297353 |
| | 0.58656 | 0.58610 | 0.58546 | 0.58676 | 0.57158 |
| | 0.999996 | 0.023969 | 0.999999 | 0.101344 | 3.83E-06 |
| | 58.08299 | 14.15838 | 55.05409 | 3.10586 | 24.84184 |
| | 51.31448 | 12.7859 | 47.43071 | 4.99325 | 29.21314 |

Tabela 5.4: Dados para os catalisadores s14-s26 (catalisador simplificado).

| Cat. | Rend. 30 min | Carga N | Cat. | Conv. 5 min | Rend. 30 min | Carga H ¹ |
|------------|--------------|----------|---------------|-------------|--------------|----------------------|
| s14 | 18% | -0.60485 | s14-py | 4% | 7% | 0.45877 |
| s15 | 51% | -0.64791 | s15-py | 52% | 100% | 0.44336 |
| s18 | 4% | -0.58885 | s18-py | 41% | 91% | 0.44246 |
| s19 | 22% | -0.5912 | s19-py | 48% | 87% | 0.44603 |
| s20 | 33% | -0.62959 | s20-py | 51% | 100% | 0.43989 |
| s21 | 15% | -0.6177 | s21-py | 13% | 2% | 0.45468 |
| s22 | 42% | -0.60619 | s22-py | 47% | 100% | 0.44109 |
| s23 | 9% | -0.60046 | s23-py | 5% | 10% | 0.45963 |
| s25 | 0% | -0.58432 | s25-py | 29% | 0% | 0.4517 |
| s26 | 16% | -0.60503 | s26-py | 3% | 0% | 0.45913 |

6. Referências Bibliográficas

- 1 - Ritchie, H.; Roser, M. Energy, 2020. Our World In Data. <https://ourworldindata.org/energy> (acessado em 12/08/2021).
- 2- Masson-Delmotte, V.; et al. In: *Global Warming of 1.5°C. An IPCC Special Report on the impacts of global warming of 1.5°C above pre-industrial levels and related global greenhouse gas emission pathways, in the context of strengthening the global response to the threat of climate change, sustainable development, and efforts to eradicate poverty*. World Meteorological Organization: Geneva, **2021**, 32.
- 3- Barboza, A. A.; Ferreira, M. A. B. In *Biomassa: estrutura, propriedades e aplicações*, Vol. 1; Corrêa, A. G.; Gallo, J. M. R. Ed.; Edufscar: São Carlos, **2020**, 181.
- 4 - Tuck, C.O.; et al. Valorization of biomass: deriving more value from waste. *Science*, **2012**, *337*, 695.
- 5 - Kumaravel, S.; et al. Green and sustainable route for oxidative depolymerization of lignin: New platform for fine chemicals and fuels. *Biotechnology Progress*, **2021**, *37*, 3111.
- 6 - Ning, P.; et al. Recent advances in the valorization of plant biomass. *Biotechnol Biofuels*, **2021**, *14*, 102.
- 7- Li, C.; Zhao, X.; Wang, A.; Huber, G. W.; Zhang, T. Catalytic Transformation of Lignin for the Production of Chemicals and Fuels. *Chemical Reviews*, **2015**, *115*, 11559.
- 8- Rinaldi, R.; Jastrzebski, R.; Clough, M. T.; Ralph, J.; Kennema, M.; Bruijninx, P. C. A.; Weckhuysen. B. M. Paving the Way for Lignin Valorisation: Recent Advances in Bioengineering, Biorefining and Catalysis. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 8164.
- 9- Li, C.; Chen, C.; Wu, X.; Tsang, C.-H.; Mou, J.; Yan, J.; Liu, Y.; Lin, C. S. K. Recent advancement in lignin biorefinery: With special focus on enzymatic degradation and valorization. *Bioresource Technology*, **2019**, *291*, 121898.
- 10- Behling, R.; Valange, S.; Chatel, G. Heterogeneous catalytic oxidation for lignin valorization into valuable chemicals: what results? What limitations? What trends?. *Green chemistry*, **2016**, *18*, 1839.
- 11- Song, Q.; Wang, F.; Xu, J. Hydrogenolysis of lignosulfonate into phenols over heterogeneous nickel catalysts. *Chemical communications*, **2016**, *48*, 7019.
- 12- Magallanes, Gabriel; et al. Selective C–O bond cleavage of lignin systems and polymers enabled by sequential palladium-catalyzed aerobic oxidation and visible-light photoredox catalysis. *ACS Catalysis*, **2019**, *9*, 2252.

-
- 13- Nichols, Jason M.; et al. Catalytic C- O bond cleavage of 2-aryloxy-1-arylethanol and its application to the depolymerization of lignin-related polymers. *Journal of the American Chemical Society*, **2010**, *132*, 12554.
- 14- Zhang, Z.; et al. Combined lignin defunctionalisation and synthesis gas formation by acceptorless dehydrogenative decarbonylation. *Green Chemistry*, **2020**, *22*, 3791.
- 15- Biannic, B.; Bozell, J. J. Efficient cobalt-catalyzed oxidative conversion of lignin models to benzoquinones. *Organic Letters*, **2013**, *15*, 2730.
- 16- Nishinaga, A.; Yamada, T.; Fujisawa, H.; Ishizaki, K.; Ihara, H.; Matsuura, T. Catalysis of cobalt-Schiff base complexes in oxygenation of alkenes: on the mechanism of ketonization. *Journal of molecular catalysis*, **1988**, *48*, 249.
- 17- Ali, S.; Milanezi, H.; Alves, T. M.; Tormena, C. F.; Ferreira, M. A. Cobalt-catalyzed stereoselective synthesis of 2, 5-trans-THF nitrile derivatives as a platform for diversification: development and mechanistic studies. *The Journal of Organic Chemistry*, **2018**, *83*, 7694.
- 18- Gupta, K. C.; Sutar, A. K. Catalytic activities of Schiff base transition metal complexes. *Coordination Chemistry Reviews*, **2008**, *252*, 1420.
- 19- Tokunaga, M. Asymmetric Catalysis with Water: Efficient Kinetic Resolution of Terminal Epoxides by Means of Catalytic Hydrolysis. *Science*, **1997**, *277*, 936.
- 20- Naruta, Y., Tani, F., Maruyama, K. Remarkable effects of metal ions and axial bases on catalytic and asymmetric oxidation of simple olefins with a "twin-coronet" porphyrin. *Tetrahedron letters*, **1992**, *33*, 6323.
- 21- Jacobsen, E. N.; Zhang, W.; Muci, A. R.; Ecker, J. R.; Deng, Li. Highly enantioselective epoxidation catalysts derived from 1,2-diaminocyclohexane. *Journal of the American Chemical Society*, **1991** *113*, 7063.
- 22- Gassman, P. G.; Sugawara, T.; Tillotson, L. G. Kinetic resolution via the transition metal complex promoted rearrangement of strained hydrocarbons. *The Journal of Organic Chemistry*, **1977**, *42*, 3785.
- 23- Bozell, J. J.; Hames, B. H.; Dimmel, D. R. Cobalt-Schiff base complex catalyzed oxidation of para-substituted phenolics. Preparation of benzoquinones. *The Journal of Organic Chemistry*, **1995**, *60*, 2398.
- 24- Cooper, C. J.; Alam, S.; Nziko, V. D. P. N.; Johnston, R. C.; Ivanov, A. S.; Mou, Z.; Parks, J. M. Co (salen)-catalyzed oxidation of lignin models to form benzoquinones and benzaldehydes: A computational and experimental study. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, **2020**, *8*, 7225.
- 25- Kervinen, K., Korpi, H., Mesu, J. G., Soulimani, F., Repo, T., Rieger, B., ... & Weckhuysen, B. M. Mechanistic Insights into the Oxidation of Veratryl Alcohol

with Co (salen) and Oxygen in Aqueous Media: An in-situ Spectroscopic Study. *European Journal of Inorganic Chemistry*, **2005**, *2005*, 2561.

26- Elder, T.; Bozell, J. J. Cobalt-schiff base complex catalyzed oxidation of para-substituted phenolics. molecular orbital calculations on phenolic substrates. *Holzforschung*, **1996**, *50*, 24.

27- Cedeno, D.; Bozell, J. J. Catalytic oxidation of para-substituted phenols with cobalt–Schiff base complexes/O₂—selective conversion of syringyl and guaiacyl lignin models to benzoquinones. *Tetrahedron Letters*, **2012**, *53*, 2380.

28- Elder, T; Bozell, J. J.; Cedeno, D. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2013**, *15*, 7328.

29- Biannic, B.; Bozell, J. J. Efficient Cobalt-Catalyzed Oxidative Conversion of Lignin Models to Benzoquinones. *Organic Letters*, **2013**, *15*, 2730.

30- Key, R. E.; Elder, T.; Bozell, J. J. Steric effects in the design of Co-Schiff base complexes for the catalytic oxidation of lignin models to para-benzoquinones. *Tetrahedron*, **2014**, *75*, 3118.

31- Key, R. E.; Elder, T.; Bozell, J. J. Steric effects of bulky tethered arylpiperazines on the reactivity of Co-Schiff base oxidation catalysts — a synthetic and computational study. *Tetrahedron*, **2019**, *75*, 3118.

32- Zuleta. E. C. et al. Deactivation of Co-Schiff base catalysts in the oxidation of para-substituted lignin models for the production of benzoquinones. *Catalysis, Science & Technology*, **2020**, *10*, 403.

33- (a) Maes, D. et al. Total synthesis of naturally occurring 5, 6, 7-and 5, 7, 8-trioxygenated coumarins. *Tetrahedron*, **2008**, *64*, 4438. (b) Benlloch, X. M.; Elhabiri, M.; Lanfranchi, D. A.; Charvet, E. D.-. A Practical and Economical High-Yielding, Six-Step Sequence Synthesis of a Flavone: Application to the Multigram-Scale Synthesis of Ladanein. *Organic Process Research & Development*, **2014**, *18*, 613. (c) Wang, Q.; Liao, X. L.; Xiang, C.; Yang, J. A practical synthesis of the flavone, scutellarein. *Journal of Chemical Research*, **2017**, *41*, 157.

34- Han, C.; Li, H.; Shi, R.; Zhang, T.; Tong, J.; Li, J.; Li, B. Organic quinones towards advanced electrochemical energy storage: recent advances and challenges. *Journal of Materials Chemistry A*, **2019**, *7*, 23378.

35- (a) Liu, Z.; Ju, X.; Ma, S.; Du, C.; Zhang, W.; Li, H.; She, X. Asymmetric total synthesis of (+)-winchinine B. *The Journal of organic chemistry*, **2019**, *84*, 14994. (b) Current, S. P. Catalytic synthesis of oxalate esters. *The Journal of Organic Chemistry*, **1983**, *48*, 1779.

36- Santiago, C. B.; Guo, J. Y.; Sigman, M. S. Predictive and mechanistic multivariate linear regression models for reaction development. *Chemical science*, **2018**, *9*, 2398.

-
- 37- Harper, K. C.; Bess, E. N.; Sigman, M. S., *Nature Chem.*, **2012**, *4*, 366.
- 38- (a) Gensch, T.; dos Passos Gomes, G.; Friederich, P.; Peters, E.; Gaudin, T.; Pollice, R.; Aspuru-Guzik, A. A comprehensive discovery platform for organophosphorus ligands for catalysis. *Journal of the American Chemical Society*, **2022**, *144*, 1205. (b) Barboza, A. A.; Neto, A. C.; Rosset, I. G.; Jardim, G. A.; Ferreira, M. A. Synthesis of 3-Carbonyl Trisubstituted Furans via Pd-Catalyzed Aerobic Cycloisomerization Reaction: Development and Mechanistic Studies. *The Journal of Organic Chemistry*, **86**, **2021**, 3923. (c) Williams, W. L.; Zeng, L.; Gensch, T.; Sigman, M. S.; Doyle, A. G.; Anslyn, E. V. The Evolution of Data-Driven Modeling in Organic Chemistry. *ACS central science*, **2021**, *7*, 1622.
- 39- Hansch, C.; Leo, A.; Taft, R. W. *Chem. Rev.* **1991**, *91*, 165.
- 40- Dherange, B. D.; Kelly, P. Q.; Liles, J. P.; Sigman, M. S.; Levin, M. D. Carbon Atom Insertion into Pyrroles and Indoles Promoted by Chlorodiazirines. *Journal of the American Chemical Society*, **2021**, *143*, 11337.
- 41- Mougel, V.; Santiago, C.; Zhizhko, P.; Bess, E.; Varga, J.; Frater, G.; Sigman, M. S.; Copéret, C. Quantitatively analyzing metathesis catalyst activity and structural features in silica-supported tungsten imido-alkylidene complexes. *Journal of the American Chemical Society*, **2015**, *137*, 6699-6704.
- 42- Macromodel versão 10.8. Schrödinger, Inc., LLC, New York, NY, **2015**.
- 43- Gaussian 16, Revisão B.01, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Li, X.; Caricato, M.; Marenich, A. V.; Bloino, J.; Janesko, B. G.; Gomperts, R.; Mennucci, B.; Hratchian, H. P.; Ortiz, J. V.; Izmaylov, A. F.; Sonnenberg, J. L.; Williams-Young, D.; Ding, F.; Lipparini, F.; Egidi, F.; Goings, J.; Peng, B.; Petrone, A.; Henderson, T.; Ranasinghe, D.; Zakrzewski, V. G.; Gao, J.; Rega, N.; Zheng, G.; Liang, W.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Throssell, K.; Montgomery, J. A., Jr.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M. J.; Heyd, J. J.; Brothers, E. N.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Keith, T. A.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A. P.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Millam, J. M.; Klene, M.; Adamo, C.; Cammi, R.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Farkas, O.; Foresman, J. B.; Fox, D. J. Gaussian, Inc., Wallingford CT, **2016**.
- 44- Glendening, E. D.; Landis, C. R.; Weinhold, F. NBO 6.0: Natural bond orbital analysis program. *Journal of computational chemistry*, **2013**, *34*, 1429.
- 45- (a) Zhao, Y.; Truhlar, D. G. The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: two new functionals and systematic testing of four M06-class functionals and 12 other functionals. *Theoretical chemistry accounts*, **2008**, *120*, 215. (b) Weigend, F.; Ahlrichs, R. Balanced basis sets of split valence, triple zeta valence and quadruple zeta valence quality for H to Rn: Design

and assessment of accuracy. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2005**, *7*, 3297.

46- MATLAB. *versão 7.10.0 (R2010a)*. Natick, Massachusetts: The MathWorks Inc., **2010**.

47- Jacobsen, E. N.; Zhang, W.; Muci, A. R.; Ecker, J. R., & Deng, L. Highly enantioselective epoxidation catalysts derived from 1, 2-diaminocyclohexane. *Journal of the American Chemical Society*, **1991**, *113*, 7063.

48- Elavarasan, P.; Rengadurai, S.; Upadhyayula, S. Kinetics of phenol alkylation with tert-butyl alcohol using supported ionic liquid catalyst. *Chemical Engineering Journal Advances*, **2020**, *4*, 100045.

49 - Hofsløkken, N. U.; Skattebøl, L. Convenient Method for the ortho-Formylation. *Acta Chem. Scand*, **1999**, *53*, 258-262.

50- Larrow, J. F.; Jacobsen, E. N.; Gao, Y.; Hong, Y.; Nie, X.; Zepp, C. M. A practical method for the large-scale preparation of [N, N'-Bis (3, 5-di-tertbutylsalicylidene)-1, 2-cyclohexanediaminato (2-)] manganese (III) chloride, a highly enantioselective epoxidation catalyst. *The Journal of Organic Chemistry*, **1994**, *59*, 1939.

51- Hansen, T. V.; Skattebøl, L. A high yielding one-pot method for the preparation of salen ligands. *Tetrahedron letters*, **2005**, *46*, 3829.

52- Kozuch, S.; Martin, J. M. "Turning over" definitions in catalytic cycles. *Acs Catalysis*, **2012**, *2*, 2787.

53- Henderson, R. K.; Hill, A. P.; Redman, A. M.; Sneddon, H. F. Development of GSK's acid and base selection guides. *Green Chemistry*, **2015**, *17*, 945.

54- Armarego, W. L. F., Perrin, D. D. Purification of Laboratory Chemicals. Pergamon Press: Oxford, **1988**.

55- Postnova, M. V.; Koshel, S. G.; Lebedeva, N. V.; Kuznetsova, E. A.; Koshel, G. N. Synthesis of cyclohexylphenols. *Russian journal of organic chemistry*, **2003**, *39*, 1415.

56- Rosevear, J.; & Wilshire, J. F. K. Preparation of some 2-(2'H-Benzotriazol-2'-yl) phenol ultraviolet absorbers: application of the transalkylation reaction. *Australian journal of chemistry*, **1985**, *38*, 1163.

57- Li, Z. W.; Ma, Z. H.; Li, S. Z.; Han, Z. G.; Zheng, X. Z.; & Lin, J. Synthesis and catalytic activity of rhenium carbonyl complexes containing alkyl-substituted tetramethylcyclopentadienyl ligands. *Transition Metal Chemistry*, **2017**, *42*, 137.

58- Morimura, S.; Horiuchi, H.; Murayama, K. Vilsmeier reaction of phenols. I. Synthesis of aryl formates. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **1977**, *50*, 2189.

-
- 59- Sun, M.; Xu, T.; Gao, W.; Liu, Y.; Wu, Q.; Mu, Y.; & Ye, L. Large ultra-high molecular weight polyethylene spherical particles produced by AIR 3 activated half-sandwich chromium (iii) catalysts. *Dalton Transactions*, **2011**, *40*, 10184.
- 60- Zeng, C.; Yuan, D.; Zhao, B.; & Yao, Y. Highly enantioselective epoxidation of α , β -unsaturated ketones catalyzed by rare-earth amides [(Me₃Si)₂N] 3RE (μ -Cl) Li (THF) 3 with phenoxy-functionalized chiral prolinols. *Organic letters*, **2015**, *17*, 2242.
- 61- Sinitskii, A. S.; Abramova, V. V.; & Tretyakov, Y. D. Structural and optical properties of titania photonic crystal films prepared by a sol-gel method. *Mendeleev Communications*, **2007**, *17*, 1.
- 62- Morandi, B.; Mariampillai, B.; & Carreira, E. M. Enantioselective Cobalt-Catalyzed Preparation of Trifluoromethyl-Substituted Cyclopropanes. *Angewandte Chemie International Edition*, **2011**, *50*, 1101.
- 63 - Hariharan, P. S.; & Anthony, S. P. Substitutional group dependent colori/fluorimetric sensing of Mn²⁺, Fe³⁺ and Zn²⁺ ions by simple Schiff base chemosensor. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **2015**, *136*, 1658.
- 64- Yao, X.; Qiu, M.; Lü, W.; Chen, H.; Zheng, Z. Substituted salen–Ru (II) complexes as catalysts in the asymmetric cyclopropanation of styrene by ethyl diazoacetate: the influence of substituents and achiral additives on activity and enantioselectivity. *Tetrahedron: Asymmetry*, **2001**, *12*(2), 197-204.
- 65- Zhang, G.; Constable, E. C.; Housecroft, C. E.; & Zampese, J. A. Assembling chiral salen–copper (II) complexes into a 2D-network with carboxylic acid functionalization. *Inorganic chemistry communications*, **2014**, *43*, 51-55.
- 66- Chen, X.; Yun, Y.; Dong, Z.; Zhou, Y.; Li, F.; Jiang, N.; & Chen, D. Unusual transformation of 4-hydroxy/methoxybenzylic alcohols via C-C ipso-substitution reaction using proton-exchanged montmorillonite as media. *Tetrahedron Lett.* **2020**, *61*, 152584.
- 67- Angle, S. R.; & Arnaiz, D. O. Formal [3+ 2] cycloaddition of benzylic cations with alkenes. *The Journal of Organic Chemistry*, **1992**, *57*(22), 5937-5947.
- 68- Wang, M. H.; & Chen, L. Y. An efficient FeCl₃-mediated approach for reduction of ketones through N-heterocyclic carbene boranes. *Tetrahedron Letters*, **2017**, *58*, 732.
- 69- Krishnan, R. B. J. S., Binkley, J. S., Seeger, R., & Pople, J. A. Self-consistent molecular orbital methods. XX. A basis set for correlated wave functions. *The Journal of chemical physics*, **1980**, *72*, 650.

70- McLean, A. D., & Chandler, G. S. Contracted Gaussian basis sets for molecular calculations. I. Second row atoms, Z= 11–18. *The Journal of chemical physics*, **1980**, *72*, 5639.

71- Grimme, S., Antony, J., Ehrlich, S., & Krieg, H. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *The Journal of chemical physics*, **2010**, *132*, 154104.

72- Luchini, G; Paton, R. bobbypaton/DBSTEP: 1.2-alpha Release (1.2-alpha). *Zenodo*. **2021**.

73- Falivene, L.; Cao, Z.; Petta, A.; Serra, L.; Poater, A.; Oliva, R.; Cavallo, L. Towards the online computer-aided design of catalytic pockets. *Nature Chemistry*, **2019**, *11*, 872.

7. Apêndices

Energias dos confôrmeros calculados.

| Confôrmero | Energia (Hartrees) | Energia no ponto zero (Hartrees) | Energia livre de Gibbs (Hartrees) |
|------------|--------------------|----------------------------------|-----------------------------------|
| s01_1 | -3441.659283 | 0.921805 | -3440.821632 |
| s01_2 | -3441.6599 | 0.921913 | -3440.821837 |
| s01_3 | -3441.658952 | 0.922325 | -3440.819365 |
| s01_4 | -3441.657764 | 0.922142 | -3440.818825 |
| s01_6 | -3441.658498 | 0.922266 | -3440.818152 |
| s01_7 | -3441.660785 | 0.921889 | -3440.822311 |
| s01_8 | -3441.660431 | 0.922928 | -3440.819129 |
| s02_1 | -3457.672595 | 0.910712 | -3456.847597 |
| s02_2 | -3457.653538 | 0.91137 | -3456.821397 |
| s02_3 | -3457.671331 | 0.910983 | -3456.843989 |
| s02_4 | -3457.671521 | 0.910612 | -3456.84478 |
| s02_5 | -3457.674421 | 0.910936 | -3456.847176 |
| s02_6 | -3457.655062 | 0.911387 | -3456.823243 |
| s02_7 | -3457.674315 | 0.9108 | -3456.846595 |
| s02_8 | -3457.645671 | 0.911886 | -3456.814185 |
| s03_1 | -3727.624091 | 1.019763 | -3726.692453 |
| s03_2 | -3727.624307 | 1.019048 | -3726.698533 |
| s03_3 | -3727.626539 | 1.020829 | -3726.69449 |
| s03_4 | -3727.62324 | 1.019173 | -3726.696424 |
| s03_5 | -3727.624724 | 1.019993 | -3726.695019 |
| s03_6 | -3727.626696 | 1.019106 | -3726.698252 |
| s03_7 | -3727.626729 | 1.019599 | -3726.697543 |
| s03_8 | -3727.630002 | 1.019689 | -3726.700661 |
| s03_9 | -3727.626452 | 1.019412 | -3726.698603 |
| s04_1 | -3496.920586 | 0.93831 | -3496.066833 |
| s04_2 | -3496.922028 | 0.937858 | -3496.069557 |
| s04_3 | -3496.926209 | 0.938399 | -3496.071673 |
| s04_4 | -3496.920592 | 0.93845 | -3496.066198 |
| s04_5 | -3496.92067 | 0.938159 | -3496.066265 |
| s04_6 | -3496.924025 | 0.939242 | -3496.067788 |
| s04_7 | -3496.924511 | 0.939466 | -3496.067211 |
| s05_1 | -3688.382001 | 0.993146 | -3687.475757 |
| s05_2 | -3688.381344 | 0.992769 | -3687.475434 |
| s05_3 | -3688.376936 | 0.991156 | -3687.476012 |

| | | | |
|--------|--------------|----------|--------------|
| s05_4 | -3688.381594 | 0.991687 | -3687.475421 |
| s05_5 | -3688.379387 | 0.991843 | -3687.476219 |
| s06_1 | -3766.875161 | 1.048423 | -3765.918761 |
| s06_10 | -3766.877461 | 1.047156 | -3765.92651 |
| s06_11 | -3766.879333 | 1.04831 | -3765.922958 |
| s06_12 | -3766.880426 | 1.048706 | -3765.923048 |
| s06_2 | -3766.875195 | 1.048755 | -3765.91761 |
| s06_3 | -3766.877438 | 1.050786 | -3765.91446 |
| s06_4 | -3766.876902 | 1.047941 | -3765.9209 |
| s06_5 | -3766.875848 | 1.048237 | -3765.919458 |
| s06_6 | -3766.877497 | 1.048462 | -3765.920203 |
| s06_7 | -3766.882173 | 1.049822 | -3765.920453 |
| s06_8 | -3766.883388 | 1.048933 | -3765.92473 |
| s06_9 | -3766.878085 | 1.047571 | -3765.923037 |
| s07_1 | -3958.332435 | 1.101973 | -3957.323324 |
| s07_2 | -3958.330496 | 1.100876 | -3957.325284 |
| s07_3 | -3958.331501 | 1.100399 | -3957.326982 |
| s07_4 | -3958.332821 | 1.102589 | -3957.322522 |
| s07_5 | -3958.331538 | 1.100871 | -3957.325415 |
| s07_6 | -3958.32737 | 1.100617 | -3957.321313 |
| s07_7 | -3958.329872 | 1.099441 | -3957.327266 |
| s07_8 | -3958.331971 | 1.099847 | -3957.327131 |
| s07_9 | -3958.334546 | 1.101006 | -3957.328578 |
| s08_3 | -3802.530513 | 1.008176 | -3801.61326 |
| s08_4 | -3802.530597 | 1.007342 | -3801.615559 |
| s08_6 | -3802.530088 | 1.007377 | -3801.615436 |
| s08_7 | -3802.530767 | 1.007437 | -3801.614192 |
| s08_8 | -3802.531794 | 1.00729 | -3801.6185 |
| s09_1 | -3442.844375 | 0.940167 | -3441.990366 |
| s09_2 | -3442.845666 | 0.940231 | -3441.990862 |
| s09_3 | -3442.843086 | 0.940674 | -3441.987057 |
| s10_1 | -3728.813325 | 1.037429 | -3727.871286 |
| s10_10 | -3728.808702 | 1.037801 | -3727.864788 |
| s10_11 | -3728.809511 | 1.038284 | -3727.863059 |
| s10_12 | -3728.810417 | 1.037759 | -3727.864907 |
| s10_2 | -3728.812098 | 1.037777 | -3727.86883 |
| s10_3 | -3728.812021 | 1.037303 | -3727.86995 |
| s10_4 | -3728.812836 | 1.037738 | -3727.866945 |
| s10_5 | -3728.811981 | 1.037585 | -3727.86873 |
| s10_6 | -3728.814174 | 1.037676 | -3727.870559 |
| s10_7 | -3728.808859 | 1.037654 | -3727.865632 |

| | | | |
|-----------|--------------|-----------|--------------|
| s10_8 | -3728.808032 | 1.037584 | -3727.865912 |
| s10_9 | -3728.807608 | 1.037374 | -3727.865572 |
| s11_1 | -3498.107864 | 0.955928 | -3497.239822 |
| s11_2 | -3498.108551 | 0.956714 | -3497.238156 |
| s11_3 | -3498.102945 | 0.956276 | -3497.234221 |
| s11_4 | -3498.101766 | 0.95718 | -3497.231045 |
| s11_5 | -3498.101757 | 0.956134 | -3497.234295 |
| s11_6 | -3498.104523 | 0.956545 | -3497.234374 |
| s12_1 | -3689.562038 | 1.009791 | -3688.644801 |
| s12_10 | -3689.558644 | 1.009335 | -3688.642621 |
| s12_2 | -3689.564306 | 1.009744 | -3688.645985 |
| s12_3 | -3689.563277 | 1.009437 | -3688.646486 |
| s12_4 | -3689.56078 | 1.009659 | -3688.641825 |
| s12_5 | -3689.563186 | 1.010214 | -3688.644649 |
| s12_6 | -3689.561595 | 1.009411 | -3688.643175 |
| s12_7 | -3689.560751 | 1.009467 | -3688.645006 |
| s12_8 | -3689.562026 | 1.009452 | -3688.645568 |
| s12_9 | -3689.557548 | 1.008963 | -3688.641724 |
| s13_1 | -3804.234655 | 1.055123 | -3803.276153 |
| s13_10 | -3804.237844 | 1.057184 | -3803.271066 |
| s13_11 | -3804.235388 | 1.057042 | -3803.270008 |
| s13_2 | -3804.214723 | 1.056196 | -3803.246901 |
| s13_3 | -3804.234443 | 1.055187 | -3803.274857 |
| s13_4 | -3804.232894 | 1.05542 | -3803.273846 |
| s13_5 | -3804.235766 | 1.056459 | -3803.27001 |
| s13_6 | -3804.234478 | 1.055555 | -3803.273544 |
| s13_7 | -3804.239542 | 1.055038 | -3803.28106 |
| s13_8 | -3804.237603 | 1.055173 | -3803.27895 |
| s13_9 | -3804.239701 | 1.056333 | -3803.275066 |
| s06_intra | -3651.287242 | 0.994663 | -3650.377838 |
| s10_intra | -3613.220712 | 0.983662 | -3612.328494 |
| MeOH | -115.5609520 | 0.0510460 | -115.5326190 |

Coordenadas das estruturas calculadas

s08_3

Co -0.34275 -0.06052 -0.8865
 N 0.53307 -0.08081 -2.5857
 N -1.95956 0.06785 -1.8784
 C -0.41694 -0.38249 -3.6472
 C 1.78409 0.15847 -2.7867
 C -1.70746 0.3572 -3.2843
 C -3.1451 -0.09177 -1.3846
 C 0.01731 -0.08792 -5.0708
 H -0.64724 -1.46745 -3.5592
 C 2.76312 0.3882 -1.7637
 H 2.16334 0.19593 -3.8222
 C -2.82185 0.03911 -4.2651
 H -1.4731 1.44388 -3.3592
 C -3.47489 -0.30275 -0.0115
 H -4.00871 -0.06245 -2.0705
 C -1.10603 -0.41428 -6.0456
 H 0.92188 -0.66505 -5.3279
 H 0.28669 0.98412 -5.1527
 C 4.04585 0.8329 -2.16
 C 2.46939 0.14908 -0.387
 C -2.37967 0.33646 -5.6916
 H -3.72939 0.61801 -4.0243
 H -3.08996 -1.03189 -4.1673
 C -4.83449 -0.56149 0.2963
 C -2.4863 -0.22171 1.0216
 H -1.30453 -1.50309 -6.0178
 H -0.79207 -0.18532 -7.0772
 C 5.05693 1.09139 -1.2538
 H 4.21096 0.98234 -3.2324
 C 3.51888 0.40623 0.5474
 O 1.32557 -0.27444 0.0433
 H -3.18831 0.08787 -6.3984
 H -2.20271 1.42431 -5.7965
 C -5.26318 -0.75256 1.5883
 H -5.53806 -0.60952 -0.5417
 C -2.9414 -0.35731 2.3853
 O -1.23806 -0.03891 0.781
 C 6.44288 1.59587 -1.6451
 C 4.74425 0.86805 0.1062
 C -6.70849 -1.05709 1.9719
 C -4.27808 -0.63188 2.6026
 C -1.966 -0.12811 3.5424
 C 6.70876 2.94179 -0.9635
 C 6.5725 1.79153 -3.152
 C 7.50126 0.58191 -1.2008
 H 5.49939 1.07741 0.8756
 C -7.61425 -1.14185 0.7478
 C -6.77275 -2.39987 2.7062
 C -7.24529 0.04945 2.8853
 H -4.61047 -0.75588 3.6373
 C -2.60955 -0.39632 4.9014
 C -1.53995 1.34567 3.5174
 C -0.73615 -1.04109 3.4422
 H 6.68889 2.86054 0.1355
 H 5.95161 3.68858 -1.2573
 H 7.70225 3.3307 -1.2474
 H 5.85411 2.53723 -3.5326
 H 7.58467 2.15345 -3.3981
 H 6.417 0.84895 -3.7038
 H 7.48359 0.4175 -0.111
 H 8.51315 0.93438 -1.467
 H 7.34012 -0.39437 -1.6885
 H -7.63967 -0.19081 0.1893
 H -7.29543 -1.93967 0.0557
 H -8.64773 -1.36839 1.0592
 H -6.40387 -3.217 2.0633
 H -7.81186 -2.63547 2.9961
 H -6.16538 -2.39905 3.626
 H -7.21545 1.02738 2.3758

H -8.29189 -0.15601 3.171
 H -6.66102 0.14051 3.8154
 H -3.47411 0.26059 5.0955
 H -2.94054 -1.44451 5.0058
 H -1.87077 -0.19968 5.6958
 H -2.4061 1.99607 3.732
 H -0.76168 1.54598 4.2776
 H -1.14497 1.62883 2.5292
 H -0.08509 -0.88066 4.3203
 H -1.04078 -2.10387 3.4505
 H -0.14924 -0.84784 2.5316
 C 3.24664 0.25634 2.012
 H 4.14193 -0.15958 2.5107
 H 2.42581 -0.47914 2.1577
 N 2.93549 1.52302 2.6776
 O -0.21218 -2.27942 -0.82
 H 0.61119 -2.13253 -0.3222
 C -1.11077 -3.03252 -0.039
 H -1.1549 -2.67548 1.0038
 H -0.84809 -4.10535 -0.0423
 O -0.12468 2.02407 -0.7988
 O -0.93598 2.66088 -0.1582
 H -2.11606 -2.92377 -0.4741
 C 1.86544 -2.27231 2.0263
 C 2.63675 1.2444 4.0717
 H 1.95732 2.11694 0.9389
 H 0.86479 1.87597 2.3022
 H 3.47521 0.64641 4.4798
 H 1.7204 0.61911 4.1737
 C 2.08009 6.53903 2.592
 C 0.91396 5.85422 2.9226
 C 0.83941 4.47184 2.7496
 C 1.93107 3.75826 2.2535
 C 3.09532 4.45697 1.9135
 C 3.17239 5.8347 2.0812
 H 2.13901 7.62337 2.7272
 H 0.05245 6.39872 3.3214
 H -0.07562 3.92929 3.0139
 H 3.94993 3.89078 1.5244
 H 4.08874 6.36847 1.8096
 C 2.03994 4.64832 6.5254
 C 1.10131 3.63386 6.3681
 N 1.29518 2.56666 5.5956
 C 2.4498 2.45916 4.9379
 C 3.46454 3.41725 5.0481
 C 3.253 4.53016 5.8479
 H 1.82569 5.50929 7.1639
 H 0.13739 3.69032 6.8916
 H 4.39082 3.28286 4.4817
 H 4.02204 5.303 5.9409

s08_4

Co -0.41671 -0.19584 -0.9336
 N 0.54548 -0.20484 -2.5717
 N -1.99601 -0.27215 -1.9913
 C -0.30946 -0.68057 -3.6484
 C 1.78184 0.13866 -2.7064
 C -1.6947 -0.07112 -3.4051
 C -3.20097 -0.3568 -1.5203
 C 0.16496 -0.44043 -5.0691
 H -0.42329 -1.77736 -3.4919
 C 2.66024 0.52306 -1.6362
 H 2.23077 0.14487 -3.715
 C -2.70856 -0.60386 -4.4027
 H -1.58265 1.02615 -3.5646
 C -3.57414 -0.44601 -0.1425
 H -4.04507 -0.36589 -2.2318
 C -0.85487 -0.97774 -6.0642
 H 1.14572 -0.91765 -5.2358
 H 0.30799 0.64776 -5.2234

C 3.93489 1.03144 -1.965
 C 2.28566 0.35847 -0.2633
 C -2.22994 -0.37226 -5.8299
 H -3.6913 -0.12529 -4.2563
 H -2.85108 -1.68751 -4.2166
 C -4.94846 -0.60574 0.1669
 C -2.60381 -0.36054 0.9063
 H -0.9179 -2.07797 -5.9579
 H -0.51679 -0.78791 -7.0962
 C 4.85922 1.41451 -1.0064
 H 4.17962 1.12598 -3.0311
 C 3.2369 0.74856 0.7231
 O 1.15654 -0.13472 0.1154
 H -2.96215 -0.77967 -6.5464
 H -2.18501 0.71717 -6.0223
 C -5.39607 -0.70222 1.4645
 H -5.65009 -0.65304 -0.6727
 C -3.05852 -0.46525 2.2696
 O -1.35255 -0.20915 0.6881
 C 6.22046 1.976 -1.4188
 C 4.46568 1.25923 0.3396
 C -6.86408 -0.87691 1.8455
 C -4.4123 -0.63015 2.4878
 C -2.03423 -0.38082 3.4075
 C 6.02121 3.24669 -2.2502
 C 6.97544 0.93651 -2.2523
 C 7.08147 2.3303 -0.2099
 H 5.14638 1.54034 1.1504
 C -7.7673 -0.9294 0.6176
 C -7.04345 -2.18445 2.6232
 C -7.3142 0.30021 2.7164
 H -4.76023 -0.70973 3.5221
 C -2.7011 -0.53704 4.7722
 C -1.32862 0.98235 3.3846
 C -0.9818 -1.49302 3.2799
 H 5.48108 4.01454 -1.6711
 H 5.44165 3.05256 -3.1677
 H 6.9945 3.66986 -2.5552
 H 6.42802 0.66669 -3.1705
 H 7.9635 1.32396 -2.5572
 H 7.13592 0.01041 -1.6746
 H 6.60759 3.09978 0.4224
 H 8.05225 2.7312 -0.5465
 H 7.28857 1.44961 0.4211
 H -7.70795 -0.00125 0.0243
 H -7.51542 -1.77713 -0.042
 H -8.81794 -1.05497 0.9286
 H -6.73475 -3.04979 2.0124
 H -8.10113 -2.32619 2.9069
 H -6.44841 -2.20143 3.5508
 H -7.20418 1.25426 2.1737
 H -8.375 0.18918 3.0021
 H -6.72808 0.37688 3.6467
 H -3.43913 0.25962 4.9677
 H -3.20841 -1.51149 4.8798
 H -1.93711 -0.47525 5.5647
 H -2.05859 1.80364 3.4885
 H -0.62022 1.05243 4.2294
 H -0.76192 1.13022 2.4537
 H -0.27032 -1.43453 4.1241
 H -1.45507 -2.49205 3.3111
 H -0.39953 -1.39836 2.3484
 C 2.85819 0.63022 2.1734
 H 1.92889 0.02663 2.2623
 H 2.59011 1.63469 2.5562
 N 3.9235 0.11309 3.0185
 O -0.10284 -2.38528 -0.6987
 H 0.49236 -2.21165 0.0523
 C -1.16861 -3.20975 -0.3001
 H -1.91447 -3.21034 -1.1109

H -1.66192 -2.84826 0.6195
 O -0.4917 1.91893 -0.9865
 O -0.20699 2.51565 0.0295
 H -0.84201 -4.25449 -0.1426
 C 3.61417 0.26886 4.4261
 C 4.39945 -1.19888 2.6246
 H 2.61898 -0.51498 4.6905
 H 4.34553 -0.32923 5.0013
 H 5.13035 -1.53621 3.3803
 H 4.94126 -1.11423 1.6655
 C 3.84783 4.3567 5.789
 C 2.80295 3.53746 6.2077
 C 2.72131 2.22241 5.7523
 C 3.68235 1.70421 4.8813
 C 4.72624 2.5375 4.4639
 C 4.80911 3.85187 4.9131
 H 3.91182 5.39085 6.1402
 H 2.03923 3.92638 6.888
 H 1.89349 1.58132 6.0758
 H 5.47305 2.13566 3.7708
 H 5.63173 4.49112 4.5777
 C 1.4017 -4.19834 2.3283
 C 1.76226 -3.57004 3.5203
 N 2.70513 -2.63885 3.6036
 C 3.33664 -2.2624 2.4862
 C 3.02615 -2.81465 1.2386
 C 2.05564 -3.80957 1.1626
 H 0.62996 -4.97318 2.321
 H 1.25964 -3.84714 4.4573
 H 3.54949 -2.46307 0.3428
 H 1.81107 -4.27103 0.1998

s08_6

Co -0.46386 -0.10008 -0.9299
 N 0.47762 -0.13074 -2.5893
 N -2.04446 -0.06112 -1.9916
 C -0.40952 -0.50157 -3.6808
 C 1.70949 0.21393 -2.7406
 C -1.74597 0.18853 -3.3962
 C -3.24351 -0.23846 -1.5381
 C 0.07396 -0.22734 -5.0919
 H -0.59405 -1.59306 -3.57
 C 2.63612 0.4834 -1.6773
 H 2.12385 0.29215 -3.7604
 C -2.80114 -0.21509 -4.4109
 H -1.55818 1.28184 -3.5003
 C -3.62343 -0.38673 -0.1697
 H -4.07876 -0.27168 -2.2584
 C -0.98739 -0.64168 -6.1019
 H 1.01829 -0.76318 -5.2889
 H 0.29037 0.85455 -5.1978
 C 3.89855 1.00409 -2.0244
 C 2.33176 0.14877 -0.317
 C -2.31124 0.05434 -5.8276
 H -3.74391 0.32838 -4.2306
 H -3.02399 -1.29349 -4.2852
 C -4.98874 -0.65492 0.102
 C -2.67993 -0.21876 0.8943
 H -1.13221 -1.73777 -6.0455
 H -0.64083 -0.4298 -7.1268
 C 4.90025 1.22338 -1.0916
 H 4.07059 1.24223 -3.0822
 C 3.39148 0.28637 0.6202
 O 1.17159 -0.28577 0.0695
 H -3.0751 -0.25908 -6.5581
 H -2.18398 1.14559 -5.9648
 C -5.46497 -0.76756 1.3867
 H -5.65793 -0.77178 -0.7571
 C -3.18313 -0.27974 2.2452
 O -1.42712 -0.02173 0.6925
 C 6.23744 1.83622 -1.5054
 C 4.60723 0.82868 0.2263
 C -6.91941 -1.07327 1.7333
 C -4.52332 -0.562 2.4286
 C -2.24692 0.01379 3.4204
 C 5.99573 3.20802 -2.1417

C 6.93376 0.9214 -2.5168
 C 7.16792 2.02625 -0.311
 H 5.36343 0.94311 1.0119
 C -7.77184 -1.26561 0.4832
 C -6.99104 -2.36034 2.5608
 C -7.51296 0.08552 2.5405
 H -4.89518 -0.62464 3.4553
 C -2.95356 -0.14327 4.7653
 C -1.77428 1.47007 3.3175
 C -1.0476 -0.94473 3.4252
 H 5.49522 3.88804 -1.4315
 H 5.36234 3.14095 -3.0415
 H 6.95164 3.67152 -2.4426
 H 6.32911 0.77867 -3.4277
 H 7.90391 1.34874 -2.8258
 H 7.12263 -0.07429 -2.0813
 H 6.72275 2.68628 0.4534
 H 8.11257 2.48936 -0.6421
 H 7.42179 1.06918 0.1749
 H -7.79232 -0.35813 -0.1437
 H -7.40966 -2.10426 -0.1353
 H -8.81294 -1.49143 0.7687
 H -6.58123 -3.2142 1.995
 H -8.03721 -2.59546 2.8243
 H -6.42334 -2.28081 3.5022
 H -7.47973 1.02412 1.9618
 H -8.56655 -0.12029 2.7989
 H -6.96904 0.25648 3.4836
 H -3.80413 0.55067 4.8752
 H -3.32175 -1.1715 4.9266
 H -2.24371 0.08468 5.5774
 H -2.63976 2.15429 3.3557
 H -1.10444 1.73274 4.1554
 H -1.22971 1.65951 2.3799
 H -0.40624 -0.73979 4.3015
 H -1.39031 -1.99257 3.5068
 H -0.43477 -0.84014 2.5173
 C 3.22001 -0.10142 2.0641
 H 4.13877 -0.61911 2.3918
 H 2.38656 -0.82663 2.1787
 N 3.0419 1.05842 2.9232
 O -0.30872 -2.30708 -0.7895
 H 0.48919 -2.12919 -0.2595
 C -1.22919 -3.05548 -0.0307
 H -2.20943 -2.99774 -0.5279
 H -1.34597 -2.65999 0.9928
 O -0.35552 1.97623 -0.9552
 O -0.01175 2.53209 0.0698
 H -0.93521 -4.11861 0.0264
 C 3.54598 0.87626 4.2663
 C 1.6926 1.58819 2.9014
 H 3.19075 1.73193 4.8723
 H 3.11996 -0.03315 4.7563
 H 1.03083 1.08539 3.639
 H 1.25178 1.38966 1.9077
 C 7.85482 0.79454 4.4012
 C 7.1231 -0.20416 5.037
 C 5.72868 -0.1851 4.9918
 C 5.04909 0.83028 4.3175
 C 5.79458 1.82902 3.6784
 C 7.18501 1.81329 3.7212
 H 8.94831 0.78082 4.4328
 H 7.63969 -1.00937 5.568
 H 5.15355 -0.97583 5.4871
 H 5.25671 2.61802 3.1392
 H 7.75504 2.60328 3.2219
 C 1.66543 5.75973 3.6471
 C 1.00174 4.83613 4.4478
 N 1.00639 3.52358 4.2177
 C 1.67834 3.06795 3.1601
 C 2.38474 3.91802 2.2973
 C 2.3739 5.28288 2.5439
 H 1.62925 6.82656 3.8831
 H 0.43832 5.17648 5.3271
 H 2.92448 3.48411 1.4478
 H 2.90862 5.97319 1.8842

s08_7

Co -0.34212 -0.08867 -0.9705
 N 0.5752 -0.16543 -2.6344
 N -1.94221 -0.14543 -1.9989
 C -0.31319 -0.64316 -3.6822
 C 1.80443 0.17477 -2.8208
 C -1.67333 0.00962 -3.4248
 C -3.13814 -0.2307 -1.5094
 C 0.13652 -0.45278 -5.1181
 H -0.45191 -1.73151 -3.4935
 C 2.73718 0.52808 -1.7881
 H 2.20962 0.18265 -3.8474
 C -2.7252 -0.51659 -4.3858
 H -1.53464 1.09882 -3.6157
 C -3.49294 -0.26129 -0.1255
 H -3.99125 -0.27526 -2.2081
 C -0.92 -0.98736 -6.0756
 H 1.10016 -0.96099 -5.293
 H 0.3043 0.62662 -5.306
 C 4.00202 1.01 -2.1787
 C 2.43702 0.3216 -0.4026
 C -2.27114 -0.33516 -5.8282
 H -3.68923 -0.00366 -4.2311
 H -2.89683 -1.59035 -4.1707
 C -4.86452 -0.42335 0.1931
 C -2.51587 -0.09642 0.9085
 H -1.01219 -2.08187 -5.937
 H -0.59998 -0.83578 -7.1197
 C 5.00791 1.30896 -1.273
 H 4.17691 1.14388 -3.2541
 C 3.48819 0.58085 0.5241
 O 1.29342 -0.10028 0.0265
 H -3.03076 -0.73829 -6.5181
 H -2.19828 0.74725 -6.0496
 C -5.3154 -0.43162 1.4925
 H -5.56172 -0.54497 -0.6427
 C -2.98709 -0.05586 2.2712
 O -1.25937 0.00807 0.675
 C 6.36186 1.83244 -1.7518
 C 4.71021 1.06132 0.0805
 C -6.77803 -0.61945 1.8862
 C -4.3372 -0.23563 2.5022
 C -1.9945 0.22728 3.4016
 C 6.15962 3.05882 -2.6456
 C 7.07971 0.73695 -2.546
 C 7.25561 2.2425 -0.5847
 H 5.46338 1.26408 0.8504
 C -7.67388 -0.81128 0.6668
 C -6.91526 -1.858 2.7771
 C -7.27115 0.61419 2.6489
 H -4.68636 -0.2181 3.5387
 C -2.66636 0.19058 4.7727
 C -1.4175 1.63475 3.2054
 C -0.86261 -0.81027 3.4217
 H 5.62089 3.85387 -2.1028
 H 5.57855 2.82185 -3.5519
 H 7.13268 3.46209 -2.9766
 H 6.49735 0.42409 -3.4286
 H 8.06307 1.09199 -2.9022
 H 7.24502 -0.15752 -1.9217
 H 6.78201 3.02308 0.0351
 H 8.20797 2.64809 -0.9655
 H 7.50268 1.38892 0.0683
 H -7.64638 0.06358 -0.0046
 H -7.38797 -1.70301 0.0835
 H -8.72052 -0.94802 0.9865
 H -6.57729 -2.76346 2.245
 H -7.96793 -2.00892 3.0743
 H -6.32021 -1.7726 3.701
 H -7.18945 1.52003 2.0247
 H -8.3293 0.49353 2.9405
 H -6.69332 0.7916 3.5705
 H -3.4712 0.93919 4.8652
 H -3.08896 -0.80271 5.0038
 H -1.92001 0.42029 5.552

H -2.2136 2.39432 3.289
H -0.66003 1.855 3.9798
H -0.9384 1.74394 2.2213
H -0.22301 -0.64822 4.3085
H -1.27255 -1.83342 3.4995
H -0.23098 -0.74569 2.5217
C 3.24819 0.3681 1.9889
H 4.14484 -0.09448 2.4439
H 2.41317 -0.35684 2.108
N 2.95883 1.59288 2.7384
O -0.0803 -2.29653 -0.6847
H 0.60512 -2.0617 -0.0361
C -1.09759 -3.05594 -0.0822
H -0.77283 -4.09312 0.1162
H -1.94633 -3.09526 -0.7829
O -0.3294 2.05977 -1.0923
O -1.18834 2.669 -0.5027
H -1.45851 -2.60789 0.8599
C 2.55734 1.24088 4.086
C 2.00251 2.46084 2.0675
H 1.56859 0.722 4.0941
H 3.28452 0.49287 4.4584
H 1.47614 3.0563 2.8385
H 1.20856 1.89493 1.5332
C 2.46631 4.50218 6.9048
C 1.41102 3.59609 6.8467
C 1.43833 2.55213 5.9235
C 2.51777 2.39322 5.0505
C 3.57548 3.30654 5.1226
C 3.55015 4.35301 6.0394
H 2.44591 5.32613 7.6241
H 0.55575 3.70466 7.5202
H 0.60537 1.84008 5.8777
H 4.42792 3.17871 4.4474
H 4.38515 5.05894 6.0829
C 3.60086 5.31323 -0.6448
C 2.37658 4.67266 -0.8125
N 1.89641 3.7699 0.0377
C 2.62252 3.44281 1.1065
C 3.87145 4.02607 1.3596
C 4.36076 4.97673 0.4747
H 3.94847 6.05309 -1.3712
H 1.74899 4.90512 -1.6843
H 4.43764 3.71216 2.2402
H 5.33051 5.45348 0.653

s08_8

Co -0.36418 0.01437 -0.95958
N 0.56799 -0.0305 -2.62207
N -1.95315 -0.14441 -1.99034
C -0.30101 -0.52412 -3.68167
C 1.79807 0.32034 -2.79682
C -1.69022 0.05948 -3.40994
C -3.12953 -0.38035 -1.5053
C 0.14018 -0.27545 -5.11176
H -0.39075 -1.6216 -3.52043
C 2.72469 0.67368 -1.75961
H 2.21192 0.32756 -3.81996
C -2.71731 -0.48211 -4.38839
H -1.6007 1.15888 -3.56811
C -3.47829 -0.47225 -0.12116
H -3.97181 -0.51218 -2.20615
C -0.89303 -0.82412 -6.08648
H 1.12271 -0.74012 -5.30149
H 0.26583 0.81476 -5.26749
C 4.02054 1.09069 -2.13657
C 2.40018 0.50112 -0.37595
C -2.26985 -0.23539 -5.82319
H -3.70234 -0.01598 -4.21758
H -2.84241 -1.56885 -4.21028
C -4.82118 -0.79423 0.19656
C -2.52999 -0.18934 0.91385
H -0.94078 -1.92506 -5.98005
H -0.5779 -0.62909 -7.12476
C 5.02011 1.35536 -1.21643
H 4.22293 1.19166 -3.21107

C 3.43616 0.74461 0.57169
O 1.24586 0.10264 0.04523
H -3.01118 -0.64743 -6.52752
H -2.24107 0.85554 -6.01009
C -5.26869 -0.84925 1.49619
H -5.49875 -0.99819 -0.63942
C -2.99971 -0.20237 2.2776
O -1.29728 0.0724 0.67703
C 6.41289 1.79284 -1.67047
C 4.68331 1.16943 0.14143
C -6.7008 -1.20197 1.88937
C -4.32097 -0.53752 2.50586
C -2.04664 0.18318 3.41447
C 6.31281 3.10888 -2.44632
C 7.01747 0.71407 -2.5741
C 7.35604 2.00116 -0.48772
H 5.44065 1.34431 0.913
C -7.56564 -1.50497 0.67
C -6.69711 -2.44141 2.78938
C -7.33469 -0.02748 2.64131
H -4.67162 -0.55995 3.54175
C -2.72603 0.0915 4.77895
C -1.58142 1.63283 3.22202
C -0.82067 -0.73948 3.4475
H 5.88007 3.90468 -1.81682
H 5.67907 3.01201 -3.34355
H 7.31177 3.44177 -2.7791
H 6.40632 0.53841 -3.47494
H 8.02683 1.00929 -2.91078
H 7.10473 -0.24453 -2.03523
H 6.9997 2.8008 0.18459
H 8.35279 2.29859 -0.85506
H 7.47442 1.08533 0.11628
H -7.6388 -0.63748 -0.00762
H -7.17642 -2.3611 0.09318
H -8.58998 -1.76031 0.98919
H -6.25596 -3.30599 2.26503
H -7.72634 -2.70992 3.08576
H -6.11849 -2.28143 3.71368
H -7.35571 0.87684 2.00991
H -8.3729 -0.26653 2.93157
H -6.78384 0.22234 3.5627
H -3.59005 0.77268 4.86195
H -3.06942 -0.93254 5.0059
H -2.00871 0.37873 5.56556
H -2.44315 2.32256 3.22121
H -0.91483 1.92823 4.05161
H -1.03044 1.76049 2.27852
H -0.16315 -0.45903 4.28991
H -1.11711 -1.794 3.59371
H -0.24147 -0.65232 2.51572
C 3.16639 0.4931 2.03488
H 2.10864 0.7102 2.25911
H 3.7773 1.18461 2.64158
N 3.44788 -0.86721 2.50086
O 0.02916 -2.19259 -0.74579
H 0.89172 -1.94855 -0.37282
C -0.69012 -2.91971 0.22646
H -0.32487 -3.95902 0.30736
H -1.74748 -2.94368 -0.07888
O -0.43311 2.12633 -1.08675
O -0.1677 2.75711 -0.08738
H -0.63699 -2.44414 1.22142
C 2.58624 -1.88625 1.94138
C 4.8468 -1.23862 2.42729
H 1.58378 -1.43741 1.8198
H 2.91081 -2.19139 0.91421
H 5.25624 -1.19693 1.39296
H 4.92847 -2.29279 2.75566
C 2.14946 -5.41164 4.38453
C 2.35657 -5.53449 3.01333
C 2.52024 -4.39402 2.22781
C 2.47217 -3.11908 2.79654
C 2.2659 -3.00709 4.1764
C 2.10605 -4.14299 4.96391
H 2.02486 -6.30423 5.00463
H 2.40034 -6.5254 2.55137

H 2.69525 -4.49253 1.1496
H 2.23308 -2.00609 4.62007
H 1.94272 -4.0403 6.0411
C 7.33687 1.14352 4.90176
C 7.532 0.99191 3.53257
N 6.74752 0.24571 2.75682
C 5.71987 -0.39588 3.31595
C 5.43924 -0.30197 4.68474
C 6.26086 0.4776 5.48704
H 8.00876 1.77121 5.49274
H 8.36411 1.50737 3.03324
H 4.57863 -0.84143 5.09145
H 6.06746 0.56713 6.56026

s01_1

Co -0.45603 -0.01146 -1.0741
N 0.50073 -0.21308 -2.7092
N -2.0247 0.05633 -2.1473
C -0.40242 -0.59835 -3.7841
C 1.77227 -0.04443 -2.8534
C -1.69684 0.18837 -3.5625
C -3.23706 0.05534 -1.6929
C 0.10666 -0.4467 -5.2052
H -0.65568 -1.66755 -3.6077
C 2.70851 0.21104 -1.7972
H 2.20989 -0.1195 -3.8639
C -2.76744 -0.2189 -4.5595
H -1.44196 1.25888 -3.7383
C -3.63453 0.05589 -0.3195
H -4.0701 0.06779 -2.4167
C -0.97022 -0.86009 -6.1993
H 1.01571 -1.05289 -5.3585
H 0.39381 0.61016 -5.376
C 4.05495 0.47061 -2.1515
C 2.3282 0.11505 -0.4227
C -2.25316 -0.07241 -5.9854
H -3.67756 0.38974 -4.426
H -3.05524 -1.27112 -4.3636
C -5.02256 0.00347 -0.0376
C -2.6776 0.16023 0.7402
H -1.18049 -1.93994 -6.0752
H -0.60368 -0.73496 -7.2314
C 5.04536 0.66247 -1.2096
H 4.28951 0.5129 -3.2207
C 3.35735 0.28952 0.5547
O 1.12788 -0.14309 -0.0246
H -3.02866 -0.38848 -6.7025
H -2.06139 0.99836 -6.1918
C -5.5058 0.04362 1.2496
H -5.70545 -0.06931 -0.8908
C -3.17538 0.22974 2.0922
O -1.41219 0.1912 0.536
C 6.50692 0.9378 -1.5498
C 4.64571 0.5706 0.1451
C -6.98924 -0.01576 1.6043
C -4.54185 0.1607 2.2853
C -2.19293 0.40506 3.2554
C 6.74046 0.98991 -3.0559
C 7.38147 -0.17797 -0.9683
C 6.93132 2.28305 -0.9534
H 5.39639 0.73114 0.9305
C -7.86607 -0.13159 0.3618
C -7.2582 -1.23498 2.4918
C -7.39247 1.25848 2.3531
H -4.91653 0.2054 3.312
C -2.90776 0.42773 4.6043
C -1.44746 1.73739 3.1002
C -1.17717 -0.74478 3.2907
H 6.15387 1.79241 -3.5344
H 6.48249 0.03527 -3.545
H 7.80473 1.1897 -3.2649
H 7.09998 -1.15745 -1.3912
H 8.44637 0.00123 -1.1987
H 7.2871 -0.25034 0.1279
H 6.31972 3.10485 -1.3625
H 7.98944 2.49478 -1.1871

H 6.82522 2.30274 0.1434
 H -7.74307 0.73493 -0.3098
 H -7.6459 -1.04738 -0.2126
 H -8.92873 -0.17333 0.6539
 H -6.98631 -2.16812 1.9698
 H -8.3278 -1.29239 2.7599
 H -6.6838 -1.19908 3.4317
 H -7.21503 2.152 1.731
 H -8.46455 1.23198 2.6161
 H -6.82622 1.38714 3.2899
 H -3.62083 1.26583 4.6854
 H -3.45311 -0.51098 4.8034
 H -2.16541 0.55294 5.4099
 H -2.15691 2.58291 3.1017
 H -0.75095 1.88028 3.9453
 H -0.8652 1.77071 2.1678
 H -0.48215 -0.61467 4.1397
 H -1.6858 -1.71745 3.4206
 H -0.58317 -0.76874 2.3651
 C 3.01639 0.13417 2.0176
 H 1.97267 0.45216 2.1809
 H 3.66347 0.80507 2.6114
 C 4.63154 -2.93547 3.48
 C 4.53515 -1.68085 2.6276
 C 2.27336 -2.20012 2.0061
 C 2.28297 -3.46736 2.8416
 H 4.35032 -2.67759 4.518
 H 5.67547 -3.29252 3.5054
 H 4.95099 -1.89926 1.6097
 H 5.16545 -0.87881 3.0543
 H 1.26252 -1.76281 1.9561
 H 2.56092 -2.46532 0.9534
 H 1.89169 -3.22813 3.8484
 H 1.60128 -4.21461 2.3982
 N 3.16984 -1.20767 2.5598
 O -0.37987 -2.22736 -0.8084
 H 0.43399 -2.08244 -0.2964
 C -1.33583 -2.87152 0.0006
 H -1.41064 -2.41397 1.0021
 H -1.1135 -3.94801 0.1119
 O -0.23172 2.07995 -1.2184
 O 0.12421 2.67351 -0.223
 C 3.69688 -4.01493 2.9567
 H 3.72751 -4.91145 3.5993
 H 4.04159 -4.33693 1.9536
 H -2.31718 -2.77362 -0.4887

s01_2
 Co -0.50499 -0.19788 -1.0788
 N 0.45294 -0.34395 -2.7164
 N -2.05955 0.03665 -2.154
 C -0.46174 -0.64103 -3.8073
 C 1.73223 -0.22546 -2.8424
 C -1.71329 0.20671 -3.5619
 C -3.26635 0.1615 -1.6998
 C 0.06278 -0.46703 -5.22
 H -0.77521 -1.70126 -3.6739
 C 2.6564 -0.02025 -1.7664
 H 2.17919 -0.28239 -3.85
 C -2.79818 -0.11051 -4.5765
 H -1.39973 1.26775 -3.6956
 C -3.67266 0.12498 -0.3296
 H -4.08655 0.31617 -2.4221
 C -1.02829 -0.79109 -6.2315
 H 0.9409 -1.11317 -5.3894
 H 0.4042 0.57895 -5.3535
 C 4.00614 0.27147 -2.0872
 C 2.25225 -0.14721 -0.4033
 C -2.27043 0.05375 -5.9955
 H -3.67688 0.53923 -4.428
 H -3.14085 -1.15212 -4.4129
 C -5.05811 0.22914 -0.0484
 C -2.72206 0.01149 0.7344
 H -1.29401 -1.8624 -6.1451
 H -0.65081 -0.65003 -7.2577
 C 4.96409 0.4879 -1.1181

H 4.26504 0.32951 -3.15
 C 3.24573 0.07795 0.5961
 O 1.05572 -0.45199 -0.0211
 H -3.05804 -0.19883 -6.7245
 H -2.02308 1.11929 -6.1668
 C -5.54296 0.21523 1.2389
 H -5.73785 0.32111 -0.9023
 C -3.21836 0.00015 2.0879
 O -1.461 -0.09172 0.5361
 C 6.42586 0.80632 -1.4171
 C 4.53426 0.39991 0.2284
 C -7.02451 0.32137 1.5911
 C -4.5829 0.09869 2.2792
 C -2.22748 -0.10995 3.2518
 C 6.70834 0.83598 -2.9154
 C 7.31858 -0.26492 -0.7822
 C 6.78263 2.17701 -0.8345
 H 5.23832 0.59709 1.0462
 C -7.89789 0.43274 0.3457
 C -7.46072 -0.92514 2.3674
 C -7.26206 1.56657 2.4512
 H -4.95893 0.08911 3.3065
 C -2.94262 -0.12226 4.6008
 C -1.26914 1.08875 3.2417
 C -1.41525 -1.40886 3.1483
 H 6.11573 1.6118 -3.4292
 H 6.49317 -0.13504 -3.393
 H 7.77289 1.06281 -3.0936
 H 7.09067 -1.2617 -1.1969
 H 8.38408 -0.04929 -0.976
 H 7.18427 -0.32002 0.311
 H 6.15777 2.96843 -1.2818
 H 7.8406 2.42149 -1.0352
 H 6.63478 2.21257 0.257
 H -7.65737 1.33242 -0.2456
 H -7.79343 -0.44882 -0.3093
 H -8.95951 0.50388 0.6359
 H -7.31032 -1.83622 1.7637
 H -8.53089 -0.86348 2.6323
 H -6.89553 -1.0496 3.3055
 H -6.96164 2.47996 1.9105
 H -8.33058 1.65982 2.7136
 H -6.69231 1.53514 3.3941
 H -3.51876 0.80254 4.7749
 H -3.62883 -0.98085 4.7019
 H -2.19854 -0.19994 5.4108
 H -1.82685 2.03613 3.3402
 H -0.57074 1.01861 4.095
 H -0.67755 1.12409 2.3152
 H -0.74172 -1.5006 4.0189
 H -2.08119 -2.29051 3.1481
 H -0.79604 -1.42177 2.2384
 C 2.80489 0.01794 2.0321
 H 2.11126 -0.84636 2.1676
 H 2.17123 0.90482 2.2308
 C 5.7721 -1.2852 3.9056
 C 4.52311 -1.31713 3.0456
 C 3.50817 0.45303 4.2992
 C 4.71169 0.54869 5.2196
 H 6.51029 -0.61018 3.4306
 H 6.23055 -2.2882 3.9412
 H 3.80518 -2.07243 3.4582
 H 4.76405 -1.64925 2.0205
 H 3.02084 1.43855 4.1986
 H 2.74502 -0.231 4.7543
 H 5.39715 1.31859 4.8185
 H 4.39288 0.89007 6.2192
 N 3.89308 -0.01115 2.9819
 O -0.56554 -2.40301 -0.9309
 H 0.08139 -2.34654 -0.2078
 C -1.73711 -3.05687 -0.5103
 H -2.15222 -2.62534 0.4172
 H -1.5693 -4.13789 -0.3593
 O -0.20283 1.87627 -1.0622
 O 0.22878 2.36712 -0.0386
 C 5.44035 -0.78373 5.3023
 H 6.3485 -0.70078 5.9235

H 4.7855 -1.52424 5.8032
 H -2.48792 -2.93914 -1.3076

s01_3
 Co -0.3529 -0.04082 -1.0571
 N 0.59796 -0.23525 -2.6929
 N -1.93131 -0.00613 -2.1223
 C -0.30291 -0.67048 -3.7492
 C 1.86859 -0.06408 -2.8415
 C -1.61208 0.09557 -3.543
 C -3.13999 0.06131 -1.6605
 C 0.19439 -0.55327 -5.1778
 H -0.53413 -1.73996 -3.5408
 C 2.79712 0.25068 -1.7953
 H 2.30862 -0.17352 -3.8478
 C -2.67924 -0.36842 -4.5192
 H -1.38131 1.16569 -3.7516
 C -3.52999 0.08412 -0.2855
 H -3.97579 0.10748 -2.38
 C -0.87875 -1.0219 -6.1512
 H 1.1156 -1.14405 -5.3174
 H 0.45761 0.50361 -5.3831
 C 4.14044 0.51471 -2.1556
 C 2.41089 0.22244 -0.4183
 C -2.1785 -0.25809 -5.9531
 H -3.60319 0.2219 -4.4005
 H -2.94047 -1.41985 -4.2838
 C -4.91689 0.10209 0.0071
 C -2.56422 0.11045 0.7706
 H -1.06295 -2.10204 -5.9927
 H -0.52174 -0.9204 -7.1893
 C 5.12461 0.77293 -1.2215
 H 4.37974 0.50446 -3.2245
 C 3.42263 0.51951 0.5456
 O 1.22786 -0.08308 -0.0073
 H -2.95135 -0.61578 -6.6533
 H -2.01363 0.80947 -6.196
 C -5.38826 0.12895 1.2993
 H -5.60912 0.09234 -0.8416
 C -3.04707 0.13005 2.1291
 O -1.30063 0.10437 0.5613
 C 6.58132 1.0578 -1.5757
 C 4.7166 0.76744 0.1331
 C -6.87047 0.14985 1.6635
 C -4.41344 0.13865 2.3322
 C -2.04051 0.14106 3.2847
 C 6.81992 1.01658 -3.0815
 C 7.4817 0.00656 -0.9198
 C 6.96999 2.44967 -1.0682
 H 5.45561 0.96781 0.9201
 C -7.75988 0.13592 0.4244
 C -7.21219 -1.08196 2.5075
 C -7.187 1.4186 2.4614
 H -4.77883 0.15546 3.3633
 C -1.16233 1.39737 3.2114
 C -1.14884 -1.10749 3.2255
 C -2.73956 0.14145 4.6421
 H 6.21964 1.77393 -3.6137
 H 6.5834 0.02689 -3.5079
 H 7.88083 1.22425 -3.2997
 H 7.22928 -1.00572 -1.2784
 H 8.5423 0.19969 -1.1586
 H 7.38366 0.00456 0.1778
 H 6.33945 3.22727 -1.5315
 H 8.02346 2.67233 -1.3127
 H 6.85832 2.53721 0.0247
 H -7.58547 1.01693 -0.2161
 H -7.60206 -0.77033 -0.1846
 H -8.82143 0.15113 0.7232
 H -7.00345 -2.01036 1.9493
 H -8.28183 -1.08096 2.7814
 H -6.63205 -1.11815 3.4439
 H -6.95812 2.32119 1.8699
 H -8.2566 1.44985 2.7337
 H -6.60633 1.47704 3.3964
 H -0.57828 1.42969 2.2798

C 2.40833 1.00491 5.0351
 C 3.65548 0.55647 4.28
 C 3.51588 2.4092 2.7633
 C 2.27381 2.95182 3.4643
 H 2.46515 0.68796 6.0914
 H 1.51924 0.50301 4.6047
 H 3.78253 -0.53903 4.3323
 H 4.54634 0.99821 4.7723
 H 4.41669 2.8869 3.2007
 H 3.5088 2.67506 1.6913
 H 2.24442 4.05187 3.3785
 H 1.36646 2.58057 2.9521
 N 3.66746 0.96584 2.8885
 O -0.5512 -2.42099 -0.8749
 H 0.1593 -2.3477 -0.2145
 C -1.6835 -3.05133 -0.3285
 H -1.98227 -2.6169 0.6411
 H -1.52297 -4.13656 -0.201
 O -0.1244 1.83855 -1.0888
 O 0.32552 2.33129 -0.0724
 C 2.24836 2.51585 4.9238
 H 3.08526 3.00409 5.4637
 H 1.32217 2.85485 5.4204
 H -2.5172 -2.91197 -1.0342

s01_7

Co -0.54713 -0.21489 -1.09515
 N 0.43742 -0.43991 -2.71077
 N -2.09125 -0.08715 -2.19956
 C -0.45571 -0.82551 -3.79164
 C 1.71094 -0.26875 -2.83183
 C -1.73041 0.00572 -3.61021
 C -3.30796 0.0043 -1.76524
 C 0.08225 -0.72099 -5.20614
 H -0.74436 -1.88272 -3.59753
 C 2.60555 0.05721 -1.75845
 H 2.17396 -0.36461 -3.82931
 C -2.79443 -0.39238 -4.61808
 H -1.43796 1.06387 -3.802
 C -3.72635 0.04402 -0.3983
 H -4.1268 0.06747 -2.5028
 C -0.98858 -1.12759 -6.20949
 H 0.97752 -1.35453 -5.32711
 H 0.40083 0.32343 -5.39644
 C 3.93261 0.43409 -2.07602
 C 2.18433 -0.0134 -0.39662
 C -2.251 -0.29751 -6.03764
 H -3.68792 0.24627 -4.51685
 H -3.11781 -1.43007 -4.40061
 C -5.11837 0.09675 -0.13573
 C -2.78289 0.06833 0.67817
 H -1.23277 -2.19754 -6.06368
 H -0.6009 -1.03823 -7.23764
 C 4.84968 0.7892 -1.10545
 H 4.2071 0.45209 -3.13628
 C 3.12208 0.37981 0.60086
 O 1.01216 -0.41384 -0.02223
 H -3.02321 -0.60824 -6.76058
 H -2.02367 0.76164 -6.26666
 C -5.61593 0.166 1.14496
 H -5.79247 0.08024 -0.99886
 C -3.29246 0.16114 2.02348
 O -1.51615 0.00363 0.49928
 C 6.27757 1.23604 -1.40556
 C 4.39896 0.75474 0.23521
 C -7.10481 0.21681 1.4779
 C -4.66239 0.19877 2.19704
 C -2.30916 0.23446 3.1968
 C 6.58512 1.20023 -2.89878
 C 7.26689 0.31094 -0.69091
 C 6.47322 2.67254 -0.90988
 H 5.06593 1.05793 1.05212
 C -7.96949 0.17761 0.22201
 C -7.47837 -0.98575 2.35009
 C -7.42157 1.51188 2.23231
 H -5.04875 0.26264 3.21853

s01_8

Co -0.44355 0.15232 -0.9616
 N 0.49486 -0.12511 -2.5974
 N -1.99761 0.34471 -2.0449
 C -0.43069 -0.37392 -3.6948
 C 1.7791 -0.14074 -2.7285
 C -1.64321 0.5267 -3.4457
 C -3.21499 0.31126 -1.6093
 C 0.10892 -0.20706 -5.1036
 H -0.79401 -1.41987 -3.5732
 C 2.73557 -0.01186 -1.6706
 H 2.20894 -0.27098 -3.7362
 C -2.73438 0.28631 -4.4727
 H -1.27945 1.57375 -3.5568
 C -3.62509 0.18762 -0.2457
 H -4.03909 0.37482 -2.3404
 C -0.99154 -0.4479 -6.1279
 H 0.9481 -0.9 -5.2837

H 0.51223 0.81935 -5.2138
 C 4.10336 0.07336 -2.0274
 C 2.34238 -0.02616 -0.2966
 C -2.18629 0.45989 -5.8827
 H -3.5811 0.97429 -4.3089
 H -3.12797 -0.74207 -4.3444
 C -5.00909 0.26952 0.0056
 C -2.68252 0.2489 0.8309
 H -1.31791 -1.50414 -6.0665
 H -0.59774 -0.30728 -7.1479
 C 5.11038 0.1492 -1.0874
 H 4.33933 0.07712 -3.0969
 C 3.3852 0.05854 0.6795
 O 1.11766 -0.13976 0.0978
 H -2.97947 0.26952 -6.6243
 H -1.87869 1.51392 -6.0243
 C -5.50646 -0.11405 1.2811
 H -5.67642 -0.00804 -0.8623
 C -3.20048 0.13681 2.1738
 O -1.42011 0.3911 0.6465
 C 6.59287 0.26126 -1.4292
 C 4.70139 0.12823 0.2672
 C -6.9847 -0.31515 1.603
 C -4.56048 -0.04845 2.3365
 C -2.24804 0.25374 3.3661
 C 6.82973 0.27794 -2.9356
 C 7.35038 -0.93193 -0.8391
 C 7.15095 1.56195 -0.8424
 H 5.46878 0.1697 1.0517
 C -7.84049 -0.34817 0.3408
 C -7.17427 -1.64342 2.3418
 C -7.4825 0.83432 2.4847
 H -4.94386 -0.14756 3.3563
 C -1.64904 1.6653 3.381
 C -1.13138 -0.79714 3.2859
 C -2.96533 0.04593 4.6981
 H 6.33157 1.13481 -3.4199
 H 6.47136 -0.64741 -3.4178
 H 7.90907 0.36222 -3.1457
 H 6.97168 -1.88171 -1.2533
 H 8.4272 -0.86214 -1.0729
 H 7.25334 -0.98383 0.2574
 H 6.62215 2.43743 -1.256
 H 8.22449 1.66652 -1.0785
 H 7.04779 1.59984 0.2546
 H -7.77208 0.59565 -0.2262
 H -7.55157 -1.17508 -0.3299
 H -8.9002 -0.49566 0.60839
 H -6.83474 -2.48989 1.721
 H -8.23897 -1.80424 2.5862
 H -6.60964 -1.67593 3.2878
 H -7.36348 1.80306 1.9707
 H -8.55208 0.70393 2.7259
 H -6.93405 0.89383 3.4389
 H -1.14543 1.9017 2.4326
 H -2.43893 2.41737 3.5498
 H -0.90909 1.75998 4.1962
 H -0.54326 -0.70134 2.3613
 H -0.44405 -0.67997 4.1425
 H -1.55562 -1.81621 3.3385
 H -2.23865 0.14152 5.522
 H -3.75375 0.79766 4.8723
 H -3.42013 -0.95689 4.775
 C 3.02768 0.13766 2.1449
 H 3.82326 -0.34875 2.7385
 H 2.09397 -0.42025 2.3252
 C 1.46667 3.49322 2.8176
 C 1.77469 2.22862 2.039
 C 4.07022 2.25974 2.7529
 C 3.84482 3.53076 3.5552
 H 1.09666 3.21266 3.8221
 H 0.65294 4.04686 2.317
 H 2.03914 2.51396 0.9893
 H 0.88881 1.57462 1.9617
 H 4.85266 1.63921 3.2287
 H 4.46033 2.53954 1.7396
 H 3.58438 3.25015 4.593

H 4.78031 4.11485 3.6014
N 2.8525 1.4838 2.6647
O -0.57747 -2.05221 -0.6802
H 0.08351 -1.96471 0.0269
C -1.71139 -2.74993 -0.2291
H -2.15097 -2.30792 0.6831
H -1.48567 -3.8141 -0.0379
O -0.13637 2.20958 -0.9946
O 0.94447 2.62941 -1.3671
C 2.71435 4.35133 2.9542
H 2.51629 5.2538 3.5577
H 3.01988 4.70675 1.9499
H -2.47171 -2.70252 -1.0242

H 7.3793 0.8989 0.3081
H -7.36312 1.85182 -0.1666
H -7.78567 0.12529 -0.3599
H -8.80459 1.1894 0.6353
H -7.57395 -1.46339 1.613
H -8.64801 -0.37094 2.531
H -7.08242 -0.8605 3.2144
H -6.55245 2.72472 2.0743
H -8.04531 2.07423 2.8127
H -6.45153 1.64931 3.4836
H -3.96389 -2.20659 3.9192
H -2.66501 -2.8428 2.8814
H -2.34687 -2.51826 4.6059
H -3.79161 0.14325 4.8891
H -2.12808 -0.11677 5.4356
H -2.50506 1.24194 4.3418
H -0.45857 -1.03568 4.1683
H -0.57943 -1.46484 2.4388
H -0.49892 -2.2808 2.9058
C 2.90838 0.59486 2.0694
H 3.76502 0.29353 2.7011
H 2.07435 -0.10803 2.2929
C 1.08055 3.88386 2.0761
C 1.44827 2.47665 1.6469
C 2.30231 2.05992 3.8633
C 1.90388 3.47732 4.2532
H 0.22589 4.24574 1.4796
H 1.93432 4.55599 1.8684
H 1.74547 2.49017 0.5838
H 0.55864 1.802 1.7019
H 1.5113 1.33765 4.1874
H 3.21828 1.76783 4.4102
H 1.67202 3.5211 5.3322
H 2.76637 4.14687 4.0736
N 2.55405 1.95842 2.4389
O -0.34365 -2.41664 -0.7938
H 0.29096 -2.31395 -0.0647
C -1.48228 -3.13228 -0.3831
H -1.26342 -4.20693 -0.2553
H -2.24168 -3.03081 -1.1747
O -0.20294 1.80387 -1.0653
O -1.10373 2.50512 -0.6313
N 0.77437 3.98471 3.4952
C -0.48763 3.37903 3.8851
H -1.91396 -2.738 0.5532
H -0.60597 3.54747 4.9738
H -0.50931 2.2746 3.7466
C -3.86785 5.04276 1.7984
C -3.14208 5.82764 2.697
C -2.04777 5.29148 3.369
C -1.66707 3.96183 3.1595
C -2.38909 3.19205 2.246
C -3.48633 3.72345 1.5692
H -4.72871 5.46668 1.2719
H -3.43493 6.86724 2.8738
H -1.46665 5.90419 4.0671
H -2.07693 2.16058 2.0475
H -4.03205 3.09485 0.8557

H 1.03393 -1.1571 -5.3529
H 0.38833 0.4972 -5.34
C 3.91726 0.56546 -2.0205
C 2.20657 -0.04566 -0.3538
C -2.23766 -0.20192 -6.0092
H -3.69133 0.2082 -4.4634
H -3.05159 -1.44641 -4.4265
C -5.10557 -0.13107 -0.0982
C -2.77029 -0.18552 0.7158
H -1.14054 -2.05399 -6.1291
H -0.56109 -0.81299 -7.2451
C 4.84494 0.88876 -1.0423
H 4.18258 0.66006 -3.0816
C 3.15602 0.29343 0.6484
O 1.04436 -0.49978 -0.0075
H -2.99837 -0.51001 -6.7453
H -2.05582 0.87558 -6.1876
C -5.60526 -0.13478 1.1834
H -5.7785 -0.1055 -0.9619
C -3.2827 -0.17545 2.0629
O -1.50258 -0.22781 0.5354
C 6.24224 1.37641 -1.426
C 4.41699 0.74687 0.2922
C -7.0948 -0.10875 1.5162
C -4.65302 -0.15467 2.2367
C -2.3019 -0.16952 3.2403
C 6.13116 2.65549 -2.2608
C 6.95494 0.29561 -2.2442
C 7.0955 1.68359 -0.199
H 5.07898 1.02099 1.12
C -7.95753 -0.09309 0.2584
C -7.46323 -1.35334 2.3296
C -7.41921 1.14737 2.3307
H -5.04046 -0.14903 3.2597
C -3.0318 -0.15687 4.5814
C -1.41978 1.08598 3.1787
C -1.41108 -1.41926 3.2108
H 5.62116 3.45228 -1.6935
H 5.5633 2.49304 -3.1916
H 7.13287 3.02457 -2.5431
H 6.4104 0.05386 -3.1719
H 7.96806 0.62842 -2.5309
H 7.0538 -0.63658 -1.6626
H 6.65267 2.48002 0.4221
H 8.09472 2.02755 -0.5149
H 7.23763 0.79392 0.4369
H -7.765 0.79932 -0.3608
H -7.79153 -0.98816 -0.3648
H -9.02508 -0.07745 0.5348
H -7.24955 -2.27289 1.7588
H -8.5384 -1.34915 2.5809
H -6.90345 -1.41128 3.2773
H -7.17121 2.05904 1.7613
H -8.49416 1.18172 2.5806
H -6.85863 1.184 3.279
H -3.65903 0.74235 4.7059
H -3.67144 -1.04595 4.7168
H -2.29474 -0.1564 5.4014
H -2.04127 1.99926 3.1741
H -0.76582 1.12743 4.0698
H -0.78118 1.09317 2.2813
H -0.72197 -1.41009 4.0741
H -2.02173 -2.33744 3.28
H -0.80471 -1.45833 2.2932
C 2.7687 0.18032 2.0975
H 3.25023 -0.71301 2.542
H 1.67089 0.00507 2.1664
C 2.85749 3.71538 3.3325
C 2.40931 2.51725 2.5156
C 3.07842 1.06676 4.3045
C 3.51159 2.28434 5.1072
H 2.26541 4.60663 3.0656
H 3.91274 3.93806 3.0845
H 2.5494 2.72067 1.4396
H 1.31232 2.34062 2.6504
H 2.03888 0.76594 4.5923
H 3.72586 0.20586 4.5522

s03_1

Co -0.43013 -0.23056 -0.9922
N 0.53412 -0.38666 -2.6279
N -1.98713 -0.08831 -2.0806
C -0.36504 -0.78182 -3.6999
C 1.80091 -0.19698 -2.7697
C -1.65017 0.02313 -3.4974
C -3.18086 0.13224 -1.6295
C 0.15058 -0.66327 -5.1215
H -0.63112 -1.84584 -3.5089
C 2.71204 0.13662 -1.7137
H 2.2455 -0.27871 -3.7766
C -2.7222 -0.40917 -4.4838
H -1.38805 1.08766 -3.6979
C -3.60038 0.12431 -0.2646
H -3.98506 0.3352 -2.3577
C -0.92579 -1.09693 -6.1078
H 1.05824 -1.27577 -5.257
H 0.44118 0.38843 -5.316
C 4.01734 0.53518 -2.0685
C 2.32198 0.06334 -0.3369
C -2.20849 -0.30349 -5.9135
H -3.63315 0.20144 -4.3695
H -3.00927 -1.45491 -4.2536
C -4.97382 0.36039 -0.0129
C -2.6795 -0.12312 0.8105
H -1.13721 -2.17361 -5.9605
H -0.55789 -0.9949 -7.1419
C 4.96297 0.92387 -1.134
H 4.2662 0.54692 -3.1377
C 3.28932 0.48319 0.6214
O 1.16251 -0.35191 0.0569
H -2.98462 -0.63891 -6.621
H -2.0168 0.76118 -6.1494
C -5.49397 0.32231 1.2603
H -5.61325 0.57859 -0.875
C -3.23533 -0.26377 2.1336
O -1.41489 -0.21588 0.6228
C 6.35939 1.36289 -1.5745
C 4.54565 0.90023 0.2121
C -6.9489 0.62882 1.6008
C -4.58905 -0.0237 2.2919
C -2.43546 -0.72181 3.37
C 6.24939 2.58147 -2.4957
C 7.04361 0.21723 -2.3259
C 7.23831 1.7436 -0.387
H 5.22553 1.24206 1.
C -7.7618 0.96524 0.3551
C -7.59451 -0.58355 2.2784
C -7.00115 1.8338 2.5459
H -4.99895 -0.1106 3.304
C -2.882 -2.14981 3.7128
C -2.7386 0.1882 4.5686
C -0.91274 -0.74787 3.2029
H 5.75957 3.42303 -1.9775
H 5.66274 2.36168 -3.4028
H 7.25037 2.91581 -2.8207
H 6.48013 -0.08129 -3.2253
H 8.0557 0.51492 -2.6521
H 7.14058 -0.67328 -1.6821
H 6.81808 2.58949 0.1822
H 8.23659 2.04882 -0.7428

s03_2

Co -0.52483 -0.3044 -1.0681
N 0.46177 -0.39938 -2.6937
N -2.07579 -0.17088 -2.1654
C -0.41712 -0.76355 -3.7936
C 1.72493 -0.168 -2.8064
C -1.72261 0.00602 -3.5704
C -3.29368 -0.12159 -1.7274
C 0.11369 -0.56754 -5.2009
H -0.66303 -1.83977 -3.6525
C 2.61209 0.12847 -1.7165
H 2.18826 -0.18808 -3.808
C -2.77231 -0.38702 -4.5953
H -1.47397 1.08326 -3.7109
C -3.71285 -0.158 -0.3612
H -4.1134 -0.03395 -2.4614
C -0.94192 -0.96885 -6.2224

H 1.03393 -1.1571 -5.3529
H 0.38833 0.4972 -5.34
C 3.91726 0.56546 -2.0205
C 2.20657 -0.04566 -0.3538
C -2.23766 -0.20192 -6.0092
H -3.69133 0.2082 -4.4634
H -3.05159 -1.44641 -4.4265
C -5.10557 -0.13107 -0.0982
C -2.77029 -0.18552 0.7158
H -1.14054 -2.05399 -6.1291
H -0.56109 -0.81299 -7.2451
C 4.84494 0.88876 -1.0423
H 4.18258 0.66006 -3.0816
C 3.15602 0.29343 0.6484
O 1.04436 -0.49978 -0.0075
H -2.99837 -0.51001 -6.7453
H -2.05582 0.87558 -6.1876
C -5.60526 -0.13478 1.1834
H -5.7785 -0.1055 -0.9619
C -3.2827 -0.17545 2.0629
O -1.50258 -0.22781 0.5354
C 6.24224 1.37641 -1.426
C 4.41699 0.74687 0.2922
C -7.0948 -0.10875 1.5162
C -4.65302 -0.15467 2.2367
C -2.3019 -0.16952 3.2403
C 6.13116 2.65549 -2.2608
C 6.95494 0.29561 -2.2442
C 7.0955 1.68359 -0.199
H 5.07898 1.02099 1.12
C -7.95753 -0.09309 0.2584
C -7.46323 -1.35334 2.3296
C -7.41921 1.14737 2.3307
H -5.04046 -0.14903 3.2597
C -3.0318 -0.15687 4.5814
C -1.41978 1.08598 3.1787
C -1.41108 -1.41926 3.2108
H 5.62116 3.45228 -1.6935
H 5.5633 2.49304 -3.1916
H 7.13287 3.02457 -2.5431
H 6.4104 0.05386 -3.1719
H 7.96806 0.62842 -2.5309
H 7.0538 -0.63658 -1.6626
H 6.65267 2.48002 0.4221
H 8.09472 2.02755 -0.5149
H 7.23763 0.79392 0.4369
H -7.765 0.79932 -0.3608
H -7.79153 -0.98816 -0.3648
H -9.02508 -0.07745 0.5348
H -7.24955 -2.27289 1.7588
H -8.5384 -1.34915 2.5809
H -6.90345 -1.41128 3.2773
H -7.17121 2.05904 1.7613
H -8.49416 1.18172 2.5806
H -6.85863 1.184 3.279
H -3.65903 0.74235 4.7059
H -3.67144 -1.04595 4.7168
H -2.29474 -0.1564 5.4014
H -2.04127 1.99926 3.1741
H -0.76582 1.12743 4.0698
H -0.78118 1.09317 2.2813
H -0.72197 -1.41009 4.0741
H -2.02173 -2.33744 3.28
H -0.80471 -1.45833 2.2932
C 2.7687 0.18032 2.0975
H 3.25023 -0.71301 2.542
H 1.67089 0.00507 2.1664
C 2.85749 3.71538 3.3325
C 2.40931 2.51725 2.5156
C 3.07842 1.06676 4.3045
C 3.51159 2.28434 5.1072
H 2.26541 4.60663 3.0656
H 3.91274 3.93806 3.0845
H 2.5494 2.72067 1.4396
H 1.31232 2.34062 2.6504
H 2.03888 0.76594 4.5923
H 3.72586 0.20586 4.5522

H 3.4111 2.08585 6.1887
H 4.58379 2.46937 4.9037
N 3.17009 1.33214 2.8825
O -0.46428 -2.50348 -0.9071
H 0.22361 -2.3911 -0.228
C -1.56676 -3.21391 -0.3993
H -1.33991 -4.28857 -0.2843
H -2.39001 -3.11612 -1.1242
O -0.34422 1.77005 -1.0622
O 0.01215 2.29414 -0.0241
N 2.77382 3.48575 4.767
C 1.42962 3.52887 5.3102
H -1.91666 -2.81553 0.5686
H 1.50995 3.29405 6.3898
H 0.74449 2.75874 4.8876
C -0.4081 7.40023 4.865
C -1.06998 6.26033 4.418
C -0.47288 5.00718 4.5557
C 0.7854 4.87815 5.1462
C 1.44697 6.03104 5.5838
C 0.85512 7.28202 5.4469
H -0.87304 8.38465 4.7561
H -2.05601 6.34504 3.9514
H -0.98734 4.10913 4.1937
H 2.44443 5.92816 6.0239
H 1.38172 8.17572 5.7958

s03_3

Co -0.5072 -0.09635 -0.9771
N 0.45747 -0.26187 -2.614
N -2.05716 0.08993 -2.065
C -0.45036 -0.53909 -3.7175
C 1.73787 -0.16362 -2.7386
C -1.70333 0.30338 -3.4629
C -3.27556 0.07742 -1.629
C 0.08543 -0.33537 -5.1224
H -0.76562 -1.60133 -3.6061
C 2.67229 0.02256 -1.668
H 2.18142 -0.22671 -3.7471
C -2.77946 0.01975 -4.4956
H -1.3883 1.36714 -3.5636
C -3.69347 -0.0654 -0.2705
H -4.09636 0.17479 -2.36
C -0.99945 -0.62414 -6.1509
H 0.95925 -0.98429 -5.3027
H 0.43627 0.71079 -5.2264
C 4.02536 0.26902 -2.0059
C 2.27176 -0.07838 -0.3006
C -2.23672 0.22424 -5.9035
H -3.65649 0.66881 -4.3336
H -3.12751 -1.02529 -4.3702
C -5.08486 -0.1835 -0.0282
C -2.75475 -0.08018 0.8108
H -1.27449 -1.69516 -6.0957
H -0.61097 -0.45908 -7.1693
C 5.0071 0.43968 -1.0512
H 4.27074 0.32683 -3.0718
C 3.28401 0.12252 0.6901
O 1.06682 -0.35452 0.0764
H -3.01873 0.00001 -6.6474
H -1.97925 1.29231 -6.04
C -5.59253 -0.34114 1.2399
H -5.74906 -0.15258 -0.8985
C -3.28125 -0.22917 2.1464
O -1.48672 0.02234 0.637
C 6.46812 0.73844 -1.3722
C 4.58807 0.3533 0.2978
C -7.07943 -0.48589 1.5518
C -4.64845 -0.36015 2.299
C -2.32925 -0.2022 3.3449
C 6.72072 0.79243 -2.8752
C 7.36307 -0.35154 -0.7755
C 6.84773 2.09706 -0.7736
H 5.33342 0.48644 1.0933
C -7.93137 -0.43907 0.2876
C -7.33161 -1.82752 2.2466
C -7.52676 0.65587 2.4698
H -5.03962 -0.48308 3.3131
C -3.05247 -0.48426 4.6603
C -1.71169 1.1981 3.4462
C -1.22611 -1.26166 3.2048
H 6.12869 1.58512 -3.3631
H 6.48366 -0.16693 -3.3658
H 7.78433 1.0088 -3.0704
H 7.11399 -1.33971 -1.1979
H 8.42525 -0.14424 -0.9939
H 7.2588 -0.42067 0.3194
H 6.21415 2.89883 -1.1903
H 7.90104 2.34139 -0.997
H 6.72863 2.11597 0.3224
H -7.81842 0.51865 -0.2481
H -7.6776 -1.25608 -0.409
H -8.99758 -0.54703 0.5479
H -7.02833 -2.66797 1.5994
H -8.4035 -1.94763 2.4827
H -6.77335 -1.91667 3.1929
H -7.36294 1.63436 1.9877
H -8.60158 0.56623 2.7062
H -6.97778 0.65957 3.4256
H -3.83577 0.26077 4.8789
H -3.51468 -1.48671 4.6737
H -2.32797 -0.4428 5.4905
H -2.47742 1.93801 3.7357
H -0.91201 1.21479 4.209
H -1.27716 1.51793 2.4882
H -0.58473 -1.25339 4.1036
H -1.66823 -1.27166 3.1244
H -0.5891 -1.0821 2.3267
C 2.88327 0.21195 2.1422
H 3.70452 -0.16188 2.7799
H 2.00227 -0.42517 2.3256
C 3.27808 3.75412 3.3609
C 3.70486 2.44387 2.7154
C 1.48453 2.18691 1.8381
C 1.08295 3.4978 2.4906
H 4.13906 4.43827 3.4508
H 2.92057 3.53705 4.3852
H 4.47088 1.95107 3.3431
H 4.19606 2.65789 1.732
H 1.77585 2.38127 0.7762
H 0.63158 1.48917 1.7878
H 0.28425 3.98303 1.9019
H 0.6715 3.28518 3.4959
N 2.56353 1.56283 2.5828
O -0.54096 -2.29022 -0.7986
H 0.13048 -2.21956 -0.0987
C -1.65917 -3.01949 -0.3556
H -2.06526 -2.63736 0.5974
H -1.42371 -4.09221 -0.2403
O -0.18604 1.93342 -1.0091
O -1.02652 2.65412 -0.4974
N 2.20053 4.41627 2.6434
C 2.60102 5.06891 1.4125
H -2.44473 -2.92512 -1.1213
H 1.68171 5.48453 0.955
H 3.02341 4.37907 0.646
C 5.39484 8.28994 2.0493
C 4.2318 8.20365 2.8161
C 3.33577 7.15921 2.6139
C 3.5844 6.18479 1.6405
C 4.75612 6.27398 0.8866
C 5.65577 7.32128 1.0844
H 6.09964 9.11131 2.2096
H 4.02388 8.95972 3.5795
H 2.42802 7.07206 3.2201
H 4.96578 5.50557 0.1333
H 6.5694 7.37566 0.4847
C -0.4234 -0.56031 -3.7073
C 1.74264 -0.00947 -2.758
C -1.72815 0.21102 -3.4882
C -3.27602 0.00779 -1.6288
C 0.09247 -0.39477 -5.1245
H -0.6667 -1.63341 -3.5383
C 2.67038 0.26502 -1.6928
H 2.19054 -0.09218 -3.7633
C -2.78768 -0.19917 -4.4953
H -1.48383 1.28549 -3.6535
C -3.67566 -0.03818 -0.2566
H -4.10648 -0.00078 -2.3556
C -0.97475 -0.809 -6.1286
H 1.00699 -0.99273 -5.2771
H 0.37249 0.66558 -5.285
C 4.01965 0.48662 -2.0305
C 2.27677 0.1769 -0.3181
C -2.26604 -0.03464 -5.9165
H -3.7052 3.99819 -4.3611
H -3.06493 -1.25645 -4.3113
C -5.05763 -0.18028 0.0228
C -2.72641 0.09347 0.8066
H -1.17624 -1.89172 -6.0153
H -0.60258 -0.67194 -7.1572
C 5.01429 0.66211 -1.0819
H 4.27119 0.52202 -3.0986
C 3.29693 0.36061 0.6581
O 1.07305 -0.08633 0.0707
H -3.0339 -0.35135 -6.6414
H -2.08281 1.03963 -6.112
C -5.54061 -0.21284 1.3106
H -5.73623 -0.26718 -0.8325
C -3.22399 0.07678 2.1598
O -1.46621 0.21754 0.6063
C 6.45922 0.92139 -1.5092
C 4.60658 0.58469 0.2655
C -7.01728 -0.3741 1.662
C -4.58354 -0.07979 2.3508
C -2.24566 0.24801 3.3263
C 6.52856 2.21943 -2.3191
C 6.95922 -0.24238 -2.37
C 7.39262 1.05871 -0.3102
H 5.34369 0.69871 1.0676
C -7.88732 -0.49601 0.4153
C -7.21139 -1.63967 2.503
C -7.49462 0.84496 2.4575
H -4.95808 -0.10004 3.3784
C -2.95085 0.15249 4.6777
C -1.57814 1.62671 3.2428
C -1.16538 -0.8424 3.3009
H 6.17754 3.07637 -1.7198
H 5.90645 2.17186 -3.2281
H 7.56588 2.42609 -2.6362
H 6.35529 -0.37087 -3.2833
H 8.00364 -0.07233 -2.6853
H 6.92245 -1.19128 -1.8087
H 7.10882 1.90453 0.3381
H 8.42339 1.24133 -0.6573
H 7.40862 0.14435 0.3063
H -7.81684 0.40043 -0.2238
H -7.61365 -1.37526 -0.1922
H -8.9452 -0.61188 0.7047
H -6.88343 -2.53443 1.9472
H -8.27543 -1.77199 2.7666
H -6.64032 -1.60447 3.4451
H -7.37385 1.76984 1.8685
H -8.56221 0.74367 2.7205
H -6.93403 0.97331 3.3977
H -3.71379 0.93862 4.8088
H -3.43568 -0.82822 4.8266
H -2.21192 0.27992 5.4867
H -2.33375 2.42915 3.2999
H -0.87982 1.76015 4.0881
H -1.01066 1.74499 2.3084
H -0.49275 -0.71731 4.1702
H -1.61856 -1.84875 3.3735
H -0.5484 -0.78666 2.3896

s03_4

Co -0.49872 0.0244 -0.9962
N 0.47024 -0.17249 -2.6247
N -2.06246 0.06187 -2.0769

C 2.94617 0.27497 2.1147
 H 1.86497 0.51017 2.2435
 H 3.51232 1.04674 2.6685
 C 3.36486 -2.3133 4.7916
 C 2.9912 -0.99225 4.1419
 C 2.63491 -2.13386 2.0636
 C 3.03054 -3.43924 2.7367
 H 3.11425 -2.29734 5.8655
 H 4.46033 -2.44679 4.7135
 H 3.56286 -0.17053 4.6103
 H 1.91185 -0.764 4.3344
 H 1.5213 -2.01967 2.0717
 H 2.94132 -2.1569 1.0022
 H 2.52663 -4.29033 2.2453
 H 4.12043 -3.58161 2.6093
 N 3.27581 -1.00913 2.7193
 O -0.37592 -2.19698 -0.6633
 H 0.3312 -1.96357 -0.0358
 C -1.37917 -2.93608 -0.0134
 H -1.01404 -3.93043 0.3021
 H -2.20283 -3.09212 -0.7269
 O -0.28344 2.1265 -1.1445
 O 0.05329 2.72494 -0.147
 N 2.73219 -3.45905 4.1569
 C 1.31936 -3.62168 4.4461
 H -1.78691 -2.4129 0.8696
 H 0.97973 -4.51619 3.8864
 H 0.68353 -2.78564 4.0778
 C 0.47872 -4.23775 8.6279
 C 1.49812 -4.95672 8.0019
 C 1.77381 -4.75097 6.6541
 C 1.03521 -3.82472 5.9091
 C 0.02259 -3.10405 6.5463
 C -0.25821 -3.31063 7.8968
 H 0.26296 -4.3994 9.6882
 H 2.0829 -5.68469 8.5726
 H 2.58028 -5.29939 6.1562
 H -0.55547 -2.36982 5.9722
 H -1.055 -2.73769 8.3805

s03_5

Co -0.48404 -0.20453 -0.9326
 N 0.50996 -0.33856 -2.5534
 N -2.03237 -0.24097 -2.0413
 C -0.33546 -0.83369 -3.6285
 C 1.74432 0.00523 -2.6953
 C -1.6909 -0.1466 -3.4575
 C -3.25358 -0.20276 -1.6134
 C 0.18515 -0.69659 -5.0465
 H -0.5035 -1.91236 -3.414
 C 2.63251 0.37677 -1.6305
 H 2.19267 -0.00855 -3.7037
 C -2.70778 -0.68855 -4.4476
 H -1.52115 0.9325 -3.6798
 C -3.68315 -0.11414 -0.2544
 H -4.0699 -0.21608 -2.356
 C -0.83462 -1.24734 -6.0345
 H 1.14774 -1.22432 -5.1586
 H 0.37857 0.37333 -5.262
 C 3.92934 0.81347 -1.9724
 C 2.26994 0.18735 -0.2572
 C -2.18464 -0.56649 -5.8727
 H -3.66798 -0.15379 -4.3578
 H -2.90963 -1.75016 -4.2019
 C -5.08047 -0.09286 -0.0166
 C -2.75181 0.00748 0.8273
 H -0.95141 -2.3349 -5.8639
 H -0.46373 -1.13611 -7.0667
 C 4.90881 1.07374 -1.0275
 H 4.1512 0.93719 -3.0404
 C 3.29046 0.41329 0.7093
 O 1.10632 -0.22673 0.1262
 H -2.91839 -0.98268 -6.5825
 H -2.08353 0.50599 -6.1287
 C -5.60207 0.05269 1.2469
 H -5.73773 -0.19197 -0.887

C -3.29159 0.19353 2.1525
 O -1.48046 -0.04523 0.6647
 C 6.29147 1.56838 -1.4525
 C 4.54824 0.83998 0.3145
 C -7.0967 0.07657 1.5549
 C -4.66529 0.20092 2.3025
 C -2.34478 0.33847 3.3407
 C 6.1543 2.92277 -2.1543
 C 6.93115 0.56067 -2.4119
 C 7.22562 1.74368 -0.2589
 H 5.28721 0.97482 1.1116
 C -7.93841 -0.10121 0.2954
 C -7.44116 -1.06092 2.5213
 C -7.47148 1.41825 2.1921
 H -5.06937 0.33655 3.3098
 C -3.10821 0.57666 4.6495
 C -1.46772 1.62463 3.1266
 C -1.44987 -0.84932 3.5086
 H 5.69904 3.66959 -1.4822
 H 5.52237 2.85724 -3.0554
 H 7.14314 3.30199 -2.4671
 H 6.33193 0.42051 -3.3266
 H 7.93336 0.90346 -2.7237
 H 7.04239 -0.42543 -1.9302
 H 6.8415 2.48741 0.459
 H 8.21127 2.09822 -0.6041
 H 7.38584 0.79593 0.2818
 H -7.76259 0.70762 -0.4338
 H -7.73454 -1.06459 -0.202
 H -9.01044 -0.08375 0.5538
 H -7.19059 -2.04048 2.08
 H -8.51998 -1.05785 2.7564
 H -6.89542 -0.97528 3.475
 H -7.24021 2.2544 1.5107
 H -8.55117 1.45166 2.4208
 H -6.92895 1.59667 3.1347
 H -3.75931 1.46701 4.6248
 H -3.72963 -0.29916 4.9045
 H -2.39085 0.72035 5.4743
 H -2.09022 2.53087 3.0298
 H -0.79976 1.76666 3.9948
 H -0.84382 1.53012 2.2262
 H -0.83876 -0.75591 4.4254
 H -2.05995 -1.76689 3.6078
 H -0.76499 -0.96897 2.6533
 C 3.03244 0.09408 2.1531
 H 1.9366 0.08466 2.3283
 H 3.44777 0.90017 2.7867
 C 2.24774 -2.03375 4.3593
 C 3.5925 -1.43627 3.9712
 C 3.37864 -2.32113 1.7852
 C 2.02825 -2.91866 2.1486
 H 1.43663 -1.27715 4.2269
 H 2.25422 -2.30493 5.4293
 H 4.38324 -2.16397 4.2388
 H 3.78116 -0.5176 4.5534
 H 3.42247 -2.0882 0.7075
 H 4.15435 -3.08579 1.9837
 H 1.21349 -2.20263 1.8625
 H 1.86201 -3.85106 1.5753
 N 3.70665 -1.13862 2.5571
 O -0.28974 -2.39687 -0.6286
 H 0.50114 -2.21652 -0.0913
 C -1.2531 -3.0577 0.1585
 H -2.22455 -2.97355 -0.3528
 H -1.35653 -2.6029 1.1593
 O -0.44815 1.89303 -1.1132
 O -0.12093 2.53703 -0.1385
 N 1.97388 -3.2225 3.5657
 C 0.72953 -3.8639 3.9299
 H -1.01543 -4.13081 0.2723
 H 0.57736 -4.71138 3.2321
 H -0.14261 -3.18422 3.7783
 C 0.67671 -5.38733 7.9598
 C -0.37543 -4.60152 7.4984
 C -0.35304 -4.09896 6.1976
 C 0.71287 -4.38147 5.3415

C 1.76881 -5.16756 5.8164
 C 1.75165 -5.66661 7.1146
 H 0.66374 -5.77982 8.981
 H -1.21816 -4.37062 8.1569
 H -1.17621 -3.47105 5.8373
 H 2.61385 -5.36832 5.1494
 H 2.58391 -6.2798 7.4737

s03_6

Co -0.55713 -0.22675 -1.09431
 N 0.42378 -0.20512 -2.72685
 N -2.11013 0.02231 -2.16621
 C -0.46812 -0.43891 -3.852
 C 1.69766 -0.02026 -2.82411
 C -1.75619 0.3334 -3.54704
 C -3.32808 -0.00552 -1.7266
 C 0.06334 -0.11382 -5.23528
 H -0.73859 -1.51819 -3.81804
 C 2.59846 0.1388 -1.71945
 H 2.1581 0.02794 -3.82614
 C -2.8163 0.07454 -4.60293
 H -1.4829 1.41338 -3.5763
 C -3.74132 -0.18953 -0.3695
 H -4.15206 0.13175 -2.44814
 C -1.0038 -0.38027 -6.28819
 H 0.9673 -0.70806 -5.45221
 H 0.36587 0.95205 -5.26496
 C 3.93519 0.52288 -1.98819
 C 2.18232 -0.11773 -0.37954
 C -2.27883 0.39346 -5.99165
 H -3.72012 0.67503 -4.40524
 H -3.12131 -0.98964 -4.54646
 C -5.13191 -0.24659 -0.10098
 C -2.79316 -0.27528 0.6987
 H -1.23045 -1.4638 -6.30692
 H -0.62044 -0.12929 -7.29088
 C 4.86732 0.69831 -0.98457
 H 4.20575 0.68917 -3.03645
 C 3.13548 0.09608 0.65845
 O 1.00419 -0.54253 -0.05376
 H -3.04811 0.18389 -6.75305
 H -2.06915 1.47865 -6.05681
 C -5.62194 -0.38867 1.17704
 H -5.81154 -0.17295 -0.95673
 C -3.29521 -0.39531 2.04408
 O -1.52602 -0.25693 0.51285
 C 6.30967 1.13272 -1.229
 C 4.42291 0.4757 0.34132
 C -7.10883 -0.46414 1.51444
 C -4.66352 -0.45368 2.22342
 C -2.30314 -0.42776 3.21131
 C 6.60818 1.31388 -2.71352
 C 7.26601 0.07277 -0.67463
 C 6.56382 2.46821 -0.52266
 H 5.10804 0.61453 1.18652
 C -7.9798 -0.38399 0.26494
 C -7.41028 -1.79036 2.21939
 C -7.48883 0.70017 2.43455
 H -5.04442 -0.55208 3.24438
 C -3.01553 -0.55936 4.55553
 C -1.49851 0.87827 3.23868
 C -1.33817 -1.61532 3.08213
 H 5.97429 2.09385 -3.16845
 H 6.46212 0.37757 -2.27864
 H 7.65817 1.62202 -2.85124
 H 7.10759 -0.89856 -1.1732
 H 8.31586 0.37353 -0.83742
 H 7.12901 -0.08128 0.4079
 H 5.89511 3.25283 -0.91564
 H 7.60627 2.79822 -0.67671
 H 6.39393 2.39919 0.5645
 H -7.83545 0.56639 -0.27631
 H -7.77377 -1.21326 -0.43297
 H -9.04497 -0.44492 0.54425
 H -7.15585 -2.64608 1.57121
 H -8.48256 -1.86082 2.47318

H -6.84143 -1.9015 3.15695 H -3.11818 -0.56351 -4.3609 H -1.3172 -4.07351 -0.3575
H -7.28928 1.66834 1.94499 C -5.05795 -0.17591 0.0477 H -2.2936 -2.98221 -1.3705
H -8.5625 0.6602 2.68916 C -2.72671 -0.1339 0.8864 O -0.10684 2.13192 -0.6534
H -6.92431 0.68298 3.38099 H -1.27979 -1.0773 -6.1468 O 0.18052 2.51783 0.4539
H -3.6995 0.28457 4.74919 H -0.59949 0.2515 -7.0914 N 2.35105 3.7269 4.2907
H -3.5929 -1.49694 4.63242 C 5.06814 0.36018 -0.9827 C 1.83834 4.99345 4.7554
H -2.26817 -0.156705 5.36713 H 4.30719 0.37706 -2.9961 H -2.10105 -2.62893 0.367
H -2.16588 1.74923 3.3594 C 3.33954 0.08406 0.7569 H 0.88558 5.26694 4.2371
H -0.79948 0.86921 4.09438 O 1.09967 -0.28187 0.1564 H 2.56863 5.77549 4.4685
H -0.90749 1.01288 2.31968 H -2.99959 0.68977 -6.5197 C 1.28856 5.22018 9.0258
H -0.66913 -1.6498 3.96092 H -1.94144 1.8985 -5.7851 C 2.40785 4.58087 8.4923
H -1.89243 -2.57077 3.05057 C -5.56206 -0.42042 1.3038 C 2.57643 4.49682 7.1138
H -0.71225 -1.53047 2.18049 H -5.72441 -0.08364 -0.8165 C 1.6284 5.04885 6.2451
C 2.66685 -0.09769 2.07604 C -3.24872 -0.37014 2.2099 C 0.50636 5.67759 6.7886
H 2.58352 -1.18254 2.28633 O -1.4601 -0.02534 0.7201 C 0.33729 5.76818 8.1696
H 1.61542 0.26554 2.13573 C 6.54272 0.57876 -1.3059 H 1.15627 5.28549 10.1099
C 2.22474 2.36706 4.00164 C 4.65149 0.25396 0.3648 H 3.15672 4.14307 9.1595
C 3.42554 1.93892 3.1725 C -7.04821 -0.58732 1.6088 H 3.44419 3.9866 6.6832
C 3.52795 -0.11153 4.37321 C -4.6158 -0.5078 2.3579 H -0.24862 6.10066 6.1162
C 2.32247 0.29777 5.20373 C -2.28854 -0.43395 3.4004 H -0.5484 6.26405 8.5781
H 1.27903 2.11465 3.46202 C 6.7904 0.65567 -2.8087
H 2.23002 3.4648 4.12539 C 7.37195 -0.57918 -0.7431
H 4.34196 2.33293 3.65389 C 7.00923 1.89523 -0.6756
H 3.36627 2.38231 2.16344 H 5.40136 0.33472 1.1633
H 3.57187 -1.20917 4.27223 C -7.90282 -0.46539 0.3514
H 4.43967 0.2039 4.91719 C -7.29693 -1.9696 2.2204
H 1.38331 -0.10606 4.74607 C -7.49703 0.49486 2.5958
H 2.39473 -0.14168 6.21406 H -5.00595 -0.69392 3.3626
N 3.55211 0.49491 3.05755 C -3.02954 -0.69147 4.7106
O -0.5383 -2.43876 -1.123 C -1.55105 0.90417 3.5357
H 0.17847 -2.38717 -0.46694 C -1.26224 -1.56054 3.2203
C -1.62191 -3.1803 -0.61817 H 6.24825 1.49708 -3.2724
H -1.90878 -2.8671 0.40046 H 6.48937 -0.27348 -3.3218
H -1.40539 -4.2633 -0.61281 H 7.86468 0.80864 -3.0056
O -0.3192 1.83952 -0.90173 H 7.05977 -1.53896 -1.1884
O 0.10994 2.25349 0.15797 H 8.44382 -0.43248 -0.9635
N 2.26303 1.74482 5.31388 H 7.26914 -0.66981 0.3504
C 1.18869 2.19383 6.16864 H 6.43246 2.74672 -1.0753
H -2.48445 -3.00936 -1.28084 H 8.07734 2.07426 -0.8908
H 0.19417 1.83103 5.81097 H 6.88756 1.89611 0.4203
H 1.14495 3.29825 6.09697 H -7.79536 0.52439 -0.1237
C 1.67612 1.14152 10.32087 H -7.64658 -1.23597 -0.3953
C 2.7593 1.62274 9.58472 H -8.96808 -0.59427 0.6063
C 2.60321 1.9514 8.24195 H -6.992 -2.76801 1.5228
C 1.36239 1.80358 7.61179 H -8.36839 -2.10654 2.4494
C 0.28733 1.31124 8.35435 H -6.7379 -2.11539 3.1591
C 0.43898 0.98597 9.70159 H -7.33641 1.5014 2.1739
H 1.79974 0.88296 11.3767 H -8.57127 0.38829 2.828
H 3.73567 1.7424 10.06434 H -6.9463 0.4416 3.549
H 3.44915 2.3175 7.65095 H -3.7468 0.11258 4.9485
H -0.68483 1.17923 7.86537 H -3.57588 -1.65034 4.7005
H -0.41435 0.60145 10.26831 H -2.30458 -0.73712 5.5401
H -2.26505 1.74485 3.5848
H -0.96529 0.9139 4.4726
H -0.86108 1.07495 2.6932
H -0.59418 -1.60251 4.0997
H -1.76338 -2.54186 3.1391
H -0.64065 -1.39556 2.3271
C 2.96051 0.10486 2.2057
H 3.84763 -0.18623 2.8228
H 2.16963 -0.64219 2.3954
C 2.81332 3.79257 2.9207
C 3.40108 2.47086 2.4792
C 1.97704 1.33503 4.0004
C 1.38411 2.65531 4.4344
H 1.97874 4.06592 2.2296
H 3.57974 4.58354 2.8356
H 4.32824 2.27007 3.0769
H 3.70674 2.54802 1.4217
H 1.21503 0.54035 4.0813
H 2.81137 1.06678 4.6975
H 0.47413 2.86496 3.8201
H 1.06011 2.59086 5.4881
N 2.44642 1.39465 2.6338
O -0.46346 -2.24526 -0.8843
H 0.16103 -2.18117 -0.143
C -1.58354 -3.01525 -0.5294

s03_8
Co -0.5092 -0.05817 -0.98284
N 0.45599 -0.19771 -2.62265
N -2.06431 0.08023 -2.07438
C -0.43858 -0.52652 -3.72158
C 1.71518 0.04005 -2.75846
C -1.72303 0.2697 -3.47894
C -3.28258 0.0247 -1.64063
C 0.08726 -0.32611 -5.13001
H -0.70833 -1.59781 -3.58891
C 2.64441 0.25307 -1.68544
H 2.15105 0.05935 -3.77219
C -2.78897 -0.0798 -4.5025
H -1.45066 1.34263 -3.60636
C -3.70008 -0.0496 -0.27735
H -4.1041 0.04735 -2.37692
C -0.98546 -0.68628 -6.14881
H 0.99154 -0.93628 -5.29626
H 0.38657 0.73329 -5.25895
C 3.95849 0.63909 -2.01957
C 2.28838 -0.02001 -0.32421
C -2.25754 0.11385 -5.91648
H -3.69075 0.53768 -4.35371
H -3.09512 -1.13448 -4.35278
C -5.08989 -0.17554 -0.02691
C -2.76362 0.05313 0.80124
H -1.21346 -1.76656 -6.06731
H -0.60712 -0.52824 -7.17213
C 4.96243 0.78098 -1.07555
H 4.17122 0.83127 -3.07936
C 3.34407 0.03737 0.63036
O 1.08974 -0.33578 0.05149
H -3.03093 -0.16102 -6.6525
H -2.04619 1.18842 -6.07915
C -5.59803 -0.20716 1.24998
H -5.75124 -0.24829 -0.89694
C -3.29467 0.07302 2.14344
O -1.49487 0.12402 0.61966
C 6.36005 1.24422 -1.4858
C 4.61028 0.45369 0.24822
C -7.08181 -0.35774 1.5738
C -4.65913 -0.07083 2.30594
C -2.35288 0.2896 3.32981
C 6.27192 2.63994 -2.11017
C 6.94992 0.26672 -2.50642
C 7.30956 1.31678 -0.29377
H 5.35798 0.52049 1.04594
C -7.92774 -0.48755 0.31132
C -7.29793 -1.61449 2.42253
C -7.5692 0.87071 2.34848
H -5.05345 -0.07205 3.32629
C -3.09165 0.23598 4.66523
C -1.71574 1.681 3.21624
C -1.26246 -0.79003 3.37335
H 5.8524 3.36555 -1.39316

s03_7
Co -0.47408 0.00606 -0.8904
N 0.47824 -0.01249 -2.5411
N -2.02793 0.29973 -1.9528
C -0.43419 -0.17755 -3.6639
C 1.76143 0.03392 -2.6662
C -1.67682 0.64773 -3.3242
C -3.2487 0.22725 -1.5284
C 0.10106 0.15717 -5.0443
H -0.75948 -1.2429 -3.656
C 2.70504 0.10753 -1.5916
H 2.20029 0.01919 -3.6785
C -2.75762 0.48464 -4.3777
H -1.34864 1.71253 -3.317
C -3.66774 -0.03825 -0.1887
H -4.06889 0.38067 -2.2504
C -0.98919 -0.01022 -6.0939
H 0.96432 -0.48306 -5.2929
H 0.46832 1.20291 -5.043
C 4.0683 0.28908 -1.9307
C 2.3052 -0.03431 -0.2248
C -2.21387 0.82572 -5.7583
H -3.62675 1.12382 -4.1478

H 5.63142 2.65025 -3.0075 C 2.71176 0.2421 -1.7852 C 3.34752 -3.26531 2.8631
H 7.27278 2.99617 -2.41142 H 2.19176 -0.0607 -3.8535 H 3.33591 -1.91632 5.9113
H 6.33503 0.20035 -3.4191 C -2.80595 -0.26426 -4.4437 H 4.73129 -0.03715 4.798
H 7.96165 0.58665 -2.81188 H -1.5125 1.22589 -3.5875 H 3.63231 0.14304 4.5317
H 7.02691 -0.74806 -2.08073 C -3.58055 -0.15983 -0.1743 H 2.04243 -0.63062 4.2792
H 6.95541 2.02692 0.47209 H -4.06764 0.01433 -2.2525 H 1.74535 -1.99746 2.1829
H 8.3035 1.65907 -0.62739 C -1.02972 -0.77407 -6.1516 H 3.13986 -2.10548 1.0644
H 7.44406 0.33316 0.18684 H 0.98135 -0.93165 -5.3658 H 2.86816 -4.16544 2.4386
H -7.84334 0.40401 -0.33293 H 0.30375 0.70813 -5.2988 H 4.44965 -3.37245 2.7065
H -7.64308 -1.3715 -0.28435 C 4.03751 0.56024 -2.1466 N 3.44332 -0.83538 2.6976
H -8.99137 -0.59958 0.58062 C 2.3512 0.12489 -0.4038 O -0.24705 -2.36206 -0.8437
H -6.96424 -2.5159 1.88099 C -2.33352 -0.04263 -5.8743 H 0.38793 -2.23995 -0.118
H -8.36735 -1.73918 2.66763 H -3.73403 0.30407 -4.2652 C -1.34521 -3.13651 -0.43
H -6.74368 -1.57305 3.37427 H -3.05083 -1.33337 -4.282 H -2.10174 -3.09389 -1.2294
H -7.43161 1.7895 1.75368 C -4.96154 -0.2018 0.1434 H -1.8063 -2.75548 0.4978
H -8.64248 0.77697 2.59051 C -2.59474 -0.19 0.8631 O -0.30692 1.94803 -1.0019
H -7.02694 1.00497 3.29853 H -1.19887 -1.86509 -6.069 O 0.02617 2.48244 0.0347
H -3.87082 1.01348 4.74384 H -0.69371 -0.59283 -7.1858 N 3.02826 -3.18066 4.2721
H -3.56177 -1.74673 4.84529 C 5.0357 0.79779 -1.2152 C 3.38125 -4.37409 5.0018
H -2.37281 0.41314 5.48295 H 4.26532 0.61701 -3.2191 H -1.06657 -4.19492 -0.2824
H -2.48425 2.46937 3.30789 C 3.36529 0.41277 0.5544 H 4.49009 -4.49252 5.0913
H -0.9816 1.82687 4.02963 O 1.18574 -0.24899 0.0049 H 3.03674 -5.24368 4.4083
H -1.19468 1.81287 2.25614 H -3.11563 -0.35721 -6.5848 C 1.55909 -4.64685 8.9072
H -0.61002 -0.62302 4.24931 H -2.18482 1.04181 -6.0409 C 2.87575 -5.06009 8.7156
H -1.71305 -1.79411 3.47792 C -5.40749 -0.28956 1.4417 C 3.47108 -4.954 7.4593
H -0.63384 -0.77361 2.47012 H -5.6698 -0.16362 -0.6912 C 2.75903 -4.44449 6.3715
C 3.09495 -0.32382 2.06669 C -3.05076 -0.29278 2.2272 C 1.43764 -4.02854 6.5684
H 3.94783 -0.92434 2.43547 O -1.33587 -0.14215 0.6309 C 0.84282 -4.1274 7.8224
H 2.19116 -0.97144 2.13433 C 6.45557 1.14138 -1.6664 H 1.09148 -4.72385 9.8867
C 1.67827 2.83219 3.50264 C 4.65129 0.71871 0.1391 H 3.44848 -5.46141 9.5572
C 1.82654 1.64751 2.57867 C -6.88206 -0.33711 1.8334 H 4.51096 -5.27045 7.3185
C 2.88003 0.42336 4.32371 C -4.41262 -0.33659 2.4543 H 0.88889 -3.61226 5.7174
C 2.75779 1.62236 5.2366 C -2.02251 -0.34997 3.362 H -0.19065 -3.79515 7.9611
H 0.76454 3.38963 3.23089 C 6.43831 2.45097 -2.4603
H 2.54501 3.52599 3.3614 C 7.00244 0.01766 -2.5515
H 1.95102 2.00697 1.54361 C 7.40312 1.31443 -0.4831
H 0.88951 1.04408 2.59385 H 5.38717 0.90623 0.9286
H 1.9979 -0.24418 4.49057 C -7.7957 -0.27561 0.6137
H 3.78109 -0.15835 4.59089 C -7.17575 -1.64088 2.5821
H 2.66732 1.28436 6.28419 C -7.21376 0.85512 2.7363
H 3.69345 2.23122 5.16437 H -4.75748 -0.41194 3.4898
N 2.97081 0.8304 2.93936 C -2.69351 -0.48824 4.7266
O -0.52594 -2.26478 -0.78077 C -1.18423 0.93513 3.382
H 0.25447 -2.13564 -0.21229 C -1.09685 -1.56127 3.1803
C -1.54017 -2.92885 -0.06499 H 6.0509 3.27956 -1.8438
H -1.32553 -4.00792 0.03286 H 5.80308 2.37932 -3.3586
H -2.48167 -2.81772 -0.62446 H 7.45661 2.71924 -2.7929
O -0.22564 2.00272 -1.04868 H 6.39026 -0.13253 -3.456
O -0.00849 2.57326 0.00175 H 8.02996 0.24892 -2.883
N 1.59568 2.41388 4.89034 H 7.028 -0.9388 -2.0026
C 1.40972 3.53408 5.79047 H 7.09205 2.14133 0.1769
H -1.69185 -2.5009 0.94084 H 8.41773 1.54815 -0.8469
H 2.17871 4.3261 5.61252 H 7.47204 0.39747 0.1259
H 1.57492 3.16708 6.82003 H -7.6542 0.65677 0.0413
C -2.56704 5.16883 5.51335 H -7.62957 -1.12742 -0.0674
C -2.33725 3.976 6.19974 H -8.85107 -0.30969 0.9321
C -1.04809 3.46166 6.28666 H -6.95471 -2.51607 1.9478
C 0.0324 4.1309 5.70255 H -8.23948 -1.69025 2.874
C -0.20891 5.3247 5.0206 H -6.57656 -1.73607 3.5023
C -1.50082 5.84097 4.92179 H -7.01893 1.80788 2.2156
H -3.58036 5.57476 5.4409 H -8.27818 0.83652 3.0293
H -3.17089 3.44244 6.66657 H -6.61649 0.85366 3.6626
H -0.86262 2.51644 6.81026 H -3.34883 0.36892 4.9577
H 0.63198 5.854 4.55691 H -3.29188 -1.41234 4.8062
H -1.67434 6.77543 4.37992 H -1.92102 -0.52921 5.5125
H -1.82626 1.81733 3.5489
H -0.44997 0.89161 4.2066
H -0.63441 1.07576 2.4395
H -0.37923 -1.62389 4.0184
H -1.67701 -2.50166 3.1676
H -0.51619 -1.48182 2.2482
C 3.026 0.38169 2.0155
H 1.93113 0.54778 2.1354
H 3.53689 1.22342 2.5189
C 3.61513 -1.98592 4.8458
C 3.14229 -0.75309 4.1108
C 2.86123 -2.0346 2.1305

s03_9
Co -0.41727 -0.15655 -1.0095
N 0.50464 -0.22006 -2.6734
N -2.01647 -0.07154 -2.0404
C -0.41193 -0.59092 -3.7413
C 1.7689 -0.02303 -2.8346
C -1.72622 0.14023 -3.4549
C -3.21731 -0.06711 -1.5535
C 0.05653 -0.36414 -5.1664
H -0.62511 -1.67552 -3.6055

s06_1
Co -0.40359 -0.21186 -1.0321
N 0.54646 -0.31756 -2.6843
N -1.98279 -0.1811 -2.0981
C -0.34797 -0.72591 -3.7569
C 1.80919 -0.10253 -2.8355
C -1.66908 0.00796 -3.5099
C -3.19148 -0.25219 -1.6405
C 0.14465 -0.5312 -5.1786
H -0.55972 -1.80714 -3.5967
C 2.72071 0.24513 -1.7846
H 2.24883 -0.17089 -3.8455
C -2.73032 -0.41205 -4.5114
H -1.45291 1.09138 -3.6548
C -3.57951 -0.35813 -0.2689
H -4.0287 -0.23492 -2.3593
C -0.92459 -0.95996 -6.1741
H 1.07224 -1.10353 -5.3495
H 0.39532 0.53773 -5.3302
C 4.02673 0.64776 -2.1359
C 2.33594 0.17513 -0.41
C -2.23018 -0.21781 -5.9365
H -3.66011 0.16158 -4.3598
H -2.98071 -1.47791 -4.3376
C -4.96087 -0.50703 0.0096
C -2.62118 -0.29503 0.7931
H -1.09956 -2.04831 -6.0708
H -0.56893 -0.80259 -7.2056
C 4.96531 1.03722 -1.1948
H 4.28104 0.65737 -3.2038
C 3.27853 0.63336 0.5507
O 1.1952 -0.28223 -0.0009
H -3.00003 -0.54246 -6.6557
H -2.07337 0.86267 -6.1203
C -5.43728 -0.61625 1.2954
H -5.64464 -0.53576 -0.8455
C -3.11161 -0.40801 2.1447
O -1.36237 -0.15398 0.5926
C 6.36703 1.46876 -1.6276
C 4.54368 1.03058 0.1517
C -6.91355 -0.78267 1.6454
C -4.47165 -0.56429 2.334

C -2.12781 -0.33227 3.3162
 C 6.26929 2.68589 -2.5521
 C 7.05066 0.3186 -2.3726
 C 7.24028 1.84738 -0.4353
 H 5.21219 1.36521 0.9512
 C -7.79253 -0.80719 0.3991
 C -7.11945 -2.10025 2.399
 C -7.36958 0.38499 2.5259
 H -4.83945 -0.6525 3.3604
 C -1.45347 1.04496 3.3381
 C -1.05337 -1.42324 3.2044
 C -2.83085 -0.52249 4.6588
 H 5.77994 3.53091 -2.0389
 H 5.68771 2.46714 -3.4628
 H 7.27402 3.01533 -2.8707
 H 6.49162 0.02107 -3.2751
 H 8.06647 0.61056 -2.6925
 H 7.13886 -0.57106 -1.7264
 H 6.82146 2.69717 0.1291
 H 8.24316 2.14468 -0.7852
 H 7.36899 1.00467 0.2643
 H -7.71251 0.12959 -0.1779
 H -6.53519 -1.64678 -0.2687
 H -8.85035 -0.92753 0.687
 H -6.8079 -2.95904 1.7805
 H -8.18333 -2.23606 2.6614
 H -6.54111 -2.13703 3.3365
 H -7.23963 1.34644 2.001
 H -8.43685 0.27993 2.7887
 H -6.80154 0.44092 3.4688
 H -0.85842 1.22634 2.4285
 H -2.2022 1.85152 3.434
 H -0.77868 1.11332 4.2111
 H -0.45159 -1.30452 2.291
 H -0.37151 -1.36768 4.0719
 H -1.51327 -2.42808 3.208
 H -2.08728 -0.47813 5.4721
 H -3.57735 0.26625 4.8553
 H -3.33562 -1.50131 4.7306
 C -8.3358 0.68557 1.9883
 H 2.92115 -0.32258 2.4413
 H 1.74231 0.89387 1.9901
 C 2.02719 3.46835 3.1903
 C 3.31806 3.01005 2.5348
 C 3.59193 1.36345 4.2146
 C 2.29378 1.79184 4.8818
 H 1.15233 2.97919 2.6944
 H 1.89763 4.55482 3.0366
 H 4.15325 3.61999 2.9301
 H 3.26923 3.18404 1.4462
 H 3.78407 0.29407 4.4079
 H 4.41907 1.93536 4.6783
 H 1.45284 1.14331 4.5273
 H 2.38348 1.62794 5.9692
 N 3.617 1.60922 2.7883
 O -0.21518 -2.40492 -0.8299
 H 0.46352 -2.24582 -0.1517
 C -1.26422 -3.19205 -0.3232
 H -2.08286 -3.17105 -1.0595
 H -1.65792 -2.80734 0.6335
 O -0.29678 1.87733 -1.0497
 O 0.08242 2.41783 -0.0297
 N 2.02907 3.1953 4.6183
 C 0.8088 3.68792 5.2169
 H -0.9556 -4.24365 -0.1869
 C 0.71302 3.50664 6.7252
 H -0.09276 3.22255 4.7453
 H 0.73102 4.76863 4.9898
 H 0.68379 2.4309 6.9768
 H 1.62191 3.92253 7.1959
 C -2.86479 5.42347 8.1754
 C -2.92937 4.1622 7.5852
 C -1.76706 3.54212 7.1355
 C -0.52136 4.16709 7.2661
 C -0.47131 5.43398 7.8548
 C -1.63172 6.05769 8.3091
 H -3.7764 5.91131 8.5327
 H -3.89348 3.65621 7.4769
 H -1.81855 2.54923 6.6717
 H 0.49768 5.93507 7.9612
 H -1.57176 7.04712 8.7725
s06_2
 Co -0.37225 -0.20725 -0.88125
 N 0.57805 -0.23445 -2.53258
 N -1.94683 -0.35339 -1.94442
 C -0.25711 -0.78153 -3.5901
 C 1.77454 0.21277 -2.70555
 C -1.65755 -0.20874 -3.36816
 C -3.153 -0.42816 -1.48008
 C 0.20831 -0.58305 -5.01988
 H -0.33107 -1.87318 -3.38855
 C 2.66182 0.641 -1.66157
 H 2.19059 0.25146 -3.72706
 C -2.65704 -0.81539 -4.33826
 H -1.58151 0.88386 -3.57551
 C -3.54539 -0.4065 -0.10709
 H -3.98809 -0.49713 -2.19829
 C -0.79313 -1.19997 -5.98711
 H 1.20643 -1.02977 -5.16768
 H 0.30873 0.50189 -5.2234
 C 3.90544 1.19099 -2.03504
 C 2.36009 0.40051 -0.2815
 C -2.18744 -0.63133 -5.77547
 H -3.65356 -0.36027 -4.21243
 H -2.76678 -1.89323 -4.10513
 C -4.93026 -0.51882 0.17427
 C -2.59409 -0.22689 0.94854
 H -0.81793 -2.29566 -5.83098
 H -0.46339 -1.04503 -7.02757
 C 4.88897 1.51914 -1.116
 H 4.08275 1.34919 -3.10691
 C 3.38968 0.69406 0.65691
 O 1.24697 -0.11354 0.12998
 H -2.90675 -1.09431 -6.47096
 H -2.17932 0.44941 -6.01614
 C -5.42045 -0.45564 1.45722
 H -5.60505 -0.65557 -0.6775
 C -3.10353 -0.1306 2.29497
 O -1.32948 -0.15466 0.74584
 C 6.2102 2.136 -1.57467
 C 4.59368 1.23251 0.23165
 C -6.89992 -0.57686 1.81181
 C -4.46631 -0.25271 2.48787
 C -2.13732 0.10814 3.45855
 C 5.93524 3.47549 -2.26447
 C 6.90937 1.19218 -2.55718
 C 7.15682 2.38897 -0.40519
 H 5.34495 1.41627 1.00727
 C -7.76337 -0.79885 0.57421
 C -7.10747 -1.76562 2.75542
 C -7.37325 0.70819 2.49811
 H -4.84655 -0.18418 3.51106
 C -1.40172 1.44079 3.27016
 C -1.11523 -1.03144 3.53899
 C -2.86468 0.16174 4.80043
 H 5.43496 4.17722 -1.57597
 H 5.28704 3.3579 -3.14852
 H 6.87791 3.94107 -2.60214
 H 6.29883 1.00344 -3.45552
 H 7.86856 1.62278 -2.89439
 H 7.11986 0.21782 -2.0848
 H 6.72401 3.08696 0.33095
 H 8.09473 2.8376 -0.77321
 H 7.42075 1.45625 0.12093
 H -7.6855 0.04064 -0.13729
 H -7.49003 -1.72699 0.04411
 H -8.82347 -0.88558 0.86574
 H -6.78233 -2.70616 2.2793
 H -8.17391 -1.86825 3.02254
 H -6.54151 -1.6545 3.69474
 H -7.2428 1.57887 1.83347
 H -8.44293 0.63645 2.76237
 H -6.81671 0.91221 3.42731
 H -0.81092 1.44948 2.34272
 H -2.11664 2.28108 3.24036
 H -0.71397 1.61389 4.11709
 H -0.45229 -1.04105 2.65837
 H -0.48533 -0.91541 4.44096
 H -1.62335 -2.01133 3.6133
 H -2.13407 0.34534 5.6057
 H -3.6063 0.97749 4.84243
 H -3.37969 -0.78657 5.03439
 C 3.20729 0.32827 2.10109
 H 2.12218 0.2271 2.31156
 H 3.57786 1.15347 2.73787
 C 2.68958 -1.88913 4.30395
 C 3.96466 -1.18154 3.86471
 C 3.72957 -2.04734 1.678
 C 2.44931 -2.75566 2.08882
 H 1.81818 -1.1924 4.23725
 H 2.7908 -2.16904 5.36611
 H 4.81913 -1.85176 4.08226
 H 4.10846 -0.26196 4.45843
 H 3.70576 -1.79698 0.60352
 H 4.5737 -2.74754 1.82938
 H 1.56682 -2.1071 1.84341
 H 2.33537 -3.69168 1.50891
 N 3.99351 -0.85221 2.45523
 O 0.01579 -2.37763 -0.61861
 H 0.79697 -2.13846 -0.08982
 C -0.87417 -3.13461 0.16916
 H -1.85263 -3.13808 -0.33554
 H -1.01277 -2.70047 1.17456
 O -0.50953 1.88759 -1.02308
 O -0.21387 2.53756 -0.04207
 N 2.46658 -3.0823 3.50316
 C 1.27781 -3.82103 3.86563
 H -0.53435 -4.18086 0.2724
 C 1.22734 -4.28793 5.31359
 H 1.2187 -4.71232 3.21068
 H 0.35168 -3.23308 3.65312
 H 2.15616 -4.83931 5.54586
 H 1.19056 -3.41679 5.99204
 C -2.28133 -6.72467 5.88322
 C -2.3672 -5.33593 5.96618
 C -1.2261 -4.55505 5.80188
 C 0.01859 -5.14463 5.5526
 C 0.08992 -6.53834 5.46721
 C -1.04856 -7.32402 5.63366
 H -3.17586 -7.34023 6.01578
 H -3.33091 -4.85682 6.16362
 H -1.29431 -3.46204 5.86934
 H 1.059 -7.01173 5.27096
 H -0.97202 -8.41369 5.56987
s06_3
 Co -0.46037 -0.06001 -0.8485
 N 0.4572 -0.03801 -2.526
 N -2.05583 0.04522 -1.8784
 C -0.46124 -0.30379 -3.6238
 C 1.71155 0.21543 -2.6807
 C -1.77044 0.40238 -3.2619
 C -3.24855 -0.13369 -1.4142
 C 0.00649 0.07088 -5.0178
 H -0.67832 -1.39495 -3.5971
 C 2.6592 0.43688 -1.6273
 H 2.11999 0.2772 -3.7042
 C -2.85509 0.11905 -4.2853
 H -1.54856 1.49391 -3.2753
 C -3.60218 -0.39356 -0.0537
 H -4.09821 -0.0862 -2.1163
 C -1.08539 -0.21763 -6.0392
 H 0.92551 -0.47992 -5.2811
 H 0.26233 1.14964 -5.0324
 C 3.93947 0.90938 -1.985
 C 2.33316 0.17873 -0.2588
 C -2.37954 0.49557 -5.6822
 H -3.77613 0.674 -4.0395

H -3.11038 -0.959 -4.2487
 C -4.9572 -0.68371 0.2217
 C -2.63589 -0.33066 1.003
 H -1.26771 -1.30906 -6.0755
 H -0.74675 0.07094 -7.0477
 C 4.9332 1.14511 -1.0513
 H 4.12624 1.10806 -3.0483
 C 3.34615 0.44285 0.7089
 O 1.18283 -0.28707 0.1195
 H -3.16502 0.27219 -6.4226
 H -2.21706 1.58966 -5.7259
 C -5.41147 -0.93361 1.4992
 H -5.65177 -0.71087 -0.6279
 C -3.11052 -0.53946 2.3452
 O -1.38725 -0.10293 0.7956
 C 6.27219 1.75088 -1.4696
 C 4.59792 0.87396 0.2911
 C -6.88359 -1.26407 1.7524
 C -4.45007 -0.8432 2.5328
 C -2.15011 -0.36163 3.5242
 C 6.02375 3.16842 -1.9982
 C 6.92109 0.90126 -2.5647
 C 7.24697 1.84319 -0.2993
 H 5.35013 1.02989 1.0713
 C -7.27041 -2.52178 0.9686
 C -7.17145 -1.5213 3.2287
 C -7.75763 -0.09239 1.2952
 H -4.78788 -1.01655 3.5559
 C -1.74251 1.11717 3.5824
 C -0.91209 -1.26022 3.3871
 C -2.80306 -0.71072 4.8603
 H 5.53883 3.7969 -1.2299
 H 5.36358 3.16957 -2.8815
 H 6.97451 3.65084 -2.2864
 H 6.29078 0.83191 -3.4663
 H 7.88614 1.33941 -2.8735
 H 7.11135 -0.12535 -2.2084
 H 6.86658 2.4992 0.5021
 H 8.20436 2.26917 -0.6428
 H 7.46131 0.85335 0.1385
 H -7.1308 -2.39061 -0.117
 H -6.65874 -3.38473 1.2821
 H -8.3315 -2.77617 1.1381
 H -6.58853 -2.37166 3.6209
 H -8.2389 -1.76289 3.3644
 H -6.95296 -0.63845 3.8525
 H -7.63445 0.11887 0.2202
 H -8.82585 -0.31036 1.4708
 H -7.50145 0.82784 1.8467
 H -1.39184 1.48174 2.6057
 H -2.60242 1.73921 3.8843
 H -0.93226 1.27085 4.3182
 H -0.33944 -1.04555 2.4733
 H -0.24605 -1.11296 4.2556
 H -1.20972 -2.32481 3.378
 H -2.07478 -0.55161 5.673
 H -3.67723 -0.07608 5.0825
 H -3.12166 -1.76674 4.9041
 C 2.98987 0.46114 2.177
 H 3.87026 0.18534 2.7852
 H 2.19247 -0.27027 2.3874
 C 0.90536 3.59631 2.3346
 C 1.34742 2.2187 1.8984
 C 3.59504 2.75939 2.7193
 C 3.06174 4.14259 3.0745
 H 0.59925 3.58446 3.3971
 H 0.01821 3.90384 1.7561
 H 1.52073 2.25855 0.8001
 H 0.54803 1.46966 2.0311
 H 4.315 2.42623 3.492
 H 4.18453 2.84758 1.7763
 H 2.67775 4.13793 4.1112
 H 3.88752 4.87546 3.0345
 N 2.53106 1.77623 2.6203
 O -0.3013 -2.21992 -0.8264
 H 0.48553 -2.10315 -0.2618
 C -1.24375 -3.05325 -0.1907
 H -2.19519 -2.96794 -0.7367
 H -1.42348 -2.75668 0.8564
 O -0.31231 1.91619 -0.7872
 O -1.23038 2.55552 -0.2711
 N 1.98312 4.57076 2.1978
 C 2.44877 4.78077 0.8387
 H -0.9244 -4.10951 -0.2186
 C 1.38098 5.25011 -0.1416
 H 2.92166 3.8768 0.3878
 H 3.25752 5.53795 0.8725
 H 0.52618 4.55143 -0.1349
 H 0.99402 6.23659 0.169
 C 3.13927 5.30457 -4.0787
 C 2.53597 4.14692 -3.5879
 C 1.95082 4.14259 -2.3243
 C 1.95107 5.29647 -1.5299
 C 2.56432 6.44845 -2.0303
 C 3.15317 6.45572 -3.2938
 H 3.59749 5.31026 -5.0722
 H 2.52142 3.23604 -4.1971
 H 1.48151 3.22958 -1.9348
 H 2.57569 7.35583 -1.4149
 H 3.6246 7.36892 -3.6696
s06_4
 Co -0.42527 -0.05559 -0.92992
 N 0.48309 -0.07178 -2.60806
 N -2.02758 -0.01736 -1.95794
 C -0.42699 -0.42749 -3.68633
 C 1.71821 0.25346 -2.78081
 C -1.75884 0.25516 -3.36389
 C -3.21238 -0.23715 -1.48624
 C 0.0266 -0.13115 -5.10303
 H -0.60823 -1.5209 -3.58836
 C 2.67143 0.4967 -1.73582
 H 2.11334 0.33193 -3.80823
 C -2.83396 -0.13278 -4.36339
 H -1.57496 1.35045 -3.45311
 C -3.5611 -0.41209 -0.11216
 H -4.05987 -0.28492 -2.19127
 C -1.05565 -0.52846 -6.09767
 H 0.96577 -0.66461 -5.32884
 H 0.24259 0.95206 -5.19561
 C 3.94559 0.97249 -2.10631
 C 2.38401 0.17061 -0.37007
 C -2.37338 0.16254 -5.78477
 H -3.77374 0.40523 -4.15303
 H -3.05222 -1.21383 -4.25335
 C -4.91071 -0.72597 0.18667
 C -2.60243 -0.22014 0.93369
 H -1.19977 -1.62535 -6.05645
 H -0.73003 -0.29965 -7.12572
 C 4.97274 1.15598 -1.19445
 H 4.10712 1.20169 -3.16777
 C 3.46448 0.28232 0.54854
 O 1.22462 -0.23966 0.03906
 H -3.15191 -0.13806 -6.50513
 H -2.24874 1.25607 -5.9049
 C -5.35654 -0.85814 1.48085
 H -5.59298 -0.86204 -0.65934
 C -3.07774 -0.28864 2.29365
 O -1.35942 0.0079 0.70961
 C 6.32353 1.71374 -1.64189
 C 4.68898 0.78368 0.1334
 C -6.79178 -1.2171 1.85552
 C -4.4032 -0.61732 2.5046
 C -2.1332 0.06052 3.44653
 C 6.12797 3.1136 -2.23151
 C 6.93557 0.79567 -2.70382
 C 7.30808 1.82049 -0.48133
 H 5.45496 0.88876 0.90923
 C -7.6616 -1.43774 0.62217
 C -6.7993 -2.50773 2.68036
 C -7.41166 -0.08294 2.67778
 H -4.75187 -0.68831 3.53899
 C -1.72094 1.53167 3.30473
 C -0.88739 -0.83657 3.4493
 C -2.80762 -0.09616 4.80772
 H 5.69097 3.79742 -1.48448
 H 5.45632 3.10217 -3.10576
 H 7.09375 3.53704 -2.55908
 H 6.29374 0.70967 -3.5961
 H 7.91418 1.18402 -3.03657
 H 7.08991 -0.22078 -2.30388
 H 6.93858 2.49203 0.31159
 H 8.26724 2.22943 -0.84073
 H 7.51795 0.83752 -0.02719
 H -7.72759 -0.53029 -0.00173
 H -7.28151 -2.26121 -0.00606
 H -8.6879 -1.70204 0.92755
 H -6.36962 -3.34451 2.10388
 H -7.83049 -2.78211 2.96429
 H -6.21553 -2.40889 3.61005
 H -7.42436 0.85762 2.10153
 H -8.45177 -0.3281 2.95589
 H -6.85628 0.10566 3.61088
 H -1.15192 1.71019 2.37915
 H -2.61208 2.18315 3.30008
 H -1.09572 1.82978 4.16303
 H -0.28701 -0.7105 2.53478
 H -0.25323 -0.5876 4.32035
 H -1.17329 -1.89982 3.54703
 H -2.09219 0.16511 5.60618
 H -3.67714 0.57359 4.92545
 H -3.14124 -1.13269 4.99067
 C 3.28681 -0.11013 1.9879
 H 4.09454 -0.81246 2.26979
 H 2.32557 -0.65758 2.11041
 C 2.38484 3.12769 3.63665
 C 2.26389 1.94775 2.68837
 C 3.43989 0.58795 4.27413
 C 3.53927 1.78277 5.20993
 H 1.53768 3.82034 3.49318
 H 3.30996 3.68288 3.38898
 H 2.27978 2.30009 1.64199
 H 1.27791 1.43586 2.82397
 H 2.55522 -0.04168 4.54695
 H 4.32691 -0.05978 4.40033
 H 3.57737 1.44292 6.25872
 H 4.49309 2.30629 5.00843
 N 3.36479 1.02112 2.89367
 O -0.25024 -2.2756 -0.80786
 H 0.57198 -2.07446 -0.32533
 C -1.10928 -3.01872 0.02485
 H -0.79471 -4.07561 0.08993
 H -2.12005 -2.9887 -0.40981
 O -0.29709 2.02571 -0.91918
 O 0.00637 2.55733 0.12971
 N 2.45536 2.73428 5.03493
 C 1.18988 2.32397 5.60013
 H -1.16743 -2.59765 1.04347
 C 1.12934 2.41722 7.1207
 H 0.87592 1.29378 5.30416
 H 0.40849 2.99024 5.18959
 H 1.90786 1.77922 7.57546
 H 1.3556 3.45606 7.41917
 C -2.78844 1.1815 8.43246
 C -1.72396 0.28355 8.46833
 C -0.45411 0.68782 8.06039
 C -0.22235 1.99447 7.61867
 C -1.30275 2.88358 7.58136
 C -2.57419 2.48411 7.98451
 H -3.78564 0.86661 8.75356
 H -1.88296 -0.74145 8.81668
 H 0.38122 -0.02172 8.08915
 H -1.1356 3.91019 7.23407
 H -3.40422 3.19631 7.95293
s06_5
 Co -0.4109 -0.11091 -1.0121
 N 0.54461 -0.27946 -2.6535
 N -1.9856 -0.21056 -2.079

C -0.32605 -0.76773 -3.7118 C 3.22729 0.18555 1.9968 H -1.70582 -1.08705 -5.7691
 C 1.77293 0.07169 -2.8237 H 4.06895 -0.44494 2.341 C -5.34707 -0.46027 1.4838
 C -1.681 -0.08676 -3.4988 H 2.29755 -0.4078 2.1473 C -5.38495 -1.06897 -0.58
 C -3.18165 -0.38283 -1.6163 C 2.03964 3.43582 3.4312 C -3.08587 -0.02734 2.4205
 C 0.16054 -0.60945 -5.1396 C 2.02546 2.17289 2.5859 O -1.20816 -0.37916 1.0418
 H -0.48658 -1.84896 -3.5043 C 3.38195 1.07577 4.2237 C 6.21946 2.27735 -1.2763
 C 2.68317 0.46298 -1.781 C 3.42124 2.36011 5.0351 C 4.54699 1.57538 0.5697
 H 2.19746 0.06247 -3.8424 H 1.10168 3.99789 3.2803 C -6.85153 -0.47756 1.7401
 C -2.7188 -0.60678 -4.4774 H 2.86308 4.08743 3.0791 C -4.46258 -0.08111 2.5266
 H -1.51774 0.99655 -3.7019 H 1.96555 2.43684 1.5153 C -2.19861 0.39299 3.5958
 C -3.56611 -0.40489 -0.24 H 1.11051 1.56734 2.8005 C 5.90109 3.409 -2.2577
 H -4.0105 -0.51327 -2.333 H 2.55306 0.41788 4.5933 C 7.0779 1.2213 -1.9786
 C -0.88345 -1.13762 -6.1143 H 4.31949 0.50735 4.365 C 7.0336 2.86236 -0.1261
 H 1.11837 -1.13822 -5.2833 H 3.55017 2.1412 6.1086 H 5.21912 1.96982 1.3394
 H 0.35286 0.46349 -5.3405 H 4.30474 2.94359 4.7109 C -7.63245 -0.91617 0.5055
 C 3.94721 0.94773 -2.1605 N 3.22286 1.38216 2.8166 C -7.16963 -1.45518 2.8757
 C 2.36763 0.24344 -0.3982 O -0.21426 -2.29549 -0.6634 C -7.32464 0.92668 2.1284
 C -2.22594 -0.45315 -5.9102 H 0.59248 -2.04507 -0.1777 H -4.91323 0.19318 3.4846
 H -3.67602 -0.07342 -4.3505 C -1.09689 -2.96628 0.2052 C -1.32319 1.5949 3.2166
 H -2.9154 -1.67489 -4.2562 H -2.09608 -2.97021 -0.2566 C -1.29697 -0.77555 4.0076
 C -4.92347 -0.68191 0.0587 H -1.17976 -2.46335 1.184 C -3.02668 0.7891 4.8166
 C -2.63421 -0.09825 0.8019 O -0.32982 1.94973 -1.228 H 5.28557 4.18685 -1.7752
 H -1.00231 -2.22763 -5.9614 O -0.02723 2.60232 -0.2478 H 5.34809 3.04674 -3.1399
 H -0.53447 -1.00906 -7.1521 N 2.24083 3.17845 4.8476 H 6.83006 3.88359 -2.6198
 C 4.93632 1.26141 -1.2419 C 1.06593 2.7564 5.578 H 6.56478 0.78714 -2.8526
 H 4.13187 1.08464 -3.234 H -0.78748 -4.0145 0.3646 H 8.02495 1.66298 -2.3356
 C 3.41568 0.47762 0.5339 C 0.11296 3.9103 5.8889 H 7.32434 0.39457 -1.2911
 O 1.21062 -0.17021 0.0153 H 1.40223 2.32064 6.5373 H 6.47847 3.64909 0.4118
 H -2.97656 -0.84977 -6.6134 H 0.49307 1.94896 5.065 H 7.95851 3.31886 -0.5167
 H -2.12448 0.62428 -6.1439 H -0.20291 4.39241 4.9454 H 7.32981 2.09101 0.6042
 C -5.40178 -0.66873 1.3484 H -0.80571 3.48751 6.334 H -7.47274 -0.23297 -0.3457
 H -5.58604 -0.90929 -0.7832 C 1.90741 6.77433 8.5642 H -7.35673 -1.93557 0.1861
 C -3.14151 -0.01812 2.1492 C 1.07491 5.77495 9.0627 H -8.7131 -0.92041 0.7257
 O -1.38608 0.10692 0.5869 C 0.4845 4.86139 8.1918 H -6.84764 -2.4777 2.6152
 C 6.27319 1.84247 -1.7014 C 0.71112 4.92893 6.8134 H -8.25536 -1.47903 3.0752
 C 4.6292 0.99555 0.1058 C 1.55191 5.93604 6.3266 H -6.66748 -1.17689 3.8166
 C -6.84857 -0.97735 1.7238 C 2.1436 6.85156 7.1925 H -7.11595 1.6484 1.3207
 C -4.47293 -0.31949 2.3634 H 2.37057 7.49552 9.2443 H -8.41218 0.93156 2.3194
 C -2.21695 0.45239 3.2751 H 0.88018 5.70776 10.1374 H -6.82767 1.29502 3.0406
 C 6.03184 3.18342 -2.4009 H -0.17263 4.07745 8.5871 H -0.62385 1.34786 2.4047
 C 6.95149 0.87536 -2.6757 H 1.74204 5.99536 5.2498 H -1.94395 2.44889 2.8938
 C 7.22237 2.08117 -0.531 H 2.79586 7.63418 6.793 H -0.73479 1.91925 4.094
 H 5.36822 1.2007 0.8878
s06_6
 Co -0.16256 -0.56251 -0.521 H -0.57943 -1.02161 3.2088
 N 0.88793 -0.75128 -2.0978 H -0.72091 -0.51043 4.9128
 N -1.64616 -1.04137 -1.6165 H -1.89264 -1.67696 4.2418
 C 0.18835 -1.57622 -3.0693 H -2.35205 1.09663 5.6326
 C 2.04726 -0.2202 -2.2875 H -3.69556 1.64107 4.606
 C -1.27735 -1.14509 -3.0263 H -3.63923 -0.04606 5.1977
 C -2.88033 -1.04141 -1.2246 C 3.08463 0.90825 2.4874
 C 0.72215 -1.59387 -4.4888 H 1.98724 0.83055 2.6401
 H 0.22056 -2.61348 -2.6675 H 3.40947 1.84102 2.9851
 C 2.81676 0.47273 -1.2936 C 2.42733 -0.86104 5.0331
 H 2.52752 -0.32037 -3.2764 C 3.7263 -0.22918 4.5506
 C -2.13469 -2.05331 -3.892 C 3.63131 -1.49968 2.5501
 H -1.31101 -0.11411 -3.4492 C 2.3295 -2.14269 3.0047
 C -3.36486 -0.74746 0.0861 H 1.56412 -0.19743 4.7798
 H -3.66558 -1.26277 -1.9683 H 2.44787 -0.94888 6.1342
 C -0.13605 -2.50478 -5.357 H 4.56622 -0.83491 4.9444
 H 1.77212 -1.93281 -4.5038 H 3.83127 0.79005 4.9622
 H 0.7116 -0.56303 -4.896 H 3.67917 -1.45144 1.449
 C 4.0353 1.06399 -1.6881 H 4.46594 -2.14883 2.8802
 C 2.43812 0.45321 0.0878 H 1.46288 -1.56834 2.5856
 C -1.59947 -2.09244 -5.3175 H 2.27167 -3.17435 2.6079
 H -3.18491 -1.7176 -3.8987 N 3.84255 -0.17702 3.1073
 H -2.12796 -3.06926 -3.4492 O 0.41564 -2.59604 0.1128
 C -4.76908 -0.78158 0.2787 H 1.08605 -2.22962 0.7139
 C -2.4855 -0.3864 1.1587 C -0.50665 -3.3687 0.8448
 H -0.04056 -3.54512 -4.9909 H -1.32874 -3.63845 0.1634
 H 0.23906 -2.50815 -6.3937 H -0.93823 -2.80962 1.6946
 C 4.91768 1.64048 -0.7892 O -0.53201 1.44752 -1.0202
 H 4.27866 1.04563 -2.7586 O -0.44874 2.27314 -0.1339
 C 3.36304 1.01197 1.0158 N 2.2751 -2.1836 4.4552
 O 1.35167 -0.08758 0.5279 C 1.19846 -2.98555 4.9992
 H -2.21154 -2.77122 -5.9341 H -0.0439 -4.29955 1.22
 C 1.66295 -4.37091 5.4544
 H 0.37337 -3.09848 4.2617
 H 0.74905 -2.46205 5.8631

H 2.41185 -4.24066 6.255
 H 0.80258 -4.90745 5.8939
 C 3.31244 -6.49095 2.0883
 C 1.94373 -6.54383 2.3489
 C 1.42044 -5.89075 3.4626
 C 2.24971 -5.17272 4.3316
 C 3.62272 -5.14167 4.0681
 C 4.15093 -5.7925 2.9554
 H 3.72629 -7.00133 1.2137
 H 1.2795 -7.10053 1.6802
 H 0.34216 -5.92716 3.6626
 H 4.27719 -4.57298 4.7374
 H 5.22706 -5.75193 2.7612

s06_7

Co -0.51238 0.05729 -0.8177
 N 0.40129 0.12347 -2.4925
 N -2.11289 0.1274 -1.8445
 C -0.5092 -0.1791 -3.5867
 C 1.65038 0.40242 -2.6468
 C -1.8402 0.48849 -3.2298
 C -3.30194 -0.07636 -1.3776
 C -0.05374 0.18919 -4.9863
 H -0.69391 -1.27631 -3.5479
 C 2.59247 0.63673 -1.5915
 H 2.05811 0.47404 -3.6697
 C -2.91504 0.16013 -4.2505
 H -1.65387 1.58637 -3.2522
 C -3.64663 -0.37696 -0.0245
 H -4.15478 -0.03129 -2.0761
 C -1.13722 -0.14749 -6.0017
 H 0.88132 -0.33791 -5.2414
 H 0.17019 1.27414 -5.0192
 C 3.87612 1.10483 -1.9449
 C 2.2661 0.37535 -0.2238
 C -2.45175 0.53174 -5.6528
 H -3.8533 0.68887 -4.0122
 H -3.13697 -0.92479 -4.1993
 C -5.00007 -0.70239 0.2421
 C -2.67526 -0.34672 1.0269
 H -1.2869 -1.24431 -6.0213
 H -0.80883 0.13584 -7.0151
 C 4.86566 1.34789 -1.0085
 H 4.06952 1.28867 -3.0096
 C 3.27527 0.64711 0.7449
 O 1.12498 -0.10521 0.1572
 H -3.2309 0.27542 -6.3893
 H -2.32167 1.62953 -5.7116
 C -5.43565 -1.02683 1.5053
 H -5.69374 -0.69539 -0.6054
 C -3.1299 -0.66506 2.3596
 O -1.43822 -0.06265 0.8291
 C 6.21884 1.92102 -1.4282
 C 4.52077 1.09657 0.3356
 C -6.87713 -1.39887 1.841
 C -4.46021 -0.99594 2.5349
 C -2.15309 -0.5863 3.5355
 C 6.00769 3.3373 -1.9733
 C 6.85374 1.04309 -2.5092
 C 7.19128 2.00611 -0.2551
 H 5.26248 1.27468 1.1217
 C -7.77262 -1.36919 0.6067
 C -6.92103 -2.81328 2.4272
 C -7.4411 -0.40584 2.862
 H -4.79402 -1.24813 3.5457
 C -1.74584 0.88021 3.7259
 C -0.91353 -1.46081 3.2954
 C -2.78416 -1.0626 4.8424
 H 5.54371 3.98482 -1.2096
 H 5.34679 3.3415 -2.8565
 H 6.97005 3.78995 -2.2714
 H 6.22834 0.97814 -3.4145
 H 7.83162 1.45341 -2.8161
 H 7.01575 0.01639 -2.1395
 H 6.82451 2.68228 0.5354
 H 8.16031 2.40338 -0.6006

H 7.37898 1.0173 0.1967
 H -7.80777 -0.36611 0.1489
 H -7.43844 -2.08764 -0.1609
 H -8.80483 -1.64068 0.8843
 H -6.52941 -3.54997 1.7054
 H -7.95798 -3.09825 2.6775
 H -6.32357 -2.89936 3.3494
 H -7.42804 0.62106 2.4594
 H -8.48489 -0.6607 3.1162
 H -6.86401 -0.40277 3.801
 H -1.39768 -1.3291 2.7846
 H -2.60299 1.47366 4.0876
 H -0.93113 0.9652 4.4679
 H -0.34542 -1.14306 2.4092
 H -0.24383 -1.40651 4.1716
 H -1.20702 -2.5193 3.1707
 H -2.0449 -0.97552 5.6559
 H -3.65763 -0.45622 5.1352
 H -3.09745 -2.11995 4.7918
 C 2.92782 0.59028 2.2128
 H 3.82462 0.31874 2.7986
 H 2.1653 -0.18624 2.3896
 C 2.81682 4.12534 3.514
 C 3.39936 2.9094 2.8186
 C 1.2119 2.305 2.075
 C 0.64201 3.52269 2.7662
 H 3.56427 4.93806 3.5159
 H 2.59671 3.8672 4.5797
 H 4.2831 2.54264 3.3737
 H 3.74765 3.23805 1.8074
 H 1.41823 2.59237 1.0158
 H 0.4804 1.48038 2.0413
 H -0.24527 3.86621 2.2048
 H 0.29399 3.25168 3.7939
 N 2.41725 1.84984 2.7402
 O -0.27735 -2.11115 -0.8144
 H 0.43416 -2.00082 -0.1585
 C -1.25671 -3.0119 -0.3562
 H -2.10425 -2.97086 -1.0574
 H -1.63207 -2.75344 0.6491
 O -0.42533 2.06577 -0.7264
 O -1.32779 2.65669 -0.1416
 N 1.63949 4.56597 2.8096
 C 1.15595 5.88716 3.1035
 H -0.87552 -4.04799 -0.3424
 C 0.4209 6.51188 1.9126
 H 2.03128 6.52136 3.3385
 H 0.49855 5.91703 4.0062
 H -0.54138 5.99565 1.7475
 H 0.17043 7.55735 2.1655
 C 2.95186 6.21375 -1.5617
 C 1.9734 5.24965 -1.3195
 C 1.1291 5.37343 -0.2201
 C 1.2526 6.45011 0.6642
 C 2.23489 7.41076 0.4091
 C 3.07704 7.29844 -0.696
 H 3.61406 6.12245 -2.4281
 H 1.86459 4.39103 -1.9905
 H 0.35901 4.61586 -0.0371
 H 2.34242 8.26089 1.0941
 H 3.83703 8.06363 -0.8823

s06_8

Co -0.41314 -0.09772 -0.9057
 N 0.51032 -0.15152 -2.5784
 N -2.00127 -0.00568 -1.9502
 C -0.40371 -0.48547 -3.6604
 C -1.76004 0.11308 -2.7467
 C -1.70978 0.25226 -3.3544
 C -3.19972 -0.15844 -1.4867
 C 0.07279 -0.22027 -5.0759
 H -0.62839 -1.56987 -3.5541
 C 2.70334 0.37772 -1.6989
 H 2.16883 0.14183 -3.7713
 C -2.79088 -0.09975 -4.3608
 H -1.48202 1.33892 -3.4487

C -3.56856 -0.34062 -0.1202
 H -4.04317 -0.14894 -2.1978
 C -1.01653 -0.58078 -6.0768
 H 0.99065 -0.79398 -5.2902
 H 0.33416 0.85227 -5.1753
 C 3.9838 0.83815 -2.066
 C 2.38032 0.13959 -0.3244
 C -2.30722 0.16607 -5.7801
 H -3.7101 0.477 -4.163
 H -3.05316 -1.1703 -4.2443
 C -4.9357 -0.59948 0.1522
 C -2.61048 -0.23582 0.9396
 H -1.20591 -1.6705 -6.0289
 H -0.67306 -0.37329 -7.1035
 C 4.97513 1.11601 -1.1388
 H 4.17706 0.98683 -3.1365
 C 3.40754 0.4012 0.6243
 O 1.22946 -0.30397 0.0729
 H -3.09158 -0.10756 -6.5048
 H -2.13667 1.25264 -5.9068
 C -5.4004 -0.76989 1.4343
 H -5.61437 -0.66571 -0.7049
 C -3.10291 -0.35304 2.3219
 O -1.35721 -0.0506 0.7325
 C 6.3373 1.64438 -1.5877
 C 4.63822 0.88661 0.2092
 C -6.85493 -1.07426 1.7814
 C -4.44459 -0.62937 2.4739
 C -2.16551 -0.10109 3.4765
 C 6.15541 2.98972 -2.2966
 C 6.98627 0.6456 -2.5501
 C 7.28462 1.85231 -0.4099
 H 5.36576 1.10469 0.9984
 C -7.72474 -1.18449 0.5335
 C -6.93524 -2.40439 2.5369
 C -7.42265 0.04551 2.6593
 H -4.80636 -0.73863 3.5001
 C -1.77781 1.38465 3.4635
 C -0.9124 -0.9864 3.4192
 C -2.84478 -0.3917 4.8126
 H 5.69076 3.72932 -1.623
 H 5.5131 2.90153 -3.1883
 H 7.12965 3.39165 -2.6263
 H 6.37366 0.48185 -3.4519
 H 7.97336 1.01172 -2.883
 H 7.1319 -0.33328 -2.0628
 H 6.89376 2.59255 0.3079
 H 8.25629 2.22699 -0.773
 H 7.47563 0.91289 0.1356
 H -7.73754 -0.24368 -0.0424
 H -7.38332 -1.99324 -0.1347
 H -8.76597 -1.40978 0.819
 H -6.54411 -3.23073 1.9193
 H -7.98149 -2.63987 2.8001
 H -6.35523 -2.38496 3.4739
 H -7.38197 1.01453 2.1337
 H -8.4763 -0.15977 2.9181
 H -6.86594 0.15545 3.6041
 H -1.3374 1.67586 2.497
 H -2.67096 2.01154 3.6334
 H -1.04217 1.61758 4.2571
 H -0.31117 -0.80642 2.5157
 H -0.28098 -0.78686 4.3037
 H -1.19372 -2.05533 3.4515
 H -2.13423 -0.18913 5.6307
 H -3.72278 0.25299 4.9905
 H -3.16406 -1.44575 4.8941
 C 3.13729 0.24361 2.0922
 H 4.03967 -0.16195 2.5864
 H 2.31851 -0.4937 2.2506
 C 1.30026 3.41545 2.8808
 C 1.60422 2.09768 2.209
 C 2.74448 1.37891 4.1655
 C 2.4821 2.7174 4.8175
 H 0.32656 3.79135 2.5174
 H 2.07558 4.16544 2.5831
 H 1.7141 2.26739 1.1241

H 0.74477 1.39944 2.3373
 H 1.92828 0.67353 4.4649
 H 3.69344 0.95855 4.545
 H 2.42246 2.57687 5.9095
 H 3.34728 3.39922 4.6175
 N 2.82726 1.51283 2.7292
 O -0.27979 -2.29888 -0.7969
 H 0.53448 -2.14103 -0.2857
 C -1.19017 -3.04777 -0.0252
 H -1.25039 -2.68471 1.0146
 H -0.9251 -4.11991 -0.0184
 O -0.20307 1.94102 -0.8711
 O -1.08599 2.6034 -0.3525
 N 1.2483 3.28971 4.3242
 C 0.90385 4.54768 4.9407
 H -2.1886 -2.94309 -0.4766
 C 0.6577 4.47635 6.4422
 H -0.01652 4.91504 4.4471
 H 1.6882 5.32197 4.7416
 H 1.59264 4.23635 6.9777
 H 0.38056 5.4927 6.776
 C -2.46008 1.73241 7.6102
 C -2.77148 2.90355 6.9215
 C -1.7593 3.78004 6.5419
 C -0.41975 3.50753 6.8409
 C -0.12117 2.32377 7.5211
 C -1.13034 1.4424 7.9049
 H -3.25463 1.04315 7.9119
 H -3.81345 3.13831 6.6826
 H -2.01199 4.70586 6.0112
 H 0.92198 2.09619 7.7692
 H -0.87534 0.52465 8.4437

s06_9

Co -0.39192 -0.21273 -0.9965
 N 0.51466 -0.17735 -2.6703
 N -2.00253 -0.11828 -2.0088
 C -0.40142 -0.5293 -3.7439
 C 1.76625 0.09046 -2.8329
 C -1.73124 0.15611 -3.4163
 C -3.19758 -0.16323 -1.5106
 C 0.04657 -0.23205 -5.1625
 H -0.58577 -1.62358 -3.6517
 C 2.70077 0.35638 -1.7777
 H 2.17937 0.12597 -3.8559
 C -2.81051 -0.23514 -4.4109
 H -1.54556 1.25123 -3.5066
 C -3.54392 -0.31408 -0.1317
 H -4.05714 -0.07702 -2.1977
 C -1.03852 -0.63089 -6.1535
 H 0.98468 -0.76539 -5.3922
 H 0.26319 0.85108 -5.254
 C 3.99182 0.81575 -2.1233
 C 2.36402 0.13008 -0.4071
 C -2.35755 0.05529 -5.8357
 H -3.75042 0.30242 -4.2014
 H -3.02759 -1.3156 -4.2903
 C -4.92 -0.39756 0.1982
 C -2.54699 -0.35768 0.8947
 H -1.17912 -1.7283 -6.1129
 H -0.7178 -0.40022 -7.1827
 C 4.95814 1.10678 -1.1762
 H 4.20866 0.94999 -3.1912
 C 3.35693 0.43446 0.5645
 O 1.22459 -0.33044 -0.0025
 H -3.13848 -0.25035 -6.5514
 H -2.23767 1.14897 -5.9598
 C -5.35037 -0.53486 1.4976
 H -5.63751 -0.35012 -0.6279
 C -2.98649 -0.50003 2.2606
 O -1.2916 -0.28784 0.6519
 C 6.33854 1.61569 -1.5935
 C 4.59216 0.91782 0.1743
 C -6.81933 -0.63201 1.9014
 C -4.34461 -0.58295 2.4993
 C -1.94564 -0.54636 3.3848

C 6.19443 2.95795 -2.3167
 C 7.0009 0.60203 -2.5307
 C 7.25658 1.81903 -0.3909
 H 5.28777 1.16475 0.9823
 C -7.74636 -0.55949 0.6924
 C -7.07125 -1.9642 2.6143
 C -7.17369 0.52434 2.8416
 H -4.67743 -0.69175 3.5358
 C -2.60159 -0.71709 4.7531
 C -1.14089 0.76013 3.412
 C -0.98585 -1.7279 3.1833
 H 5.7208 3.70819 -1.6612
 H 5.57511 2.87108 -3.2247
 H 7.18238 3.34562 -2.6224
 H 6.41117 0.43926 -3.4479
 H 8.0016 0.95292 -2.8388
 H 7.12032 -0.37483 -2.0323
 H 6.85998 2.5746 0.308
 H 8.24637 2.17046 -0.7302
 H 7.41523 0.88618 0.1777
 H -7.6351 0.39256 0.1462
 H -7.56461 -1.38639 -0.0149
 H -8.79728 -0.63085 1.0192
 H -6.83354 -2.81447 1.9528
 H -8.13032 -2.05038 2.9147
 H -6.46032 -2.06982 3.5257
 H -7.00784 1.49664 2.3477
 H -8.23477 0.46964 3.1421
 H -6.56895 0.5114 3.7629
 H -3.279 0.11891 4.9974
 H -3.17319 -1.65837 4.8279
 H -1.82278 -0.74391 5.5331
 H -1.80493 1.62527 3.5818
 H -0.40586 0.7319 4.2366
 H -0.59474 0.91587 2.4703
 H -0.27142 -1.77902 4.0239
 H -1.53889 -2.68406 3.1571
 H -0.40603 -1.61827 2.2542
 C 2.9747 0.2766 2.0105
 H 2.42539 -0.68556 2.1463
 H 2.22136 1.05255 2.2506
 C 4.96257 1.08304 5.0767
 C 3.7184 0.8155 4.2537
 C 4.89823 -0.80356 2.9765
 C 6.16105 -0.5439 3.7685
 H 4.67959 1.33764 6.1149
 H 5.47222 1.97816 4.6442
 H 3.10933 1.7339 4.19
 H 3.09764 0.03942 4.7673
 H 4.32703 -1.64156 3.4469
 H 5.15678 -1.11775 1.9505
 H 6.7535 -1.47212 3.8569
 H 6.78325 0.18499 3.1964
 N 4.08798 0.39682 2.921
 O -0.18547 -2.4136 -0.9518
 H 0.47947 -2.30719 -0.2507
 C -1.24997 -3.2248 -0.5212
 H -1.67162 -2.89256 0.4434
 H -0.947 -4.28323 -0.4342
 O -0.33628 1.8779 -0.8984
 O 0.05693 2.3777 0.1364
 N 5.81995 -0.07761 5.0961
 C 6.86024 -0.06814 6.0934
 H -2.04456 -3.16159 -1.2813
 C 7.86195 1.09642 6.0697
 H 7.41118 -1.0243 6.0155
 H 6.38191 -0.0762 7.093
 H 7.328 2.04767 6.2432
 H 8.53721 0.96711 6.9364
 C 10.09359 1.29143 2.3838
 C 10.26158 0.21521 3.2546
 C 9.56117 0.17351 4.4563
 C 8.67072 1.19508 4.8076
 C 8.52848 2.27822 3.9351
 C 9.23241 2.32914 2.7338
 H 10.64056 1.32519 1.4368
 H 10.94706 -0.59719 2.9948

H 9.69848 -0.67584 5.1363
 H 7.84226 3.09088 4.1998
 H 9.10458 3.1848 2.0637

s06_10

Co -0.39641 -0.16624 -0.93318
 N 0.53675 -0.24757 -2.59176
 N -1.98954 -0.22158 -1.97246
 C -0.35066 -0.70247 -3.65231
 C 1.77935 0.0523 -2.7611
 C -1.70654 -0.04062 -3.39217
 C -3.18684 -0.33615 -1.49283
 C 0.11156 -0.48939 -5.08128
 H -0.49976 -1.79216 -3.48317
 C 2.70646 0.39152 -1.71821
 H 2.20028 0.03701 -2.8127
 C -2.75666 -0.53239 -4.37286
 H -1.5547 1.05105 -3.55681
 C -3.55149 -0.39475 -0.1116
 H -4.03381 -0.38474 -2.09177
 C -0.94445 -0.98949 -6.05766
 H 1.06898 -1.00756 -5.26065
 H 0.29597 0.59127 -5.24486
 C 4.00054 0.81084 -2.09178
 C 2.37318 0.22732 -0.33584
 C -2.28852 -0.32422 -5.80707
 H -3.71521 -0.01059 -4.21342
 H -2.9434 -1.60853 -4.18464
 C -4.92241 -0.5751 0.19977
 C -2.58289 -0.22935 0.92928
 H -1.05244 -2.08529 -5.94277
 H -0.61364 -0.82049 -7.09558
 C 4.98887 1.10679 -1.16832
 H 4.2097 0.89912 -3.1659
 C 3.39566 0.50458 0.61753
 O 1.21883 -0.18041 0.07877
 H -3.04765 -0.70163 -6.51182
 H -2.19922 0.76173 -6.00361
 C -5.3763 -0.60367 1.49804
 H -5.61632 -0.69153 -0.63962
 C -3.05186 -0.23071 2.29308
 O -1.32977 -0.08614 0.6994
 C 6.37785 1.55134 -1.62725
 C 4.63827 0.94452 0.18851
 C -6.83924 -0.80528 1.88426
 C -4.40221 -0.42198 2.5149
 C -2.05703 -0.00093 3.43594
 C 6.26226 2.80684 -2.49601
 C 7.02704 0.42643 -2.43949
 C 7.29249 1.87313 -0.44906
 H 5.37608 1.17563 0.96485
 C -7.73079 -0.98022 0.65923
 C -6.97355 -2.05957 2.75339
 C -7.33983 0.41298 2.66656
 H -4.75488 -0.43003 3.55038
 C -1.41967 1.38777 3.29363
 C -0.95654 -1.07056 3.42081
 C -2.73723 -0.06129 4.80153
 H 5.7979 3.634 -1.93309
 H 5.65156 2.63261 -3.39698
 H 7.2597 3.13995 -2.83252
 H 6.43684 0.17282 -3.33559
 H 8.03621 0.72088 -2.77765
 H 7.12388 -0.49017 -1.83293
 H 6.889 2.68867 0.17459
 H 8.2795 2.19715 -0.81927
 H 7.45662 0.99448 0.19745
 H -7.70495 -0.09413 0.00254
 H -7.43983 -1.86097 0.66191
 H -8.77772 -1.12646 0.97363
 H -6.62973 -2.95424 2.20707
 H -8.02651 -2.2203 3.0443
 H -6.38228 -1.98752 3.68085
 H -7.2611 1.32966 2.05797
 H -8.39806 0.28248 2.95346
 H -6.76497 0.57741 3.5924

H -0.86325 1.48577 2.34982
H -2.1918 2.17568 3.32862
H -0.71761 1.56714 4.12708
H -0.38843 -1.03227 2.47921
H -0.24984 -0.90405 4.25363
H -1.38744 -2.08087 3.54376
H -1.98717 0.10708 5.59196
H -3.51194 0.71592 4.91674
H -3.20153 -1.04394 4.99394
C 3.10957 0.28504 2.08407
H 2.04014 0.4758 2.27723
H 3.68953 1.01319 2.67978
C 2.90593 -3.40688 2.79058
C 2.64516 -2.11934 2.03808
C 4.8379 -1.36296 2.5918
C 5.09173 -2.64749 3.35329
H 2.33879 -4.22909 2.31701
H 2.52346 -3.30527 3.83669
H 1.57653 -1.85052 2.0953
H 2.88929 -2.29087 0.95802
H 5.23866 -1.48933 1.55553
H 5.3973 -0.53352 3.06181
H 6.16335 -2.90614 3.29323
H 4.84244 -2.48836 4.43146
N 3.42895 -1.04111 2.59533
O -0.11369 -2.36537 -0.70817
H 0.67466 -2.1466 -0.1818
C -1.01545 -3.11607 0.06968
H -1.99938 -3.08217 -0.42319
H -1.13424 -2.70387 1.08646
O -0.36789 1.93516 -1.03242
O -0.06639 2.5365 -0.02323
N 4.31624 -3.72444 2.78148
C 4.62429 -5.03959 3.28846
H -4.70422 -4.17352 0.14392
C 4.40992 -6.13628 2.24455
H 4.0377 -5.27445 4.20868
H 5.68776 -5.05446 3.58973
H 4.54721 -7.1181 2.7299
H 3.36129 -6.11154 1.89548
C 7.15773 -5.68175 -1.04811
C 7.40078 -6.63174 -0.05926
C 6.50132 -6.8771 0.99414
C 5.34554 -6.00501 1.07757
C 5.11304 -5.05473 0.07549
C 6.00974 -4.89346 -0.9768
H 7.8614 -5.55669 -1.87652
H 8.29667 -7.2582 -0.1077
H 6.69691 -7.53685 1.77055
H 4.21721 -4.42836 0.13454
H 5.81044 -4.14428 -1.74924

s06_11

Co -0.47279 -0.10571 -0.9743
N 0.48048 -0.15527 -2.6217
N -2.05422 -0.08805 -2.035
C -0.40469 -0.55461 -3.7058
C 1.7391 0.08724 -2.7615
C -1.74589 0.13639 -3.4431
C -3.26145 -0.17855 -1.574
C 0.08277 -0.31312 -5.122
H -0.58756 -1.64489 -3.5722
C 2.65479 0.38402 -1.6962
H 2.18043 0.06516 -3.7729
C -2.79457 -0.29558 -4.4529
H -1.56197 1.22817 -3.5688
C -3.64298 -0.30936 -0.2027
H -4.10124 -0.1591 -2.2899
C -0.97318 -0.75186 -6.1274
H 1.02688 -0.85387 -5.3049
H 0.30166 0.76594 -5.2492
C 3.97282 0.75114 -2.0377
C 2.27848 0.24619 -0.3206
C -2.30146 -0.05671 -5.8738
H -3.74127 0.24624 -4.2899
H -3.01232 -1.37176 -4.3

C -5.02002 -0.48025 0.0861
C -2.6794 -0.25069 0.8541
H -1.11377 -1.84722 -6.0489
H -0.62308 -0.56015 -7.155
C 4.94978 1.0163 -1.091
H 4.21241 0.8235 -3.1067
C 3.27119 0.55338 0.6522
O 1.11723 -0.1653 0.0669
H -3.06105 -0.3906 -6.5997
H -2.17916 1.03179 -6.0352
C -5.48205 -0.61681 1.3747
H -5.71183 -0.50414 -0.7627
C -3.15213 -0.39747 2.2082
O -1.42566 -0.08586 0.6474
C 6.3622 1.41492 -1.5196
C 4.55142 0.90713 0.2563
C -6.95297 -0.80816 1.7349
C -4.50798 -0.57322 2.4072
C -2.14891 -0.3451 3.3653
C 6.30728 2.72664 -2.3083
C 6.96411 0.31668 -2.401
C 7.28485 1.61827 -0.3216
H 5.27117 1.1045 1.0581
C -7.84316 -0.82155 0.4964
C -7.13555 -2.1416 2.4663
C -7.41555 0.33764 2.6403
H -4.86497 -0.68708 3.435
C -1.48332 1.03653 3.4134
C -1.07062 -1.42628 3.1989
C -2.82831 -0.58146 4.7122
H 5.87918 3.53694 -1.6943
H 5.68926 2.63531 -3.2167
H 7.31967 3.03488 -2.6237
H 6.37154 0.14797 -3.3151
H 7.98705 0.58796 -2.7159
H 7.0175 -0.64071 -1.8556
H 6.93124 2.42794 0.3384
H 8.29442 1.89457 -0.6691
H 7.38188 0.70108 0.2832
H -7.78049 0.12641 -0.0643
H -7.58151 -1.64566 -0.1887
H -8.89659 -0.96069 0.7917
H -6.81904 -2.98517 1.8297
H -8.19525 -2.29542 2.7357
H -6.54834 -2.18825 3.3979
H -7.30222 1.30995 2.1317
H -8.47907 0.21443 2.9103
H -6.84002 0.38371 3.5791
H -0.93995 1.25766 2.483
H -2.23759 1.82593 3.5753
H -0.76482 1.08011 4.2514
H -0.47313 -1.26168 2.2884
H -0.38085 -1.40905 4.0635
H -1.52586 -2.43366 3.1553
H -2.07405 -0.54462 5.5161
H -3.58408 0.18946 4.94
H -3.31884 -1.56955 4.7636
C 2.93252 0.47717 2.113
H 1.82763 0.53354 2.2386
H 3.36128 1.3584 2.625
C 3.92781 -1.83215 4.8835
C 3.28207 -0.64591 4.2024
C 2.93946 -1.93687 2.2418
C 3.57751 -3.12939 2.9186
H 3.72559 -1.79128 5.968
H 5.03598 -1.77064 4.7461
H 3.71786 0.29201 4.59
H 2.1925 -0.63429 4.4592
H 1.83048 -1.98106 2.3886
H 3.12883 -1.98113 1.1548
H 3.12276 -4.05771 2.5287
H 4.66404 -3.16184 2.6552
N 3.47777 -0.7015 2.7699
O -0.24211 -2.30601 -0.7918
H 0.40492 -2.14669 -0.0835
C -1.29606 -3.12012 -0.3411
H -2.07259 -3.1215 -1.122

H -1.75152 -2.74529 0.5922
O -0.40358 1.9968 -0.9847
O -0.10407 2.54643 0.0543
N 3.39766 -3.06783 4.3526
C 3.85375 -4.25423 5.0373
H -0.96891 -4.16339 -0.1852
C 2.8475 -5.40248 4.9701
H 4.01541 -4.00013 6.1009
H 4.84288 -4.59484 4.646
H 2.60596 -5.61898 3.9134
H 3.32699 -6.31452 5.3657
C -0.70758 -4.49856 7.2382
C 0.25037 -5.36857 7.7523
C 1.38951 -5.66931 7.0076
C 1.59146 -5.11337 5.7404
C 0.61946 -4.24062 5.2347
C -0.51854 -3.93584 5.9764
H -1.60355 -4.25946 7.8186
H 0.11085 -5.81842 8.74
H 2.14105 -6.35522 7.4162
H 0.76996 -3.78771 4.2485
H -1.26441 -3.24941 5.5628

s06_12

Co -0.22056 0.04562 -0.8323
N 0.58466 -0.12736 -2.5592
N -1.86638 0.17906 -1.7802
C -0.41275 -0.46246 -3.5647
C 1.82571 0.09593 -2.8242
C -1.65742 0.35396 -3.2115
C -3.03935 0.10762 -1.2398
C -0.01991 -0.28612 -5.0192
H -0.68127 -1.52801 -3.3915
C 2.85205 0.34381 -1.8539
H 2.1597 0.08595 -3.8758
C -2.8198 0.01343 -4.1269
H -1.38418 1.42252 -3.3725
C -3.33361 0.04856 0.155
H -3.92282 0.10988 -1.9003
C -1.19014 -0.63725 -5.928
H 0.85406 -0.9138 -5.2639
H 0.28308 0.76653 -5.1884
C 4.12123 0.7394 -2.3226
C 2.62434 0.12281 -0.4576
C -2.42046 0.18791 -5.586
H -3.69395 0.64615 -3.8985
H -3.12592 -1.03547 -3.9412
C -4.69514 -0.09696 0.523
C -2.30973 0.19523 1.1458
H -1.42791 -1.71237 -5.8132
H -0.90691 -0.49602 -6.984
C 5.19841 0.95596 -1.4788
H 4.23489 0.88175 -3.4052
C 3.74756 0.29222 0.4007
O 1.47973 -0.2385 0.0315
H -3.26406 -0.07859 -6.2437
H -2.20679 1.25721 -5.7775
C -5.09681 -0.09566 1.8373
H -5.42291 -0.21142 -0.2874
C -2.738 0.29107 2.5221
O -1.05864 0.24553 0.858
C 6.5458 1.41587 -2.0349
C 4.96488 0.71473 -0.1111
C -6.54267 -0.27747 2.2898
C -4.07989 0.11868 2.8031
C -1.72692 0.65198 3.6111
C 6.37428 2.76218 -2.7444
C 7.07274 0.37898 -3.031
C 7.58715 1.58901 -0.9334
H 5.77021 0.86483 0.6159
C -7.4858 -0.47787 1.1081
C -6.64383 -1.50866 3.1953
C -7.00503 0.96239 3.0618
H -4.39028 0.16493 3.851
C -1.19635 2.06209 3.3177
C -0.57293 -0.35694 3.6679

C -2.35982 0.68594 5.0009
H 5.99705 3.52904 -2.0471
H 5.66381 2.69773 -3.5848
H 7.33885 3.11396 -3.1507
H 6.38624 0.23716 -3.8819
H 8.04814 0.69414 -3.4415
H 7.20838 -0.60147 -2.5439
H 7.27914 2.34403 -0.1908
H 8.54207 1.92547 -1.3706
H 7.78361 0.6439 -0.3998
H -7.48554 0.39261 0.4303
H -7.22245 -1.37329 0.5198
H -8.51895 -0.61281 1.4696
H -6.32995 -2.41891 2.6567
H -7.68308 -1.65542 3.5383
H -6.00922 -1.41623 4.0918
H -6.94556 1.86373 2.4286
H -8.05176 0.84534 3.3932
H -6.39364 1.14532 3.9604
H -0.78065 2.13389 2.3006
H -2.01078 2.80242 3.4072
H -0.39263 2.32359 4.0298
H -0.02282 -0.40631 2.7166
H 0.13653 -0.06391 4.463
H -0.95293 -1.36605 3.9106
H -1.59235 0.96996 5.7407
H -3.17319 1.42785 5.0753
H -2.75951 -0.29765 5.3033
C 3.60568 0.07427 1.8774
H 4.5174 -0.42185 2.2602
H 2.75545 -0.61887 2.0688
C 2.07916 3.30561 3.0112
C 2.26983 2.05576 2.1858
C 3.37326 1.03201 4.0408
C 3.16955 2.2915 4.8528
H 1.15408 3.81518 2.6883
H 2.92792 4.01 2.8285
H 2.39183 2.33388 1.1244
H 1.35032 1.42841 2.2479
H 2.53617 0.32717 4.2706
H 4.30884 0.53244 4.3524
H 3.08212 2.01868 5.9179
H 4.0674 2.95153 4.7516
N 3.43933 1.31144 2.6227
O -0.22486 -2.15553 -0.6238
H 0.65909 -2.0284 -0.234
C -1.06781 -2.76994 0.3245
H -0.85997 -3.85151 0.4056
H -2.10881 -2.64444 -0.0101
O 0.12746 2.06449 -0.8733
O -0.7661 2.81077 -0.5107
N 1.9731 2.97884 4.4186
C 1.6045 4.11148 5.2308
H -0.97556 -2.30708 1.322
C 1.14665 3.72825 6.6342
H 0.76428 4.62529 4.7255
H 2.42633 4.86935 5.2987
H 0.42912 2.8923 6.5385
H 1.99637 3.35288 7.2315
C -0.67424 7.12047 8.5698
C 0.68655 6.8706 8.7328
C 1.27144 5.76311 8.1223
C 0.50989 4.88786 7.342
C -0.85482 5.15312 7.1825
C -1.44441 6.25744 7.7918
H -1.13608 7.98758 9.051
H 1.29791 7.54252 9.3427
H 2.34197 5.56634 8.254
H -1.46042 4.47392 6.5697
H -2.51426 6.44538 7.6603

s07_1

Co -0.37998 -0.21454 -0.7877
N 0.66668 -0.5982 -2.3251
N -1.89302 -0.39055 -1.9341
C -0.15553 -1.21772 -3.3502

C 1.93299 -0.37647 -2.4392
C -1.49733 -0.48307 -3.3363
C -3.12899 -0.3531 -1.548
C 0.42679 -1.32 -4.7462
H -0.37135 -2.24862 -2.986
C 2.8053 0.0501 -1.3855
H 2.42423 -0.256877 -3.4092
C -2.4879 -1.13748 -4.2837
H -1.29148 0.55257 -3.6921
C -3.60109 -0.18742 -0.2098
H -3.9208 -0.46174 -2.3091
C -0.57331 -1.98441 -5.6824
H 1.37031 -1.89359 -4.7282
H 0.67541 -0.30458 -5.1143
C 4.16228 0.29604 -1.7151
C 2.36495 0.09335 -0.0218
C -1.90208 -1.24485 -5.6854
H -3.43354 -0.5709 -4.3164
H -2.73434 -2.14619 -3.8943
C -5.00101 -0.24295 0.0069
C -2.703 0.04472 0.8809
H -0.73672 -3.02906 -5.3521
H -0.15917 -2.04648 -6.7021
C 5.1144 0.59467 -0.7624
H 4.43426 0.23949 -2.7748
C 3.37999 0.2814 0.9744
O 1.14478 -0.07047 0.3487
H -2.62143 -1.73862 -6.3593
H -1.74953 -0.22628 -6.0918
C -5.55041 -0.09318 1.2589
H -5.63698 -0.41311 -0.8683
C -3.26894 0.19609 2.1988
O -1.43236 0.11648 0.7365
C 6.57209 0.91606 -1.0795
C 4.67134 0.57518 0.5826
C -7.04915 -0.14661 1.5432
C -4.64204 0.12262 2.329
C -2.33953 0.42588 3.3944
C 6.89246 0.69258 -2.554
C 7.50464 0.02445 -0.2534
C 6.84378 2.38511 -0.7408
H 5.39932 0.77139 1.3811
C -7.85948 -0.38841 0.2738
C -7.34877 -1.28612 2.5222
C -7.50543 1.18251 2.1528
H -5.06891 0.23936 3.3295
C -3.1183 0.54482 4.7022
C -1.54061 1.7228 3.2074
C -1.37012 -0.75518 3.5398
H 6.29058 1.34201 -3.2117
H 6.72118 -0.35609 -2.8548
H 7.95296 0.92432 -2.7484
H 7.3239 -1.04488 -0.4591
H 8.55921 0.24409 -0.4945
H 7.38179 0.17837 0.8311
H 6.20073 3.05197 -1.3395
H 7.8967 2.64607 -0.9475
H 6.64798 2.60115 0.3225
H -7.71165 0.41548 -0.467
H -7.59962 -1.34889 -0.2028
H -8.93526 -0.42063 0.5146
H -7.03746 -2.25727 2.1014
H -8.4303 -1.3383 2.7385
H -6.82639 -1.15643 3.484
H -7.30908 2.01924 1.4613
H -8.58868 1.16111 2.3656
H -6.98717 1.40458 3.0998
H -3.81119 1.4036 4.6968
H -3.6989 -0.3663 4.9278
H -2.41396 0.6992 5.5364
H -2.21944 2.58624 3.0983
H -0.90766 1.90382 4.0942
H -0.88909 1.67597 2.3226
H -0.70631 -0.59803 4.4088
H -1.92086 -1.69861 3.7043
H -0.73922 -0.85697 2.6432
C 3.07569 0.00263 2.4288

H 2.03879 0.29092 2.6704
H 3.75127 0.60165 3.0671
C 4.74811 -3.38055 2.809
C 4.61482 -1.87794 2.6213
C 2.19487 -2.25854 2.2734
C 2.45645 -3.72936 2.5189
H 4.59407 -3.65211 3.8685
H 5.77211 -3.68992 2.5432
H 5.03612 -1.62364 1.6217
H 5.26118 -1.35207 3.3516
H 1.23979 -1.95287 2.7434
H 2.05767 -2.1285 1.1773
H 2.42231 -3.95635 3.5991
H 1.66373 -4.32714 2.0377
N 3.25102 -1.40553 2.7869
O -0.26939 -2.32569 -0.182
H 0.23437 -2.12073 0.6214
C -1.35894 -3.16078 0.1147
H -1.02202 -4.15312 0.4658
H -1.93011 -3.3096 -0.8158
O -0.26074 1.8333 -1.2329
O -0.07816 2.59424 -0.3061
N 3.76988 -4.12878 2.0234
C 3.91804 -3.93455 5.8008
H -2.04021 -2.7178 0.8651
H 3.81455 -2.86509 0.2937
C 0.95806 -6.02008 -1.7798
C 1.5613 -6.6616 -0.6967
C 2.50291 -5.99253 0.079
C 2.84977 -4.66756 -0.2082
C 2.22851 -4.02831 -1.2831
C 1.29475 -4.70109 -2.0698
H 0.22416 -6.55053 -2.3938
H 1.29717 -7.69638 -0.4584
H 2.97316 -6.49056 0.9334
H 2.47442 -2.97989 -1.4977
H 0.82252 -4.18563 -2.914
C 7.7772 -5.11408 -0.9575
C 7.1678 -3.94095 -1.3955
C 5.9326 -3.56003 -0.8738
C 5.28894 -4.34708 0.0846
C 5.90861 -5.52202 0.5205
C 7.14454 -5.90127 0.0046
H 8.74861 -5.41388 -1.3614
H 7.6597 -3.31053 -2.1435
H 5.45462 -2.62897 -1.2097
H 5.41481 -6.12896 1.2866
H 7.6217 -6.82044 0.3578

s07_2

Co -0.47255 -0.10141 -0.9661
N 0.48801 -0.28765 -2.5985
N -2.04726 -0.09414 -2.0359
C -0.40383 -0.72794 -3.661
C 1.75278 -0.0816 -2.7443
C -1.72504 0.01813 -3.4546
C -3.25865 -0.08277 -1.5772
C 0.09671 -0.5949 -5.0869
H -0.61973 -1.80114 -3.4575
C 2.67497 0.2317 -1.6888
H 2.197 -0.16547 -3.7513
C -2.78187 -0.45406 -4.4378
H -1.50913 1.09249 -3.6568
C -3.65094 -0.07285 -0.2022
H -4.09437 -0.07614 -2.2982
C -0.96655 -1.07231 -6.067
H 1.02669 -1.17186 -5.2267
H 0.34536 0.46686 -5.2852
C 4.01139 0.52166 -2.0356
C 2.29105 0.15773 -0.3109
C -2.27709 -0.32709 -5.869
H -3.71384 0.12343 -4.3181
H -3.02991 -1.51052 -4.2116
C -5.03683 -0.1254 0.0901
C -2.68891 0.01952 0.8533
H -1.13664 -2.15573 -5.9154

H -0.60717 -0.9598 -7.103
 C 5.00078 0.75426 -1.0939
 H 4.25641 0.55414 -3.1054
 C 3.30564 0.40231 0.6583
 O 1.10454 -0.15445 0.0885
 H -3.04235 -0.69042 -6.5745
 H -2.12563 0.74416 -6.1042
 C -5.51066 -0.1053 1.3818
 H -5.72678 -0.18469 -0.7584
 C -3.17445 0.04452 2.2105
 O -1.42589 0.06962 0.6458
 C 6.43073 1.07448 -1.5305
 C 4.60205 0.67899 0.2568
 C -6.99204 -0.16348 1.7455
 C -4.53926 -0.02094 2.4142
 C -2.17236 0.15066 3.3643
 C 6.97473 -0.06504 -2.397
 C 7.36549 1.24858 -0.3372
 C 6.43956 2.37596 -2.3378
 H 5.33654 0.83873 1.0536
 C -7.87823 -0.24444 0.5069
 C -7.26346 -1.40138 2.6061
 C 7.38093 1.09557 2.5268
 H -4.90578 -0.00406 3.4449
 C -2.86762 0.12426 4.7238
 C -1.38926 1.46601 3.2628
 C -1.19043 -1.02893 3.3355
 H 6.3725 -0.21699 -3.3077
 H 6.98121 -1.01601 -1.838
 H 8.00925 0.14996 -2.7174
 H 7.4203 0.33564 0.2792
 H 8.38623 1.47129 -0.6905
 H 7.05304 2.08286 0.3128
 H 5.81392 2.30321 -3.2427
 H 7.46504 2.62776 -2.661
 H 6.05565 3.21576 -1.7344
 H -7.75195 0.63535 -0.1465
 H -7.67051 -1.14952 -0.0887
 H -8.93917 -0.28328 0.8055
 H -7.00096 -2.32386 2.0609
 H -8.33176 -1.45817 2.8793
 H -6.68361 -1.39131 3.5433
 H -7.20287 2.00215 1.924
 H -8.45092 1.06963 2.798
 H -6.80617 1.19885 3.4616
 H -3.55971 0.97342 4.8551
 H -3.43319 -0.81018 4.885
 H -2.11219 0.19333 5.5247
 H -2.07331 2.33103 3.3055
 H -0.68467 1.55118 4.1094
 H -0.81132 1.521 2.3288
 H -0.48418 -0.94571 4.1828
 H -1.7334 -1.98698 3.4437
 H -0.5975 -1.0475 2.4061
 C 2.96033 0.32129 2.1165
 H 1.87105 0.51524 2.2439
 H 3.49659 1.12085 2.6608
 C 3.24329 -3.37793 2.7672
 C 2.76609 -2.10553 2.0885
 C 3.05641 -0.93325 4.154
 C 3.50142 -2.22896 4.8118
 H 4.34271 -3.43622 2.6629
 H 2.82133 -4.26097 2.2617
 H 1.64567 -2.06141 2.0969
 H 3.07004 -2.11971 1.0267
 H 3.58527 -0.08224 4.6206
 H 1.9666 -0.75857 4.3479
 H 4.60155 -2.30479 4.7254
 H 3.26012 -2.20873 5.8862
 N 3.34176 -0.94168 2.7335
 O -0.33331 -2.28938 -0.6365
 H 0.34388 -2.12271 0.0413
 C -1.40887 -3.01659 -0.0965
 H -1.1207 -4.05734 0.1356
 H -2.20808 -3.04117 -0.8539
 O -0.33503 1.99111 -1.1382
 O 0.01835 2.61087 -0.157
 N 2.93035 -3.41844 4.1907
 C 1.51843 -3.64185 4.4842
 H -1.81972 -2.5473 0.8156
 H 0.87469 -2.81838 4.1007
 C 0.64263 -3.95308 8.7067
 C -0.22481 -3.27912 7.8517
 C 0.07955 -3.16444 6.4963
 C 1.24917 -3.7233 5.9756
 C 2.1148 -4.39886 6.8427
 C 1.81521 -4.51042 8.197
 H 0.40868 -4.04156 9.7717
 H -1.14509 -2.8337 8.2412
 H -0.60555 -2.63184 5.8257
 H 3.04217 -4.82223 6.4436
 H 2.50493 -5.03691 8.8637
 C -0.01201 -7.25981 2.6747
 C -0.73064 -6.07094 2.5905
 C -0.21891 -4.90398 3.1582
 C 1.00814 -4.91001 3.8236
 C 1.72356 -6.10985 3.9022
 C 1.21969 -7.2733 3.3303
 H -0.40845 -8.17669 2.2288
 H -1.69808 -6.04804 2.0789
 H -0.78168 -3.96566 3.0873
 H 2.69616 -6.11619 4.4044
 H 1.79314 -8.2029 3.3961
 C -7.38292 1.29995 2.3174
 H -5.02102 -0.01544 3.2627
 C -2.99863 -0.05275 4.5758
 C -1.38783 1.15846 3.1519
 C -1.40418 -1.34672 3.2039
 H 5.87226 2.04033 -3.4545
 H 6.46398 0.35798 -3.3308
 H 7.57955 1.72015 -3.08
 H 7.18123 -0.57439 -1.0709
 H 8.3027 0.80748 -0.9177
 H 7.14177 0.45274 0.3824
 H 5.69966 3.48574 -1.3799
 H 7.43564 3.18124 -1.088
 H 6.24595 2.87684 0.2007
 H -7.7481 0.90101 -0.3644
 H -7.80478 -0.88548 -0.3304
 H -9.01808 0.06471 0.5556
 H -7.27307 -2.13402 1.8171
 H -8.54176 -1.17176 3.2626
 H -6.90426 -1.24663 3.3153
 H -7.12222 2.19516 1.728
 H -8.45597 1.35777 2.571
 H -6.81757 1.34708 3.2624
 H -3.61873 0.85258 4.695
 H -3.64304 -0.93547 4.7294
 H -2.25289 -0.04665 5.3888
 H -1.9991 2.07699 3.2208
 H -0.68039 1.15901 4.0027
 H -0.80116 1.19319 2.2198
 H -0.72116 -1.34555 4.072
 H -2.02558 -2.25793 3.2685
 H -0.7924 -1.39203 2.2905
 C 2.71382 0.36279 2.0528
 H 3.14087 -0.52299 2.5637
 H 1.6078 0.23318 2.09
 C 3.14706 2.62248 5.0043
 C 2.80858 1.37779 4.2029
 C 2.52718 2.75216 2.2531
 C 2.90482 3.96409 3.0852
 H 4.24191 2.77724 4.9733
 H 2.87067 2.47132 6.0599
 H 1.72741 1.12147 4.3436
 H 3.37552 0.51616 4.6004
 H 2.87026 2.89639 1.214
 H 1.4155 2.65211 2.1929
 H 4.00309 4.09117 3.0493
 H 2.45963 4.87389 2.6528
 N 3.12436 1.54033 2.7958
 O -0.44974 -2.4938 -0.8579
 H 0.20884 -2.36544 -0.1539
 C -1.56692 -3.20472 -0.3845
 H -1.3265 -4.26732 -0.2045
 H -2.34394 -3.16085 -1.1638
 O -0.38033 1.7635 -1.15
 O -0.0868 2.3353 -0.1163
 N 2.52014 3.83274 4.486
 C 1.07851 3.91379 4.7077
 H -1.98354 -2.76929 0.5403
 H 0.5329 3.0833 4.2066
 C -0.60773 7.54573 3.0784
 C 0.47316 7.60914 3.9591
 C 1.02254 6.44233 4.4792
 C 0.50354 5.19221 4.1252
 C -0.57212 5.13769 3.2373
 C -1.12814 6.30678 2.7178
 H -1.04001 8.46463 2.6713
 H 0.89059 8.57998 4.2431
 H 1.87612 6.49259 5.1625
 H -0.97364 4.16169 2.9401
 H -1.96956 6.24453 2.0215
 C -0.09561 3.72881 8.8634
 C 1.09976 4.35346 8.5097
 C 1.49978 4.40303 7.1772
 C 0.71217 3.82442 6.1764
 C -0.48283 3.19857 6.5413
 C -0.88698 3.15103 7.8737
 H -0.40771 3.69019 9.9112

s07_3

Co -0.53056 -0.30454 -1.085
 N 0.45399 -0.44095 -2.7078
 N -2.0867 -0.21699 -2.1783
 C -0.42567 -0.84819 -3.7918
 C 1.71927 -0.21735 -2.8275
 C -1.73861 -0.085 -3.5898
 C -3.30126 -0.13883 -1.7349
 C 0.09803 -0.69224 -5.2069
 H -0.66094 -1.92217 -3.6166
 C 2.60793 0.11424 -1.7505
 H 2.18155 -0.27316 -3.8283
 C -2.7876 -0.52481 -4.5964
 H -1.50232 0.98937 -3.7683
 C -3.71353 -0.12658 -0.3656
 H -4.1243 -0.0662 -2.467
 H -0.95644 -1.13761 -6.2113
 H 1.0238 -1.27681 -5.3434
 H 0.36141 0.37024 -5.3807
 C 3.92145 0.53245 -2.0688
 C 2.19789 -0.0028 -0.3864
 C -2.26068 -0.37995 -6.0179
 H -3.71359 0.06286 -4.4805
 H -3.05285 -1.5814 -4.3908
 C -5.10402 -0.07231 -0.0953
 C -2.76626 -0.13876 0.7074
 H -1.14187 -2.22154 -6.0832
 H -0.58091 -1.00966 -7.2398
 C 4.84102 0.88516 -1.0987
 H 4.18559 0.58325 -3.1306
 C 3.14101 0.38074 0.6123
 O 1.03764 -0.44119 -0.0219
 H -3.02026 -0.72124 -6.7404
 H -2.09284 0.69329 -6.2321
 C -5.5964 -0.0362 1.1888
 H -5.78194 -0.05905 -0.9554
 C -3.27052 -0.09441 2.0571
 O -1.50017 -0.19803 0.5214
 C 6.25411 1.37436 -1.4029
 C 4.40344 0.8019 0.243
 C -7.08362 0.02166 1.5282
 C -4.63925 -0.04816 2.238
 C -2.28168 -0.08724 3.2277
 C 6.54962 1.36976 -2.899
 C 7.27367 0.46457 -0.7115
 C 6.41636 2.80758 -0.8862
 H 5.07063 1.11268 1.0571
 C -7.9524 0.02522 0.2745
 C -7.46825 -1.19924 2.3695

H 1.72916 4.80598 9.2821
 H 2.44516 4.88008 6.8984
 H -1.1088 2.7471 5.7619
 H -1.82587 2.65583 8.1395

s07_4

Co -0.57871 0.11182 -0.8609
 N 0.39707 0.17415 -2.5008
 N -2.13024 0.36121 -1.9316
 C -0.4961 0.00594 -3.6391
 C 1.67059 0.34711 -2.6094
 C -1.78291 0.75776 -3.2902
 C -3.34756 0.22151 -1.5161
 C 0.03526 0.40907 -5.0021
 H -0.76694 -1.07331 -3.6662
 C 2.60557 0.41739 -1.5227
 H 2.11234 0.4391 -3.6165
 C -2.84369 0.5652 -4.3589
 H -1.51148 1.8379 -3.2546
 C -3.76247 -0.07123 -0.1805
 H -4.16909 0.33873 -2.2433
 C -1.03397 0.21148 -6.068
 H 0.93521 -0.17583 -5.2573
 H 0.34351 1.47337 -4.9686
 C 3.95099 0.73041 -1.8294
 C 2.21589 0.11857 -0.1799
 C -2.30526 0.97099 -5.7243
 H -3.74669 1.15248 -4.1214
 H -3.149 -0.50023 -4.3729
 C -5.14428 -0.29964 0.036
 C -2.83257 -0.09353 0.9082
 H -1.2654 -0.86792 -6.1521
 H -0.64921 0.52068 -7.0537
 C 4.94638 0.76334 -0.8698
 H 4.18819 0.93672 -2.8795
 C 3.23088 0.21146 0.8231
 O 1.01677 -0.23148 0.1554
 H -3.07497 0.8131 -6.4976
 H -2.09118 2.05725 -5.7204
 C -5.65163 -0.56349 1.2867
 H -5.80087 -0.26271 -0.8397
 C -3.36576 -0.31922 2.2307
 O -1.56907 0.07555 0.7519
 C 6.41498 1.01586 -1.2117
 C 4.53758 0.48441 0.4543
 C -7.12653 -0.8347 1.5702
 C -4.72107 -0.55705 2.3576
 C -2.44091 -0.23089 3.447
 C 7.08779 -0.33197 -1.4932
 C 7.14859 1.69984 -0.0557
 C 6.55476 1.90608 -2.4463
 H 5.28556 0.49863 1.2558
 C -7.9656 -0.79618 0.2971
 C -7.28228 -2.22163 2.2014
 C -7.67143 0.22675 2.5311
 H -5.1139 -0.74576 3.3609
 C -3.161 -0.584 4.7469
 C -1.95723 1.2206 3.5692
 C -1.24927 -1.19161 3.3223
 H 6.60974 -0.84186 -2.3468
 H 7.01151 -1.00156 -0.6196
 H 8.15875 -0.19789 -1.728
 H 7.23271 1.05183 0.8314
 H 8.17785 1.95451 -0.3603
 H 6.64557 2.63238 0.2542
 H 6.14869 1.43328 -3.3553
 H 7.61982 2.11307 -2.6449
 H 6.04111 2.87389 -2.3083
 H -7.92251 0.19099 -0.1934
 H -7.6412 -1.55822 -0.4317
 H -9.02291 -0.99831 0.537
 H -6.90882 -3.00646 1.5219
 H -8.34419 -2.4335 2.4173
 H -6.72832 -2.31052 3.1502
 H -7.57646 1.23589 2.0959
 H -8.73933 0.04543 2.7454

H -7.13731 0.22826 3.4952
 H -4.00475 0.09371 4.9599
 H -3.54143 -1.62023 4.7429
 H -2.4552 -0.49494 5.5896
 H -2.79887 1.88322 3.8339
 H -1.18945 1.30989 4.3592
 H -1.52561 1.58593 2.6258
 H -0.60174 -1.1013 4.2125
 H -1.60335 -2.23772 3.2777
 H -0.64043 -0.98718 2.4297
 C 2.83351 0.20459 2.2805
 H 3.66427 -0.18233 2.8982
 H 1.96141 -0.45135 2.4366
 C 1.05048 3.52444 2.5107
 C 1.34484 2.10517 2.0791
 C 3.64427 2.41575 2.8946
 C 3.24455 3.83198 3.2749
 H 0.7319 3.55151 3.5688
 H 0.21253 3.918 1.9107
 H 1.48401 2.11576 0.9762
 H 0.47395 1.44808 2.2472
 H 4.32261 2.00058 3.6653
 H 4.25195 2.46908 1.9603
 H 2.82581 3.84178 4.2972
 H 4.13926 4.47569 3.2855
 N 2.49442 1.53957 2.7677
 O -0.5325 -2.11687 -0.8968
 H 0.22024 -2.02834 -0.2856
 C -1.54625 -2.89606 -0.3094
 H -1.76788 -2.58465 0.7261
 H -1.2866 -3.96978 -0.3125
 O -0.35485 2.20332 -0.675
 O -1.21703 2.82806 -0.0938
 N 2.22873 4.38436 2.3833
 C 2.69314 4.52439 1.0046
 H -2.46339 -2.76618 -0.9041
 H 2.97757 3.54405 0.562
 C 6.22491 6.9809 0.6082
 C 6.1228 5.77264 -0.0762
 C 4.98461 4.98209 0.0749
 C 3.93682 5.38477 0.9059
 C 4.04758 6.59965 1.5887
 C 5.18369 7.39013 1.4421
 H 7.11717 7.60391 0.4964
 H 6.93601 5.43612 -0.7281
 H 4.90051 4.02542 -0.4584
 H 3.23502 6.91049 2.2535
 H 5.26022 8.33682 1.9856
 C -0.25842 6.14276 -1.7028
 C -0.17472 6.62994 -0.3985
 C 0.76393 6.10848 0.487
 C 1.62532 5.08327 0.0852
 C 1.53087 4.5974 -1.221
 C 0.59935 5.12525 -2.1124
 H -0.99623 6.55545 -2.3973
 H -0.84995 7.42507 -0.0681
 H 0.82385 6.478 1.5161
 H 2.19217 3.77888 -1.5349
 H 0.53838 4.73183 -3.1323

s07_5

Co -0.46293 -0.31018 -0.9034
 N 0.5477 -0.40632 -2.5129
 N -1.99952 -0.44102 -2.023
 C -0.25385 -0.98676 -3.5777
 C 1.76026 0.00831 -2.6516
 C -1.6531 -0.38777 -3.4413
 C -3.22345 -0.35764 -1.6086
 C 0.26779 -0.86355 -4.9965
 H -0.35125 -2.06731 -3.3302
 C 2.62122 0.43421 -1.5849
 H 2.21592 0.00611 -3.6569
 C -2.62145 -1.04872 -4.408
 H -1.55822 0.68926 -3.7131
 C -3.66399 -0.19446 -0.2603
 H -4.03291 -0.38412 -2.3587

C -0.70105 -1.52652 -5.967
 H 1.26735 -1.32286 -5.0832
 H 0.38388 0.2089 -5.2513
 C 3.90431 0.91386 -1.9226
 C 2.26196 0.23255 -0.212
 C -2.10153 -0.94778 -5.8361
 H -3.62112 -0.58801 -4.3439
 H -2.74071 -2.11077 -4.1148
 C -5.06156 -0.09912 -0.0428
 C -2.74211 -0.07702 0.8301
 H -0.73413 -2.61277 -5.7562
 H -0.33378 -1.42531 -7.0016
 C 4.87638 1.19362 -0.9764
 H 4.12307 1.05005 -2.9898
 C 3.28324 0.46074 0.7551
 O 1.10782 -0.19961 0.1732
 H -2.79624 -1.45047 -6.5291
 H -2.08389 0.11748 -6.1377
 C -5.59118 0.12331 1.2061
 H -5.71202 -0.20173 -0.9179
 C -3.2888 0.18404 2.1394
 O -1.47321 -0.19878 0.6882
 C 6.24221 1.73663 -1.3969
 C 4.52776 0.92532 0.363
 C -7.08648 0.23612 1.4903
 C -4.66201 0.26719 2.2689
 C -2.34814 0.36492 3.3336
 C 6.91142 0.76368 -2.3719
 C 7.17322 1.92414 -0.2027
 C 6.06117 3.09594 -2.0789
 H 5.26879 1.06246 1.1578
 C -7.91979 0.04815 0.2267
 C -7.50192 -0.84024 2.4979
 C -7.39946 1.62111 2.0651
 H -5.0715 0.46557 3.2635
 C -3.11371 0.67775 4.6173
 C -1.36782 1.51798 3.0798
 C -1.55377 -0.9243 3.569
 H 6.31599 0.61955 -3.2884
 H 7.05295 -0.22588 -1.9055
 H 7.90239 1.14159 -2.679
 H 7.36633 0.97379 0.3226
 H 8.14567 2.3166 -0.5443
 H 6.76631 2.6433 0.5277
 H 5.42828 3.02325 -2.9788
 H 7.03672 3.50995 -2.3895
 H 5.58525 3.81884 -1.3951
 H -7.69283 0.81524 -0.5329
 H -7.75902 -0.94456 -0.227
 H -8.9928 0.1311 0.4676
 H -7.2956 -1.84909 2.102
 H -8.58231 -0.77267 2.7155
 H -6.96581 -0.74163 3.4559
 H -7.11702 2.41453 1.3527
 H -8.47871 1.71933 2.2767
 H -6.85985 1.81184 3.007
 H -3.69353 1.61313 4.5371
 H -3.80508 -0.13394 4.9023
 H -2.4002 0.80538 5.4481
 H -1.90973 2.45592 2.8671
 H -0.74606 1.68457 3.9775
 H -0.6995 1.30215 2.2337
 H -0.91966 -0.82326 4.4696
 H -2.23082 -1.78527 3.7273
 H -0.89567 -1.1449 2.7131
 C 3.04412 0.08899 2.1906
 H 1.95375 0.12463 2.3988
 H 3.51789 0.84155 2.8476
 C 1.86198 -2.86183 2.1646
 C 3.21727 -2.32567 1.7291
 C 3.6271 -1.54632 3.9181
 C 2.28912 -2.10628 4.3787
 H 1.59684 -3.73309 1.5403
 H 1.07428 -2.08232 1.9962
 H 3.20114 -2.05743 0.6591
 H 3.9573 -3.14178 1.8439
 H 4.40186 -2.3158 4.1047

H 3.89119 -0.66293 4.5249
 H 2.36676 -2.40871 5.4356
 H 1.50304 -1.31333 4.3322
 N 3.666 -1.19443 2.514
 O -0.15759 -2.47286 -0.5626
 H 0.54621 -2.27147 0.0766
 C -1.16715 -3.22505 0.07
 H -1.52085 -2.74854 1.003
 H -0.82822 -4.25242 0.3
 O -0.56453 1.78195 -1.1274
 O -0.35097 2.46816 -0.1494
 N 1.90032 -3.25578 3.5673
 C 0.64226 -3.83911 4.0136
 H -2.01976 -3.28813 -0.6241
 H -0.17886 -3.09512 3.8914
 C 0.66978 -4.96098 8.1857
 C 1.69789 -5.38132 7.3406
 C 1.69698 -5.01337 5.9995
 C 0.67266 -4.21246 5.4833
 C -0.34894 -3.7923 6.336
 C -0.35407 -4.16586 7.6799
 H 0.67064 -5.25288 9.24
 H 2.50769 -6.0038 7.733
 H 2.50678 -5.33548 5.3368
 H -1.15068 -3.15842 5.9393
 H -1.16187 -3.8273 8.3354
 C -0.59698 -7.36177 1.8351
 C 0.76113 -7.10097 2.0123
 C 1.17519 -5.96421 2.7023
 C 0.23681 -5.06275 3.2142
 C -1.12191 -5.33366 3.0322
 C -1.53939 -6.47549 2.3525
 H -0.92004 -8.25638 1.2947
 H 1.50747 -7.79198 1.6088
 H 2.24173 -5.75286 2.835
 H -1.8642 -4.63279 3.4339
 H -2.60788 -6.67133 2.2218

s07_6

Co -0.41949 -0.11389 -0.9481
 N 0.52807 -0.21807 -2.6008
 N -1.98038 0.11087 -2.018
 C -0.39117 -0.49512 -3.6949
 C 1.80869 -0.15849 -2.7387
 C -1.64266 0.33889 -3.4201
 C -3.17959 0.2572 -1.5566
 C 0.12614 -0.28097 -5.1054
 H -0.69849 -1.56024 -3.5879
 C 2.75455 0.03861 -1.6814
 H 2.24113 -0.2492 -3.7498
 C -2.73184 0.0497 -4.4387
 H -1.3376 1.40617 -3.5193
 C -3.60089 0.11453 -0.1976
 H -3.98938 0.49458 -2.2675
 C -0.96945 -0.57384 -6.1215
 H 1.00146 -0.92319 -5.3008
 H 0.46914 0.76789 -5.2081
 C 4.09925 0.27147 -2.0394
 C 2.36263 0.00638 -0.303
 C -2.21116 0.26156 -5.8538
 H -3.61219 0.69098 -4.2665
 H -3.06964 -0.99788 -4.3068
 C -4.98335 0.23245 0.057
 C -2.66953 -0.16631 0.8629
 H -1.23393 -1.64761 -6.0683
 H -0.59574 -0.39996 -7.1439
 C 5.08937 0.53413 -1.1075
 H 4.34416 0.2539 -3.1096
 C 3.37167 0.33105 0.6481
 O 1.16926 -0.29109 0.0973
 H -3.00168 0.03166 -6.5869
 H -1.96591 1.33243 -5.9912
 C -5.51817 0.03951 1.3147
 H -5.63445 0.48388 -0.7901
 C -3.22695 -0.44936 2.1599
 O -1.40161 -0.17658 0.672

C 6.5328 0.77625 -1.5483
 C 4.67106 0.58014 0.2371
 C -7.01358 0.23132 1.5708
 C -4.60127 -0.32586 2.3231
 C -2.40586 -0.96151 3.3613
 C 7.06797 -0.4761 -2.2487
 C 7.44503 1.08628 -0.3652
 C 6.58849 1.96275 -2.5148
 H 5.38126 0.85706 1.0234
 C -7.36967 1.70696 1.362
 C -7.82855 -0.63112 0.6033
 C -7.40887 -0.15528 2.9931
 H -5.00258 -0.53919 3.3167
 C -2.84077 -0.25693 4.6546
 C -0.8903 -0.77383 3.2462
 C -2.6804 -2.46329 3.5151
 H 6.47377 -0.73447 -3.1409
 H 7.04619 -1.34576 -1.5704
 H 8.11165 -0.32414 -2.5761
 H 7.47475 0.25634 0.3605
 H 8.47608 1.25063 -0.7207
 H 7.1304 1.99783 0.1698
 H 5.98826 1.78638 -3.4224
 H 7.62729 2.15291 -2.8372
 H 6.20677 2.87947 -2.0346
 H -6.80074 2.35001 2.055
 H -7.14155 2.04102 0.3358
 H -8.44584 1.88015 1.5395
 H -7.64036 -0.36794 -0.4503
 H -8.90967 -0.50047 0.7846
 H -7.58853 -1.70045 0.7297
 H -6.89933 0.46684 3.7477
 H -8.49362 -0.01261 3.1311
 H -7.18391 -1.21337 3.2102
 H -2.7448 0.8393 4.569
 H -3.88012 -0.47951 4.9434
 H -2.20215 -0.58392 5.4925
 H -0.44852 -1.34686 2.4194
 H -0.6162 0.27912 3.0754
 H -0.42003 -1.1018 4.1909
 H -3.75287 -2.6705 3.6682
 H -2.35698 -3.02028 2.619
 H -2.12776 -2.87139 4.3799
 C 3.00462 0.56102 2.0869
 H 3.70675 0.01697 2.7471
 H 1.99576 0.13906 2.275
 C 1.51721 2.28684 4.2787
 C 2.96746 2.28592 3.8213
 C 2.28456 2.8633 1.6321
 C 0.82437 2.83267 2.0477
 H 1.46181 2.60713 5.3337
 H 1.10461 1.24937 4.2472
 H 3.55316 1.56977 4.4243
 H 3.39006 3.29358 4.0063
 H 2.66052 3.89618 1.7652
 H 2.37729 2.61907 0.5603
 H 0.26315 3.56046 1.4398
 H 0.38138 1.83201 1.8204
 N 3.12985 1.97838 2.4152
 O -0.34051 -2.31967 -0.8661
 H 0.27425 -2.25019 -0.1166
 C -1.48155 -3.06286 -0.5179
 H -1.25618 -4.14022 -0.4289
 H -2.22073 -2.93559 -1.3246
 O -0.16032 1.93681 -0.8729
 O -1.13211 2.63452 -0.6412
 N 0.71223 3.1816 3.4592
 C -0.64362 3.28696 3.9837
 H -1.94304 -2.71313 0.4221
 H -1.03253 2.26558 4.219
 C -3.38004 4.93882 1.077
 C -2.42441 5.75734 1.6816
 C -1.55284 5.23499 2.632
 C -1.61406 3.88235 2.9831
 C -2.57091 3.07249 2.3709
 C -3.45369 3.59379 1.4256
 H -4.066 5.35426 0.3326

H -2.36224 6.81604 1.4118
 H -0.80732 5.8803 3.1093
 H -2.61675 2.0065 2.6187
 H -4.18518 2.92993 0.9514
 C -0.87644 5.59885 7.6298
 C -1.84222 4.63725 7.3351
 C -1.74279 3.88401 6.1689
 C -0.68284 4.07859 5.2788
 C 0.28121 5.04317 5.5823
 C 0.18532 5.79739 6.7501
 H -0.95067 6.19031 8.5472
 H -2.67858 4.4717 8.021
 H -2.50465 3.13082 5.933
 H 1.11494 5.18163 4.8856
 H 0.94969 6.54737 6.9762

s07_7

Co -0.532 -0.16345 -1.05569
 N 0.44001 -0.29526 -2.69461
 N -2.08335 -0.00148 -2.14621
 C -0.45704 -0.61272 -3.7952
 C 1.7062 -0.08625 -2.82321
 C -1.7359 0.1938 -3.5484
 C -3.30061 -0.0634 -1.71246
 C 0.07154 -0.40632 -5.20189
 H -0.73629 -1.68229 -3.67008
 C 2.61797 0.15623 -1.74165
 H 2.1532 -0.09407 -3.83228
 C -2.80302 -0.13619 -4.57676
 H -1.45199 1.26507 -3.66449
 C -3.71536 -0.1419 -0.3464
 H -4.1241 -0.03825 -2.44667
 C -1.0034 -0.74621 -6.22526
 H 0.96912 -1.02499 -5.37276
 H 0.38314 0.65069 -5.32093
 C 3.93707 0.55288 -2.0486
 C 2.22927 -0.05459 -0.3836
 C -2.26745 0.06515 -5.98806
 H -3.69919 0.48833 -4.42288
 H -3.11917 -1.18936 -4.43749
 C -5.10403 -0.2627 -0.09092
 C -2.77762 -0.04184 0.73133
 H -1.24298 -1.8247 -6.15359
 H -0.62174 -0.58328 -7.24658
 C 4.89192 0.78579 -1.07262
 H 4.18963 0.68497 -3.10879
 C 3.21175 0.17669 0.61696
 O 1.0506 -0.46353 -0.02533
 H -3.04233 -0.1949 -6.72787
 H -2.04457 1.13889 -6.14042
 C -5.61013 -0.28452 1.18782
 H -5.76833 -0.33834 -0.95844
 C -3.30585 0.0016 2.07291
 O -1.50831 0.00862 0.55201
 C 6.30153 1.23704 -1.45725
 C 4.48631 0.58535 0.26388
 C -7.09365 -0.43253 1.51483
 C -4.67056 -0.13596 2.24102
 C -2.35944 0.24631 3.2523
 C 6.94896 0.18764 -2.36546
 C 7.19465 1.4209 -0.23401
 C 6.22762 2.57497 -2.19884
 H 5.17805 0.75295 1.09538
 C -7.94034 -0.57914 0.25467
 C -7.30741 -1.67922 2.3789
 C -7.58244 0.80455 2.27474
 H -5.06518 -0.12057 3.26115
 C -3.10533 0.26123 4.58528
 C -1.69802 1.61998 3.07956
 C -1.28419 -0.84517 3.34107
 H 6.37732 0.0364 -3.29595
 H 7.01776 -0.78709 -1.8535
 H 7.9701 0.49644 -2.65055
 H 7.30958 0.48418 0.33648
 H 8.20132 1.74199 -0.55047
 H 6.80209 2.1908 0.45086

H 5.63097 2.5018 -3.1231 C 1.83912 0.04164 -2.72729 H 2.11904 0.79501 2.2566
 H 7.23771 2.92073 -2.48112 C -1.66718 -0.25908 -3.32775 H 3.81574 1.1853 2.64179
 H 5.76593 3.35068 -1.56488 C -3.11368 -0.42463 -1.39768 H 2.97339 -3.24583 2.68574
 H -7.85929 0.3051 -0.39996 C 0.16 -0.58233 -5.03098 H 2.71611 -1.92233 2.00643
 H -7.6539 -1.46919 -0.33096 H -0.31629 -1.90011 -3.40335 C 3.0292 -0.82436 4.08806
 H -9.00335 -0.69085 0.52638 C 2.77595 0.39161 -1.7 C 3.25434 -2.16173 4.75882
 H -6.9724 -2.58667 1.84841 H 2.25549 0.00196 -3.74867 H 4.06388 -3.48477 2.63977
 H -8.37652 -1.80268 2.62579 C -2.67932 -0.88076 -4.27544 H 2.44413 -4.04379 2.13925
 H -6.75327 -1.62535 3.33014 H -1.6203 0.83678 -3.52648 H 1.61103 -1.74424 1.98905
 H -7.4463 1.71631 1.66891 C -3.46393 -0.41294 -0.01272 H 3.06651 -1.97242 0.96028
 H -8.65552 0.71238 2.51802 H -3.97217 -0.41741 -2.09172 H 3.62071 -0.04684 4.60424
 H -7.04073 0.951 3.22334 C -0.8568 -1.20166 -5.98068 H 1.95215 -0.54591 4.21112
 H -3.86254 1.06255 4.63265 H 1.15727 -1.01651 -5.21441 H 4.34791 -2.39414 4.77664
 H -3.60434 -0.69995 4.79789 H 0.24531 0.50651 -5.21947 H 2.91838 -2.09631 5.8059
 H -2.3875 0.44476 5.40364 C 4.09523 0.71407 -2.08665 N 3.39649 -0.84317 2.68829
 H -2.46222 2.41087 2.98615 C 2.43407 0.312 -0.31142 O 0.1928 -2.41216 -0.60451
 H -1.07828 1.86241 3.96141 C -2.25671 -0.66751 -5.72296 H 0.71931 -2.19312 0.18172
 H -1.05166 1.65138 2.18938 H -3.68386 -0.45572 -4.11434 C -0.82258 -3.32545 -0.26759
 H -0.64176 -0.66849 4.22391 H -2.75217 -1.96387 -4.05068 H -0.41191 -4.32326 -0.03097
 H -1.7473 -1.84062 3.46634 C -4.8433 -0.41362 0.31558 H -1.4836 -3.42598 -1.14321
 H -0.64331 -0.85975 2.44577 C -2.47021 -0.38185 1.01784 O -0.56739 1.84812 -0.94923
 C 2.80636 -0.05714 2.04684 H -0.85528 -2.30016 -5.84288 O -0.57269 2.43786 0.10854
 H 2.78557 -1.14778 2.24506 H -0.55835 -1.02324 -7.02684 N 2.51858 -3.20364 4.0643
 H 1.73767 0.23345 2.14297 C 5.10969 0.95787 -1.17709 C 2.57534 -4.50731 4.7028
 C 2.08916 2.14065 4.11868 H 4.30476 0.75644 -3.16357 H -1.43642 -2.97986 0.58428
 C 3.32445 1.98193 3.2478 C 3.48155 0.55649 0.62868 H 3.6112 -4.92681 4.62512
 C 3.79761 -0.0882 4.28589 O 1.26702 -0.00217 0.12818 C -0.15167 -7.39679 2.99818
 C 2.56461 0.04135 5.16162 H -2.98466 -1.13787 -6.40443 C -0.455 -6.0373 2.94149
 H 1.1931 1.7606 3.57338 H -2.27989 0.41626 -5.94849 C 0.43231 -5.09643 3.45834
 H 1.90255 3.21129 4.30133 C -5.28172 -0.38831 1.61881 C 1.6354 -5.50229 4.04502
 H 4.18029 2.48101 3.74155 H -5.55641 -0.43146 -0.51554 C 1.93265 -6.86583 4.09373
 H 3.16489 2.48637 2.27876 C -2.91981 -0.36729 2.38801 C 1.04818 -7.8083 3.57467
 H 4.0309 -1.15321 4.11674 O -1.2128 -0.38145 0.77194 H -0.84933 -8.13513 2.59221
 H 4.65685 0.35076 4.82893 C 6.5186 1.30974 -1.65626 H -1.39651 -5.70312 2.493
 H 1.7035 -0.4895 4.6826 C 4.75753 0.85989 0.18685 H 0.20591 -4.02624 3.40483
 H 2.74394 -0.46269 6.12525 C -6.75405 -0.37853 2.02116 H 2.87246 -7.19204 4.55508
 N 3.67297 0.59023 3.01271 C -4.28054 -0.36685 2.62569 H 1.29802 -8.87246 3.62109
 O -0.55539 -2.38134 -0.90182 C -1.88752 -0.36045 3.51968 C 1.61385 -4.33528 8.91193
 H 0.26132 -2.25526 -0.38558 C 7.05603 0.19115 -2.55361 C 0.70532 -3.8627 7.96348
 H -1.52507 -3.02236 -0.10736 C 7.48879 1.48804 -0.49213 C 1.01459 -3.91692 6.60905
 H -1.5884 -2.58746 0.90492 C 6.47699 2.62024 -2.44772 C 2.2426 -4.43464 6.18069
 H -1.32662 -4.1056 -0.02186 H 5.51755 1.0262 0.95776 C 3.14568 -4.90209 7.1354
 O -0.23996 1.90521 -1.04796 C -7.67465 -0.4073 0.80538 C 2.83428 -4.85679 8.49466
 C 0.21889 2.39348 -0.03415 C -7.06276 -1.60869 2.88012 H 1.36741 -4.29541 9.97698
 N 2.23823 1.44268 5.39392 C -7.06092 0.89181 2.82019 H -0.25614 -3.45079 8.28447
 C 1.04083 1.58854 6.21035 H -4.61941 -0.34601 3.66568 H 0.29907 -3.54841 5.86607
 H -2.5053 -2.89124 -0.59104 C -2.55083 -0.28606 4.89297 H 4.11177 -5.30356 6.80829
 H 0.1577 1.19951 5.64241 C -0.94743 0.84668 3.39076 H 3.55397 -5.22774 9.23046
 C 0.11516 5.65604 7.33643 C -1.06968 -1.65749 3.47256
 C -0.90363 4.74201 7.07904 H 6.429 0.03954 -3.44752
 C -0.59161 3.44117 6.69042 H 7.09677 -0.76643 -2.00754
 C 0.73757 3.03349 6.55639 H 8.07615 0.42907 -2.90288
 C 1.75435 3.95794 6.81617 H 7.58122 0.56931 0.11124
 C 1.44489 5.25962 7.20089 H 8.49296 1.7342 -0.87603
 H -0.12633 6.67955 7.63772 H 7.1827 2.30889 0.17786
 H -1.95054 5.04407 7.17686 H 5.82281 2.54564 -3.33205
 H -1.39461 2.72203 6.48679 H 7.48632 2.89502 -2.80172
 H 2.79702 3.64662 6.69251 H 6.0978 3.44576 -1.82199
 H 2.25073 5.97411 7.39471 H -7.52503 0.47197 0.15613
 C 1.17936 -0.66788 9.89386 H -7.5234 -1.31514 0.19698
 C 2.20569 0.22443 9.58004 H -8.72831 -0.40065 1.13107
 C 2.16734 0.94706 8.3926 H -6.85919 -2.5383 2.32206
 C 1.10745 0.78353 7.49407 H -8.1252 -1.61602 3.18063
 C 0.08837 -0.11453 7.81386 H -6.45937 -1.63418 3.80206
 C 0.11981 -0.835 9.00782 H -6.85542 1.79313 2.21835
 H 1.20913 -1.23323 10.82991 H -8.12334 0.91517 3.12003
 H 3.04343 0.35868 10.27097 H -6.45683 0.96042 3.73952
 H 2.97523 1.64298 8.14461 H -3.13693 0.64033 5.02046
 H -0.74187 -0.25509 7.11139 H -3.21559 -1.14557 5.08561
 H -0.68788 -1.53475 9.242 H -1.77376 -0.29403 5.67534
 H -1.52233 1.78906 3.36823
 H -0.27076 0.88706 4.26355
 H -0.33541 0.79359 2.47775
 H -0.28776 -1.6593 4.25551
 H -1.72022 -2.53733 3.63388
 H -0.55852 -1.76706 2.50349
 C 3.17268 0.4715 2.09446

s07_8
 Co -0.31583 -0.26333 -0.88104
 N 0.59686 -0.25934 -2.54893
 N -1.91829 -0.42749 -1.8984
 C -0.2639 -0.8029 -3.59063

s07_9
 Co -0.50216 -0.12126 -0.99824
 N 0.4452 -0.30443 -2.64545
 N -2.07178 -0.04168 -2.07123
 C -0.45969 -0.6786 -3.72158
 C 1.70003 -0.05716 -2.80465
 C -1.7518 0.10747 -3.48524
 C -3.28215 -0.09163 -1.61583
 C 0.04489 -0.51216 -5.14211
 H -0.71307 -1.74872 -3.55383
 C 2.63364 0.22033 -1.75045
 H 2.12487 -0.07228 -3.82307
 C -2.8263 -0.28718 -4.48287
 H -1.49729 1.18029 -3.64885
 C -3.67653 -0.11035 -0.24344
 H -4.11571 -0.10434 -2.33862
 C -1.03619 -0.91584 -6.13556
 H 0.95491 -1.11515 -5.30322
 H 0.32847 0.54689 -5.30502
 C 3.93487 0.62731 -2.10822
 C 2.29005 0.00882 -0.37624
 C -2.31646 -0.12717 -5.90899
 H -3.73448 0.32204 -4.3392
 H -3.11509 -1.34114 -4.29813
 C -5.06025 -0.23652 0.03825
 C -2.72459 0.05009 0.81352
 H -1.24771 -1.99639 -6.02028

| | | | | | | | | |
|------------|----------|----------|--------------|----------|----------|--------------|----------|----------|
| H -0.67351 | -0.78193 | -7.16792 | N 1.55081 | 2.97849 | 4.55296 | C -7.37667 | 1.35776 | 2.35111 |
| C 4.93254 | 0.85851 | -1.1745 | C 1.35383 | 4.12785 | 5.42758 | H -4.93296 | 0.22125 | 3.30077 |
| H 4.14193 | 0.7655 | -3.17747 | H -2.42435 | -2.818 | -0.32845 | C -2.91752 | 0.35706 | 4.59815 |
| C 3.33241 | 0.18811 | 0.57567 | H 2.33544 | 4.64266 | 5.58771 | C -1.41136 | 1.64409 | 3.12007 |
| O 1.1113 | -0.35695 | 0.01709 | C -0.21094 | 3.05493 | 9.31198 | C -1.22839 | -0.84965 | 3.2616 |
| H -3.09538 | -0.43412 | -6.6262 | C -0.4383 | 2.22103 | 8.21925 | H 6.11921 | 1.79552 | -3.52555 |
| H -2.12295 | 0.94513 | -6.10527 | C 0.08373 | 2.54378 | 6.96836 | H 6.47644 | 0.04397 | -3.52452 |
| C -5.54701 | -0.20446 | 1.32393 | C 0.84044 | 3.70596 | 6.79242 | H 7.77863 | 1.22166 | -3.24678 |
| H -5.73597 | -0.36228 | -0.8145 | C 1.06645 | 4.53364 | 7.89506 | H 7.10631 | -1.12545 | -1.35962 |
| C -3.23588 | 0.16467 | 2.15795 | C 0.54577 | 4.21383 | 9.14593 | H 8.43297 | 0.05659 | -1.17335 |
| O -1.45762 | 0.09414 | 0.61515 | H -0.62003 | 2.80055 | 10.29416 | H 7.27604 | -0.20377 | 0.15324 |
| C 6.31691 | 1.3346 | -1.61424 | H -1.02794 | 1.30676 | 8.34017 | H 6.25472 | 3.12326 | -1.3615 |
| C 4.5859 | 0.61918 | 0.16971 | H -0.08221 | 1.88927 | 6.1047 | H 7.93374 | 2.54264 | -1.17533 |
| C -7.02286 | -0.35932 | 1.68039 | H 1.6551 | 5.44943 | 7.76277 | H 6.76709 | 2.33898 | 0.15145 |
| C -4.15492 | 0.10136 | 2.35417 | H 0.73276 | 4.87365 | 9.99848 | H -7.73705 | 0.87788 | -0.31877 |
| C -2.27789 | 0.5066 | 3.30099 | C -1.26922 | 7.08931 | 3.68621 | H -7.6902 | -0.90762 | -0.244 |
| C 6.92983 | 0.31826 | -2.58198 | C 0.09746 | 7.33401 | 3.78589 | H -8.94943 | -0.00884 | 0.63163 |
| C 7.26675 | 1.49554 | -0.43112 | C 0.93684 | 6.37723 | 4.35475 | H -7.06686 | -2.07383 | 1.92456 |
| C 6.19154 | 2.6915 | -2.31331 | C 0.42531 | 5.16915 | 4.83307 | H -8.38359 | -1.17041 | 2.72498 |
| H 5.324 | 0.77789 | 0.96334 | C -0.95154 | 4.94083 | 4.74358 | H -6.73831 | -1.1327 | 3.39906 |
| C -7.88405 | -0.58975 | 0.44273 | C -1.79101 | 5.88827 | 4.16666 | H -7.17331 | 2.25371 | 1.74053 |
| C -7.20203 | -1.55991 | 2.61463 | H -1.93089 | 7.8359 | 3.2373 | H -8.44951 | 1.35788 | 2.61224 |
| C -7.52287 | 0.90929 | 2.37834 | H 0.51604 | 8.27472 | 3.41596 | H -6.80871 | 1.45874 | 3.29029 |
| H -4.97344 | 0.07822 | 3.37863 | H 2.01467 | 6.56543 | 4.42135 | H -3.60151 | 1.21748 | 4.69456 |
| C -2.99128 | 0.56997 | 4.65018 | H -1.36794 | 4.00421 | 5.12908 | H -3.49522 | -0.56585 | 4.77893 |
| C -1.68434 | 1.89564 | 3.03424 | H -2.86475 | 5.68953 | 4.09571 | H -2.1723 | 0.44118 | 5.40641 |
| C -1.15712 | -0.53496 | 3.42629 | | | | H -2.09108 | 2.5136 | 3.13317 |
| H 6.31628 | 0.18698 | -3.48847 | s02_1 | | | H -0.7144 | 1.74848 | 3.97035 |
| H 7.03321 | -0.66969 | -2.10221 | Co -0.47021 | -0.04435 | -1.07879 | H -0.82496 | 1.67334 | 2.19001 |
| H 7.93272 | 0.64679 | -2.90669 | N 0.48875 | -0.24837 | -2.71133 | H -0.52518 | -0.75701 | 4.10878 |
| H 7.42142 | 0.54438 | 0.10552 | N -2.03561 | 0.04397 | -2.15588 | H -1.77131 | -1.80494 | 3.37991 |
| H 8.25294 | 1.83777 | -0.78699 | C -0.41461 | -0.62887 | -3.78725 | H -0.63965 | -0.88109 | 2.33245 |
| H 6.90028 | 2.24202 | 0.29317 | C 1.7605 | -0.08117 | -2.8519 | C 2.99038 | 0.11063 | 2.02353 |
| H 5.54913 | 2.63608 | -3.2076 | C -1.70284 | 0.16964 | -3.57083 | H 1.94002 | 0.40747 | 2.18471 |
| H 7.18228 | 3.05648 | -2.63668 | C -3.24874 | 0.07433 | -1.70377 | H 3.62331 | 0.79448 | 2.61783 |
| H 5.75463 | 3.44404 | -1.63552 | C 0.09906 | -0.48626 | -5.2075 | C 4.63377 | -2.9642 | 3.44424 |
| H -7.82881 | 0.25855 | -0.26037 | H -0.67737 | -1.69543 | -3.60841 | C 4.54211 | -1.67791 | 2.63617 |
| H -7.58917 | -1.50535 | -0.09762 | C 2.69237 | 0.17793 | -1.79221 | C 2.29969 | -2.24149 | 2.01411 |
| H -8.94097 | -0.70529 | 0.73587 | H 2.20138 | -0.1565 | -3.86099 | C 2.39728 | -3.52043 | 2.82863 |
| H -6.85995 | -2.48959 | 2.12903 | C -2.77452 | -0.23275 | -4.56878 | H 4.3478 | -2.74342 | 4.49024 |
| H -8.26493 | -1.68681 | 2.88544 | H -1.43853 | 1.2374 | -3.74932 | H 5.67392 | -3.33182 | 3.46428 |
| H -6.63395 | -1.44487 | 3.55216 | C -3.64922 | 0.08191 | -0.33142 | H 4.97322 | -1.86146 | 1.61693 |
| H -7.4112 | 1.78831 | 1.72132 | H -4.07957 | 0.10811 | -2.42947 | H 5.15931 | -0.88688 | 3.10228 |
| H -8.59068 | 0.81251 | 2.64224 | C -0.97883 | -0.89542 | -6.20224 | H 1.26642 | -1.45383 | 2.00185 |
| H -6.9705 | 1.1168 | 3.30922 | H 1.00404 | -1.09974 | -5.35596 | H 2.57229 | -2.47778 | 0.95039 |
| H -3.79854 | 1.32188 | 4.66258 | H 0.39432 | 0.56778 | -5.38178 | H 2.00895 | -3.32114 | 3.84585 |
| H -3.42054 | -0.40397 | 4.94366 | C 4.03621 | 0.45374 | -2.14267 | H 1.75958 | -4.30689 | 2.38858 |
| H -2.26846 | 0.86226 | 5.43166 | C 2.30926 | 0.07606 | -0.41879 | N 3.16991 | -1.22742 | 2.56903 |
| H -2.47153 | 2.66832 | 3.08999 | C -2.25603 | -0.09687 | -5.99428 | O -0.4191 | -2.25527 | -0.80968 |
| H -0.90758 | 2.13448 | 3.78444 | H -3.67992 | 0.38388 | -4.44034 | H 0.35687 | -2.11138 | -0.24148 |
| H -1.2177 | 1.95555 | 2.03929 | H -3.07153 | -1.2816 | -4.3684 | C -1.43214 | -2.91088 | -0.08504 |
| H -0.52639 | -0.30059 | 4.30318 | C -5.03871 | 0.0642 | -0.05183 | H -1.59938 | -2.45619 | 0.90659 |
| H -1.57927 | -1.5445 | 3.58268 | C -2.69248 | 0.1523 | 0.73106 | H -1.20835 | -3.98494 | 0.04525 |
| H -0.51109 | -0.55403 | 2.53522 | H -1.19768 | -1.9731 | -6.07428 | O -0.2335 | 2.04334 | -1.21686 |
| C 3.06466 | -0.04281 | 2.03379 | H -0.60925 | -0.7773 | -7.23413 | O 0.14087 | 2.63035 | -0.22388 |
| H 3.90029 | -0.62331 | 2.4688 | C 5.02117 | 0.66082 | -1.19794 | N 3.75767 | -4.0109 | 2.95217 |
| H 2.14607 | -0.66126 | 2.1465 | H 4.2734 | 0.49897 | -3.21111 | H 4.08738 | -4.32546 | 2.03786 |
| C 2.66703 | 2.16842 | 5.01087 | C 3.3326 | 0.26693 | 0.56135 | H -2.3682 | -2.82458 | -0.65815 |
| C 2.78275 | 0.89926 | 4.20268 | O 1.1107 | -0.1976 | -0.02476 | | | |
| C 1.86209 | 2.02363 | 2.32703 | H -3.03256 | -0.41003 | -6.71148 | s02_2 | | |
| C 1.73451 | 3.29047 | 3.14506 | H -2.05551 | 0.97143 | -6.20499 | Co -0.35357 | 0.25092 | -0.9081 |
| H 3.62128 | 2.74429 | 4.92724 | C -5.52287 | 0.10451 | 1.23507 | N 0.6359 | -0.00601 | -2.5188 |
| H 2.53303 | 1.9181 | 6.07622 | H -5.722 | 0.01754 | -0.90661 | N -1.90215 | -0.11198 | -1.9624 |
| H 1.86758 | 0.27874 | 4.37764 | C -3.19 | 0.21393 | 2.08331 | C -0.1782 | -0.67096 | -3.5256 |
| H 3.64557 | 0.30778 | 4.55916 | O -1.4262 | 0.15734 | 0.53006 | C 1.8801 | 0.29873 | -2.6909 |
| H 2.03568 | 2.293 | 1.27051 | C 6.47917 | 0.95859 | -1.53458 | C -1.59318 | -0.11478 | -3.3899 |
| H 0.89891 | 1.46332 | 2.36 | C 4.61837 | 0.56637 | 0.15538 | C -3.118 | -0.15976 | -1.5158 |
| H 2.64386 | 3.92339 | 2.99339 | C -7.00802 | 0.08226 | 1.58688 | C 0.30682 | -0.61921 | -4.9627 |
| H 0.87043 | 3.8651 | 2.77328 | C -4.55806 | 0.18089 | 2.2739 | H -0.23578 | -1.73935 | -3.211 |
| N 2.95355 | 1.18916 | 2.7968 | C -2.20288 | 0.3359 | 3.24914 | C 2.79475 | 0.66343 | -1.6529 |
| O -0.49047 | -2.31964 | -0.7469 | C 6.7171 | 1.00558 | -3.04019 | H 2.32528 | 0.18958 | -3.6952 |
| H 0.34414 | -2.17068 | -0.26699 | C 7.37077 | -0.13835 | -0.94344 | C -2.56193 | -0.84852 | -4.3017 |
| C -1.4231 | -2.93183 | 0.11435 | C 6.87836 | 2.31445 | -0.94482 | H -1.54226 | 0.94987 | -3.7154 |
| H -1.43886 | -2.45936 | 1.11144 | H 5.36372 | 0.74107 | 0.9428 | C -3.53932 | 0.00642 | -0.1624 |
| H -1.2175 | -4.01092 | 0.22824 | C -7.88549 | 0.00674 | 0.34164 | H -3.93531 | -0.33379 | -2.2367 |
| O -0.19126 | 1.90226 | -1.05812 | C -7.31253 | -1.14011 | 2.45833 | C -0.66509 | -1.35445 | -5.8757 |
| O -1.15204 | 2.63752 | -0.90365 | | | | | | |

H 1.3131 -1.06258 -5.05
H 0.39578 0.44047 -5.2753
C 4.16132 0.84519 -1.9842
C 2.39174 0.63617 -0.2817
C -2.07583 -0.8032 -5.7442
H -3.57206 -0.41113 -4.2371
H -2.64664 -1.89877 -3.9574
C -4.92042 -0.14163 0.1206
C -2.61467 0.36102 0.8715
H -0.6675 -2.42885 -5.6084
H -0.32108 -1.29918 -6.9217
C 5.15662 0.91143 -1.0295
H 4.41081 0.90096 -3.0495
C 3.43758 0.51773 0.6881
O 1.18172 0.63988 0.1294
H -2.77239 -1.35477 -6.397
H -2.09036 0.24653 -6.096
C -5.42672 0.03438 1.387
H -5.75827 -0.40323 -0.7151
C -3.13769 0.55266 2.202
O -1.3597 0.50656 0.6669
C 6.63196 1.13248 -1.3503
C 4.75187 0.68516 0.3116
C -6.90361 -0.11471 1.7423
C -4.49389 0.3816 2.4001
C -2.18372 0.93676 3.3358
C 6.86381 1.34399 -2.8428
C 7.45009 -0.08511 -0.9089
C 7.1297 2.37655 -0.6083
H 5.51727 0.59313 1.0941
C -7.74571 -0.48391 0.5255
C -7.07295 -1.21874 2.7906
C -7.4352 1.20748 2.3045
H -4.88675 0.52626 3.4108
C -2.91991 1.09028 4.6649
C -1.49696 2.27385 3.0264
C -1.11654 -0.15004 3.5226
H 6.30771 2.21723 -3.2237
H 6.56773 0.46146 -3.4349
H 7.93484 1.52333 -3.0353
H 7.11168 -0.99586 -1.4316
H 8.52026 0.06235 -1.1372
H 7.36795 -0.27161 0.1743
H 6.56498 3.27157 -0.9194
H 8.19863 2.55498 -0.82
H 7.01967 2.27683 0.4838
H -7.69123 0.28801 -0.2607
H -7.43297 -1.44637 0.0861
H -8.8048 -0.5833 0.8167
H -6.70734 -2.18552 2.4049
H -8.13681 -1.33867 3.061
H -6.5194 -0.99881 3.718
H -7.33128 2.01858 1.5641
H -8.50431 1.11712 2.5656
H -6.89823 1.51758 3.2157
H -3.68235 1.88705 4.6274
H -3.41327 0.15484 4.9806
H -2.20088 1.36408 5.4547
H -2.24482 3.07129 2.8743
H -0.85744 2.57179 3.8762
H -0.86599 2.20795 2.1284
H -0.4618 0.11916 4.3716
H -1.5827 -1.12439 3.7582
H -0.4884 -0.2611 2.6227
C 3.03559 0.06155 2.0554
H 2.25718 0.72508 2.4748
H 3.91823 0.1041 2.7364
C 1.4963 -3.07341 3.408
C 2.13091 -1.70069 3.3965
C 3.38291 -2.27264 1.4504
C 2.76015 -3.65311 1.4611
H 0.51854 -3.00969 2.8723
H 1.27517 -3.36681 4.4482
H 3.04305 -1.72163 4.0407
H 1.44036 -0.95563 3.824
H 3.60883 -1.9788 0.4108
H 4.3511 -2.29853 2.0085

H 1.88581 -3.63501 0.7681
H 3.48193 -4.38009 1.0521
N 2.47849 -1.29589 2.0433
O 0.1908 -1.79546 -0.1449
H 0.76851 -1.50313 0.5972
C -0.84998 -2.60267 0.3359
H -1.43629 -2.10765 1.1326
H -0.47649 -3.57005 0.7242
O -0.54766 2.33204 -1.4002
O -0.443 3.13068 -0.4986
N 2.40861 -4.02608 2.8143
H 2.03485 -4.97101 2.8523
H -1.53113 -2.81955 -0.503

s02_3

Co -0.48418 -0.08947 -1.0713
N 0.47397 -0.27279 -2.7054
N -2.05088 0.02913 -2.1476
C -0.43319 -0.64429 -3.7813
C 1.75005 -0.14432 -2.8406
C -1.71564 0.16229 -3.5619
C -3.26157 0.11601 -1.6946
C 0.08089 -0.50338 -5.2017
H -0.70391 -1.71101 -3.6053
C 2.67993 0.11242 -1.7776
H 2.19512 -0.24411 -3.8457
C -2.78989 -0.23197 -4.5606
H -1.44439 1.22917 -3.7353
C -3.66344 0.112 -0.3229
H -4.08906 0.2053 -2.4195
C -1.00006 -0.90274 -6.197
H 0.98076 -1.12374 -5.3519
H 0.38471 0.54861 -5.3733
C 4.02969 0.34277 -2.1166
C 2.28141 0.06388 -0.4022
C -2.27219 -0.09699 -5.9863
H -3.69237 0.38852 -4.4312
H -3.09196 -1.2796 -4.3599
C -5.05205 0.15993 -0.042
C -2.70673 0.08586 0.7414
H -1.22558 -1.97944 -6.0722
H -0.6301 -0.78409 -7.2287
C 5.01878 0.55274 -1.1692
H 4.28517 0.35013 -3.1843
C 3.29065 0.31512 0.5708
O 1.0853 -0.22256 -0.0104
H -3.05134 -0.40415 -6.7033
H -2.06553 0.97049 -6.1953
C -5.53463 0.1694 1.2461
H -5.73621 0.18845 -0.8969
C -3.20165 0.09162 2.0956
O -1.44177 0.04592 0.5423
C 6.46599 0.79846 -1.5968
C 4.60089 0.53391 0.1771
C -7.01905 0.21974 1.5983
C -4.56919 0.13213 2.287
C -2.20701 0.05692 3.261
C 6.54105 2.07107 -2.4455
C 6.96942 -0.39145 -2.4191
C 7.39349 0.97087 -0.3977
H 5.32967 0.69721 0.9784
C -7.89755 0.25082 0.3518
C -7.39788 -1.01908 2.4158
C -7.31165 1.48051 2.4176
H -4.94334 0.13769 3.315
C -2.91944 0.04877 4.6114
C -1.29987 1.29391 3.2189
C -1.34447 -1.21104 3.1868
H 6.18715 2.94605 -1.8746
H 5.92391 1.99595 -3.3561
H 7.58032 2.26747 -2.763
H 6.37001 -0.54749 -3.331
H 8.01556 -0.23176 -2.7342
H 6.92901 -1.3227 -1.8292
H 7.11113 1.83932 0.2205
H 8.42713 1.13662 -0.7448

H 7.40074 0.07738 0.2488
H -7.69744 1.13999 -0.2697
H -7.75519 -0.64673 -0.2737
H -8.96102 0.28479 0.6419
H -7.20673 -1.94169 1.8419
H -8.46957 -0.99721 2.6806
H -6.82729 -1.08697 3.3564
H -7.0553 2.38832 1.8458
H -8.38261 1.53293 2.6812
H -6.73842 1.50665 3.3586
H -3.53109 0.95423 4.7645
H -3.57086 -0.83353 4.7353
H -2.17146 0.02046 5.421
H -1.8986 2.21896 3.2824
H -0.60762 1.28224 4.0799
H -0.70127 1.32682 2.2965
H -0.65141 -1.24854 4.0473
H -1.97414 -2.11829 3.2251
H -0.74064 -1.2268 2.2658
C 2.92778 0.32936 2.027
H 1.84155 0.55446 2.1301
H 3.47557 1.15193 2.5231
C 3.42538 -2.02148 4.8998
C 3.01403 -0.7661 4.1501
C 2.61595 -2.06847 2.1889
C 3.03605 -3.31819 2.9429
H 3.18878 -1.92146 5.9727
H 4.52343 -2.13662 4.8219
H 3.55979 0.11414 4.5369
H 1.92447 -0.56931 4.3353
H 1.50173 -1.95628 2.2518
H 2.86836 -2.16261 1.1172
H 2.51045 -4.20169 2.5418
H 4.11759 -3.48525 2.7774
N 3.27542 -0.89664 2.7315
O -0.4297 -2.29118 -0.811
H 0.20614 -2.16565 -0.0863
C -1.56901 -2.98623 -0.3692
H -2.01696 -2.53401 0.5329
H -1.34646 -4.0485 -0.1649
O -0.26168 2.00283 -1.1554
O 0.09706 2.5644 -0.1418
N 2.81037 -3.22544 4.3733
H 1.80499 -3.19726 4.5545
H -2.31651 -2.94659 -1.1773

s02_4

Co -0.44411 -0.31185 -1.0157
N 0.52243 -0.36225 -2.6558
N -2.01152 -0.28601 -2.1002
C -0.33706 -0.84405 -3.7257
C 1.76572 -0.05371 -2.8037
C -1.69578 -0.17603 -3.5227
C -3.21245 -0.11051 -1.6489
C 0.15615 -0.67931 -5.1507
H -0.4905 -1.92904 -3.5294
C 2.67191 0.28237 -1.7437
H 2.2042 -0.06729 -3.8164
C -2.72285 -0.73457 -4.4936
H -1.54808 0.90678 -3.7432
C -3.60922 0.00043 -0.2818
H -4.03517 -0.00748 -2.3779
C -0.87286 -1.2336 -6.1276
H 1.12335 -1.1919 -5.289
H 0.33104 0.39622 -5.3536
C 3.98169 0.67722 -2.0896
C 2.30886 0.11132 -0.3689
C -2.23474 -0.58641 -5.9287
H -3.69514 -0.22792 -4.3771
H -2.88983 -1.80304 -4.2508
C -4.98535 0.22636 -0.0273
C -2.66526 -0.07762 0.7941
H -0.96274 -2.32619 -5.9737
H -0.52538 -1.09729 -7.165
C 4.96789 0.91946 -1.1477
H 4.20724 0.78273 -3.1589

C 3.32438 0.3557 0.5998
O 1.14685 -0.29305 0.0231
H -2.97359 -1.01262 -6.6272
H -2.16462 0.49084 -6.1749
C -5.47274 0.39356 1.247
H -5.65395 0.27149 -0.8935
C -3.16814 0.10814 2.1337
O -1.41676 -0.31229 0.6098
C 6.36826 1.35589 -1.5792
C 4.59483 0.73533 0.1996
C -6.94252 0.64574 1.5715
C -4.52199 0.33235 2.298
C -2.21122 0.0406 3.3276
C 6.28193 2.69768 -2.3125
C 6.97402 0.30405 -2.5129
C 7.30522 1.52506 -0.3869
H 5.33136 0.88456 0.9964
C -7.8053 0.66624 0.3138
C -7.46577 -0.46401 2.4887
C -7.0904 1.99941 2.2729
H -4.89626 0.47894 3.315
C -2.91791 0.3707 4.6412
C -1.05498 1.03678 3.1633
C -1.65546 -1.38297 3.4505
H 5.85127 3.47551 -1.6596
H 5.65122 2.63391 -3.2146
H 7.28471 3.03417 -2.6299
H 6.37173 0.16404 -3.4256
H 7.98851 0.60357 -2.8296
H 7.04885 -0.67391 -2.0081
H 6.94728 2.29952 0.3119
H 8.30436 1.83421 -0.7369
H 7.42826 0.58516 0.1769
H -7.50155 1.46845 -0.3797
H -7.76288 -0.29345 -0.2287
H -8.85938 0.84618 0.5837
H -7.37788 -1.44998 2.0016
H -8.52953 -0.29691 2.7328
H -6.91275 -0.5117 3.4409
H -6.72922 2.81758 1.6271
H -8.14903 2.19734 2.5164
H -6.52092 2.04292 3.2155
H -3.34607 1.38769 4.6367
H -3.72492 -0.34374 4.8773
H -2.19119 0.32372 5.4691
H -1.43955 2.06342 3.0325
H -0.42336 1.02929 4.0704
H -0.42288 0.79463 2.2957
H -1.00108 -1.45829 4.3384
H -2.47392 -2.11505 3.5687
H -1.06216 -1.65197 2.5633
C 3.02218 0.15003 2.0555
H 1.9327 0.29453 2.2138
H 3.5323 0.93798 2.6407
C 1.62404 -2.69492 2.2517
C 3.05035 -2.316 1.875
C 3.36094 -1.28428 3.9931
C 1.93668 -1.64398 4.3932
H 1.35678 -3.65414 1.7674
H 0.93117 -1.91027 1.8584
H 3.14603 -2.17946 0.7839
H 3.71517 -3.15511 2.1576
H 4.03052 -2.0992 4.3305
H 3.68343 -0.35785 4.5001
H 1.8859 -1.81902 5.4823
H 1.264 -0.77986 4.1749
N 3.52443 -1.12579 2.5593
O -0.21018 -2.50199 -0.8145
H 0.47332 -2.37137 -0.1363
C -1.28475 -3.2401 -0.2842
H -1.63786 -2.83205 0.679
H -1.02068 -4.30458 -0.1528
O -0.45707 1.7974 -1.0661
O -0.26304 2.38199 -0.021
N 1.53774 -2.85174 3.6927
H 0.59685 -3.12736 3.9661
H -2.11691 -3.18085 -1.0036

s02_5

Co -0.50845 -0.19067 -1.07697
N 0.45325 -0.33445 -2.71149
N -2.06549 0.01406 -2.15459
C -0.45549 -0.6544 -3.80078
C 1.73084 -0.19786 -2.83611
C -1.7213 0.1742 -3.56421
C -3.27242 0.1399 -1.70045
C 0.06717 -0.48386 -5.21468
H -0.75125 -1.71866 -3.65904
C 2.65234 0.01832 -1.75983
H 2.17967 -0.25202 -3.84313
C -2.80015 -0.17358 -4.57533
H -1.42644 1.23898 -3.71023
C -3.6775 0.11889 -0.32961
H -4.09382 0.28305 -2.42385
C -1.01718 -0.83717 -6.22365
H 0.9569 -1.11564 -5.37748
H 0.38987 0.56682 -5.35747
C 4.00101 0.31459 -2.08115
C 2.24995 -0.11341 -0.39622
C -2.27527 -0.01386 -5.99601
H -3.6909 0.46104 -4.43369
H -3.12325 -1.21966 -4.40068
C -5.06268 0.22537 -0.04758
C -2.72598 0.01767 0.73488
H -1.26277 -1.91245 -6.12761
H -0.64186 -0.69841 -7.25092
C 4.96124 0.52442 -1.11283
H 4.25778 0.37915 -3.14408
C 3.24806 0.09689 0.6025
O 1.05302 -0.41373 -0.01342
H -3.05772 -0.28877 -6.72248
H -2.04831 1.05446 -6.17798
C -5.54549 0.22607 1.24063
H -5.74379 0.30721 -0.90142
C -3.21991 0.02019 2.08911
O -1.46532 -0.08718 0.53646
C 6.42181 0.84705 -1.41321
C 4.53592 0.4208 0.23408
C -7.0266 0.33591 1.59353
C -4.58411 0.12115 2.28117
C -2.22662 -0.08123 3.25195
C 6.69851 0.89737 -2.91193
C 7.31723 -0.23251 -0.79644
C 6.78062 2.20967 -0.81311
H 5.24339 0.60381 1.05233
C -7.90174 0.43191 0.34807
C -7.46131 -0.90131 2.3854
C -7.26342 1.59132 2.43887
H -4.9589 0.12291 3.30895
C -2.93946 -0.0776 4.60223
C -1.26228 1.11268 3.22914
C -1.42009 -1.38452 3.1591
H 6.10233 1.67881 -3.41299
H 6.4835 -0.06754 -3.40189
H 7.76195 1.12863 -3.09117
H 7.08724 -1.22371 -1.22316
H 8.3819 -0.0145 -0.99221
H 7.18787 -0.30161 0.29668
H 6.15403 3.00707 -1.2472
H 7.83781 2.45706 -1.01436
H 6.63674 2.23006 0.27932
H -7.66254 1.3246 -0.25433
H -7.79759 -0.45734 -0.29656
H -8.96302 0.50592 0.63886
H -7.31152 -1.81952 1.79245
H -8.53112 -0.83677 2.65109
H -6.89471 -1.01437 3.32404
H -6.96421 2.4982 1.88668
H -8.33158 1.68727 2.70172
H -6.69215 1.57148 3.38116
H -3.51253 0.85071 4.76765
H -3.6281 -0.93303 4.71322
H -2.19434 -0.14944 5.41175

H -1.81493 2.06393 3.31848
H -0.56377 1.04694 4.08285
H -0.67006 1.13607 2.30252
H -0.74704 -1.47273 4.03031
H -2.08968 -2.26335 3.16475
H -0.80081 -1.40663 2.24946
C 2.81747 0.01255 2.04046
H 2.1079 -0.84034 2.16197
H 2.20618 0.90711 2.27181
C 5.74379 -1.38038 3.89872
C 4.5229 -1.37938 3.00459
C 3.54776 0.35771 4.31486
C 4.76384 0.35713 5.21835
H 6.50958 -0.71044 3.4362
H 6.17512 -2.39497 3.93892
H 3.7955 -2.1405 3.37986
H 4.8027 -1.67331 1.97775
H 3.11424 1.37192 4.26728
H 2.7689 -0.31608 4.75072
H 5.46464 1.14251 4.84742
H 4.46488 0.63701 6.24271
N 3.91381 -0.06266 2.97795
O -0.54067 -2.39515 -0.90926
H 0.09517 -2.32535 -0.17774
C -1.71051 -3.05883 -0.49936
H -2.14725 -2.61984 0.41472
H -1.53094 -4.13521 -0.32991
O -0.24271 1.88866 -1.08916
O 0.13979 2.40926 -0.06092
N 5.359 -0.96214 5.22904
H 6.14633 -1.00411 5.87125
H -2.44876 -2.96284 -1.31118

s02_6

Co -0.46943 -0.19085 -1.0806
N 0.4867 -0.41796 -2.7137
N -2.02159 0.01201 -2.1635
C -0.43249 -0.73736 -3.7947
C 1.76572 -0.30282 -2.8461
C -1.67264 0.1357 -3.5745
C -3.23221 0.10498 -1.7144
C 0.09445 -0.61136 -5.2116
H -0.75994 -1.78806 -3.6284
C 2.68868 -0.04957 -1.778
H 2.21176 -0.39522 -3.8515
C -2.76118 -0.18948 -4.5822
H -1.34241 1.18754 -3.7366
C -3.63659 0.10133 -0.3423
H -4.05738 0.20301 -2.4409
C -1.00154 -0.94468 -6.2146
H 0.96217 -1.27599 -5.3623
H 0.45255 0.42491 -5.374
C 4.03274 0.25507 -2.1038
C 2.28131 -0.12979 -0.4131
C -2.22824 -0.07116 -6.0039
H -3.62812 0.47969 -4.4509
H -3.12246 -1.22044 -4.3942
C -5.02579 0.14855 -0.066
C -2.68243 0.08582 0.7248
H -1.28653 -2.00817 -6.0984
H -0.62075 -0.83934 -7.2438
C 4.98181 0.52474 -1.1371
H 4.29527 0.28415 -3.1669
C 3.25376 0.17822 0.5822
O 1.09267 -0.47328 -0.032
H -3.01912 -0.32824 -6.7277
H -1.96108 0.98484 -6.2023
C -5.51275 0.17138 1.2206
H -5.70745 0.16512 -0.9232
C -3.18148 0.12731 2.0768
O -1.41694 0.02907 0.531
C 6.43185 0.88622 -1.446
C 4.5468 0.48134 0.209
C -6.99864 0.21369 1.5676
C -4.55001 0.16168 2.264
C -2.19064 0.15061 3.2459

C 6.71923 0.86618 -2.9436 H 2.16788 -0.39055 -3.8295 H 3.65782 4.66665 3.2037
 C 7.36763 -0.11726 -0.7659 C -2.79832 -0.40429 -4.6312 H 4.98435 3.49749 3.0442
 C 6.72553 2.29489 -0.9201 H -1.43893 1.04945 -3.8155 H 3.15405 2.87455 1.5057
 H 5.24248 0.71257 1.0251 C -3.73991 0.04442 -0.415 H 1.97922 2.87068 2.8443
 C -7.87356 0.2194 0.3182 H -4.13478 0.06408 -2.5207 H 2.21899 1.10585 4.621
 C -7.36824 -1.01725 2.401 C -0.9909 -1.15047 -6.2157 H 3.57526 -0.04379 4.4562
 C -7.30591 1.48279 2.3685 H 0.97209 -1.038183 -5.3275 H 4.04418 1.74994 6.1637
 H -4.92708 0.18658 3.2906 H 0.40147 0.29795 -5.4032 H 5.21778 1.74152 4.8315
 C -2.90815 0.16958 4.5938 C 3.92379 0.40934 -2.0739 N 3.39724 1.29601 2.8631
 C -1.32529 1.41524 3.1633 C 2.17004 -0.02958 -0.3976 O -0.5923 -2.41382 -0.8145
 C -1.28686 -1.09043 3.224 C -2.25076 -0.31539 -6.0496 H 0.1199 -2.28862 -0.1633
 H 6.09899 1.59571 -3.4915 H -3.68977 0.23784 -4.5342 C -1.70421 -3.04511 -0.2283
 H 6.5459 -0.13168 -3.3814 H -3.12596 -1.44023 -4.4117 H -2.0025 -2.57505 0.7245
 H 7.77461 1.12842 -3.1275 C -5.13243 0.10113 -0.1562 H -1.5168 -4.11965 -0.0552
 H 7.18045 -1.1406 -1.1332 C -2.79927 0.06855 0.6638 O -0.28972 1.8426 -1.2084
 H 8.42276 0.13308 -0.9737 H -1.23926 -2.21914 -6.0676 O 0.15535 2.39454 -0.2203
 H 7.23808 -0.12624 0.3283 H -0.60017 -1.0654 -7.2431 N 3.90074 3.35003 4.8168
 H 6.07303 3.03906 -1.4076 C 4.83935 0.76506 -1.102 H 2.98068 3.60095 5.1823
 H 7.77447 2.57525 -1.1213 H 4.2009 0.42431 -3.1335 H -2.54852 -2.95611 -0.9295
 H 6.56326 2.37157 0.1676 C 3.10634 0.36421 0.6007
 H -7.68008 1.10196 -0.3147 O 0.99586 -0.42559 -0.0251
 H -7.72059 -0.68509 -0.2946 H -3.02217 -0.6254 -6.7736
 H -8.93823 0.24706 0.6046 H -2.01905 0.74228 -6.281
 H -7.16768 -1.94574 1.84 C -5.63329 0.17413 1.1229
 H -8.44061 -1.00147 2.6636 H -5.80424 0.08459 -1.0211
 H -6.79858 -1.06724 3.3433 C -3.3122 0.16482 2.0075
 H -7.05595 2.38501 1.7851 O -1.53211 0.00088 0.4885
 H -8.37827 1.52885 2.6276 C 6.2685 1.20989 -1.3989
 H -6.73656 1.52728 3.3113 C 4.38521 0.73464 0.2372
 H -3.54407 1.06295 4.7158 C -7.12294 0.22947 1.4517
 H -3.53643 -0.72517 4.7447 C -4.68251 0.20635 2.1774
 H -2.16238 0.18698 5.406 C -2.33166 0.23673 3.1832
 H -1.95439 2.32199 3.188 C 6.5794 1.17251 -2.8914
 H -0.63802 1.45994 4.0285 C 7.25494 0.28428 -0.681
 H -0.7212 1.43407 2.2426 C 6.4644 2.64667 -0.9038
 H -0.61006 -1.07649 4.0972 H 5.05122 1.03866 1.0544
 H -1.88948 -2.01449 3.288 C -7.98429 0.19067 0.1936
 H -0.66927 -1.12554 2.3135 C -7.50208 -0.97072 2.3248
 C 2.803 0.1762 2.018 C -7.43814 1.52659 2.2033
 H 2.78228 -0.86644 2.3944 H -5.07154 0.27302 3.1977
 H 1.73544 0.48916 2.0324 C -3.06258 0.32011 4.5214
 C 2.32756 1.07626 4.9734 C -1.45583 1.4907 3.053
 C 3.59917 0.59381 4.2921 C -1.43647 -1.01012 3.2255
 C 3.48614 2.39715 2.738 H 5.92478 1.85042 -3.465
 C 2.22142 2.91058 3.4089 H 6.47213 0.15607 -3.307
 H 2.36265 0.83193 6.0495 H 7.61985 1.49324 -3.0673
 H 1.45584 0.52329 4.5456 H 7.13918 -0.75716 -1.0262
 H 3.70529 -0.5004 4.3913 H 8.2953 0.5966 -0.879
 H 4.46292 1.05898 4.8053 H 7.10834 0.29243 0.4111
 H 4.35945 2.89909 3.1977 H 5.77261 3.33577 -1.4175
 H 3.48243 2.65383 1.6643 H 7.49596 2.98884 -1.099
 H 2.18856 4.01145 3.3401 H 6.28305 2.73906 0.1799
 H 1.33241 2.53069 2.8549 H -7.78244 1.04942 -0.4688
 N 3.65987 0.95749 2.888 H -7.82609 -0.73568 -0.3843
 O -0.56987 -2.38544 -0.8504 H -9.05195 0.2299 0.4672
 H 0.16299 -2.30106 -0.2157 H -7.29645 -1.91874 1.7993
 C -1.68094 -3.00841 -0.2542 H -8.57706 -0.94516 2.5757
 H -1.94042 -2.5645 0.7222 H -6.94183 -0.98715 3.2738
 H -1.51664 -4.0926 -0.1226 H -7.18137 2.40723 1.5906
 O -0.12566 1.85982 -1.1525 H -8.51325 1.5821 2.4487
 O 0.31954 2.38455 -0.1495 H -6.87916 1.60506 3.15
 N 2.22294 2.51379 4.807 H -3.69676 1.22005 4.5947
 H 1.40093 2.87568 5.2849 H -3.69566 -0.5648 4.7069
 H -2.54231 -2.87447 -0.9267 H -2.32578 0.37334 5.34
 H -2.07817 2.40236 3.0494
 H -0.76522 1.55867 3.9128
 H -0.8546 1.47496 2.1312
 H -0.76302 -0.95857 4.0997
 H -2.04551 -1.92638 3.3288
 H -0.8139 -1.09097 2.3217
 C 2.64422 0.38247 2.0322
 H 2.72938 -0.63555 2.4617
 H 1.55131 0.60861 2.0506
 C 3.93864 3.61658 3.3908
 C 3.05382 2.68003 2.5884
 C 3.28188 1.00634 4.2763
 C 4.16009 1.94818 5.0847

s02_7

Co -0.55965 -0.22469 -1.1028
 N 0.42829 -0.45764 -2.7152
 N -2.10047 -0.09483 -2.2117
 C -0.46333 -0.84332 -3.7974
 C 1.70252 -0.29047 -2.8335
 C -1.73558 -0.00713 -3.6217
 C -3.31803 0.00059 -1.7808
 C 0.07875 -0.74479 -5.2107
 H -0.7561 -1.89899 -3.6009
 C 2.5952 0.03612 -1.7586

s02_8

Co -0.42352 0.0449 -0.94243
 N 0.51477 -0.17616 -2.58703
 N -1.97309 0.29009 -2.02325
 C -0.41142 -0.4102 -3.68625
 C 1.79792 -0.19249 -2.7204
 C -1.61801 0.49316 -3.42216
 C -3.1932 0.29506 -1.5915
 C 0.12718 -0.22849 -5.09366
 H -0.77863 -1.45602 -3.57654
 C 2.75232 -0.04966 -1.66241
 H 2.22838 -0.32317 -3.728
 C -2.71146 0.27667 -4.4526
 H -1.24719 1.53966 -3.516
 C -3.61206 0.16762 -0.23145
 H -4.01227 0.40462 -2.32272
 C -0.97603 -0.44876 -6.11951
 H 0.96204 -0.92401 -5.28388
 H 0.53654 0.79682 -5.19184
 C 4.11827 0.04474 -2.02521
 C 2.35965 -0.038 -0.28649
 C -2.16334 0.46482 -5.86062
 H -3.55237 0.96959 -4.28038
 H -3.11419 -0.74964 -4.33733
 C -5.0035 0.08697 0.02223
 C -2.66733 0.14947 0.84405
 H -1.31033 -1.50316 -6.07082
 H -0.58278 -0.29827 -7.1384
 C 5.12816 0.17357 -1.09431
 H 4.35064 0.01548 -3.09531
 C 3.40562 0.14111 0.67347
 O 1.14798 -0.20319 0.12202
 H -2.95886 0.29093 -6.60383
 H -1.84739 1.51823 -5.98846
 C -5.50523 -0.03104 1.29764
 H -5.67329 0.11706 -0.84391
 C -3.1858 0.04205 2.18532
 O -1.39989 0.21823 0.66389
 C 6.60701 0.3008 -1.44542
 C 4.71953 0.22101 0.25903
 C -6.99308 -0.13262 1.62253
 C -4.55469 -0.04927 2.35142
 C -2.2174 0.05615 3.37077
 C 6.84379 0.21584 -2.94953
 C 7.39607 -0.82614 -0.77271
 C 7.12956 1.6548 -0.95397
 H 5.47856 0.35441 1.04163
 C -7.85278 -0.09395 0.36325
 C -7.27306 -1.45171 2.34919
 C -7.40706 1.03989 2.51717
 H -4.94284 -0.13814 3.37023
 C -2.95249 -0.0825 4.70212
 C -1.4566 1.38767 3.39311
 C -1.21248 -1.10004 3.27471
 H 6.32911 1.02604 -3.49332
 H 6.50346 -0.74828 -3.36421

| | | |
|-------------------------------|------------------------------|-------------------------------|
| H 7.92122 0.30702 -3.16664 | C -4.87278 -0.16499 0.13842 | H -1.65796 -2.60559 0.64521 |
| H 7.04229 -0.181295 -1.11627 | C -2.51017 -0.05243 0.86295 | O -0.28173 2.03346 -1.12334 |
| H 8.47406 -0.74522 -1.01321 | H -1.0345 -2.11652 -5.94592 | O 0.03674 2.6392 -0.12172 |
| H 7.30075 -0.80125 0.32502 | H -0.56182 -0.90296 -7.13961 | N 3.17851 -2.59403 4.50379 |
| H 6.58245 2.48355 -1.43487 | C 5.09238 1.0502 -1.25482 | C 3.60067 -3.7135 5.29887 |
| H 8.20183 1.76905 -1.19158 | H 4.3424 0.70216 -3.24436 | H -0.86237 -4.06925 -0.02801 |
| H 7.01758 1.7711 0.13683 | C 3.42492 0.73045 0.53074 | H 3.31064 -3.56918 6.35289 |
| H -7.72075 0.84835 -0.19506 | O 1.27329 -0.04311 0.01936 | H 3.12401 -4.6416 4.94197 |
| H -7.62329 -0.93225 -0.31632 | H -2.99234 -0.70161 -6.56109 | H 4.70634 -3.8702 5.27171 |
| H -8.91946 -0.17044 0.63294 | H -2.10537 0.7559 -6.10428 | |
| H -6.99429 -2.31346 1.71927 | C -5.3219 -0.18688 1.4384 | s04_2 |
| H -8.34594 -1.54065 2.59474 | H -5.57828 -0.1926 -0.69899 | Co -0.45844 -0.02467 -1.02822 |
| H -6.71038 -1.53305 3.29354 | C -2.96908 -0.08864 2.22958 | N 0.50779 -0.1565 -2.66523 |
| H -7.22383 2.00293 2.01134 | O -1.25209 0.01526 0.63196 | N -2.02721 -0.00521 -2.104 |
| H -8.48199 0.98127 2.76286 | C 6.50554 1.39969 -1.72226 | C -0.37671 -0.55945 -3.7492 |
| H -6.85101 1.0525 3.46874 | C 4.70195 1.05229 0.10025 | C 1.77108 0.06828 -2.80446 |
| H -3.65386 0.75066 4.87971 | C -6.7967 -0.24461 1.82781 | C -1.70328 0.16789 -3.51565 |
| H -3.51567 -1.02912 4.77172 | C -4.33042 -0.15219 2.45498 | C -3.23883 -0.07684 -1.6536 |
| H -2.22187 -0.07518 5.52788 | C -1.94428 -0.05538 3.36867 | C 0.12757 -0.35947 -5.16607 |
| H -2.15716 2.24106 3.39129 | C 6.4538 2.598 -2.67443 | H -0.58487 -1.64147 -3.59323 |
| H -0.85269 1.45672 4.31601 | C 7.11568 0.19812 -2.44997 | C 2.6948 0.34396 -1.7426 |
| H -0.77975 1.48334 2.52859 | C 7.41905 1.7611 -0.55489 | H 2.21236 0.02993 -3.81537 |
| H -0.54018 -1.08579 4.15173 | H 5.42578 1.32095 0.87737 | C -2.75438 -0.26419 -4.52272 |
| H -1.73266 -2.07501 3.27378 | C -7.7063 -0.27374 0.60378 | H -1.49319 1.25133 -3.6699 |
| H -0.59307 -1.01838 2.36833 | C -7.06519 -1.50925 2.64942 | C -3.63863 -0.12369 -0.28165 |
| C 3.04287 0.32132 2.11572 | C -7.15813 0.99006 2.65933 | H -4.06996 -0.09248 -2.37951 |
| C 3.92736 0.06401 2.75163 | H -4.67766 -0.17666 3.49218 | C -0.92967 -0.79775 -6.17051 |
| H 2.23213 -0.37784 2.38657 | C -2.61754 -0.13393 4.73674 | H 1.06119 -0.92431 -5.32911 |
| C 3.01996 4.06459 2.46056 | C -1.14182 1.25158 3.31755 | H 0.37067 0.71155 -5.31569 |
| C 3.56454 2.68659 2.14826 | H -0.98666 -1.25022 3.25732 | C 4.02936 0.66557 -2.0904 |
| C 2.10359 1.74809 3.78295 | H 6.01825 3.47952 -2.17443 | C 2.31798 0.20717 -0.37072 |
| C 1.55742 3.12672 4.08538 | H 5.84617 2.38872 -3.57014 | C -2.2446 -0.06842 -5.94429 |
| H 2.19409 4.27904 1.74205 | H 7.46836 2.86629 -3.01797 | H -3.68933 0.3032 -4.37947 |
| H 3.81016 4.81579 2.29082 | H 6.52524 -0.09083 -3.33509 | H -2.9981 -1.33124 -4.34837 |
| H 4.48796 2.51611 2.76055 | H 8.13919 0.42911 -2.79422 | C -5.02224 -0.2568 -0.00495 |
| H 3.86276 2.64253 1.08658 | H 7.16938 -0.67929 -1.78357 | C -2.69051 0.01137 0.78221 |
| H 1.31772 0.98723 3.93468 | H 7.0514 2.64162 -0.00169 | H -1.09492 -1.88767 -6.06822 |
| H 2.93088 1.52343 4.50308 | H 8.42718 2.00457 -0.9301 | H -0.56705 -0.63715 -7.19914 |
| H 0.6521 3.28549 3.45349 | H 7.52493 0.92735 0.15923 | C 5.01107 0.88053 -1.14432 |
| H 1.23719 3.17234 5.14086 | H -7.58231 0.62672 -0.02137 | H 4.2624 0.73722 -3.1583 |
| N 2.57442 1.66273 2.41636 | H -7.51909 -1.15974 -0.02644 | C 3.33897 0.4066 0.61026 |
| O -0.4906 -2.19647 -0.70678 | H -8.76204 -0.31214 0.92045 | O 1.12973 -0.10902 0.02184 |
| H 0.17979 -2.0694 -0.0146 | H -6.82165 -2.41437 2.06756 | H -3.00522 -0.40233 -6.66914 |
| C -1.60072 -2.89241 -0.19936 | H -8.12903 -1.56543 2.93977 | H -2.09724 1.01324 -6.1292 |
| H -2.03207 -2.41057 0.69654 | H -6.46874 -1.53763 3.57579 | C -5.50955 -0.26646 1.28133 |
| H -1.35031 -3.93987 0.04743 | H -6.9828 1.91516 2.08463 | H -5.69829 -0.35185 -0.86143 |
| O 0.03426 2.16168 -0.91907 | H -8.22284 0.9646 2.95078 | C -3.19458 0.03278 2.13393 |
| O 0.34001 2.63981 0.14668 | H -6.5638 1.05561 3.58522 | O -1.42769 0.10915 0.58246 |
| N 2.58751 4.11436 3.84082 | H -3.2946 0.71844 4.91768 | C 6.46013 1.2214 -1.47835 |
| H 2.26162 5.04627 4.0857 | H -3.19336 -1.0667 4.86586 | C 4.61523 0.74679 0.20783 |
| H -2.37485 -2.91014 -0.98215 | H -1.84753 -0.11236 5.52557 | C -6.98788 -0.41699 1.63033 |
| s04_1 | H -1.80949 2.12364 3.42786 | C -4.55576 -0.11307 2.32164 |
| Co -0.32596 -0.06882 -1.00264 | H -0.41349 1.27817 4.14796 | C -2.22474 0.23703 3.30278 |
| N 0.60494 -0.20888 -2.65704 | H -0.58935 1.35179 2.37135 | C 6.69053 1.31354 -2.98303 |
| N -1.92236 -0.09676 -2.04116 | H -0.26876 -1.25177 4.09774 | C 7.37908 0.13008 -0.91957 |
| C -0.29536 -0.67463 -3.70134 | H -1.54299 -2.20416 3.29524 | C 6.83027 2.57036 -0.85479 |
| C 1.8639 0.01367 -2.82671 | H -0.40709 -1.20696 2.32202 | H 5.35871 0.9207 0.99731 |
| C -1.63193 0.03382 -3.46541 | C 3.07716 0.79124 1.9891 | C -7.85291 -0.56815 0.38327 |
| C -3.12501 -0.09218 -1.55858 | H 1.97666 0.93047 2.09209 | C -7.18717 -1.66169 2.50079 |
| C 0.17237 -0.52504 -5.1368 | H 3.55845 1.6822 2.43351 | C -7.46707 0.82146 2.39408 |
| H -0.47701 -1.75428 -3.49703 | C 3.48716 -2.77301 3.10149 | H -4.93473 -0.105 3.34778 |
| C 2.7927 0.37633 -1.79423 | C 2.97169 -1.61197 2.2812 | C -2.94306 0.20699 4.64968 |
| H 2.29303 -0.07845 -3.83946 | C 3.2259 -0.1828 4.16099 | C -1.53937 1.60356 3.17002 |
| C -2.69482 -0.46454 -4.42931 | C 3.73357 -1.34664 4.98155 | C -1.1586 -0.8664 3.32273 |
| H -1.44965 1.11482 -3.66602 | H 4.59147 -2.86877 2.94578 | H 6.0705 2.1001 -3.44563 |
| C -3.4918 -0.10884 -0.1774 | H 3.0267 -3.71338 2.74879 | H 6.47302 0.35891 -3.49141 |
| H -3.97414 -0.07604 -2.26362 | H 1.85589 -1.59439 2.33254 | H 7.74536 1.56208 -3.1875 |
| C -0.897 -1.02837 -6.09689 | H 3.25127 -1.75376 1.22247 | H 7.13675 -0.85115 -1.36202 |
| H 1.11431 -1.07643 -5.29755 | H 3.69264 0.75443 4.5135 | H 8.43576 0.35661 -1.14604 |
| H 0.38862 0.54354 -5.33636 | H 2.12347 -0.07818 4.3221 | H 7.28839 0.03175 0.17499 |
| C 4.10937 0.71314 -2.17148 | H 4.85189 -1.36485 4.93551 | H 6.18623 3.37509 -1.24775 |
| C 2.42777 0.34155 -0.40946 | H 3.45387 -1.20779 6.04113 | H 7.87903 2.829 -1.08331 |
| C -2.22299 -0.31979 -5.86986 | N 3.52774 -0.36095 2.75685 | H 6.72351 2.56382 0.24218 |
| H -3.6402 0.0858 -4.28941 | O -0.08901 -2.25194 -0.69549 | H -7.78015 0.31313 -0.27634 |
| H -2.90844 -1.52816 -4.20079 | O 0.53042 -2.06529 0.03009 | H -7.57636 -1.46118 -0.20256 |
| | C -1.17022 -3.03189 -0.24875 | H -8.91197 -0.67748 0.67096 |
| | H -1.9141 -3.06461 -1.06048 | |

H -6.85797 -2.56992 1.96799 O 1.19501 0.6492 0.21913 H 2.08469 -5.46245 4.13488
 H -8.25251 -1.7864 2.76297 H -2.60082 -1.73168 -6.27054 H 1.38435 -5.36182 2.49028
 H -6.6199 -1.60438 3.44405 H -2.06334 -0.07201 -5.99404
 H -7.34254 1.73159 1.7833 C -5.37792 -0.25716 1.46691
 H -8.53593 0.72789 2.65489 H -5.50618 -0.69877 -0.63566
 H -6.91019 0.97193 3.3332 C -3.10117 0.28101 2.30294
 H -3.69464 1.00975 4.74032 O -1.3107 0.26212 0.78211
 H -3.44436 -0.75885 4.83416 C 6.57254 1.62116 -1.29574
 H -2.20921 0.35502 5.45917 C 4.74598 1.03607 0.38337
 H -2.28627 2.41613 3.17731 C -6.85602 -0.42283 1.80964
 H -0.85586 1.76652 4.02205 C -4.45741 0.09762 2.48864
 H -0.95288 1.67549 2.24233 C -2.15864 0.65446 3.44996
 H -0.46863 -0.7172 4.17267 C 6.78113 1.81692 -2.79377
 H -1.62309 -1.8626 3.43897 C 7.50139 0.49611 -0.82869
 H -0.5664 -0.84985 2.39585 C 6.95368 2.92391 -0.58594
 C 3.00431 0.21193 2.06929 H 5.51784 1.03259 1.16481
 H 1.95185 0.49454 2.24098 C -7.68398 -0.79764 0.58485
 H 3.63218 0.88872 2.67698 C -7.02202 -1.53169 2.85341
 C 4.67602 -2.65842 3.41733 C -7.40629 0.89196 2.37115
 C 4.57027 -1.58317 2.62457 H -4.86073 0.23654 3.49587
 C 2.34176 -2.1495 2.01242 C -2.9133 0.81877 4.76751
 C 2.44258 -3.42944 2.81224 C -1.44091 1.97872 3.15477
 H 4.41272 -2.65842 4.48432 C -1.11602 -0.45332 3.65008
 H 5.71867 -3.23499 3.40414 H 6.14714 2.62642 -3.1934
 H 4.98787 -1.75615 1.60185 H 6.56565 0.89693 -3.36326
 H 5.19152 -0.80385 3.10281 H 7.83093 2.08862 -2.99482
 H 1.30365 -1.77849 2.00852 H 7.24906 -0.45444 -1.32872
 H 2.62343 -2.37704 0.95279 H 8.5527 0.7375 -1.06448
 H 2.03695 -3.24718 3.83957 H 7.43905 0.3284 0.25893
 H 1.81607 -4.21358 2.34864 H 6.30844 3.75493 -0.9173
 N 3.19777 -1.13513 2.58459 H 8.00137 3.19518 -0.80501
 O -0.29477 -2.23933 -0.80483 H 6.85374 2.84153 0.50878
 H 0.51354 -2.07815 -0.28934 H -7.63074 -0.02331 -0.19912
 C -1.22579 -2.94042 -0.0146 H -7.35775 -1.75582 0.14599
 H -0.96019 -4.00933 0.07258 H -8.74439 -0.90863 0.86699
 H -2.20877 -2.87057 -0.50533 H -6.64223 -2.49321 2.46826
 O -0.31852 2.07631 -1.13295 H -8.08678 -1.66425 3.11422
 O -0.0008 2.66537 -0.12206 H -6.4791 -1.30829 3.78625
 N 3.81246 -3.89224 2.86676 H -7.3053 1.70628 1.63389
 C 3.93629 -5.13887 3.56992 H -8.47638 0.78923 2.62339
 H -1.32299 -2.50974 0.99691 H -6.88008 1.2052 3.28755
 H 3.30814 -5.91217 3.09714 H -3.66873 1.62134 4.71483
 H 4.98056 -5.49249 3.54729 H -3.41863 -0.11125 5.08016
 H 3.62901 -5.06363 4.64109 H -2.20408 1.08984 5.56704
 H -2.16985 2.78765 2.97355
 H -0.82544 2.2715 4.02414
 H -0.78273 1.89736 2.27768
 H -0.48844 -0.21764 4.52902
 H -1.60476 -1.42584 3.84252
 H -0.45743 -0.55308 2.77061
 C 3.09388 0.3104 2.15054
 H 2.2585 0.9157 2.54804
 H 3.96825 0.45348 2.82886
 C 1.79887 -2.89239 3.58596
 C 2.33065 -1.47935 3.54222
 C 3.64376 -2.00674 1.63787
 C 3.13164 -3.42961 1.68403
 H 0.82339 -2.9305 3.03582
 H 1.58434 -3.17943 4.63095
 H 3.23454 -1.41254 4.19527
 H 1.58048 -0.78001 3.94514
 H 3.86359 -1.73353 0.5914
 H 4.60304 -1.93738 2.20812
 H 2.26742 -3.51875 0.97871
 H 3.91443 -4.11592 1.31491
 N 2.65706 -1.08838 2.18304
 O 0.4175 -1.87008 -0.05234
 H 0.94564 -1.5152 0.69764
 C -0.55936 -2.76373 0.41251
 H -1.20348 -3.03809 -0.43872
 H -1.20046 -2.31944 1.19621
 O -0.70261 2.17862 -1.27682
 O -0.72554 2.96344 -0.35733
 N 2.75824 -3.81821 3.02625
 C 2.30769 -5.18036 3.09262
 H -0.11132 -3.69449 0.81052
 H 3.0879 -5.86326 2.71748
 H 2.08469 -5.46245 4.13488
 H 1.38435 -5.36182 2.49028
s04_4
 Co -0.46098 -0.1172 -1.046
 N 0.4917 -0.20578 -2.6912
 N -2.03968 -0.02386 -2.1073
 C -0.40882 -0.57455 -3.7735
 C 1.76192 -0.02961 -2.8292
 C -1.7203 0.17288 -3.5177
 C -3.24934 -0.00009 -1.643
 C 0.08853 -0.36377 -5.1912
 H -0.6366 -1.65575 -3.6339
 C 2.68851 0.23031 -1.7642
 H 2.20386 -0.08343 -3.8392
 C -2.78553 -0.22882 -4.5232
 H -1.49243 1.25503 -3.6554
 C -3.63954 -0.07817 -0.2704
 H -4.08544 0.0868 -2.3584
 C -0.98325 -0.77001 -6.1936
 H 1.01076 -0.94254 -5.3691
 H 0.34978 0.70476 -5.327
 C 4.02728 0.5192 -2.1022
 C 2.29866 0.13536 -0.3889
 C -2.28465 -0.0235 -5.9465
 H -3.71105 0.35001 -4.3665
 H -3.04405 -1.29412 -4.3575
 C -5.02656 -0.10127 0.0222
 C -2.67352 -0.11395 0.7852
 H -1.16509 -1.85862 -6.1062
 H -0.62606 -0.60006 -7.2227
 C 5.01098 0.74815 -1.1537
 H 4.27824 0.55848 -3.1704
 C 3.29878 0.41584 0.5863
 O 1.11937 -0.21291 0.0011
 H -3.05653 -0.33609 -6.669
 H -2.12197 1.05804 -6.1188
 C -5.49689 -0.17622 1.3127
 H -5.71918 -0.05897 -0.8252
 C -3.15513 -0.20597 2.1413
 O -1.41029 -0.08054 0.5762
 C 6.44718 1.05304 -1.5804
 C 4.59811 0.69258 0.1935
 C -6.97876 -0.20184 1.678
 C -4.52125 -0.23117 2.3437
 C -2.14812 -0.27514 3.2946
 C 6.47451 2.33858 -2.4122
 C 6.99187 -0.10686 -2.4191
 C 7.37011 1.24322 -0.3804
 H 5.32155 0.87499 0.9955
 C -7.86962 -0.13867 0.4416
 C -7.30304 -1.4955 2.4316
 C -7.31077 1.00194 2.5652
 H -4.88586 -0.2974 3.3731
 C -2.84586 -0.39678 4.6472
 C -1.28989 0.99652 3.3248
 C -1.2408 -1.50307 3.1321
 H 6.08999 3.19254 -1.8294
 H 5.85915 2.2531 -3.3231
 H 7.50544 2.57678 -2.7283
 H 6.39582 -0.27298 -3.3315
 H 8.03069 0.09486 -2.7344
 H 6.98681 -1.04647 -1.8412
 H 7.05627 2.09153 0.2505
 H 8.39621 1.45234 -0.7265
 H 7.41166 0.34168 0.2535
 H -7.70665 0.7875 -0.1351
 H -7.70165 -0.99763 -0.2301
 H -8.93085 -0.15755 0.7412
 H -7.08206 -2.37866 1.8084
 H -8.37246 -1.52865 2.7044
 H -6.72201 -1.59096 3.3633
 H -7.09527 1.94776 2.04
 H -8.38011 0.99903 2.8404
 H -6.72885 1.00079 3.5012
 H -3.49187 0.47157 4.8624

H -3.4597 -1.3112 4.7199
 H -2.08837 -0.44645 5.4468
 H -1.92121 1.88983 3.4727
 H -0.57457 0.94696 4.1655
 H -0.71818 1.12253 2.3933
 H -0.54002 -1.58407 3.9829
 H -1.83853 -2.43207 3.1063
 H -0.6418 -1.43331 2.2108
 C 2.93161 0.40711 2.0412
 H 1.83845 0.59759 2.14
 H 3.45151 1.24297 2.5453
 C 3.14303 -3.23506 2.9349
 C 2.70119 -2.00107 2.1811
 C 2.99246 -0.70496 4.1503
 C 3.42566 -1.94177 4.9041
 H 4.24389 -3.3771 2.7905
 H 2.64288 -4.12732 2.5172
 H 1.58691 -1.92978 2.2169
 H 2.99242 -2.09124 1.1199
 H 3.4998 0.18343 4.5673
 H 1.89408 -0.5533 4.3014
 H 4.5423 -2.01454 4.8741
 H 3.13374 -1.85443 5.9659
 N 3.31013 -0.81166 2.7423
 O -0.3201 -2.32323 -0.8543
 H 0.29198 -2.20379 -0.1088
 C -1.44019 -3.0816 -0.4708
 H -2.17021 -3.03612 -1.2944
 H -1.92625 -2.68831 0.4391
 O -0.32647 1.98778 -1.0541
 O -0.01075 2.52749 -0.015
 N 2.81761 -3.12718 4.3407
 C 3.16786 -4.31365 5.0709
 H -1.1792 -4.14209 -0.3066
 H 2.8652 -4.21992 6.1271
 H 2.65229 -5.1924 4.6491
 H 4.26462 -4.52473 5.0518

s04_5

Co -0.54678 -0.21168 -1.0763
 N 0.42817 -0.27511 -2.7111
 N -2.10362 -0.02428 -2.1546
 C -0.46654 -0.57059 -3.8192
 C 1.70079 -0.0895 -2.8224
 C -1.75597 0.21308 -3.5514
 C -3.31987 -0.03171 -1.7096
 C 0.05887 -0.31833 -5.2198
 H -0.73404 -1.64717 -3.727
 C 2.60491 0.1277 -1.7305
 H 2.15761 -0.09035 -3.8272
 C -2.81912 -0.10618 -4.5875
 H -1.48636 1.29069 -3.6403
 C -3.7278 -0.14582 -0.3434
 H -4.14671 0.06507 -2.4344
 C -1.01104 -0.64497 -6.2528
 H 0.96432 -0.92011 -5.4079
 H 0.35722 0.74548 -5.3081
 C 3.93962 0.5012 -2.0239
 C 2.19567 -0.06512 -0.3777
 C -2.28808 0.13891 -5.9936
 H -3.72447 0.50085 -4.4189
 H -3.11988 -1.16681 -4.472
 C -5.11743 -0.19466 -0.0687
 C -2.77606 -0.17275 0.7249
 H -1.23357 -1.72875 -6.2122
 H -0.63233 -0.447 -7.2691
 C 4.8766 0.7245 -1.0346
 H 4.20427 0.61858 -3.0802
 C 3.15577 0.19274 0.6438
 O 1.01845 -0.47113 -0.0256
 H -3.05931 -0.11443 -6.7396
 H -2.08283 1.21974 -6.1182
 C -5.60365 -0.27604 1.2159
 H -5.79953 -0.16577 -0.9252
 C -3.27427 -0.23326 2.0758
 O -1.50961 -0.15347 0.5342

s09_1

H -6.87187 5.67938 -4.2816 H -13.97968 8.07502 -5.3236 C -10.69245 1.64547 -0.3537
H -7.36074 6.86443 -5.533 H -14.50358 9.67083 -4.7399 C -8.35104 1.02268 -0.3327
H -5.9053 7.15527 -4.5467 H -12.00925 9.19176 -6.4763 H -11.63374 1.57394 -2.2809
C -7.59655 9.0034 -3.7705 H -12.62313 10.76302 -5.8886 C -11.02835 5.68889 -2.8892
H -8.13333 9.63421 -3.0418 H -10.93665 10.29077 -5.5771 H -12.67666 4.47686 -2.2062
H -6.52815 9.26739 -3.7031 H -12.69383 9.82452 -2.2451 H -10.72314 2.31326 0.5339
H -7.93934 9.27615 -4.7837 H -13.02959 11.13079 -3.4165 C -6.95944 1.0741 -0.6388
C -7.22725 7.24317 -2.0756 H -11.35115 10.67572 -3.0446 H -8.60993 0.26341 0.4268
H -7.77751 7.84146 -1.3291 H -5.74962 -2.00321 1.249 C -11.93488 6.72546 -3.2183
H -7.31863 6.17965 -1.8046 H -5.65422 -2.79819 -0.349 C -9.63249 5.80551 -3.1856
H -6.16027 7.52221 -2.0146 H -4.40551 -3.1063 0.8783 C -6.09958 0.18615 0.0115
H -12.29594 1.80413 -1.9744 H -3.83191 -2.13858 -1.9918 C -6.44022 2.0694 -1.5664
C -10.68862 -0.34942 -1.0108 H -2.63368 -2.52359 -0.7242 C -11.52057 7.88987 -3.8221
H -10.25104 -0.83352 -1.9061 H -2.5922 -0.94405 -1.5394 H -12.9902 6.56326 -2.9748
H -11.16545 -0.79176 -0.1282 H -4.05911 -0.21557 1.884 C -9.18724 1.03451 -3.7934
C -12.36011 -2.04981 -1.2658 H -2.7645 -1.39792 1.5401 O -8.78159 4.86552 -2.947
C -12.72335 -0.24574 0.2752 H -2.73096 0.20941 0.779 C -4.74677 0.15774 -0.2288
C -13.84764 -2.33416 -1.35 H -5.82895 4.85155 -1.5867 C -5.02359 2.03097 -1.8393
H -11.90052 -2.70492 -0.4815 H -4.47746 4.50889 -0.4691 O -7.17928 2.93764 -2.1554
H -11.86368 -2.30754 -2.2177 H -4.20327 5.5088 -1.9218 C -12.45658 9.03424 -4.2007
C -14.22427 -0.46425 0.2445 H -5.83738 3.75652 -3.931 C -10.13314 8.00026 -4.0867
H -12.27934 -0.81733 1.1305 H -4.22266 4.4577 -4.2174 C -3.7803 -0.8098 0.4483
H -12.50186 0.81813 0.4674 H -4.46548 2.70119 -4.408 C -4.25415 1.09892 -1.1695
C -14.54927 -1.9151 -0.0685 H -2.3876 4.09581 -2.692 C -4.41326 3.01452 -2.841
H -14.00932 -3.40406 -1.5633 H -2.51693 3.10774 -1.2235 C -13.90608 8.72312 -3.8423
H -14.26635 -1.76829 -2.203 H -2.52809 2.32981 -2.8341 C -12.38228 9.28287 -5.7103
H -14.66369 -0.15392 1.2072 C -7.71312 7.66241 -3.2408 C -12.04388 10.30616 -3.4533
H -14.66005 0.19043 -0.5337 O -8.6815 2.62371 -4.6702 H -9.78912 8.92634 -4.5556
H -15.63838 -2.07142 -0.1429 H -8.19181 3.43632 -4.872 C -4.49889 -1.74489 1.4156
H -14.19759 -2.55413 0.7652 C -7.88771 1.48655 -4.908 C -3.08045 -1.66732 -0.6106
N -12.10032 -0.6503 -0.9745 H -7.72551 1.32068 -5.9874 C -2.73259 -0.02019 1.2391
H -6.1501 -0.79109 -0.0558 H -8.43068 0.6165 -4.506 H -3.17975 1.08253 -1.3734
O -9.4811 4.15309 -0.773 C -4.6512 4.45531 -2.3734
O -8.85518 3.75763 0.1941 C -5.03801 2.80697 -4.2264
H -6.90891 1.54112 -4.4001 C -2.90587 2.81815 -2.9868
C -6.76825 6.95946 -4.2224 H -14.03587 8.5621 -2.7587
H -6.81479 5.86714 -4.1114 H -14.27646 7.82827 -4.3707
H -7.01887 7.22215 -5.2652 H -14.55439 9.56777 -4.1298
H -5.72713 7.27883 -4.0374 H -12.68465 8.38274 -6.2718
C -7.44184 9.16193 -3.342 H -13.05389 10.10954 -6.0014
H -8.05395 9.74706 -2.6348 H -11.36496 9.55343 -6.0368
H -6.38492 9.35885 -3.0973 H -12.09773 10.15481 -2.362
H -7.62101 9.55069 -4.3594 H -12.71167 11.14543 -3.7159
C -7.39353 7.22846 -1.8042 H -11.01412 10.61492 -3.6965
H -8.02657 7.77584 -1.0847 H -5.00298 -1.19004 2.2249
H -7.55899 6.14914 -1.6624 H -5.2521 -2.36672 0.9025
H -6.33824 7.4485 -1.5637 H -3.77314 -2.42838 1.8872
H -12.64727 2.1077 -2.9193 H -3.81436 -2.25398 -1.1888
C -11.33222 -0.18786 -1.9107 H -2.37674 -2.37321 -0.1356
H -12.38931 -0.2578 -2.2699 H -2.50345 -1.05767 -1.3249
H -10.71632 -0.65626 -2.7027 H -3.21189 0.5987 2.0163
C -12.19934 -0.65252 0.2889 H -2.0232 -0.70507 1.736
C -10.99404 -2.35342 -0.9091 H -2.14515 0.65236 0.5931
C -11.91792 -1.32502 1.6188 H -5.72299 4.69961 -2.3447
H -13.18803 -1.00324 -0.105 H -4.23177 4.61205 -1.3643
H -12.29006 0.43891 0.4244 H -4.15167 5.16298 -3.059
C -10.67382 -3.08737 0.3793 H -6.1224 2.98821 -4.2041
H -11.92058 -2.7862 -1.3659 H -4.59084 3.50548 -4.9556
H -10.18295 -2.49956 -1.6459 H -4.85849 1.77888 -4.5881
C -11.73791 -2.82258 1.4319 H -2.51243 3.54036 -3.7211
H -12.73578 -1.1056 2.3253 H -2.37008 2.99286 -2.0382
H -10.99663 -0.88982 2.0483 H -2.64728 1.80851 -3.3497
H -10.57219 -4.16649 0.1757 C -7.69516 7.26999 -4.0466
H -9.69165 -2.73724 0.7503 O -9.24814 2.37948 -4.0086
H -11.48224 -3.31399 2.3854 H -8.68214 3.10025 -4.329
H -12.69722 -3.26566 1.0988 C -8.66958 1.1331 -4.3045
N -11.15372 -0.92742 -0.6813 H -8.43157 1.03459 -5.3779
H -7.00375 -0.97051 -0.3432 H -9.40622 0.35266 -4.0571
O -8.74328 4.38325 -0.1757
O -7.65787 4.89768 -0.0225
H -7.7495 0.94497 -3.7208
C -7.0888 6.15639 -4.9113
H -7.07178 5.19364 -4.3805
H -7.65763 6.03619 -5.8505
H -6.04986 6.41503 -5.1824
C -7.44012 8.59019 -4.7721
H -7.79105 9.46244 -4.1954

s09_2

Co -9.09849 3.26893 -2.6024
N -10.93743 3.35873 -3.0435
N -9.49758 1.54792 -1.888
C -11.54487 2.05241 -3.0005
C -11.58038 4.40974 -3.4275
C -10.93851 1.2804 -1.838
C -8.63037 0.75855 -1.3339
H -11.30628 1.51205 -3.9413
C -11.03182 5.72051 -3.5756
H -12.65766 4.30178 -3.6549
H -11.32521 1.72965 -0.8984
C -7.21553 0.94757 -1.2881
H -9.01199 -0.15639 -0.8495
C -11.92844 6.77657 -3.8666
C -9.62451 5.95794 -3.4593
C -6.45206 -0.10588 -0.7269
C -6.58118 2.13035 -1.79
C -11.49735 8.07551 -4.0098
H -12.98829 6.52069 -3.9697
C -9.17641 7.32464 -3.5375
O -8.76553 5.00937 -3.3038
C -5.07892 -0.06267 -0.6701
C -5.13801 2.16858 -1.7642
O -7.23798 3.12724 -2.2653
C -12.41877 9.24852 -4.3327
C -10.11136 8.30412 -3.8192
C -4.21497 -1.17 -0.073
C -4.46448 1.09419 -1.2131
C -4.39285 3.37982 -2.3327
C -13.8674 8.80205 -4.5015
C -11.96881 9.90925 -5.6393
C -12.36667 10.2754 -3.1972
H -9.76264 9.3383 -3.8913
C -5.05919 -2.32708 0.4518
C -3.26598 -1.72052 -1.142
C -3.39702 -0.60996 1.0948
H -3.37171 1.13443 -1.1903
C -4.75344 4.63418 -1.5303
C -4.75777 3.58234 -3.809
C -2.87718 3.20645 -2.2616
H -14.26633 8.34498 -3.5801

s09_3

Co -9.03788 3.2558 -1.9608
N -10.90933 3.48954 -1.8696
N -9.31117 1.71549 -0.8577
C -11.55874 2.2779 -1.4285
C -11.57454 4.50922 -2.2955

| | | | | | | | | |
|--------------|-----------|---------|--------------|-----------|---------|--------------|-----------|--------|
| H -6.35563 | 8.7194 | -4.9233 | H -15.94358 | -18.03068 | 5.2857 | Co -14.49924 | -8.70544 | 4.8397 |
| H -7.91809 | 8.61734 | -5.7668 | H -14.4978 | -17.00442 | 5.1468 | N -16.27842 | -9.21475 | 4.4832 |
| C -6.97625 | 7.33866 | -2.6938 | H -13.29796 | -2.97996 | 1.7 | N -14.97017 | -7.02573 | 4.0557 |
| H -7.34997 | 8.19224 | -2.1025 | H -13.57464 | -2.22455 | 3.2959 | C -17.11831 | -8.0654 | 4.2328 |
| H -7.12719 | 6.42043 | -2.1067 | H -12.41433 | -1.50594 | 2.1564 | C -16.76078 | -10.41224 | 4.5463 |
| H -5.89048 | 7.47898 | -2.8408 | H -11.75306 | -2.28381 | 5.0652 | C -16.30813 | -7.0402 | 3.456 |
| H -12.58839 | 2.45736 | -1.0641 | H -10.66043 | -1.5096 | 3.8829 | C -14.13677 | -6.05851 | 3.8462 |
| C -11.24534 | 0.29622 | 0.1 | H -10.16546 | -3.00498 | 4.7084 | H -17.41051 | -7.6111 | 5.2025 |
| H -10.52592 | -0.21269 | 0.7872 | H -11.07826 | -4.11011 | 1.1946 | C -16.05114 | -11.58906 | 4.9303 |
| H -12.12091 | 0.52823 | 0.7329 | H -10.26691 | -2.57627 | 1.6198 | H -17.83129 | -10.54668 | 4.302 |
| C -10.60961 | -1.16649 | -1.722 | H -9.76134 | -4.09696 | 2.3912 | H -16.18637 | -7.41783 | 2.4179 |
| C -12.60699 | -1.59827 | -0.4626 | H -11.41202 | -9.56917 | 4.658 | C -12.77532 | -5.98112 | 4.279 |
| C -11.13253 | -1.9595 | -2.9046 | H -10.23839 | -8.82728 | 3.5334 | H -14.48138 | -5.1842 | 3.2674 |
| H -9.98693 | -1.83182 | -1.0688 | H -9.65993 | -9.6661 | 4.9978 | C -16.76362 | -12.81352 | 4.9017 |
| H -9.9411 | -0.3625 | -2.0689 | H -11.81948 | -8.50605 | 6.9543 | C -14.68844 | -11.53405 | 5.3742 |
| C -13.20016 | -2.40957 | -1.5991 | H -10.08054 | -8.64248 | 7.3005 | C -12.05943 | -4.8072 | 3.9374 |
| H -12.08221 | -2.28581 | 0.2498 | H -10.88255 | -7.05473 | 7.4394 | C -12.15373 | -7.02336 | 5.0362 |
| H -13.40838 | -1.1045 | 0.1146 | H -8.39931 | -7.78335 | 5.8005 | C -16.1891 | -13.99818 | 5.2966 |
| C -12.1038 | -3.03457 | -2.4463 | H -8.78352 | -6.88283 | 4.3192 | H -17.80206 | -12.77934 | 4.5556 |
| H -10.28562 | -2.39502 | -3.462 | H -9.06841 | -6.14205 | 5.922 | C -14.07531 | -12.7783 | 5.7744 |
| H -11.64667 | -1.26175 | -3.5939 | C -12.19601 | -12.93894 | 5.8443 | O -14.01651 | -10.44058 | 5.4448 |
| H -13.87823 | -3.17844 | -1.1922 | O -14.98517 | -8.49986 | 7.2612 | C -10.75246 | -4.61329 | 4.3197 |
| H -13.81401 | -1.73726 | -2.227 | H -14.11659 | -8.09596 | 7.1028 | C -10.78976 | -6.82366 | 5.4532 |
| H -12.52866 | -3.58046 | -3.3052 | C -14.85741 | -9.50277 | 8.244 | O -12.76963 | -8.10736 | 5.3647 |
| H -11.55596 | -3.78242 | -1.8397 | H -14.00718 | -10.17665 | 8.0402 | C -16.91312 | -15.34159 | 5.2915 |
| N -11.69505 | -0.58063 | -0.9542 | H -15.77748 | -10.10766 | 8.2292 | C -14.83893 | -13.92962 | 5.7253 |
| H -6.55874 | -0.51365 | 0.7177 | O -14.79808 | -9.84178 | 3.1308 | C -9.93856 | -3.37 | 3.9717 |
| | | | O -13.68325 | -9.81746 | 2.654 | C -10.15862 | -5.6504 | 5.0815 |
| | | | H -14.74931 | -9.0686 | 9.2536 | C -10.0774 | -7.90048 | 6.2762 |
| s10_1 | | | C -11.72693 | -11.90794 | 6.88 | C -18.3508 | -15.20882 | 4.7998 |
| Co -14.97729 | -9.20742 | 5.1439 | H -12.09269 | -10.89865 | 6.6418 | C -16.9467 | -15.91436 | 6.7117 |
| N -16.69196 | -9.97726 | 5.2973 | H -12.07578 | -12.18294 | 7.8918 | C -16.18187 | -16.31803 | 4.3649 |
| N -15.88041 | -7.65493 | 4.4969 | H -10.62322 | -11.87715 | 6.9064 | H -14.36917 | -14.86708 | 6.0356 |
| C -17.72091 | -8.96518 | 5.2728 | C -11.44287 | -14.23765 | 6.1268 | C -10.75035 | -2.37169 | 3.1527 |
| C -16.95735 | -11.2248 | 5.5104 | H -11.67469 | -15.02707 | 5.3921 | C -9.48586 | -2.67317 | 5.2585 |
| C -17.3138 | -7.88403 | 4.2839 | H -10.35792 | -14.05056 | 6.0676 | C -8.71018 | -3.77272 | 3.15 |
| C -15.2927 | -6.58061 | 4.0749 | H -11.65537 | -14.63053 | 7.1363 | H -9.12032 | -5.50681 | 5.3937 |
| H -17.7972 | -8.50379 | 6.2801 | C -11.81129 | -12.47795 | 4.4328 | C -10.031 | -9.21532 | 5.489 |
| C -16.00341 | -12.27147 | 5.6822 | H -12.07708 | -13.24914 | 3.6894 | C -10.8045 | -8.11445 | 7.6101 |
| H -18.02148 | -11.51905 | 5.5817 | H -12.31965 | -11.54173 | 4.1567 | C -8.63833 | -7.50764 | 6.6039 |
| H -17.43023 | -8.30291 | 3.2615 | H -10.72175 | -12.30811 | 4.3681 | H -18.3975 | -14.82631 | 3.7661 |
| C -13.89388 | -6.28617 | 4.1471 | H -18.7134 | -9.38672 | 5.0231 | H -18.9445 | -14.53739 | 5.4431 |
| H -15.92296 | -5.81043 | 3.5976 | C -18.19953 | -6.65666 | 4.4454 | H -18.84421 | -16.19514 | 4.8087 |
| C -16.50445 | -13.58583 | 5.8564 | H -19.24257 | -6.99379 | 4.6675 | H -17.47947 | -15.23354 | 7.3971 |
| C -14.59371 | -12.00575 | 5.7176 | H -17.85703 | -6.11902 | 5.3499 | H -17.46584 | -16.88877 | 6.7257 |
| C -13.47872 | -5.03227 | 3.6365 | C -18.95995 | -6.21056 | 2.1963 | H -15.93507 | -16.0734 | 7.1194 |
| C -12.94635 | -7.19393 | 4.7135 | C -18.5788 | -4.39822 | 3.6968 | H -16.15182 | -15.93127 | 3.3323 |
| C -15.67145 | -14.66028 | 6.0583 | C -18.83296 | -5.26518 | 1.0238 | H -16.69389 | -17.2962 | 4.3493 |
| H -17.59168 | -13.71476 | 5.828 | H -20.03804 | -6.30406 | 2.4762 | H -15.14207 | -16.49505 | 4.6847 |
| C -13.71371 | -13.13582 | 5.8988 | H -18.61391 | -7.2146 | 1.8969 | H -11.08453 | -2.80271 | 2.1938 |
| O -14.09815 | -10.82547 | 5.6136 | C -18.45215 | -3.4572 | 2.5195 | H -11.64007 | -2.01781 | 3.7007 |
| C -12.16359 | -4.62877 | 3.6734 | H -19.63253 | -4.37936 | 4.0676 | H -10.13406 | -1.48741 | 2.9193 |
| C -11.57035 | -6.77566 | 4.7727 | H -17.93231 | -4.04877 | 4.5219 | H -10.35451 | -2.36572 | 5.8651 |
| O -13.28102 | -8.34896 | 5.1807 | N -19.23742 | -3.9258 | 1.3998 | H -8.89565 | -1.76997 | 5.024 |
| C -16.15933 | -16.09196 | 6.2609 | H -19.46525 | -5.61821 | 0.1916 | H -8.85558 | -3.32539 | 5.8848 |
| C -14.27952 | -14.38534 | 6.0664 | H -17.77545 | -5.27201 | 0.6606 | H -9.01085 | -4.26936 | 2.2121 |
| C -11.66861 | -3.29104 | 3.1302 | H -18.79879 | -2.45033 | 2.8105 | H -8.1089 | -2.8841 | 2.8894 |
| C -11.24302 | -5.53402 | 4.2576 | H -17.37092 | -3.36485 | 2.2446 | H -8.05299 | -4.46685 | 3.6987 |
| C -10.5178 | -7.70454 | 5.3843 | N -18.18082 | -5.742 | 3.326 | H -11.03966 | -9.60965 | 5.2985 |
| C -17.68127 | -16.18337 | 6.2216 | H -14.25313 | -4.38776 | 3.2078 | H -9.52581 | -9.06998 | 4.5182 |
| C -15.68652 | -16.60852 | 7.6233 | C -19.21505 | -3.00723 | 0.2836 | H -9.46176 | -9.97473 | 6.0544 |
| C -15.59988 | -16.98979 | 5.153 | H -19.39411 | -1.99107 | 0.6855 | H -11.83606 | -8.46339 | 7.455 |
| H -13.60682 | -15.23536 | 6.2113 | H -18.20564 | -2.96906 | -0.1952 | H -10.28143 | -8.87922 | 8.2108 |
| C -12.80596 | -2.46256 | 2.541 | C -22.21954 | -3.80454 | -2.7023 | H -10.82768 | -7.18061 | 8.1987 |
| C -11.02532 | -2.48117 | 4.2599 | C -22.53215 | -3.8975 | -1.3459 | H -8.16696 | -8.30824 | 7.1976 |
| C -10.63591 | -3.53473 | 2.0253 | C -21.55739 | -3.65136 | -0.3842 | H -8.02734 | -7.37247 | 5.6952 |
| H -10.19524 | -5.22277 | 4.298 | C -20.25392 | -3.31061 | -0.7624 | H -8.58152 | -6.5812 | 7.2009 |
| C -10.46123 | -9.01946 | 4.5974 | C -19.94823 | -3.22933 | -2.1223 | C -12.59884 | -12.81059 | 6.1799 |
| C -10.85232 | -7.99072 | 6.8543 | C -20.92454 | -3.46977 | -3.0882 | O -14.97905 | -8.03319 | 6.9021 |
| C -9.12276 | -7.08405 | 5.3496 | H -22.9862 | -3.99809 | -3.4581 | H -14.04504 | -7.80232 | 7.0316 |
| H -18.08775 | -15.85421 | 5.2503 | H -23.54725 | -4.16386 | -1.0361 | C -15.34669 | -9.04001 | 7.8177 |
| H -18.14955 | -15.57648 | 7.0151 | H -21.78995 | -3.73122 | 0.6826 | H -14.61436 | -9.86528 | 7.8436 |
| H -17.99954 | -17.2282 | 6.3746 | H -18.92731 | -2.97466 | -2.4286 | H -16.31171 | -9.45573 | 7.4883 |
| H -16.08669 | -15.98438 | 8.4402 | H -20.66828 | -3.40167 | -4.1496 | O -13.86583 | -9.31857 | 2.9137 |
| H -16.02889 | -17.64558 | 7.786 | | | | O -12.68647 | -9.56911 | 2.7846 |
| H -14.58771 | -16.60614 | 7.7095 | s10_2 | | | H -15.47782 | -8.63315 | 8.8357 |
| H -15.93434 | -16.64316 | 4.1606 | | | | C -12.30686 | -11.82557 | 7.32 |

| | | | | | | | | |
|-------------|-----------|---------|-------------|-----------|--------|--------------|-----------|---------|
| H -12.44145 | -10.7823 | 6.9996 | C -16.60813 | -15.99249 | 6.6514 | C -22.38077 | -5.21504 | 1.6215 |
| H -12.96739 | -12.02143 | 8.1841 | C -15.87209 | -16.38283 | 4.2933 | H -22.84119 | -6.13861 | 2.0517 |
| H -11.26494 | -11.9491 | 7.6648 | H -14.08168 | -14.85942 | 5.922 | H -22.88567 | -4.367 | 2.1234 |
| C -12.16887 | -14.19538 | 6.6615 | C -10.93841 | -2.30983 | 2.7968 | C -23.24076 | -4.97595 | -2.5951 |
| H -12.2792 | -14.96661 | 5.8806 | C -9.60649 | -2.52959 | 4.871 | C -22.29322 | -4.12927 | -2.0195 |
| H -11.10224 | -14.16959 | 6.9395 | C -8.86049 | -3.65401 | 2.7649 | C -22.00998 | -4.21703 | -0.6604 |
| H -12.73483 | -14.52024 | 7.5518 | H -9.15857 | -5.3484 | 5.0575 | C -22.6679 | -5.15334 | 0.1452 |
| C -11.74817 | -12.46187 | 4.9527 | C -9.95093 | -9.07342 | 5.2486 | C -23.60782 | -6.00256 | -0.4415 |
| H -11.89291 | -13.21334 | 4.1576 | C -10.70969 | -7.96377 | 7.3699 | C -23.89749 | -5.91338 | -1.8026 |
| H -12.009 | -11.47397 | 4.5451 | C -8.58873 | -7.30326 | 6.3028 | H -23.46316 | -4.90689 | -3.6639 |
| H -10.67584 | -12.45223 | 5.2176 | H -18.14989 | -14.97514 | 3.7268 | H -21.77092 | -3.39308 | -2.638 |
| H -18.05155 | -8.33318 | 3.7057 | H -18.67576 | -14.69351 | 5.4119 | H -21.2601 | -3.56497 | -0.2007 |
| C -17.00158 | -5.68349 | 3.4514 | H -18.52895 | -16.35119 | 4.7865 | H -24.11999 | -6.74674 | 0.1788 |
| H -16.94371 | -5.28253 | 4.4817 | H -17.15169 | -15.32659 | 7.3429 | H -24.63682 | -6.58633 | -2.2469 |
| H -16.45415 | -4.96003 | 2.8004 | H -17.09282 | -16.98419 | 6.68 | | | |
| C -19.12841 | -4.5711 | 3.4285 | H -15.58437 | -16.11414 | 7.0413 | s10_4 | | |
| C -18.57091 | -6.06065 | 1.6585 | H -15.87386 | -16.00122 | 3.2583 | Co -15.31277 | -9.37476 | 5.0424 |
| C -20.59475 | -4.71955 | 3.0893 | H -16.34979 | -17.37833 | 4.2919 | N -16.91035 | -10.26262 | 5.5115 |
| H -18.72248 | -3.6758 | 2.8968 | H -14.82123 | -16.52161 | 4.5954 | N -16.44123 | -7.95984 | 4.43 |
| H -19.01316 | -4.3897 | 4.5111 | H -11.28794 | -2.77116 | 1.8577 | C -18.02278 | -9.34425 | 5.5648 |
| C -20.03701 | -6.20269 | 1.319 | H -11.82155 | -1.96826 | 3.363 | C -17.02674 | -11.50288 | 5.8586 |
| H -18.1243 | -5.2535 | 1.0273 | H -10.35408 | -1.41447 | 2.5264 | C -17.86052 | -8.32484 | 4.4465 |
| H -18.04916 | -6.9986 | 1.4019 | H -10.4658 | -2.23305 | 5.496 | C -16.01629 | -6.89193 | 3.8313 |
| N -20.76867 | -5.00753 | 1.6827 | H -9.04918 | -1.61573 | 4.6001 | H -17.99721 | -8.80525 | 6.5353 |
| H -21.12934 | -3.78607 | 3.3375 | H -8.94019 | -3.14996 | 5.4923 | C -15.96528 | -12.44792 | 5.9791 |
| H -21.03265 | -5.52955 | 3.7239 | H -9.17365 | -4.17935 | 1.8469 | H -18.03911 | -11.87382 | 6.1069 |
| H -20.15177 | -6.38778 | 0.2374 | H -8.29202 | -2.75522 | 2.4681 | H -18.07297 | -8.85571 | 3.4941 |
| H -20.44893 | -7.09629 | 1.852 | H -8.1687 | -4.31756 | 3.3089 | C -14.65432 | -6.49263 | 5.6533 |
| N -18.39135 | -5.76634 | 3.0683 | H -10.95096 | -9.50074 | 5.0855 | H -16.77457 | -6.20738 | 3.4157 |
| H -12.59002 | -4.0488 | 3.3521 | H -9.47046 | -8.9289 | 4.2653 | C -16.31384 | -13.77405 | 6.3383 |
| C -22.16035 | -5.07258 | 1.2971 | H -9.34749 | -9.80612 | 5.8138 | C -14.5947 | -12.06728 | 5.7907 |
| H -22.6666 | -5.96664 | 1.7381 | H -11.73166 | -8.35106 | 7.2452 | C -14.44105 | -5.26844 | 2.9745 |
| H -22.669 | -4.19302 | 1.7372 | H -10.1461 | -8.69949 | 7.9703 | C -13.55378 | -7.26338 | 4.139 |
| C -22.79194 | -4.98534 | -2.9653 | H -10.75203 | -7.02143 | 7.9438 | C -15.36443 | -14.75073 | 6.5215 |
| C -23.51192 | -5.87504 | -2.1728 | H -8.0785 | -8.07695 | 6.9001 | H -17.37873 | -13.99277 | 6.4713 |
| C -23.29605 | -5.91558 | -0.7958 | H -8.00287 | -7.16626 | 5.378 | C -13.59507 | -13.09476 | 5.9639 |
| C -22.3677 | -5.06441 | -0.1936 | H -8.54861 | -6.36403 | 6.8809 | O -14.2317 | -10.8706 | 5.4993 |
| C -21.6458 | -4.17643 | -0.9991 | C -12.38295 | -12.74255 | 6.0253 | C -13.17876 | -4.76373 | 2.7624 |
| C -21.85531 | -4.13748 | -2.3739 | O -14.8981 | -8.05226 | 6.7812 | C -12.22923 | -6.73929 | 3.933 |
| H -22.95643 | -4.95461 | -4.0464 | H -13.9705 | -7.78094 | 6.8736 | O -12.71052 | -8.38481 | 4.7596 |
| H -24.24326 | -6.5487 | -2.6291 | C -15.18407 | -9.07147 | 7.7121 | C -15.68563 | -16.18977 | 6.915 |
| H -23.85798 | -6.62242 | -0.1748 | H -14.41735 | -9.86536 | 7.7069 | C -14.01464 | -14.36222 | 6.3204 |
| H -20.90535 | -3.52305 | -0.5262 | H -16.14436 | -9.52794 | 7.4254 | C -12.90107 | -3.45141 | 2.0345 |
| H -21.2835 | -3.43879 | -2.9921 | O -13.83713 | -9.30574 | 2.7593 | C -12.1009 | -5.53456 | 3.2635 |
| | | | O -12.65453 | -9.52454 | 2.6084 | C -11.01179 | -7.51711 | 4.4405 |
| | | | H -15.28838 | -8.66825 | 8.7347 | C -17.18542 | -16.4102 | 7.0833 |
| | | | C -12.10372 | -11.73453 | 7.1485 | C -15.00305 | -16.52455 | 8.2448 |
| | | | H -12.27863 | -10.70003 | 6.819 | C -15.18337 | -17.14611 | 5.8288 |
| | | | H -12.74197 | -11.94178 | 8.0266 | H -13.25081 | -15.13314 | 6.4555 |
| | | | H -11.05239 | -11.81971 | 7.4758 | C -14.18892 | -2.7695 | 1.5834 |
| | | | C -11.89966 | -14.1064 | 6.5161 | C -12.15588 | -2.49174 | 2.9673 |
| | | | H -11.99511 | -14.8901 | 5.7458 | C -12.04547 | -3.72308 | 0.7933 |
| | | | H -10.83049 | -14.04157 | 6.7776 | H -11.09204 | -5.14392 | 3.1028 |
| | | | H -12.44133 | -14.43949 | 7.4184 | C -10.96237 | -8.89958 | 3.7796 |
| | | | C -11.56556 | -12.38172 | 4.7795 | C -11.07745 | -7.66935 | 5.9659 |
| | | | H -11.69689 | -13.14873 | 3.997 | C -9.70209 | -6.80226 | 4.114 |
| | | | H -11.86979 | -11.40997 | 4.3641 | H -17.73664 | -16.21419 | 6.148 |
| | | | H -10.48996 | -12.32974 | 5.0254 | H -17.60883 | -15.76813 | 7.8743 |
| | | | H -18.04676 | -8.46223 | 3.6758 | H -17.3822 | -17.45729 | 7.3683 |
| | | | C -17.09567 | -5.76123 | 3.463 | H -15.35806 | -15.85601 | 9.0474 |
| | | | H -16.99091 | -5.38908 | 4.5003 | H -15.22298 | -17.5645 | 8.5438 |
| | | | H -16.60443 | -5.00382 | 2.8059 | H -13.90713 | -16.4225 | 8.1863 |
| | | | C -19.24901 | -4.71268 | 3.6029 | H -15.66719 | -16.92982 | 4.8614 |
| | | | C -18.75392 | -6.1202 | 1.7479 | H -15.40919 | -18.19288 | 6.0981 |
| | | | C -20.72766 | -4.88931 | 3.3399 | H -14.09376 | -17.07139 | 5.6805 |
| | | | H -18.89758 | -3.78661 | 3.0852 | H -14.7678 | -3.39207 | 0.8792 |
| | | | H -19.07742 | -4.56933 | 4.6837 | H -14.84598 | -2.52046 | 2.4345 |
| | | | C -20.2329 | -6.28999 | 1.4858 | H -13.95177 | -1.82449 | 1.0652 |
| | | | H -18.36495 | -5.27886 | 1.1233 | H -12.75663 | -2.27322 | 3.8664 |
| | | | H -18.22327 | -7.0335 | 1.428 | H -11.94674 | -1.53606 | 2.4552 |
| | | | N -20.97222 | -5.12897 | 1.9349 | H -11.19032 | -2.90386 | 3.3032 |
| | | | H -21.27122 | -3.98095 | 3.6533 | H -12.56591 | -4.40549 | 0.1003 |
| | | | H -21.10853 | -5.7343 | 3.9655 | H -11.83308 | -2.78322 | 0.2539 |
| | | | H -20.40433 | -6.43863 | 0.4061 | H -11.077 | -4.18297 | 1.0495 |
| | | | H -20.59139 | -7.21317 | 2.0067 | H -11.8371 | -9.50886 | 4.0494 |
| | | | N -18.50184 | -5.87183 | 3.1555 | H -10.9313 | -8.80433 | 2.6802 |
| | | | H -12.72508 | -4.0306 | 3.0881 | | | |

s10_3

| | | | | | | | | |
|-------------|-----------|--------|--|--|--|--|--|--|
| Co -14.4519 | -8.71203 | 4.7037 | | | | | | |
| N -16.21991 | -9.28366 | 4.3921 | | | | | | |
| N -15.00225 | -7.05107 | 3.9329 | | | | | | |
| C -17.10911 | -8.16428 | 4.1786 | | | | | | |
| C -16.65796 | -10.49757 | 4.4663 | | | | | | |
| C -16.36481 | -7.09686 | 3.3923 | | | | | | |
| C -14.20196 | -6.06709 | 3.6771 | | | | | | |
| H -17.39119 | -7.73431 | 5.1622 | | | | | | |
| C -15.8983 | -11.64856 | 4.8329 | | | | | | |
| H -17.72931 | -10.66937 | 4.2508 | | | | | | |
| H -16.28099 | -7.44094 | 2.3389 | | | | | | |
| C -12.82863 | -5.94712 | 4.0593 | | | | | | |
| H -14.59078 | -5.21129 | 3.0983 | | | | | | |
| C -16.56798 | -12.89721 | 4.8243 | | | | | | |
| C -14.52887 | -11.54412 | 5.2468 | | | | | | |
| C -12.15609 | -4.76167 | 3.6721 | | | | | | |
| C -12.15584 | -6.95632 | 4.8173 | | | | | | |
| C -15.94444 | -14.05917 | 5.2124 | | | | | | |
| H -17.61412 | -12.90081 | 4.5004 | | | | | | |
| C -13.86614 | -12.76349 | 5.6444 | | | | | | |
| O -13.89261 | -10.42843 | 5.2942 | | | | | | |
| C -10.84434 | -4.52413 | 4.0111 | | | | | | |
| C -10.78746 | -6.70913 | 5.192 | | | | | | |
| O -12.73059 | -8.05143 | 5.1821 | | | | | | |
| C -16.62048 | -15.4272 | 5.2278 | | | | | | |
| C -14.58974 | -13.94095 | 5.6153 | | | | | | |
| C -10.07585 | -3.26703 | 3.6131 | | | | | | |
| C -10.20054 | -5.52732 | 4.7777 | | | | | | |
| C -10.0214 | -7.74792 | 6.0158 | | | | | | |
| C -18.07072 | -15.3483 | 4.762 | | | | | | |

H -10.05173 -9.43865 4.0968 C -15.94001 -13.95797 4.8067 H -15.54832 -8.30953 -0.8931
 H -11.9676 -8.23623 6.2767 C -14.89874 -11.81605 5.51 H -17.08311 -9.05328 -0.4321
 H -10.19052 -8.21559 6.3327 C -12.8635 -5.52502 2.2872 C -17.00802 -6.26556 -0.6445
 H -11.09302 -6.68139 6.4586 C -13.38407 -7.04295 4.1697 C -17.58287 -7.12576 1.5077
 H -8.85572 -7.39544 4.4982 C -15.59769 -14.57437 5.9864 C -17.16723 -4.85442 -0.1228
 H -9.55241 -6.68573 3.0271 H -16.48807 -14.49891 4.028 H -17.965 -6.591 -1.1214
 H -9.64086 -5.80414 4.5809 C -14.52334 -12.46366 6.7443 H -16.23075 -6.28214 -1.4294
 C -12.12049 -12.77999 5.6956 O -14.60674 -10.57831 5.3269 C -17.74796 -5.7123 2.0177
 O -15.07478 -8.49015 7.0665 C -12.20303 -4.64241 3.1113 H -18.57273 -7.52552 1.1738
 H -14.25026 -8.08004 6.7569 C -12.69242 -6.12907 5.04 H -17.23045 -7.74538 2.3475
 C -14.79201 -9.38364 8.1188 O -13.91787 -8.11136 4.6612 N -18.13176 -4.8062 0.9527
 H -13.94524 -10.05058 7.8818 C -15.93108 -16.02595 6.3188 H -17.49862 -4.18816 -0.9387
 H -15.68296 -10.01208 8.2747 C -14.88705 -13.78446 6.9265 H -16.16656 -4.48683 0.2194
 O -15.37378 -10.15254 3.0901 C -11.5623 -3.34386 2.6289 H -18.51327 -5.69119 2.8119
 O -14.32252 -10.17582 2.4832 C -12.14227 -4.9876 4.4836 H -16.78108 -5.39086 2.4822
 H -14.583 -8.84679 9.0608 C -12.57149 -6.44 6.5348 N -16.62133 -7.15711 0.4254
 C -11.63872 -11.59038 6.5376 C -16.6959 -16.70515 5.1875 H -12.95915 -5.32817 1.2142
 H -12.13921 -10.65611 6.2433 C -16.79868 -16.08004 7.58 C -18.3441 -3.45788 1.4293
 H -11.82494 -11.77146 7.6118 C -14.63662 -16.81005 6.556 H -17.43159 -3.05728 1.9367
 H -10.55025 -11.45526 6.4083 H -14.60252 -14.26734 7.8657 H -18.50285 -2.81216 0.5437
 C -11.21471 -13.96424 6.0286 C -11.72783 -3.1539 1.1246 C -21.75616 -3.02455 4.0266
 H -11.44462 -14.85506 5.4201 C -12.22235 -2.15465 3.3339 C -20.55155 -2.40532 4.3481
 H -10.16704 -13.69251 5.8184 C -10.06361 -3.35758 2.945 C -19.44342 -2.55983 3.5161
 H -11.27549 -14.24725 7.0939 H -11.61703 -4.29605 5.1484 C -19.52585 -3.32464 2.3511
 C -11.95037 -12.47107 4.203 C -11.83234 -7.76883 6.7322 C -20.73979 -3.94674 2.0384
 H -12.21953 -13.35156 3.5944 C -13.9618 -6.51678 7.1794 C -21.84571 -3.79893 2.8696
 H -12.58172 -11.62742 3.8863 C -11.78819 -5.36037 7.279 H -22.62609 -2.9086 4.6796
 H -10.89904 -12.21528 3.9805 H -16.1114 -16.72706 4.2522 H -20.46965 -1.80233 5.2573
 H -18.99596 -9.86697 5.4979 H -17.65667 -16.20325 4.9822 H -18.49331 -2.07951 3.7759
 C -18.85246 -7.18699 4.6474 H -16.92124 -17.74986 5.4597 H -20.79616 -4.56123 1.1339
 H -19.85018 -7.64552 4.869 H -17.74344 -15.53039 7.4305 H -22.78866 -4.29166 2.6136
 H -18.55335 -6.64485 5.5654 H -17.04781 -17.1249 7.8357
 C -19.42058 -6.77027 2.3176 H -16.29066 -15.63883 8.453
 C -19.72983 -5.06238 3.9533 H -13.9973 -16.79306 5.6572
 C -19.36551 -5.71467 1.233 H -14.85958 -17.8641 6.7978
 H -20.4655 -7.15479 2.4142 H -14.04793 -16.39717 7.3914
 H -18.78149 -7.61905 2.0185 H -11.25147 -3.96835 0.553
 C -19.67028 -4.00766 2.8692 H -12.79023 -3.10227 0.8314
 H -20.79609 -5.3402 4.1401 H -11.25336 -2.20914 0.8105
 H -19.32625 -4.6522 4.8954 H -13.30274 -2.11852 3.1125
 N -20.13461 -4.55325 1.6146 H -11.77209 -1.20406 2.9979
 H -19.77483 -6.1277 0.2936 H -12.10799 -2.20589 4.429
 H -18.29304 -5.46406 1.0402 H -9.56393 -4.20206 2.441
 H -20.30851 -3.15045 3.1496 H -9.58568 -2.42316 2.6021
 H -18.62077 -3.62968 2.8006 H -9.86736 -3.45119 4.0255
 N -18.95278 -6.22493 3.5756 H -12.38696 -8.6098 6.2906
 H -15.32868 -4.73193 2.6226 H -10.8316 -7.73025 6.2678
 C -20.32871 -3.57714 0.5565 H -11.69576 -7.96982 7.8099
 H -20.83644 -4.08813 -0.2821 H -14.56014 -7.33529 6.7525
 H -21.03084 -2.81098 0.9334 H -13.86842 -6.70657 8.2633
 C -16.70974 -1.69026 -0.8631 H -14.50933 -5.56683 7.0491
 C -17.18282 -2.84855 -1.4761 H -11.72291 -5.62609 8.347
 C -18.35641 -3.44705 -1.0233 H -10.75545 -5.26304 6.9033
 C -19.07598 -2.90342 0.046 H -12.27394 -4.37136 7.2169
 C -18.58861 -1.73967 0.6511 C -13.68683 -11.70914 7.782
 C -17.41525 -1.13696 0.2037 O -16.57978 -8.4595 4.5702
 H -15.79092 -1.21557 -1.2198 H -15.94965 -7.85104 4.9926
 H -16.63822 -3.28454 -2.3187 C -17.31613 -9.14502 5.5583
 H -18.73366 -4.34961 -1.5185 H -16.66449 -9.54895 6.3519
 H -19.1506 -1.29035 1.4783 H -17.82112 -9.99439 5.072
 H -17.05212 -0.22442 0.686 O -12.96777 -10.43399 3.0993
 O -11.97061 -10.14669 3.7239
 H -18.08885 -8.49865 6.0098
 C -14.35386 -10.38928 8.1933
 H -14.3833 -9.67247 7.3598
 H -15.38555 -10.56603 8.5478
 H -13.79221 -9.92864 9.0252
 C -13.48563 -12.52752 9.0564
 H -12.94657 -13.47174 8.871
 H -12.87929 -11.94654 9.7708
 H -14.44257 -12.76628 9.5523
 C -12.30158 -11.43373 7.1843
 H -11.78214 -12.38182 6.9625
 H -12.36793 -10.85135 6.2532
 H -11.67945 -10.86683 7.8997
 H -16.73029 -11.13781 0.9798
 C -16.22256 -8.46026 -0.0309

s10_5

Co -14.78747 -9.53816 3.7489 H -15.54832 -8.30953 -0.8931
 N -15.81789 -10.85499 2.8756 H -17.08311 -9.05328 -0.4321
 N -14.83463 -8.59916 2.0894 C -17.00802 -6.26556 -0.6445
 C -16.45189 -10.33299 1.687 H -17.58287 -7.12576 1.5077
 C -16.05334 -12.05146 3.3073 C -17.16723 -4.85442 -0.1228
 C -15.51038 -9.33351 1.0225 H -17.965 -6.591 -1.1214
 C -14.1693 -7.51842 1.8363 H -16.23075 -6.28214 -1.4294
 H -17.39176 -9.82131 1.9758 C -17.74796 -5.7123 2.0177
 C -15.60934 -12.60478 4.5447 H -18.57273 -7.52552 1.1738
 H -16.67468 -12.71269 2.6743 H -17.23045 -7.74538 2.3475
 H -14.73781 -9.9302 0.4937 N -18.13176 -4.8062 0.9527
 C -13.45868 -6.71068 2.7815 H -17.49862 -4.18816 -0.9387
 H -14.13853 -7.15058 0.7988 H -16.16656 -4.48683 0.2194
 H -18.51327 -5.69119 2.8119
 H -16.78108 -5.39086 2.4822
 N -16.62133 -7.15711 0.4254
 H -12.95915 -5.32817 1.2142
 C -18.3441 -3.45788 1.4293
 H -17.43159 -3.05728 1.9367
 H -18.50285 -2.81216 0.5437
 C -21.75616 -3.02455 4.0266
 C -20.55155 -2.40532 4.3481
 C -19.44342 -2.55983 3.5161
 C -19.52585 -3.32464 2.3511
 C -20.73979 -3.94674 2.0384
 C -21.84571 -3.79893 2.8696
 H -22.62609 -2.9086 4.6796
 H -20.46965 -1.80233 5.2573
 H -18.49331 -2.07951 3.7759
 H -20.79616 -4.56123 1.1339
 H -22.78866 -4.29166 2.6136
s10_6
 Co -14.58283 -9.326 3.9757
 N -15.86929 -10.46814 3.2057
 N -14.78952 -8.25905 2.4049
 C -16.63366 -9.78957 2.185
 C -16.1641 -11.66377 3.598
 C -15.72689 -8.8322 1.4261
 C -13.99428 -7.29133 2.0846
 H -17.43653 -9.19638 2.6645
 C -15.60434 -12.34674 4.7195
 H -16.94417 -12.21036 3.0353
 H -15.11546 -9.42258 0.7114
 C -12.99857 -6.6811 2.9102
 H -14.08265 -6.85557 1.0729
 C -16.04201 -13.6729 4.9582
 C -14.6856 -11.69922 5.6091
 C -12.26088 -5.61414 2.3409
 C -12.77487 -7.08871 4.2634
 C -15.61377 -14.39498 6.0471
 H -16.74789 -14.10297 4.2398
 C -14.22602 -12.45527 6.749
 O -14.28431 -10.48827 5.4449
 C -11.31274 -4.92086 3.0569
 C -11.79632 -6.35827 5.026
 O -13.41773 -8.06568 4.8091
 C -16.06007 -15.82178 6.3538
 C -14.704 -13.74156 6.9167
 C -10.48833 -3.76919 2.488
 C -11.11829 -5.32718 4.4002
 C -11.50984 -6.74284 6.4807
 C -17.03269 -16.34974 5.3042
 C -16.76145 -15.86018 7.715
 C -14.84097 -16.74886 6.3817
 H -14.35412 -14.30711 7.7849
 C -10.84294 -3.48249 1.0325
 C -10.74931 -2.49736 3.3009
 C -8.99901 -4.12123 2.5548
 H -10.36886 -4.7825 4.9809
 C -11.01303 -8.19124 6.5471
 C -12.77465 -6.58888 7.3345
 C -10.43412 -5.85503 7.1035
 H -16.57887 -16.37335 4.299
 H -17.95212 -15.74214 5.2534
 H -17.33311 -17.38096 5.5545

H -17.64968 -15.20585 7.7174 H -24.63625 -2.91107 1.313 O -14.46875 -10.19367 3.047
H -17.0921 -16.8864 7.9532 O -13.29664 -10.17572 2.7364
H -16.10058 -15.52831 8.5323 H -15.38078 -8.81592 8.998
H -14.32331 -16.7459 5.4076 C -11.85688 -11.61385 7.4435
H -15.14697 -17.78631 6.6035 H -12.26846 -10.67508 7.0453
H -14.10869 -16.44951 7.1491 H -12.33018 -11.82369 8.4198
H -10.64816 -4.35273 0.3831 H -10.77662 -11.46871 7.6215
H -11.90176 -3.1952 0.9163 C -11.29068 -13.97432 7.0156
H -10.23147 -2.64622 0.6544 H -11.34 -14.85047 6.3472
H -11.81562 -2.21739 3.2608 H -10.22698 -13.69946 7.1088
H -10.15923 -1.65379 2.9018 H -11.64115 -14.28154 8.0162
H -10.47563 -2.61842 4.3617 C -11.49605 -12.4337 5.095
H -8.7842 -5.03164 1.9702 H -11.57921 -13.29684 4.4123
H -8.38695 -3.29882 2.1448 H -12.02034 -11.58064 4.6391
H -8.66023 -4.30113 3.5881 H -10.42611 -12.1734 5.1822
H -11.78103 -8.89658 6.1988 H -18.61936 -9.88309 4.3356
H -10.11127 -8.32445 5.9242 C -18.21579 -7.19973 3.5165
H -10.74615 -8.4527 7.5869 H -19.25349 -7.60421 3.6226
H -13.57162 -7.26962 7.0012 H -18.05838 -6.54156 4.392
H -12.55265 -6.82964 8.3891 C -18.63094 -5.06779 2.4707
H -13.15247 -5.55223 7.2975 C -18.64783 -7.06874 1.144
H -10.26242 -6.16631 8.1471 C -18.40152 -4.24877 1.2108
H -9.46895 -5.93888 6.5757 H -18.12761 -4.58225 3.3267
H -10.72702 -4.79117 7.1229 H -19.72073 -5.09969 2.7215
C -13.18811 -11.85201 7.6997 C -18.41647 -6.22757 -0.102
O -16.07883 -8.15199 5.1578 H -18.17437 -8.05778 1.0164
H -15.31751 -7.72451 5.5861 H -19.74176 -7.25941 1.2849
C -16.84328 -7.85487 6.11 N -18.93592 -4.88111 0.0183
H -16.22046 -9.52574 6.7271 H -17.31039 -4.11817 1.0738
H -17.57384 -9.47184 5.5637 H -18.83652 -3.24157 1.3226
O -12.9936 -10.33906 2.987 H -17.326 -6.16588 -0.2811
O -11.90207 -10.2752 3.5084 H -18.86491 -6.71848 -0.9823
H -17.40376 -8.16807 6.7683 N -18.09288 -6.40881 2.3125
C -13.65221 -10.49733 8.2536 H -14.3362 -4.66867 2.7291
H -13.73128 -9.73629 7.4636 C -20.37021 -4.7587 -0.1504
H -14.63458 -10.5967 8.7501 H -20.64211 -5.35638 -1.0422
H -12.93412 -10.13627 9.0111 H -20.96573 -5.19223 0.6865
C -12.91865 -12.75672 8.901 C -21.65741 -0.69799 -0.8109
H -12.51368 -13.73954 8.6069 C -20.54774 -1.20458 -1.4884
H -12.16707 -12.28203 9.5534 C -20.12811 -2.51174 -1.2653
H -13.82578 -12.92323 9.5077 C -20.81131 -3.33473 -0.3629
C -11.86793 -11.69086 6.9361 C -21.91428 -2.81566 0.3174
H -11.48082 -12.67702 6.6271 C -22.33973 -1.50652 0.0935
H -11.99074 -11.07278 6.0344 H -21.98645 0.33041 -0.9863
H -11.10619 -11.21275 7.5773 H -20.00529 -0.57227 -2.1977
H -17.12922 -10.49752 1.4932 H -19.25123 -2.91454 -1.7824
C -16.54714 -7.84109 0.5999 H -22.44872 -3.44906 1.0349
H -15.87527 -7.0743 0.1429 H -23.20627 -1.11525 0.6347
H -16.95785 -8.40741 -0.2564
C -17.27316 -6.32962 2.3625
C -18.58021 -6.58798 0.3845
C -18.4945 -5.81913 3.0912
H -16.69367 -5.46447 1.9547
H -16.62829 -6.85039 3.0868
C -19.79883 -6.08201 1.1224
H -18.09067 -5.73067 -0.1398
H -18.89163 -7.3092 -0.3913
N -19.41869 -5.17425 2.1846
H -18.18458 -5.09922 3.8685
H -18.97873 -6.6802 3.619
H -20.47094 -5.56256 0.418
H -20.36266 -6.95614 1.5338
N -17.65711 -7.23675 1.2937
H -12.47832 -5.35486 1.2996
C -20.56239 -4.61567 2.8684
H -21.21904 -5.41689 3.29
H -20.18408 -4.04935 3.7415
C -22.91516 -1.92863 0.4549
C -21.52171 -1.88146 0.4073
C -20.76443 -2.7575 1.1783
C -21.38735 -3.69662 2.0081
C -22.78242 -3.74237 2.0417
C -23.54397 -2.86193 1.2745
H -23.51006 -1.23933 -0.1514
H -21.02143 -1.15262 -0.2376
H -19.67039 -2.73579 1.1407
H -23.27944 -4.48204 2.6796
Co -14.95867 -9.38567 4.94
N -16.6238 -10.27276 4.9482
N -15.86625 -7.9809 4.0198
C -17.70445 -9.35746 4.6699
C -16.83116 -11.51286 5.2498
C -17.2302 -8.35383 3.6306
C -15.30793 -6.89229 3.5957
H -17.95688 -8.8029 5.5986
C -15.84399 -12.45547 5.6638
H -17.87137 -11.88664 5.2016
H -17.15821 -8.88776 2.659
C -13.96406 -6.4674 3.8438
H -15.91683 -6.21983 2.9673
C -16.27608 -13.78385 5.9043
C -14.47703 -12.07206 5.8711
C -13.58291 -5.21301 3.3081
C -13.03915 -7.24908 4.6033
C -15.41399 -14.76114 6.341
H -17.33492 -14.00399 5.7315
C -13.5638 -13.10025 6.3111
O -14.05005 -10.87256 5.7011
C -12.32631 -4.68752 3.5037
C -11.72651 -6.70195 4.8277
O -13.34163 -8.40044 5.1007
C -15.82888 -16.20295 6.6202
C -14.063 -14.3705 6.5282
C -11.87074 -3.34159 2.9463
C -11.43068 -5.468 4.2764
C -10.70502 -7.48756 5.6547
C -17.31541 -16.42525 6.3614
C -15.5439 -16.54612 8.0856
C -15.04076 -17.15156 5.7116
H -13.36506 -15.14162 6.8664
C -12.97351 -2.657 2.145
C -11.47435 -2.41403 4.0991
C -10.66792 -3.54778 2.0206
H -10.43038 -5.05874 4.4444
C -10.41253 -8.83482 4.9836
C -11.23799 -7.71532 7.0758
C -9.3801 -6.73894 5.784
H -17.58426 -16.22015 5.3113
H -17.94434 -15.7906 7.0087
H -17.58111 -17.47496 6.5708
H -16.10906 -15.88198 8.7613
H -15.83754 -17.58763 8.3051
H -14.47521 -16.44479 8.3356
H -15.23647 -16.92996 4.6488
H -15.32917 -18.20037 5.9013
H -13.95328 -17.07406 5.8733
H -13.28945 -3.2638 1.2795
H -13.8632 -2.44998 2.7637
H -12.61121 -1.69082 1.7556
H -12.32827 -2.24243 4.7762
H -11.14167 -1.43443 3.7132
H -10.64953 -2.82896 4.7011
H -10.93132 -4.20611 1.1756
H -10.32463 -2.58258 1.6086
H -9.81361 -4.00529 2.5456
H -11.31452 -9.46068 4.9185
H -10.02011 -8.6828 3.9632
H -9.64812 -9.38672 5.5595
H -12.15503 -8.3235 7.0692
H -10.48763 -8.25165 7.6831
H -11.44866 -6.75279 7.5745
H -8.67801 -7.33873 6.3866
H -8.90315 -6.56609 4.8043
H -9.49614 -5.76467 6.2894
C -12.07484 -12.78149 6.4719
O -15.30825 -8.47061 6.9427
H -14.44413 -8.03285 6.8783
C -15.30235 -9.3572 8.0387
H -14.40284 -9.99691 8.0504
H -16.18136 -10.0137 7.9435

s10_8

Co -14.94369 -9.4668 3.814
N -16.2205 -10.73148 3.2446
N -15.33211 -8.54752 2.1841
C -17.10012 -10.178 2.2419
C -16.40662 -11.90849 3.7448
C -16.30862 -9.2477 1.3351
C -14.62852 -7.56522 1.7275
H -17.89154 -9.58312 2.7376
C -15.71654 -12.46975 4.8612
H -17.19205 -12.54096 3.2899
H -15.72208 -9.86858 0.6255
C -13.6215 -6.82595 2.4265
H -14.82004 -7.21943 0.6956
C -16.04452 -13.79897 5.2253
C -14.77669 -11.70264 5.6252
C -13.01863 -5.75397 1.7332
C -13.26541 -7.11096 3.785
C -15.48567 -14.41108 6.3221
H -16.77269 -14.32423 4.5982
C -14.18511 -12.34115 6.7763
O -14.46708 -10.48689 5.3412
C -12.07984 -4.93149 2.3204
C -12.29631 -6.25542 4.4095
O -13.78985 -8.08739 4.4475
C -15.80602 -15.83817 6.7578
C -14.56038 -13.63904 7.0696

| | | | | | | | | |
|-------------|-----------|---------|--------------|-----------|--------|---------------|-----------|---------|
| C -11.4576 | -3.77585 | 1.5348 | H -19.50322 | -6.93558 | 3.534 | H -8.34421 | -2.84018 | 2.633 |
| C -11.75096 | -5.21959 | 3.6636 | H -18.72622 | -5.3404 | 3.5928 | H -8.23249 | -4.40725 | 3.4665 |
| C -11.87382 | -6.50639 | 5.8606 | N -18.318 | -7.74305 | 1.2215 | H -11.05798 | -9.5889 | 5.2156 |
| C -16.81892 | -16.49997 | 5.8292 | H -13.3306 | -5.58404 | 0.6947 | H -9.57165 | -9.02764 | 4.3985 |
| C -16.39331 | -15.8262 | 8.1724 | C -19.81415 | -4.34373 | 1.4121 | H -9.45835 | -9.90523 | 5.9475 |
| C -14.5265 | -16.68037 | 6.7439 | H -18.93449 | -4.36292 | 0.728 | H -11.83704 | -8.43013 | 7.3715 |
| H -14.4482 | -14.11557 | 7.9438 | H -20.68128 | -4.09369 | 0.7698 | H -10.25703 | -8.79253 | 8.1018 |
| C -10.73585 | -4.32381 | 0.3002 | C -19.24869 | -1.17692 | 4.2783 | H -10.84772 | -7.10911 | 8.0731 |
| C -12.55832 | -2.80711 | 1.0915 | C -20.38769 | -1.98171 | 4.3334 | H -8.1798 | -8.18746 | 7.0361 |
| C -10.4453 | -2.99222 | 2.3652 | C -20.56517 | -3.00689 | 3.4104 | H -8.09343 | -7.27506 | 5.5156 |
| H -11.01129 | -4.58297 | 4.1511 | C -19.60926 | -3.24227 | 2.4157 | H -8.63658 | -6.47106 | 7.0185 |
| C -11.25652 | -7.90351 | 5.9877 | C -18.46865 | -2.43862 | 2.3754 | C -12.52713 | -12.81484 | 6.1759 |
| C -13.08213 | -6.3856 | 6.798 | C -18.28834 | -1.40839 | 3.298 | O -14.99298 | -8.08224 | 6.8955 |
| C -10.83229 | -5.49527 | 6.3362 | H -19.10956 | -0.37132 | 5.0052 | H -14.06199 | -7.82503 | 6.9928 |
| H -16.44377 | -16.56722 | 4.7939 | H -21.14366 | -1.80604 | 5.1048 | C -15.30336 | -8.0861 | 7.8352 |
| H -17.77846 | -15.95575 | 5.8134 | H -21.44867 | -3.65243 | 3.454 | H -14.5508 | -9.89339 | 7.8441 |
| H -17.0282 | -17.52734 | 6.1713 | H -17.70737 | -2.62609 | 1.6091 | H -16.26943 | -9.52855 | 7.5463 |
| H -17.32343 | -15.23394 | 8.2064 | H -17.3882 | -0.78826 | 3.253 | O -13.94494 | -9.39594 | 2.8904 |
| H -16.62924 | -16.85267 | 8.5039 | | | | O -12.76298 | -9.6182 | 2.7391 |
| H -15.6957 | -15.39398 | 8.9082 | s10_9 | | | H -15.4077 | -8.67009 | 8.8527 |
| H -14.08756 | -16.71078 | 5.7323 | Co -14.5519 | -8.77187 | 4.8273 | C -12.23287 | -11.80483 | 7.2933 |
| H -14.74082 | -17.7178 | 7.0553 | N -16.3275 | -9.32501 | 4.5247 | H -12.39588 | -10.77016 | 6.9585 |
| H -13.75962 | -16.28217 | 7.4281 | N -15.08169 | -7.11442 | 4.034 | H -12.87135 | -11.99964 | 8.174 |
| H -9.93364 | -5.02259 | 0.5914 | C -17.20014 | -8.1968 | 4.2907 | H -11.18177 | -11.90097 | 7.6184 |
| H -11.42134 | -4.86567 | -0.3719 | C -16.78057 | -10.53248 | 4.6123 | C -12.05674 | -14.18173 | 6.6707 |
| H -10.28006 | -3.50321 | -0.2813 | C -16.43824 | -7.16155 | 3.4788 | H -12.16445 | -14.96781 | 5.9045 |
| H -13.30339 | -3.29816 | 0.444 | C -14.27524 | -6.13342 | 3.7868 | H -10.98577 | -14.12761 | 6.9271 |
| H -12.12953 | -1.96301 | 0.5231 | H -17.47176 | -7.73967 | 5.2649 | H -12.59797 | -14.50467 | 7.577 |
| H -13.0942 | -2.39485 | 1.9633 | C -16.03402 | -11.68883 | 4.9887 | C -11.71037 | -12.46803 | 4.9256 |
| H -9.60414 | -3.6246 | 2.6954 | H -17.85403 | -10.69351 | 4.399 | H -11.85352 | -13.23623 | 4.1463 |
| H -10.0226 | -2.17164 | 1.7617 | H -16.34446 | -7.54401 | 2.4396 | H -12.00426 | -11.49406 | 4.5077 |
| H -10.90611 | -2.5393 | 3.2592 | C -12.90483 | -6.01985 | 4.1819 | H -10.63333 | -12.42796 | 5.1675 |
| H -11.98041 | -8.68862 | 5.7259 | H -14.65448 | -5.27549 | 3.2051 | H -18.14364 | -8.49086 | 3.7969 |
| H -10.37939 | -8.00434 | 5.325 | C -16.71773 | -12.92989 | 4.9899 | C -17.15663 | -5.81746 | 3.4911 |
| H -10.91721 | -8.07544 | 7.0251 | C -14.6625 | -11.597 | 5.3987 | H -17.05384 | -5.40257 | 4.5123 |
| H -13.83959 | -7.15257 | 6.5796 | C -12.22424 | -4.83599 | 3.8039 | H -16.6537 | -5.09333 | 2.8052 |
| H -12.76498 | -6.52222 | 7.8469 | C -12.24135 | -7.03506 | 4.9402 | C -18.8098 | -6.24517 | 1.7837 |
| H -13.54883 | -5.38863 | 6.714 | C -16.1061 | -14.09632 | 5.3834 | C -19.29949 | -4.73963 | 3.5828 |
| H -10.55824 | -5.71741 | 7.3808 | H -17.76458 | -12.92382 | 4.6683 | C -20.29969 | -6.40966 | 1.5282 |
| H -9.9052 | -5.54054 | 5.74 | C -14.01197 | -12.82141 | 5.8009 | H -18.29121 | -7.18261 | 1.5171 |
| H -11.21049 | -4.45881 | 6.3103 | O -14.01411 | -10.48794 | 5.4387 | H -18.38454 | -5.45354 | 1.1165 |
| C -13.12616 | -11.60463 | 7.6016 | C -10.9134 | -4.60608 | 4.1515 | C -20.7848 | -4.92136 | 3.3129 |
| O -16.40653 | -8.27627 | 5.0082 | C -10.87334 | -6.79672 | 5.3223 | H -19.13172 | -4.56228 | 4.6597 |
| H -15.64762 | -7.76364 | 5.3353 | O -12.82333 | -8.12799 | 5.2995 | H -18.91937 | -3.83243 | 3.049 |
| C -17.05182 | -8.9288 | 6.0777 | C -16.79703 | -15.45677 | 5.4079 | N -21.07601 | -5.25232 | 1.9329 |
| H -16.34288 | -9.49978 | 6.7021 | C -14.7489 | -13.99082 | 5.7812 | H -20.65601 | -7.28497 | 2.1047 |
| H -17.77707 | -9.63787 | 5.6487 | C -10.13707 | -3.35036 | 3.7645 | H -20.48481 | -6.62557 | 0.4627 |
| O -13.39053 | -10.48418 | 2.7812 | C -10.27836 | -5.61605 | 4.9165 | H -21.15232 | -5.74664 | 3.9525 |
| O -12.26239 | -10.31023 | 3.1877 | C -10.11786 | -7.84218 | 6.1475 | H -21.34032 | -4.01208 | 3.5991 |
| H -17.6074 | -8.21611 | 6.7118 | C -18.24788 | -15.36437 | 4.9464 | N -18.5623 | -5.92498 | 3.1805 |
| C -13.64613 | -10.24892 | 8.0994 | C -16.78597 | -16.01528 | 6.8342 | H -12.78613 | -4.09969 | 3.2195 |
| H -13.84292 | -9.55736 | 7.2673 | C -16.06227 | -16.42506 | 4.4755 | C -21.03716 | -4.13455 | 1.0111 |
| H -14.57654 | -10.3785 | 8.6814 | H -14.2502 | -14.91318 | 6.0916 | H -21.59251 | -3.30371 | 1.4884 |
| H -12.89962 | -9.78261 | 8.7664 | C -10.99056 | -2.38525 | 2.948 | H -20.01377 | -3.73412 | 0.8234 |
| C -12.70399 | -12.40273 | 8.834 | C -9.67228 | -2.62139 | 5.029 | C -22.90503 | -5.00808 | -2.7745 |
| H -12.24937 | -13.37304 | 8.5725 | C -8.91821 | -3.73808 | 2.9217 | C -23.52928 | -5.37014 | -1.5802 |
| H -11.94464 | -11.83278 | 9.3946 | H -9.23704 | -5.44349 | 5.2027 | C -22.91943 | -5.09596 | -0.3606 |
| H -13.54974 | -12.58958 | 9.5184 | C -10.05538 | -9.16847 | 5.3808 | C -21.67702 | -4.45352 | -0.3141 |
| C -11.88104 | -11.40563 | 6.7294 | C -10.81207 | -8.05189 | 7.4995 | C -21.0561 | -4.10365 | -1.5145 |
| H -11.45081 | -12.38109 | 6.4444 | C -8.68256 | -7.409 | 6.4388 | C -21.66619 | -4.37462 | -2.7391 |
| H -12.11499 | -10.85024 | 5.8093 | H -18.32646 | -14.99581 | 3.9096 | H -23.38465 | -5.22502 | -3.7335 |
| H -11.10853 | -10.84189 | 7.282 | H -18.84363 | -14.69968 | 5.5948 | H -24.50158 | -5.8716 | -1.6023 |
| H -17.61087 | -10.96414 | 1.6532 | H -18.71695 | -16.36204 | 4.9776 | H -23.39429 | -5.38786 | 0.5816 |
| C -13.84286 | -8.37513 | 0.497 | H -17.32022 | -15.34042 | 7.5242 | H -20.07745 | -3.61053 | -1.4885 |
| H -16.64908 | -7.6328 | -0.0908 | H -17.28097 | -17.00165 | 6.869 | H -21.16602 | -4.09398 | -3.6707 |
| H -17.69646 | -9.04043 | -0.261 | H -15.76225 | -16.14589 | 7.2213 | | | |
| C -19.34555 | -7.24666 | 0.3231 | H -16.06281 | -16.04814 | 3.4388 | s10_10 | | |
| C -17.87915 | -6.71582 | 2.1577 | H -16.55122 | -17.41507 | 4.4801 | Co -14.77951 | -9.07957 | 4.9312 |
| C -20.5097 | -6.65633 | 1.1053 | H -15.01218 | -16.57444 | 4.7752 | N -16.51962 | -9.78477 | 4.7602 |
| H -19.70557 | -8.08007 | -0.3066 | H -11.33606 | -2.84014 | 2.0042 | N -15.48199 | -7.50664 | 4.1064 |
| H -18.92681 | -6.48298 | -0.3795 | H -11.87581 | -2.04309 | 3.5106 | C -17.48441 | -8.73672 | 4.5299 |
| C -19.0646 | -6.13483 | 2.9075 | H -10.40088 | -1.49089 | 2.6861 | C -16.86813 | -11.0188 | 4.9256 |
| H -17.18167 | -7.15083 | 2.8907 | H -10.53412 | -2.32438 | 5.6503 | C -16.85649 | -7.68698 | 3.6266 |
| H -17.31894 | -5.90654 | 1.6225 | H -9.10939 | -1.70857 | 4.7663 | C -14.78024 | -6.46584 | 3.7876 |
| N -20.10626 | -5.62122 | 2.0349 | H -9.01249 | -3.24783 | 5.6512 | H -17.73351 | -8.25601 | 5.4998 |
| H -20.98847 | -7.47175 | 1.6806 | H -9.22793 | -4.25745 | 1.9991 | C -16.00544 | -12.09659 | 5.2847 |
| H -21.26831 | -6.25474 | 0.4113 | | | | | | |

| | | | | | | | | |
|-------------|-----------|--------|---------------|-----------|---------|-------------|-----------|---------|
| H -17.93648 | -11.27364 | 4.7922 | H -12.07322 | -11.53654 | 4.49 | C -9.96135 | -6.29039 | 5.0512 |
| H -16.79358 | -8.11498 | 2.6028 | H -10.5748 | -12.34576 | 5.0247 | H -17.2956 | -16.41387 | 5.372 |
| C -13.4114 | -6.2196 | 4.1273 | H -18.42688 | -9.12675 | 4.0998 | H -17.87322 | -15.8283 | 6.9589 |
| H -15.27447 | -5.68658 | 3.183 | C -17.71722 | -6.42931 | 3.5987 | H -17.30621 | -17.50328 | 6.7769 |
| C -16.58042 | -13.38954 | 5.3647 | H -18.78411 | -6.74798 | 3.6544 | H -16.23425 | -15.5128 | 8.8725 |
| C -14.62037 | -11.88167 | 5.5909 | H -17.52786 | -5.87295 | 4.5363 | H -15.75405 | -17.22094 | 8.6668 |
| C -12.85587 | -4.29047 | 3.6953 | C -17.69615 | -4.14192 | 2.7056 | H -14.51803 | -15.94218 | 8.6773 |
| C -12.62869 | -7.14914 | 4.8799 | C -18.07266 | -5.96495 | 1.225 | H -14.83206 | -16.93861 | 5.0289 |
| C -15.84428 | -14.49116 | 5.7303 | C -19.16958 | -3.77767 | 2.6527 | H -14.93863 | -18.05582 | 6.4188 |
| H -17.64543 | -13.4787 | 5.1254 | H -17.17141 | -3.56958 | 1.9169 | H -13.68003 | -16.80015 | 6.3782 |
| C -13.83681 | -13.0402 | 5.9491 | H -17.25342 | -3.84708 | 3.673 | H -12.27969 | -4.56302 | -0.3865 |
| O -14.06923 | -10.72173 | 5.5755 | C -19.54727 | -5.60299 | 1.1512 | H -13.93597 | -3.97595 | -0.1135 |
| C -11.56008 | -4.63211 | 3.9897 | H -17.54396 | -5.46395 | 0.393 | H -12.64306 | -2.81803 | -0.492 |
| C -11.27814 | -6.77694 | 5.2097 | H -17.93844 | -7.05035 | 1.0803 | H -14.45306 | -2.65691 | 2.0777 |
| O -13.89998 | -8.28494 | 5.2816 | N -19.7407 | -4.1834 | 1.3839 | H -13.19352 | -15.9037 | 1.5797 |
| C -16.41612 | -15.90196 | 5.8383 | H -19.2935 | -2.68662 | 2.7716 | H -13.12345 | -2.26532 | 3.1889 |
| C -14.47157 | -14.26636 | 6.0097 | H -19.71188 | -4.25311 | 3.5101 | H -10.41053 | -4.00946 | 1.2859 |
| C -10.91625 | -3.32252 | 3.5422 | H -19.9465 | -5.86793 | 0.1571 | H -10.86511 | -2.30371 | 1.0471 |
| C -10.80864 | -5.55718 | 4.7564 | H -20.13299 | -4.36235 | 1.8932 | H -10.77089 | -2.96524 | 6.3889 |
| C -10.40449 | -7.73023 | 6.0299 | N -17.45109 | -5.55475 | 2.4742 | H -11.73353 | -9.2268 | 4.7004 |
| C -17.90314 | -15.93794 | 5.5011 | H -13.50449 | -4.3266 | 3.1143 | H -10.45683 | -8.5932 | 3.6233 |
| C -16.23935 | -16.42141 | 7.2684 | C -21.12744 | -3.79258 | 1.2611 | H -10.08946 | -8.92939 | 5.3364 |
| H -15.68478 | -16.83101 | 4.8643 | H -21.77562 | -4.36226 | 1.9729 | H -12.7333 | -7.7182 | 6.5146 |
| H -13.87259 | -15.13771 | 6.289 | H -21.20279 | -2.73207 | 1.5707 | H -11.09965 | -7.46705 | 7.1659 |
| C -11.88201 | -2.46319 | 2.7328 | C -22.70801 | -4.14046 | -2.733 | H -12.10086 | -6.05463 | 6.7327 |
| C -10.47695 | -2.51763 | 4.7692 | C -21.44497 | -3.58711 | -2.5209 | H -9.26472 | -6.72553 | 5.7867 |
| C -9.69661 | -3.62231 | 2.6653 | C -20.93255 | -3.84582 | -1.2315 | H -9.44672 | -6.28849 | 4.0753 |
| H -9.7791 | -5.28123 | 5.0019 | C -21.6732 | -3.93779 | -0.1335 | H -10.14007 | -5.24331 | 5.3504 |
| C -10.22771 | -9.05412 | 5.2767 | C -22.93207 | -4.49843 | -0.3568 | C -12.29433 | -12.28796 | 6.5818 |
| C -11.04381 | -7.99205 | 7.4005 | C -23.45066 | -4.59619 | -1.6474 | O -15.87811 | -8.30471 | 6.1986 |
| C -9.01387 | -7.15151 | 6.2821 | H -23.1105 | -4.21966 | -3.747 | H -14.99104 | -7.90752 | 6.1729 |
| H -18.09823 | -15.60019 | 4.4692 | H -20.85498 | -3.23054 | -3.3706 | C -16.03717 | -9.05157 | 7.3831 |
| H -18.49497 | -15.30881 | 6.1875 | H -19.93818 | -3.06251 | -1.0557 | H -15.18998 | -9.73791 | 7.5559 |
| H -18.28409 | -16.96929 | 5.588 | H -23.51485 | -4.86514 | 0.4958 | H -16.9509 | -9.65692 | 7.2772 |
| H -16.76718 | -15.77428 | 7.9892 | H -24.43914 | -5.03773 | -1.8049 | O -14.58476 | -10.4065 | 2.6357 |
| H -16.64679 | -17.4432 | 7.3639 | | | | O -13.38595 | -10.37064 | 2.4569 |
| H -15.17939 | -16.4593 | 7.5681 | s10_11 | | | H -16.16249 | -8.39585 | 8.2624 |
| H -15.80351 | -16.48166 | 3.8247 | Co -15.31297 | -9.43171 | 4.3665 | C -12.28804 | -10.97395 | 7.3754 |
| H -16.08798 | -17.85691 | 4.929 | N -16.88427 | -10.47538 | 4.3584 | H -12.73101 | -10.14853 | 6.7994 |
| H -14.60452 | -16.88724 | 5.0756 | N -16.2586 | -8.23793 | 3.2111 | H -12.84831 | -11.08729 | 8.3212 |
| H -12.21836 | -2.9764 | 1.816 | C -18.02309 | -9.70379 | 3.9177 | H -11.2509 | -10.69719 | 7.6354 |
| H -12.77433 | -2.18483 | 3.3189 | C -17.00102 | -11.68726 | 4.7914 | C -11.4746 | -13.299 | 7.382 |
| H -11.38537 | -1.52804 | 2.4242 | C -17.57635 | -8.76016 | 2.8134 | H -11.36341 | -14.26225 | 6.8563 |
| H -11.34087 | -2.28099 | 5.4133 | C -15.72353 | -7.21904 | 2.6256 | H -10.4589 | -12.90055 | 7.541 |
| H -10.00819 | -1.56607 | 4.4626 | H -18.40565 | -9.0985 | 4.7617 | H -11.91265 | -13.49536 | 8.3761 |
| H -9.74281 | -3.06407 | 5.3835 | C -15.97258 | -12.47011 | 5.3975 | C -11.59688 | -12.09336 | 5.2299 |
| H -9.98922 | -4.19421 | 1.7686 | H -17.99454 | -12.16707 | 4.7108 | H -11.52135 | -13.05546 | 4.6945 |
| H -9.21729 | -2.68492 | 2.3324 | H -17.40338 | -9.3655 | 1.8981 | H -12.13965 | -11.38425 | 4.5873 |
| H -8.93437 | -4.21081 | 3.2015 | C -14.42894 | -6.65924 | 2.8744 | H -10.57286 | -11.70627 | 5.377 |
| H -11.18698 | -9.57525 | 5.1426 | H -16.31092 | -6.6882 | 1.8548 | H -18.85808 | -10.34545 | 3.5766 |
| H -9.78474 | -8.87918 | 4.2809 | C -16.29885 | -13.79807 | 5.7676 | C -18.65674 | -7.73766 | 2.4707 |
| H -9.54636 | -9.72008 | 5.836 | C -14.67686 | -11.92222 | 5.6717 | H -18.25862 | -7.02061 | 1.7175 |
| H -12.02431 | -8.48195 | 7.3001 | C -14.08448 | -5.4974 | 2.1482 | H -19.44587 | -8.29284 | 1.9302 |
| H -10.39883 | -8.65823 | 8.0003 | C -13.52042 | -7.2221 | 3.8279 | C -20.54462 | -6.45167 | 3.2958 |
| H -11.16903 | -7.04943 | 7.962 | C -15.39611 | -14.61795 | 6.4028 | H -18.47075 | -6.21466 | 4.4182 |
| H -8.42218 | -7.86564 | 6.8785 | H -17.30895 | -14.14972 | 5.532 | C -20.3447 | -5.11639 | 2.595 |
| H -8.46142 | -6.97417 | 5.3437 | C -13.72154 | -12.78187 | 6.3276 | H -21.08774 | -6.27502 | 4.2432 |
| H -9.05017 | -6.20377 | 6.8466 | O -14.34987 | -10.71308 | 5.3801 | H -21.16928 | -7.11934 | 2.6775 |
| C -12.33131 | -12.89885 | 6.1912 | C -12.87077 | -4.86158 | 2.312 | C -18.22934 | -4.87642 | 3.7385 |
| O -15.16303 | -8.33458 | 7.0014 | C -12.2597 | -6.56093 | 4.0151 | H -19.01809 | -6.02885 | 5.3611 |
| H -14.26316 | -7.96997 | 7.0091 | O -13.80216 | -8.27777 | 4.5152 | H -17.52164 | -6.69968 | 4.6964 |
| C -15.2717 | -9.32366 | 8.0003 | C -15.69864 | -16.05266 | 6.8261 | N -19.49254 | -4.25594 | 3.3892 |
| H -14.42979 | -10.03694 | 7.9704 | C -14.11669 | -14.06376 | 6.6619 | H -21.3216 | -4.61759 | 2.4529 |
| H -16.19865 | -9.88854 | 7.8149 | C -12.54228 | -3.57936 | 1.5454 | H -19.93282 | -5.29026 | 1.5705 |
| O -14.23746 | -9.74944 | 2.9942 | C -11.98933 | -5.42996 | 3.2588 | H -17.67769 | -4.20481 | 4.4219 |
| O -13.05035 | -9.80055 | 2.7529 | C -11.24681 | -7.11506 | 5.022 | H -17.56837 | -5.01527 | 2.8472 |
| H -15.33927 | -8.87612 | 9.0075 | C -17.12128 | -16.46317 | 6.4602 | N -19.29047 | -7.11253 | 3.6124 |
| C -12.03367 | -11.86333 | 7.2845 | C -15.53955 | -16.18712 | 8.3436 | H -14.83017 | -5.10319 | 1.4449 |
| H -12.30197 | -10.84618 | 6.9636 | C -14.73164 | -17.01178 | 6.125 | C -19.38142 | -2.89652 | 2.8905 |
| H -12.5874 | -12.10178 | 8.2106 | H -13.388 | -14.70807 | 7.1617 | H -20.40081 | -2.4705 | 2.8417 |
| H -10.95683 | -11.87503 | 7.5296 | C -12.87199 | -3.74665 | 0.06 | H -18.82431 | -2.30718 | 3.6417 |
| C -11.699 | -14.21718 | 6.6337 | C -13.37457 | -2.43271 | 2.1278 | C -17.46998 | -2.57809 | -0.9737 |
| H -11.81117 | -15.01282 | 5.878 | C -11.0667 | -3.20247 | 1.6537 | C -16.70888 | -2.5067 | 0.1917 |
| H -10.6173 | -14.06933 | 6.7876 | H -11.02322 | -4.94465 | 3.4054 | C -17.3283 | -2.59631 | 1.4367 |
| H -12.12136 | -14.58188 | 7.5862 | C -10.86665 | -8.55234 | 4.6475 | C -18.71522 | -2.75097 | 1.5418 |
| C -11.66098 | -12.48117 | 4.8762 | C -11.83683 | -7.08525 | 6.4378 | C -19.46633 | -2.80915 | 0.3627 |
| H -11.80184 | -13.2602 | 4.1072 | | | | C -18.85234 | -2.72763 | -0.885 |

H -16.9855 -2.50488 -1.9516
 H -15.62438 -2.3656 0.1321
 H -16.72681 -2.52713 2.352
 H -20.55631 -2.90816 0.4281
 H -19.45833 -2.77131 -1.7949

s10_12

Co -15.17799 -9.61978 4.0396
 N -16.54011 -10.88199 3.7058
 N -15.84613 -8.69983 2.5056
 C -17.57202 -10.3325 2.856
 C -16.63959 -12.05603 4.2368
 C -16.92192 -9.43103 1.818
 C -15.25444 -7.6909 1.9565
 H -18.26522 -9.72386 3.4676
 C -15.75946 -12.6207 5.2087
 H -17.49687 -12.68562 3.9327
 H -16.42741 -10.08129 1.0651
 C -14.18083 -6.91756 2.4979
 H -15.61528 -7.34627 0.971
 C -16.0231 -13.94701 5.6314
 C -14.68308 -11.86331 5.7771
 C -13.76679 -5.78807 1.7497
 C -13.57865 -7.22415 3.7583
 C -15.2654 -14.56625 6.5974
 H -16.86537 -14.46406 5.1595
 C -13.8739 -12.51397 6.7789
 O -14.4316 -10.64542 5.4497
 C -12.78721 -4.93511 2.2013
 C -12.54891 -6.33907 4.238
 O -13.92949 -8.24291 4.4668
 C -15.51068 -15.98902 7.0921
 C -14.19797 -13.80788 7.142
 C -12.3235 -3.69527 1.4421
 C -12.20459 -5.25261 3.4538
 C -11.8604 -6.62253 5.5762
 C -16.69862 -16.63735 6.3887
 C -15.80117 -15.96883 8.5959
 C -14.2717 -16.84898 6.8235
 H -13.58353 -14.2925 7.906
 C -13.06652 -3.53046 0.1202
 C -12.58212 -2.44753 2.2925
 C -10.82659 -3.80507 1.1371
 H -11.42163 -4.58379 3.8221
 C -11.17989 -7.99581 5.5314
 C -12.88168 -6.58613 6.7206
 C -10.78724 -5.58354 5.8949
 H -16.54182 -16.70865 5.299
 H -17.63493 -16.08171 6.5668
 H -16.84678 -17.66232 6.7679
 H -16.6965 -15.36255 8.8147
 H -15.98092 -16.99177 8.9707
 H -14.96342 -15.54763 9.1752
 H -14.04612 -16.886 5.7444
 H -14.43287 -17.88316 7.1753
 H -13.3773 -16.46112 7.3378
 H -12.89993 -4.38772 -0.5538
 H -14.15373 -3.41798 0.2719
 H -12.71029 -2.62648 -0.4014
 H -13.65704 -2.34231 2.5182
 H -12.25257 -1.53864 1.759
 H -12.04185 -2.48073 3.2527
 H -10.61577 -4.69427 0.5193
 H -10.47614 -2.91465 0.5863
 H -10.22046 -3.88497 2.0541
 H -11.91131 -8.80567 5.3934
 H -10.44956 -8.04234 4.705
 H -10.63364 -8.17815 6.4742
 H -13.64213 -7.37305 6.6073
 H -12.37535 -6.75399 7.6874
 H -13.38529 -5.60482 6.769
 H -10.31631 -5.82823 6.8612
 H -9.98642 -5.5679 5.1362
 H -11.2022 -4.56463 5.9817
 C -12.65681 -11.79378 7.3667
 O -16.4099 -8.43871 5.4654

H -15.62552 -7.89495 5.6485
 C -16.82268 -9.09876 6.6407
 H -15.9836 -9.61201 7.1417
 H -17.56495 -9.85967 6.3533
 O -13.83608 -10.62355 2.7465
 O -12.65467 -10.42624 2.935
 H -17.30361 -8.40206 7.3491
 C -13.04401 -10.43516 7.967
 H -13.38513 -9.73202 7.1934
 H -13.84689 -10.5546 8.7169
 H -12.17378 -9.98982 8.4809
 C -11.99762 -12.60551 8.4808
 H -11.62287 -13.58067 8.1269
 H -11.12926 -12.05002 8.8719
 H -12.68418 -12.78447 9.3265
 C -11.61645 -11.6038 6.2557
 H -11.27517 -12.58281 5.8774
 H -12.02012 -11.03011 5.4078
 H -10.73333 -11.06562 6.644
 H -18.17849 -11.12119 2.3711
 C -17.94877 -8.58833 1.0662
 H -17.41289 -7.9018 0.3715
 H -18.49344 -9.2833 0.3997
 C -20.05855 -7.39455 1.1438
 C -18.47543 -6.93221 2.8441
 C -19.73078 -6.07566 0.4595
 H -20.89535 -7.22215 1.8468
 H -20.40197 -8.13522 0.4011
 C -18.12543 -5.61128 2.1828
 H -19.30077 -6.74892 3.5575
 H -17.63101 -7.31479 3.438
 N -19.25289 -5.10222 1.4208
 H -20.63336 -5.67723 -0.0377
 H -18.97681 -6.24172 -0.352
 H -17.84088 -4.87259 2.9519
 H -17.22753 -5.72756 1.5221
 N -18.94083 -7.93782 1.8953
 H -14.27084 -5.60889 0.7939
 C -18.96121 -3.82962 0.8008
 H -18.07606 -3.90279 0.1197
 H -19.81942 -3.56983 0.1508
 C -18.36857 -0.61296 3.607
 H -17.48054 -0.78611 2.5491
 C -17.66339 -1.83537 1.6489
 C -18.7367 -2.71701 1.7886
 C -19.62158 -2.5372 2.8576
 C -19.43922 -1.49437 3.76
 H -18.22507 0.20659 4.3172
 H -16.63379 -0.10437 2.4257
 H -16.95803 -1.97486 0.8218
 H -20.45135 -3.24177 2.9758
 H -20.13807 -1.36591 4.5921

s09_1

Co -12.35783 0.95972 8.28494
 N -11.54714 -0.21443 7.04463
 N -13.70059 -0.38639 8.47012
 C -12.09189 -1.54509 7.1515
 C -10.61711 0.08958 6.19883
 C -13.5812 -1.42854 7.44863
 C -14.67936 -0.34395 9.31629
 H -11.61047 -2.07056 8.00371
 C -9.98738 1.36263 6.06784
 H -10.27158 -0.70071 5.506
 H -14.07508 -1.04634 6.52904
 C -14.87597 0.63926 10.33768
 H -15.44071 -1.13943 9.26112
 C -9.05326 1.52458 5.01454
 C -10.27383 2.43703 6.97459
 C -15.94021 0.42094 11.24609
 C -14.03444 1.78935 10.4631
 C -8.40271 2.71612 4.79804
 H -8.86891 0.65788 4.37082
 C -9.63148 3.70394 6.72003
 O -11.05196 2.30938 7.98815
 C -16.17992 1.26516 12.30672

C -14.23686 2.64268 11.60639
 O -13.10764 2.07633 9.61654
 C -7.3834 2.9416 3.685
 C -8.73503 3.78396 5.67142
 C -17.31701 1.07458 13.307
 C -15.28781 2.35597 12.45819
 C -13.28145 3.81259 11.85942
 C -7.15983 1.68049 2.85685
 C -6.0405 3.35535 4.29471
 C -7.87905 4.04589 2.74601
 H -8.24605 4.74526 5.48949
 C -18.16261 -0.15139 12.97765
 C -16.74347 0.89205 14.71565
 C -18.23137 2.30327 13.28385
 H -15.44527 3.01356 13.31804
 C -13.38293 4.83724 10.72465
 C -11.83905 3.29467 11.96054
 C -13.59763 4.5333 13.16803
 H -8.08594 1.34634 3.5916
 H -6.7791 0.84766 3.47221
 H -6.41432 1.87558 2.0679
 H -5.65525 2.56936 4.96618
 H -5.29034 3.52664 5.0283
 H -6.12005 4.2852 4.88112
 H -8.84338 3.76808 2.28806
 H -7.15191 4.22015 1.93357
 H -8.02318 5.00438 3.27073
 H -18.6264 -0.07369 11.97976
 H -17.56916 -1.08088 13.01073
 H -18.9776 -0.2549 13.71349
 H -16.08649 0.00685 14.76038
 H -17.55546 0.75249 15.45078
 H -16.15168 1.7635 15.04012
 H -18.66604 2.44999 12.28072
 H -19.06103 2.18441 14.00272
 H -17.69193 3.22649 13.55121
 H -13.11056 4.39217 9.75712
 H -14.40975 5.23466 10.6508
 H -12.70506 5.68806 10.91822
 H -11.50572 2.86383 11.00345
 H -11.15088 4.12163 12.20921
 H -11.75052 2.53486 12.75891
 H -12.87689 5.35413 13.31811
 H -14.60479 4.98328 13.16234
 H -13.52299 3.8643 14.04275
 C -9.99065 4.92226 7.57418
 O -11.1685 0.14536 9.98343
 H -11.52413 0.73513 10.66483
 C -9.77097 0.31907 9.90253
 H -9.4902 1.37755 9.76279
 H -9.41811 -0.23978 9.02212
 O -13.46742 1.86937 6.75043
 O -14.63668 2.11563 6.96895
 H -9.26088 -0.08455 10.79447
 C -9.64614 4.67516 9.04757
 H -10.2606 3.86872 9.47103
 H -8.58052 4.40785 9.16247
 H -9.82812 5.59074 9.6382
 C -9.23285 6.17197 7.13098
 H -9.44936 6.44331 6.08371
 H -9.53792 7.02582 7.75834
 H -8.14044 6.05873 7.24086
 C -11.49024 5.21361 7.42991
 H -11.74162 5.44128 6.3796
 H -12.10171 4.35878 7.75752
 H -11.76849 6.09026 8.04155
 H -11.90623 -2.14418 6.23956
 C -14.15862 -2.79174 7.80415
 H -13.65456 -3.54756 7.15736
 H -13.84313 -3.03364 8.83712
 C -16.22016 -3.85677 8.59397
 C -16.14945 -2.95754 6.38735
 C -16.08595 -5.27798 8.06533
 H -17.29734 -3.61634 8.67766
 H -15.78985 -3.7794 9.60818
 C -16.02279 -4.35301 5.79435
 H -17.21916 -2.6809 6.42933

H -15.65777 -2.21983 5.7312 H -17.23691 -1.33112 13.41439 N -12.13378 0.35765 5.78471
N -16.5845 -5.33587 6.70315 H -18.85228 -2.07329 13.30195 N -14.35502 0.07799 7.0767
H -16.649 -5.98216 8.69043 H -18.42769 0.98799 13.18659 C -12.94081 -0.74768 5.32343
H -15.02111 -5.59496 8.09277 H -19.99148 0.16494 13.00607 C -11.11711 0.80034 5.1205
H -16.55192 -4.43026 4.83441 H -19.43037 1.30318 11.74951 C -14.38905 -0.49847 5.7229
H -14.95689 -4.59366 5.59578 H -19.0557 -2.14818 10.25253 C -15.39308 0.09763 7.84514
N -15.60426 -2.86182 7.73345 H -20.33997 -1.6217 11.3681 H -12.6003 -1.68248 5.80797
H -16.56702 -0.46124 11.0778 H -19.84927 -0.55304 10.03379 C -10.21023 1.81557 5.5518
C -17.35613 -6.34713 6.18905 H -13.13797 2.86481 10.18706 H -10.91843 0.35627 4.12721
O -17.67742 -6.41535 5.02339 H -14.47963 3.62495 11.09089 H -14.79786 0.28677 5.05476
O -17.70386 -7.22539 7.13989 H -12.84656 3.56111 11.80687 C -15.45003 0.55743 9.19866
C -19.9044 -7.91861 6.34192 H -12.26022 0.54297 10.9384 H -16.33346 -0.34343 7.46961
C -18.54349 -8.37624 6.83677 H -11.84456 1.33699 12.48053 C -9.21315 2.2343 4.63676
C -18.67439 -9.06655 8.1814 H -12.84608 -0.13848 12.489 C -10.27969 2.36844 6.87255
C -17.84624 -9.28638 5.8407 H -13.55667 2.48917 13.81342 C -16.62897 0.27688 9.92338
H -19.83154 -7.41928 5.36636 H -15.25714 2.59401 13.30429 C -14.33756 1.199 9.83414
H -20.57123 -8.79055 6.24314 H -14.57223 1.03429 13.84865 C -8.28825 3.19867 4.962
H -20.36012 -7.22343 7.06594 C -9.59926 3.39527 8.92782 H -9.20703 1.75854 3.65039
H -17.68476 -9.36218 8.56437 O -12.40703 -1.33706 7.90918 C -9.338 3.40818 7.20528
H -19.14598 -8.39708 8.91822 H -13.06744 -1.57166 8.5793 O -11.12343 1.96701 7.75687
H -19.29528 -9.97114 8.08572 C -11.12474 -1.30086 8.50055 C -16.74825 0.55038 11.27008
H -16.84489 -9.56131 6.21072 H -11.08336 -0.60443 9.35633 C -14.43074 1.43987 11.24774
H -18.42963 -10.21362 5.71992 H -10.41993 -0.93458 7.73942 O -13.27654 1.54523 9.92338
H -17.74322 -8.80498 4.85892 O -13.81292 2.68503 6.76801 C -7.19287 3.68262 4.01584
O -14.74247 3.12806 7.40557 C -8.39698 3.7653 6.2576
H -10.79624 -2.30472 8.82398 C -18.02412 0.18159 12.02905
C -9.74847 2.27435 9.96444 C -15.61528 1.11968 11.89542
H -10.71123 1.75549 9.85657 C -13.23074 2.02569 11.9992
H -8.93404 1.53417 9.86393 C -7.23641 2.95236 2.6776
H -9.69401 2.69539 10.98423 C -5.82013 3.43504 4.64891
C -8.37417 4.21922 9.31927 C -7.36792 5.10853 3.74715
H -8.22113 5.08766 8.6565 H -7.6829 4.55184 6.51754
H -8.50992 4.61242 10.34037 C -18.1608 -1.34451 12.06693
H -7.44993 3.61559 9.31836 C -18.00706 0.69304 13.46693
C -10.8207 4.32118 8.98418 C -19.24429 0.7857 11.32912
H -10.69316 5.17354 8.29486 H -15.6744 1.31615 12.96723
H -11.74363 3.78746 8.70967 C -12.94234 3.44779 11.50675
H -10.94914 4.72599 10.00369 C -11.98794 1.14887 11.78323
H -13.37994 -0.31323 3.70183 C -13.48009 2.09369 13.50447
C -15.85723 -1.29419 4.82208 H -8.19176 3.11646 2.15098
H -16.85462 -0.82913 4.73384 H -7.09134 1.86536 2.79834
H -15.5649 -1.56545 3.77758 H -6.43104 3.32173 2.02093
C -17.24147 -3.14843 5.69067 H -5.66574 2.36032 4.8444
C -14.81953 -3.2488 5.91454 H -5.01467 3.77947 3.97681
C -17.49543 -3.71797 7.08953 H -5.70175 3.96844 5.60616
H -17.28308 -3.95422 4.92141 H -8.34769 5.38426 3.28308
H -18.0581 -2.45271 5.43398 H -6.58242 5.5468 3.06307
C -15.21151 -4.48408 6.71456 H -7.30592 5.77835 4.67106
H -14.32747 -3.56084 4.96138 H -18.21165 -1.77882 11.05393
H -14.07059 -2.6719 6.49158 H -17.29644 -1.79953 12.58016
N -16.23469 -4.13768 7.6774 H -19.07625 -1.64432 12.6076
H -18.22228 -4.55189 7.04335 H -17.1946 0.24087 14.0598
H -17.93168 -2.9479 7.74647 H -18.95586 0.43557 13.9666
H -15.61564 -5.27181 6.05289 H -17.89469 1.78959 13.5107
H -14.34172 -4.91235 7.2253 H -19.35952 0.41653 10.29714
N -15.99108 -2.43079 5.68518 H -20.16961 0.52863 11.87354
H -17.81612 -0.82456 8.98739 H -19.1689 1.8852 11.2844
C -15.98392 -3.83404 8.98867 H -12.70241 3.45955 10.43395
O -16.84003 -3.48906 9.77288 H -13.8128 4.10369 11.679
O -14.67886 -3.97903 9.27481 H -12.08371 3.8747 12.05587
C -14.91406 -4.94209 11.51371 H -11.6568 1.18461 10.73344
C -14.18459 -3.93194 10.64503 H -11.15057 1.51326 12.40373
C -14.30058 -2.52132 11.18861 H -12.18803 0.10124 12.075
C -12.72811 -4.32647 10.49007 H -12.58852 2.5054 14.00561
H -14.89023 -5.93892 11.04329 H -14.32656 2.75399 13.7574
H -14.40606 -5.01591 12.48877 H -13.67518 1.09896 13.94121
H -15.96064 -4.65634 11.68501 C -9.4355 4.11737 8.55848
H -13.70865 -1.80793 10.58523 O -11.89718 -0.73772 8.5741
H -15.34333 -2.17166 11.20549 H -12.10567 -0.37613 9.44979
H -13.90062 -2.48295 12.21573 C -10.50259 -0.9336 8.47103
H -12.22363 -3.65133 9.77985 H -9.93906 -0.02257 8.73717
H -12.209 -4.26346 11.45918 H -10.27767 -1.175 7.42093
H -12.63702 -5.35594 10.10861 O -13.48015 2.77454 6.64887
O -14.0948 2.76017 5.60011
H -10.1661 -1.77619 9.09932
C -9.26118 3.12176 9.71168
H -10.08348 2.39302 9.7364

s09_2

Co -13.10705 0.72668 7.28789
N -12.54163 0.419 5.50735
N -14.77515 -0.01917 6.74006
C -13.43543 -0.46641 4.79668
C -11.43679 0.82522 4.97165
C -14.8558 -0.22662 5.29737
C -15.79809 -0.19189 7.51688
H -13.13442 -1.51205 4.99302
C -10.42746 1.60942 5.6027
H -11.24288 0.5428 3.91963
H -15.18085 0.73638 4.84822
C -15.85241 0.0484 8.92401
H -16.73909 -0.55963 7.07799
C -9.31312 1.9934 4.81566
C -10.52617 1.98607 6.98281
C -17.04235 -0.33615 9.58814
C -14.77041 0.65315 9.64394
C -8.29019 2.75498 5.32822
H -9.29695 1.65634 3.77375
C -9.4821 2.83396 7.50885
O -11.47959 1.59749 7.74871
C -17.21997 -0.145 10.93712
C -14.98359 0.93447 11.04239
O -13.64249 0.94103 9.09578
C -7.06226 3.18327 4.5298
C -8.42582 3.16235 6.68089
C -18.4399 -0.6419 11.70761
C -16.17085 0.52093 11.61934
C -13.90433 1.66087 11.84949
C -7.09815 2.64619 3.10272
C -5.79674 2.64919 5.20772
C -6.99753 4.71226 4.46129
H -7.63207 3.79291 7.09136
C -17.99312 -1.71407 12.70808
C -19.10367 0.5186 12.45316
C -19.47361 -1.27433 10.78015
H -16.3148 0.7131 12.68653
C -13.57208 3.0038 11.18781
C -12.64125 0.79674 11.93891
C -14.35851 1.95418 13.2778
H -7.97298 3.02085 2.54476
H -7.12132 1.5434 3.08001
H -6.19614 2.96891 2.55626
H -5.81433 1.54732 5.25937
H -4.89657 2.95097 4.64391
H -5.68515 3.02931 6.23626
H -7.89539 5.12106 3.96774
H -6.11269 5.03851 3.88694
H -6.92927 5.17061 5.46133

s09_3

Co -12.72446 0.99867 7.45873
H -10.08348 2.39302 9.7364

| | | |
|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| H -8.30531 2.57589 9.61886 | C -7.72924 1.67718 2.62022 | H -16.77007 -0.10213 11.29751 |
| H -9.24906 3.65836 10.67716 | C -6.34447 3.12396 4.07447 | C -17.45167 -6.31356 6.13787 |
| C -8.36256 5.19256 8.71718 | C -8.20511 4.10376 2.72036 | O -18.17319 -6.13316 5.18192 |
| H -8.43971 5.97789 7.94616 | H -8.30249 4.63145 5.52768 | O -17.36567 -7.45428 6.83687 |
| H -8.48124 5.68551 9.69628 | C -18.3127 0.31361 13.21974 | C -19.63956 -8.31111 6.61305 |
| H -7.34243 4.77246 8.68278 | C -16.79159 1.2154 14.95083 | C -18.15898 -8.62166 6.47815 |
| C -10.80253 4.8056 8.66581 | C -18.17393 2.76211 13.55331 | C -17.73881 -9.26575 7.51067 |
| H -10.92008 5.56048 7.86933 | H -15.34236 3.24265 13.55863 | C -17.79659 -9.09512 5.08117 |
| H -11.62731 4.08115 8.58326 | C -13.12929 4.89505 10.94521 | H -19.96415 -7.56783 5.87244 |
| H -10.89363 5.32256 9.63778 | C -11.74262 3.24036 12.21953 | H -20.22333 -9.23432 6.4661 |
| H -12.8531 -0.90149 4.23105 | C -13.40764 4.63552 13.38726 | H -19.85878 -7.92815 7.62323 |
| C -15.25267 -1.74217 5.52237 | H -8.71842 1.47098 2.17749 | H -16.65787 -9.85177 7.4422 |
| H -16.27983 -1.53839 5.90257 | H -7.39134 0.76885 3.14744 | H -17.96178 -9.2935 8.52854 |
| H -15.38379 -1.85096 4.42976 | H -7.02716 1.85629 1.78877 | H -18.27958 -10.59615 7.3471 |
| C -15.32782 -4.17117 5.4766 | H -5.99736 2.25722 4.66214 | H -16.71024 -9.26682 5.0059 |
| C -14.47532 -3.12736 7.43533 | H -5.63756 3.27667 3.24013 | H -18.3059 -10.05022 4.87355 |
| C -16.64652 -4.48043 6.16953 | H -6.28556 4.01245 4.7241 | H -18.09507 -8.36362 4.31801 |
| H -14.64372 -5.02896 5.61966 | H -9.2226 3.95652 2.32053 | |
| H -15.448576 -4.05885 4.39021 | H -7.52226 4.26463 1.86771 | |
| C -15.76355 -3.40818 8.19644 | H -8.21228 5.03072 3.31664 | |
| H -13.79455 -3.98678 7.58521 | H -18.78145 0.4416 12.22934 | |
| H -13.95843 -2.24671 7.8485 | H -17.79785 -0.66206 13.23461 | |
| N -16.44859 -4.5459 7.6063 | H -19.12422 0.26843 13.96513 | |
| H -17.06233 -5.44169 5.83653 | H -16.21034 0.27812 14.97783 | |
| H -17.39978 -3.70095 5.92626 | H -17.60369 1.13547 15.69459 | |
| H -15.55032 -3.61542 9.25288 | H -16.12549 2.03079 15.27685 | |
| H -16.42835 -2.51775 8.17574 | H -18.60682 2.95652 12.55753 | |
| N -14.67551 -2.98145 5.99873 | H -19.00212 2.70381 14.28116 | |
| H -17.45482 -0.20019 9.37981 | H -17.55675 3.6342 13.82421 | |
| C -17.09428 -5.52547 8.31606 | H -12.8551 4.42403 9.99015 | |
| O -17.75034 -6.40378 7.8002 | H -14.12321 5.36162 10.83437 | |
| O -16.89397 -5.38379 9.63407 | H -12.40182 5.69914 11.15671 | |
| C -16.96307 -5.7966 11.92411 | H -11.43102 2.76964 11.27427 | |
| C -17.46063 -6.32316 10.59108 | H -10.99106 4.01081 12.46619 | |
| C -16.92193 -7.72163 10.34332 | H -11.72786 2.48624 13.02688 | |
| C -18.97759 -6.27324 10.53473 | H -12.62638 5.39888 13.53712 | |
| H -17.31403 -4.76638 12.0914 | H -14.37662 5.16236 13.36377 | |
| H -17.33499 -6.42954 12.7452 | H -13.39475 3.97416 14.27074 | |
| H -15.86194 -5.79726 11.95542 | C -9.88538 4.83227 7.7364 | |
| H -17.27917 -8.12921 9.38825 | O -11.32487 0.08275 9.92632 | |
| H -15.81962 -7.70994 10.33648 | H -11.60647 0.68069 10.63553 | |
| H -17.24854 -8.38924 11.15721 | C -9.92612 0.17967 9.76349 | |
| H -19.35638 -6.64671 9.57362 | H -9.38943 -0.28922 10.60639 | |
| H -19.39683 -6.89276 11.3442 | H -9.59427 1.22602 9.648 | |
| H -19.33052 -5.23903 10.68112 | O -13.73124 2.18244 7.08086 | |
| | O -14.31752 1.65163 6.15478 | |
| | H -9.6614 -0.36246 8.84273 | |
| | C -9.55262 4.43481 9.18039 | |
| | H -10.27419 3.7023 9.57015 | |
| | H -8.53748 4.0034 9.24542 | |
| | H -9.57946 5.32565 9.83292 | |
| | C -8.97825 6.0035 7.36522 | |
| | H -9.1844 6.38953 6.35258 | |
| | H -9.14825 6.83478 8.06934 | |
| | H -7.90874 5.73639 7.423 | |
| | C -11.33696 5.32189 7.65173 | |
| | H -11.56912 5.66989 6.63051 | |
| | H -12.04875 4.52481 7.91701 | |
| | H -11.49587 6.16942 8.34205 | |
| | H -12.46976 -1.98621 6.1872 | |
| | C -14.60347 -2.57265 8.00236 | |
| | H -14.11601 -2.87004 8.95093 | |
| | H -15.68078 -2.42932 8.24164 | |
| | C -15.20242 -3.53714 5.83179 | |
| | C -14.3872 -4.97194 7.55397 | |
| | C -16.62494 -4.02698 6.059 | |
| | H -14.73382 -4.16101 5.04754 | |
| | H -15.21092 -2.50142 5.45165 | |
| | C -15.78818 -5.50199 7.82906 | |
| | H -13.9052 -5.63243 6.80794 | |
| | H -13.77365 -5.01431 8.46986 | |
| | N -16.6034 -5.35843 6.63675 | |
| | H -17.19153 -4.06912 5.11852 | |
| | H -17.16912 -3.33447 6.73498 | |
| | H -15.75649 -6.55813 8.12469 | |
| | H -16.24894 -4.94038 8.66978 | |
| | N -14.37559 -3.61894 7.02789 | |

s09_4

Co -12.56648 1.05303 8.37615
N -11.94054 -0.10863 7.02908
N -13.9805 -0.21288 8.61046
C -12.54286 -1.41841 7.13096
C -11.05991 0.17646 6.12692
C -13.98965 -1.24501 7.56982
C -14.9052 -0.11466 9.50992
H -12.01331 -2.00541 7.91068
C -10.34339 1.40491 6.01045
H -10.82532 -0.60043 5.37547
H -14.55386 -0.82701 6.70991
C -15.00181 0.86561 10.54696
H -15.71511 -0.86363 9.51763
C -9.47076 1.54989 4.90351
C -10.46731 2.43985 6.99433
C -16.06942 0.72216 11.46771
C -14.05918 1.93306 10.68193
C -8.72002 2.68619 4.71445
H -9.41555 0.71459 4.19747
C -9.70886 3.6481 6.78224
O -11.19948 2.32619 8.04457
C -16.22711 1.56919 12.54008
C -14.18179 2.7892 11.83502
O -13.10978 2.13907 9.83789
C -7.76231 2.89036 3.54395
C -8.8788 3.71431 5.67903
C -17.36486 1.46142 13.55176
C -15.24631 2.58173 12.69255
C -13.13389 3.87677 12.09042

s09_5

Co -12.09863 0.15517 7.9927
N -11.01897 -0.58426 6.62287
N -13.04264 -1.50014 7.93227
C -11.23024 -2.00759 6.49559
C -10.20129 0.06915 5.86352
C -12.7134 -2.26787 6.73479
C -13.94683 -1.85207 8.78525
H -10.6491 -2.53865 7.27854
C -9.91642 1.46476 5.94221
H -9.67102 -0.49379 5.07245
H -13.24805 -1.78382 5.89082
C -14.36144 -1.13288 9.94813
H -14.46425 -2.80737 8.63228
C -9.05693 2.01253 4.95747
C -10.46842 2.286 6.98061
C -15.2898 -1.77948 10.80018
C -13.88892 0.18453 10.23864
C -8.73571 3.3491 4.93658
H -8.65713 1.32567 4.20397
C -10.17569 3.69793 6.93278
O -11.18466 1.8178 7.93842
C -15.75633 -1.18456 11.94992
C -14.3152 0.78433 11.4766
O -13.09692 0.83275 9.4552
C -7.81206 3.9885 3.90353
C -9.33084 4.15688 5.94016
C -16.80115 -1.81861 12.8651
C -15.22691 0.09419 12.25664
C -13.72846 2.13191 11.90641
C -7.272 2.96216 2.91296
C -6.62024 4.63878 4.61279
C -8.57954 5.05372 3.11425
H -9.10646 5.22706 5.9149
C -17.17839 -3.22438 12.40603
C -16.25854 -1.91341 14.29418
C -18.067 -0.95477 12.85847
H -15.56375 0.56399 13.18533
C -14.11298 3.22981 10.90902
C -12.19849 2.02292 11.98809
C -14.22926 2.55782 13.28449
H -8.08141 2.47689 2.3417
H -6.68492 2.17516 3.41612
H -6.60627 3.45578 2.18533
H -6.04359 3.88857 5.17998
H -5.94147 5.10926 3.87996
H -6.93566 5.42213 5.32106
H -9.43968 4.60757 2.58702
H -7.92452 5.52656 2.36158
H -8.96655 5.85491 3.76474
H -17.59967 -3.24345 11.38644
H -16.30738 -3.90198 12.42097
H -17.93612 -3.64761 13.08679
H -15.34223 -2.52709 14.32587
H -17.00479 -2.38168 14.9595
H -16.01555 -0.92574 14.71929
H -18.49365 -0.89104 11.84263
H -18.83577 -1.38662 13.52317

H -15.58809 2.46683 13.08483 C -20.58967 -7.24858 7.01346 H -12.30326 5.82896 13.38399
 C -13.69155 4.5471 10.56167 H -19.64978 -7.7787 9.52011 H -14.07203 5.69856 13.40926
 C -12.00194 3.22869 11.86339 H -19.95324 -9.3372 8.69994 H -13.07169 4.49764 14.27816
 C -13.95633 4.21868 12.99681 H -18.27803 -8.82095 9.04692 C -10.07797 4.59155 7.46507
 H -7.7703 1.7832 2.34492 H -18.60325 -8.23515 5.36014 O -11.60338 0.24615 10.38062
 H -6.42461 1.47034 3.47932 H -17.63857 -9.04397 6.63361 H -11.82533 0.91548 11.04489
 H -6.1831 2.53722 2.07788 H -19.28883 -9.61237 6.27117 C -10.20668 0.2466 10.1752
 H -5.57703 3.32882 4.99078 H -20.56939 -6.74673 6.0367 H -9.67089 -0.15415 11.05302
 H -5.31699 4.3234 3.52998 H -21.30591 -8.0849 6.96579 H -9.82356 1.2533 9.93385
 H -6.26724 4.96617 4.88908 H -20.94998 -6.53609 7.77346 O -13.97396 2.01491 7.27108
 H -8.84749 4.081 2.25 H -8.84749 4.081 2.25 O -14.61703 1.37947 6.4561
 H -7.22695 4.75896 1.92549
 H -8.22167 5.41786 3.24396
 H -18.27361 -1.02043 11.64748
 H -17.13049 -1.87874 12.72088
 H -18.66192 -1.24922 13.36772
 H -15.87348 -0.60562 14.52056
 H -17.45234 -0.06029 15.15355
 H -16.17978 1.12705 14.78911
 H -18.66066 1.47586 11.93757
 H -19.08096 1.1569 13.64445
 H -17.84718 2.37298 13.24111
 H -13.32166 4.1438 9.60853
 H -14.75921 4.80027 10.44449
 H -13.14431 5.48253 10.77692
 H -11.57582 2.84888 10.92184
 H -11.44295 4.14122 12.13558
 H -11.84151 2.4866 12.66715
 H -13.36003 5.13019 13.16798
 H -15.01436 4.52745 12.95132
 H -13.82369 3.56736 13.87795
 C -10.25048 5.07324 7.50267
 O -10.83339 0.19285 9.91689
 H -11.30608 0.71651 10.58093
 C -9.48173 0.5973 9.88694
 H -8.94675 0.28686 10.80132
 H -9.37779 1.68765 9.74746
 O -13.24803 1.56886 6.60143
 O -14.44547 1.658 6.78625
 H -9.00702 0.1023 9.02581
 C -9.91539 4.87347 8.98554
 H -10.42632 3.99031 9.39365
 H -8.82687 4.75278 9.1298
 H -10.23581 5.75501 9.56906
 C -9.65574 6.41353 7.07564
 H -9.88202 6.65533 6.02319
 H -10.08634 7.21822 7.69431
 H -8.56078 6.44639 7.21081
 C -11.77142 5.16056 7.31871
 H -12.02403 5.3501 6.26116
 H -12.27171 4.2325 7.63602
 H -12.17983 5.99362 7.91813
 H -11.13706 -2.19646 6.17472
 C -13.31377 -3.13505 7.71374
 H -12.72492 -3.84624 7.08325
 H -12.97551 -3.30447 8.75355
 C -15.18997 -3.61797 6.26974
 C -15.11731 -4.54007 8.47323
 C -16.69372 -3.78675 6.22592
 H -14.7026 -4.51712 5.81836
 H -14.90198 -2.74922 5.65405
 C -16.6215 -4.72603 8.46704
 H -14.62756 -5.48636 8.13558
 H -14.77679 -4.34437 9.50612
 N -17.10034 -4.85961 7.10839
 H -17.04031 -4.02252 5.21066
 H -17.17327 -2.83862 6.54297
 H -16.90444 -5.61214 9.04752
 H -17.09312 -3.84091 8.94358
 N -14.7292 -3.42317 7.63275
 H -16.14147 -1.13402 10.8316
 C -17.98251 -5.80894 6.66009
 O -18.40232 -5.84818 5.52513
 O -18.3009 -6.67279 7.63422
 C -19.27758 -8.46869 8.74633
 C -19.21876 -7.77799 7.39677
 C -18.6512 -8.71652 6.3462

s09_8
 Co -12.84171 1.04366 8.72383
 N -12.29106 -0.32913 7.55241
 N -14.29513 -0.117 9.1698
 C -12.94379 -1.58161 7.85612
 C -11.43636 -0.20838 6.59019
 C -14.37497 -1.27779 8.27993
 C -15.16537 0.12076 10.09734
 H -12.42753 -2.06924 8.7092
 C -10.69333 0.97449 6.27095
 H -11.25357 -1.09243 5.95111
 H -14.93027 -0.94903 7.37735
 C -15.16511 1.21848 11.01431
 H -15.99298 -0.59446 10.24155
 C -9.8742 0.92916 5.11543
 C -10.74634 2.1351 7.10134
 C -16.15646 1.21573 12.02653
 C -14.19074 2.26441 10.94939
 C -9.11486 2.00782 4.72746
 H -9.87038 0.00016 4.53557
 C -9.97921 3.28135 6.67955
 O -11.4252 2.18976 8.19161
 C -16.19612 2.17636 13.011
 C -14.17339 3.22528 12.0237
 O -13.32988 2.36134 9.9988
 C -8.21617 2.01862 3.49397
 C -9.20708 3.16796 5.5387
 C -17.24983 2.2224 14.11428
 C -15.16685 3.15125 12.98237
 C -13.05293 4.26736 12.09287
 C -8.25197 0.68492 2.75495
 C -6.76873 2.29137 3.91456
 C -8.68102 3.11164 2.52658
 H -8.62546 4.04015 5.227
 C -18.26466 1.09219 13.97668
 C -16.57412 2.09095 15.48274
 C -18.00613 3.55261 14.04422
 H -15.1595 3.89265 13.78657
 C -13.12992 5.21801 10.89409
 C -11.68831 3.56213 12.10497
 C -13.13964 5.11088 13.363
 H -9.26634 0.44148 2.39609
 H -7.90242 -0.14617 3.39079
 H -7.59143 0.72563 1.87272
 H -6.40664 1.51069 4.60482
 H -6.10372 2.30376 3.03321
 H -6.66022 3.26295 4.42358
 H -9.72018 2.93294 2.2025
 H -8.04072 3.13232 1.62727
 H -8.64187 4.11436 2.98247

s09_9
 Co -12.87708 0.92685 7.44938
 N -12.34862 0.36888 5.72367
 N -14.55637 0.11411 7.04717
 C -13.21618 -0.6647 5.20873
 C -11.32146 0.80073 5.06747
 C -14.64229 -0.37942 5.66484
 C -15.57552 0.11729 7.84211
 H -12.90293 -1.64567 5.61478
 C -10.36114 1.74634 5.53856
 H -11.15999 0.40746 4.04624
 H -15.03244 0.45683 5.04663
 C -15.58225 0.48207 9.22391
 H -16.54091 -0.26076 7.46406
 C -9.35844 2.17012 4.63199
 C -10.39034 2.2338 6.88634

| | | | | | | | | |
|-------------|----------|----------|--------------|----------|----------|-------------|----------|----------|
| C -16.76364 | 0.20604 | 9.95518 | C -14.77451 | -2.91076 | 7.3189 | H -5.73616 | 1.92856 | 5.12132 |
| C -14.4311 | 1.03233 | 9.87001 | C -16.04483 | -3.8879 | 5.51664 | H -4.97409 | 3.40869 | 4.47389 |
| C -8.39005 | 3.07772 | 4.99252 | C -14.30439 | -4.29542 | 7.71009 | H -5.70714 | 3.41859 | 6.09425 |
| H -9.38423 | 1.74601 | 3.62263 | H -15.66902 | -2.65627 | 7.94468 | H -8.18211 | 5.29499 | 3.91313 |
| C -9.40377 | 3.2176 | 7.25711 | H -13.99249 | -2.17736 | 7.56886 | H -6.40393 | 5.37414 | 3.76193 |
| O -11.23686 | 1.82203 | 7.76203 | C -15.60581 | -5.2738 | 5.95177 | H -7.16594 | 5.43581 | 5.36731 |
| C -16.84053 | 0.40334 | 11.31517 | H -17.04544 | -3.68288 | 5.9748 | H -17.98344 | -2.25037 | 11.66627 |
| C -14.48318 | 1.18923 | 11.30118 | H -16.18555 | -3.85853 | 4.4215 | H -17.44159 | -1.42449 | 13.06134 |
| O -13.36815 | 1.37417 | 9.22911 | N -15.32388 | -5.27435 | 7.37519 | H -19.15967 | -1.86572 | 12.90006 |
| C -7.28498 | 3.56075 | 4.05717 | H -14.07029 | -4.33994 | 8.77986 | H -18.2771 | 1.06376 | 13.2235 |
| C -8.45946 | 3.5831 | 6.31628 | H -13.38686 | -4.54914 | 7.14907 | H -19.9479 | 0.52716 | 12.95118 |
| C -18.09145 | 0.12643 | 12.14514 | H -16.39179 | -6.0106 | 5.73861 | H -19.21328 | 1.74454 | 11.8706 |
| C -15.66474 | 0.878 | 11.95009 | H -14.6882 | -5.57116 | 5.41392 | H -19.38301 | -1.46509 | 9.8721 |
| C -13.24599 | 1.6848 | 12.05633 | N -15.08999 | -2.85639 | 5.89663 | H -20.56387 | -0.90965 | 11.07652 |
| C -7.38241 | 2.9101 | 2.6811 | H -17.61925 | -0.18768 | 9.39528 | H -19.90488 | 0.25007 | 9.89847 |
| C -5.91832 | 3.21099 | 4.65397 | C -16.37729 | -5.52803 | 8.22433 | H -13.20632 | 2.99651 | 10.61973 |
| C -7.3887 | 5.07807 | 3.87405 | O -17.42497 | -6.02184 | 7.87094 | H -14.30572 | 3.39898 | 11.97053 |
| H -7.70959 | 4.32495 | 6.60561 | O -16.07642 | -5.15954 | 9.47725 | H -12.57091 | 3.11426 | 12.28351 |
| C -19.26334 | -0.31789 | 11.27556 | C -16.31313 | -4.55378 | 11.70838 | H -12.04733 | 0.74822 | 13.59224 |
| C -17.80219 | -0.98372 | 13.15991 | C -17.08118 | -5.11569 | 10.52679 | H -11.66042 | 0.72049 | 12.32699 |
| C -18.50934 | 1.40016 | 12.88664 | C -17.59087 | -6.51267 | 10.83229 | H -12.64019 | -0.59559 | 11.63799 |
| H -15.70145 | 1.004 | 13.03601 | C -18.19829 | -4.16574 | 10.12849 | H -13.14619 | 1.41652 | 13.98455 |
| C -12.92127 | 3.12346 | 11.64004 | H -15.91521 | -3.55279 | 11.47027 | H -14.87512 | 1.70666 | 13.75232 |
| C -12.03975 | 0.78134 | 11.7586 | H -16.97254 | -4.46758 | 12.58695 | H -14.22415 | 0.04479 | 13.63277 |
| C -13.46036 | 1.67126 | 13.56826 | H -15.46805 | -5.21011 | 11.96993 | C -9.5223 | 3.40355 | 8.93909 |
| H -8.33579 | 3.14941 | 2.18027 | H -18.14616 | -6.93118 | 9.98212 | O -12.40513 | -1.15702 | 8.32701 |
| H -7.28906 | 1.81231 | 2.73836 | H -16.74742 | -7.1815 | 11.06883 | H -12.58615 | -0.73531 | 9.18333 |
| H -6.56888 | 3.2767 | 2.03301 | H -18.25565 | -6.47904 | 11.71091 | C -11.04113 | -1.513 | 8.27003 |
| H -5.81434 | 2.12047 | 4.78432 | H -18.76505 | -4.54409 | 9.26612 | H -10.81774 | -2.36896 | 8.93092 |
| H -5.1051 | 3.55527 | 3.9912 | H -18.89418 | -4.03703 | 10.97431 | H -10.38439 | -0.6652 | 8.53113 |
| H -5.76326 | 3.68084 | 5.63889 | H -17.7809 | -3.17332 | 9.87878 | O -13.50682 | 2.71051 | 6.67804 |
| H -8.364 | 5.35536 | 3.43962 | | | | O -14.03395 | 2.88892 | 5.5995 |
| H -6.5965 | 5.44212 | 3.19657 | | | | H -10.81259 | -1.81245 | 7.23537 |
| H -7.28183 | 5.62079 | 4.82734 | | | | C -9.34413 | 2.24656 | 9.92858 |
| H -19.53232 | 0.4475 | 10.52804 | Co -12.99412 | 0.76026 | 7.30832 | H -10.0996 | 1.46443 | 9.76966 |
| H -19.04906 | -1.25969 | 10.74248 | N -12.36285 | 0.26605 | 5.60097 | H -8.34227 | 1.79441 | 9.82398 |
| H -20.15229 | -0.49323 | 11.90429 | N -14.67663 | 0.07676 | 6.71675 | H -9.44293 | 2.61204 | 10.96669 |
| H -17.52276 | -1.92049 | 12.64726 | C -13.23833 | -0.69197 | 4.96948 | C -8.44406 | 4.4398 | 9.24851 |
| H -18.6933 | -1.1859 | 13.77993 | C -11.28179 | 0.69841 | 5.03881 | H -8.51891 | 5.32594 | 8.59523 |
| H -16.97771 | -0.7176 | 13.84174 | C -14.68466 | -0.34192 | 5.31726 | H -8.56061 | 4.78825 | 10.28817 |
| H -18.72514 | 2.2154 | 12.17563 | C -15.76395 | 0.14319 | 7.41254 | H -7.42516 | 4.02622 | 9.15635 |
| H -19.41914 | 1.21874 | 13.48508 | H -12.99532 | -1.69673 | 5.36201 | C -10.88422 | 4.07839 | 9.15242 |
| H -17.72774 | 1.75735 | 13.57659 | C -10.32812 | 1.58133 | 5.62903 | H -11.01632 | 4.91415 | 8.44328 |
| H -12.70934 | 3.19032 | 10.56315 | H -11.06807 | 0.36427 | 4.00629 | H -11.71671 | 3.37178 | 9.101377 |
| H -13.76419 | 3.79594 | 11.874 | H -14.94812 | 0.54208 | 4.69869 | H -10.94521 | 4.49256 | 10.17447 |
| H -12.0351 | 3.48867 | 12.1897 | C -15.86338 | 0.40215 | 8.81546 | H -13.09353 | -0.72364 | 3.87269 |
| H -11.72611 | 0.8743 | 10.70688 | H -16.71898 | -0.08536 | 6.91322 | C -15.68198 | -1.46107 | 4.91888 |
| H -11.17903 | 1.07502 | 12.38452 | C -9.27295 | 2.04859 | 4.80748 | H -16.66034 | -1.00067 | 4.70083 |
| H -12.27195 | -0.27563 | 11.98583 | C -10.41608 | 1.96226 | 7.00825 | H -15.31555 | -1.82155 | 3.93256 |
| H -12.54486 | 2.02281 | 14.07206 | C -17.09771 | 0.09122 | 9.43549 | C -14.79849 | -3.26107 | 6.38789 |
| H -14.27825 | 2.3429 | 13.87879 | C -14.74186 | 0.83333 | 9.58965 | C -17.14828 | -2.6113 | 6.57872 |
| H -13.68025 | 0.65916 | 13.94993 | C -8.30829 | 2.9063 | 5.2823 | C -15.18268 | -4.65021 | 6.87116 |
| C -9.45749 | 3.85696 | 8.64684 | H -9.2572 | 1.70405 | 3.76808 | H -14.36397 | -2.68988 | 7.24553 |
| O -12.07436 | -0.91848 | 8.45035 | C -9.4265 | 2.88703 | 7.5019 | H -14.00088 | -3.36339 | 5.63011 |
| H -12.25184 | -0.58531 | 9.34408 | O -11.31836 | 1.50511 | 7.80396 | C -17.49551 | -4.02563 | 7.00317 |
| C -10.68975 | -1.14454 | 8.2992 | C -17.25309 | 0.12269 | 10.80254 | H -17.06975 | -2.02766 | 7.52355 |
| H -10.0943 | -0.26271 | 8.5928 | C -14.89344 | 0.87134 | 11.02011 | H -17.96984 | -2.17131 | 5.986 |
| H -10.49987 | -1.33979 | 7.23235 | O -13.61826 | 1.17492 | 9.05598 | N -16.35998 | -4.57978 | 7.71907 |
| O -13.59083 | 2.76459 | 6.65508 | C -7.1543 | 3.44218 | 4.43963 | H -14.35315 | -5.11818 | 7.41496 |
| O -14.53955 | 3.28011 | 7.20593 | C -8.4331 | 3.30709 | 6.63708 | H -15.43131 | -5.29073 | 6.00591 |
| H -10.35727 | -2.02489 | 8.87621 | C -18.5339 | -0.30099 | 11.51678 | H -18.37589 | -4.02922 | 7.66015 |
| C -9.30194 | 2.79347 | 9.74101 | C -16.12023 | 0.51838 | 11.55571 | H -17.70026 | -4.66316 | 6.12516 |
| H -10.14788 | 2.09155 | 9.73633 | C -13.71583 | 1.3005 | 11.90293 | N -15.9299 | -2.58467 | 5.78881 |
| H -8.36618 | 2.22275 | 9.60361 | C -7.19372 | 2.9007 | 3.0143 | H -17.92378 | -0.21747 | 8.78695 |
| H -9.25886 | 3.27434 | 10.73455 | C -5.82144 | 3.02727 | 5.07023 | C -16.27188 | -4.29041 | 9.06203 |
| C -8.34498 | 4.88393 | 8.84519 | C -7.23215 | 4.9705 | 4.3704 | O -17.19755 | -3.86602 | 9.71967 |
| H -8.40416 | 5.71082 | 8.11719 | H -7.6872 | 4.00962 | 7.01966 | O -15.04576 | -4.55648 | 9.5271 |
| H -8.43258 | 5.3285 | 9.85037 | C -18.25922 | -1.56857 | 12.33394 | C -13.152 | -4.51262 | 10.87254 |
| H -7.34124 | 4.43055 | 8.7734 | C -19.01428 | 0.82114 | 12.44077 | C -14.61561 | -4.11362 | 10.84445 |
| C -10.79787 | 4.58546 | 8.81385 | C -19.65168 | -0.61987 | 10.52864 | C -15.39145 | -4.83797 | 11.92943 |
| H -10.89981 | 5.38682 | 8.06179 | H -16.22718 | 0.52937 | 12.64423 | C -14.7417 | -2.60483 | 10.94254 |
| H -11.65005 | 3.8962 | 8.70691 | C -13.43463 | 2.78955 | 11.67534 | H -12.60554 | -4.00507 | 10.0601 |
| H -10.85609 | 5.05142 | 9.81367 | C -12.44644 | 0.49252 | 11.58615 | H -12.69657 | -4.22619 | 11.83375 |
| H -13.16432 | -0.74277 | 4.10602 | C -14.0177 | 1.10147 | 13.38723 | H -13.03962 | -5.60068 | 10.74184 |
| C -15.56111 | -1.57142 | 5.42435 | H -8.11926 | 3.19229 | 2.48956 | H -16.45349 | -4.55757 | 11.92115 |
| H -16.58112 | -1.34387 | 5.81852 | H -7.11537 | 1.80048 | 2.9905 | H -15.31215 | -5.92883 | 11.79235 |
| H -15.6991 | -1.65067 | 4.32945 | H -6.34617 | 3.30398 | 2.43527 | H -14.96668 | -4.58655 | 12.91511 |

H -15.78487 -2.25936 10.90404 H -11.05548 -0.35305 9.53387 C -6.74836 -10.1357 -13.7074
H -14.30285 -2.25773 11.89381 H -11.00091 -1.32861 8.04814 O -8.50531 -8.63133 -13.2321
H -14.18976 -2.12826 10.11256 O -13.96692 2.71636 6.95371 C -16.29703 -5.80626 -14.1062
O -14.62065 3.47261 7.63517 C -14.49808 -7.59076 -14.3561
H -11.2085 -2.15119 9.6236 C -2.92611 -9.643 -13.7368
C -9.72899 2.33586 9.96947 C -5.3806 -10.3165 -13.8132
H -10.73219 1.88957 10.02492 C -7.73879 -11.27057 -13.9835
H -8.98004 1.52463 9.92679 C -16.48888 -4.38608 -13.5843
H -9.55542 2.90271 10.90151 C -17.25061 -6.7283 -13.3401
C -8.27937 4.0285 8.91227 C -16.66101 -5.81902 -15.5943
H -8.12317 4.76574 8.10674 H -15.28315 -8.19763 -14.8159
H -8.28894 4.58602 9.86341 C -2.04183 -8.43822 -13.4308
H -7.40796 3.35136 8.93593 C -2.53973 -10.77268 -12.7772
C -10.7311 4.29905 8.76543 C -2.65099 -10.08181 -15.1784
H -10.60771 5.01766 7.93702 H -5.01606 -11.30544 -14.1053
H -11.71526 3.81636 8.66347 C -8.66671 -10.88567 -15.1416
H -10.72587 4.86906 9.71147 C -8.56749 -11.56822 -12.7271
H -14.09744 -0.93066 4.55127 C -7.02749 -12.56499 -14.3727
C -16.64295 -1.13226 5.81568 H -15.84687 -6.36519 -14.1156
H -17.55353 -0.68571 6.26031 H -16.27198 -4.3121 -12.5051
H -16.82176 -1.09218 4.72646 H -17.53472 -4.0689 -13.7324
C -16.01729 -3.44514 5.20975 H -17.01643 -6.72677 -12.2621
C -16.23299 -2.81514 7.57384 H -18.29618 -6.39545 -13.4635
C -16.36314 -4.87807 5.57545 H -17.19217 -7.77108 -13.6924
H -14.90611 -3.39131 5.11522 H -15.99248 -5.1547 -16.1675
H -16.43415 -3.19207 4.21879 H -17.69854 -5.47191 -15.7434
C -16.53515 -4.26694 7.89659 H -16.58447 -6.82744 -16.0325
H -15.16231 -2.61492 7.82624 H -2.25063 -7.59277 -14.1081
H -16.83195 -2.15853 8.2303 H -2.17062 -8.08729 -12.3927
N -15.89451 -5.13783 6.92575 H -0.98024 -8.70878 -13.5582
H -15.88745 -5.58718 4.885 H -2.72099 -10.47744 -11.7298
H -17.45639 -5.02919 5.54765 H -1.46923 -11.02233 -12.8818
H -16.2027 -4.52161 8.91021 H -3.11327 -11.69442 -12.9679
H -17.62384 -4.4448 7.8371 H -2.91257 -9.28 -15.8893
N -16.55562 -2.52068 6.1906 H -1.58238 -10.32466 -15.3139
H -18.29427 0.71149 9.85087 H -3.23118 -10.97644 -15.4574
C -14.58 -5.52542 7.04845 H -9.28391 -10.01043 -14.8924
O -13.93309 -5.99746 6.13996 H -8.08159 -10.6511 -16.0479
O -14.12513 -5.3074 8.28916 H -9.3392 -11.72809 -15.3838
C -11.9405 -4.44747 7.63077 H -9.16324 -10.69545 -12.421
C -12.70135 -5.35649 8.58352 H -9.26959 -12.39808 -12.9217
C -12.20927 -6.7908 8.53191 H -7.91504 -11.86787 -11.8883
C -12.63192 -4.80625 9.99581 H -7.77647 -13.35274 -14.5575
H -12.41771 -3.45097 7.60311 H -6.43732 -12.45243 -15.2981
H -10.90667 -4.31947 7.99181 H -6.35675 -12.93131 -13.5765
H -11.90744 -4.85786 6.61281 C -12.91499 -9.5325 -14.8059
H -12.79308 -7.42082 9.22241 O -9.58823 -7.92764 -10.876
H -12.29591 -7.20157 7.51638 H -9.12025 -8.70263 -11.2279
H -11.15214 -6.83259 8.84164 C -10.88102 -8.3062 -10.4617
H -13.24734 -5.41182 10.6797 H -11.39921 -8.91609 -11.2218
H -11.5921 -4.81727 10.36061 H -11.46796 -7.38658 -10.3108
H -13.00333 -3.76785 10.0165 O -9.21243 -6.28282 -14.8687
O -9.00185 -7.11254 -15.7283
H -10.85503 -8.85662 -9.5048
C -12.29265 -10.43884 -13.7348

s09_11
Co -13.45722 0.79837 7.81124
N -13.07085 0.10916 6.09914
N -15.25511 0.23272 7.49156
C -14.11956 -0.77653 5.64768
C -11.98467 0.29708 5.42308
C -15.45463 -0.20287 6.09959
C -16.24058 0.46054 8.29813
H -13.97187 -1.76477 6.12513
C -10.86121 1.075 5.83615
H -11.90594 -0.1855 4.43102
H -15.62949 0.72292 5.50912
C -16.16688 0.95393 9.63851
H -17.26588 0.24344 7.95163
C -9.79031 1.21661 4.91934
C -10.80592 1.68128 7.13431
C -17.3797 1.01921 10.36891
C -14.93008 1.35501 10.23613
C -8.66671 1.94899 5.22259
H -9.8911 0.71676 3.95017
C -9.65045 2.48827 7.44068
O -11.72214 1.52629 8.02104
C -17.42012 1.44167 11.67721
C -14.95978 1.78111 11.61219
O -13.81209 1.34004 9.59693
C -7.48362 2.12614 4.27494
C -8.646 2.57587 6.49532
C -18.69895 1.52611 12.50599
C -16.18058 1.80751 12.26068
C -13.66014 2.19008 12.31037
C -7.69342 1.38107 2.96071
C -6.21184 1.58235 4.93296
C -7.29693 3.61248 3.95451
H -7.76731 3.18075 6.73672
C -19.92403 1.10045 11.70322
C -18.58427 0.60517 13.7246
C -18.91469 2.96845 12.97439
H -16.19889 2.13742 13.30334
C -13.03375 3.39049 11.59089
C -12.67659 1.0122 12.31872
C -13.89602 2.59415 13.76391
H -8.58081 1.74798 2.41765
H -7.80995 0.2954 3.11823
H -6.82096 1.52682 2.30206
H -6.31714 0.5086 5.16314
H -5.34419 1.70442 4.26112
H -5.97607 2.10388 5.87493
H -8.19848 4.0261 3.4718
H -6.44426 3.75759 3.26821
H -7.09827 4.21123 4.85831

s11_1
Co -9.42896 -7.00211 -12.8946
N -10.34566 -5.44293 -12.3596
N -7.83367 -6.0487 -12.4586
C -9.49963 -4.58947 -11.5603
C -11.59614 -5.18017 -12.5588
C -8.0854 -4.64431 -12.1169
C -6.63334 -6.49483 -12.6525
H -9.47845 -4.97756 -10.5198
C -12.54344 -6.02985 -13.2032
H -11.98513 -4.21592 -12.1806
H -8.0744 -4.06737 -13.0662
C -6.26775 -7.81336 -13.0725
H -5.7982 -5.79186 -12.4891
C -13.86201 -5.53346 -13.358
C -12.19464 -7.35333 -13.6343
C -4.88277 -8.07722 -13.2045
C -7.23448 -8.83309 -13.3346
C -14.86089 -6.28882 -13.9241
H -14.05945 -4.51706 -13.0009
C -13.2365 -8.14373 -14.2462
O -11.02276 -7.85601 -13.4814
C -4.40781 -9.31433 -13.5754
H -9.42896 -7.00211 -12.8946
N -10.34566 -5.44293 -12.3596
H -11.30148 -10.07765 -13.4238
H -12.9458 -10.49777 -12.8453
H -12.17846 -11.46358 -14.1304
C -14.16457 -10.24146 -15.3253
H -14.64926 -9.69157 -16.1495
H -13.88415 -11.23187 -15.7204
H -14.91235 -10.4027 -14.5294
C -11.94808 -9.37221 -15.9853
H -12.42053 -8.78937 -16.7947
H -11.0228 -8.85832 -15.6849
H -11.67423 -10.36046 -16.3958
H -9.8768 -3.54965 -11.5197
C -7.10724 -4.03219 -11.1236
H -7.5937 -3.14746 -10.642
H -6.95571 -4.77182 -10.3147
C -5.8528 -2.46276 -12.4656

C -4.78693 -3.59022 -10.6563 H -1.99706 -11.53316 -16.1117 C -12.17519 -7.34553 -13.643
C -4.50226 -2.19188 -13.0899 H -3.61747 -12.02351 -15.5662 C -4.87005 -8.15494 -13.2057
H -6.14524 -1.58977 -11.832 H -9.31607 -10.34166 -14.0244 C -7.23182 -8.88033 -13.3257
H -6.61269 -2.55881 -13.2599 H -8.44368 -11.51012 -15.0562 C -14.83152 -6.25716 -13.9361
C -3.43954 -3.3142 -11.2849 H -9.47592 -12.09629 -13.7237 H -14.00693 -4.48098 -13.0419
H -5.01879 -2.78479 -9.9178 H -8.59657 -9.99441 -11.6026 C -13.2277 -8.13304 -14.2401
H -4.175033 -4.54555 -10.1028 H -8.74959 -11.73862 -11.2975 O -11.00836 -7.85882 -13.4868
N -3.476 -2.10556 -12.0756 H -7.20798 -10.91472 -10.9407 C -4.412 -9.40519 -13.5531
H -4.53666 -1.24267 -13.6527 H -7.72281 -13.38683 -12.7018 C -6.7635 -10.19645 -13.6727
H -4.27343 -3.00208 -13.8274 H -6.62739 -12.98821 -14.0403 O -8.49989 -8.65949 -13.2295
H -2.67521 -3.20884 -10.4951 H -6.10933 -12.73414 -12.3471 C -16.26363 -5.76264 -14.118
H -3.14374 -4.19578 -11.9099 C -12.8112 -9.57356 -13.4974 C -14.48397 -7.56845 -14.352
C -2.18954 -1.77891 -12.6298 O -8.81951 -6.77352 -11.3583 C -2.93493 -9.75725 -13.7077
N -5.81837 -3.67592 -11.6724 H -8.556 -7.70657 -11.4352 C -5.39836 -10.3981 -13.7735
H -4.19582 -7.25055 -12.9959 C -10.00427 -6.66055 -10.6044 C -7.76977 -11.3225 -13.9265
H -1.44277 -1.666 -11.827 H -10.79721 -7.33226 -10.9762 C -16.43898 -4.3339 -13.6137
H -1.81372 -2.55819 -13.3348 H -10.36288 -5.62347 -10.6965 C -17.22279 -6.66495 -13.3355
H -2.23918 -0.8255 -13.1806 O -9.14736 -7.03166 -15.7028 C -16.63478 -5.79116 -15.604
O -9.18984 -8.1691 -16.1164 H -15.27717 -15.7133 -14.8004
H -9.82577 -6.86373 -9.5339 C -2.03394 -8.56091 -13.4181
s11_2
Co -9.01082 -6.78529 -13.5899 C -11.98465 -9.9258 -12.2525 C -2.56541 -10.87825 -12.7314
N -9.80059 -5.07617 -13.6771 H -10.95582 -9.54311 -12.3229 C -2.66502 -10.22076 -15.1425
N -7.35232 -5.88156 -13.8703 H -12.45635 -9.5118 -11.3428 H -5.04736 -11.39729 -14.0468
C -8.8313 -4.03291 -13.4345 H -11.93873 -11.02257 -12.1313 C -8.69253 -10.94811 -15.0923
C -11.06239 -4.82163 -13.793 C -14.14064 -10.3167 -13.3758 C -8.60283 -11.58192 -12.6643
C -7.49525 -4.42786 -14.0465 C -14.78168 -10.18307 -14.2633 H -15.79246 -3.62438 -14.1574
C -6.24528 -6.48442 -14.157 H -8.68722 -3.91629 -12.3427 H -13.94638 -11.39786 -17.48235 -4.00834 -13.7612
H -8.68722 -3.91629 -12.3427 H -13.94638 -11.39786 -13.2802 H -16.98309 -6.65229 -12.2587
C -12.11806 -5.78194 -13.8332 H -14.71221 -10.00279 -12.4851 H -18.26544 -6.32273 -13.4579
H -11.36941 -3.75966 -13.8357 H -14.71221 -10.00279 -17.17711 -7.71263 -13.6748
H -7.5425 -4.24396 -15.1406 C -12.10949 -10.08294 -14.7618 H -15.96252 -5.14093 -16.1889
C -5.98069 -7.8879 -14.0814 C -12.10949 -10.08294 -17.66957 -5.43585 -15.7528
H -5.38485 -5.87089 -14.4803 H -12.7471 -9.9191 -15.6475 H -16.57016 -6.8059 -16.0293
C -13.437 -5.29137 -13.9968 H -12.7471 -9.9191 -15.6475 H -16.57016 -6.8059 -16.0293
C -11.8665 -7.18088 -13.6473 H -11.15125 -9.56981 -14.9286 H -2.22986 -7.72242 -14.1077
C -4.67285 -8.31222 -14.4227 H -11.90853 -11.1662 -14.6832 H -2.15855 -8.19361 -12.3852
C -6.96545 -8.82727 -13.6392 H -9.16842 -3.0513 -13.8195 H -0.97619 -8.84816 -13.5406
C -14.53026 -6.12505 -13.9794 H -6.36361 -3.55916 -13.4958 H -2.7439 -10.56563 -11.6886
H -13.55577 -4.21098 -14.1311 C -5.37879 -3.93181 -13.8697 H -1.49828 -11.14381 -12.8309
C -13.01001 -8.06089 -13.6299 H -6.48257 -2.55885 -13.952 H -3.15101 -11.79487 -12.9097
O -10.68756 -7.66539 -13.4752 C -6.05981 -4.59683 -11.3157 H -2.91364 -9.42532 -15.8651
C -4.28968 -9.63045 -14.338 C -5.49966 -2.30184 -11.6467 H -1.60008 -10.48161 -15.2732
C -6.56951 -10.20773 -13.5346 C -6.17501 -4.34339 -9.8306 H -3.25854 -11.11034 -15.4093
O -8.16877 -8.47778 -13.3302 H -5.0285 -4.95706 -11.5545 H -9.2978 -10.05978 -14.8605
C -15.96998 -5.64726 -14.1467 H -6.7645 -5.39742 -11.5879 H -8.10456 -10.73966 -16.003
C -14.26571 -7.50524 -13.7904 H -5.62437 -2.05708 -10.1593 H -9.37647 -11.78598 -15.3175
C -2.89584 -10.13751 -14.6976 H -4.43153 -2.5241 -11.8898 H -9.18514 -10.69379 -12.3767
C -5.27383 -10.54331 -13.885 H -5.77665 -1.38569 -12.1975 H -9.31731 -12.40499 -12.8421
C -7.57629 -11.26335 -13.0681 H -5.32116 -3.25511 -9.4116 H -7.9548 -11.87422 -11.8195
C -16.04715 -4.13588 -14.3366 H -5.89716 -5.25813 -9.2783 H -7.83661 -13.41507 -14.4586
C -16.78281 -6.01267 -12.9009 H -7.24871 -4.13133 -9.5882 H -6.48423 -12.54864 -15.2156
C -16.59412 -6.31392 -15.3766 H -4.931 -1.25294 -9.8553 H -6.4118 -12.99395 -13.4848
H -15.12729 -8.17857 -13.7746 H -6.66151 -1.69737 -9.939 C -12.92317 -9.53279 -14.7815
C -1.98003 -9.00501 -15.1503 H -5.37315 -3.03683 -7.9918 O -9.56561 -7.89983 -10.8808
C -2.25829 -10.80495 -13.4751 C -6.36367 -3.38763 -12.0643 H -9.09704 -8.68156 -11.2164
C -2.99751 -11.15394 -15.839 N -8.39674 -7.54358 -14.7553 C -10.8596 -8.27207 -10.4642
H -4.98109 -11.59438 -13.8126 H -4.67179 -2.23833 -7.6986 H -11.37516 -8.89474 -11.2157
C -8.77369 -11.29793 -14.0243 H -6.38993 -2.74057 -7.638 H -11.4477 -7.35058 -10.3303
C -8.0571 -10.95195 -11.6452 H -5.08582 -3.95348 -7.4511 O -9.18443 -6.33113 -14.907
C -6.96411 -12.66256 -13.0415 H -15.50234 -3.80695 -15.2377 O -8.98551 -7.17791 -15.7523
H -15.63816 -3.59155 -13.4685 **s11_3**
H -17.09854 -3.82464 -14.4551 Co -9.40318 -7.014 -12.9189 H -12.30849 -10.43109 -13.6993
H -16.35848 -5.53527 -12.0014 N -10.29938 -5.43494 -12.4081 H -11.31144 -10.07832 -13.3976
H -17.82864 -5.67457 -13.0063 N -7.79511 -6.07249 -12.5053 H -12.95876 -10.46807 -12.8065
H -16.80404 -7.10017 -12.7227 C -9.43936 -4.57713 -11.6284 H -12.20918 -11.46308 -14.0799
H -16.03069 -6.05834 -16.2899 C -11.54823 -5.1624 -12.6042 C -14.182 -10.23451 -15.2883
H -17.63734 -5.97878 -15.5129 C -8.0293 -4.65857 -12.1918 H -14.66282 -9.69 -16.1183
H -16.60887 -7.41268 -15.2908 C -6.60054 -6.53796 -12.6881 H -13.91373 -11.23306 -15.6711
H -2.36719 -8.49837 -16.0505 H -9.41677 -4.94674 -10.5812 C -14.92927 -10.37705 -14.4883
H -1.84204 -8.24748 -14.3602 C -12.508 -6.01218 -13.2299 C -11.95738 -9.4002 -15.9654
H -0.98329 -9.40488 -15.4009 H -11.92492 -4.18803 -12.2398
H -2.16812 -10.0902 -12.6396 H -8.01786 -4.1023 -13.1534
H -1.24715 -11.17551 -13.7186 C -6.25148 -7.86925 -13.081
H -2.8467 -11.66519 -13.1165 H -5.7567 -5.84219 -12.5394
H -3.44498 -10.69364 -16.736 C -13.82212 -5.50439 -13.3854

H -12.42473 -8.82244 -16.7813 H -17.18935 -4.96251 -15.7351 C -11.38201 -5.0965 -12.8465
H -11.02471 -8.8942 -15.6746 H -16.27926 -6.48295 -15.8875 C -7.83511 -4.69447 -12.5723
H -11.69717 -10.39725 -16.3633 H -2.07136 -8.94748 -14.6293 C -6.4952 -6.66331 -12.9526
H -9.80419 -3.53236 -11.6047 H -1.93458 -9.20402 -12.8655 H -9.18637 -4.77868 -10.9085
C -7.03598 -4.03693 -11.2198 H -0.92225 -10.14165 -13.9864 C -12.39034 -5.96155 -13.3657
H -7.51313 -3.14448 -10.7427 H -2.73884 -11.38089 -11.8306 H -11.71114 -4.07813 -12.5659
H -6.87557 -4.76594 -10.4029 H -1.65836 -12.24966 -12.9568 H -7.82311 -4.22351 -13.5789
C -5.80185 -2.47503 -12.5869 H -3.37818 -12.68966 -12.8535 C -6.20836 -8.04039 -13.2267
C -4.70087 -3.62634 -10.7915 H -3.07912 -10.75291 -16.1042 H -5.62387 -5.98823 -12.9104
C -4.44891 -2.20797 -13.2302 H -1.85582 -11.88134 -15.455 C -13.68714 -5.41664 -13.5386
H -6.10895 -1.60592 -11.9523 H -3.58039 -12.31379 -15.4122 C -12.11979 -7.33995 -13.6597
H -6.57296 -2.57539 -13.3706 H -9.40147 -10.45445 -14.6639 C -4.84898 -8.39014 -13.375
C -3.36011 -3.34607 -11.4536 H -8.37608 -11.39807 -15.782 C -7.23174 -9.0361 -13.3305
H -4.92417 -2.84518 -10.0234 H -9.70814 -12.19834 -14.9059 C -14.73889 -6.17448 -13.995
H -4.66064 -4.59272 -10.2564 H -9.19069 -10.8124 -12.1343 H -13.82254 -4.35909 -13.2882
N -3.36671 -2.15123 -12.2705 H -9.54552 -12.53697 -12.3789 C -13.21746 -8.13508 -14.1577
H -4.47878 -1.26781 -13.8068 H -8.06419 -12.05897 -11.5065 O -10.96974 -7.88345 -13.4821
H -4.23989 -3.02502 -13.9475 H -8.31059 -13.89537 -13.9426 C -4.44237 -9.68754 -13.6117
H -2.56607 -3.26665 -10.6916 H -6.92374 -12.93228 -14.8735 C -6.8214 -9.39171 -13.5606
H -3.107 -4.2103 -12.0994 C -12.91478 -9.48173 -14.4654 C -16.15393 -5.63907 -14.194
C -3.25952 -0.91244 -11.5421 O -9.15333 -7.82258 -10.9806 C -14.4533 -7.53167 -14.294
N -5.75417 -3.68967 -11.7913 H -8.82884 -8.70457 -11.2242 C -2.95791 -10.02082 -13.7705
H -4.17142 -7.3346 -13.011 C -10.45299 -7.92895 -10.445 C -5.46534 -10.65785 -13.6928
H -2.34896 -0.92353 -10.92 H -11.10966 -8.55827 -11.0702 C -7.87463 -11.49879 -13.6677
H -3.16186 -0.07164 -12.2491 H -10.88552 -6.91678 -10.4142 C -16.2604 -4.16458 -13.8185
H -4.11377 -0.67628 -10.8681 O -8.85186 -6.11198 -15.1834 C -17.13128 -6.42558 -13.3151
O -8.8042 -7.77515 -15.919 C -16.55861 -5.78564 -15.6642
H -10.43506 -8.32599 -9.4149 H -15.28081 -8.14171 -14.6669
C -12.33188 -10.31117 -13.3126 C -2.38179 -9.24151 -14.9564
N -9.68361 -5.48645 -12.7642 H -11.28373 -10.04535 -13.1105 C -2.20493 -9.63295 -12.4944
N -7.28252 -6.43382 -12.9079 H -12.92072 -10.16369 -12.3891 C -2.72376 -11.50732 -14.0234
C -8.6809 -4.64804 -12.1468 H -12.37452 -11.3857 -13.5643 H -5.1693 -11.69201 -13.8754
C -10.90051 -5.08575 -12.9358 H -14.2779 -10.08117 -14.8068 H -8.81907 -11.20755 -14.84
C -7.33375 -4.97464 -12.7716 H -14.74929 -9.58957 -15.6744 H -8.67773 -11.59771 -12.3638
C -6.17034 -7.06538 -13.1028 C -14.2779 -10.08117 -14.8068 H -7.242 -12.86721 -13.9129
H -8.62552 -4.88514 -11.064 H -14.74929 -9.58957 -15.6744 H -15.5986 -3.5346 -14.4367
C -11.99251 -5.87906 -13.3991 H -14.15339 -11.14498 -17.293 -3.8101 -13.9749
H -11.13394 -4.03407 -12.6843 H -14.15339 -11.14498 -17.293 -3.8101 -13.9749
H -7.32594 -4.55861 -13.8021 H -14.97931 -10.02961 -16.86637 -6.32743 -12.2487
C -6.0021 -8.46467 -13.3498 H -14.97931 -10.02961 -16.86637 -6.32743 -12.2487
H -5.22926 -6.4889 -13.0868 H 13.9559 H -18.16131 -6.05047 -13.4476
C -13.24429 -5.2337 -13.5559 C -12.02696 -9.61137 -15.7094 H -17.13753 -7.50026 -13.5596
C -11.84656 -7.28287 -13.6525 H -12.4834 -9.08368 -16.5645 H -15.87335 -5.22013 -16.318
C -4.67504 -8.93157 -13.518 H -11.02367 -9.1916 -15.5417 H -17.58113 -5.40158 -16.8259
C -7.10865 -9.36901 -13.4072 H -11.91126 -10.67334 -16.54441 -6.83651 -15.9963
C -14.36845 -5.91578 -13.957 H 15.9906 H -2.90507 -9.50446 -15.8912
H -13.28469 -4.16118 -13.338 H -8.92172 -3.57317 -12.2311 H -2.47548 -8.15191 -14.8181
C -13.01918 -7.99977 -14.0929 H -6.19013 -4.39137 -11.9505 H -1.30931 -9.469 -15.089
O -10.74043 -7.91562 -13.486 H -6.13357 -4.97404 -11.0108 H -2.2925 -8.55602 -12.2756
C -4.39156 -10.26049 -13.7323 H -5.21332 -4.53955 -12.4718 H -1.12966 -9.86599 -12.5895
C -6.82119 -10.76464 -13.6156 C -5.514 -2.57958 -10.5298 H -2.59795 -10.18362 -11.623
O -8.33065 -8.9842 -13.2643 C -6.24831 -2.11926 -12.7632 H -3.21454 -11.85085 -14.9495
C -15.73981 -5.27021 -14.1348 C -5.8027 -1.136 -10.148 H -1.64364 -11.70214 -14.1319
C -14.20514 -7.30075 -14.2169 H -4.43838 -2.69604 -10.8153 H -3.08844 -12.13099 -13.1899
C -2.98091 -10.81067 -13.9241 H -5.68083 -3.23994 -9.6607 H -9.37771 -10.27261 -14.6866
C -5.49988 -11.14306 -13.7693 C -6.52902 -0.67872 -12.3605 H -8.25283 -11.12285 -15.7838
C -7.96595 -11.78006 -13.6726 H -5.22492 -2.20792 -13.2072 H -9.54545 -12.03192 -14.9558
C -15.71306 -3.7819 -13.8025 H -6.95675 -2.42208 -13.5541 H -9.22466 -10.6659 -12.1559
C -16.7525 -5.94716 -13.2061 N -5.70081 -0.22098 -11.2658 H -9.4216 -12.41083 -12.4354
C -16.19761 -5.42526 -15.5884 H -5.12353 -0.80925 -9.3421 H -8.01436 -11.82166 -11.51
H -15.0905 -7.85223 -14.5457 H -6.83412 -1.08612 -9.7484 H -8.0351 -13.63041 -13.9786
C -1.9275 -9.71048 -13.8456 H -6.39875 -0.00747 -13.2265 H -6.67793 -12.901 -14.8604
C -2.67611 -11.84024 -12.8317 H -7.59025 -0.61037 -12.0501 H -6.5642 -13.16872 -13.0958
C -2.87152 -11.47749 -15.2988 C -4.35745 0.15136 -11.6313 C -12.98238 -9.5898 -14.5746
H -5.28718 -12.20287 -13.9353 N -6.38459 -3.00083 -11.6151 O -9.45201 -7.7401 -10.9186
C -8.91895 -11.42992 -14.8213 H -3.87203 -8.18863 -13.4683 H -9.02387 -8.5646 -11.2031
C -8.7325 -11.79056 -12.3434 H -4.38575 0.93027 -12.4116 C -10.74512 -8.02547 -10.4364
C -7.45579 -13.19971 -13.9115 H -3.83978 0.58237 -10.758 H -11.3097 -8.68039 -11.1227
H -15.02293 -3.2266 -14.46 H -3.71806 -0.67478 -12.0163 H -11.29172 -7.07283 -10.3544
H -15.41347 -3.60028 -12.7563 O -9.13906 -6.58031 -15.093
H -16.71784 -3.34782 -13.9379 H -10.71126 -8.48701 -9.4338 O -8.99351 -7.51544 -15.8511
H -16.45075 -5.83872 -12.1505 Co -9.31827 -7.05345 -13.0376 C -12.37537 -10.41094 -13.4287
H -17.75208 -5.49325 -13.3243 N -10.13903 -5.39919 -12.658 H -11.35832 -10.07342 -13.1819
H -16.85247 -7.02471 -13.4153 N -7.66346 -6.13916 -12.7651
H -15.48735 -4.93779 -16.2775 C -9.22528 -4.50783 -11.9851

| | | |
|-------------------------------|-------------------------------|------------------------------|
| H -13.00354 -10.34096 - | C -8.22909 -11.06816 -12.0028 | H -2.54428 -4.9858 -9.6672 |
| 12.5222 | C -6.87654 -12.53037 -13.4536 | H -2.32742 -4.26994 -11.2939 |
| H -12.32522 -11.4762 -13.7158 | H -15.82356 -3.8453 -14.7633 | |
| C -14.28056 -10.28228 - | H -16.0572 -3.99395 -12.9973 | s12_1 |
| 14.9861 | H -17.45084 -4.10219 -14.0956 | Co -2.90238 10.57389 2.5356 |
| H -14.76141 -9.79664 -15.8519 | H -16.72578 -6.22598 -11.9858 | N -1.84323 9.25038 1.7121 |
| H -14.06141 -11.32183 - | H -18.1329 -6.23924 -13.086 | N -4.13572 10.27673 1.1043 |
| 15.2809 | H -17.035 -7.63705 -13.0255 | C -2.61533 8.45706 0.7828 |
| H -15.0117 -10.32022 -14.1599 | H -16.15481 -5.86641 -16.2656 | C -0.60967 8.97677 1.9855 |
| C -12.04422 -9.60545 -15.7876 | H -17.79966 -6.02675 -15.5873 | C -3.60567 9.37215 0.0797 |
| H -6.79347 -4.02246 -11.6844 | H -16.69538 -7.42081 -15.5886 | C -5.21374 10.96734 0.9165 |
| H -11.08539 -9.11335 -15.5668 | H -2.29766 -7.77144 -15.4354 | H -3.19108 7.69417 1.3471 |
| H -11.83339 -10.6445 -16.0975 | H -1.96434 -7.69151 -13.6811 | C 0.19128 9.60226 2.987 |
| H -9.55113 -3.45185 -12.0498 | H -0.92317 -8.66313 -14.7455 | H -0.12384 8.16851 1.4072 |
| C -6.79347 -4.02246 -11.6844 | H -2.33005 -9.73893 -12.2224 | H -3.03815 10.00137 -0.6394 |
| H -7.24802 -3.09151 -11.2732 | H -1.22841 -10.63454 -13.3062 | C -5.77534 11.94912 1.7918 |
| H -6.62801 -4.67935 -10.8095 | H -2.84251 -11.28481 -12.9406 | H -5.78564 10.80643 -0.0136 |
| C -4.35204 -3.82926 -11.479 | H -3.13275 -9.93347 -16.4757 | C 1.53911 9.17889 3.0972 |
| H -5.48117 -2.59243 -13.1716 | H -1.69951 -10.75136 -15.7917 | C -0.35212 10.58543 3.879 |
| C -4.17151 -2.56459 -10.6582 | H -3.32729 -11.39997 -15.4867 | C -6.98371 12.5619 1.3765 |
| H -3.45981 -3.95308 -12.1223 | H -9.24811 -10.22691 -14.4369 | C -5.17274 12.29288 3.0424 |
| H -4.41164 -4.71816 -10.8271 | H -8.20224 -11.23616 -15.4766 | C 2.38409 9.68668 4.0549 |
| C -5.29162 -1.31712 -12.3649 | H -9.34278 -12.00927 -14.3428 | H 1.88511 8.42025 2.3871 |
| H -4.63564 -2.69156 -13.8773 | H -8.84058 -10.15797 -11.9155 | C 0.53627 11.13491 4.8751 |
| H -6.40027 -2.53014 -13.7789 | H -8.89526 -11.93162 -11.8299 | O -1.57741 10.97101 3.8365 |
| N -4.11316 -1.40862 -11.5285 | H -7.4656 -11.06634 -11.2052 | C -7.6311 13.49598 2.1512 |
| H -3.23684 -2.6229 -10.0724 | H -7.61673 -13.33169 -13.2937 | C -5.85135 13.25797 3.8681 |
| H -5.00545 -2.469 -9.9146 | H -6.40998 -12.70987 -14.437 | O -4.07138 11.76416 3.4536 |
| H -5.18415 -0.45596 -13.0482 | H -6.10064 -12.64113 -12.6765 | C 3.83962 9.2595 4.2215 |
| H -6.20381 -1.11146 -11.7466 | C -12.8602 -9.69461 -14.02 | C 1.83599 10.66658 4.9218 |
| C -3.87282 -0.19231 -10.8004 | O -9.09702 -7.06395 -11.1797 | C -8.9306 14.18651 1.7463 |
| N -5.52264 -3.78335 -12.3384 | H -8.75522 -7.95592 -11.3578 | C -7.02788 13.8097 3.395 |
| H -4.10931 -7.58345 -13.2921 | C -10.31012 -7.14508 -10.4667 | C -5.25833 13.65323 5.2234 |
| H -3.76937 0.65786 -11.4944 | H -11.02056 -7.84716 -10.9368 | C 4.23999 8.20127 3.1987 |
| H -4.69596 0.05235 -10.0866 | H -10.76778 -6.14352 -10.4714 | C 4.04648 8.67187 5.6209 |
| H -2.93909 -0.26935 -10.2196 | O -9.34524 -6.64752 -15.4929 | C 4.75767 10.47167 4.0365 |
| | O -9.11647 -7.67411 -16.0964 | H 2.50174 11.08375 5.6826 |
| | H -10.14396 -7.43996 -9.4159 | C -9.42023 13.7183 0.3798 |
| s11_6 | C -12.14804 -10.25224 - | C -10.02191 13.8752 2.7752 |
| Co -9.24513 -6.75202 -13.3766 | 12.7807 | C -8.70901 15.70075 1.6797 |
| N -10.12682 -5.09254 -13.211 | H -11.14969 -9.81008 -12.6543 | H -7.53507 14.54769 4.0228 |
| N -7.63307 -5.7318 -13.4667 | H -12.74088 -10.05566 - | C -3.86452 14.26102 5.0262 |
| C -9.21335 -4.04813 -12.8076 | 11.8692 | C -5.16865 12.42678 6.1411 |
| C -11.39732 -4.8885 -13.3275 | H -12.03154 -11.34667 - | C -6.11878 14.69205 5.9397 |
| C -7.87451 -4.28002 -13.49 | 12.8727 | H 4.14148 8.57211 2.1644 |
| C -6.47593 -6.23231 -13.7504 | C -14.13898 -10.50869 - | H 3.63238 7.28558 3.296 |
| H -9.06317 -4.09415 -11.7121 | 14.2088 | H 5.29454 7.91447 3.3469 |
| C -12.39248 -5.882 -13.5743 | H -14.69651 -10.2125 -15.1133 | H 3.40267 7.78942 5.7752 |
| H -11.76345 -3.85123 -13.2102 | H -13.87887 -11.57393 - | H 5.09596 8.35787 5.7594 |
| H -7.98548 -4.00028 -14.5594 | 14.3245 | H 3.81186 9.39889 6.4154 |
| C -6.12151 -7.61633 -13.8074 | H -14.8169 -10.42712 -13.3415 | H 4.63378 10.90812 3.031 |
| H -5.6411 -5.53754 -13.9521 | C -11.99316 -9.90047 -15.2682 | H 5.81582 10.17921 4.1546 |
| C -13.72967 -5.43759 -13.7207 | H -12.53756 -9.57786 -16.1723 | H 4.55075 11.26578 4.7722 |
| C -12.06566 -7.27672 -13.6274 | H -11.05342 -9.33139 -15.2095 | H -8.69001 13.94075 -0.4165 |
| C -4.76011 -7.91891 -14.0563 | H -11.73843 -10.96845 - | H -9.62656 12.6346 0.3663 |
| C -7.07623 -8.65763 -13.5848 | 15.3888 | H -10.35894 14.23528 0.1195 |
| C -14.76894 -6.3142 -13.9258 | H -9.60447 -3.03829 -13.0363 | H -10.2072 12.78933 2.8349 |
| H -13.90795 -4.35872 -13.6602 | C -6.77745 -3.38953 -12.912 | H -10.96962 14.36889 2.4974 |
| C -13.14947 -8.19917 -13.8649 | H -5.80593 -3.65546 -13.3875 | H -9.75246 14.22374 3.7856 |
| O -10.87236 -7.72597 -13.4548 | H -6.98788 -2.36525 -13.2727 | H -7.93171 15.95168 0.9383 |
| C -4.29514 -9.21325 -14.0822 | C -6.41349 -4.55026 -10.745 | H -9.64022 16.217 1.3874 |
| C -6.59865 -10.01603 -13.6078 | C -5.91479 -2.24038 -10.9547 | H -8.3912 16.11708 2.6495 |
| O -8.32399 -8.4209 -13.3619 | C -4.93305 -4.88691 -10.7853 | H -3.16192 13.53336 4.5943 |
| C -16.22579 -5.88808 -14.0838 | H -7.02398 -5.39069 -11.1104 | H -3.91319 15.13682 4.3559 |
| C -14.42772 -7.68881 -13.9945 | H -6.69767 -4.39153 -9.6877 | H -3.45991 14.60157 5.996 |
| C -2.83862 -9.58903 -14.3401 | C -4.42659 -2.55241 -10.9965 | H -4.50504 11.65634 5.7209 |
| C -5.2538 -10.23123 -13.8506 | H -6.13008 -1.31539 -11.5168 | H -4.75957 12.71674 7.1249 |
| C -7.57584 -11.17417 -13.3869 | H -6.20151 -2.05951 -9.9015 | H -6.1676 11.98683 6.3074 |
| C -16.38879 -4.37529 -13.978 | N -4.14212 -3.78045 -10.2848 | H -5.65676 14.94475 6.9084 |
| C -17.07419 -6.53627 -12.9855 | H -4.62222 -5.16028 -11.8279 | H -6.20345 15.62955 5.3642 |
| C -16.74544 -6.32776 -15.4562 | H -4.7356 -5.78113 -10.1675 | H -7.13685 14.32128 6.1495 |
| H -15.24398 -8.39528 -14.1693 | H -4.07592 -2.61311 -12.0597 | C 0.04918 12.25034 5.8047 |
| C -1.96655 -8.35718 -14.5612 | H -3.85655 -1.72701 -10.533 | O -3.8926 9.11123 3.8799 |
| C -2.28302 -10.35552 -13.136 | C -2.73768 -4.08424 -10.2714 | H -4.40179 9.83487 4.2791 |
| C -2.7477 -10.46824 -15.5911 | N -6.73494 -3.32444 -11.4671 | C -3.07439 8.51408 4.8606 |
| H -4.89704 -11.26481 -13.8708 | H -4.08119 -7.07512 -14.2201 | H -2.52185 9.26365 5.453 |
| C -8.65654 -11.1533 -14.474 | H -2.16644 -3.25144 -9.8291 | |

H -4.34547 12.06488 5.1957
H -4.8039 13.54848 6.0622
H -6.07736 12.4661 5.4382
H -5.73782 15.46405 4.9267
H -6.10676 15.48176 3.1899
H -7.09027 14.49226 4.3092
C 0.12082 12.96766 5.5926
O -3.49448 9.07554 4.517
H -4.08255 9.84799 4.5058
C -2.84682 9.00388 5.7675
H -2.42319 9.9769 6.0712
H -2.01512 8.28809 5.675
O -1.3085 11.04097 1.3168
O -1.49782 12.23693 1.2528
H -3.528 8.63739 6.5555
C -1.23601 12.79956 6.29
H -1.98874 12.36962 5.6133
H -1.14148 12.14773 7.1774
H -1.60387 13.78128 6.6373
C 1.01334 13.77667 6.5322
H 1.99677 14.00453 6.0877
H 0.52893 14.74206 6.7536
H 1.17886 13.26154 7.4944
C -0.04842 13.77826 4.3015
H 0.93399 13.97583 3.839
H -0.67488 13.25012 3.567
H -0.52165 14.75251 4.5184
H -1.01885 6.6961 1.6984
C -3.5338 6.86131 0.4011
H -2.96783 5.89695 0.4045
H -4.36743 6.27434 1.1155
C -5.289 6.37273 -1.1773
C -3.12376 6.92964 -1.9756
C -5.88585 6.77248 -2.5076
H -6.02212 6.65955 -0.3744
H -5.08116 5.27488 -1.1795
C -3.69671 7.32878 -3.3189
H -2.2178 7.5282 -1.7799
H -2.80726 5.85837 -2.0178
N -4.92337 6.61157 -3.5827
H -6.22375 7.83336 -2.4447
H -6.7787 6.16167 -2.7015
H -3.85321 8.43257 -3.3363
H -2.95864 7.08778 -4.1004
N -4.0834 7.13062 -0.9097
H -6.5536 10.42069 -0.2125
C -6.37297 6.39487 -7.5518
C -5.29358 7.21446 -7.2423
C -4.81635 7.30963 -5.9362
C -5.40481 6.5666 -4.8995
C -6.49422 5.73739 -5.226
C -6.96923 5.65842 -6.5279
H -6.74642 6.32739 -8.5769
H -4.81318 7.80715 -8.0268
H -3.98317 7.98522 -5.7304
H -6.95729 5.12151 -4.4498
H -7.81349 4.99792 -6.7479

s12_4

Co -2.09418 10.61703 1.9443
N -0.57372 9.79103 1.1941
N -2.74606 10.73405 0.1547
C -0.84224 9.29641 -0.1363
C 0.54871 9.56292 1.7953
C -1.77868 10.27379 -0.839
C -3.82363 11.35828 -0.1969
H -1.32693 8.30313 -0.0597
C 0.85571 9.87075 3.1536
H 1.34942 9.06544 1.2162
H -1.15711 11.15117 -1.1169
C -4.82527 11.89349 0.6749
H -4.02276 11.49598 -1.2711
C 2.16692 9.57834 3.6055
C -0.13073 10.41222 4.0433
C -5.95134 12.49298 0.06
C -4.72811 11.80704 2.0989

C 2.55377 9.80098 4.9054
H 2.86639 9.15966 2.8743
C 0.27747 10.66929 5.4037
O -1.34138 10.65418 3.686
C -6.99559 13.00696 0.7942
C -5.81449 12.34242 2.8763
O -3.72051 11.26347 2.6973
C 3.94945 9.49831 5.4434
C 1.57224 10.35225 5.7687
C -8.23096 13.65767 0.1779
C -6.88212 12.90934 2.2026
C -5.76099 12.29081 4.4061
C 4.85582 8.90898 4.3675
C 3.85173 8.48732 6.5899
C 4.59578 10.78937 5.9553
H 1.87248 10.54421 6.8027
C -8.17182 13.65498 -1.3462
C -9.48556 12.89044 0.6065
C -8.33582 15.1115 0.6486
H -7.70329 13.3187 2.7974
C -4.53216 13.05662 4.91
C -5.70475 10.83655 4.891
C -6.99476 12.92977 5.041
H 4.99341 9.60303 3.5211
H 4.4599 7.95792 3.9727
H 5.85371 8.70115 4.7885
H 3.39801 7.54331 6.2435
H 4.85423 8.25752 6.9915
H 3.24013 8.86448 7.4257
H 4.68505 11.53196 5.1445
H 5.60798 10.58784 6.3477
H 4.01286 11.25195 6.7683
H -7.30345 14.2204 -1.7247
H -8.12027 12.63057 -1.753
H -9.0784 14.12841 -1.7587
H -9.43797 11.84061 0.2708
H -10.38954 13.34869 0.1684
H -9.61597 12.8851 1.7009
H -7.44648 15.6882 0.3432
H -9.22582 15.59809 0.2124
H -8.42187 15.18739 1.7448
H -3.59677 12.59334 4.5641
H -4.55327 14.10239 4.5569
H -4.52385 13.07434 6.0145
H -4.79585 10.32769 4.5382
H -5.69431 10.80378 5.9947
H -6.58808 10.27182 4.5449
H -6.91201 12.87236 6.1389
H -7.09288 13.99639 4.7767
H -7.9284 12.41485 4.7562
C -0.69473 11.3359 6.3812
O -3.13903 8.66604 2.3565
H -3.83976 9.20984 2.756
C -2.54999 7.84713 3.3416
H -2.30751 8.41346 4.2571
H -1.60886 7.44467 2.93
O -1.25868 12.56358 1.6835
O -1.77622 13.46029 2.3116
H -3.19893 6.99199 3.6001
C -2.00798 10.5491 6.4941
H -2.58117 10.57575 5.556
H -1.81016 9.49496 6.7603
H -2.63584 10.98026 7.2939
C -0.10868 11.43718 7.7884
H 0.8119 12.04392 7.8191
H -0.8391 11.92734 8.4531
H 0.11542 10.44528 8.2179
C -0.97474 12.76233 5.8921
H -0.04577 13.35805 5.8905
H -1.39052 12.76929 4.8734
H -1.69672 13.26403 6.5608
H 0.08723 9.15717 -0.721
C -2.36882 9.70819 -2.143
H -2.44428 10.52163 -2.8873
H -1.61506 8.99637 -2.5656
C -4.23378 8.81079 -3.3468
C -3.78141 7.99209 -1.1205

C -5.66495 8.31942 -3.2146
H -3.62871 8.03468 -3.8788
H -4.20031 9.72477 -3.9672
C -5.22305 7.52118 -1.0405
H -3.12988 7.14092 -1.4439
H -3.45572 8.30415 -0.1144
N -5.7297 7.15709 -2.3506
H -6.10701 8.11684 -4.1986
H -6.27533 9.11913 -2.7558
H -5.329 6.6983 -0.3226
H -5.84151 8.35199 -0.6527
N -3.67573 9.11099 -2.0409
H -5.96394 12.52763 -1.0343
C -5.19254 3.24141 -3.8934
C -5.49624 4.30712 -4.7357
C -5.65055 5.59727 -4.2407
C -5.51746 5.87617 -2.8643
C -5.19709 4.78804 -2.0259
C -5.04556 3.503 -2.534
H -5.06877 2.22993 -4.2883
H -5.61464 4.13949 -5.8109
H -5.88788 6.39317 -4.949
H -5.06955 4.93354 -0.9518
H -4.80228 2.6901 -1.8426

s12_5

Co -2.04224 10.60794 1.9547
N -0.45966 9.81232 1.3093
N -2.636 10.58248 0.1388
C -0.66319 9.21221 0.0117
C 0.64998 9.67824 1.9586
C -1.61857 10.07749 -0.7961
C -3.68951 11.20284 -0.2822
H -1.12318 8.21329 0.1401
C 0.88982 10.06903 3.31
H 1.49455 9.19152 1.4355
H -1.05772 10.96495 -1.1586
C -4.71737 11.80022 0.5127
H -3.8498 11.28026 -1.3726
C 2.1947 9.866 3.8229
C -0.15846 10.59008 4.1374
C -5.79966 12.39588 -0.181
C -4.69043 11.77026 1.9428
C 2.51516 10.15331 5.1287
H 2.94505 9.46127 3.1355
C 0.17386 10.90063 5.5066
O -1.36189 10.76517 3.7186
C -6.86749 12.95699 0.4799
C -5.80987 12.34345 2.6435
O -3.71686 11.24585 2.608
C 3.90288 9.95124 5.7307
C 1.46808 10.66915 5.9343
C -8.05564 13.61061 -0.2203
C -6.82978 12.90392 1.8954
C -5.84065 12.34162 4.1747
C 4.88662 9.38761 4.7104
C 3.8189 8.96978 6.9037
C 4.44903 11.29367 6.227
H 1.71133 10.90458 6.9741
C -7.91399 13.56595 -1.17383
C -9.34496 12.87576 0.1592
C -8.16015 15.07828 0.2054
H -7.67384 13.3457 2.4321
C -4.639 13.12197 4.7194
C -5.8111 10.90391 4.7086
C -7.10639 13.00019 4.7198
H 5.01512 10.06286 3.8475
H 4.56645 8.40193 4.3321
H 5.87758 9.25575 5.1761
H 3.43653 7.99032 6.5698
H 4.81619 8.81292 7.3509
H 3.15263 9.33319 7.703
H 4.52787 12.01627 5.3973
H 5.454 11.16587 6.6662
H 3.80557 11.74349 7.0006
H -7.01503 14.10447 -2.083

H -7.86255 12.53079 -2.1163 C -3.5492 11.06114 -0.3989 H -0.29036 10.98832 8.3334
 H -8.78684 14.04592 -2.2115 H -1.22223 7.93442 0.3392 C -1.15058 13.07511 5.712
 H -9.29771 11.81664 -0.1457 C 0.81573 9.88256 3.4329 H -0.21584 13.66104 5.7413
 H -10.21548 13.33654 -0.3395 H 1.41464 8.82588 1.6512 H -1.46787 12.98704 4.6621
 H -9.53472 12.90242 1.2447 H -0.92732 10.55969 -1.17 H -1.92513 13.64392 6.2564
 H -7.24509 15.63182 -0.0648 C -4.5564 11.78748 0.3133 H 0.26439 8.6288 -0.3451
 H -9.01545 15.56698 -0.2931 H -3.66629 11.07122 -1.4976 C -2.08659 8.94022 -1.9382
 H -8.30633 15.18639 1.2925 C 2.08563 9.62931 4.0083 H -2.80777 9.55427 -2.5305
 H -3.68812 12.64804 4.436 C -0.21863 10.53507 4.1805 H -1.22718 8.77878 -2.6149
 H -4.63936 14.1572 4.3359 C -5.56106 12.41121 -0.4584 C -3.86954 7.69961 -0.8444
 H -4.68811 13.17105 5.8221 C -4.58535 11.85505 1.7447 C -2.77166 6.81111 -2.7923
 H -4.87831 10.39104 4.4315 C 2.38377 9.99281 5.3002 C -4.34449 6.29544 -0.5171
 H -5.87279 10.90658 5.811 H 2.82652 9.12155 3.3817 H -4.66107 8.2461 -1.4159
 H -6.66716 10.32237 4.3241 C 0.09301 10.92995 5.5328 H -3.70339 8.24905 0.096
 H -7.08607 12.97502 5.8218 O -1.39422 10.75661 3.7082 C -3.24714 5.41695 -2.422
 H -7.18635 14.05883 4.4198 C -6.60985 13.09887 0.1153 H -3.499 7.25663 -3.5172
 H -8.02366 12.47829 4.3969 C -5.67743 12.56044 2.353 H -1.79637 6.75394 -3.3078
 C -0.87699 11.52878 6.4267 O -3.67923 11.30181 2.4811 N -4.50538 5.4798 -1.7026
 O -4.02515 8.66022 2.4494 C 3.73138 9.73688 5.9691 H -5.27289 6.31783 0.0703
 H -3.73163 9.18685 2.8608 C 1.35238 10.64281 6.0249 H -3.58138 5.81451 0.1249
 C -2.39397 7.85409 3.4179 C -7.67551 13.76428 -0.7571 H -3.33363 4.79509 -3.3225
 H -2.104 8.43322 4.3117 C -6.62797 13.14423 1.5267 H -2.49191 4.93839 -1.771
 H -1.47811 7.4422 2.9656 C -5.76349 12.67836 3.878 N -2.63127 7.64426 -1.6112
 O -1.2792 12.55899 1.5972 C 4.70512 9.03158 5.0307 H -5.48588 12.32742 -1.5502
 O -1.74462 13.45492 2.2669 C 3.5335 8.85144 7.2033 C -8.18536 5.32213 -3.7961
 H -3.03435 7.00766 3.7221 C 4.35841 11.06887 6.3922 C -8.04902 6.11798 -2.6634
 C -2.15506 10.68011 6.4844 H 1.57899 10.94193 7.0522 C -6.83953 6.19575 -1.9783
 H -2.67149 10.65205 5.5137 C -8.36003 12.70691 -1.6284 C -5.71597 5.45925 -2.4001
 H -1.92119 9.64487 6.7925 C -8.75016 14.45923 0.0739 C -5.86972 4.6547 -3.5474
 H -2.84954 11.09914 7.2339 C -7.01722 14.81479 -1.6564 C -7.07897 4.59238 -4.2277
 H -0.3693 11.67057 7.8608 H -7.44774 13.6832 2.0036 H -9.1355 5.27011 -4.3338
 H 0.51531 12.32533 7.9327 C -4.51947 13.39527 4.4146 H -8.89748 6.70769 -2.3026
 H -1.15725 12.12628 8.483 C -5.87897 11.28957 4.5186 H -6.77739 6.85324 -1.1085
 H -0.11546 10.69476 8.3102 C -6.98577 13.48089 4.3206 H -5.03793 4.03956 -3.8997
 C -1.19766 12.93571 5.9077 H 4.91276 9.6311 4.1282 H -7.15694 3.94897 -5.1096
 H -0.30144 13.5776 5.9587 H 4.32628 8.0461 4.7106
 H -1.54675 12.91568 4.8647 H 5.66704 8.86384 5.5433
 H -1.98616 13.40427 6.5231 H 3.09206 7.88004 6.923
 H 0.28822 9.05869 -0.5329 H 4.49974 8.65689 7.701
 C -2.12152 9.33456 -2.0331 H 2.86729 9.31843 7.9468
 H -2.90647 9.93708 -2.5513 H 4.51919 11.72246 5.5183
 H -1.27498 9.29914 -2.7435 H 5.33542 10.90106 6.8785
 C -3.76136 7.86639 -0.9972 H 3.72434 11.61824 7.107
 C -2.67848 7.24155 -3.052 H -7.64604 12.19387 -2.2933
 C -4.11169 6.4054 -0.7801 H -8.8469 11.93799 -1.0049
 H -4.61521 8.39342 -1.4922 H -9.13353 13.1692 -2.2665
 H -3.60132 8.34611 -0.0182 H -9.28742 13.75262 0.7287
 C -3.0303 5.78665 -2.794 H -9.49665 14.92195 -0.593
 H -3.46698 7.68952 -3.7083 H -8.33105 15.26131 0.7044
 H -1.72375 7.30779 -3.6037 H -6.25751 14.37088 -2.3206
 N -4.25786 5.68525 -2.0277 H -7.77049 15.30784 -2.2958
 H -5.01326 6.30136 -0.1607 H -6.51905 15.59256 -1.0534
 H -3.287 5.93455 -0.2108 H -3.60386 12.82214 4.21
 H -3.10738 5.24214 -3.744 H -4.41446 14.39312 3.954
 H -2.21354 5.31434 -2.2167 H -4.60486 13.53577 5.5072
 N -2.55401 7.97623 -1.8059 H -4.98473 10.67962 4.3246
 H -5.75838 12.38851 -1.2752 H -5.98414 11.38379 5.6138
 C -8.00334 5.37194 -3.983 H -6.76606 10.75254 4.1399
 C -6.85865 4.78553 -4.5202 H -7.00355 13.54161 5.4213
 C -5.62896 4.90015 -3.8849 H -6.96526 14.51527 3.9377
 C -5.49241 5.61514 -2.6775 H -7.93355 13.01287 4.0036
 C -6.65522 6.20844 -2.1492 C -0.93895 11.70121 6.3601
 C -7.88399 6.07868 -2.7908 O -3.16049 8.67872 2.5356
 H -8.96954 5.27861 -4.4853 H -3.83076 9.28993 2.8879
 H -6.92101 4.21454 -5.4519 C -2.61556 7.89911 3.5751
 H -4.76426 4.39518 -4.3226 H -2.2953 8.51736 4.4316
 H -6.61082 6.79297 -1.2278 H -1.72871 7.38159 3.1765
 H -8.76297 6.5559 -2.3464 O -1.12371 12.38963 1.4792
 O -1.58334 13.3617 2.0367
 H -3.32864 7.13211 3.9249
 C -2.27031 10.94126 6.446
 H -2.75862 10.85811 5.4639
 H -2.11212 9.92506 6.8505
 H -2.9586 11.46659 7.1315
 C -0.46365 11.93519 7.793
 H 0.4616 12.53383 7.8379
 H -1.23578 12.49499 8.3464

s12_6
 Co -2.02846 10.51468 1.937
 N -0.48439 9.57116 1.4076
 N -2.56101 10.39924 0.1057
 C -0.69009 8.88723 0.1525
 C 0.59143 9.40856 2.1057
 C -1.55904 9.74743 -0.7525

s12_7
 Co -2.72206 10.4476 2.5563
 N -1.61533 9.03984 1.9668
 N -3.86744 9.96967 1.1026
 C -2.32615 8.1434 1.0839
 C -0.40189 8.80764 2.3476
 C -3.26007 8.97256 0.2162
 C -4.96098 10.58996 0.7967
 H -2.9454 7.44977 1.6903
 C 0.33564 9.55282 3.3154
 H 0.1185 7.93984 1.9005
 H -2.63714 9.53394 -0.5131
 C -5.5934 11.64079 1.5328
 H -5.48867 10.30108 -0.1283
 C 1.67323 9.1543 3.5615
 C -0.26072 10.63438 4.0443
 C -6.81248 12.14316 1.0138
 C -5.046 12.16054 2.7478
 C 2.45739 9.78132 4.5005
 H 2.0615 8.31618 2.973
 C 0.56481 11.30826 5.0178
 O -1.48075 11.00447 3.8805
 C -7.52455 13.13149 1.6521
 C -5.79234 13.18502 3.4323
 O -3.93654 11.73809 3.2492
 C 3.89946 9.38813 4.8084
 C 1.85802 10.8576 5.2037
 C -8.83921 13.70637 1.1319
 C -6.97604 13.6198 2.8645
 C -5.2632 13.76301 4.7478
 C 4.36224 8.21403 3.9519
 C 4.0189 8.98028 6.2801
 C 4.82781 10.57461 4.5308
 H 2.47502 11.37053 5.9469
 C -9.26467 13.05285 -0.1788
 C -9.94815 13.47204 2.1623
 C -8.68093 15.20982 0.8853
 H -7.53577 14.40222 3.3847
 C -3.89557 14.4169 4.5184
 C -5.14274 12.65538 5.8032

C -6.19645 14.82947 5.3172
H 4.3308 8.45354 2.8755
H 3.74793 7.31372 4.1229
H 5.40465 7.95414 4.2012
H 3.36742 8.11824 6.5027
H 5.05793 8.69484 6.5211
H 3.73447 9.79806 6.9621
H 4.76485 10.88319 3.4736
H 5.87674 10.30611 4.7472
H 4.57748 11.45179 5.1494
H -8.51808 13.20753 -0.9761
H -9.42643 11.96764 -0.0634
H -10.21443 13.49196 -0.5272
H -10.08774 12.39408 2.3509
H -10.90711 13.88284 1.8008
H -9.7265 13.95385 3.1285
H -7.8923 15.40434 0.139
H -9.62382 15.64287 0.5078
H -8.41181 15.7554 1.8044
H -3.1498 13.68598 4.1733
H -3.97048 15.21998 3.7649
H -3.52967 14.86937 5.4575
H -4.41572 11.88688 5.5004
H -4.79672 13.07942 6.7623
H -6.12084 12.1748 5.9815
H -5.77727 15.21663 6.2606
H -6.31111 15.68866 4.6347
H -7.20031 14.43081 5.5438
C 0.01942 12.52419 5.7717
O -3.79893 9.15616 4.0127
H -4.31601 9.92462 4.3032
C -3.0376 8.66607 5.0932
H -2.48222 9.46917 5.6084
H -2.30231 7.95365 4.6879
O -1.77399 11.82169 1.249
O -1.92106 12.99824 1.5015
H -3.66866 8.12904 5.8229
C -1.27732 12.18189 6.5174
H -2.09142 11.93599 5.8201
H -1.12226 11.32599 7.199
H -1.59702 13.04239 7.1314
C 1.01236 13.04714 6.8079
H 1.96141 13.37684 6.3525
H 0.57878 13.92269 7.3189
H 1.24223 12.29388 7.5814
C -0.23577 13.65079 4.7631
H 0.70778 13.95589 4.2787
H -0.94168 13.3393 3.9787
H -0.65542 14.53624 5.2729
H -1.6435 7.52343 0.4756
C -4.26937 8.09222 -0.5092
H -4.97162 7.70398 0.2534
H -4.88098 8.69639 -1.2215
C -4.65341 5.9551 -1.5197
C -2.90191 7.36475 -2.3585
C -3.98798 4.7696 -2.196
H -5.44126 6.37479 -2.1929
H -5.15838 5.63184 -0.5925
C -2.25664 6.1586 -3.0197
H -3.55893 7.87834 -3.105
H -2.12097 8.08845 -2.0664
N -3.25821 5.17288 -3.3796
H -4.71605 3.98201 -2.4352
H -3.26415 4.32504 -1.4874
H -1.67503 6.47388 -3.8953
H -1.54404 5.69535 -2.3116
N -3.66439 6.96765 -1.186
H -7.17454 11.70829 0.0763
C -5.10957 5.26608 -7.1904
C -5.82277 4.8637 -6.0662
C -5.23257 4.84947 -4.8053
C -3.88811 5.22765 -4.6264
C -3.17706 5.63046 -5.7749
C -3.77955 5.64898 -7.0262
H -5.57961 5.28172 -8.177
H -6.87059 4.5622 -6.1609
H -5.84314 4.54623 -3.9522

H -2.12268 5.90685 -5.6983
H -3.18845 5.96196 -7.8924

s12_8

Co -2.41422 10.12008 2.725
N -1.23238 8.69026 2.3828
N -3.45957 9.42271 1.2883
C -1.86764 7.66908 1.5846
C -0.04138 8.54553 2.8656
C -2.77019 8.34836 0.5661
C -4.55875 9.94792 0.8485
H -2.50039 7.03634 2.2424
C 0.61911 9.43987 3.759
H 0.52509 7.64095 2.5744
H -2.11328 8.83227 -0.1878
C -5.26708 11.05295 1.4186
H -4.99725 9.51687 -0.0676
C 1.94968 9.12274 4.131
C -0.04182 10.59776 4.2889
C -6.47017 11.43911 0.7786
C -4.80405 11.7432 2.582
C 2.66764 9.90776 5.0012
H 2.38854 8.2178 3.6973
C 0.72045 11.44364 5.1763
O -1.26311 10.89392 4.0229
C -7.24615 12.47389 1.2475
C -5.61463 12.81991 3.0885
O -3.71253 11.42767 3.1925
C 4.09739 9.60607 5.4412
C 2.01085 11.06509 5.4938
C -8.54727 12.92758 0.5914
C -6.779 13.1343 2.4112
C -5.17165 13.58222 4.3402
C 4.62717 8.32415 4.807
C 4.14246 9.43817 6.9631
C 5.01881 10.75771 5.0273
H 2.57849 11.70678 6.1736
C -8.87912 12.09725 -0.6444
C -9.70364 12.7838 1.5857
C -8.42328 14.3925 0.1614
H -7.38952 13.95641 2.7955
C -3.80821 14.24045 4.0963
C -5.08484 12.62674 5.5379
C -6.15814 14.68686 4.7128
H 4.64955 8.38937 3.7059
H 4.02153 7.44602 5.0884
H 5.65928 8.13506 5.1465
H 3.49421 8.60574 7.2854
H 5.17127 9.22067 7.2998
H 3.80708 10.34562 7.4911
H 5.00969 10.89356 3.9326
H 6.05857 10.55433 5.3383
H 4.71911 11.71481 5.4844
H -8.09603 12.17966 -1.4171
H -9.01067 11.02964 -0.3988
H -9.82269 12.45076 -1.0927
H -9.81921 11.73398 1.9045
H -10.65382 13.1084 1.1264
H -9.55043 13.39249 2.4917
H -7.60256 14.52041 -0.5643
H -9.35782 14.73857 -0.3139
H -8.21999 15.05968 1.0149
H -3.02306 13.49222 3.9134
H -3.85354 14.91668 3.225
H -3.51656 14.8432 4.9749
H -4.33791 11.83638 5.369
H -4.78557 13.17958 6.4458
H -6.0645 12.15769 5.737
H -5.80236 15.20533 5.6185
H -6.25131 15.44609 3.9177
H -7.16482 14.29307 4.9353
C 0.11362 12.7515 5.6912
O -3.53105 8.96678 4.2779
H -4.12716 9.72544 4.3848
C -2.84272 8.74587 5.4888
H -2.41716 9.67822 5.8987

H -2.00868 8.05759 5.2809
O -1.43386 11.36106 1.3101
O -1.73529 12.53563 1.3235
H -3.49514 8.27495 6.245
C -1.20843 12.50204 6.4297
H -1.99406 12.14964 5.7459
H -1.07337 11.7539 7.2317
H -1.55718 13.43709 6.9028
C 1.04676 13.46897 6.6649
H 2.01115 13.73897 6.2025
H 0.57453 14.40812 6.9975
H 1.25137 12.86539 7.5662
C -0.11856 13.6859 4.4973
H 0.84058 13.93889 4.0136
H -0.77492 13.2259 3.7433
H -0.58726 14.62838 4.832
H -1.13005 7.00688 1.0923
C -3.67196 7.32553 -0.1093
H -3.08631 6.38706 -0.2737
H -4.46998 7.06098 0.6102
C -3.36238 7.80522 -2.4584
C -5.48147 7.00262 -1.6635
C -4.03982 8.35203 -3.7035
H -2.96992 6.78076 -2.6803
H -2.49365 8.4341 -2.1981
C -6.12973 7.54914 -2.924
H -5.23649 5.92108 -1.804
H -6.18597 7.06969 -0.8144
N -5.20763 7.55924 -4.039
H -3.32776 8.38298 -4.5379
H -4.35996 9.39377 -3.5156
H -7.04398 6.995 -3.1783
H -6.44022 8.59428 -2.7308
N -4.28906 7.76893 -1.3407
H -6.7646 10.87474 -0.1124
C -4.90002 4.2728 -6.6957
C -5.78761 4.23683 -5.6254
C -5.88285 5.30036 -4.7318
C -5.09476 6.45641 -4.8902
C -4.20196 6.47994 -5.9806
C -4.10912 5.40871 -6.8597
H -4.825 3.4325 -7.3904
H -6.41885 3.35702 -5.4664
H -6.57978 5.21291 -3.8955
H -3.58872 7.36477 -6.1677
H -3.40813 5.47217 -7.6977

s12_9

Co -2.53905 10.34667 2.6219
N -1.3392 8.98732 2.1132
N -3.58817 9.78602 1.1231
C -1.96873 8.02371 1.239
C -0.13267 8.82749 2.5488
C -2.92335 8.76003 0.313
C -4.64484 10.40604 0.7061
H -2.56147 7.31248 1.8514
C 0.52257 9.62709 3.5323
H 0.44933 7.9781 2.1443
H -2.31595 9.29437 -0.4497
C -5.32942 11.48235 1.3535
H -5.09127 10.09608 -0.2547
C 1.86561 9.3002 3.8438
C -0.16184 10.68395 4.2192
C -6.48105 11.99287 0.7047
C -4.90071 12.01486 2.6097
C 2.57104 9.97264 4.813
H 2.32403 8.47916 3.2824
C 0.57873 11.4017 5.2292
O -1.38766 10.99331 3.9871
C -7.23662 13.00464 1.2505
C -5.69539 13.06139 3.1981
O -3.85378 11.58461 3.227
C 4.01575 9.65755 5.1901
C 1.88293 11.01816 5.4802
C -8.47931 13.59299 0.5878
C -6.80639 13.50582 2.5047

| | | | | | | | | |
|-------------|----------|---------|---------------|----------|---------|------------------|-----------|-----------|
| C -5.29141 | 13.66032 | 4.5482 | N -3.20991 | 6.64849 | -0.933 | H -4.46273 | 11.62762 | 5.5223 |
| C 4.57828 | 8.50504 | 4.3646 | H -6.75374 | 11.54637 | -0.2573 | H -4.89234 | 12.82856 | 6.7615 |
| C 4.08858 | 9.26436 | 6.6688 | C -5.9998 | 5.03184 | -7.2621 | H -6.18492 | 11.92858 | 5.9229 |
| C 4.8923 | 10.88996 | 4.9461 | C -5.32309 | 6.22818 | -7.0537 | H -5.87958 | 14.95978 | 6.1961 |
| H 2.43622 | 11.56352 | 6.2499 | C -4.73531 | 6.5158 | -5.8231 | H -6.31144 | 15.42306 | 4.5373 |
| C -8.78117 | 12.92249 | -0.7484 | C -4.7989 | 5.59684 | -4.7619 | H -7.24883 | 14.16269 | 5.3929 |
| C -9.69287 | 13.39895 | 1.5022 | C -5.48379 | 4.38741 | -4.9871 | C 0.03301 | 12.51351 | 5.9511 |
| C -8.26603 | 15.08831 | 0.333 | C -6.07409 | 4.11495 | -6.2135 | O -3.5459 | 8.93432 | 4.0543 |
| H -7.40062 | 14.30784 | 2.9515 | H -6.46236 | 4.81291 | -8.228 | H -4.12654 | 9.6765 | 4.2894 |
| C -3.89514 | 14.28457 | 4.4444 | H -5.25546 | 6.96652 | -7.8587 | C -2.81411 | 8.53478 | 5.1909 |
| C -5.29888 | 12.57691 | 5.6345 | H -4.23326 | 7.47718 | -5.6951 | H -2.35309 | 9.39273 | 5.7106 |
| C -6.25609 | 14.75646 | 4.9962 | H -5.52828 | 3.63387 | -4.196 | H -2.00323 | 7.87099 | 4.8522 |
| H 4.58036 | 8.7356 | 3.2858 | H -6.59127 | 3.16106 | -6.3551 | O -1.58442 | 11.73641 | 1.3777 |
| H 4.0071 | 7.57355 | 4.517 | | | | O -1.81458 | 12.9009 | 1.626 |
| H 5.62149 | 8.30404 | 4.6606 | s12_10 | | | H -3.4441 | 7.97025 | 5.9006 |
| H 3.474 | 8.3701 | 6.8679 | Co -2.49496 | 10.30251 | 2.6418 | C -1.27328 | 12.10664 | 6.6466 |
| H 5.12899 | 9.03577 | 6.9594 | N -1.29184 | 8.96247 | 2.0832 | H -2.05376 | 11.84099 | 5.9187 |
| H 3.73018 | 10.06941 | 7.3308 | N -3.56148 | 9.77534 | 1.1465 | H -1.10661 | 11.2466 | 7.3202 |
| H 4.8629 | 11.18834 | 3.8845 | C -1.92947 | 8.03305 | 1.1825 | H -1.64664 | 12.94333 | 7.2632 |
| H 5.94261 | 10.67895 | 5.2135 | C -0.08043 | 8.79406 | 2.5029 | C 0.96169 | 13.07372 | 7.027 |
| H 4.56705 | 11.75641 | 5.5447 | C -2.88203 | 8.80443 | 0.2828 | H 1.90839 | 13.45555 | 6.6091 |
| H -7.9551 | 13.05048 | -1.4682 | C -4.66023 | 10.35728 | 0.7842 | H 0.46725 | 13.92089 | 7.5304 |
| H -8.97348 | 11.84237 | -0.632 | H -2.52414 | 7.306 | 1.7755 | H 1.20182 | 12.32399 | 7.8008 |
| H -9.68261 | 13.37064 | -1.1987 | C 0.58417 | 9.57573 | 3.4935 | C -0.2378 | 13.6362 | 4.9421 |
| H -9.87221 | 12.32764 | 1.6949 | H 0.50052 | 7.95644 | 2.0728 | H 0.70651 | 13.98433 | 4.4893 |
| H -10.60123 | 13.81906 | 1.0359 | H -2.26766 | 9.38302 | -0.4405 | H -0.90684 | 13.30424 | 4.1343 |
| H -9.56288 | 13.89626 | 2.4772 | C -5.3609 | 11.38314 | 1.4948 | H -0.70974 | 14.49917 | 5.4447 |
| H -7.402 | 15.25379 | -0.3324 | H -5.10395 | 10.0491 | -0.1775 | H -1.193 | 7.45641 | 0.5904 |
| H -9.15673 | 15.53168 | -0.1456 | C 1.93422 | 9.25076 | 3.7773 | C -3.7889 | 7.84188 | -0.4747 |
| H -8.07994 | 15.64593 | 1.2654 | C -0.09371 | 10.619 | 4.2085 | H -3.1904 | 6.93306 | -0.718 |
| H -3.13092 | 13.52907 | 4.2113 | C -6.55812 | 11.86051 | 0.9073 | H -4.57326 | 7.49859 | 0.2262 |
| H -3.87134 | 15.05756 | 3.6567 | C -4.89836 | 11.90862 | 2.741 | C -3.58091 | 8.53907 | -2.8113 |
| H -3.62544 | 14.76909 | 5.3999 | C 2.65393 | 9.91448 | 4.7416 | C -5.69639 | 7.8241 | -2.0173 |
| H -4.57241 | 11.78067 | 5.4145 | H 2.38663 | 8.43954 | 3.197 | C -3.39697 | 7.2213 | -3.546 |
| H -5.02581 | 13.01528 | 6.6105 | C 0.66444 | 11.33151 | 5.2097 | H -2.59765 | 8.94865 | -2.5238 |
| H -6.30238 | 12.12761 | 5.7351 | O -1.32608 | 10.92106 | 4.0084 | H -4.04346 | 9.26954 | -3.5008 |
| H -5.92997 | 15.1546 | 5.9712 | C -7.32695 | 12.83298 | 1.5049 | C -5.55084 | 6.48689 | -2.7273 |
| H -6.27959 | 15.60358 | 4.2897 | C -5.7019 | 12.91651 | 3.3814 | H -6.33276 | 7.71435 | -1.1219 |
| H -7.28661 | 14.38255 | 5.1233 | O -3.8116 | 11.50426 | 3.3079 | H -6.213 | 8.52373 | -2.7016 |
| C -0.06082 | 12.59349 | 5.9478 | C 4.10639 | 9.601 | 5.0891 | N -4.68183 | 6.62257 | -3.878 |
| O -3.61733 | 9.0327 | 4.0517 | C 1.97443 | 10.95112 | 5.432 | H -2.79245 | 6.51571 | -2.9287 |
| H -4.18828 | 9.78304 | 4.2834 | C -8.61912 | 13.38406 | 0.9079 | H -2.81487 | 7.40136 | -4.4609 |
| C -2.89439 | 8.62078 | 5.1897 | C -6.85921 | 13.33039 | 2.7463 | H -5.17538 | 5.71236 | -2.0155 |
| H -2.42359 | 9.47119 | 5.7124 | C -5.26028 | 13.50522 | 4.7242 | H -6.54619 | 6.15289 | -3.0626 |
| H -2.09236 | 7.94654 | 4.8507 | C 4.65786 | 8.45882 | 4.242 | N -4.42987 | 8.42153 | -1.6385 |
| O -1.60658 | 11.74326 | 1.3267 | C 4.20753 | 9.19328 | 6.5621 | H -6.85293 | 11.42076 | -0.051 |
| O -1.76153 | 12.91651 | 1.5905 | C 4.97408 | 10.83894 | 4.8414 | C -4.73589 | 3.60577 | -6.8469 |
| H -3.53443 | 8.06369 | 5.8962 | H 2.54037 | 11.49183 | 6.1957 | C -4.01393 | 4.78485 | -7.0332 |
| C -1.38928 | 12.20417 | 6.6109 | C -8.95791 | 12.71938 | -0.4224 | C -3.99419 | 5.76884 | -6.0544 |
| H -2.15216 | 11.93691 | 5.865 | C -9.78176 | 13.13532 | 1.8736 | C -4.69482 | 5.60531 | -4.8444 |
| H -1.24762 | 11.35031 | 7.298 | C -8.47147 | 14.88915 | 0.6642 | C -5.41383 | 4.41151 | -4.6647 |
| H -1.7722 | 13.05013 | 7.2088 | H -7.46121 | 14.10265 | 3.2335 | C -5.43545 | 3.43397 | -5.6579 |
| C 0.84368 | 13.15101 | 7.0456 | C -3.88606 | 14.16915 | 4.5779 | H -4.75291 | 2.83428 | -7.6211 |
| H 1.804 | 13.52405 | 6.6516 | C -5.19668 | 12.40253 | 5.7892 | H -3.46441 | 4.94963 | -7.965 |
| H 0.34278 | 14.0041 | 7.5324 | C -6.2351 | 14.56699 | 5.2292 | H -3.44916 | 6.69757 | -6.2443 |
| H 1.05754 | 12.40253 | 7.8283 | H 4.63991 | 8.70017 | 3.1657 | H -5.95873 | 4.22628 | -3.7366 |
| C -0.29231 | 13.71202 | 4.9248 | H 4.09269 | 7.5238 | 4.3953 | H -6.00524 | 2.5157 | -5.4854 |
| H 0.66814 | 14.04962 | 4.4988 | H 5.70688 | 8.25859 | 4.5173 | | | |
| H -0.93817 | 13.37894 | 4.0989 | H 3.59958 | 8.29498 | 6.7634 | s06_intra | | |
| H -0.77295 | 14.58185 | 5.407 | H 5.25382 | 8.96535 | 6.8314 | Co -0.02143 | 0.295315 | -0.648015 |
| H -1.23147 | 7.42726 | 0.6732 | H 3.85874 | 9.99037 | 7.2387 | N 0.965144 | -0.040916 | -2.241276 |
| C -3.89043 | 7.79152 | -0.3629 | H 4.92413 | 11.14774 | 3.7836 | N -1.544408 | -0.209028 | -1.655839 |
| H -4.58238 | 7.42604 | 0.4198 | H 6.02986 | 10.62903 | 5.0873 | C 0.161723 | -0.737547 | -3.239484 |
| H -4.52154 | 8.33705 | -1.099 | H 4.65703 | 11.69824 | 5.4545 | C 2.185257 | 0.344847 | -2.439670 |
| C -4.0285 | 5.46457 | -1.1115 | H -8.17103 | 12.88647 | -1.1772 | C -1.268756 | -0.221229 | -3.086855 |
| C -2.46977 | 6.91064 | -2.1543 | H -9.10444 | 11.63143 | -0.3122 | C -2.670138 | -0.590367 | -1.141975 |
| C -4.94784 | 5.55149 | -2.3173 | H -9.89505 | 13.13919 | -0.8247 | C 0.624282 | -0.680788 | -4.682508 |
| H -4.61621 | 5.28184 | -0.1961 | H -9.91482 | 12.05587 | 2.0585 | H 0.131435 | -1.807699 | -2.927556 |
| H -3.35346 | 4.5982 | -1.2472 | H -10.7248 | 13.52947 | 1.4559 | C 3.086765 | 0.797052 | -1.426056 |
| C -3.35115 | 7.01741 | -3.3915 | H -9.62373 | 13.62368 | 2.849 | H 2.618145 | 0.248664 | -3.450174 |
| H -1.8687 | 7.82941 | -2.0434 | H -7.6439 | 15.09393 | -0.0357 | C -2.229635 | -0.991318 | -3.972305 |
| H -1.75679 | 6.07869 | -2.3073 | H -9.39771 | 15.30554 | 0.2307 | H -1.252899 | 0.842583 | -3.418716 |
| N -4.18646 | 5.84193 | -3.5241 | H -8.2648 | 15.44189 | 1.5951 | C -3.034789 | -0.515058 | -2.636902 |
| H -5.72434 | 6.33486 | -2.15 | H -3.11116 | 13.43851 | 4.3036 | H -3.444603 | -0.999955 | -1.811525 |
| H -5.48829 | 4.60091 | -2.4304 | H -3.91345 | 14.95408 | 3.8021 | C -0.342115 | -1.458804 | -5.566978 |
| H -3.96129 | 7.95165 | -3.356 | H -3.59319 | 14.64686 | 5.53 | H 1.643006 | -1.092828 | -4.782088 |
| H -2.70146 | 7.1023 | -4.2777 | | | | H 0.672432 | 0.377423 | -5.009088 |

C 4.415137 1.110896 -1.798308
 C 2.729974 0.718226 -0.039964
 C -1.765799 -0.943834 -5.422119
 H -3.250193 -0.580208 -3.888041
 H -2.275703 -2.042412 -3.622991
 C -4.282432 -1.070165 0.612759
 C -2.210277 0.161082 1.191776
 H -0.313705 -2.527339 -5.276786
 H -0.015466 -1.414161 -6.618994
 C 5.428079 1.285095 -0.874154
 H 4.630374 1.18819 -2.872108
 C 3.806926 0.721078 0.900271
 O 1.530305 0.574326 0.387919
 H -2.454454 -1.524169 -6.058148
 H -1.814814 0.100336 -5.787765
 C -4.750191 -0.99630 1.903379
 H -4.861389 -1.573574 -0.169025
 C -2.740827 0.331014 2.523562
 O -1.051481 0.633678 0.898298
 C 6.838838 1.669066 -1.322516
 C 5.085551 1.031822 0.476114
 C -6.054188 -1.633848 2.373853
 C -3.950385 -0.267963 2.821979
 C -1.985765 1.180586 3.549706
 C 6.793683 3.028332 -2.027027
 C 7.385989 0.614274 -2.288472
 C 7.802983 1.778043 -0.144786
 H 5.86786 1.046119 1.243361
 C -6.771762 -2.359933 1.240426
 C -5.748852 -2.656102 3.473154
 C -6.996161 -0.557778 2.921932
 H -4.331964 -0.167484 3.841992
 C -1.863319 2.616945 3.025353
 C -0.590045 0.605207 3.811116
 C -2.716702 1.240833 4.889292
 H 6.408575 3.809543 -1.350201
 H 6.142648 3.30865 -2.916549
 H 7.802936 3.030055 -2.358412
 H 6.765097 0.520293 -3.194502
 H 8.407359 0.878072 -2.614686
 H 7.427451 -0.377255 -1.806612
 H 7.476203 2.537359 0.585414
 H 8.802038 2.074818 -0.505409
 H 7.917792 0.818188 0.386387
 H -7.040844 -1.675789 0.417808
 H -6.157997 -3.177464 0.824142
 H -7.706643 -2.809996 1.614131
 H -5.079584 -3.448573 3.095680
 H -6.677687 -3.134694 3.830076
 H -5.258078 -2.193181 4.344749
 H -7.236305 0.186803 2.144245
 H -7.942678 -1.009516 3.266907
 H -6.558532 -0.017654 3.777104
 H -1.307979 2.655405 2.077377
 H -2.861655 3.060274 2.866793
 H -1.328892 3.243804 3.760539
 H 0.026302 0.619373 2.900414
 H -0.076226 1.196449 4.590393
 H -0.662602 -0.436038 4.174069
 H -2.145202 1.873428 5.588510
 H -3.723615 1.682798 4.798092
 H -2.816022 0.245675 5.355920
 C 3.538596 0.279712 2.314645
 H 2.658933 0.820029 2.706439
 H 4.405234 0.596314 2.935412
 C 2.833516 -2.549969 0.499968
 C 3.829737 -2.12611 1.568500
 C 2.083141 -1.640515 3.085122
 C 1.016722 -2.061337 2.086035
 H 3.24302 -3.40647 -0.069390
 H 2.713436 -1.719516 -0.232739
 H 4.744174 -1.745527 1.084943
 H 4.125296 -3.023582 2.153392
 H 2.345666 -2.520281 3.711917
 H 1.665328 -0.88301 3.767173
 H 0.207221 -2.583324 2.630546
 H 0.566452 -1.153897 1.629036
 N 3.28204 -1.144212 2.465183
 O -0.102892 2.408999 -1.171325
 O 0.077894 3.212727 -0.296588
 N 1.544967 -2.950127 1.054033
 C 0.599567 -3.141295 -0.013566
 C -0.652704 -3.922063 0.351350
 H 1.125049 -3.661002 -0.836358
 H 0.279066 -2.150229 -0.446980
 H -0.339666 -4.888461 0.791503
 H -1.217735 -3.392991 1.139122
 C -3.321322 -4.588676 -2.992369

C -1.952564 -4.812796 -3.133984
 C -1.090401 -4.595536 -2.060784
 C -1.570807 -4.150109 -0.820944
 C -2.948189 -3.934978 -0.695602
 C -3.815538 -4.151439 -1.765276
 H -4.000224 -4.763177 -3.832275
 H -1.551329 -5.170263 -4.087872
 H -0.021088 -4.795489 -2.189492
 H -3.345707 -3.586875 0.265637
 H -4.889674 -3.979763 -1.636446

s10_intra

Co -15.049435 -8.961089 4.732919
 N -16.770535 -9.684664 5.099285
 N -15.929503 -7.305379 4.536692
 C -17.813648 -8.697725 4.901715
 C -17.008745 -10.886689 5.509942
 C -17.221634 -7.639345 3.978949
 C -15.397742 -6.12778 4.477125
 H -18.083095 -8.222622 5.864984
 C -16.048877 -11.936151 5.630895
 H -18.054017 -11.153979 5.756648
 H -17.891837 -6.75911 3.907836
 C -14.010138 -5.847727 4.627383
 H -16.060216 -5.26899 4.253137
 C -16.506207 -13.179707 6.135129
 C -14.695057 -11.775138 5.179425
 C -13.618092 -4.48557 4.684299
 C -13.034245 -6.905806 4.604541
 C -15.688333 -14.281985 6.202944
 H -17.547967 -13.231113 6.469131
 C -13.848727 -12.943956 5.198750
 O -14.228756 -10.664631 4.735052
 C -12.297846 -4.112979 4.731405
 C -11.642996 -6.513261 4.648899
 O -13.340738 -8.147231 4.505859
 C -16.125437 -15.636371 6.753860
 C -14.367197 -14.117822 5.711040
 C -11.820804 -2.665269 4.799528
 C -11.345082 -5.166338 4.709913
 C -10.544838 -7.580325 4.686504
 C -17.574916 -15.614711 7.227987
 C -15.240305 -16.014747 7.945449
 C -15.997507 -16.704804 5.663654
 H -13.713991 -14.994533 5.739792
 C -12.988468 -1.684086 4.812592
 C -11.005813 -2.452182 6.079004
 C -10.948492 -2.351125 3.580218
 H -10.29037 -4.879691 4.744871
 C -10.674541 -8.564953 3.515450
 C -10.63892 -8.33133 6.020066
 C -9.149341 -6.963328 4.601654
 H -18.272403 -15.377606 6.406666
 H -17.731368 -14.88035 8.036191
 H -17.856393 -16.605152 7.623107
 H -15.32309 -15.264229 8.749571
 H -15.541342 -16.993671 8.358119
 H -14.176615 -16.086857 7.665808
 H -16.634527 -16.45957 4.796905
 H -16.309114 -17.691695 6.048536
 H -14.96225 -16.805184 5.299088
 H -13.601985 -1.763574 3.899065
 H -13.646092 -1.840396 5.684425
 H -12.61010 -0.649544 4.866058
 H -11.616549 -2.663103 6.973044
 H -10.651835 -1.408372 6.144611
 H -10.118618 -3.104784 6.120065
 H -11.517107 -2.488498 2.644856
 H -10.594729 -1.305768 3.614942
 H -10.05838 -2.998899 3.527532
 H -11.576189 -9.186517 3.603050
 H -10.711652 -8.02633 2.551306
 H -9.796002 -9.233735 3.490861
 H -11.627283 -8.793138 6.162882
 H -9.877355 -9.130282 6.065049
 H -10.456663 -7.643074 6.863331
 H -8.394442 -7.766319 4.629635
 H -8.999904 -6.400558 3.663690
 H -8.932504 -6.290227 5.448133
 C -12.415392 -12.854844 4.667281
 O -13.830357 -9.284182 7.281322
 O -14.772311 -8.709407 6.760381
 C -11.613197 -11.837367 5.485944
 H -12.032268 -10.825625 5.392607
 H -11.605536 -12.11252 6.555083
 H -10.565515 -11.811961 5.135687

C -11.691391 -14.196614 4.757389
 H -12.192664 -14.984182 4.168592
 H -10.669911 -14.088298 4.356741
 H -11.596708 -14.549666 5.798465
 C -12.424344 -12.437553 3.190051
 H -12.994867 -13.160468 2.579767
 H -12.864786 -11.438576 3.055853
 H -11.391704 -12.407626 2.799284
 H -18.733843 -9.143531 4.476956
 C -16.926657 -8.174941 2.560825
 H -17.813148 -8.703906 2.164599
 H -16.762304 -7.307131 1.896483
 C -14.604148 -8.535266 1.771488
 C -16.005802 -10.435052 2.159407
 C -14.790847 -8.710334 0.279057
 H -13.706623 -9.088696 2.100551
 H -14.433838 -7.477694 2.029112
 C -16.186704 -10.599623 0.663318
 H -15.144883 -11.041929 2.489171
 H -16.889697 -10.802804 2.704728
 N -15.029198 -10.101938 -0.045009
 H -13.884758 -8.360358 -0.244312
 H -15.634932 -8.070551 -0.089037
 H -16.323767 -11.670374 0.431097
 H -17.120928 -10.080972 0.322610
 N -15.738194 -9.047301 2.554159
 H -14.416624 -3.736109 4.686042
 C -15.094901 -10.341015 -1.1467850
 H -15.41690 -11.39038 -1.614266
 H -15.882694 -9.713029 -1.954199
 C -11.338787 -9.799767 -3.511333
 C -11.375125 -10.402866 -2.254143
 C -12.586782 -10.567362 -1.590063
 C -13.781275 -10.127433 -2.171601
 C -13.733818 -9.516057 -3.426044
 C -12.521895 -9.356556 -4.096285
 H -10.385475 -9.670566 -4.032033
 H -10.448431 -10.74812 -1.786044
 H -12.623188 -11.029877 -0.597995
 H -14.662784 -9.15757 -3.884078
 H -12.502179 -8.87538 -5.078662

MeOH

C -1.206974 4.798677 -0.024472
 H -0.839197 3.760602 -0.024689
 H -0.8531 5.266484 0.916736
 H -2.313927 4.749053 0.022656
 O -0.725781 5.424511 -1.172928
 H -1.042284 6.333219 -1.180135

s18

Co -0.58408 -0.09925 -1.06002
 N 0.40248 -0.26556 -2.68463
 N -2.13076 0.00579 -2.18258
 C -0.47349 -0.68181 -3.76911
 C 1.66577 -0.04997 -2.82072
 C -1.76947 0.10992 -3.59468
 C -3.35199 0.11431 -1.77189
 C 0.06607 -0.57092 -5.18241
 H -0.728 -1.74656 -3.56816
 C 2.57232 0.25122 -1.75086
 H 2.11805 -0.11261 -3.82514
 C -2.8197 -0.32281 -4.60327
 H -1.50963 1.17657 -3.78518
 C -3.78063 0.14984 -0.40874
 H -4.15932 0.19774 -2.51924
 C -0.98973 -1.01635 -6.18514
 H 0.97951 -1.17908 -5.2969
 H 0.35366 0.48103 -5.38043
 C 3.90243 0.5944 -2.08354
 C 2.17867 0.12138 -0.37806
 C -2.27539 -0.22158 -6.02198
 H -3.73093 0.29128 -4.51096
 H -3.11476 -1.36762 -4.37959
 C -5.17114 0.23892 -0.15618
 C -2.84613 0.12574 0.68176
 H -1.20288 -2.09182 -6.03208
 H -0.60173 -0.92319 -7.21264
 C 4.83763 0.82486 -1.10107

H -1.49398 1.19509 -3.79385 C -5.62684 0.34316 1.1391 H -1.42306 0.92148 -3.97603
 C -3.79631 0.12554 -0.43365 H -5.8017 0.23339 -1.0028 C -3.66904 0.24681 -0.53099
 H -4.16728 0.17281 -2.54402 C -3.30806 0.38797 1.9991 H -4.03427 0.16982 -2.63293
 C -0.99221 -0.9885 -6.20508 O -1.51707 0.26476 0.5049 C -0.8175 -1.43437 -6.17056
 H 0.97153 -1.18172 -5.31012 C 6.36315 0.8621 -1.4263 H 1.14809 -1.46133 -5.26007
 H 0.36649 0.48629 -5.38618 C 4.47795 0.46004 0.2369 H 0.46746 0.16637 -5.47087
 C 3.90228 0.57399 -2.08263 C -7.11647 0.37221 1.4702 C 3.98875 0.5635 -2.09697
 C 2.1731 0.1038 -0.3864 C -4.67339 0.40322 2.1906 C 2.25626 0.11151 -0.40987
 C -2.26707 -0.17633 -6.04269 C 6.62966 0.89077 -2.9278 C -2.13625 -0.68314 -6.07292
 H -3.72221 0.34613 -4.53381 C 7.27487 -0.19841 -0.8014 H -3.6192 -0.10726 -4.61247
 H -3.13034 -1.32237 -4.41398 C 6.71539 2.23856 -0.8539 H -2.93568 -1.72153 -4.33855
 C -5.18852 0.17791 -0.17788 H 5.22049 0.64007 1.0223 C -5.04629 0.44069 -0.27306
 C -2.86397 0.12723 0.66033 C -7.98033 0.30572 0.215 C -2.76263 0.20354 0.58781
 H -1.22156 -2.06156 -6.05836 C -7.46966 -0.82697 2.3553 H -0.98907 -2.50346 -5.93944
 H -0.59868 -0.89551 -7.23065 C -7.45414 1.66953 2.2116 H -0.4267 -1.40161 -7.12914
 C 4.84708 0.80814 -1.10788 H -5.04532 0.47107 3.2192 C 4.91821 0.84693 -1.12248
 H 4.17406 0.6506 -3.14228 H 6.02118 1.65641 -3.4382 H 4.2744 0.62285 -3.15408
 C 3.1776 0.33622 0.59312 H 6.42406 -0.08472 -3.4004 C 3.24813 0.37547 0.56868
 O 0.98762 -0.23115 -0.00608 H 7.68918 1.13155 -3.117 O 1.07693 -0.24337 -0.029
 H -3.02988 -0.49747 -6.77101 H 7.04582 -1.19969 -1.2039 H -2.87888 -1.10957 -6.76762
 H -2.05287 0.88598 -6.26982 H 8.33454 0.02343 -1.0185 H -1.98103 0.3652 -6.39349
 C -5.69132 0.22161 1.10167 H 7.16523 -0.24646 0.2941 C -5.55724 0.58145 0.99039
 H -5.87035 0.18318 -1.03694 H 6.0774 3.02251 -1.2957 H -5.7307 0.47766 -1.12931
 C -3.42238 0.17635 1.97263 H 7.76826 2.49163 -1.0699 C -3.31475 0.34247 1.88461
 O -1.59163 0.07523 0.53009 H 6.58328 2.27892 0.2395 O -1.49933 0.01889 0.47432
 C 4.46472 0.68145 0.24184 H -7.797 1.1624 -0.4554 C 4.54215 0.74926 0.24157
 C -4.78162 0.22051 2.18065 H -7.80577 -0.62239 -0.3553 C -4.67828 0.54324 2.12043
 H 5.20329 0.86113 1.03007 H -9.04778 0.32669 0.4915 O -0.42836 -2.30384 -0.77986
 H -5.1637 0.25815 3.20629 H -7.24722 -1.77573 1.8381 H 0.21829 -2.13608 -0.07218
 O -0.54268 -2.29551 -0.80726 H -8.54413 -0.81995 2.6097 C -1.57009 -2.95295 -0.27597
 H 0.21426 -2.13411 -0.21793 H -6.90585 -0.82333 3.3024 H -1.97879 -2.44923 0.61636
 C -1.58505 -2.91437 -0.09146 H -7.21599 2.54962 1.5906 H -1.35978 -4.00962 -0.03324
 H -1.74412 -2.45144 0.89685 H -8.52936 1.70674 2.4601 O -0.31366 1.85932 -1.18639
 H -1.40102 -3.99562 0.03986 H -6.8935 1.76649 3.1556 O -0.39458 2.45309 -2.25528
 O -0.38658 2.02384 -1.19054 O -0.7282 -2.2545 -0.7244 H -2.33917 -2.93223 -1.06455
 O -0.0637 2.61487 -0.18467 H -0.05806 -2.15364 -0.0271 H -2.58767 0.28836 2.69686
 H -2.51262 -2.79387 -0.67281 C -1.89886 -2.85078 -0.2252 H 2.96176 0.26035 1.61708
 H -2.71307 0.18193 2.80526 H -2.29503 -2.33274 0.6664 H -6.62981 0.73231 1.11596
 H 2.87483 0.23706 1.63926 H -1.74167 -3.91589 0.021 H 5.93093 1.15352 -1.39635
 H -6.76841 0.26072 1.28097 O -0.18945 1.97647 -1.3188 N 5.46184 1.04695 1.27926
 H 5.87143 1.08018 -1.37357 O 0.21392 2.59107 -0.3529 N -5.17461 0.72011 3.39337
 H -2.66435 -2.79528 -1.0149 C -4.28974 0.70563 4.5433
 C -2.30444 0.45652 3.1284 H -4.76489 1.31016 5.33537
 C -1.56673 -0.87184 3.2968 H -3.36166 1.24282 4.28514
 C -2.89866 0.90021 4.4538 C -6.60299 0.76543 3.64699
 H -1.54647 1.2025 2.8178 H -6.74206 1.22624 4.63951
 H -1.02057 -1.13712 2.378 H -7.08464 1.46304 2.93873
 H -0.83286 -0.81164 4.1183 C -3.96694 -0.68027 5.07498
 H -2.27752 -1.68279 3.5401 H -3.25281 -0.62529 5.91192
 H -3.44476 1.8541 4.3691 H -4.87218 -1.19071 5.44206
 H -3.59649 0.14628 4.8605 H -3.52088 -1.31215 4.29046
 H -2.10251 1.03478 5.2037 C -7.2973 -0.58564 3.60697
 C 2.74579 0.09832 2.0716 H -7.16893 -1.07217 2.62685
 C 1.81751 1.26058 2.4267 H -6.8902 -1.26761 4.37021
 C 3.89738 0.01865 3.0592 H -8.37811 -0.47885 3.79237
 H 2.14633 -0.8291 2.1653 C 5.3612 2.41373 1.78993
 H 0.90773 1.25079 1.8067 H 6.19522 2.55331 2.49902
 H 1.51228 1.20379 3.4861 H 5.54344 3.14185 0.96315
 H 2.33365 2.22587 2.277 C 6.83937 0.64958 1.03095
 H 4.59373 -0.80498 2.8296 H 7.40375 1.43947 0.48099
 H 4.4794 0.95739 3.0799 H 6.82254 -0.23024 0.36631
 H 3.51438 -0.13967 4.0803 C 4.06618 2.74973 2.49373
 H 3.87124 2.04012 3.3141
 H 4.12173 3.76355 2.92062
 H 3.20205 2.72411 1.81259
 C 7.57495 0.28422 2.30493
 H 8.59868 -0.05534 2.08153
 H 7.66012 1.1356 2.99939
 H 7.0466 -0.52463 2.83334

s21

Co -0.56093 -0.07469 -1.0876
 N 0.40927 -0.39884 -2.6925
 N -2.09931 0.0802 -2.2034
 C -0.49523 -0.76829 -3.7686
 C 1.68793 -0.27235 -2.8151
 C -1.73207 0.12319 -3.6142
 C -3.3174 0.18466 -1.7777
 C 0.0521 -0.7234 -5.1826
 H -0.83316 -1.80644 -3.5504
 C 2.60207 0.01116 -1.7468
 H 2.14512 -0.3943 -3.8124
 C -2.80922 -0.25262 -4.6165
 H -1.39318 1.16195 -3.8321
 C -3.73351 0.24101 -0.4112
 H -4.13446 0.23806 -2.5179
 C -1.03216 -1.10666 -6.1807
 H 0.91896 -1.39863 -5.2832
 H 0.41713 0.30084 -5.3975
 C 3.9495 0.29488 -2.0769
 C 2.19176 -0.05746 -0.3814
 C -2.25686 -0.21711 -6.0353
 H -3.67408 0.42703 -4.5348
 H -3.17862 -1.26983 -4.3759
 C -5.12622 0.27131 -0.1414
 C -2.78968 0.29673 0.6613
 H -1.32437 -2.16082 -6.0101
 H -0.63722 -1.05999 -7.209
 C 4.90536 0.53546 -1.1128
 H 4.20921 0.32218 -3.1405
 C 3.18449 0.17083 0.6257
 O 0.98632 -0.33765 -0.0111
 H -3.03958 -0.51077 -6.7541
 H -1.9816 0.82488 -6.2891

s15

Co -0.49089 -0.14949 -1.12469
 N 0.51684 -0.40247 -2.72241
 N -2.02055 -0.12002 -2.27208
 C -0.33901 -0.90156 -3.78567
 C 1.77692 -0.16134 -2.85018
 C -1.65318 -0.12792 -3.68405
 C -3.23702 0.09493 -1.8728
 C 0.2138 -0.8774 -5.19785
 H -0.57662 -1.95602 -3.51841
 C 2.65876 0.20681 -1.7852
 H 2.24383 -0.25841 -3.84559
 C -2.68283 -0.68827 -4.65129

s14_1

Co -0.92961 0.05283 5.8958
 N -0.85963 0.689 7.6958
 N -0.49862 -1.65541 6.6261
 C -0.96219 -0.42098 8.6303
 C -0.67501 1.92025 8.0362

C -0.12688 -1.55814 8.0337 H -1.42317 1.22842 -3.67655 C -0.7374 2.68114 5.5886
C -0.50436 -2.76577 5.9663 C -3.76141 0.20309 -0.32966 C -0.06881 -2.56787 10.4611
C -0.58563 -0.14929 10.0741 H -4.11365 0.4392 -2.42942 H 0.31997 -3.73933 8.6876
H -2.02078 -0.76077 8.5937 C -1.00759 -0.8926 -6.14943 H -1.37706 -3.25422 8.8707
C -0.64649 3.03953 7.1367 H 0.94611 -1.19219 -5.26178 C -0.43213 -4.54272 4.2027
H -0.53752 2.16593 9.1032 H 0.40523 0.5004 -5.27623 C -0.65511 -2.11779 3.7743
C -0.24432 -2.8235 8.8648 C 3.92596 0.35598 -1.93725 H -1.985 -1.67107 10.8761
H 0.93165 -1.21186 8.0633 C 2.15928 -0.14689 -0.28541 H -0.7052 -1.15133 11.9778
C -0.73687 -2.91303 4.5618 C -2.25403 -0.04288 -5.9578 C -0.02804 5.24293 6.624
H -0.29556 -3.70532 6.506 H -3.68853 0.48418 -4.43179 H 0.07586 4.27532 8.543
C -0.71646 -1.42137 10.9005 H -3.15654 -1.20726 -4.3611 C -0.66796 3.8325 4.7407
H -1.22177 0.64777 10.4956 C -5.14988 0.34279 -0.07377 O -1.05524 1.54109 5.07
H 0.45912 0.21865 10.1142 C -2.84293 -0.02522 0.74412 H -0.25169 -3.45208 11.0936
C -0.27747 4.3098 7.6379 H -1.2743 -1.96166 -6.04202 H 1.00224 -2.31655 10.586
C -1.08259 2.88669 5.787 H -0.61035 -0.77596 -7.1711 C -0.59664 -4.82492 2.8673
C 0.12328 -2.54657 10.3166 C 4.84973 0.55602 -0.93614 H -0.27876 -5.35158 4.9262
H 0.40479 -3.61819 8.46 H 4.21736 0.45967 -2.98863 C -0.82618 -2.44784 2.3879
H -1.28581 -3.19682 8.8 C 3.14486 0.06742 0.7298 O -0.71165 -0.884 4.1148
C -0.75753 -4.22679 4.0295 O 0.96958 -0.49314 0.06822 C -0.31275 5.0652 5.259
C -0.90756 -1.77579 3.705 H -3.02771 -0.31476 -6.69463 C -0.79265 -3.76045 1.9642
H -1.77896 -1.73142 10.9218 H -2.00375 1.01811 -6.15113 H -0.25604 5.90124 4.5554
H -0.43193 -1.22615 11.9474 C -5.6496 0.23258 1.20129 H -0.93833 -3.94471 0.8954
C -0.30989 5.41802 6.8211 H -5.82026 0.52793 -0.9206 O -2.96434 -0.20428 5.8233
H 0.03628 4.39394 8.6842 C -3.40283 -0.16828 2.05906 H -2.865 0.7089 5.5043
C -1.11089 4.05467 4.961 O -1.57501 -0.15294 0.60685 C -3.57851 -0.96775 4.8069
O -1.49232 1.76288 5.2952 C 4.44209 0.41038 0.40311 H -3.1318 -0.76919 3.817
H 0.01492 -3.46547 10.9159 C -4.76099 -0.02873 2.26332 H -4.66664 -0.78298 4.7664
H 1.19344 -2.26804 10.3714 H 5.15088 0.55952 1.22485 O 1.38091 0.1796 5.738
C -0.93325 -4.45183 2.685 H -5.12457 -0.14792 3.2885 O 1.81466 0.61159 4.6937
H -0.62928 -5.06832 4.7199 O -0.64473 -2.40016 -0.84051 H -3.42136 -2.03234 5.04
C -1.0338 -2.0484 2.2998 H 0.13959 -2.32692 -0.26821 C -0.10314 -0.46122 1.3049
O -0.96732 -0.5584 4.1022 C -1.69705 -3.00629 -0.12062 H 0.86377 -0.95013 1.067
C -0.72345 5.27768 5.485 H -1.78313 -2.60302 0.90217 H 0.03708 0.11752 2.2353
C -1.0581 -3.34332 1.8248 H -1.56932 -4.10179 -0.07472 C -2.00892 3.04858 2.9064
H -0.76234 6.14013 4.8127 O -0.29369 1.79018 -0.85672 H -1.8027 1.96436 2.8445
H -1.17681 -3.47541 0.7443 O -0.25942 2.48608 -1.86302 H -2.85995 3.17415 3.6063
O -3.1251 -0.16742 6.0255 H -2.63662 -2.79061 -0.65237 C -2.33713 3.62831 1.5564
H -3.15815 0.77103 5.766 C -1.41767 0.18342 3.37105 H -2.58867 4.69769 1.6327
C -3.78972 -0.9397 5.048 H -1.53931 1.24294 3.07072 H -1.47356 3.53193 0.8794
H -3.48964 -0.65479 4.0244 H -0.59096 -0.22676 2.76276 H -3.18886 3.0998 1.1003
H -4.8858 -0.85272 5.1468 C 2.47355 1.09214 2.74368 C -0.55596 0.42071 0.1748
O 1.06297 0.47687 5.6881 H 2.11381 0.7475 3.72779 H 0.17275 1.22519 -0.0081
H 1.39941 1.08681 4.6867 H 3.41264 1.65733 2.92792 H -0.68245 -0.15675 -0.7544
H -3.51314 -1.99408 5.201 C 1.4507 1.98209 2.07712 H -1.52571 0.8843 0.418
C -0.02768 -0.19742 1.2433 H 1.84998 2.44134 1.1576 H 0.25072 6.22971 7.0016
H 0.34837 0.1575 2.2209 H 0.55062 1.41322 1.79304 H -0.57402 -5.85544 2.5047
H -0.38493 0.68985 0.694 H 1.16146 2.801 2.75536 O -0.8752 3.74032 3.406
C -1.28416 2.94803 2.8069 C -1.12917 0.07028 4.84361 O -1.09451 -1.46536 1.4915
H -0.87232 3.41774 1.894 H -0.1849 0.57993 5.09222
H -0.50137 2.29712 3.2292 H -1.93565 0.51853 5.4449
C -2.52428 2.15717 2.4817 H -1.03399 -0.98661 5.13847
H -2.91098 1.68469 3.3962 H 5.88348 0.82029 -1.17163
H -3.30417 2.80694 2.053 H -6.71943 0.3393 1.39629
H -2.30235 1.34835 1.7674 O 2.76305 -0.09366 2.02398
C 1.04924 -0.90962 0.4618 O -2.6246 -0.52476 3.10873
H 1.89837 -0.23516 0.2704
H 1.43556 -1.78323 1.0118
H 0.6623 -1.26201 -0.5083
H -0.01658 6.40033 7.1998
H -0.95658 -5.46733 2.2826
O -1.58138 4.02515 3.6969
O -1.17996 -1.01162 1.4316

s14_2

Co -0.58674 -0.2138 -0.99868
N 0.40356 -0.37234 -2.61693
N -2.11502 0.03858 -2.11455
C -0.49072 -0.68633 -3.72138
C 1.67712 -0.20843 -2.72978
C -1.74089 0.17328 -3.52103
C -3.32072 0.23754 -1.68909
C 0.06411 -0.54329 -5.12544
H -0.80826 -1.74173 -3.57009
C 2.58374 0.02047 -1.64077
H 2.13623 -0.24847 -3.73228
C -2.80893 -0.17111 -4.54515

s14_3

Co -0.71486 -0.1655 5.8548
N -0.74616 0.55767 7.6169
N -0.38848 -1.84822 6.6941
C -0.95408 -0.50142 8.5938
C -0.58339 1.80175 7.917
C -0.11305 -1.68912 8.1194
C -0.3125 -2.98734 6.086
C -0.68176 -0.16751 10.048
H -2.01727 -0.81244 8.4906
C -0.4679 2.88168 6.9785
H -0.53754 2.09481 8.9799
C -0.33264 -2.90701 9.0001
H 0.95099 -1.37117 8.212
C -0.46529 -3.20848 4.6813
H -0.10991 -3.89403 6.6813
C -0.91477 -1.39187 10.9226
H -1.32425 0.66563 10.3805
H 0.36727 0.17504 10.1519
C -0.1224 4.1625 7.4712

s14_4

Co -0.92853 -0.08745 5.7958
N -0.9248 0.6047 7.576
N -0.33677 -1.72437 6.5812
C -0.94804 -0.48822 8.5368
C -0.91669 1.85311 7.8978
C 0.0105 -1.54838 7.9886
C -0.11583 -2.82402 5.937
C -0.63952 -0.14594 9.982
H -1.96691 -0.93122 8.483
C -0.91534 2.94821 6.9709
H -0.8874 2.13243 8.9648
C 0.00252 -2.79816 8.8521
H 1.02835 -1.09619 8.0259
C -0.37678 -3.06409 4.5526
H 0.29361 -3.68688 6.4892
C -0.66005 -1.40471 10.8385
H -1.36546 0.58912 10.3695
H 0.35982 0.33043 10.0367
C -0.69988 4.25284 7.4719
C -1.1487 2.73057 5.5777
C 0.30456 -2.45099 10.3036
H 0.73775 -3.53332 8.4846
H -0.99402 -3.27628 8.7722
C -0.18528 -4.37993 4.0599
C -0.88078 -2.02978 3.7013
H -1.68542 -1.82195 10.844

H -0.4237 -1.15562 11.886
 C -0.64947 5.33697 6.6237
 H -0.56088 4.38311 8.551
 C -1.00636 3.86385 4.7165
 O -1.49112 1.59105 5.0714
 H 0.27591 -3.3617 10.9241
 H 1.33893 -2.06249 10.3748
 C -0.51403 -4.706 2.7663
 H 0.21745 -5.13821 4.7407
 C -1.2596 -2.41764 2.3716
 O -1.05181 -0.80882 4.0575
 C -0.78207 5.1242 5.2408
 C -1.06023 -3.71178 1.9317
 H -0.7 5.95185 4.5291
 H -1.36684 -3.93947 0.9063
 O -3.12407 -0.3442 5.9516
 H -3.17995 0.54988 5.5709
 C -3.77291 -1.25547 5.0903
 H -3.46646 -1.10337 4.0355
 H -4.87042 -1.18668 5.1888
 O 1.01597 0.51952 5.5204
 O 1.74331 -0.17496 4.8303
 H -3.46646 -2.27243 5.3803
 C -1.42591 -0.23143 1.3614
 H -0.32158 -0.21668 1.4499
 H -1.81434 0.42735 2.1579
 C -0.17979 2.84088 2.7525
 H -0.30385 1.81305 3.1401
 H -0.46775 2.83289 1.6881
 C 1.24558 3.30996 2.9159
 H 1.36874 4.34457 2.5547
 H 1.56203 3.27853 3.9719
 H 1.92992 2.65965 2.3488
 C -1.87061 0.22515 -0.002
 H -1.56604 1.26773 -0.1823
 H -1.44027 -0.40697 -0.7945
 H -2.9675 0.17182 -0.0856
 H -0.48062 6.34467 7.0112
 H -0.36728 -5.72022 2.3871
 O -1.11475 3.71894 3.373
 O -1.90426 -1.5581 1.5469

s14_5

Co -0.73368 -0.06666 5.8322
 N -0.80043 0.60328 7.6137
 N -0.35707 -1.76224 6.6275
 C -0.98692 -0.48814 8.5567
 C -0.7242 1.84773 7.9444
 C -0.10527 -1.63663 8.0607
 C -0.19899 -2.87188 5.9814
 C -0.74266 -0.18887 10.0238
 H -2.03977 -0.82949 8.4352
 C -0.62921 2.94932 7.0308
 H -0.73314 2.1196 9.0139
 C -0.30602 -2.8859 8.901
 H 0.94798 -1.29307 8.179
 C -0.32742 -3.05721 4.569
 H 0.05835 -3.78293 6.5486
 C -0.95062 -1.44423 10.8603
 H -1.41396 0.61429 10.3724
 H 0.29397 0.18244 10.1501
 C -0.40757 4.24257 7.5617
 C -0.83364 2.76367 5.6274
 C -0.06987 -2.58456 10.375
 H 0.37001 -3.69321 8.5733
 H -1.34039 -3.2534 8.7455
 C -0.15545 -4.36595 4.0511
 C -0.58887 -1.95596 3.6899
 H -2.01265 -1.75003 10.7949
 H -0.75796 -1.22896 11.9241
 C -0.34716 5.34504 6.7402
 H -0.28155 4.34834 8.6451
 C -0.72978 3.92509 4.7964
 O -1.12595 1.63291 5.0796
 H -0.23828 -3.49156 10.9786
 H 0.99294 -2.31087 10.521

C -0.25807 -4.61999 2.7042
 H 0.06377 -5.17822 4.7535
 C -0.72535 -2.26451 2.2937
 O -0.71377 -0.73686 4.0628
 C -0.49871 5.1698 5.3528
 C -0.55668 -3.55365 1.8325
 H -0.43813 6.01853 4.6648
 H -0.6579 -3.71511 0.7548
 O -2.94031 -0.20651 5.8141
 H -2.96223 0.53645 5.1876
 C -3.58607 -1.33769 5.2876
 H -3.20973 -1.61515 4.2871
 H -4.67987 -1.19615 5.2318
 O 1.33591 0.31958 5.7609
 O 1.77914 0.83505 4.7569
 H -3.38856 -2.18028 5.9691
 C -2.20787 -0.58349 1.537
 H -2.22762 -0.01675 2.4879
 H -3.03505 -1.32456 1.5681
 C -0.06132 2.92672 2.74
 H 0.9604 2.96161 3.1683
 H -0.41431 1.88601 2.8589
 C -0.05742 3.35836 1.2991
 H -1.08289 3.35961 0.8953
 H 0.34679 4.37697 1.1885
 H 0.55137 2.67219 0.69
 C -2.3575 0.33429 0.3555
 H -3.30159 0.89702 0.4131
 H -1.52803 1.05752 0.3255
 H -2.34505 -0.23417 -0.5874
 H -0.17108 6.34205 7.1514
 H -0.12138 -5.63008 2.3107
 O -0.89797 3.83062 3.4568
 O -0.97579 -1.27117 1.4025

s14_6

Co -0.77 -0.04843 5.7866
 N -0.83451 0.61267 7.5718
 N -0.35824 -1.74009 6.5697
 C -0.99507 -0.48579 8.5112
 C -0.75448 1.85581 7.9059
 C -0.09914 -1.61769 8.0019
 C -0.19676 -2.84556 5.9174
 C -0.74263 -0.18935 9.9774
 H -2.043 -0.84324 8.3964
 C -0.68205 2.96097 6.9934
 H -0.74347 2.12371 8.9764
 C -0.27242 -0.87395 8.8378
 H 0.94932 -1.2576 8.1136
 C -0.31903 -3.0236 4.5033
 H 0.06574 -3.7581 6.4797
 C -0.92451 -1.45179 10.8092
 H -1.4227 0.60251 10.3348
 H 0.28957 0.19626 10.097
 C -0.44211 4.25202 7.5214
 C -0.93061 2.77969 5.5969
 C -0.02946 -2.57549 10.3113
 H 0.41459 -3.66809 8.5009
 H -1.30157 -3.25815 8.6892
 C -0.13037 -4.32768 3.9788
 C -0.57657 -1.91767 3.6293
 H -1.98205 -1.77398 10.7505
 H -0.72695 -1.23876 11.8726
 C -0.40923 5.35728 6.7018
 H -0.2795 4.35398 8.6003
 C -0.86992 3.94558 4.7678
 O -1.23036 1.6458 5.0569
 H -0.17845 -3.4879 10.9119
 H 1.02993 -2.2854 10.4504
 C -0.20588 -4.5702 2.6282
 H 0.0821 -5.14408 4.6784
 C -0.67276 -2.21168 2.2259
 O -0.72855 -0.70466 4.0135
 C -0.61548 5.18741 5.3209
 C -0.48807 -3.49705 1.7595
 H -0.58347 6.03938 4.6342

H -0.56314 -3.64931 0.6779
 O -2.97099 -0.23236 5.7903
 H -3.00444 0.55872 5.2248
 C -3.60452 -1.325 5.1756
 H -3.25604 -1.48975 4.1408
 H -4.70286 -1.21045 5.1688
 O 1.27862 0.38228 5.7034
 O 1.68912 0.97034 4.7239
 H -3.36049 -2.22533 5.7612
 C -2.10226 -0.48607 1.428
 H -2.00329 0.3366 0.7021
 H -2.19708 -0.02379 2.4283
 C -0.25137 3.02922 2.6576
 H -0.28243 1.9856 3.0172
 H -0.69054 3.04597 1.647
 C 1.16147 3.55739 2.6346
 H 1.19084 4.6009 2.2788
 H 1.61618 3.52575 3.6385
 H 1.7904 2.94398 1.9706
 C -3.29798 -1.34614 1.0943
 H -4.22344 -0.7487 1.1021
 H -3.18944 -1.80073 0.0958
 H -3.42192 -2.16768 1.8204
 H -0.21697 6.35258 7.11
 H -0.05695 -5.57617 2.2286
 O -1.11475 3.85495 3.4385
 O -0.88404 -1.20931 1.3344

s26

Co -0.60499 -0.06538 -1.09586
 N 0.3866 -0.28262 -2.71126
 N -2.13966 0.06685 -2.22791
 C -0.49557 -0.68005 -3.79743
 C 1.65319 -0.07794 -2.84748
 C -1.7656 0.15676 -3.6362
 C -3.36343 0.18691 -1.8248
 C 0.05606 -0.59748 -5.20797
 H -0.78766 -1.73308 -3.58846
 C 2.57017 0.21772 -1.78681
 H 2.1021 -0.14755 -3.85308
 C -2.82248 -0.24267 -4.65194
 H -1.46679 1.21261 -3.83106
 C -3.81149 0.20295 -0.46969
 H -4.16232 0.28399 -2.57958
 C -1.00774 -1.01293 -6.2149
 H 0.94996 -1.23603 -5.31186
 H 0.37948 0.44291 -5.41211
 C 3.90649 0.55374 -2.12566
 C 2.1694 0.0889 -0.42375
 C -2.26412 -0.16976 -6.06678
 H -3.71106 0.4052 -4.56939
 H -3.15794 -1.27448 -4.42612
 C -5.21041 0.27575 -0.2269
 C -2.88131 0.15832 0.61481
 H -1.26179 -2.07838 -6.05418
 H -0.6097 -0.94272 -7.2406
 C 4.84389 0.7738 -1.14902
 H 4.17355 0.63573 -3.18513
 C 3.18939 0.29572 0.57264
 O 0.98481 -0.22411 -0.03549
 H -3.03219 -0.48273 -6.79322
 H -2.02477 0.88431 -6.3071
 C -5.70518 0.27724 1.05021
 H -5.88709 0.32728 -1.08728
 C -3.44572 0.12671 1.94492
 O -1.6117 0.1253 0.49673
 C 4.47761 0.63935 0.20829
 C -4.80931 0.1946 2.14246
 H 5.23436 0.80945 0.9784
 H -5.21467 0.17964 3.15752
 O -0.56752 -2.28703 -0.75734
 H 0.24132 -2.08406 -0.25489
 C -1.52451 -2.83193 0.12253
 H -1.5704 -2.27508 1.0738
 H -1.32155 -3.89789 0.33062
 O -0.36149 2.05501 -1.23071

O -0.02838 2.64646 -0.23008
 H -2.5121 -2.76164 -0.36007
 H -6.78038 0.33485 1.23697
 H 5.871 1.0439 -1.40677
 O -2.52707 0.01783 2.92728
 O 2.76684 0.12937 1.84182
 C 3.67068 0.34791 2.87799
 H 4.06063 1.38424 2.87856
 H 3.13339 0.17703 3.82078
 H 4.53356 -0.34515 2.83348
 C -2.96663 0.00596 4.2484
 H -3.50475 0.93601 4.51559
 H -3.63585 -0.85129 4.45856
 H -2.07735 -0.07936 4.88761

s20

Co -0.58611 -0.10418 -1.0412
 N 0.40472 -0.28622 -2.6658
 N -2.12828 0.01205 -2.17
 C -0.47348 -0.68471 -3.7546
 C 1.66952 -0.07416 -2.7994
 C -1.75994 0.12335 -3.5784
 C -3.35293 0.09833 -1.763
 C 0.07175 -0.57084 -5.1657
 H -0.74319 -1.74665 -3.5612
 C 2.57648 0.21854 -1.7281
 H 2.12178 -0.13269 -3.8045
 C -2.81162 -0.28386 -4.5962
 H -1.48366 1.18762 -3.7597
 C -3.78754 0.11858 -0.4023
 H -4.15825 0.17275 -2.5139
 C -0.98644 -0.99316 -6.1756
 H 0.97738 -1.19041 -5.2817
 H 0.37447 0.4785 -5.3551
 C 3.90605 0.56611 -2.0505
 C 2.17979 0.07867 -0.3585
 C -2.25973 -0.17892 -6.0116
 H -3.71329 0.344 -4.5016
 H -3.12463 -1.32574 -4.3844
 C -5.1778 0.17962 -0.1479
 C -2.85487 0.11028 0.6888
 H -1.21765 -2.06599 -6.0301
 H -0.59313 -0.89959 -7.2012
 C 4.88045 0.80664 -1.0956
 H 4.15614 0.64549 -3.1168
 C 3.19113 0.31013 0.6074
 O 0.99548 -0.26419 0.0236
 H -3.02345 -0.49759 -6.7401
 H -2.04363 0.88333 -6.2373
 C -5.71759 0.22482 1.1242
 H -5.84333 0.19158 -1.0215
 C -3.4263 0.15784 1.9909
 O -1.58123 0.05122 0.5626
 C 4.47686 0.66283 0.2509
 C -4.78803 0.21165 2.1923
 H 5.19841 0.83472 1.0547
 H -5.14885 0.24761 3.2244
 O -0.53675 -2.31508 -0.7867
 H 0.2251 -2.14796 -0.2045
 C -1.57244 -2.9287 -0.0569
 H -1.7157 -2.46436 0.9329
 H -1.3918 -4.01089 0.0719
 O -0.3761 2.00096 -1.1498
 O -0.04714 2.58768 -0.1427
 H -2.50752 -2.80365 -0.6253
 H -2.72853 0.15554 2.8334
 H 2.9033 0.20536 1.6574
 C -7.23177 0.28941 1.3278
 C -7.60657 0.34105 2.806
 H -8.70332 0.38695 2.913
 H -7.25976 -0.55319 3.3509
 H -7.18934 1.23131 3.3061
 C -7.78992 1.54535 0.6521
 H -7.33651 2.45604 1.0784
 H -7.59283 1.55184 -0.4325
 H -8.8835 1.61017 0.7912

C -7.88802 -0.95097 0.7143
 H -7.69397 -1.02656 -0.3682
 H -7.50684 -1.87216 1.1866
 H -8.9831 -0.92311 0.8542
 C 6.29774 1.20235 -1.511
 C 7.21538 1.38434 -0.3055
 H 7.30992 0.45672 0.2839
 H 8.22695 1.66479 -0.6438
 H 6.85999 2.18364 0.3662
 C 6.89902 0.1135 -2.4044
 H 6.31054 -0.03879 -3.324
 H 7.92527 0.38343 -2.7098
 H 6.94374 -0.852 -1.8727
 C 6.25542 2.52556 -2.2811
 H 5.64164 2.45074 -3.1939
 H 5.82861 3.32961 -1.6582
 H 7.27135 2.83207 -2.5868

s23

Co -0.57946 0.03039 -1.04823
 N 0.40127 -0.19996 -2.65801
 N -2.13009 0.05222 -2.15908
 C -0.47337 -0.63978 -3.73474
 C 1.68203 -0.09143 -2.77316
 C -1.77561 0.143 -3.57224
 C -3.35066 0.1419 -1.73737
 C 0.06407 -0.54457 -5.15092
 H -0.72267 -1.70499 -3.52307
 C 2.60848 0.20642 -1.72448
 H 2.13762 -0.24896 -3.76576
 C -2.82343 -0.31641 -4.57124
 H -1.52726 1.20851 -3.78332
 C -3.78839 0.15564 -0.37845
 H -4.16028 0.20702 -2.4844
 C -0.98929 -1.00759 -6.14841
 H 0.97914 -1.15047 -5.26168
 H 0.34903 0.50615 -5.35851
 C 3.96343 0.37643 -2.09894
 C 2.20717 0.26546 -0.35118
 C -2.28343 -0.2253 -5.99215
 H -3.74277 0.28618 -4.48325
 H -3.10412 -1.36246 -4.33352
 C -5.18714 0.18774 -0.15052
 C -2.8632 0.13966 0.71572
 H -1.19224 -2.08377 -5.9857
 H -0.60311 -0.9203 -7.17731
 C 4.95014 0.62009 -1.17242
 H 4.20039 0.30382 -3.16567
 C 3.23364 0.53933 0.62437
 O 0.99146 0.06412 0.03079
 H -3.04206 -0.57907 -6.70967
 H -2.09804 0.83785 -6.23956
 C -5.71944 0.17979 1.11682
 H -5.8366 0.21572 -1.03194
 C -3.41646 0.09886 2.04911
 O -1.58993 0.14321 0.55413
 C 6.42334 0.80969 -1.52283
 C 4.53425 0.69605 0.1794
 C -7.21572 0.21913 1.41477
 C -4.79101 0.12643 2.18827
 C -2.48269 0.01927 3.25956
 C 6.66929 0.69052 -3.0234
 C 7.26259 -0.25958 -0.81665
 C 6.88535 2.19948 -1.07381
 H 5.30716 0.8993 0.92557
 C -8.04749 0.26704 0.13716
 C -7.62037 -1.03332 2.19857
 C -7.54196 1.46600 2.24245
 H -5.20151 0.10439 3.20178
 C -1.57208 1.25118 3.30464
 C -1.6328 -1.25506 3.17663
 C -3.25383 -0.03345 4.57647
 H 6.11402 1.45521 -3.59263
 H 6.3823 -0.30256 -3.40888
 H 7.74123 0.83137 -3.24136
 H 6.95543 -1.27119 -1.13179

H 8.33286 -0.13604 -1.0585
 H 7.16386 -0.20774 0.27987
 H 6.30025 2.98867 -1.57551
 H 7.95049 2.35356 -1.32071
 H 6.77436 2.34283 0.01336
 H -7.82475 1.16459 -0.46435
 H -7.88141 -0.62186 -0.49491
 H -9.12104 0.2967 0.38798
 H -7.40322 -1.94653 1.61889
 H -8.70165 -1.01938 2.42177
 H -7.08677 -1.11327 3.15969
 H -7.2697 2.38347 1.69379
 H -8.62158 1.51054 2.4697
 H -7.00116 1.47952 3.20278
 H -0.93355 1.31339 2.412
 H -2.17187 2.1754 3.3699
 H -0.92105 1.20881 4.19618
 H -1.02809 -1.26763 2.25751
 H -0.94392 -1.31307 4.03767
 H -2.27394 -2.15449 3.19539
 H -2.54061 -0.10201 5.4146
 H -3.86202 0.87264 4.73926
 H -3.91829 -0.91239 4.63917
 C 2.87261 0.70548 2.10375
 O -0.45829 -2.15458 -0.70871
 H 0.08864 -2.03364 0.08347
 C -1.61732 -2.89324 -0.40921
 H -2.1857 -2.46542 0.43551
 H -1.38307 -3.94898 -0.18623
 O -0.45112 2.12076 -1.24076
 O -0.40071 2.77164 -0.21869
 H -2.26323 -2.86938 -1.30107
 C 2.15904 -0.53784 2.64772
 H 1.17843 -0.67834 2.17244
 H 2.76829 -1.44463 2.48563
 H 1.99811 -0.43332 3.73548
 C 4.10874 0.9316 2.97294
 H 4.65784 1.84652 2.69342
 H 3.79727 1.05098 4.02384
 H 4.80987 0.08002 2.93157
 C 1.96854 1.93348 2.25541
 H 2.49387 2.84499 1.92195
 H 1.04729 1.82971 1.66385
 H 1.6856 2.07382 3.31388

s18-py

Co -0.57739 -0.2907 -1.11561
 N 0.40898 -0.33684 -2.75587
 N -2.12481 -0.07095 -2.24227
 C -0.46493 -0.67066 -3.8692
 C 1.66174 -0.0521 -2.88714
 C -1.76063 0.10914 -3.64594
 C -3.33358 0.11886 -1.82295
 C 0.07412 -0.46119 -5.27187
 H -0.7265 -1.74716 -3.75616
 C 2.56799 0.21689 -1.81303
 H 2.10213 -0.02094 -3.89834
 C -2.81084 -0.2752 -4.67548
 H -1.50294 1.18426 -3.78333
 C -3.76546 0.10512 -0.46103
 H -4.12854 0.31575 -2.56285
 C -0.97729 -0.8531 -6.3014
 H 0.99468 -1.04998 -5.42543
 H 0.34937 0.60437 -5.40216
 C 3.89112 0.59807 -2.14076
 C 2.17482 0.0602 -0.43892
 C -2.27282 -0.08642 -6.08754
 H -3.72824 0.32258 -4.54695
 H -3.09464 -1.33381 -4.50909
 C -5.15028 0.26931 -0.20633
 C -2.83685 -0.02682 0.63061
 H -1.17724 -1.93887 -6.21879
 H -0.59149 -0.68867 -7.32085
 C 4.82131 0.83262 -1.15705
 H 4.17478 0.70806 -3.19299
 C 3.18382 0.30901 0.54135

O 1.01172 -0.30822 -0.05584 Cl 2.78304 0.05263 2.18517 C -2.09909 -4.40608 -0.6456
 H -3.03242 -0.39096 -6.82621 C 0.41402 -3.18091 -0.93649 C -1.9469 -3.03496 -0.82404
 H -2.08982 0.99156 -6.26149 C 0.40527 -4.55516 -0.72096 N -0.76164 -2.46726 -1.05496
 C -5.63414 0.29389 1.078 C -0.81989 -5.20472 -0.60816 H -1.04986 -6.29698 -0.5721
 H -5.84208 0.37811 -1.04851 C -1.98813 -4.45598 -0.71507 H 1.27764 -2.7309 -1.2812
 C -3.39659 0.01084 1.94687 C -1.88181 -3.08668 -0.93365 H 1.18293 -5.21529 -0.99928
 O -1.57802 -0.17705 0.49876 N -0.70653 -2.46503 -1.04525 H -3.08971 -4.82497 -0.45437
 C 4.4601 0.68534 0.19798 H -0.86413 -6.28333 -0.43274 H -2.81334 -2.36475 -0.77281
 C -4.74307 0.16417 2.1652 H 1.35467 -2.62432 -1.00894
 H 5.21099 0.87636 0.97029 H 1.34823 -5.10009 -0.63559
 H -5.14288 0.19037 3.18313 H -2.97285 -4.92027 -0.62496
 O -0.43751 1.84986 -1.15381 H -2.77884 -2.46116 -1.01621
 O -0.21061 2.42376 -0.10907
 H -2.69419 -0.08613 2.77903
 H 2.88904 0.19232 1.58767
s19_1-py
 Co -0.53452 -0.32658 -1.118
 N 0.37107 -0.38252 -2.80353
 N -2.11609 0.01258 -2.16444
 C -0.5709 -0.62583 -3.88514
 C 1.63068 -0.16887 -2.98456
 C -1.80385 0.22311 -3.57681
 C -3.29605 0.23132 -1.68587
 C -0.08172 -0.40178 -5.30362
 H -0.8936 -1.68753 -3.79229
 C 2.60048 0.01088 -1.94604
 H 2.02922 -0.13148 -4.01255
 C -2.92038 -0.05372 -4.57005
 H -1.48455 1.2847 -3.68603
 C -3.6689 0.1881 -0.3055
 H -4.11557 0.48224 -2.38124
 C -1.20082 -0.68892 -6.29564
 H 0.791 -1.04183 -5.51857
 H 0.25633 0.64799 -5.41188
 C 3.92177 0.31075 -2.31899
 C 2.26319 -0.15621 -0.55327
 C -2.43174 0.15226 -5.9976
 H -3.78927 0.59761 -4.37911
 H -3.26693 -1.09704 -4.42825
 C -5.02537 0.39029 0.01637
 C -2.69683 -0.00817 0.7438
 H -1.46846 -1.76172 -6.23915
 H -0.84979 -0.51387 -7.32574
 C 4.93128 0.4661 -1.38513
 H 4.17621 0.42763 -3.37896
 C 3.33098 0.00031 0.38419
 O 1.09831 -0.45465 -0.12953
 H -3.24113 -0.07428 -6.71092
 H -2.18466 1.22164 -6.1426
 C -5.4731 0.39288 1.32493
 H -5.74434 0.54947 -0.79432
 C -3.19478 0.00992 2.08591
 O -1.45556 -0.19843 0.54508
 C 4.60807 0.3038 -0.01444
 C -4.523 0.19895 2.3606
 H 5.39952 0.42496 0.73022
 H -4.8863 0.20795 3.39293
 O -0.26952 1.81397 -1.10587
 O 0.05919 2.33934 -0.06406
 H -2.45731 -0.13486 2.87986
 H 3.07415 -0.12609 1.43934
 C 6.28545 0.78537 -1.86798
 O 6.59624 0.91986 -3.02784
 O 7.17066 0.91595 -0.8622
 C -6.88413 0.59375 1.69267
 O -7.3118 0.5984 2.82152
 O -7.67869 0.77624 0.61806
 C 8.49374 1.22708 -1.24313
 H 8.53576 2.1791 -1.79577
 H 9.08044 1.30508 -0.3193
 H 8.91699 0.44308 -1.89111
 C -9.0471 0.98114 0.8971
 H -9.55309 1.10862 -0.06822
 H -9.47789 0.12216 1.43581
 H -9.19763 1.8774 1.51975
 C 0.32366 -3.24164 -1.11068
 C 0.26729 -4.6217 -0.9471
 C -0.96881 -5.21507 -0.71013
s19_2-py
 Co -0.61272 -0.57136 -1.16887
 N 0.15521 -0.54803 -2.92256
 N -2.30337 -0.45752 -2.08532
 C -0.83209 -0.92955 -3.92101
 C 1.35929 -0.18267 -3.20798
 C -2.13442 -0.23693 -3.52034
 C -3.46002 -0.38682 -1.5146
 C -0.49103 -0.67315 -5.3769
 H -1.00787 -2.02155 -3.79197
 C 2.37805 -0.13938 -2.25372
 H 1.66697 -0.11757 -4.2654
 C -3.28298 -0.67055 -4.41594
 H -1.96233 0.8541 -3.66439
 C -3.71131 -0.45201 -0.10724
 H -4.35917 -0.25971 -2.14154
 C -1.64092 -1.11718 -6.27113
 H 0.43563 -1.20258 -5.65722
 H -0.29829 0.4085 -5.52158
 C 3.61678 0.59564 -2.73565
 C 2.17602 -0.03855 -0.83637
 C -2.94058 -0.43173 -5.88045
 H -4.20923 -0.13016 -4.15995
 H -3.48213 -1.74629 -4.23739
 C -5.04955 -0.42689 0.32606
 C -2.64089 -0.49456 0.8608
 H -1.76517 -2.21382 -6.18355
 H -1.39856 -0.91912 -7.32802
 C 4.66833 0.89841 -1.88816
 H 3.77013 0.72051 -3.81401
 C 3.28503 0.27339 0.00993
 O 1.09627 -0.47336 -0.31598
 H -3.76939 -0.77157 -6.52291
 H -2.84355 0.65729 -6.05446
 C -5.3898 -0.45391 1.66646
 H -5.8598 -0.38455 -0.41135
 C -3.02818 -0.51156 2.23871
 O -1.40513 -0.52306 0.56327
 C 4.47731 0.72751 -0.49411
 C -4.34344 -0.49413 2.62367
 H 5.30271 0.96528 0.18249
 H -4.60307 -0.50936 3.68569
 O -0.62202 1.58337 -1.19986
 O -0.27468 2.16848 -0.19654
 H -2.21628 -0.53874 2.9704
 H 3.12987 0.13931 1.08382
 C 5.9283 1.376 -2.48231
 O 6.12766 1.52271 -3.66495
 O 6.86546 1.64053 -1.55263
 C -6.81793 -0.43185 2.02459
 O -7.73241 -0.40191 1.23534
 O -7.0127 -0.45019 3.35663
 C 8.10372 2.10822 -2.04283
 H 7.98033 3.0468 -2.60618
 H 8.74722 2.27795 -1.17053
 H 8.57042 1.3711 -2.71552
 C -8.35848 -0.42695 3.78188
 H -8.34549 -0.44276 4.87886
 H -8.87318 0.47962 3.42593
 H -8.91227 -1.29965 3.40061
 C 0.60661 -3.35418 -1.19394
 C 0.73677 -4.72813 -1.02119
 C -0.39549 -5.46989 -0.69884
 C -1.61245 -4.80942 -0.56131
 C -1.64766 -3.43239 -0.75529
 N -0.56205 -2.72239 -1.06806
 H -0.3293 -6.55164 -0.55178

H 1.47427 -2.72901 -1.43089
 H 1.71473 -5.20195 -1.13317
 H -2.52719 -5.34768 -0.30265
 H -2.58694 -2.87662 -0.64902

s22-py

Co -0.5842 -0.29413 -1.12693
 N 0.40604 -0.33797 -2.76601
 N -2.12948 -0.07664 -2.25797
 C -0.46456 -0.66675 -3.88234
 C 1.65993 -0.05174 -2.89049
 C -1.76176 0.11076 -3.65884
 C -3.33882 0.11369 -1.83845
 C 0.07758 -0.44979 -5.28287
 H -0.72673 -1.74414 -3.77681
 C 2.56365 0.21221 -1.81529
 H 2.10309 -0.01515 -3.90072
 C -2.80862 -0.27033 -4.6932
 H -1.50446 1.18664 -3.79207
 C -3.77574 0.09526 -0.47992
 H -4.13211 0.31379 -2.57987
 C -0.97039 -0.83764 -6.31735
 H 0.99953 -1.03635 -5.43692
 H 0.35194 0.61677 -5.40692
 C 3.8894 0.59626 -2.13118
 C 2.16722 0.04906 -0.44157
 C -2.26766 -0.07391 -6.10301
 H -3.72756 0.32493 -4.56376
 H -3.09101 -1.33025 -4.53265
 C -5.16032 0.26054 -0.22192
 C -2.85045 -0.04417 0.61535
 H -1.16944 -1.92408 -6.24064
 H -0.58232 -0.66767 -7.3352
 C 4.82866 0.83273 -1.15438
 H 4.15657 0.7051 -3.18942
 C 3.17244 0.29318 0.54217
 O 1.00228 -0.32293 -0.0646
 H -3.02482 -0.37572 -6.84553
 H -2.08534 1.00519 -6.271
 C -5.66456 0.27994 1.05637
 H -5.83343 0.37557 -1.08033
 C -3.414 -0.01589 1.92909
 O -1.5907 -0.19458 0.48493
 C 4.44805 0.67383 0.19549
 C -4.76362 0.13885 2.13588
 H 5.18299 0.85844 0.98624
 H -5.14749 0.15637 3.1615
 O -0.44885 1.82282 -1.16381
 O -0.2231 2.39804 -0.11667
 H -2.71212 -0.11967 2.76117
 H 2.87216 0.17022 1.58645
 H -6.73464 0.40751 1.23679
 H 5.84582 1.13552 -1.41445
 C 0.42523 -3.15179 -0.97823
 C 0.42668 -4.52884 -0.7802
 C -0.79194 -5.18054 -0.61754
 C -1.96363 -4.43079 -0.65802
 C -1.86852 -3.05831 -0.86362
 N -0.69954 -2.43597 -1.02412
 H -0.828 -6.26166 -0.45549
 H 1.36034 -2.59244 -1.09062
 H 1.37258 -5.07461 -0.74839
 H -2.94311 -4.89667 -0.52739
 H -2.76799 -2.43181 -0.89413

s21-py

Co -0.52472 -0.21426 -1.14043
 N 0.45444 -0.46054 -2.75976
 N -2.05835 0.01965 -2.27005
 C -0.44404 -0.7734 -3.85783
 C 1.72434 -0.25149 -2.88739
 C -1.6747 0.12112 -3.6741
 C -3.26565 0.22877 -1.85182
 C 0.11243 -0.66877 -5.26531
 H -0.79553 -1.81824 -3.69817
 C 2.63678 0.03316 -1.82268

H 2.17366 -0.29809 -3.89456
 C -2.74806 -0.20591 -4.69871
 H -1.32478 1.16468 -3.84462
 C -3.69687 0.24035 -0.48915
 H -4.06262 0.39921 -2.59654
 C -0.96595 -1.00897 -6.28494
 H 0.98102 -1.3384 -5.38802
 H 0.47738 0.36355 -5.43641
 C 3.97714 0.35213 -2.15853
 C 2.23072 -0.0384 -0.45273
 C -2.18745 -0.11999 -6.11206
 H -3.60796 0.47711 -4.59787
 H -3.12796 -1.22788 -4.49816
 C -5.09013 0.32984 -0.23013
 C -2.76305 0.17938 0.5946
 H -1.26366 -2.06784 -6.15816
 H -0.56397 -0.92323 -7.30795
 C 4.93173 0.60974 -1.20024
 H 4.22931 0.3914 -3.22375
 C 3.23167 0.19875 0.55099
 O 1.04174 -0.33771 -0.0734
 H -2.96755 -0.38187 -6.84592
 H -1.90531 0.92938 -6.32435
 C -5.60225 0.33025 1.04731
 H -5.75502 0.39365 -1.09834
 C -3.29696 0.16878 1.93094
 O -1.49375 0.12804 0.44972
 C 6.37963 0.97267 -1.51889
 C 4.51407 0.51532 0.15422
 C -7.09189 0.4225 1.36654
 C -4.66093 0.24355 2.10986
 C 6.63676 1.02139 -3.02148
 C 7.32004 -0.0718 -0.9095
 C 6.70371 2.35163 -0.93588
 H 5.25972 0.70165 0.93516
 C -7.9417 0.50072 0.10248
 C -7.5282 -0.81532 2.15658
 C -7.36173 1.67928 2.19979
 H -5.04336 0.23779 3.1369
 H 6.00666 1.77647 -3.52124
 H 6.45203 0.04551 -3.50187
 H 7.68906 1.28956 -3.21461
 H 7.11242 -1.0742 -1.32102
 H 8.3731 0.17711 -1.12984
 H 7.21766 -0.1334 0.18616
 H 6.04541 3.12445 -1.36734
 H 7.74946 2.63083 -1.15469
 H 6.57589 2.37925 0.15846
 H -7.69896 1.39179 -0.50083
 H -7.81447 -0.3915 -0.53396
 H -9.00968 0.5652 0.37029
 H -7.35404 -1.73506 1.57252
 H -8.60428 -0.76309 2.39881
 H -6.9804 -0.91535 3.10771
 H -7.06393 2.58678 1.64793
 H -8.43582 1.76254 2.44222
 H -6.80709 1.672 3.15215
 O -0.20978 1.83642 -1.36806
 O 0.14344 2.47637 -0.3911
 C -2.30462 0.06096 3.06611
 C -1.63026 -1.31234 3.07988
 C -2.89417 0.37258 4.43039
 H -1.51082 0.80252 2.84998
 H -1.09069 -1.50154 2.1381
 H -0.90065 -1.3788 3.90503
 H -2.38053 -2.11059 3.22945
 H -3.38842 1.3577 4.45857
 H -3.63643 -0.38683 4.73631
 H -2.10321 0.37268 5.19769
 C 2.80834 0.08369 1.99872
 C 1.82822 1.19091 2.38835
 C 3.97159 0.03854 2.97471
 H 2.25378 -0.87304 2.07704
 H 0.91186 1.14734 1.78005
 H 1.54182 1.09534 3.45029
 H 2.2931 2.18408 2.25354
 H 4.69983 -0.75236 2.72881

H 4.5143 1.00049 3.0027
 H 3.60482 -0.14911 3.99683
 C 0.26064 -3.09626 -0.6437
 C 0.17685 -4.4141 -0.20659
 C -1.07938 -4.95473 0.04984
 C -2.20285 -4.15928 -0.15104
 C -2.02347 -2.85334 -0.59564
 N -0.81764 -2.33147 -0.83277
 H -1.18133 -5.98443 0.40432
 H 1.22954 -2.62382 -0.83488
 H 1.08828 -4.9992 -0.06345
 H -3.21057 -4.53597 0.03858
 H -2.88632 -2.19602 -0.75339

s15-py

Co -0.47955 -0.37704 -1.15796
 N 0.52394 -0.50175 -2.78049
 N -2.01264 -0.2335 -2.30924
 C -0.3292 -0.91876 -3.87881
 C 1.76363 -0.16286 -2.9065
 C -1.65034 -0.16793 -3.72145
 C -3.19474 0.11277 -1.89821
 C 0.21415 -0.77783 -5.28818
 H -0.55895 -1.99547 -3.70841
 C 2.64124 0.17666 -1.83357
 H 2.2124 -0.14456 -3.91468
 C -2.67913 -0.70297 -4.70481
 H -1.43605 0.89628 -3.96293
 C -3.61837 0.23982 -0.55218
 H -3.96916 0.32913 -2.65566
 C -0.81126 -1.29198 -6.29137
 H 1.16273 -1.33145 -5.39801
 H 0.43872 0.28884 -5.48688
 C 3.95111 0.61081 -2.13979
 C 2.24848 0.01776 -0.45797
 C -2.15305 -0.593 -6.13003
 H -3.63322 -0.1572 -4.61744
 H -2.89393 -1.76075 -4.45032
 C -4.96878 0.57303 -0.28927
 C -2.72758 0.04971 0.56727
 H -0.94757 -2.38027 -6.13928
 H -0.43208 -1.17129 -7.31973
 C 4.87246 0.90283 -1.16235
 H 4.22364 0.72568 -3.19592
 C 3.23821 0.29773 0.52422
 O 1.10003 -0.40967 -0.08186
 H -2.88975 -1.00018 -6.84251
 H -2.03643 0.47792 -6.8529
 C -5.4715 0.70978 0.97707
 H -5.63709 0.72663 -1.1453
 C -3.27512 0.18744 1.86778
 O -1.49199 -0.2555 0.44986
 C 4.50797 0.74322 0.20132
 C -4.60955 0.52378 2.10708
 O -0.33539 1.58627 -1.11495
 O -0.44599 2.23723 -2.16662
 H -2.5646 0.0189 2.6787
 H 2.96385 0.13799 1.56992
 H -6.52173 0.97269 1.1068
 H 5.86694 1.26929 -1.42952
 N 5.41912 1.05746 1.24281
 N -5.09483 0.69623 3.38544
 C -4.2264 0.53275 4.5364
 H -4.64034 1.14782 5.35433
 H -3.24355 0.97755 4.3068
 C -6.51099 0.88977 3.63584
 H -6.60658 1.31895 4.64753
 H -6.90613 1.66721 2.95786
 C -4.05941 -0.90298 5.0038
 H -3.35415 -0.96319 5.84792
 H -5.01858 -1.33003 5.33923
 H -3.6724 -1.5417 4.19387
 C -7.35118 -0.3723 3.53279
 H -7.26748 -0.82649 2.53246
 H -7.02965 -1.12811 4.26687
 H -8.41531 -0.15408 3.71735

C 5.26191 2.40874 1.78002 N -6.78307 -0.31682 2.06865 C 0.37988 -3.22149 -0.99331
 H 6.09112 2.5701 2.49035 N 5.91435 1.32979 -2.36563 C 0.34276 -4.60726 -0.88254
 H 5.41076 3.15989 0.96719 C 0.58107 -3.34175 -1.08806 C -0.8941 -5.23982 -0.81403
 C 6.81092 0.72609 0.97975 C 0.70603 -4.71128 -0.88124 C -2.04727 -4.4625 -0.85868
 H 7.33855 1.55222 0.44661 C -0.43054 -5.44159 -0.54804 C -1.91722 -3.08319 -0.97337
 H 6.82912 -0.13758 0.29412 C -1.64633 -4.77432 -0.43465 N -0.72856 -2.4788 -1.04387
 C 3.95505 2.67471 2.49176 C -1.67563 -3.40248 -0.66207 H -0.9591 -6.32753 -0.72069
 H 3.79288 1.94164 3.2985 N -0.58602 -2.70257 -0.98465 H 1.33012 -2.67964 -1.02683
 H 3.96724 3.68177 2.93774 H -0.36873 -6.51948 -0.37414 H 1.2756 -5.17415 -0.84264
 H 3.09143 2.62416 1.8114 H 1.45304 -2.72652 -1.33522 H -3.04096 -4.91201 -0.79872
 C 7.56764 0.3633 2.24211 H 1.68314 -5.19056 -0.97545 H -2.80195 -2.43782 -1.00411
 H 8.60458 0.07468 2.0079 H -2.56435 -5.30349 -0.16917
 H 7.61754 1.2012 2.95614 H -2.6145 -2.84248 -0.57608

s14_2-py

Co -1.10049 0.03091 5.92553
 N -0.90467 0.68277 7.71382
 N -0.64213 -1.68247 6.65899
 C -0.98333 -0.40912 8.66869
 C -0.61661 1.90575 8.02086
 C -0.21171 -1.57688 8.05017
 C -0.53593 -2.7756 5.97792
 C -0.52278 -0.13069 10.08712
 H -2.0502 -0.72705 8.70718
 C -0.58162 3.01296 7.11576
 H -0.39038 2.14994 9.07291
 C -0.34034 -2.82914 8.90113
 H 0.8572 -1.26453 8.0325
 C -0.74573 -2.92586 4.57172
 H -0.23503 -3.6983 6.50377
 C -0.66231 -1.385 10.93913
 H -1.10436 0.69772 10.52679
 H 0.53623 0.195 10.06908
 C -0.16085 4.27674 7.60267
 C -1.04297 2.86306 5.7702
 C 0.1009 -2.55186 10.33227
 H 0.25996 -3.6535 8.48166
 H -1.39733 -3.16255 8.88197
 C -0.63061 -4.23047 4.02342
 C -1.00024 -1.7946 3.72263
 H -1.73402 -1.65108 11.01943
 H -0.31721 -1.1873 11.96728
 C -0.17888 5.38079 6.78501
 H 0.17904 4.35368 8.64154
 C -1.05885 4.03781 4.94241
 O -1.48754 1.76234 5.28335
 H -0.01909 -3.45848 10.94798
 H 1.18316 -2.31874 10.33591
 C -0.74104 -4.45123 2.67296
 H -0.44463 -5.0657 4.70851
 C -1.03276 -2.05833 2.30647
 O -1.19991 -0.601 4.13095
 C -0.62658 5.247 5.4554
 C -0.92577 -3.34316 1.81974
 H -0.65648 6.10912 4.78201
 H -0.98121 -3.46918 0.7334
 O 0.86024 0.32056 5.68428
 O 1.22883 0.86213 4.63725
 C -0.09703 -0.14494 1.31384
 H 0.27019 0.15358 2.31329
 H -0.49469 0.76441 0.83279
 C -1.33258 2.92581 2.80001
 H -0.92941 3.37563 1.8729
 H -0.56368 2.24861 3.205
 C -2.6115 2.18176 2.51684
 H -2.99437 1.73193 3.44469
 H -3.37419 2.8574 2.09647
 H -2.43604 1.3577 1.80672
 C 1.00363 -0.75483 0.48069
 H 1.82817 -0.03795 0.34333
 H 1.42154 -1.65304 0.96418
 H 0.6286 -1.04583 -0.51423
 H 0.15169 6.35564 7.15221
 H -0.65879 -5.45866 2.25807
 O -1.56209 4.01982 3.69149
 O -1.21054 -1.02365 1.44509
 C -3.77174 -1.37733 5.72127
 C -5.15417 -1.529 5.70163

s14_1-py

Co -0.57926 -0.38879 -1.02586
 N 0.41958 -0.39757 -2.65173
 N -2.11212 -0.10051 -2.14417
 C -0.45142 -0.66929 -3.78378
 C 1.67985 -0.13831 -2.75045
 C -1.74296 0.11133 -3.54241
 C -3.30093 0.16073 -1.7045
 C 0.09874 -0.401 -5.1718
 H -0.72159 -1.7483 -3.72421
 C 2.5792 0.06751 -1.65734
 H 2.1328 -0.07468 -3.75436
 C -2.79065 -0.25625 -4.58016
 H -1.48395 1.18668 -3.6522
 C -3.74175 0.11927 -0.34739
 H -4.07995 0.43783 -2.43581
 C -0.94598 -0.7551 -6.22248
 H 1.02084 -0.98203 -5.34472
 H 0.37216 0.6697 -5.25269
 C 3.91375 0.44365 -1.95138
 C 2.15662 -0.13534 -0.30167
 C -2.25205 -0.10283 -5.98387
 H -3.71581 0.32506 -4.43318
 H -3.06049 -1.32361 -4.4477
 C -5.12012 0.3472 -0.09179
 C -2.8335 -0.16478 0.72631
 H -1.13502 -1.84555 -6.18884
 H -0.55739 -0.54234 -7.232
 C 4.8383 0.63908 -0.95343
 H 4.19507 0.58018 -3.00188
 C 3.1501 0.08487 0.71291
 O 0.98721 -0.51741 0.05188
 H -3.00516 -0.3008 -6.7359
 H -2.08201 1.0728 -6.11785
 C -5.62236 0.2912 1.18416
 H -5.77791 0.56454 -0.94093
 C -3.39517 -0.20551 2.05168
 O -1.58659 -0.40756 0.58254
 C 4.43657 0.45763 0.38558
 C -4.74197 0.0179 2.25125
 H 5.14605 0.6053 1.20716
 H -5.10348 -0.03212 3.28293
 O -0.42542 1.57074 -0.79425
 O -0.35183 2.30863 -1.78853
 C -1.39906 0.15615 3.32561
 H -1.49708 1.20409 2.97774
 H -0.59765 -0.30708 2.72225
 C 2.51146 1.08205 2.74586
 H 2.17671 0.72884 3.7354
 H 3.45545 1.6446 2.91259
 C 1.47376 1.97485 2.10766
 H 1.85431 2.4468 1.18667
 H 0.5764 1.4003 1.82888
 H 1.18626 2.78307 2.79925
 C -1.08789 0.10499 4.79701
 H -0.13137 0.60798 5.00877
 H -1.87681 0.59551 5.38875
 H -1.00764 -0.93897 5.13872
 H 5.86523 0.93047 -1.18661
 H -6.68328 0.46512 1.37961
 O 2.77978 -0.09666 2.00733
 O -2.63225 -0.52396 3.12145

s24-py

Co -0.62824 -0.55024 -1.13861
 N 0.15206 -0.56715 -2.88525
 N -2.3113 -0.44362 -2.06687
 C -0.83084 -0.96887 -3.88203
 C 1.35753 -0.21262 -3.17245
 C -2.1319 -0.25986 -3.50717
 C -3.47115 -0.35788 -1.50809
 C -0.47838 -0.75022 -5.34109
 H -1.01096 -0.205613 -3.72543
 C 2.37182 0.13003 -2.21698
 H 1.67245 -0.17445 -4.22879
 C -3.27738 -0.70786 -4.39916
 H -1.95303 0.82662 -3.67403
 C -3.73111 -0.38837 -0.09865
 H -4.36537 -0.243 -2.14387
 C -1.62531 -1.21028 -6.2312
 H 0.44675 -1.29207 -5.60197
 H -0.27907 0.32649 -5.51151
 C 3.6129 0.56809 -2.70441
 C 2.15917 -0.01171 -0.79514
 C -2.92308 -0.50727 -5.86671
 H -4.20128 -0.1544 -4.16343
 H -3.48516 -1.77748 -4.19582
 C -5.0712 -0.35017 0.32096
 C -2.66581 -0.40912 0.87834
 H -1.75623 -2.3036 -6.11729
 H -1.37462 -1.04007 -7.29075
 C 4.6375 0.8776 -1.83508
 H 3.78745 0.66882 -3.77965
 C 3.26191 0.31618 0.05726
 O 1.07482 -0.42686 -0.27521
 H -3.74966 -0.85813 -6.50571
 H -2.81873 0.57643 -6.06713
 C -5.38692 -0.34513 1.66235
 H -5.88475 -0.32445 -0.40998
 C -3.05619 -0.38885 2.25769
 O -1.43154 -0.44885 0.58668
 C 4.46154 0.7512 -0.44164
 C -4.37015 -0.36088 2.64103
 H 5.29615 1.00634 0.21505
 H -4.65954 -0.34881 3.69422
 O -0.62261 1.6307 -1.21383
 O -0.28654 2.2317 -0.21934
 H -2.24653 -0.39844 2.99177
 H 3.09507 0.20864 1.13203
 O 6.02665 1.42255 -3.57329
 O 6.79507 1.58657 -1.56902
 O -7.62914 -0.30506 1.1946
 O -7.02172 -0.30935 3.26004

C -5.94828 -0.46716 6.12186 C -3.79405 0.78316 6.28789 H -7.00345 -0.96934 6.28552
 C -5.32894 0.70544 6.5432 N -3.0845 -0.32599 6.07166 H -2.98789 -2.43733 5.71285
 C -3.94028 0.77061 6.52674 H -6.94903 -0.4089 5.91685 H -5.43911 -2.88631 5.81276
 N -3.17885 -0.25292 6.12954 H -3.10389 -2.34558 5.6115 H -6.01699 1.32234 6.62427
 H -7.03878 -0.55011 6.11546 H -5.59701 -2.49102 5.49834 H -3.53262 1.59464 6.46619
 H -3.11698 -2.18995 5.38711 H -5.72516 1.73081 6.42891
 H -5.59284 -2.46658 5.35288 H -3.22178 1.69528 6.49135
 H -5.9097 1.56928 6.87441
 H -3.41294 1.68141 6.82756

s14_3-py

Co -0.96947 -0.21134 5.89816
 N -0.76862 0.53992 7.64027
 N -0.61101 -1.90056 6.73944
 C -0.96 -0.48262 8.65523
 C -0.45387 1.76856 7.88693
 C -0.2572 -1.74296 8.14877
 C -0.39617 -3.00724 6.10088
 C -0.53907 -0.15158 10.07476
 H -2.04879 -0.71733 8.66575
 C -0.34781 2.81753 6.91768
 H -0.26283 2.07133 8.93102
 C -0.55432 -2.92385 9.05897
 H 0.83527 -1.52726 8.18962
 C -0.48991 -3.21113 4.68985
 H -0.08209 -3.89528 6.67755
 C -0.82633 -1.33246 10.99321
 H -1.06696 0.71733 10.43624
 H 0.54343 0.08511 10.08861
 C 0.11302 4.0869 7.34918
 C -0.7231 2.60475 5.55016
 C -0.1562 -2.60342 10.49383
 H -0.02441 -3.82897 8.71901
 H -1.638 -3.14883 8.99877
 C -0.22596 -4.50948 4.17868
 C -0.80564 -2.13208 3.79865
 H -1.92078 -1.49256 11.04184
 H -0.50413 -1.10213 12.02206
 C 0.20679 5.1425 6.47394
 H 0.39952 4.20834 8.40008
 C -0.65733 3.74199 4.67521
 O -1.13309 1.48972 5.0707
 H -0.3953 -3.45358 11.15388
 H 0.94271 -2.47709 10.54117
 C -0.24656 -4.75777 2.82828
 H 0.00188 -5.31278 4.88872
 C -0.76289 -2.41481 2.3889
 O -1.13186 -0.95491 4.17076
 C -0.19406 4.95796 5.13556
 C -0.50236 -3.69202 1.93885
 H -0.14591 5.77818 4.41273
 H -0.49856 -3.8474 0.85551
 O 1.08512 -0.05744 5.67285
 O 1.51843 0.1372 4.54623
 C -0.23234 -0.25819 1.53342
 H 0.83755 -0.55033 1.54041
 H -0.41836 0.31 2.46183
 C -2.24493 3.05992 3.01977
 H -2.17488 1.95803 2.98197
 H -2.98989 3.30493 3.80462
 C -2.65748 3.63814 1.69235
 H -2.78255 4.73069 1.75416
 H -1.89134 3.42988 0.92914
 H -3.60621 3.19504 1.35155
 C -0.56613 0.55976 0.31741
 H 0.02372 1.4895 0.30662
 H -0.36265 0.00261 -0.61092
 H -1.63439 0.83153 0.32121
 H 0.57251 6.11701 6.80662
 H -0.04339 -5.75846 2.43893
 O -0.98855 3.62521 3.36693
 O -1.03209 -1.43854 1.49167
 C -3.7263 -1.46225 5.79537
 C -5.11366 -1.53963 5.73192
 C -5.8565 -0.38577 5.96238
 C -5.18431 0.79935 6.24611

s14_4-py

Co -1.12116 -0.03162 5.82421
 N -0.96881 0.66572 7.60188
 N -0.50436 -1.68255 6.58746
 C -0.9507 -0.41655 8.57265
 C -0.8633 1.91505 7.91209
 C -0.06779 -1.51055 7.97012
 C -0.28218 -2.76987 5.92236
 C -0.52595 -0.07474 9.98873
 H -1.98143 -0.83662 8.61222
 C -0.86843 3.00839 6.9908
 H -0.73743 -1.9179 8.97269
 C -0.07278 -2.75622 8.84071
 H 0.96552 -1.09565 7.94281
 C -0.57075 -3.00286 4.54416
 H 0.1655 -3.6279 6.45254
 C -0.53828 -1.32501 10.85776
 H -1.19175 0.69287 10.41893
 H 0.49312 0.36011 9.96762
 C -0.59752 4.30623 7.49105
 C -1.13279 2.79822 5.59847
 C 0.33914 -2.41704 10.26685
 H 0.6037 -3.5251 8.43228
 H -1.09289 -3.19026 8.82742
 C -0.35135 -4.31235 4.04193
 C -1.07531 -1.9596 3.69759
 H -1.57762 -1.69718 10.94208
 H -0.21629 -1.07863 11.88289
 C -0.52461 5.38848 6.64622
 H -0.43379 4.42732 8.56795
 C -0.95015 3.93212 4.7366
 O -1.53393 1.68578 5.09639
 H 0.31087 -3.32258 10.89505
 H 1.3924 -2.076 10.26586
 C -0.62647 -4.62353 2.73388
 H 0.03951 -5.0736 4.7265
 C -1.34108 -2.32269 2.32956
 O -1.31803 -0.76249 4.08136
 C -0.67775 5.18004 5.2619
 C -1.11782 -3.61127 1.88606
 H -0.56899 6.00432 4.54983
 H -1.34833 -3.81617 0.83611
 O 0.7989 0.47011 5.50317
 O 1.40063 -0.124 4.60452
 C -1.3763 -0.11924 1.36905
 H -0.28934 -0.11749 1.58933
 H -1.85356 0.51801 2.13256
 C -0.21724 2.83499 2.77282
 H -0.45937 1.82208 3.13921
 H -0.48317 2.87961 1.70345
 C 1.24728 3.13585 2.97565
 H 1.49667 4.15958 2.65014
 H 1.53512 3.03117 4.03505
 H 1.86263 2.42448 2.40234
 C -1.65145 0.38284 -0.02301
 H -1.32072 1.42753 -0.13206
 H -1.13271 -0.22837 -0.7782
 H -2.73077 0.34318 -0.23886
 H -0.3153 6.38946 7.0314
 H -0.4604 -5.63169 2.34658
 O -1.06569 3.97774 3.3941
 O -1.88067 -1.44488 1.45487
 C -3.695 -1.6271 5.92298
 C -5.06213 -1.87458 5.97834
 C -5.92222 -0.81186 6.2378
 C -5.38166 0.45587 6.42709
 C -4.00176 0.6124 6.35047
 N -3.17811 -0.41034 6.10997

s14_5-py

Co -0.82623 -0.04457 5.89712
 N -0.85241 0.62007 7.68667
 N -0.38035 -1.73904 6.68627
 C -0.96897 -0.4752 8.63615
 C -0.72172 1.86146 8.02055
 C -0.07148 -1.59766 8.10587
 C -0.1914 -2.83992 6.03273
 C -0.67393 -0.16813 10.09249
 H -2.01355 -0.85498 8.56344
 C -0.62375 2.9686 7.11783
 H -0.67751 2.12418 9.09142
 C -0.19884 -2.85088 8.95545
 H 0.97321 -1.21937 8.16058
 C -0.40665 -3.03612 4.63239
 H 0.14105 -3.73598 6.58502
 C -0.81259 -1.42743 10.93716
 H -1.35139 0.61813 10.46729
 H 0.35675 0.23014 10.17763
 C -0.39363 4.25681 7.66256
 C -0.7973 2.79349 5.7062
 C 0.08407 -2.54052 10.41902
 H 0.48983 -3.63636 8.60215
 H -1.22583 -3.25231 8.83999
 C -0.28691 -4.35 4.11063
 C -0.71424 -1.93529 3.76526
 H -1.86646 -1.76608 10.91283
 H -0.5861 -1.20429 11.99274
 C -0.30596 5.36333 6.8516
 H -0.28407 4.35246 8.74888
 C -0.66495 3.96436 4.88555
 O -1.09804 1.67893 5.14532
 H -0.03247 -3.45141 11.02909
 H 1.14244 -2.23305 10.52421
 C -0.50916 -4.60984 2.77963
 H -0.01706 -5.16053 4.79748
 C -0.99602 -2.25339 2.39163
 O -0.75208 -0.71118 4.12726
 C -0.43213 5.19981 5.45812
 C -0.88181 -3.54767 1.92941
 H -0.35067 6.05405 4.77896
 H -1.09043 -3.71897 0.88676
 O 1.23702 0.3326 5.85196
 O 1.71268 0.76002 4.81507
 C -2.48903 -0.50114 1.82205
 H -2.34819 0.06452 2.76198
 H -3.34771 -1.19075 1.96875
 C -0.02551 2.94735 2.82222
 H 0.99879 2.9373 3.245
 H -0.42266 1.92374 2.94233
 C -0.0143 3.38033 1.38176
 H -1.04296 3.43514 0.99011
 H 0.4408 4.37678 1.26598
 H 0.54973 2.6632 0.76559
 C -2.73328 0.42534 0.66346
 H -3.62619 1.04415 0.83977
 H -1.87212 1.09788 0.52607
 H -2.87534 -0.13846 -0.27202
 H -0.12555 6.35539 7.27291
 H -0.41545 -5.62347 2.38228
 O -0.81836 3.88741 3.54416
 O -1.32933 -1.26696 1.52408
 C -3.49655 -1.56814 5.62149
 C -4.85528 -1.75371 5.38728
 C -5.69199 -0.64201 5.40829
 C -5.13725 0.60784 5.6652
 C -3.76655 0.69885 5.88493
 N -2.96377 -0.368 5.86334
 H -6.76486 -0.7485 5.22413
 H -2.80571 -2.41928 5.60287

H -5.24186 -2.75551 5.18634 H -3.33726 1.57143 5.39079 C -1.75525 0.06161 -3.61761
H -5.75304 1.50987 5.6896 C -3.3322 0.05003 -1.79825
H -3.2833 1.66446 6.06535 C 0.08599 -0.47948 -5.24615

s14_6-py
Co -0.84728 -0.02354 5.77818
N -0.90465 0.62145 7.57537
N -0.37106 -1.71327 6.5525
C -0.9876 -0.48462 8.51573
C -0.82502 1.86304 7.92173
C -0.06305 -1.57916 7.97234
C -0.17995 -2.70812 5.88791
C -0.6938 -0.18319 9.97366
H -2.02264 -0.89026 8.44758
C -0.75216 2.98261 7.03207
H -0.8029 2.11658 8.99547
C -0.16172 -2.84355 8.80885
H 0.97241 -1.17736 8.05096
C -0.40947 -2.99654 4.49045
H 0.16301 -3.70581 6.4311
C -0.79954 -1.45318 10.80715
H -1.38861 0.5825 10.35889
H 0.32715 0.23949 10.0578
C -0.56784 -3.27055 7.59417
C -0.8997 2.81942 5.61742
C 0.11836 -2.54208 10.27483
H 0.54191 -3.61097 8.44556
H -1.18106 -3.26518 8.69138
C -0.28907 -4.30872 3.96234
C -0.718 -1.89009 3.63121
H -1.84591 -1.81459 10.78542
H -0.57242 -1.23474 11.86357
C -0.50253 5.38932 6.79769
H -0.47513 4.35641 8.68286
C -0.79917 4.00366 4.81239
O -1.15387 1.70078 5.03807
H 0.02285 -3.4612 10.87615
H 1.17045 -2.21379 10.3797
C -0.51189 -4.55858 2.63042
H -0.01836 -5.12277 4.6445
C -0.99277 -2.19659 2.25306
O -0.75507 -0.66768 4.00299
C -0.60834 5.23843 5.40126
C -0.88114 -3.49011 1.78675
H -0.54432 6.10244 4.73206
H -1.09009 -3.65448 0.72499
O 1.18402 0.40797 5.76286
O 1.66432 0.85379 4.73288
C -2.35557 -0.30384 1.68936
H -2.4687 0.30642 0.77864
H -2.05624 0.36516 2.51432
C -0.02743 3.11763 2.73845
H -0.10687 2.06346 3.05457
H -0.37125 3.18119 1.69334
C 1.39088 3.61383 2.8693
H 1.47337 4.67297 2.57249
H 1.75225 3.51845 3.90668
H 2.06505 3.01862 2.23377
C -3.65119 -1.00552 2.01809
H -4.47053 -0.27469 2.10979
H -3.92125 -1.7311 1.23261
H -3.58552 -1.55403 2.97457
H -0.35668 6.38089 7.23326
H -0.42071 -5.56951 2.22557
O -0.94703 3.93096 3.46799
O -1.30917 -1.21632 1.37391
C -3.48913 -1.65736 5.86367
C -4.84827 -1.92479 5.73689
C -5.71399 -0.86403 5.4869
C -5.18417 0.41668 5.36964
C -3.80944 0.58963 5.50364
N -2.98004 -0.42801 5.75073
H -6.78911 -1.03515 5.38179
H -2.77556 -2.46517 6.06466
H -5.21387 -2.94987 5.83143
H -5.82252 1.28063 5.17032

s26-py
Co -0.58247 -0.30959 -1.13565
N 0.40614 -0.34506 -2.77268
N -2.12688 -0.0814 -2.26145
C -0.46544 -0.66861 -3.8895
C 1.66118 -0.06032 -2.8969
C -1.76145 0.10953 -3.66224
C -3.33346 0.12433 -1.83772
C 0.07525 -0.44753 -5.29
H -0.72931 -1.7461 -3.78831
C 2.57226 0.19805 -1.82743
H 2.10102 -0.01951 -3.90818
C -2.81007 -0.27055 -4.69534
H -1.50387 1.18554 -3.79534
C -3.77588 0.10478 -0.48214
H -4.12364 0.33855 -2.57826
C -0.97413 -0.83247 -6.32423
H 0.99693 -1.0337 -5.44699
H 0.34967 0.61932 -5.41133
C 3.89946 0.58778 -2.15541
C 2.17178 0.02296 -0.46435
C -2.27188 -0.07057 -6.10569
H -3.72971 0.32293 -4.56287
H -3.09063 -1.33117 -4.53601
C -5.16552 0.28706 -0.2313
C -2.8488 -0.05497 0.59928
H -1.1724 -1.91929 -6.25063
H -0.58779 -0.65903 -7.34222
C 4.82937 0.81244 -1.1755
H 4.16209 0.70808 -3.21258
C 3.18969 0.25228 0.53794
O 1.01177 -0.34319 -0.08168
H -3.02997 -0.37135 -6.84777
H -2.0908 1.00913 -6.27144
C -5.6559 0.30071 1.04584
H -5.83645 0.41759 -1.08797
C -3.41179 -0.03585 1.93484
O -1.59444 -0.21454 0.47445
C 4.46463 0.64078 0.18113
C -4.76454 0.13645 2.135
H 5.21504 0.82104 0.95533
H -5.16659 0.15066 3.15141
O -0.44384 1.8179 -1.16068
O -0.23079 2.38731 -0.10901
H -6.72265 0.44066 1.23789
H 5.84775 1.12012 -1.42587
C 0.41716 -3.17155 -0.96708
C 0.40988 -4.54936 -0.77393
C -0.81404 -5.19832 -0.6444
C -1.98249 -4.44539 -0.71144
C -1.87857 -3.07251 -0.91
N -0.70429 -2.45304 -1.03909
H -0.85692 -6.27996 -0.48735
H 1.35586 -2.61363 -1.05329
H 1.35326 -5.09782 -0.72025
H -2.96614 -4.90917 -0.60703
H -2.77486 -2.44268 -0.96108
O -2.50186 -0.19809 2.91487
O 2.7698 0.05674 1.80332
C -2.93571 -0.16447 4.23633
H -2.05096 -0.29631 4.87397
H -3.41483 0.80052 4.49295
H -3.65593 -0.97582 4.46085
C 3.66079 0.29766 2.84429
H 4.01704 1.34623 2.85334
H 3.12564 0.10262 3.78366
H 4.54681 -0.36598 2.79932

s20-py
Co -0.57605 -0.36059 -1.08792
N 0.4148 -0.38419 -2.72853
N -2.12257 -0.13718 -2.21823
C -0.4546 -0.70853 -3.8469
C 1.66612 -0.08695 -2.85194
C -1.75525 0.06161 -3.61761
C -3.3322 0.05003 -1.79825
C 0.08599 -0.47948 -5.24615
H -0.71203 -1.78775 -3.74903
C 2.56725 0.17397 -1.773
H 2.10802 -0.0378 -3.86219
C -2.80049 -0.31742 -4.65451
H -1.5028 1.13957 -3.74332
C -3.76839 0.02005 -0.43918
H -4.12474 0.25687 -2.5386
C -0.96033 -0.86553 -6.28296
H 1.01082 -1.06039 -5.40423
H 0.35495 0.58923 -5.36326
C 3.88668 0.57563 -2.08494
C 2.17122 -0.01096 -0.404
C -2.26107 -0.1093 -6.06317
H -3.72224 0.27255 -4.521
H -3.07781 -1.37968 -4.50073
C -5.15134 0.18422 0.18123
C -2.84298 -0.13132 0.6518
H -1.15426 -1.95337 -6.21331
H -0.57339 -0.68706 -7.2998
C 4.85324 0.82009 -1.12641
H 4.13156 0.69599 -3.14887
C 3.18193 0.23235 0.56791
O 1.01023 -0.39982 -0.02748
H -3.01714 -0.40978 -6.80736
H -2.08381 0.97172 -6.22419
C -5.69262 0.19721 1.08969
H -5.80755 0.30649 -1.05348
C -3.41988 -0.11336 1.95533
O -1.58188 -0.28246 0.52439
C 4.4532 0.63154 0.21893
C -4.77197 0.0422 2.1569
H 5.17 0.80697 1.02649
H -5.13442 0.04732 3.18908
O -0.44984 1.75127 -1.10419
O -0.22644 2.31813 -0.05121
H -2.72972 -0.2254 2.79628
H 2.89754 0.09529 1.61501
C -7.1973 0.37657 1.29663
C -7.57521 0.36637 2.77505
H -8.66492 0.49756 2.88411
H -7.30769 -0.58631 3.26257
H -7.0877 1.18508 3.33061
C -7.64447 1.7151 0.70177
H -7.11727 2.55532 1.18418
H -7.44225 1.77304 -0.38041
H -8.72935 1.86372 0.84542
C -7.95294 -0.76281 0.60628
H -7.75979 -0.78667 -0.47892
H -7.65356 -1.74065 1.0202
H -9.04263 -0.65133 0.74724
C 6.2575 1.27078 -1.5307
C 7.16708 1.459 -0.31995
H 7.29055 0.52385 0.25205
H 8.16971 1.77846 -0.65052
H 6.78501 2.23333 0.3663
C 6.89654 0.22083 -2.44429
H 6.31298 0.06606 -3.36671
H 7.91316 0.53121 -2.7439
H 6.97412 -0.75259 -1.93097
C 6.17391 2.60707 -2.27442
H 5.56402 2.53047 -3.18965
H 5.71974 3.38392 -1.63653
H 7.17976 2.95289 -2.57187
C 0.44066 -3.21533 -0.96336
C 0.44507 -4.59382 -0.77533
C -0.77226 -5.24983 -0.6205
C -1.94578 -4.50277 -0.65851
C -1.85366 -3.12863 -0.85401
N -0.6859 -2.50228 -1.00718
H -0.80594 -6.33217 -0.4663
H 1.37435 -2.65223 -1.06847
H 1.39228 -5.13742 -0.7449
H -2.92438 -4.97208 -0.53358
H -2.75453 -2.50406 -0.88205

s23-py

Co -0.58135 -0.04251 -1.24138
 N 0.38572 -0.11835 -2.88237
 N -2.12562 0.25719 -2.33961
 C -0.51295 -0.3328 -4.00478
 C 1.65471 0.09441 -3.00223
 C -1.75182 0.52212 -3.72477
 C -3.34104 0.3557 -1.91025
 C 0.03637 -0.0777 -5.3959
 H -0.85097 -1.39273 -3.94986
 C 2.58809 0.2768 -1.93437
 H 2.0915 0.13494 -4.01478
 C -2.8256 0.30167 -4.77648
 H -1.41329 1.58176 -3.77719
 C -3.78049 0.17434 -0.56117
 H -4.14301 0.57418 -2.63635
 C -1.04366 -0.31395 -6.44257
 H 0.9074 -0.72589 -5.59306
 H 0.39568 0.96883 -5.45794
 C 3.92217 0.59315 -2.29095
 C 2.20878 0.10737 -0.56202
 C -2.26896 0.54494 -6.17272
 H -3.68944 0.96424 -4.60001
 H -3.19873 -0.73856 -4.68958
 C -5.17387 0.13631 -0.33023
 C -2.85033 0.03762 0.52493
 H -1.33566 -1.38186 -6.42822
 H -0.64523 -0.11787 -7.45165
 C 4.90849 0.75564 -1.3468
 H 4.14194 0.7078 -3.35788
 C 3.24704 0.24616 0.43112
 O 1.01234 -0.19284 -0.20203
 H -3.04949 0.36037 -6.9292
 H -1.99253 1.61262 -6.27007
 C -5.70701 -0.07605 0.92349
 H -5.83383 0.27209 -1.19719
 C -3.40001 -0.20456 1.83348
 O -1.58091 0.11857 0.36708
 C 4.52215 0.56704 0.00449
 C -4.77767 -0.2513 1.97637
 H 5.29972 0.68392 0.76467
 H -5.17369 -0.43667 2.97632
 O -0.29715 2.04096 -1.23984
 O -0.0361 2.56774 -0.17353
 C 0.31646 -2.92858 -0.94288
 C 0.28576 -4.26968 -0.57542
 C -0.94832 -4.87764 -0.36729
 C -2.103 -4.12279 -0.54576
 C -1.97543 -2.7875 -0.91518
 N -0.79136 -2.20002 -1.10466
 H -1.00908 -5.9281 -0.06874
 H 1.26827 -2.40924 -1.09625
 H 1.22087 -4.82022 -0.44863
 H -3.09576 -4.5528 -0.39456
 H -2.86542 -2.16247 -1.05067
 C 6.35524 1.11212 -1.67654
 C 6.57273 1.26807 -3.17809
 C 6.72477 2.43673 -1.00179
 C 7.28817 0.00612 -1.17351
 H 6.35313 0.33479 -3.72402
 H 5.94635 2.07106 -3.60217
 H 7.62509 1.52855 -3.38101
 H 6.62528 2.38537 0.09468
 H 7.77069 2.70982 -1.22728
 H 6.07355 3.25304 -1.35722
 H 8.34007 0.2495 -1.40507
 H 7.2148 -0.1353 -0.0829
 H 7.04722 -0.95829 -1.65211
 C 2.92455 0.02329 1.91041
 C 1.80928 0.97187 2.36488
 C 2.49361 -1.43337 2.12327
 C 4.13683 0.2756 2.80459
 H 2.1121 2.02429 2.22358
 H 0.87885 0.80434 1.80343
 H 1.60164 0.82166 3.43969

H 3.29533 -2.12655 1.81188
 H 2.28613 -1.61703 3.1924
 H 1.58196 -1.67061 1.55656
 H 3.85294 0.1123 3.85748
 H 4.97397 -0.40883 2.58342
 H 4.50551 1.3124 2.72196
 C -2.45631 -0.37787 3.02512
 C -3.20816 -0.74621 4.30265
 C -1.44199 -1.50039 2.75711
 C -1.73056 0.94871 3.28049
 H -3.92237 0.03579 4.61163
 H -3.75916 -1.69758 4.20185
 H -2.48696 -0.86818 5.12789
 H -0.79401 -1.27281 1.89737
 H -0.80204 -1.6469 3.64554
 H -1.96349 -2.45529 2.56076
 H -1.0093 0.83894 4.10999
 H -1.1812 1.28975 2.39089
 H -2.45399 1.73315 3.5628
 C -7.22254 -0.11612 1.12951
 C -7.82784 -1.24583 0.29088
 C -7.60073 -0.35699 2.58814
 C -7.83385 1.21975 0.6963
 H -7.63307 -1.10978 -0.78571
 H -7.40781 -2.22254 0.5857
 H -8.92293 -1.29036 0.42685
 H -7.21999 0.43902 3.24979
 H -8.69868 -0.37417 2.69157
 H -7.21997 -1.3231 2.96003
 H -8.92906 1.21281 0.83811
 H -7.41772 2.05241 1.28804
 H -7.63836 1.43715 -0.36665

s18-reduzido

H -1.3112 1.87406 0.
 O -1.78056 0.98479 0.
 N 0.15108 2.71495 0.
 H 0.59236 3.63313 0.
 C 0.99906 1.74402 0.
 H 2.08125 1.91227 0.
 C -0.83028 0.02945 0.
 C 0.55388 0.35353 0.
 C 1.50534 -0.68385 0.
 C 1.08988 -2.00634 0.
 C -0.27328 -2.33133 0.
 C -1.2249 -1.3172 0.
 H 2.56291 -0.43959 0.
 H -0.58429 -3.37029 0.
 H -2.28389 -1.55269 0.
 Cl 2.29019 -3.30116 0.

s25-reduzido

H -1.28721 1.88843 0.
 O -1.77434 1.00165 0.
 N 0.14542 2.7096 0.
 H 0.57965 3.63105 0.
 C 0.99501 1.74199 0.
 H 2.07663 1.90963 0.
 C -0.83878 0.04308 0.
 C 0.54982 0.34916 0.
 C 1.50258 -0.6829 0.
 C 1.08658 -2.00597 0.
 C -0.27291 -2.33296 0.
 C -1.21874 -1.31291 0.
 H 2.55946 -0.43806 0.
 H -0.59296 -3.36803 0.
 Cl 2.27933 -3.30178 0.
 Cl -2.92367 -1.72266 0.

s19-reduzido_1

H -1.56811 1.64068 -0.28951
 O -1.79973 0.83067 0.26624
 N -0.42298 2.47464 -1.17397
 H -0.23448 3.30902 -1.72723
 C 0.59599 1.6925 -1.06617
 H 1.56107 1.92011 -1.5307
 C -0.69997 0.06538 0.33494

C 0.51294 0.44756 -0.30866
 C 1.62981 -0.39075 -0.20404
 C 1.57609 -1.58603 0.51595
 C 0.36748 -1.94908 1.14767
 C -0.75363 -1.13745 1.05935
 H 2.55849 -0.10894 -0.69122
 H 0.31552 -2.87477 1.709
 H -1.68473 -1.41275 1.54312
 C 2.79605 -2.4256 0.5866
 O 3.86133 -2.14608 0.05029
 O 2.61699 -3.54726 1.31203
 C 3.75846 -4.42462 1.4323
 H 3.41869 -5.25654 2.04736
 H 4.07047 -4.77691 0.44642
 H 4.58796 -3.90251 1.91472

s19-reduzido_2

H -1.42406 1.72772 -0.38794
 O -1.74965 0.95825 0.17848
 N -0.17337 2.43269 -1.23881
 H 0.1101 3.22919 -1.80703
 C 0.76908 1.57157 -1.05968
 H 1.7699 1.70178 -1.48458
 C -0.72382 0.10595 0.32246
 C 0.54588 0.36379 -0.271
 C 1.584 -0.56013 -0.08881
 C 1.39265 -1.72318 0.66123
 C 0.12915 -1.96166 1.24087
 C -0.91433 -1.06462 1.07679
 H 2.55033 -0.36289 -0.54097
 H -0.01698 -2.8654 1.82275
 H -1.88706 -1.2455 1.52155
 C 2.46994 -2.71954 0.87143
 O 2.34006 -3.75091 1.51923
 O 3.6276 -2.37526 0.27254
 C 4.73157 -3.29377 0.42983
 H 5.55981 -2.84447 -0.11607
 H 4.98305 -3.40608 1.48696
 H 4.47616 -4.26854 0.00797

s22-reduzido

H -1.31119 1.87444 0.
 O -1.78307 0.98743 0.
 N 0.14946 2.72094 0.
 H 0.5968 3.63614 0.
 C 0.99363 1.7444 0.
 H 2.07644 1.91155 0.
 C -0.8321 0.02838 0.
 C 0.55229 0.35522 0.
 C 1.49916 -0.68838 0.
 C 1.1023 -2.02072 0.
 C -0.26886 -2.32667 0.
 C -1.22849 -1.31705 0.
 H 2.55594 -0.43318 0.
 H -0.59043 -3.36416 0.
 H 1.84204 -2.81434 0.
 H -2.28907 -1.54758 0.

s21-reduzido_1

H -1.47045 1.52622 -0.41006
 O -1.88667 0.61586 -0.34055
 N -0.08359 2.47822 -0.4278
 H 0.30631 3.41652 -0.50164
 C 0.81898 1.5665 -0.28124
 H 1.88673 1.81001 -0.2441
 C -0.87747 -0.27788 -0.19077
 C 0.4765 0.15515 -0.15618
 C 1.50304 -0.79107 0.00106
 C 1.24013 -2.15701 0.12642
 C -0.11055 -2.54355 0.08675
 C -1.17502 -1.64632 -0.06847
 H 2.52615 -0.42556 0.02302
 H -0.36153 -3.59371 0.18023
 C 2.39745 -3.15722 0.29822
 C 3.34214 -3.06734 -0.92427
 C 3.19006 -2.81177 1.58181
 C 1.90184 -4.61129 0.41641

H 2.80572 -3.31071 -1.84803
 H 3.76834 -2.06529 -1.03442
 H 4.17301 -3.77379 -0.81412
 H 2.54422 -2.8724 2.46472
 H 4.02046 -3.5147 1.71561
 H 3.61063 -1.80222 1.53897
 H 2.76022 -5.28048 0.53614
 H 1.24995 -4.74936 1.28584
 H 1.35594 -4.92897 -0.47859
 C -2.61402 -2.14365 -0.10195
 C -3.00975 -2.81446 1.22789
 C -2.85691 -3.09136 -1.29261
 H -3.25927 -1.2711 -0.23717
 H -2.86504 -2.13217 2.07229
 H -4.76035 -3.11466 1.20608
 H -2.40956 -3.71278 1.41321
 H -2.60259 -2.60647 -2.24112
 H -2.25205 -4.00136 -1.20608
 H -3.90981 -3.39239 -1.33271

s21-reduzido_2

H -1.48752 1.51046 -0.51648
 O -1.89208 0.6054 -0.35423
 N -0.11718 2.45944 -0.69384
 H 0.25921 3.39127 -0.86013
 C 0.80074 1.56293 -0.54202
 H 1.86643 1.81304 -0.59283
 C -0.86882 -0.27078 -0.20763
 C 0.47897 0.16419 -0.29388
 C 1.52599 -0.76739 -0.13795
 C 1.27842 -2.1162 0.10062
 C -0.07469 -2.50638 0.17929
 C -1.15145 -1.63074 0.03368
 H 2.54133 -0.39293 -0.21134
 H -0.30388 -3.55162 0.36441
 C 2.38956 -3.16508 0.27546
 C 2.24667 -4.2536 -0.81552
 C 3.79614 -2.54808 0.15835
 C 2.26425 -3.82127 1.67157
 H 1.28013 -4.76367 -0.75642
 H 2.33724 -3.81478 -1.81529
 H 3.0314 -5.01025 -0.70088
 H 3.97076 -1.78697 0.92665
 H 4.55083 -3.33058 0.28911
 H 3.95864 -2.09129 -0.82398
 H 3.04898 -4.57427 1.808
 H 2.36774 -3.07118 2.46338
 H 1.2982 -4.31893 1.80139
 C -2.58688 -2.12941 0.13263
 C -2.88656 -2.7114 1.52769
 C -2.90547 -3.15351 -0.97393
 H -3.24394 -1.26778 -0.01449
 H -2.68653 -1.97537 2.31361
 H -3.93799 -3.01181 1.59854
 H -2.27136 -3.59591 1.72922
 H -2.71834 -2.73215 -1.96735
 H -2.29139 -4.05535 -0.86873
 H -3.95716 -3.45695 -0.9225

s21-reduzido_3

H -1.4931 1.48661 -0.64962
 O -1.89492 0.59313 -0.42727
 N -0.12685 2.41857 -0.92085
 H 0.24654 3.33862 -1.14828
 C 0.79293 1.52661 -0.75417
 H 1.85701 1.76855 -0.8545
 C -0.87007 -0.27912 -0.26906
 C 0.47541 0.14425 -0.42268
 C 1.52408 -0.78301 -0.25315
 C 1.2804 -2.11642 0.06341
 C -0.0705 -2.4954 0.20729
 C -1.14877 -1.62324 0.05218
 H 2.53758 -0.41777 -0.37931
 H -0.29661 -3.52853 0.45404
 C 2.39371 -3.16007 0.25517
 C 3.79746 -2.55552 0.06302
 C 2.31135 -3.74573 1.68542

s21-reduzido_4

H -1.59305 1.2859 -0.39609
 O -1.9501 0.35149 -0.32121
 N -0.27224 2.32508 -0.42328
 H 0.05819 3.28557 -0.50146
 C 0.68625 1.47214 -0.27708
 H 1.7366 1.78297 -0.24452
 C -0.88792 -0.47618 -0.17172
 C 0.43518 0.04209 -0.14553
 C 1.5235 -0.83425 0.0101
 C 1.35125 -2.21226 0.14196
 C 0.02626 -2.68489 0.11138
 C -1.09778 -1.86314 -0.04105
 H 2.52027 -0.40183 0.02511
 H -0.16053 -3.74862 0.21003
 C 2.5716 -3.13564 0.30878
 C 2.17165 -4.61728 0.44459
 C 3.49455 -2.99642 -0.92575
 C 3.35548 -2.72947 1.57988
 H 1.53796 -4.7887 1.32152
 H 1.63912 -4.97786 -0.44214
 H 3.07246 -5.2287 0.56169
 H 3.85339 -1.96985 -1.04941
 H 4.37057 -3.64677 -0.81975
 H 2.96437 -3.28237 -1.84091
 H 4.22955 -3.37809 1.70982
 H 3.71195 -1.69622 1.5234
 H 2.7248 -2.82201 2.47098
 C -2.48855 -2.48388 -0.06008
 C -3.20872 -2.2711 -1.40629
 C -3.35763 -2.0132 1.1229
 H -2.34195 -3.56519 0.0588
 H -2.60358 -2.64841 -2.23799
 H -4.16496 -2.80675 -1.41091
 H -3.40721 -1.21027 -1.57954
 H -2.85873 -2.21071 2.07806
 H -3.56031 -0.94109 1.05662
 H -4.31529 -2.54638 1.12268

s21-reduzido_5

H -1.61026 1.26898 -0.49515
 O -1.95488 0.34173 -0.32178
 N -0.30684 2.30205 -0.69461
 H 0.00971 3.25394 -0.87178
 C 0.66642 1.46525 -0.54638
 H 1.71381 1.78104 -0.61067
 C -0.8792 -0.4677 -0.18021
 C 0.43663 0.05079 -0.28459
 C 1.54496 -0.80937 -0.134
 C 1.38841 -2.1679 0.1169
 C 0.06237 -2.64333 0.21361
 C -1.07297 -1.84397 0.07444
 H 2.53262 -0.36962 -0.22171
 H -0.10137 -3.16996 0.40923
 C 2.56693 -3.1409 0.28812
 C 2.48271 -4.24871 -0.78947

s21-reduzido_6

H -1.61128 1.24134 -0.65127
 O -1.95416 0.32939 -0.40726
 N -0.31037 2.25124 -0.95796
 H 0.00448 3.1875 -1.20692
 C 0.66347 1.41957 -0.78656
 H 1.70959 1.72376 -0.90465
 C -0.87794 -0.47577 -0.24687
 C 0.43612 0.02663 -0.42591
 C 1.54505 -0.82873 -0.25418
 C 1.39081 -2.16708 0.08955
 C 0.06656 -2.62687 0.25859
 C -1.0693 -1.83127 0.10296
 H 2.53125 -0.40165 -0.40102
 H -0.09522 -3.66718 0.52774
 C 2.56996 -3.13443 0.28687
 C 3.92986 -2.44791 0.05809
 C 2.54578 -3.68941 1.73146
 C 2.4473 -4.30891 -0.71366
 H 4.02119 -2.05801 -0.96154
 H 4.09078 -1.62216 0.75969
 H 4.73592 -3.17343 0.20925
 H 1.61875 -4.23132 1.94299
 H 3.38066 -4.38288 1.88486
 H 2.63706 -2.87681 2.4606
 H 3.28132 -5.00775 -0.58143
 H 1.51751 -4.86841 -0.57148
 H 2.46769 -3.94267 -1.74602
 C -2.45265 -2.43365 0.30955
 C -3.30044 -2.41119 -0.97769
 C -3.2044 -1.78706 1.4898
 H -2.29043 -3.48757 0.56984
 H -2.77769 -2.91273 -1.79951
 H -4.25096 -2.93101 -0.81171
 H -3.51804 -1.38489 -1.28457
 H -2.61369 -1.84737 2.41048
 H -3.41848 -0.73446 1.28734
 H -4.15444 -2.30613 1.66076

s15-reduzido_1

O 0.85044 0.60246 -2.17501
 H 0.69023 -0.37205 -1.97991
 N 0.96518 2.18612 -1.61815
 H 1.12978 3.16448 -1.84624
 C 0.72902 1.99395 -0.35582
 H 0.71629 2.82409 0.36005
 C 0.45719 -0.47674 -0.64981
 C 0.4699 0.67991 0.18198
 C 0.20995 0.485 1.55473
 C -0.04644 -0.76124 2.09237
 C -0.04746 -1.92494 1.26106
 C 0.19966 -1.73895 -0.12249
 H 0.20769 1.3514 2.21208
 H -0.24749 -0.83683 3.15184
 H 0.19238 -2.56624 -0.81903

N -0.2636 -3.17717 1.78704
C -0.61212 -3.35792 3.20121
C -2.07748 -3.04851 3.53747
H 0.05557 -2.74724 3.81777
H -0.38956 -4.39724 3.45609
H -2.24589 -3.16296 4.61386
H -2.3407 -2.02441 3.25675
H -2.75234 -3.72951 3.01135
C -0.31447 -4.36208 0.92378
C -1.64821 -4.55495 0.18843
H -0.11584 -5.23109 1.55652
H 0.51135 -4.31637 0.20616
H -1.5873 -5.42584 -0.47328
H -2.46506 -4.72051 0.89652
H -1.89648 -3.67994 -0.41941

s15-reduzido_2
H 1.03442 0.68314 -2.21827
O 0.7954 -0.28018 -2.05143
N 1.29077 2.23241 -1.61037
H 1.53596 3.20035 -1.80886
C 1.05392 2.01864 -0.35216
H 1.12028 2.82188 0.39086
C 0.57172 -0.40857 -0.72218
C 0.68986 0.71285 0.14554
C 0.42524 0.49406 1.51411
C 0.07281 -0.74423 2.01319
C -0.02831 -1.87759 1.14692
C 0.21523 -1.66402 -0.23237
H 0.49739 1.33561 2.19915
H -0.12686 -0.83489 3.07149
H 0.12995 -2.45951 -0.95907
N -0.33562 -3.13379 1.63563
C -0.90979 -3.26991 2.98106
C -2.39348 -2.88923 3.05317
H -0.32303 -2.6704 3.67973
H -0.77136 -4.30086 3.30565
H -2.76827 -3.01088 4.07506
H -2.54501 -1.84802 2.75175
H -2.99039 -3.52606 2.39179
C -0.5815 -4.21654 0.66384
C -0.74705 -5.60914 1.26911
H 0.27556 -4.25228 -0.01485
H -1.4651 -3.97699 0.05158
H -0.81368 -6.32956 0.44808
H 0.11239 -5.885 1.88855
H -1.65783 -5.70798 1.86632

s15-reduzido_3
H 1.17729 0.53644 -2.08711
O 0.9831 -0.43227 -1.89334
N 1.1955 2.13643 -1.56982
H 1.40425 3.10723 -1.79399
C 0.73545 1.98325 -0.36485
H 0.59898 2.83539 0.31126
C 0.51315 -0.49614 -0.62469
C 0.37592 0.68738 0.15771
C -0.12753 0.53643 1.46728
C -0.47795 -0.69254 1.99083
C -0.34293 -1.88007 1.20543
C 0.16055 -1.74125 -0.11273
H -0.23444 1.42263 2.08857
H -0.83592 -0.74155 3.01017
H 0.2675 -2.59182 -0.7727
N -0.68583 -3.10829 1.71087
C -1.33093 -3.26146 3.01835
C -0.33113 -3.38566 4.17376
H -1.95495 -4.1593 2.96872
H -2.01925 -2.42867 3.18752
H 0.3273 -4.2475 4.02253
H 0.29336 -2.49053 4.25145
H -0.86093 -3.52151 5.12279
C -0.43583 -4.34908 0.97239
C -1.57798 -4.72637 0.02151
H -0.28952 -5.14327 1.71122
H 0.51043 -4.26635 0.4299
H -1.35069 -5.66686 -0.49183

H -2.51347 -4.85599 0.57581
H -1.73492 -3.95 -0.7333

s15-reduzido_4
H 1.11812 0.52417 -2.21618
O 0.72677 -0.38263 -2.0253
N 1.6119 2.03335 -1.64882
H 2.01242 2.9425 -1.87117
C 1.33722 1.89679 -0.38775
H 1.53006 2.69909 0.33386
C 0.46945 -0.43206 -0.69609
C 0.76189 0.68248 0.14179
C 0.47489 0.54328 1.51424
C -0.07175 -0.61013 2.04664
C -0.38368 -1.72299 1.20542
C -0.07855 -1.59948 -0.17359
H 0.69915 1.37365 2.17984
H -0.25119 -0.64894 3.1113
H -0.25557 -2.40587 -0.87185
N -0.97007 -2.86557 1.71599
C -1.07889 -3.00228 3.18233
C -1.88217 -4.20899 3.66392
H -1.57393 -2.10541 3.56468
H -0.07398 -3.03102 3.63123
H -1.97402 -4.14174 4.7523
H -2.8923 -4.21663 3.242
H -1.39723 -5.16188 3.43413
C -1.00837 -4.08718 0.90216
C 0.33379 -4.82746 0.84676
H -1.35048 -3.83082 -0.10271
H -1.7797 -4.74164 1.30722
H 0.24698 -5.72555 0.22598
H 1.11642 -4.19021 0.42372
H 0.64863 -5.13396 1.84984

s15-reduzido_5
H -0.4964 1.45285 -1.72842
O -0.99006 0.60613 -1.49786
N 0.8057 2.48241 -1.46127
H 1.28452 3.34296 -1.719
C 1.4082 1.83338 -0.51108
H 2.33393 2.20623 -0.05748
C -0.29393 -0.00144 -0.50762
C 0.89898 0.58626 0.00558
C 1.56126 -0.10597 1.0417
C 1.09547 -1.30198 1.5515
C -0.10202 -1.89156 1.03785
C -0.77822 -1.2039 -0.00148
H 2.4779 0.31678 1.44663
H 1.66327 -1.79257 2.33027
H -1.70254 -1.57702 -0.42198
N -0.57686 -3.08014 1.53114
C -1.72933 -3.7623 0.93617
C -3.07085 -3.29569 1.5137
H -1.6005 -4.83431 1.1152
H -1.70839 -3.63495 -0.15014
H -3.89656 -3.8467 1.05081
H -3.10589 -3.46953 2.59432
H -3.2261 -2.22731 1.33613
C 0.03288 -3.74452 2.68697
C 1.18034 -4.6867 2.30502
H -0.75837 -4.30787 3.19147
H 0.36972 -2.99313 3.40668
H 1.58563 -5.17474 3.19793
H 0.82817 -5.46454 1.61936
H 1.99013 -4.14045 1.81192

s15-reduzido_6
H 0.32811 0.73282 -2.2406
O 0.23101 -0.25333 -2.06389
N 0.479 2.29884 -1.64214
H 0.57488 3.29047 -1.85147
C 0.44921 2.05171 -0.36769
H 0.52244 2.85401 0.37575
C 0.21222 -0.41511 -0.71924
C 0.31888 0.71011 0.14817
C 0.2839 0.45554 1.53525

C 0.15417 -0.8182 2.05353
C 0.05828 -1.94992 1.18447
C 0.07981 -1.70436 -0.21166
H 0.35762 1.29676 2.22058
H 0.12389 -0.93982 3.12726
H -0.00987 -2.50566 -0.93237
N -0.03509 -3.22773 1.68438
C -0.1425 -3.47362 3.12726
C -1.542 -3.23169 3.70963
H 0.59824 -2.86201 3.65267
H 0.15028 -4.51278 3.29803
H -1.52868 -3.39339 4.79303
H -1.87879 -2.20815 3.52046
H -2.27274 -3.91668 3.27055
C -0.19383 -3.8027 0.79074
C -1.62257 -4.5853 0.2677
H 0.12331 -5.26598 1.34734
H 0.50603 -4.28274 -0.04581
H -1.64662 -5.42751 -0.43236
H -2.3121 -4.8032 1.08812
H -1.98536 -3.69533 -0.25487

s15-reduzido_7
H -0.35469 1.24855 -1.83925
O -0.81591 0.38345 -1.60959
N 0.80811 2.40616 -1.4711
H 1.25673 3.2825 -1.73001
C 1.29638 1.88957 -0.38397
H 2.10678 2.37673 0.17074
C -0.24538 -0.08005 -0.47207
C 0.80428 0.64762 0.1608
C 1.34119 0.10041 1.3455
C 0.88731 -1.08606 1.88733
C -0.1678 -1.81518 1.25448
C -0.71659 -1.27464 0.06409
H 2.14903 0.63135 1.84387
H 1.35768 -1.46233 2.7855
H -1.5327 -1.75823 -0.456
N -0.62948 -2.99548 1.77915
C -0.1676 -3.50725 3.073
C 1.09173 -4.37478 2.96446
H -0.98688 -4.09343 3.50095
H -0.00647 -2.67265 3.76115
H 1.38222 -4.74913 3.952
H 0.91222 -5.23505 2.31111
H 1.9285 -3.80337 2.55144
C -1.62065 -3.81951 1.08183
C -3.06704 -3.42437 1.40259
H -1.44523 -4.85875 1.37685
H -1.43627 -3.77858 0.00431
H -3.76682 -4.07837 0.87132
H -3.26161 -3.51461 2.47644
H -3.26785 -2.3904 1.10649

s15-reduzido_8
H 1.2047 0.40277 -2.15625
O 1.07299 -0.56491 -1.91202
N 1.19394 2.02149 -1.69756
H 1.33306 2.99115 -1.97445
C 0.85192 1.89552 -0.4512
H 0.73484 2.76643 0.20412
C 0.72332 -0.59936 -0.60393
C 0.60563 0.60554 0.14725
C 0.22955 0.48241 1.50133
C -0.01694 -0.73998 2.09535
C 0.11245 -1.95127 1.34611
C 0.47705 -1.8383 -0.01931
H 0.12645 1.38652 2.09698
H -0.31064 -0.76054 3.13551
H 0.57239 -2.7062 -0.65747
N -0.09298 -3.17825 1.93245
C -0.56003 -3.28968 3.31935
C -2.06255 -3.03605 3.5052
H 0.02045 -2.60908 3.95072
H -0.31447 -4.29877 3.6601
H -2.32258 -3.09587 4.56769
H -2.34591 -2.04491 3.13889

H -2.65511 -3.78011 2.96555 H 1.3983 2.94195 -1.82148 C -0.00307 -3.577 3.15964
 C -0.00958 -4.41529 1.14845 C 1.3439 1.64139 -0.39263 C -1.34468 -3.33428 3.86477
 C -1.26091 -4.72326 0.31411 H 2.06137 2.19806 0.22023 H 0.78301 -2.96972 3.61982
 H 0.17191 -5.23173 1.85232 C -0.09562 -0.40501 -0.54013 H 0.30104 -4.61765 3.29911
 H 0.87453 -4.37033 0.50411 C 0.83812 0.39814 0.17208 H -1.23563 -3.49943 4.94223
 H -1.09874 -5.62756 -0.28249 C 1.26709 -0.0346 1.44112 H -1.69454 -2.30947 3.70889
 H -2.12921 -4.88992 0.95779 C 0.79691 -1.21769 1.99766 H -2.113 -4.01666 3.49047
 H -1.49524 -3.90056 -0.36779 C -0.12434 -2.00514 1.28792 C -0.28222 -4.46825 0.83353
 C -0.56419 -1.59596 0.02546 C -1.75364 -4.63713 0.42931
s15-reduzido_9
 H 0.31028 0.56173 -2.20859 H 1.97982 0.57699 1.9885 H 0.05771 -5.36363 1.36025
 O 0.20539 -0.41738 -2.00616 H 1.12738 -1.55009 2.97531 H 0.34881 -4.3841 -0.05752
 N 0.47887 2.1435 -1.64989 H -1.2742 -2.1914 -0.53925 H -1.85571 -5.47819 -0.26507
 H 0.58346 3.12886 -1.88345 N -0.59289 -3.23135 1.88899 H -2.37886 -4.83789 1.30384
 C 0.45329 1.92831 -0.3693 C -2.05062 -3.23525 2.12523 H -2.13602 -3.7384 -0.06334
 H 0.53857 2.74804 0.35349 C -2.50037 -2.10225 3.04546
 C 0.19226 -0.54449 -0.65764 H -2.29021 -4.19838 2.58928
 C 0.31323 0.60126 0.18056 H -2.61592 -3.19186 1.17621
 C 0.28184 0.38135 1.57389 H -3.57342 -2.1885 3.24489
 C 0.14346 -0.87771 2.12434 H -1.96463 -2.14341 3.99971
 C 0.03462 -2.03024 1.28454 H -2.3192 -1.12149 2.5947
 C 0.0509 -1.81954 -0.11714 C -0.16191 -4.43076 1.14201
 H 0.36554 1.23868 2.23782 C 1.35747 -4.55022 1.04188
 H 0.11528 -0.97163 3.20091 H -0.60521 -4.5495 0.1294
 H -0.04907 -2.6371 -0.81802 H -0.56062 -5.29686 1.68162
 N -0.0665 -3.29431 1.81697 H 1.62438 -5.48787 0.54365
 C -0.23774 -4.46864 0.95464 H 1.78939 -3.72687 0.46453
 C -1.66952 -4.67596 0.44043 H 1.81235 -4.54351 2.03802
 H 0.07415 -5.342 1.53354
s15-reduzido_12
 H 0.45994 -4.39929 0.11367 H -0.01717 0.97996 -1.9526
 H -1.70125 -5.53456 -0.23911 O -0.50736 0.12103 -1.77425
 H -2.35863 -4.86923 1.2673 N 1.1077 2.12484 -1.42727
 H -2.02689 -3.79606 -0.10251 H 1.58856 2.99797 -1.63704
 C -0.1755 -3.50224 3.26605 C 1.45391 1.61729 -0.29117
 C -1.5732 -3.23583 3.84158 H 2.19201 2.09878 0.35974
 H 0.56895 -2.88187 3.77565 C -0.08647 -0.33671 -0.57511
 H 0.11186 -4.53828 3.46311 C 0.87985 0.36938 0.19124
 H -1.56132 -3.37011 4.92872 C 1.27417 -0.16516 1.43436
 H -1.90178 -2.21468 3.62654 C 0.74 -1.35315 1.91238
 H -2.30932 -3.9257 3.41965 C -0.21812 -2.0464 1.14421
 C -0.62258 -1.5362 -0.08704
 H 2.01342 0.37294 2.0226
 H 1.05814 -1.74635 2.87194
 H -1.35964 -2.07073 -0.6761
 N -0.80359 -3.28626 1.59606
 C 0.19037 -4.3714 1.725
 C 0.89874 -4.6819 0.40797
 H -0.35675 -5.25862 2.06247
 H 0.93874 -4.14397 2.50622
 H 1.56926 -5.53741 0.53919
 H 0.17193 -4.92605 -0.374
 H 1.49796 -3.83358 0.06285
 C -1.59329 -3.12545 2.83397
 C -2.74607 -2.13651 2.6732
 H -0.95593 -2.82032 3.68416
 H -1.99381 -4.11498 3.08059
 H -3.34197 -2.1075 3.59123
 H -2.38311 -1.12328 2.47462
 H -3.39748 -2.43347 1.84447
s15-reduzido_13
 H 0.07476 0.65049 -2.21219
 O -0.0205 -0.33514 -2.0319
 N 0.29373 2.21192 -1.62179
 H 0.38546 3.20325 -1.83442
 C 0.36296 1.95901 -0.35
 H 0.50601 2.75656 0.38833
 C 0.06634 -0.50296 -0.69062
 C 0.25678 0.61669 0.16957
 C 0.32925 0.35604 1.55408
 C 0.22508 -0.91843 2.07633
 C 0.04599 -2.04485 1.21351
 C -0.04118 -1.7929 -0.17893
 H 0.46766 1.19311 2.23448
 H 0.27759 -1.04457 3.14868
 H -0.19713 -2.58965 -0.89338
 N -0.02311 -3.32388 1.71424
 C -0.00307 -3.577 3.15964
 C -1.34468 -3.33428 3.86477
 H 0.78301 -2.96972 3.61982
 H 0.30104 -4.61765 3.29911
 H -1.23563 -3.49943 4.94223
 H -1.69454 -2.30947 3.70889
 H -2.113 -4.01666 3.49047
 C -0.28222 -4.46825 0.83353
 C -1.75364 -4.63713 0.42931
 H 0.05771 -5.36363 1.36025
 H 0.34881 -4.3841 -0.05752
 H -1.85571 -5.47819 -0.26507
 H -2.37886 -4.83789 1.30384
 H -2.13602 -3.7384 -0.06334
s15-reduzido_14
 H 1.80813 0.24752 -1.8195
 O 1.39559 -0.66415 -1.71097
 N 2.05038 1.80291 -1.22344
 H 2.48106 2.7152 -1.35965
 C 1.36949 1.72492 -0.12049
 H 1.28985 2.57451 0.56768
 C 0.70834 -0.65177 -0.54385
 C 0.67694 0.51938 0.26693
 C -0.05547 0.4461 1.47033
 C -0.72183 -0.69735 1.86581
 C -0.70082 -1.87024 1.04777
 C 0.04257 -1.81157 -0.15802
 H -0.09165 1.32368 2.11169
 H -1.25544 -0.6866 2.80592
 H 0.12416 -2.66369 -0.81889
 N -1.38823 -3.00524 1.40929
 C -2.08726 -3.09311 2.69674
 C -1.17197 -3.36729 3.89812
 H -2.8243 -3.89529 2.60739
 H -2.66056 -2.1745 2.85837
 H -1.76038 -3.37363 4.82214
 H -0.67796 -4.3381 3.80067
 H -0.39812 -2.59948 3.99035
 C -1.31394 -4.22545 0.5982
 C -0.03477 -5.04856 0.80588
 H -1.42669 -3.95959 -0.4581
 H -2.18623 -4.83392 0.85062
 H -0.03085 -5.90957 0.12866
 H 0.85902 -4.45078 0.60467
 H 0.02864 -5.42086 1.83221
s15-reduzido_15
 H -0.77716 1.64244 -0.99985
 O -1.32175 1.00051 -0.44783
 N 0.72517 2.13886 -1.57346
 H 1.24895 2.80218 -2.14084
 C 1.482 1.24649 -1.01042
 H 2.56866 1.2398 -1.15469
 C -0.45544 0.11423 0.09841
 C 0.94196 0.21121 -0.1622
 C 1.77456 -0.75511 0.44016
 C 1.28151 -1.75873 1.25118
 C -0.11947 -1.85085 1.52309
 C -0.96696 -0.89223 0.91244
 H 2.84494 -0.70892 0.25324
 H 1.97602 -2.47277 1.67113
 H -2.0392 -0.90814 1.05247
 N -0.62309 -2.82184 2.35694
 C -2.06784 -2.96062 2.57175
 C -2.8143 -3.66753 1.43143
 H -2.49976 -1.97037 2.75092
 H -2.20294 -3.52105 3.50036
 H -3.88885 -3.68504 1.64358
 H -2.66225 -3.15316 0.47803
 H -2.47108 -4.69985 1.31968
 C 0.24553 -3.85572 2.93143
 C 0.59123 -5.00071 1.96922
 H -0.26958 -4.25687 3.80818
 H 1.16053 -3.38766 3.30836
 H 1.2778 -5.70261 2.45503
 H -0.30736 -5.55015 1.67489

H 1.07217 -4.62388 1.06167
s24-reduzido_1
H -1.27301 1.87364 0.01406
O -1.71662 1.00878 -0.27653
N 0.08826 2.64839 0.52862
H 0.47545 3.54739 0.81061
C 0.94233 1.68594 0.56073
H 1.98397 1.83085 0.86363
C -0.79216 0.04917 -0.22496
C 0.54731 -0.32931 0.18516
C 1.4794 -0.70987 0.22376
C 1.09431 -1.99919 -0.13699
C -0.222 -2.28256 -0.54249
C -1.15581 -1.26362 -0.58466
H 2.50011 -0.51669 0.53287
H -0.49354 -3.2939 -0.81756
H -2.17746 -1.45471 -0.89302
N 2.07246 -0.32928 -0.09395
O 3.22704 -2.80367 0.27037
O 1.71498 -4.20919 -0.42357

s24-reduzido_2
H -1.26904 1.86959 0.07038
O -1.74757 0.97886 -0.01293
N 0.15472 2.69161 0.19078
H 0.57574 3.61531 0.2752
C 1.0142 1.73386 0.16219
H 2.09313 1.90657 0.22354
C -0.81512 0.02593 -0.03921
C 0.57494 0.34447 0.04433
C 1.51401 -0.68863 0.0126
C 1.08596 -2.00963 -0.09909
C -0.28041 -2.33123 -0.18181
C -1.22138 -1.31838 -0.1518
H 2.57291 -0.46587 0.0744
H -0.58439 -3.36678 -0.26792
H -2.28108 -1.53865 -0.21407
N 2.07135 -3.07379 -0.12993
O 1.67412 -4.24313 -0.23209
O 3.27139 -2.7736 -0.05287

s14-reduzido_1
H -1.54364 1.11262 -0.08005
O -1.72256 0.19065 0.28201
N -0.43664 2.22294 -0.67179
H -0.2972 3.16487 -1.03372
C 0.65422 1.53605 -0.6105
H 1.61975 1.94899 -0.92189
C -0.54019 -0.45739 0.30516
C 0.66467 0.1625 -0.1202
C 1.87681 -0.55395 -0.05609
C 1.90684 -1.85992 0.41667
C 0.71199 -2.47189 0.82595
C -0.5005 -1.78926 0.77254
H 2.79187 -0.06624 -0.38112
H 0.70566 -3.49208 1.1975
H 2.84232 -2.40692 0.46745
O -1.64484 -2.39809 1.23714
C -2.58822 -2.79647 0.21002
C -3.80518 -3.38108 0.90032
H -2.10302 -3.53806 -0.43859
H -2.8558 -1.92255 -0.39356
H -4.53408 -3.70874 0.15209
H -3.52717 -4.24391 1.51386
H -4.28098 -2.63348 1.54281

s14-reduzido_2
H -1.35475 1.11111 -0.81158
O -1.65534 0.2138 -0.47141
N -0.09602 2.17749 -1.11289
H 0.17127 3.09504 -1.46555
C 0.90999 1.47836 -0.7058
H 1.93621 1.85926 -0.74745
C -0.54644 -0.44243 -0.07044
C 0.74216 0.13491 -0.16419
C 1.87165 -0.59443 0.26919

C 1.72191 -1.8711 0.78486
C 0.44211 -2.44836 0.88
C -0.69015 -1.74979 0.45939
H 2.85524 -0.13994 0.19152
H 0.34441 -3.44761 1.2861
H 2.58598 -2.4359 1.11909
O -1.96877 -2.22143 0.51101
C -2.19713 -3.54109 1.03587
C -3.69048 -3.80213 0.97541
H -1.82965 -3.59201 2.06916
H -1.64404 -4.27424 0.43424
H -3.90553 -4.80087 1.36797
H -4.23655 -3.06826 1.57586
H -4.05137 -3.7497 -0.05624

s14-reduzido_3
H -1.47398 1.29824 -0.13482
O -1.71078 0.42667 0.30998
N -0.3248 2.24155 -0.90254
H -0.12677 3.13707 -1.34572
C 0.69255 1.44762 -0.8846
H 1.66072 1.73354 -1.30969
C -0.60333 -0.34272 0.27979
C 0.61223 0.11653 -0.29386
C 1.74936 -0.71593 -0.27752
C 1.69456 -1.98155 0.29251
C 0.48792 -2.43603 0.84581
C -0.65347 -1.63777 0.84151
H 2.67383 -0.35016 -0.71604
H 0.41525 -3.42313 1.29149
H 2.57219 -2.6191 0.30623
O -1.8011 -2.09315 1.45111
C -2.91142 -2.40451 0.56645
C -2.65214 -3.65807 -0.25683
H -3.11762 -1.54045 -0.07305
H -3.75971 -2.54503 1.24087
H -3.52938 -3.87956 -0.87447
H -1.79373 -3.52333 -0.92249
H -2.4579 -4.51763 0.3926

s14-reduzido_4
H -1.45813 1.08271 -0.50026
O -1.71849 0.26322 0.02317
N -0.25892 1.96591 -1.26537
H -0.03643 2.80859 -1.79281
C 0.76814 1.21363 -1.05367
H 1.7676 1.47869 -1.41507
C -0.5972 -0.4674 0.19143
C 0.65832 -0.04015 -0.31679
C 1.80574 -0.82736 -0.09341
C 1.72259 -2.01755 0.61816
C 0.47792 -2.44161 1.10779
C -0.67412 -1.68692 0.89982
H 2.76014 -0.48598 -0.48507
H 0.3831 -3.37028 1.66172
H 2.60787 -2.62029 0.791
O -1.86569 -2.10266 1.45065
C -2.87697 -2.55693 0.51093
C -2.51151 -3.89229 -0.12132
H -3.03807 -1.78485 -0.24814
H -3.78408 -2.64228 1.11431
H -3.31993 -4.21739 -0.78529
H -1.59605 -3.81107 -0.71586
H -2.36184 -4.65873 0.64584

s14-reduzido_5
H -1.37035 1.23249 -0.38955
O -1.62633 0.3633 0.04853
N -0.16402 2.21792 -1.00806
H 0.05406 3.10954 -1.44987
C 0.87845 1.48617 -0.79984
H 1.88531 1.81534 -1.07866
C -0.48797 -0.33881 0.22085
C 0.77629 0.17138 -0.17686
C 1.93778 -0.59599 0.04377
C 1.86067 -1.84607 0.64485
C 0.60794 -2.3502 1.02724

C -0.5567 -1.61547 0.82036
H 2.89889 -0.19212 -0.26276
H 0.51782 -3.32487 1.49709
H 2.75731 -2.43234 0.81575
O -1.76206 -2.11396 1.26166
C -2.65955 -2.56678 0.21611
C -3.94558 -3.02452 0.87629
H -2.17464 -3.38968 -0.3259
H -2.8433 -1.74453 -0.48367
H -4.64347 -3.38915 0.11569
H -3.75137 -3.83562 1.58523
H -4.41995 -2.19684 1.41294

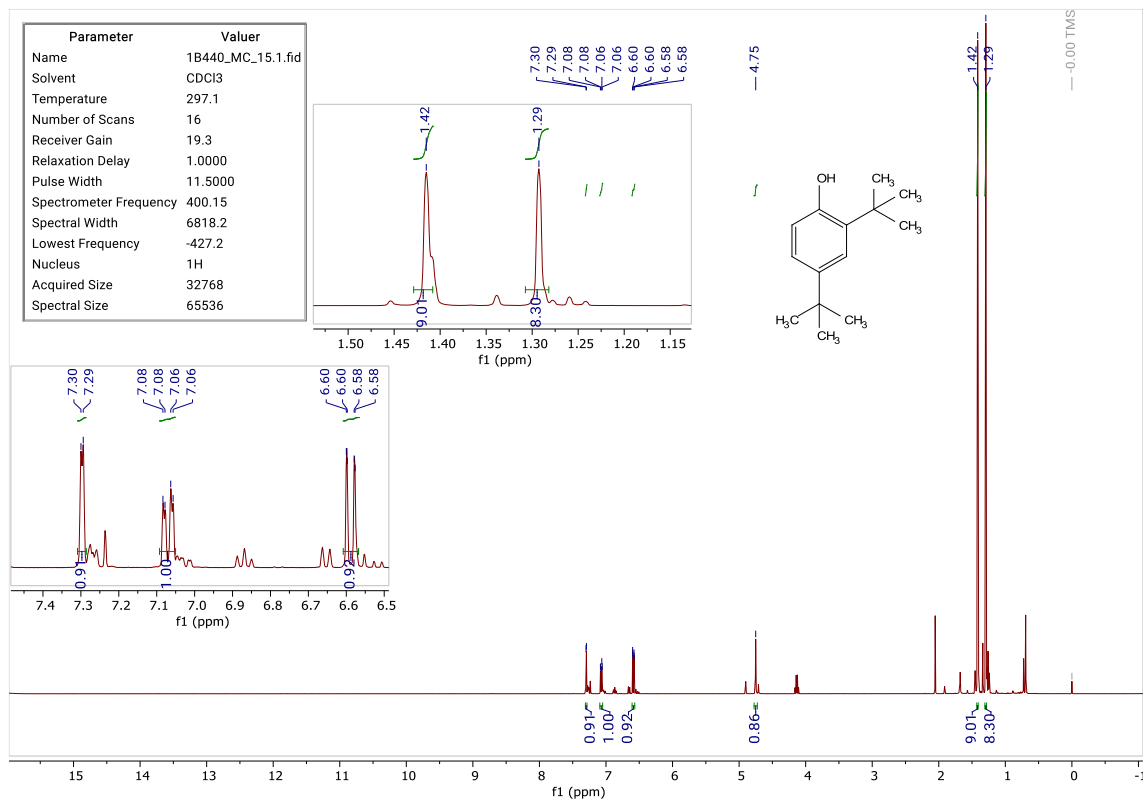
s14-reduzido_6
H -1.3179 1.09382 -1.00421
O -1.63796 0.2317 -0.5978
N -0.04552 2.13869 -1.32216
H 0.24222 3.01952 -1.74529
C 0.93195 1.49576 -0.77649
H 1.95658 1.8829 -0.78332
C -0.55758 -0.36873 -0.05667
C 0.73192 0.21116 -0.11603
C 1.83039 -0.4587 0.46736
C 1.64919 -1.67928 1.09633
C 0.36839 -2.25926 1.15677
C -0.73328 -1.619 0.5885
H 2.81524 -0.00314 0.41519
H 0.2461 -3.21442 1.6524
H 2.48921 -2.19812 1.54635
O -2.01037 -2.09794 0.59388
C -2.27117 -3.35894 1.23495
C -3.75542 -3.64124 1.09572
H -1.97844 -3.29894 2.29142
H -1.67367 -4.14403 0.75325
H -3.99464 -4.5965 1.57334
H -4.34602 -2.85542 1.57633
H -4.04113 -3.6995 0.04106

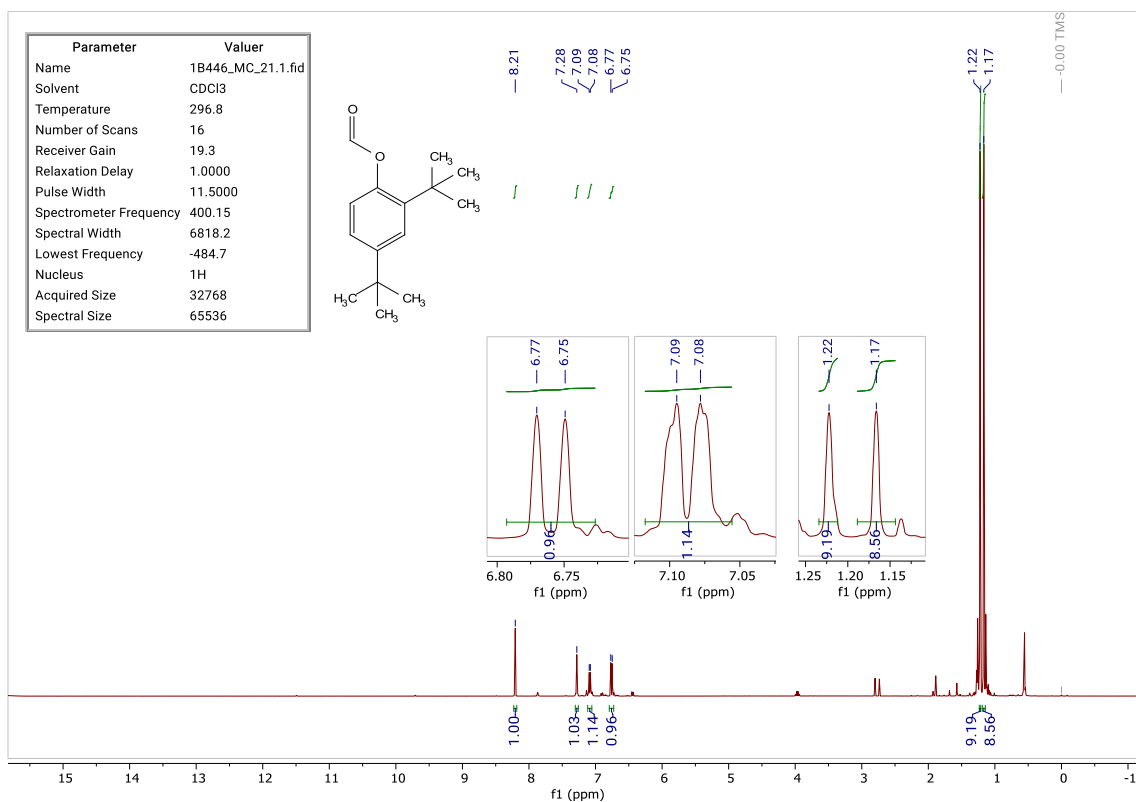
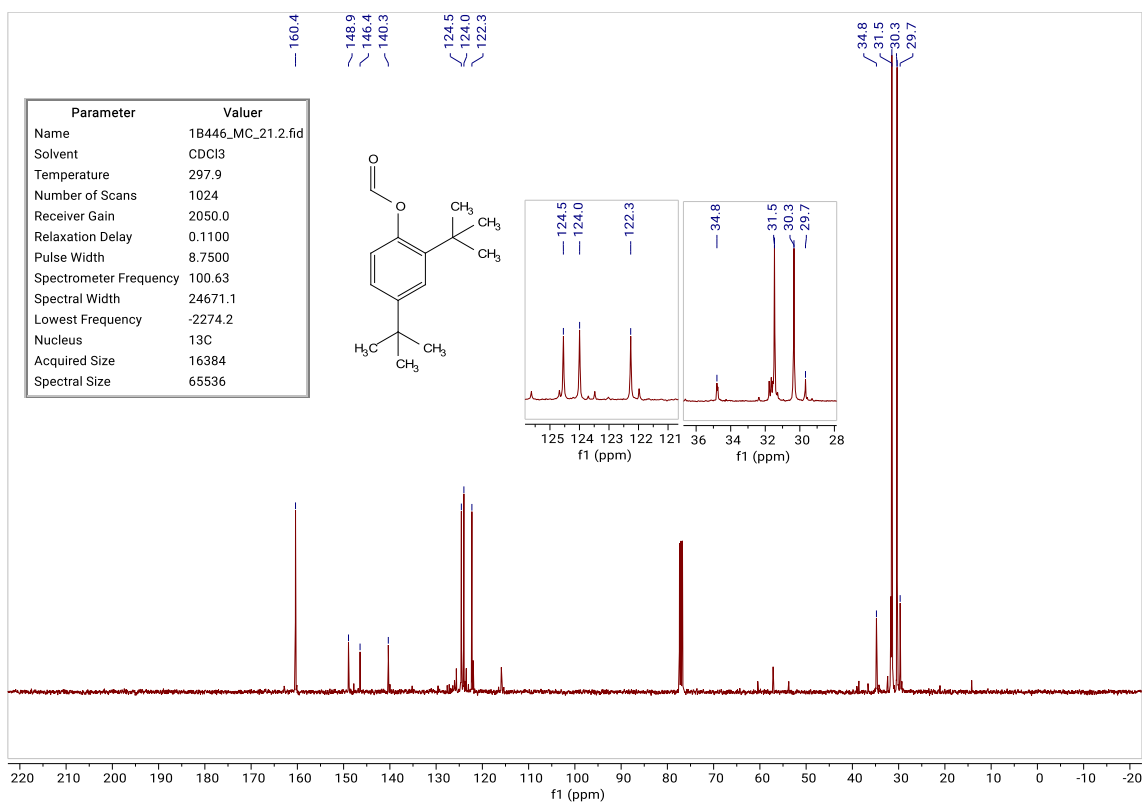
s14-reduzido_7
H -1.3112 1.24686 -0.72583
O -1.67874 0.406 -0.31456
N 0.02497 2.13935 -1.20433
H 0.3604 3.00411 -1.62549
C 0.97833 1.3362 -0.86905
H 2.0322 1.586 -1.03294
C -0.61961 -0.36856 0.00159
C 0.71118 0.04328 -0.2497
C 1.78586 -0.80281 0.10105
C 1.5405 -2.03243 0.6902
C 0.2192 -2.44414 0.94088
C -0.8618 -1.62798 0.60585
H 2.80261 -0.4767 -0.09873
H 0.04996 -3.41089 1.3986
H 2.3614 -2.68871 0.95986
O -2.1776 -1.92101 0.8227
C -2.54854 -3.21576 1.33596
C -2.50449 -4.29799 0.26394
H -3.57049 -3.07253 1.69438
H -1.926 -3.46973 2.20222
H -2.84724 -5.24754 0.6884
H -3.16315 -4.03311 -0.56866
H -1.49396 -4.44402 -0.12724

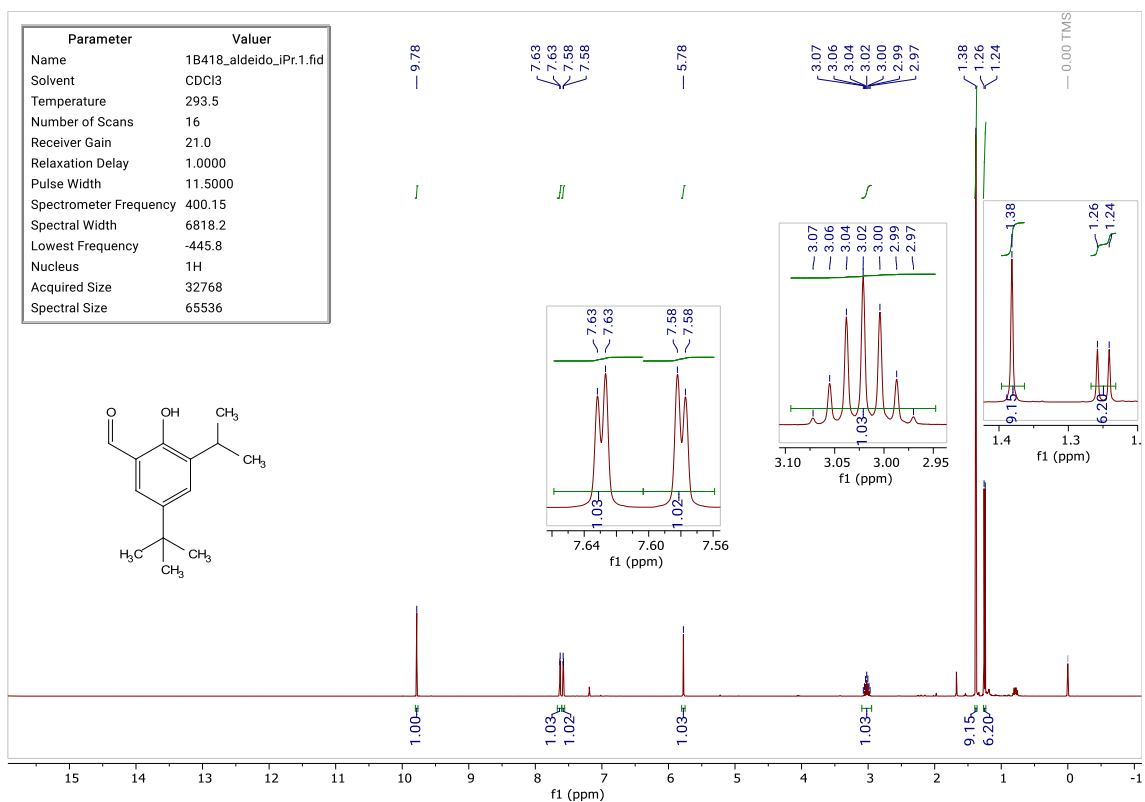
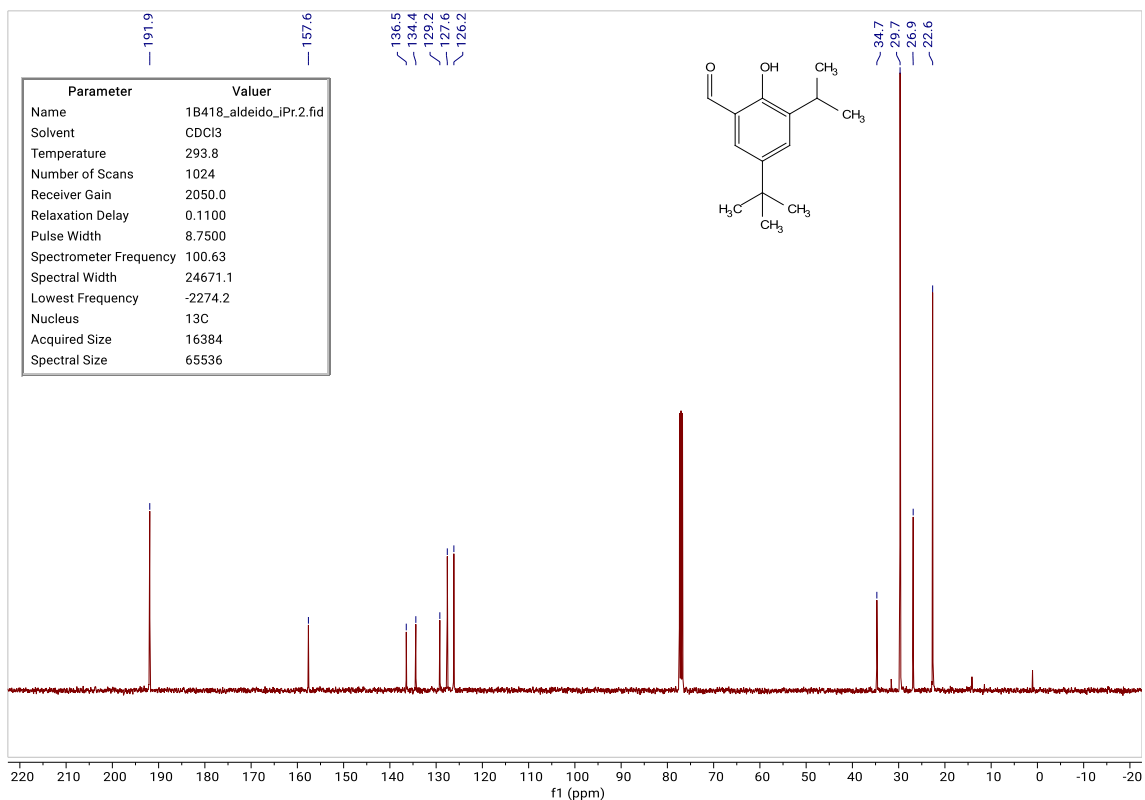
s14-reduzido_8
H -1.50431 1.10835 -0.40408
O -1.73815 0.26931 0.09793
N -0.33797 2.03978 -1.17284
H -0.14056 2.90114 -1.6797
C 0.7032 1.29317 -1.01772
H 1.68745 1.58116 -1.40276
C -0.60193 -0.44571 0.21623
C 0.63188 0.01578 -0.31743
C 1.79175 -0.77109 -0.17456
C 1.74482 -1.99036 0.48986
C 0.52791 -2.43743 1.02537
C -0.6381 -1.68533 0.88971
H 2.72729 -0.40763 -0.59095

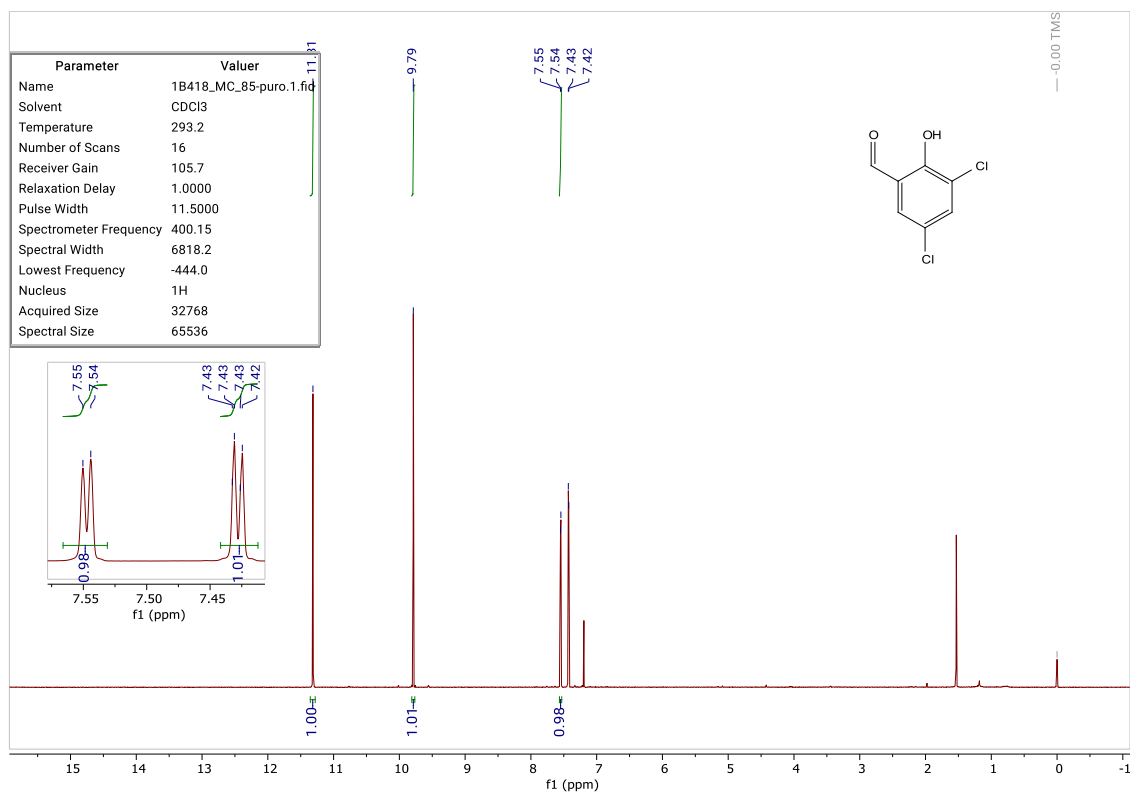
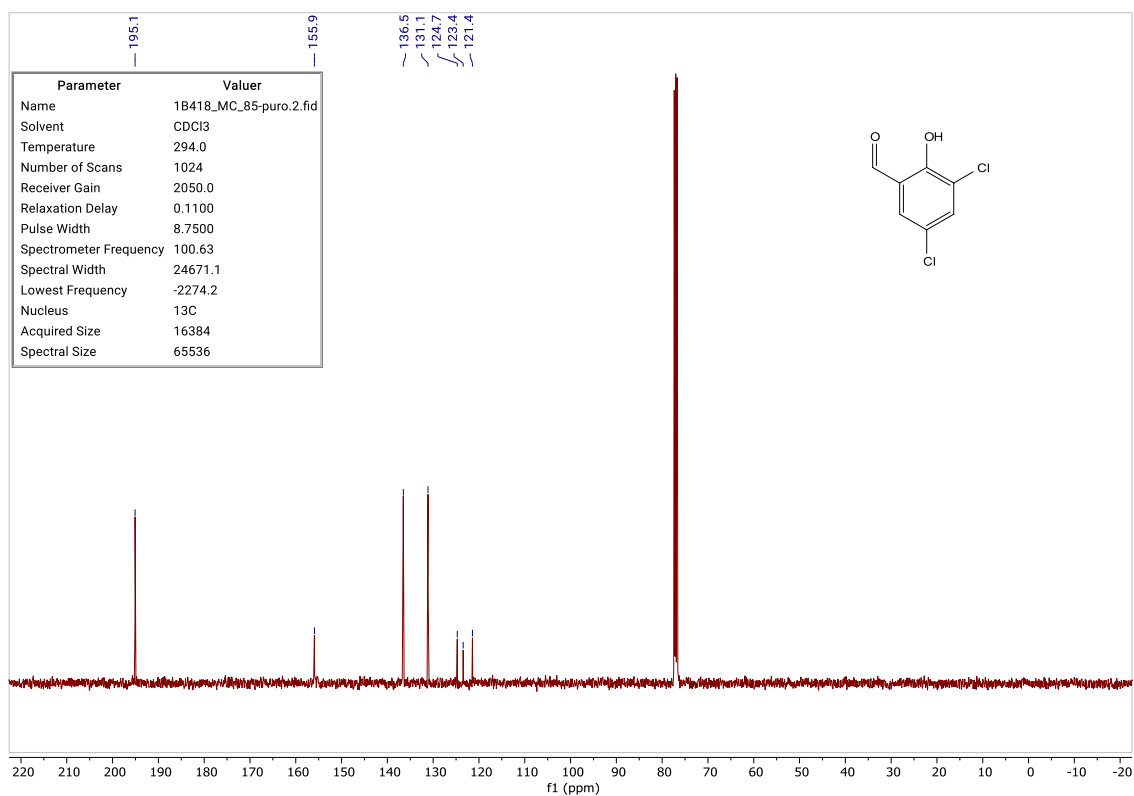
H 0.47854 -3.3805 1.56105 H 0.04295 -3.68362 0.6499 H -3.39946 -1.54468 -1.28366
 H 2.64084 -2.59114 0.60463 H 2.29818 -2.74178 0.94061
 O -1.82851 -2.09173 1.45041 O -2.12975 -2.26676 -0.23254 **s20-reduzido**
 C -2.41811 -3.29221 0.89289 C -2.50623 -3.61282 0.11947 H -1.32758 1.92178 -0.1221
 C -2.93174 -3.07708 -0.5237 C -2.72128 -3.78099 1.61872 O -1.70885 1.08825 -0.53149
 H -3.23345 -3.53741 1.57769 H -1.76959 -4.32428 -0.27252 N -0.02774 2.66511 0.67221
 H -1.68767 -4.11025 0.9261 H -3.44124 -3.77334 -0.42221 H 0.3355 3.52464 1.081
 H -3.38368 -4.00249 -0.8967 H -3.05975 -4.80138 1.82739 C 0.79931 1.67674 0.75763
 H -3.68527 -2.28466 -0.54723 H -1.80311 -3.60351 2.18532 H 1.78371 1.78263 1.2272
 H -2.11494 -2.80087 -1.19849 H -3.48654 -3.08326 1.97197 C -0.77812 0.11685 -0.39419
 C 0.46995 0.35851 0.23238
s14-reduzido_9 **s26-reduzido_1**
 H -1.30326 1.43054 -0.52888 H -1.33068 1.80631 0.
 O -1.67032 0.55831 -0.18888 O -1.77662 0.90494 -0.00002
 N 0.02666 2.33732 -0.99825 N 0.08891 2.69948 -0.00002
 H 0.36173 3.23536 -1.3432 H 0.50511 3.6293 -0.00002
 C 0.97301 1.47712 -0.82255 C 0.96571 1.75224 0.00001
 H 2.02128 1.71703 -1.03151 H 2.04187 1.95667 0.00003
 C -0.61876 -0.27397 -0.03647 C -0.79146 -0.01663 -0.00001
 C 0.70511 0.12968 -0.33337 C 0.57672 0.34669 0.00001
 C 1.77237 -0.77752 -0.15471 C 1.56944 -0.65761 0.00002
 C 1.52651 -2.05906 0.31043 C 1.20996 -1.99553 0.00001
 C 0.212 -2.46288 0.60568 C -0.1488 -2.36081 -0.00001
 C -0.86151 -1.5872 0.43967 C -1.14833 -1.38787 -0.00002
 H 2.7837 -0.45684 -0.38786 H 2.61583 -0.36566 0.00004
 H 0.0419 -3.4704 0.9642 H -0.41246 -3.41135 -0.00003
 H 2.34147 -2.7621 0.44783 H 1.96962 -2.77021 0.00001
 O -2.16867 -1.86963 0.71407 O -2.49039 -1.64056 -0.00005
 C -2.54613 -3.2016 1.11485 C -2.9212 -3.00443 -0.00026
 C -2.61152 -4.16521 -0.06398 H -2.57161 -3.53084 0.89596
 H -3.53602 -3.07102 1.55808 H -4.01087 -2.96933 -0.00031
 H -1.87458 -3.5619 1.90338 H -2.57152 -3.53059 -0.89659
 H -2.95905 -5.14407 0.283
 H -3.31417 -3.79525 -0.81674
 H -1.63505 -4.29802 -0.53768
s26-reduzido_2
 H -1.20188 1.98988 0.00152
 O -1.73068 1.1318 0.00177
 N 0.253 2.76579 0.00074
 H 0.73894 3.66092 0.0006
 C 1.05202 1.75224 0.00006
 H 2.1405 1.87369 -0.00057
 C -0.83817 0.11448 0.00089
 C 0.56081 0.37828 0.00011
 C 1.49029 -0.67924 -0.00051
 C 1.04687 -1.99509 -0.00037
 C -0.32716 -2.25639 0.00031
 C -1.27943 -1.2312 0.0009
 H 2.55217 -0.45041 -0.00106
 H -0.69612 -3.27757 0.00035
 H 1.7529 -2.81885 -0.00082
 O -2.57734 -1.66767 0.00165
 C -3.70729 -0.77869 -0.00068
 H -3.71861 -0.14732 0.89027
 H -3.71705 -0.15008 -0.89364
 H -4.57627 -1.43832 -0.00045
s26-reduzido_3
 H -1.15973 2.05673 0.63087
 O -1.68502 1.19832 0.66424
 N 0.30572 2.82158 0.36848
 H 0.80039 3.71177 0.34707
 C 1.06213 1.81318 0.09238
 H 2.12656 1.93031 -0.13751
 C -0.82851 0.20293 0.35793
 C 0.54014 0.45134 0.07104
 C 1.39748 -0.62815 -0.22217
 C 0.91974 -1.93265 -0.23557
 C -0.43562 -2.17253 0.03775
 C -1.30601 -1.12544 0.32863
 H 2.44318 -0.42427 -0.43605
 H -0.83704 -3.18131 0.0314
 H 1.58361 -2.76107 -0.45874
 O -2.61646 -1.4055 0.65032
 C -3.58323 -1.01073 -0.34368
 H -4.55979 -1.2927 0.0532
 H -3.55062 0.06915 -0.51486
s23-reduzido
 H -1.26206 1.89189 -0.03199
 O -1.76604 1.02226 -0.0294
 N 0.18005 2.71481 -0.02807
 H 0.65324 3.61683 -0.03111
 C 0.997 1.71462 -0.0158
 H 2.08333 1.85735 -0.00954
 C -0.85418 0.02111 -0.01632
 C 0.53348 0.33247 -0.00921
 C 1.48394 -0.70196 0.00432
 C 1.10538 -2.04207 0.01145
 C -0.27642 -2.30941 0.00434
 C -1.27846 -1.32873 -0.00958
 H 2.53461 -0.42427 0.00923
 H -0.59006 -3.34231 0.00995
 C 2.17271 -3.15181 0.02641
 C 3.06628 -3.02306 -1.23067
 C 3.05008 -3.00462 1.29284
 C 1.55463 -4.56328 0.03275
 H 2.46928 -3.12788 -2.01433
 H 3.5749 -2.0547 -1.26858
 H 3.83463 -3.80489 -1.23205
 H 2.44141 -3.09611 2.19921
 H 3.81826 -3.78628 1.31553
 H 3.55831 -2.03578 1.32311
 H 2.3545 -5.311 0.04327
 H 0.93231 -4.73124 0.91844
 H 0.94363 -4.74419 -0.85826
 C -2.77483 -1.70391 -0.01776
 C -3.47024 -1.12996 1.24173
 C -3.45108 -1.14747 -1.29558
 C -2.99214 -3.23148 -0.00908
 H -3.01656 -1.54151 2.15062
 H -3.39768 -0.0422 1.28058
 H -4.53133 -1.40584 1.23837
 H -2.98459 -1.57251 -2.1917
 H -4.51248 -1.42204 -1.30391
 H -3.37666 -0.06043 -1.34917
 H -4.06731 -3.43841 -0.01552
 H -2.55828 -3.71411 -0.89161
 H -2.57124 -3.70225 0.88605

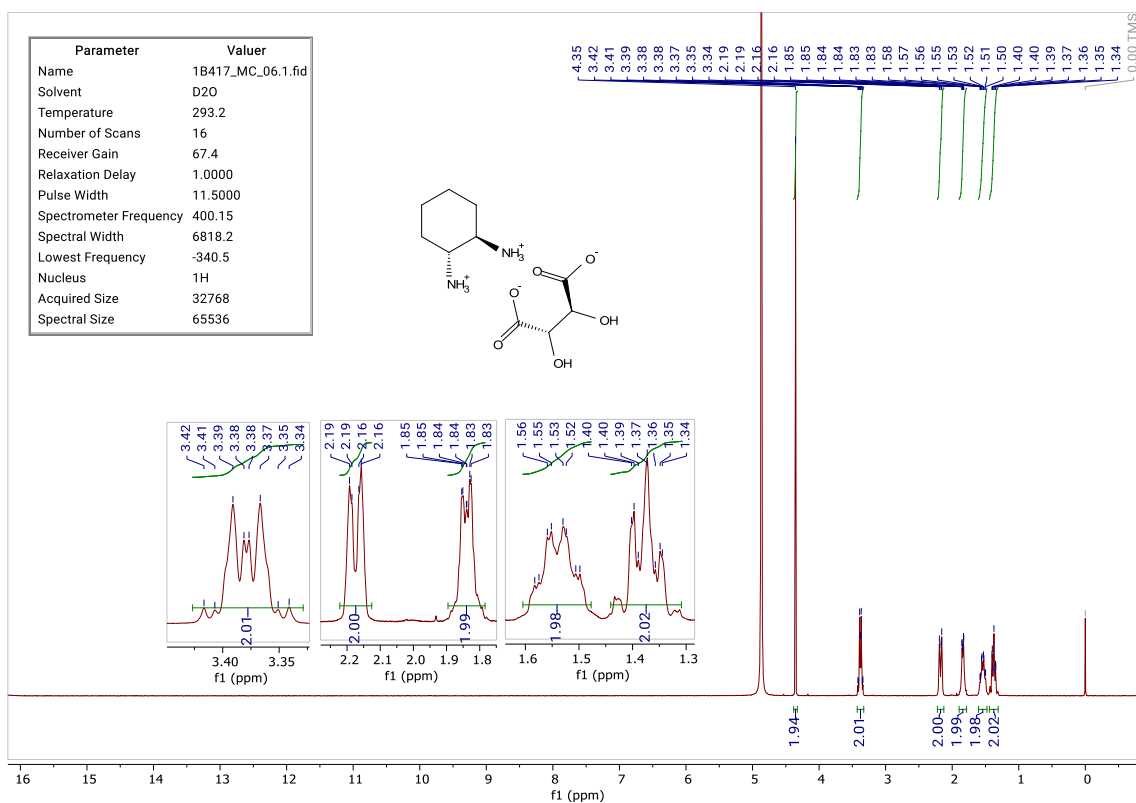
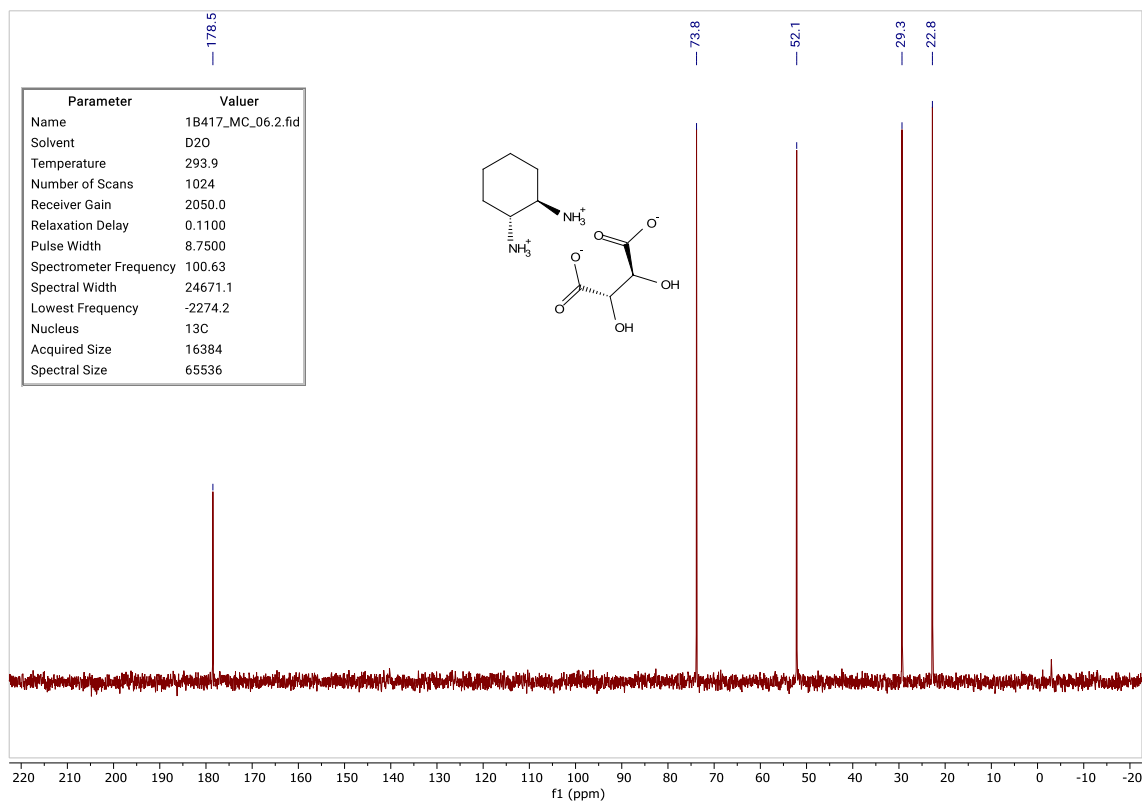
Espectros de RMN

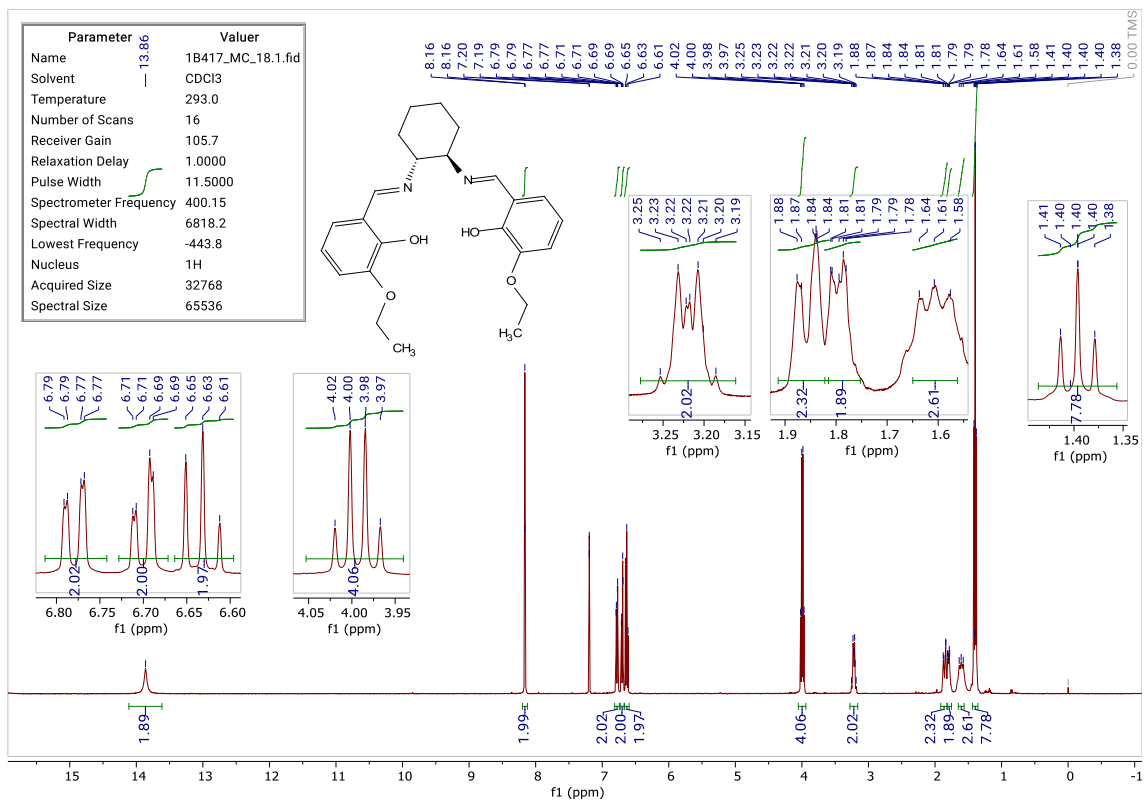
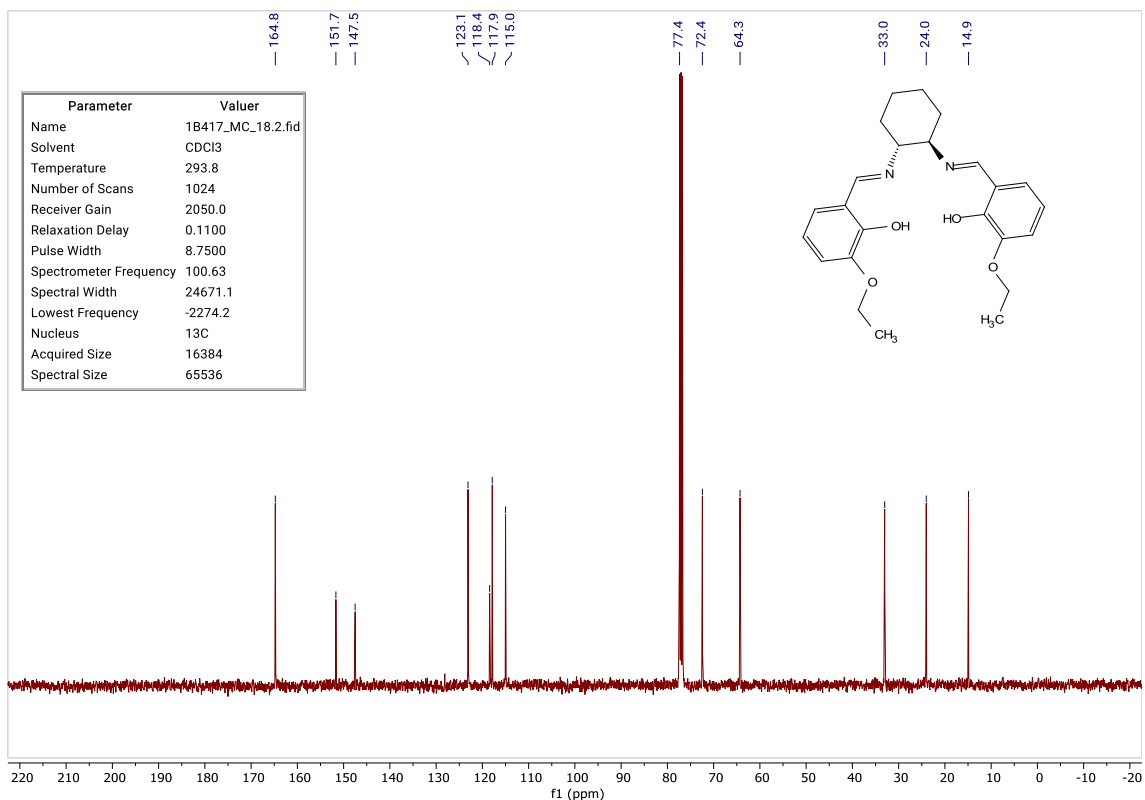
Espectro de RMN ¹H do composto 2 (400 MHz, CDCl₃)

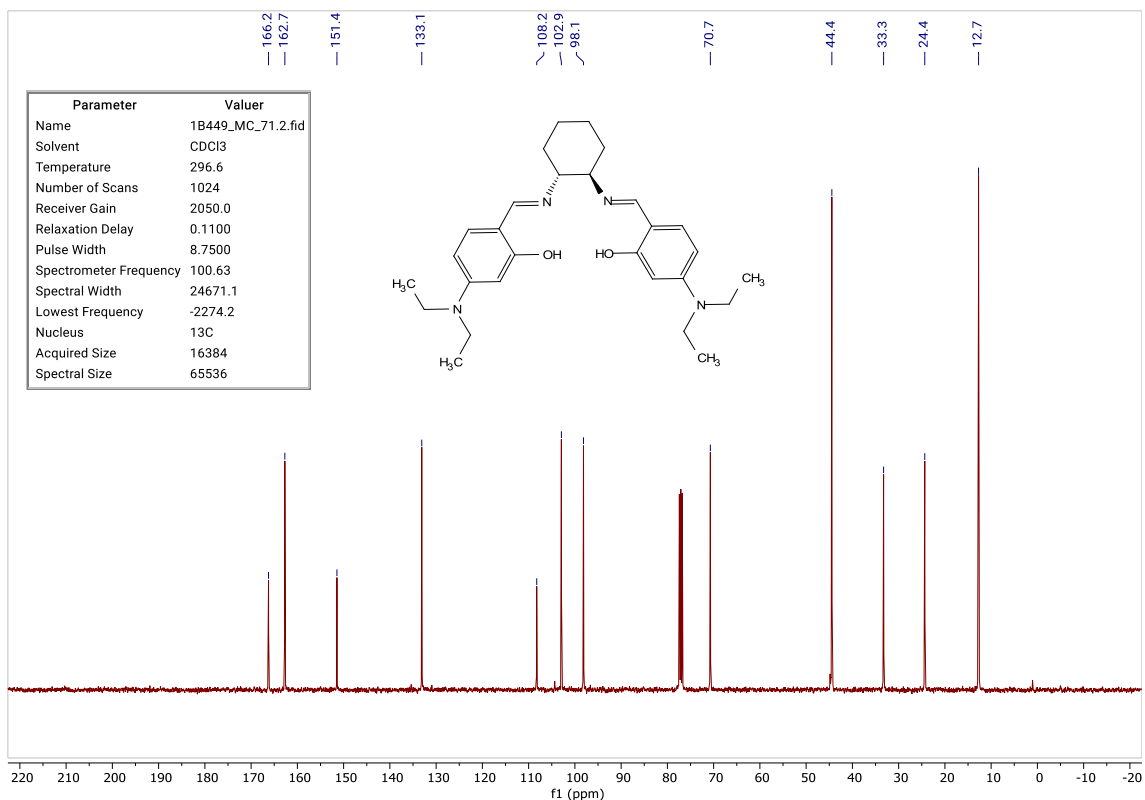
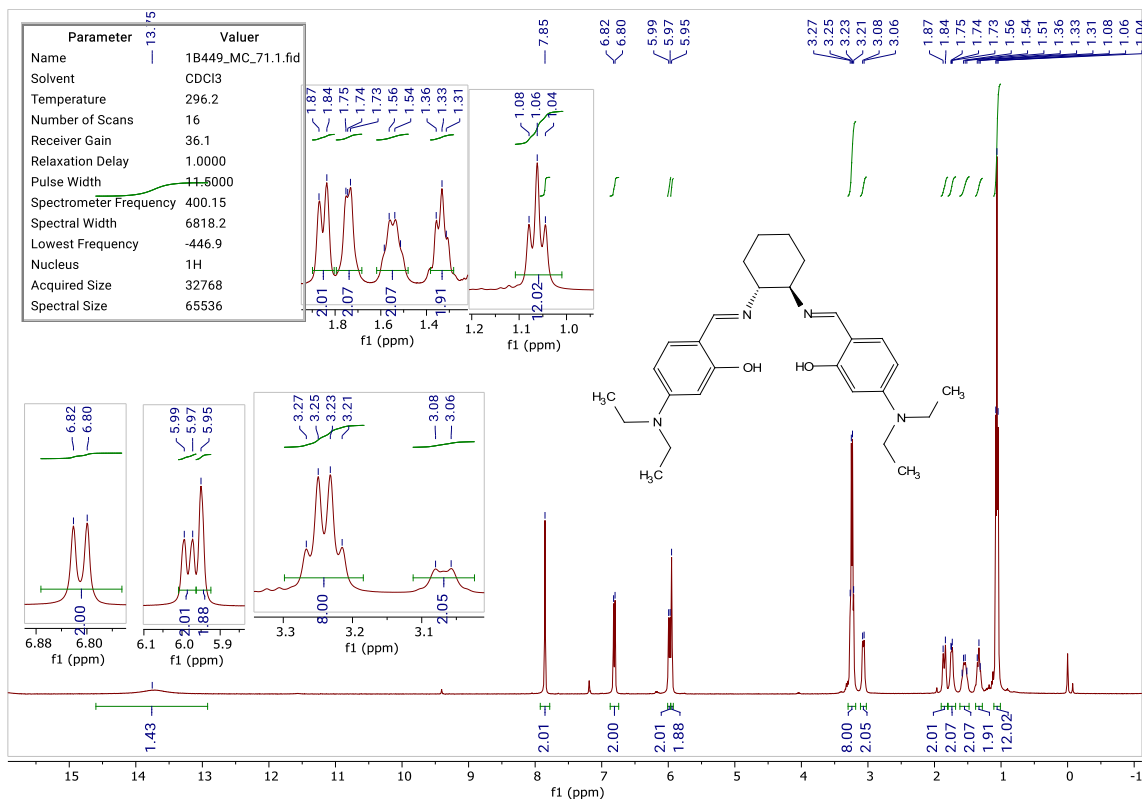
Espectro de RMN ¹H do composto 3 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 3 (100 MHz, CDCl₃)

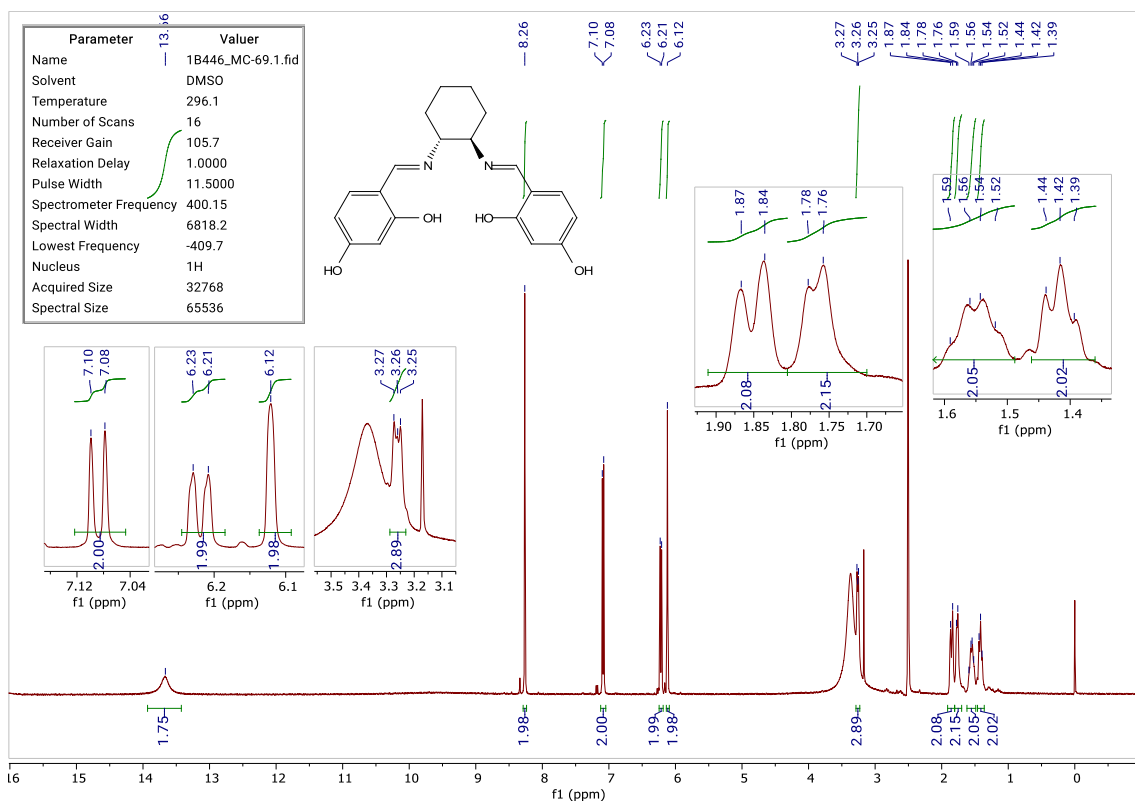
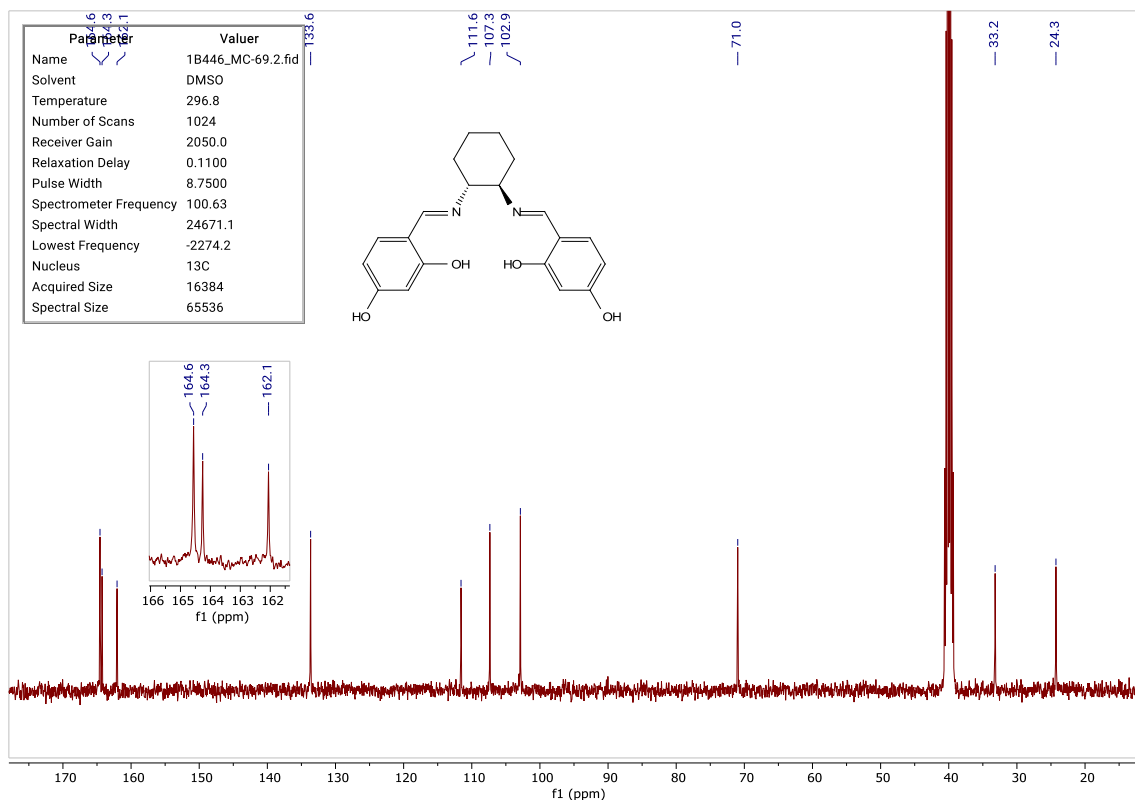
Espectro de RMN ¹H do composto 4 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 4 (100 MHz, CDCl₃)

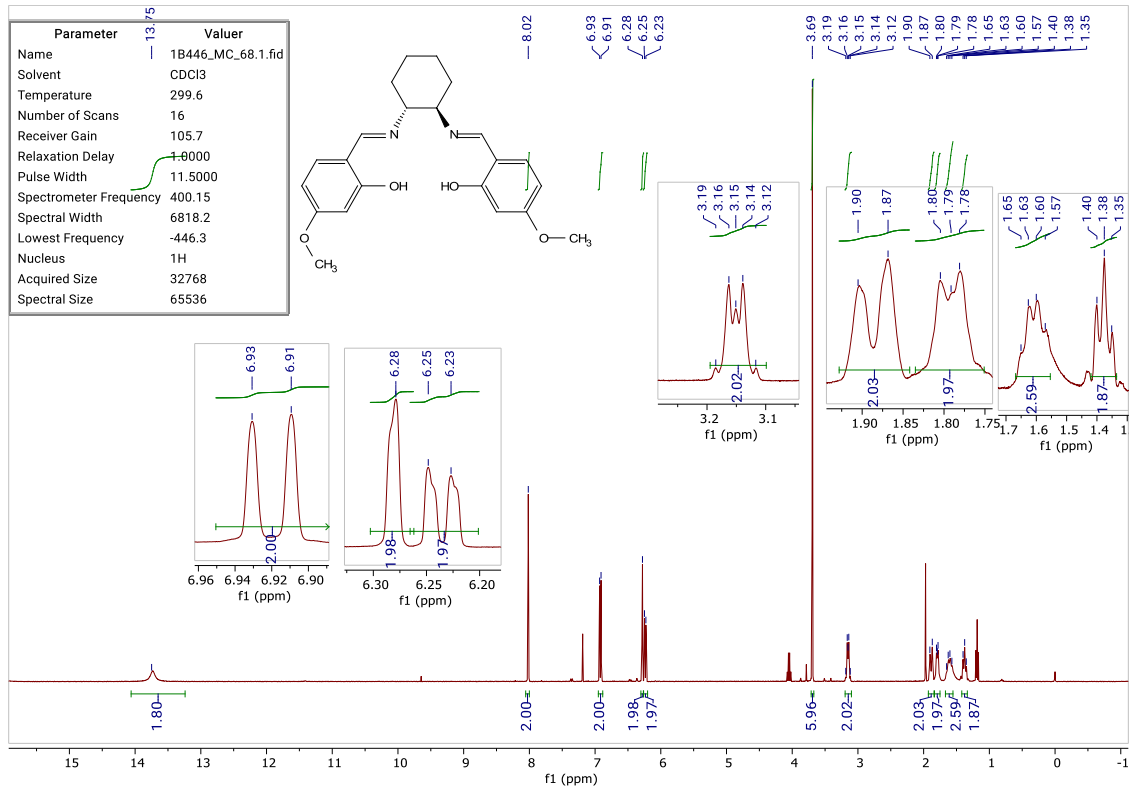
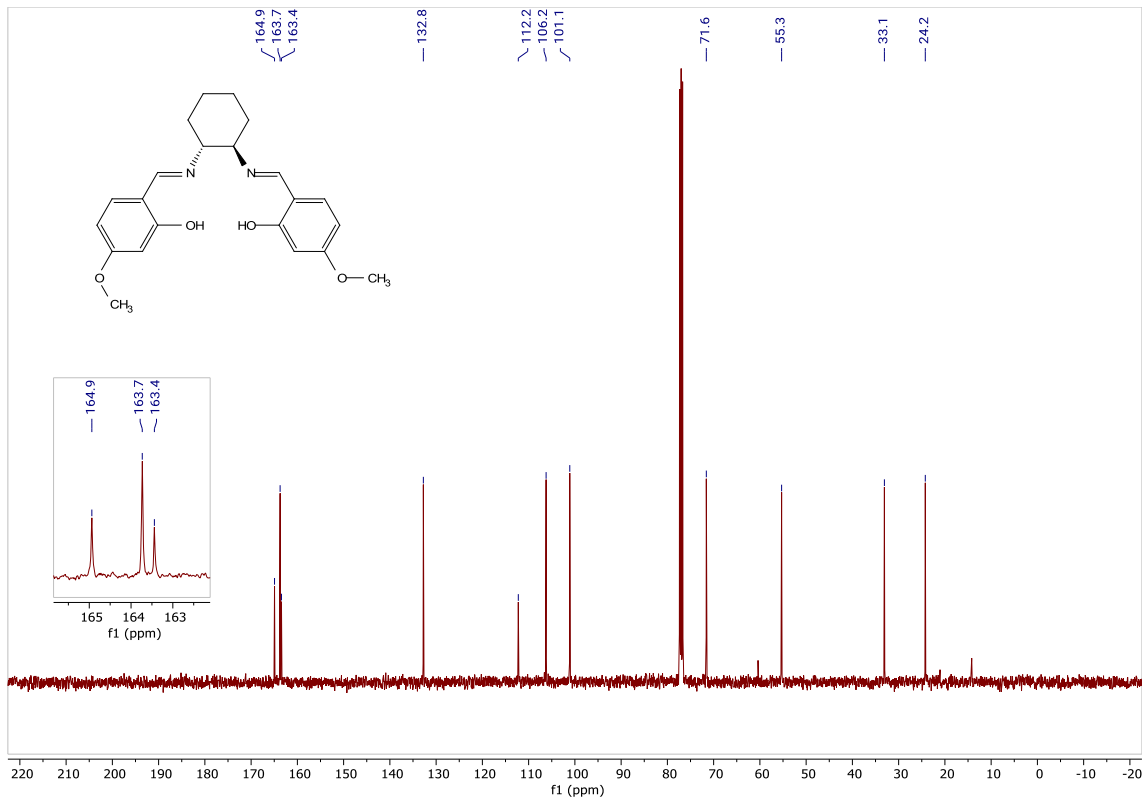
Espectro de RMN ¹H do composto 6 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 6 (100 MHz, CDCl₃)

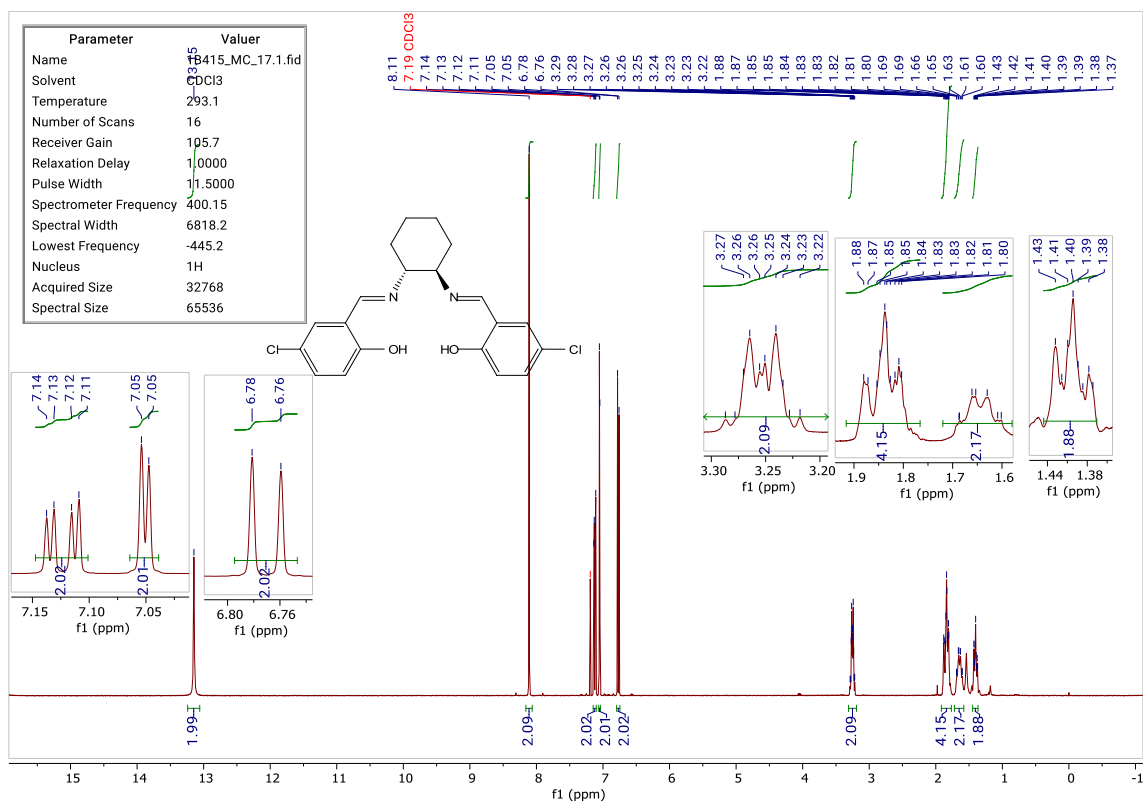
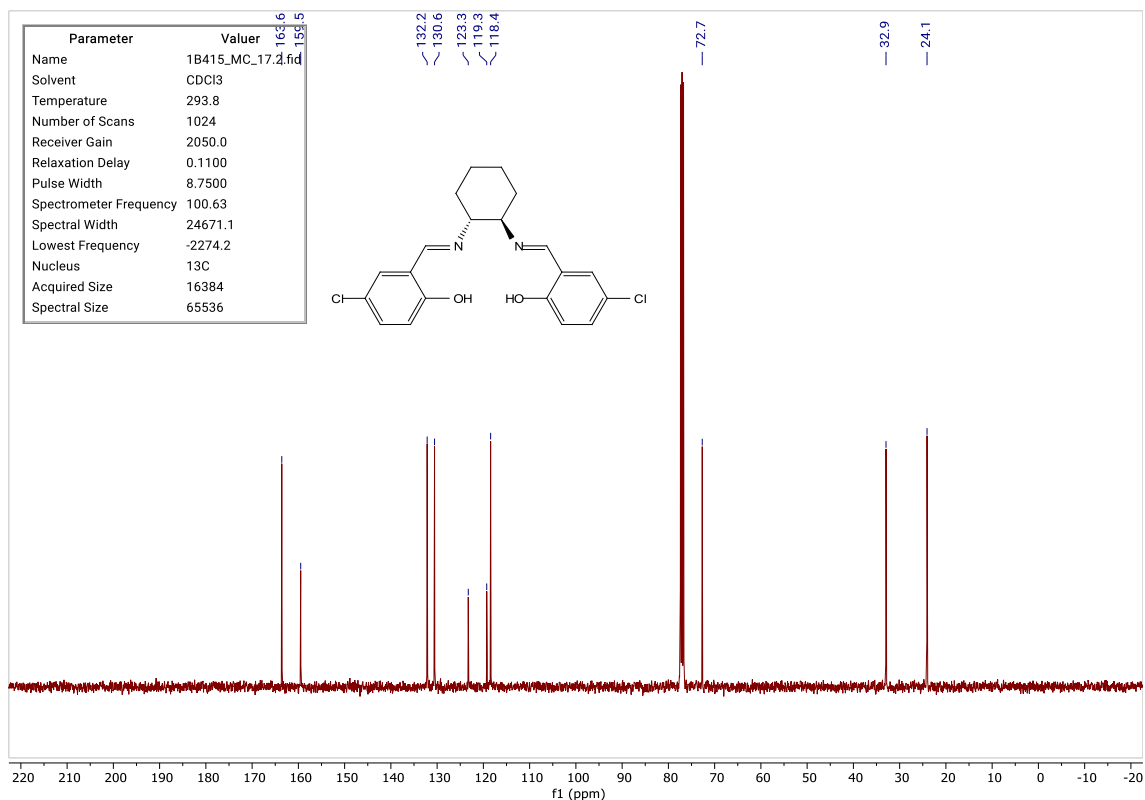
Espectro de RMN ¹H do composto 7 (400 MHz, D₂O)Espectro de RMN ¹³C do composto 7 (100 MHz, D₂O)

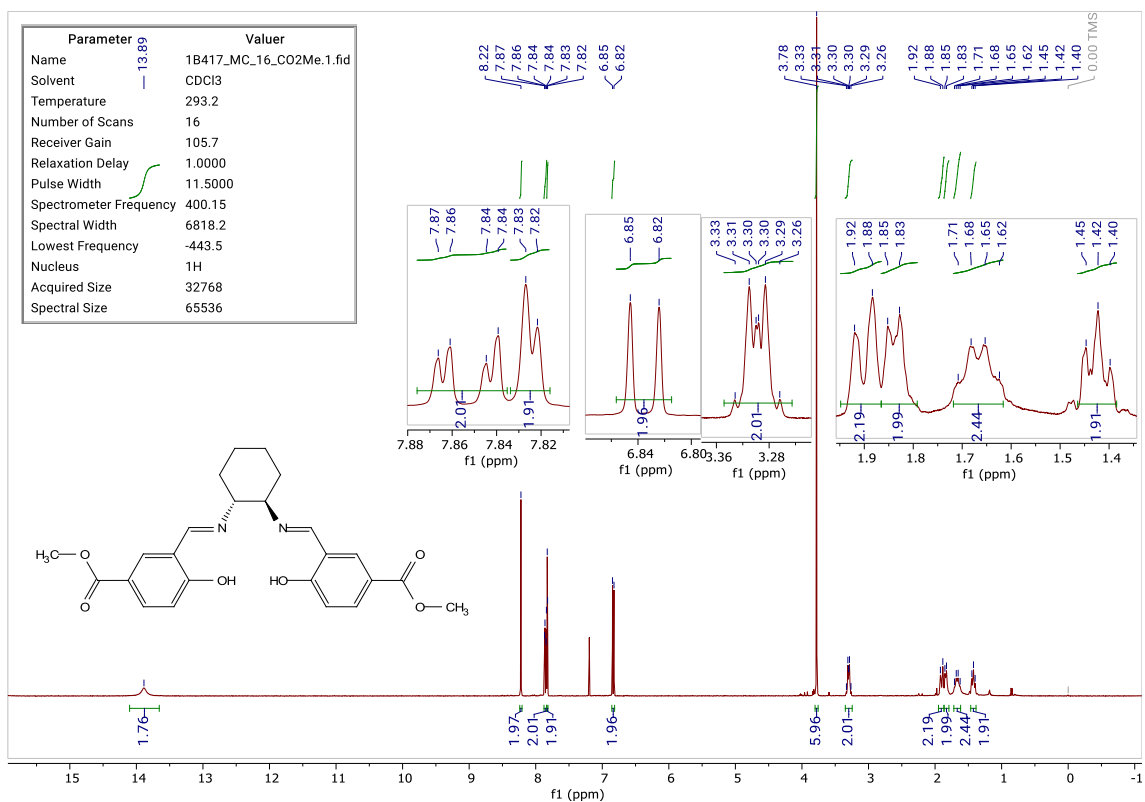
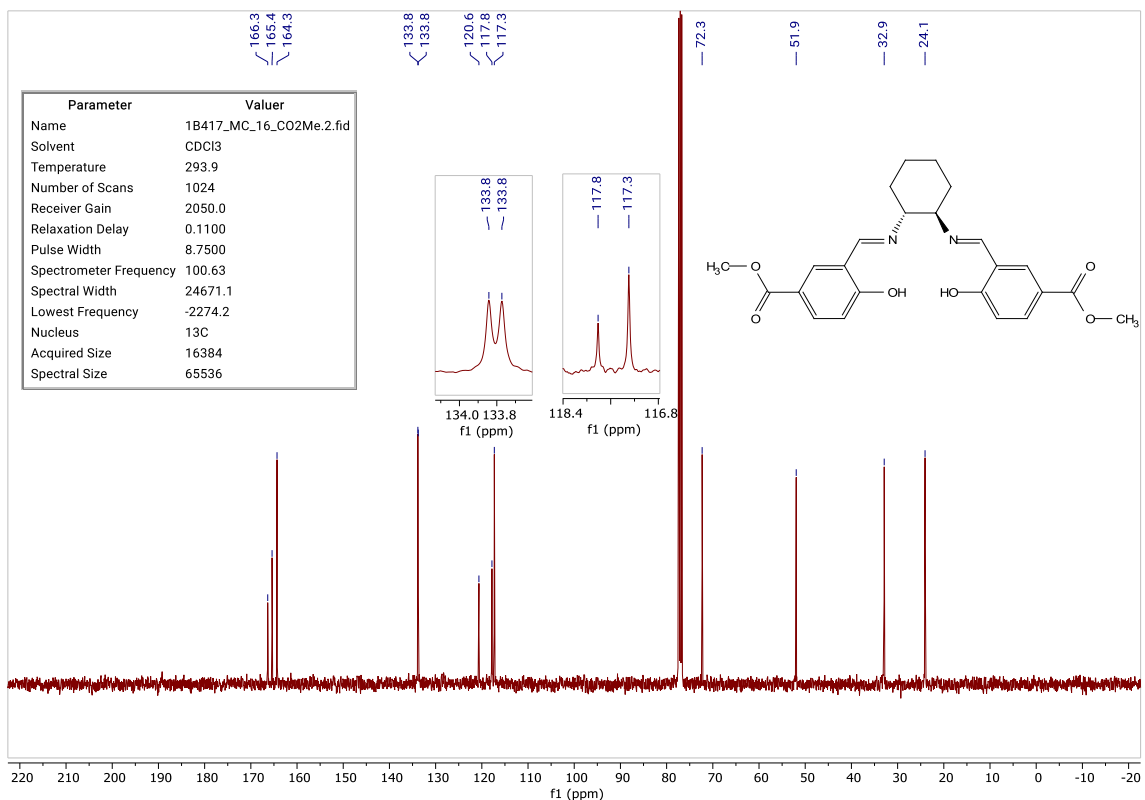
Espectro de RMN ¹H do composto 8 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 8 (100 MHz, CDCl₃)

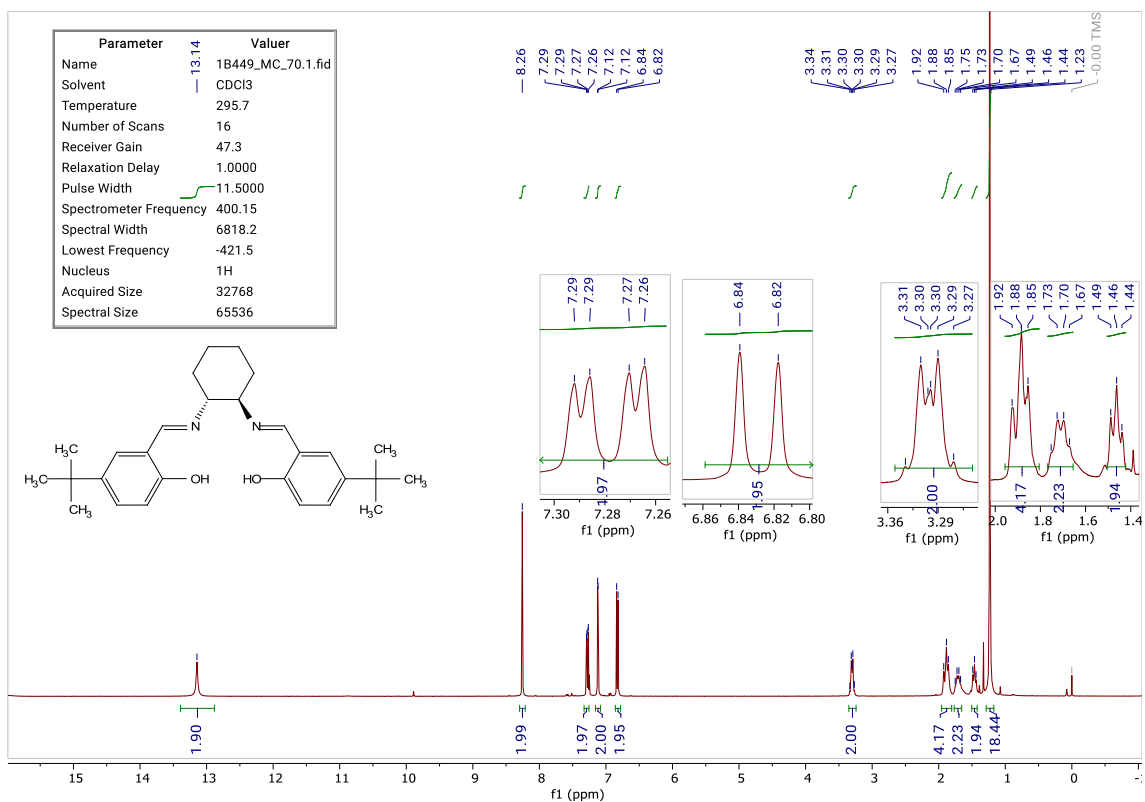
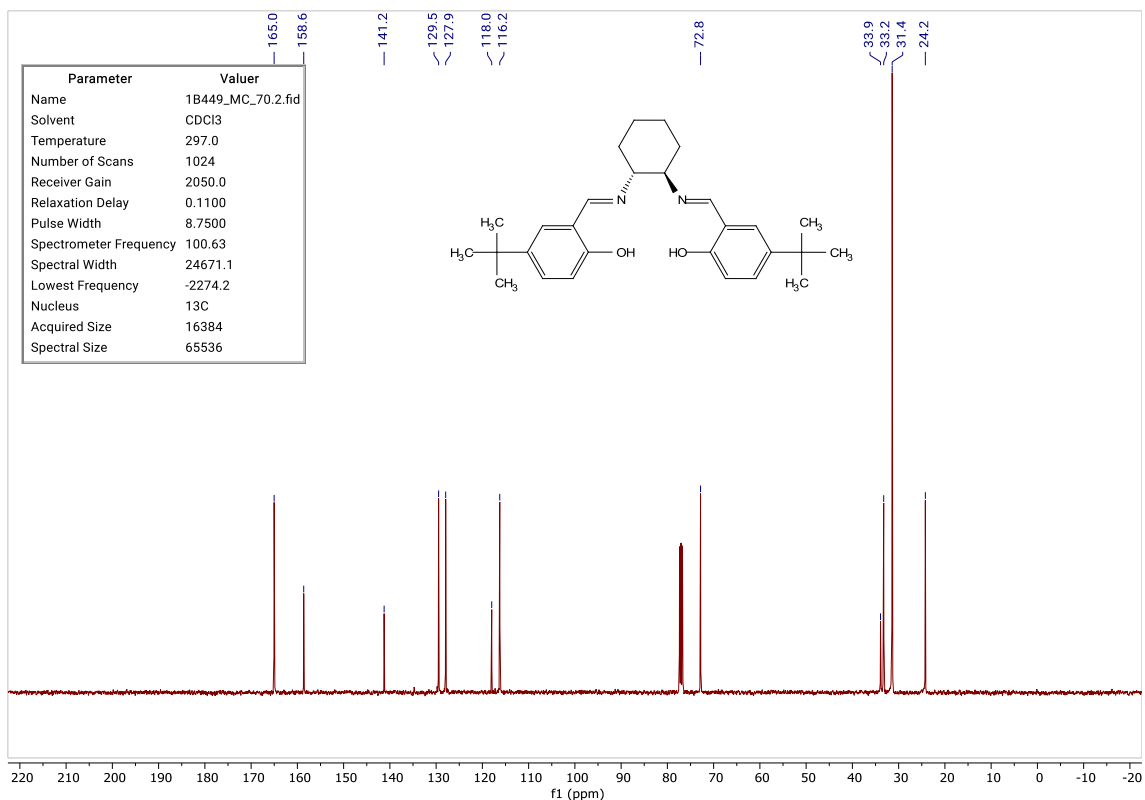


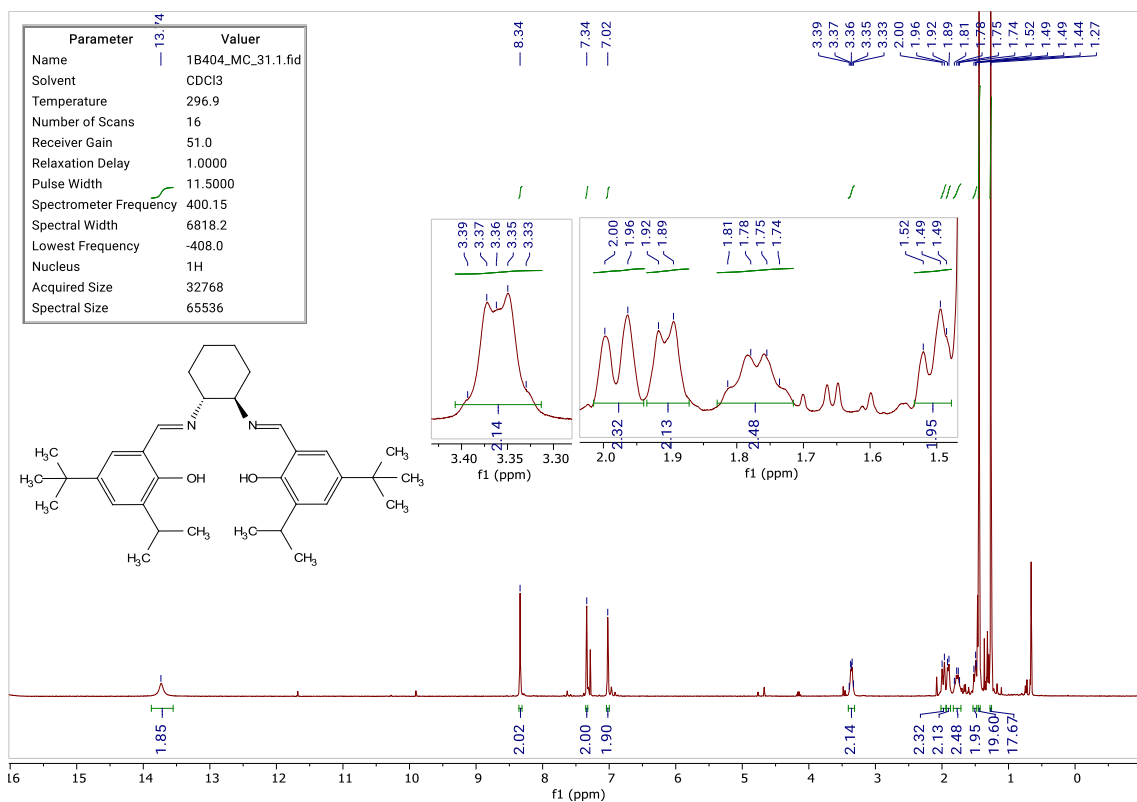
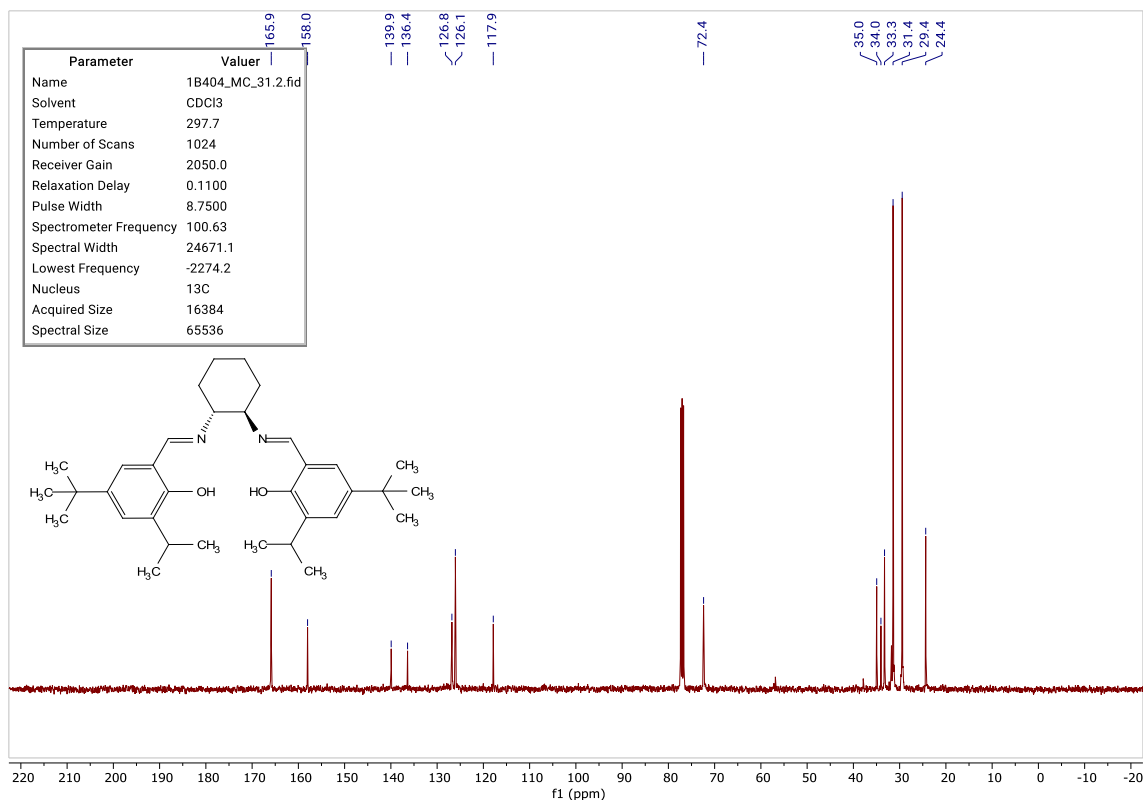
Espectro de RMN ^1H do composto 10 (400 MHz, DMSO- d_6)Espectro de RMN ^{13}C do composto 10 (100 MHz, DMSO- d_6)

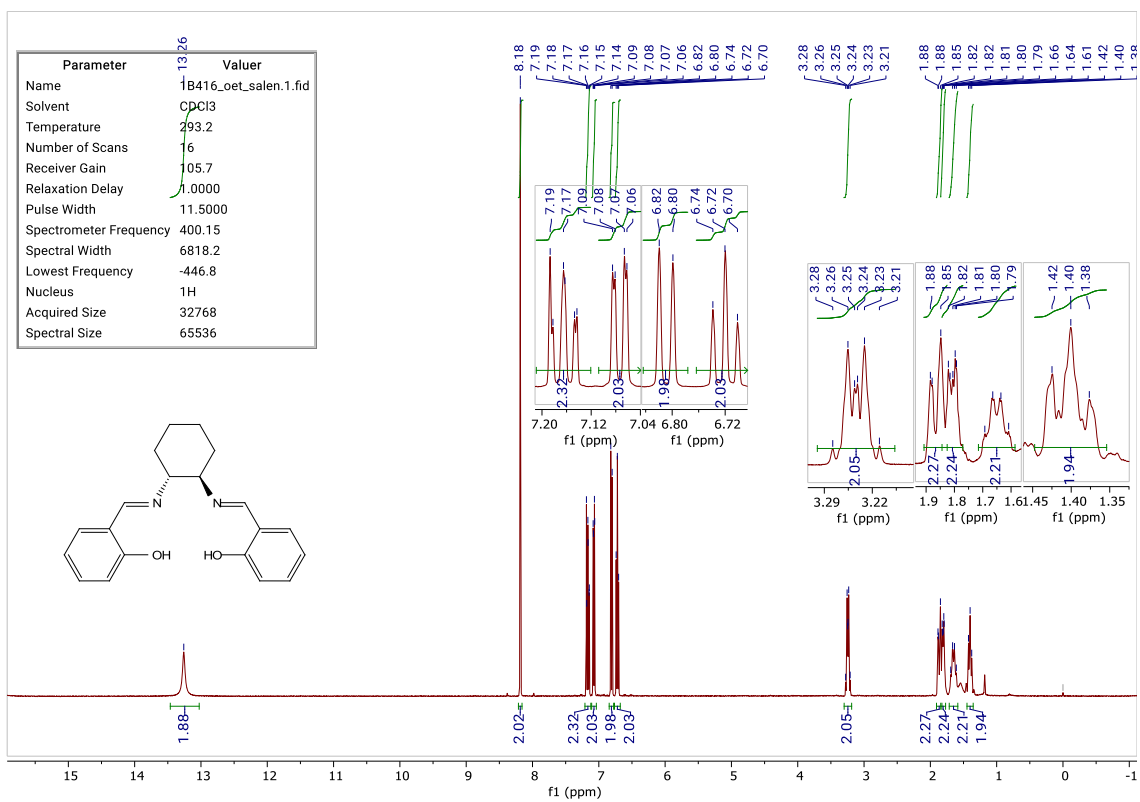
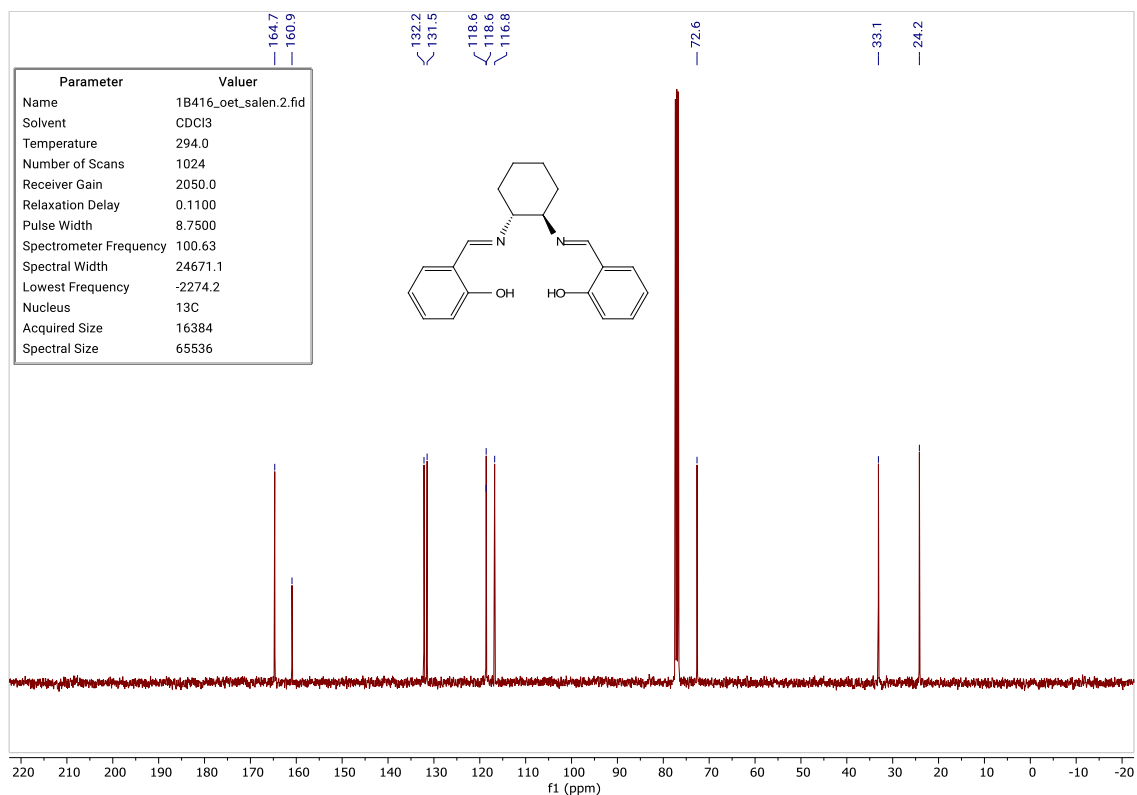
Espectro de RMN ¹H do composto 11 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 11 (100 MHz, CDCl₃)

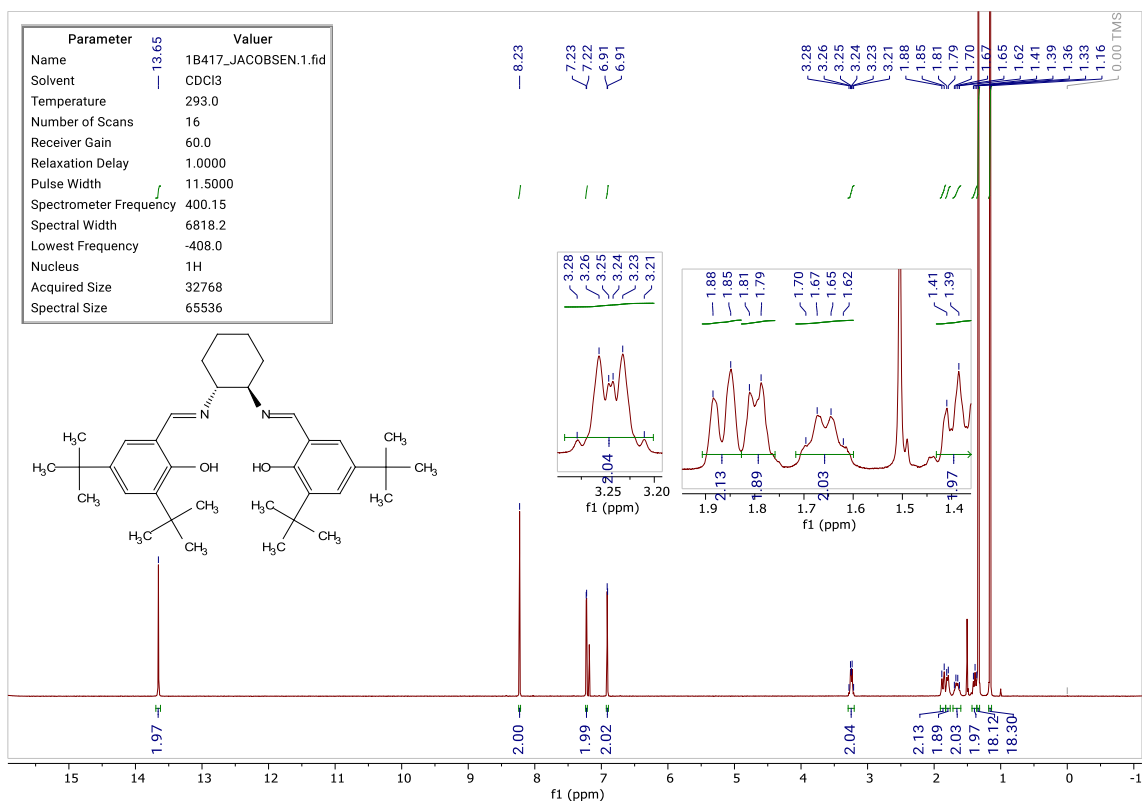
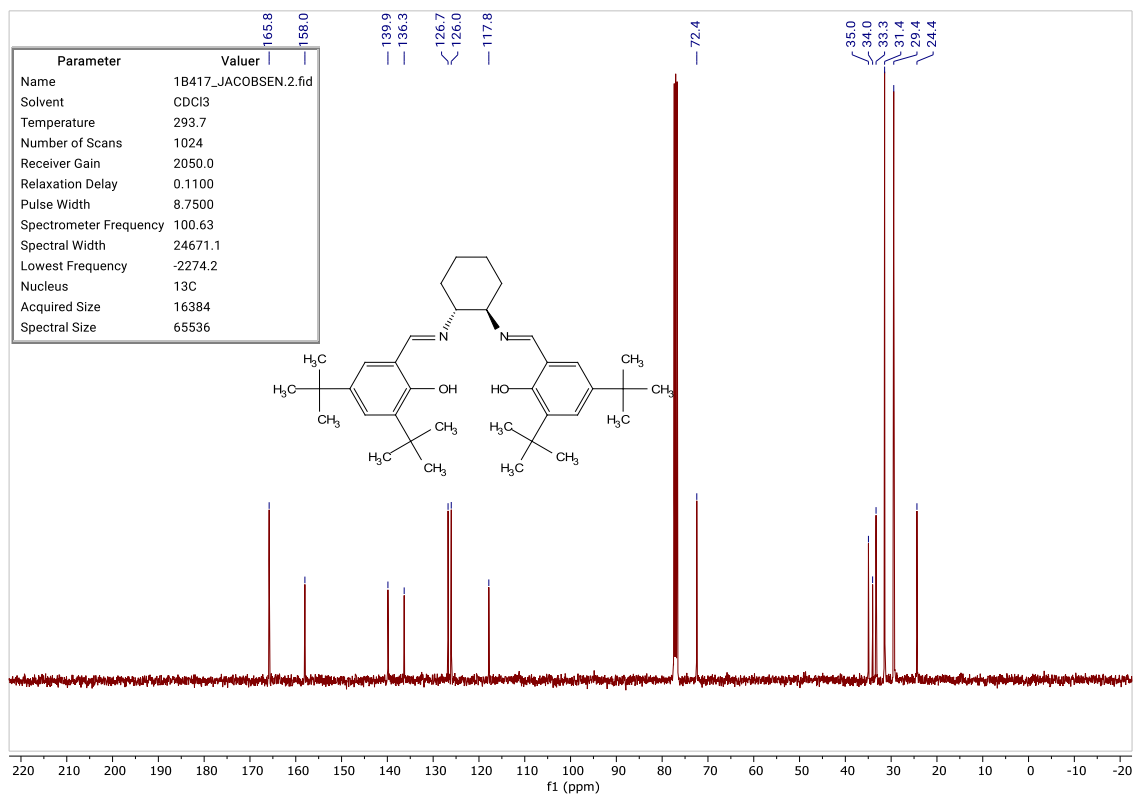
Espectro de RMN ¹H do composto 12 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 12 (100 MHz, CDCl₃)

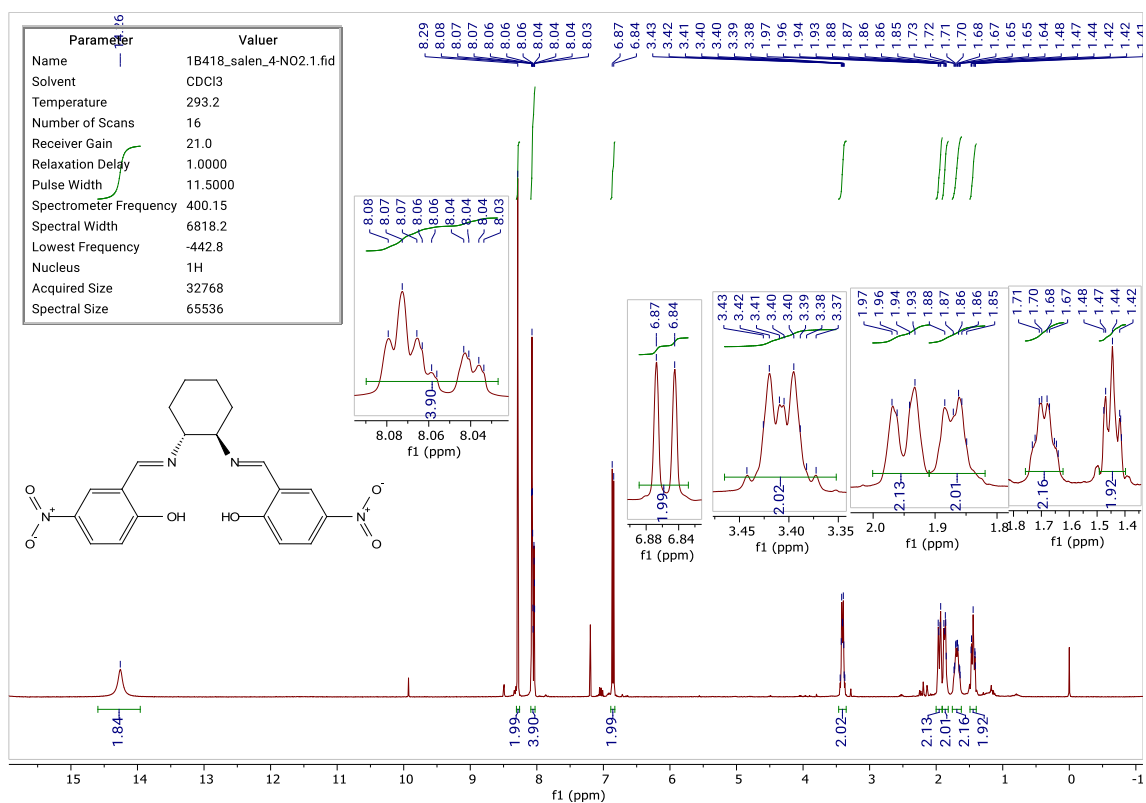
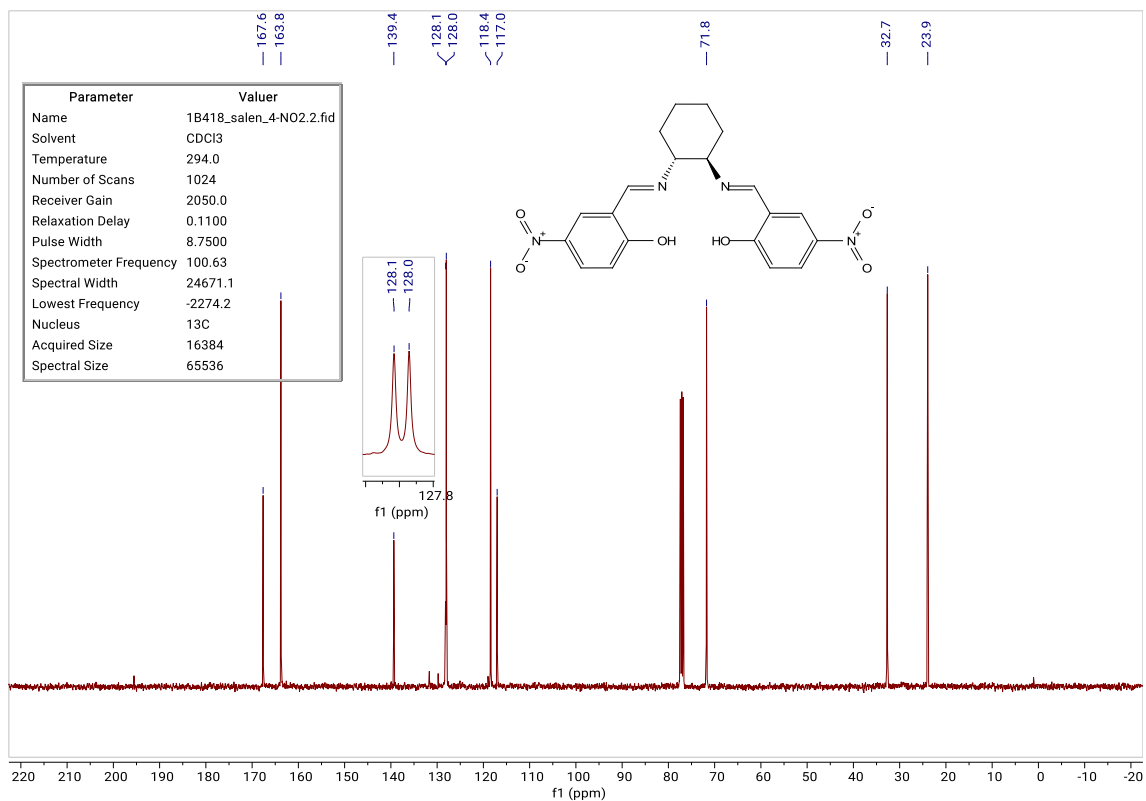
Espectro de RMN ¹H do composto 13 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 13 (100 MHz, CDCl₃)

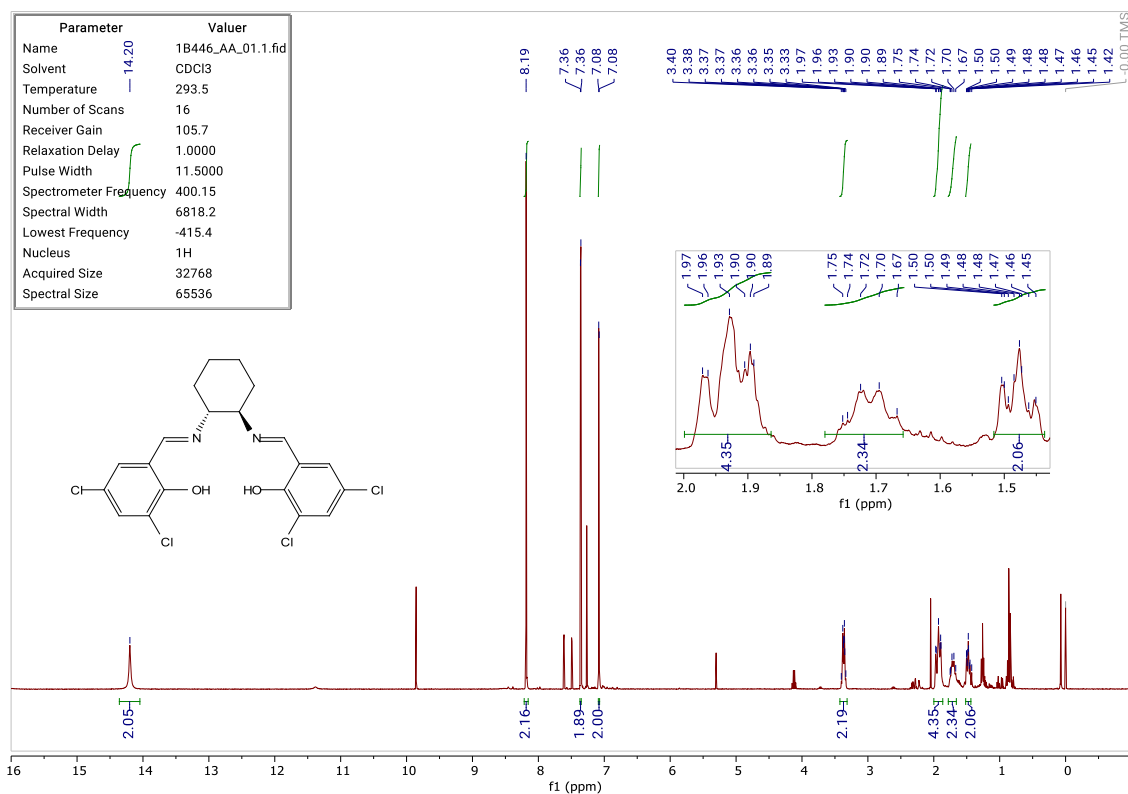
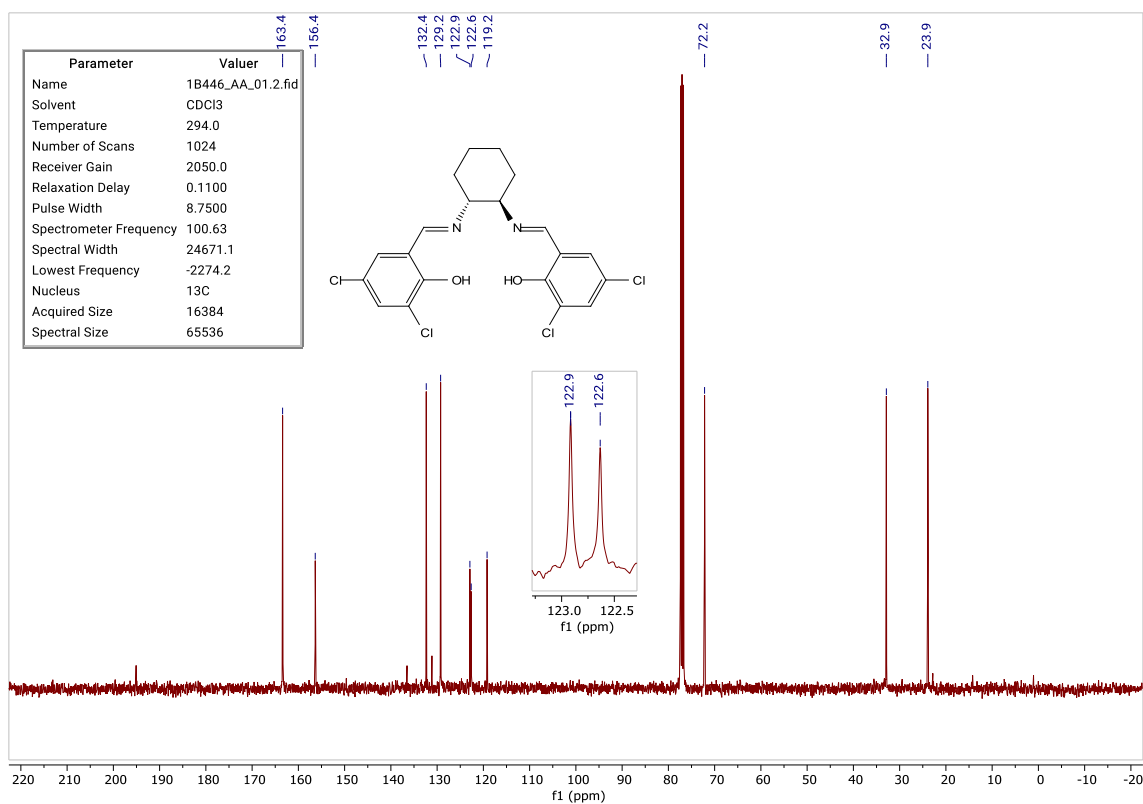
Espectro de RMN ¹H do composto 14 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 14 (100 MHz, CDCl₃)

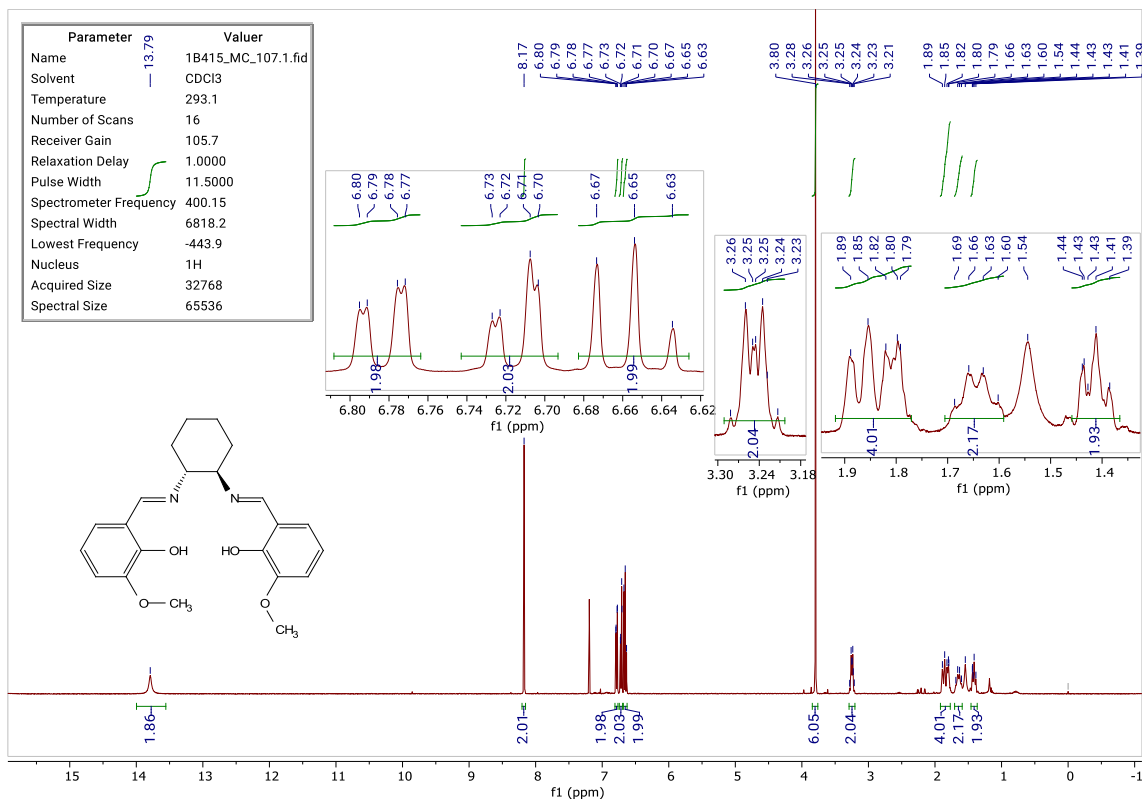
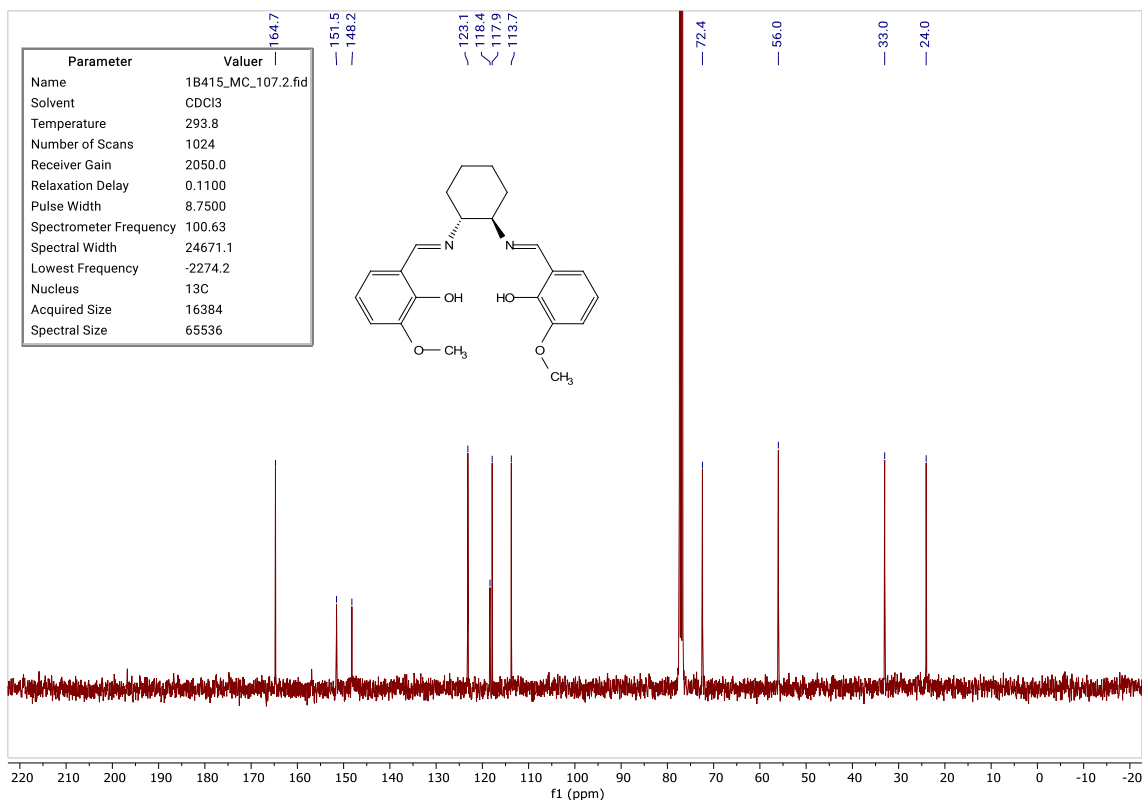
Espectro de RMN ¹H do composto 15 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 15 (100 MHz, CDCl₃)

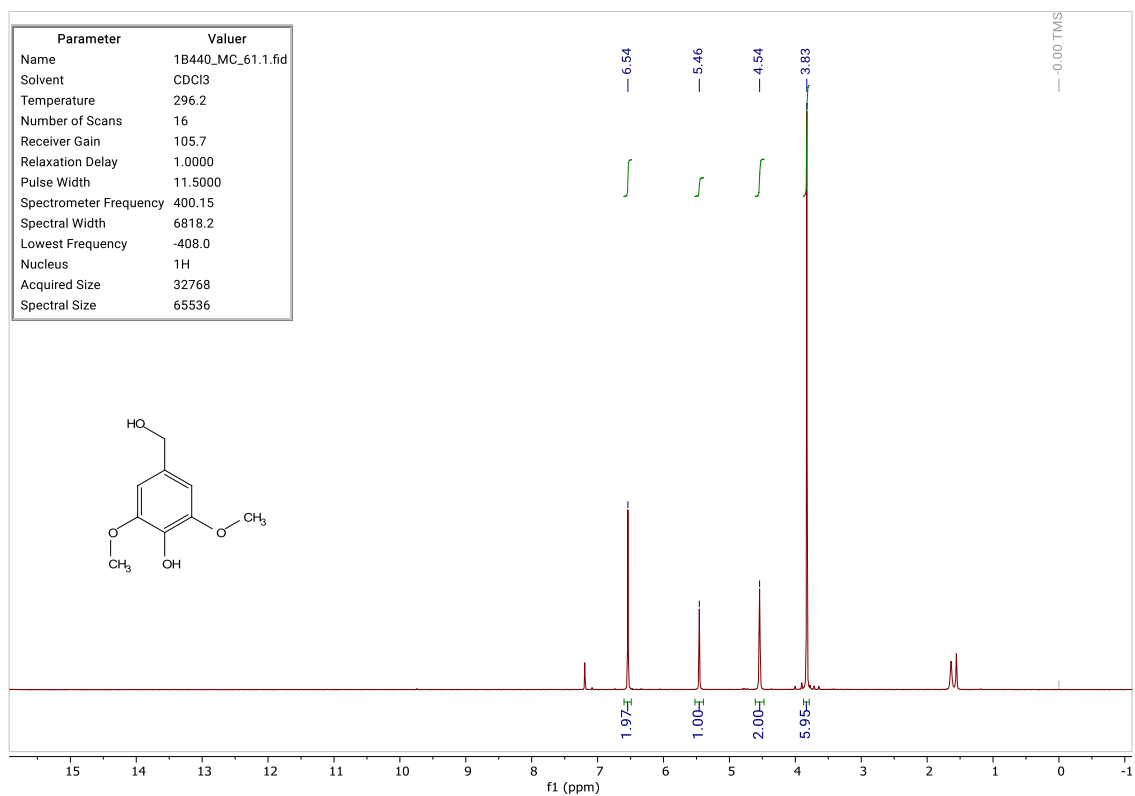
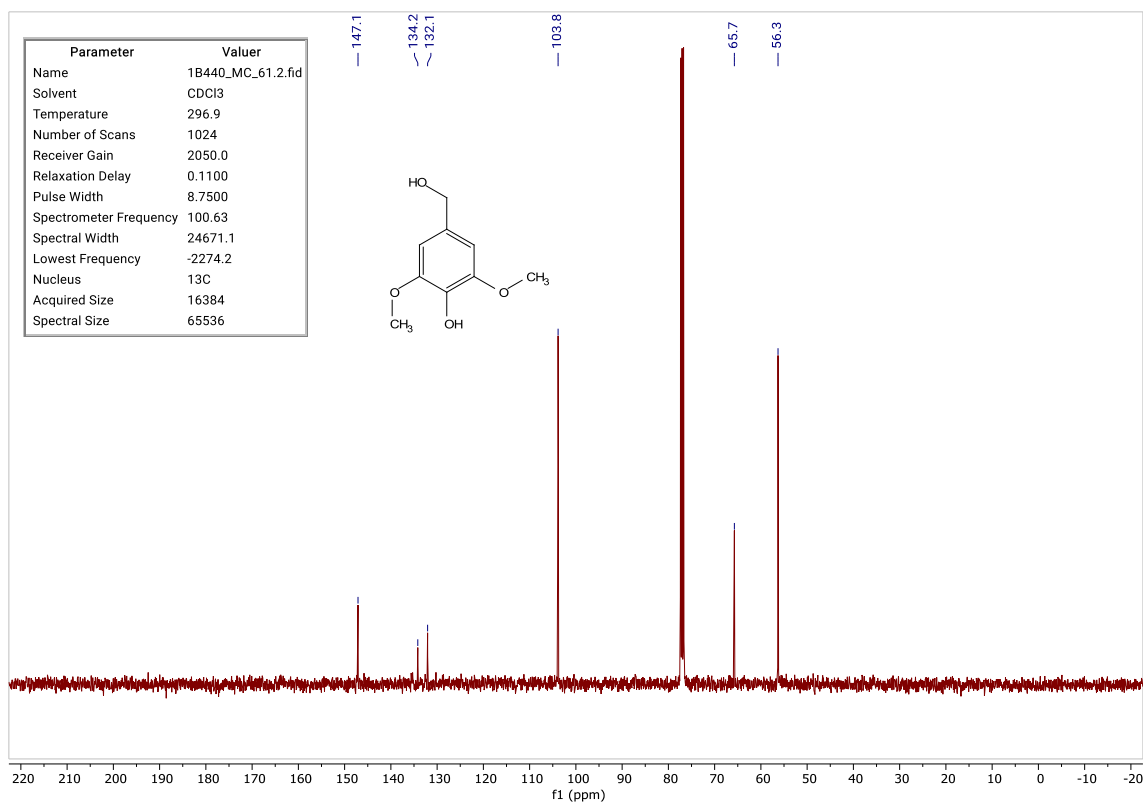
Espectro de RMN ^1H do composto 16 (400 MHz, CDCl_3)Espectro de RMN ^{13}C do composto 16 (100 MHz, CDCl_3)

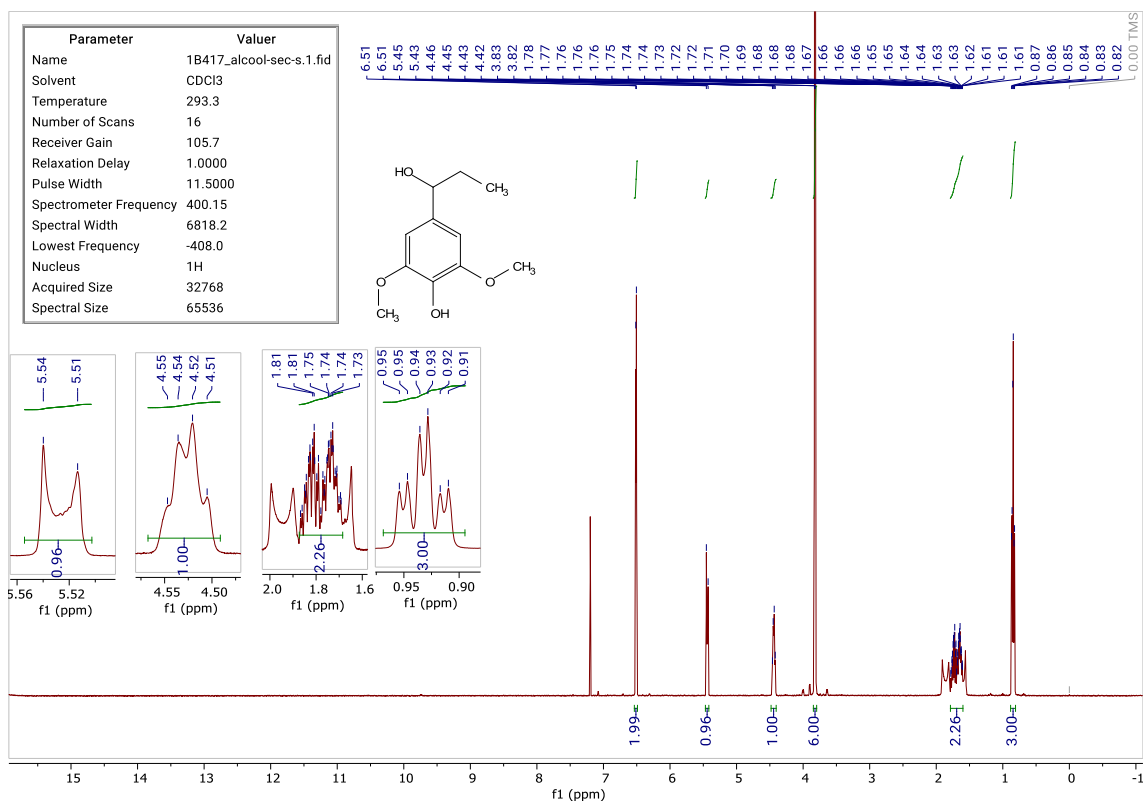
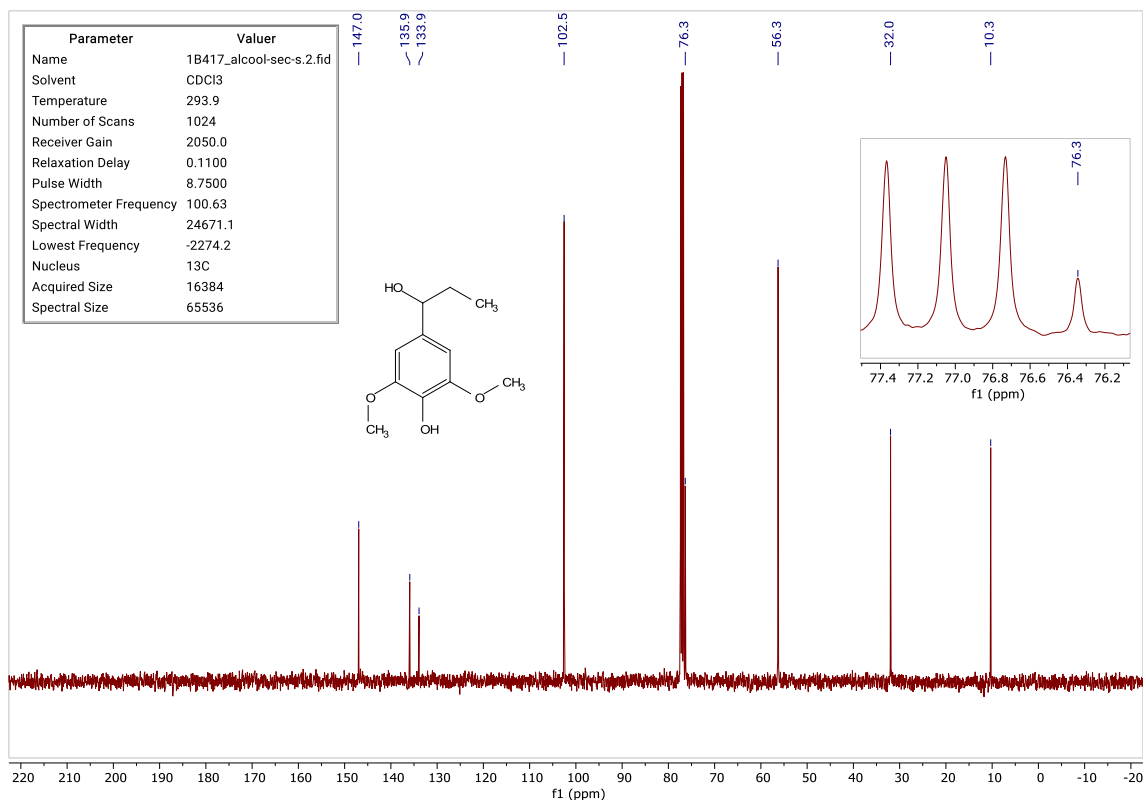
Espectro de RMN ¹H do composto 17 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 17 (100 MHz, CDCl₃)

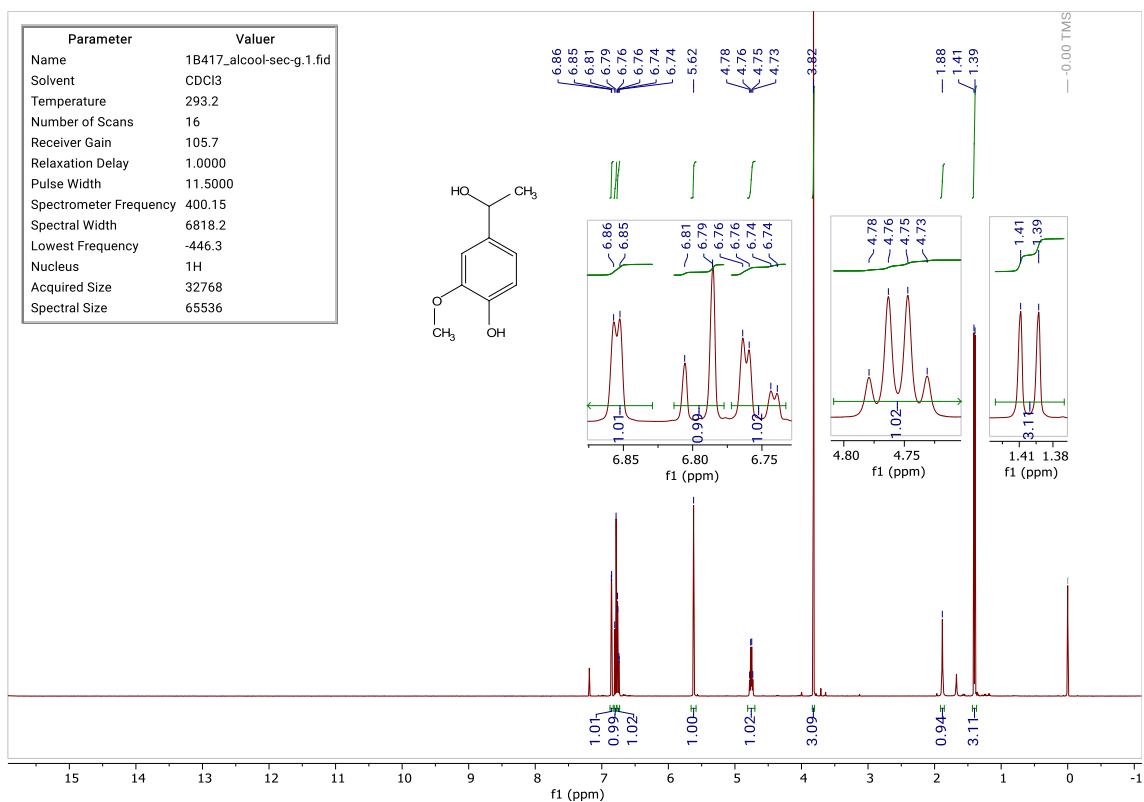
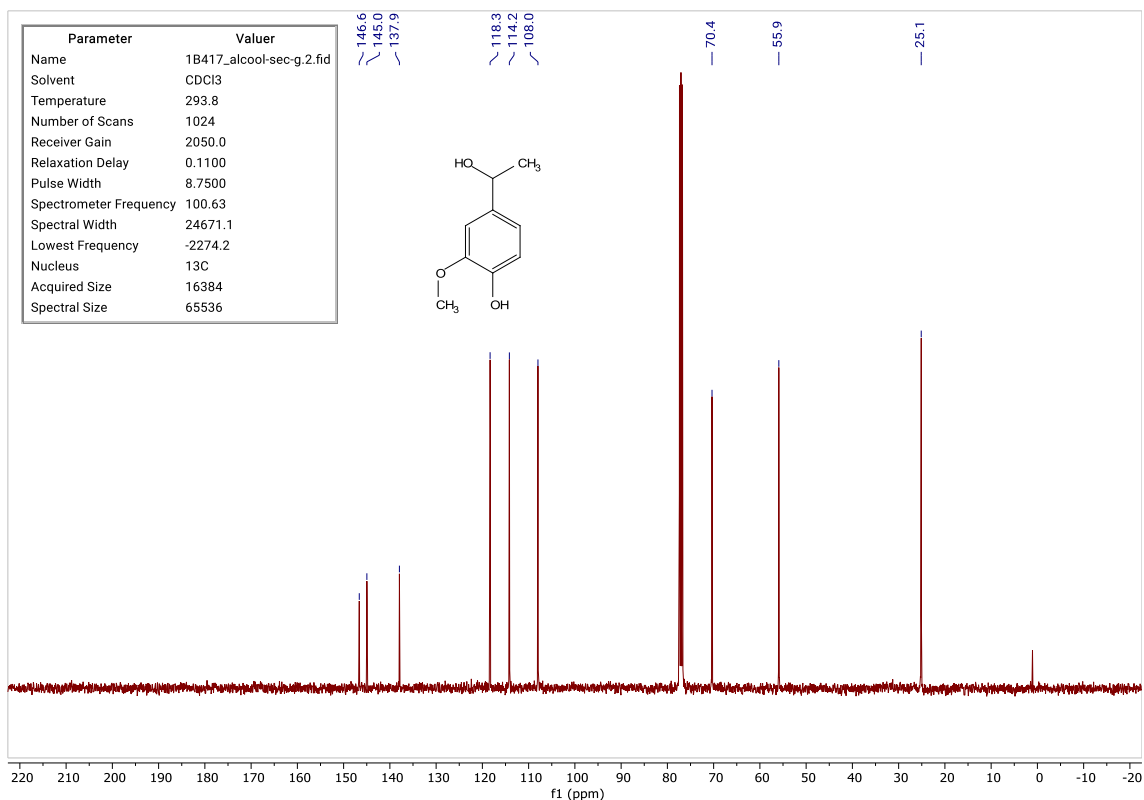
Espectro de RMN ¹H do composto 18 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 18 (100 MHz, CDCl₃)

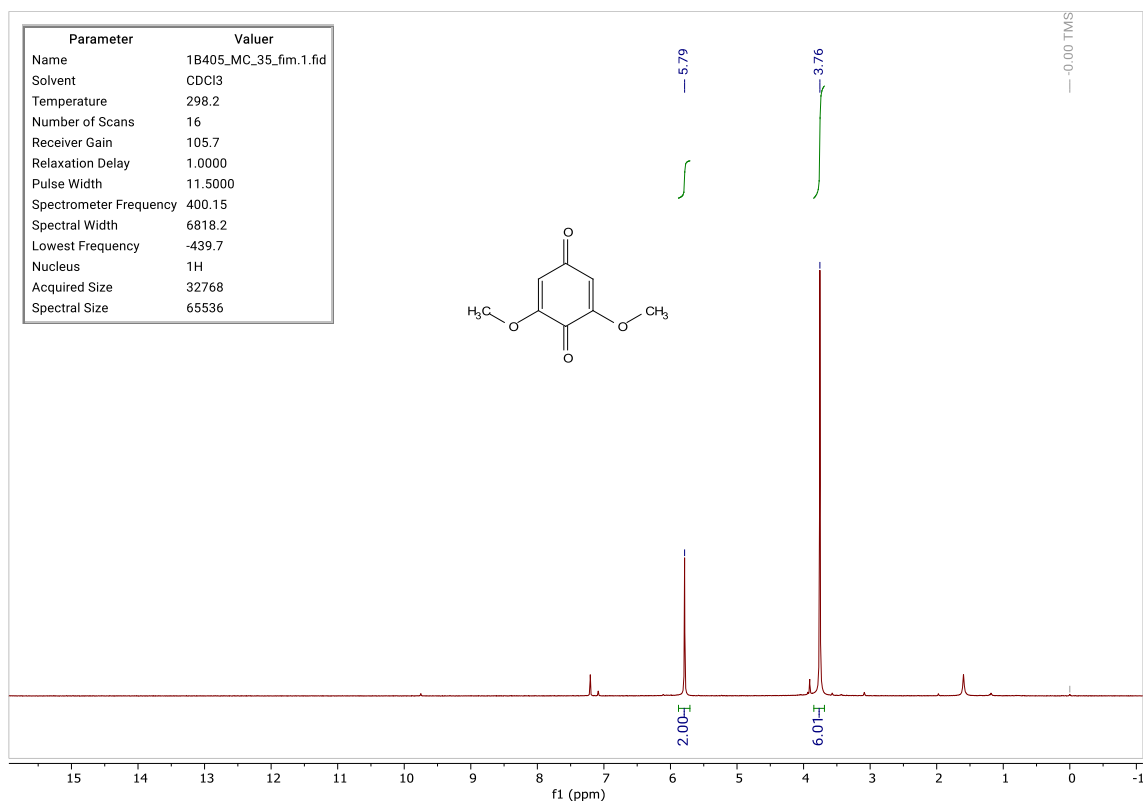
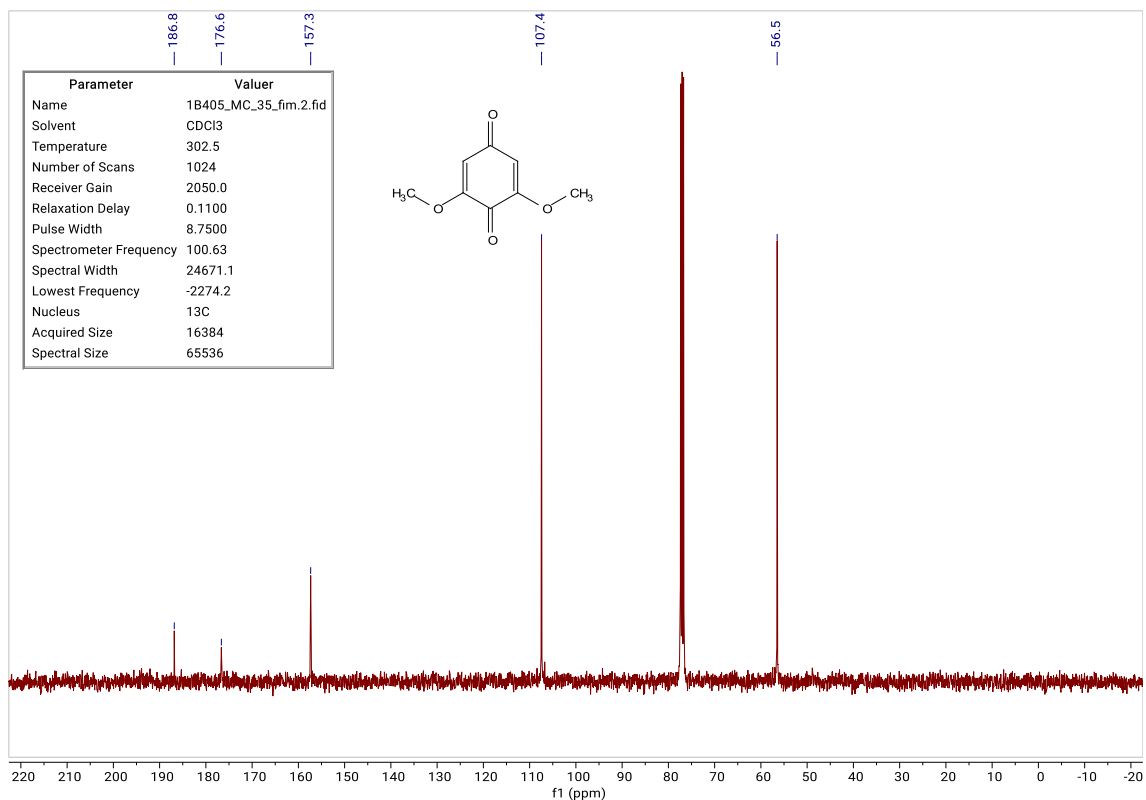
Espectro de RMN ¹H do composto 19 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 19 (100 MHz, CDCl₃)

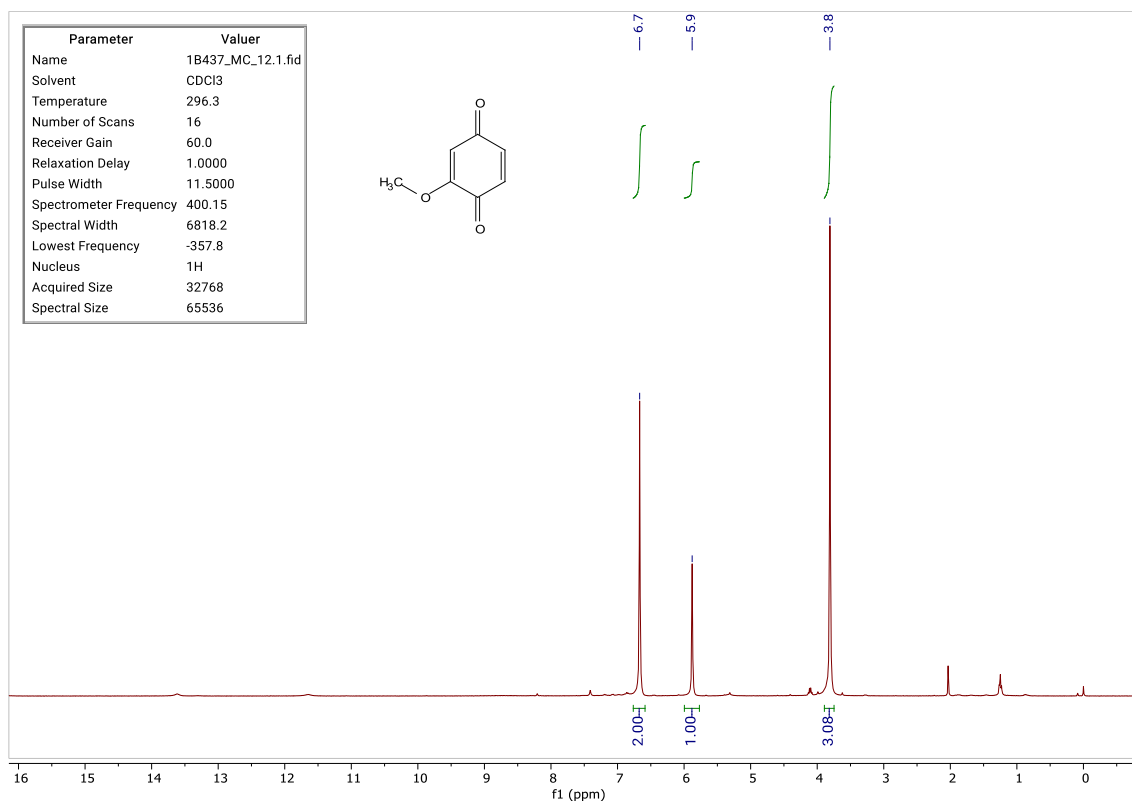
Espectro de RMN ¹H do composto 20 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 20 (100 MHz, CDCl₃)

Espectro de RMN ¹H do composto 21 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 21 (100 MHz, CDCl₃)

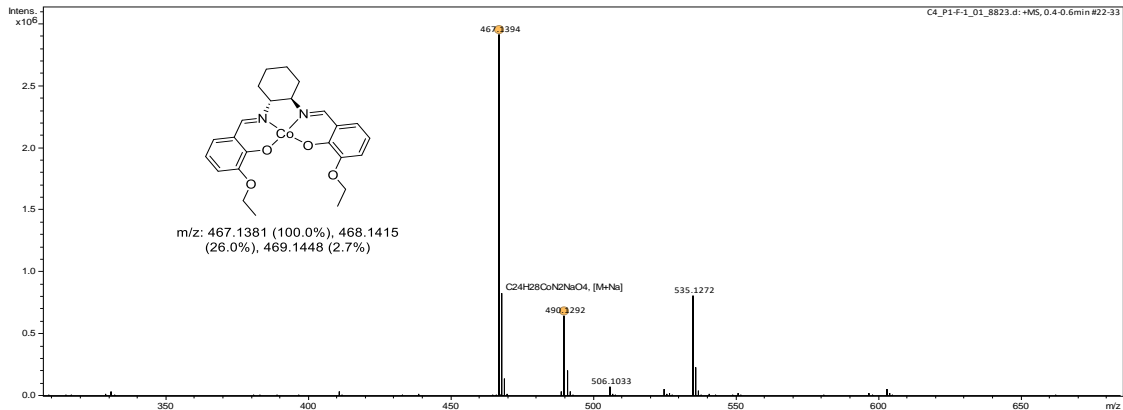
Espectro de RMN ^1H do composto 22 (400 MHz, CDCl_3)Espectro de RMN ^{13}C do composto 22 (100 MHz, CDCl_3)

Espectro de RMN ¹H do composto 23 (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto 23 (100 MHz, CDCl₃)

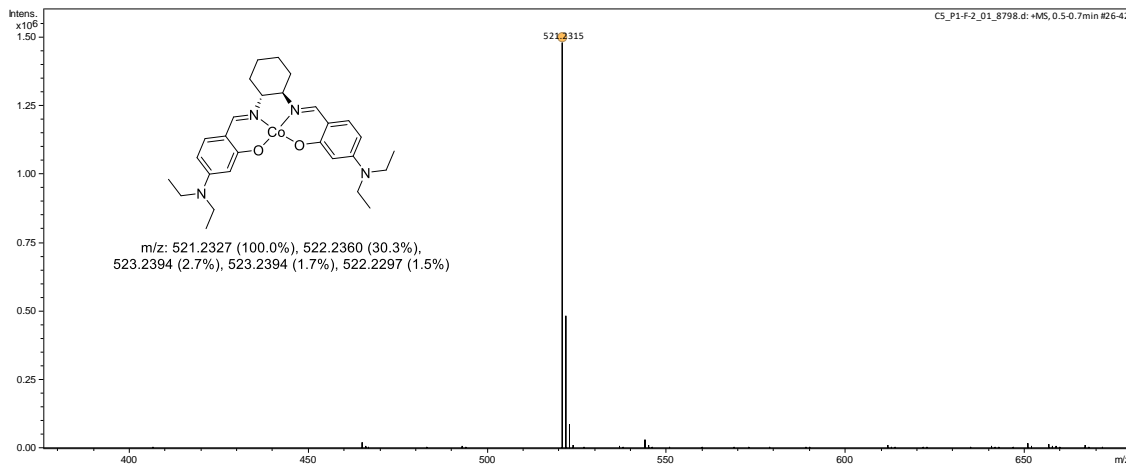
Espectro de RMN ¹H do composto **24** (400 MHz, CDCl₃)Espectro de RMN ¹³C do composto **24** (100 MHz, CDCl₃)

Espectro de RMN ¹H do composto **25** (400 MHz, CDCl₃)

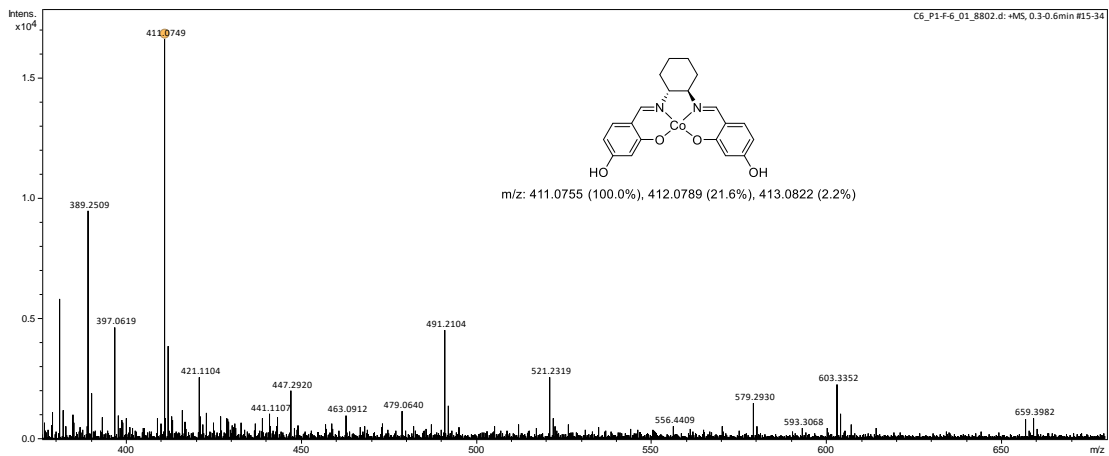
Espectrometria de massas de alta resolução



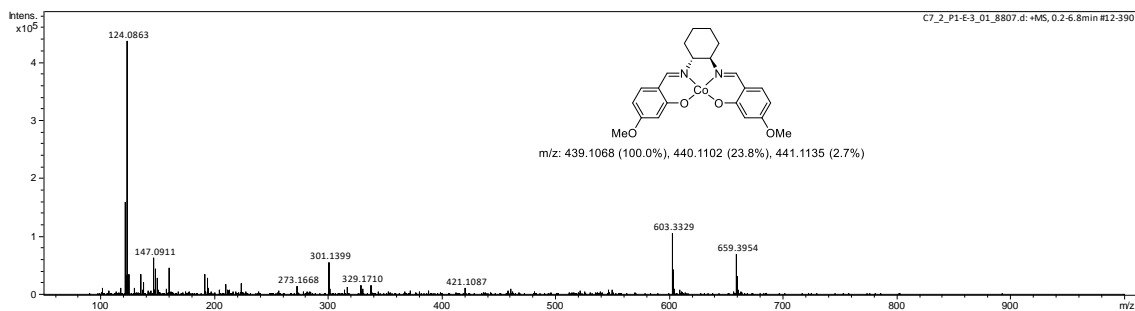
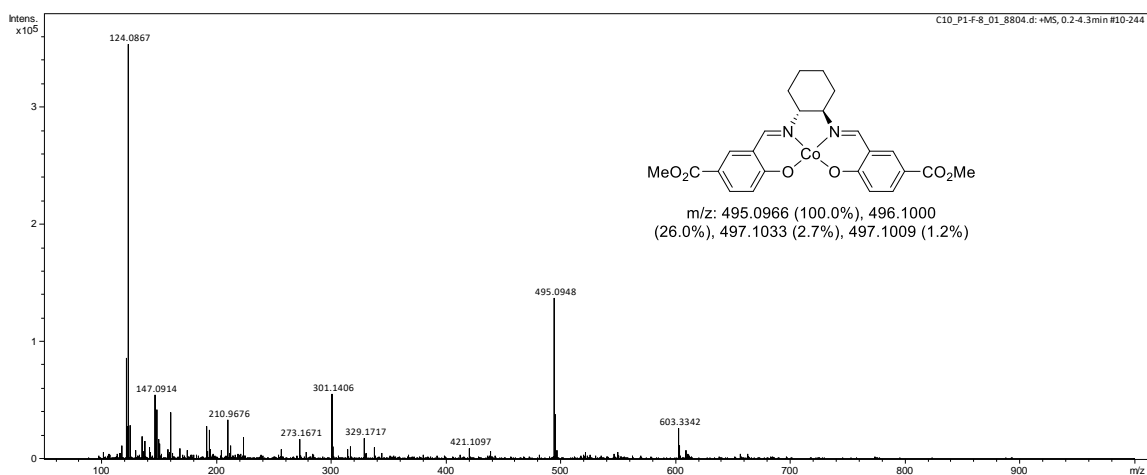
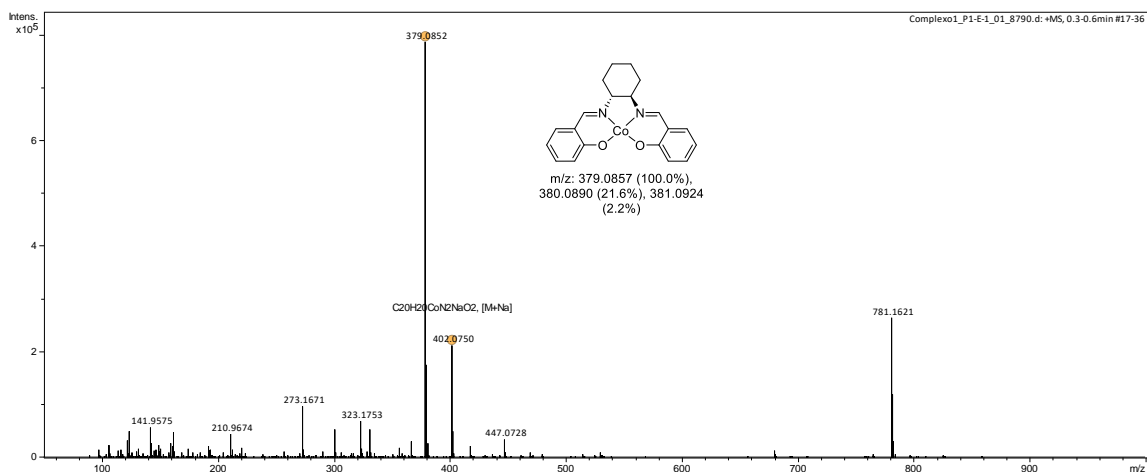
Espectro de massas (ESI) do composto s14

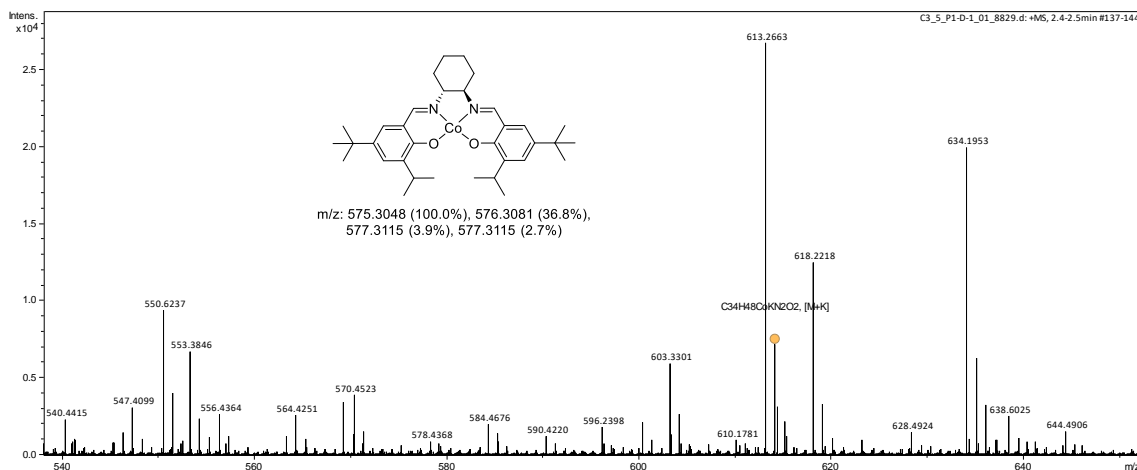


Espectro de massas (ESI) do composto s15

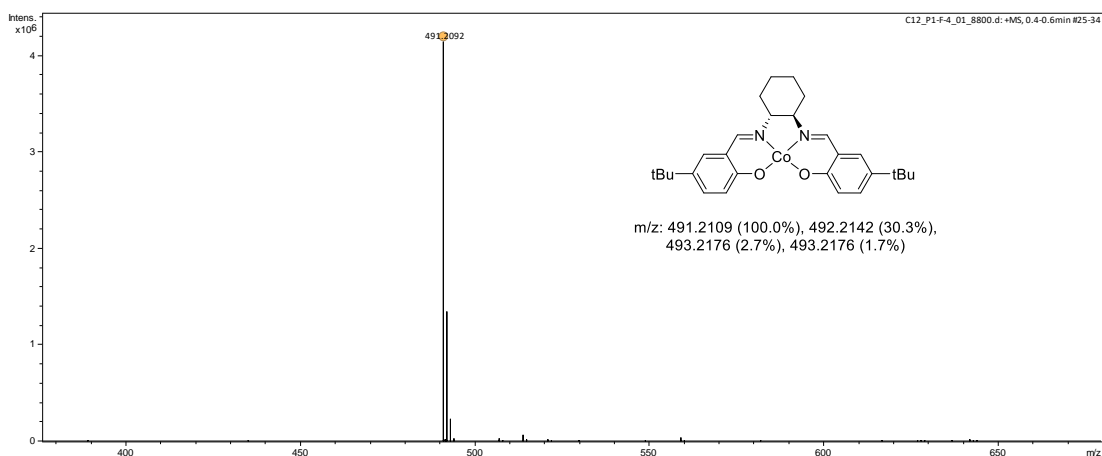


Espectro de massas (ESI) do composto s16

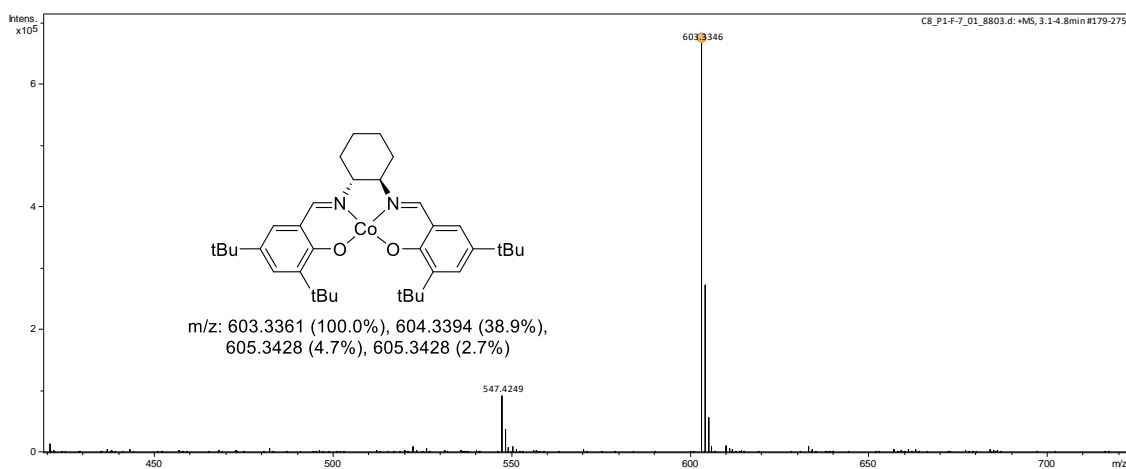
Espectro de massas (ESI) do composto **s17**Espectro de massas (ESI) do composto **s18**Espectro de massas (ESI) do composto **s20**



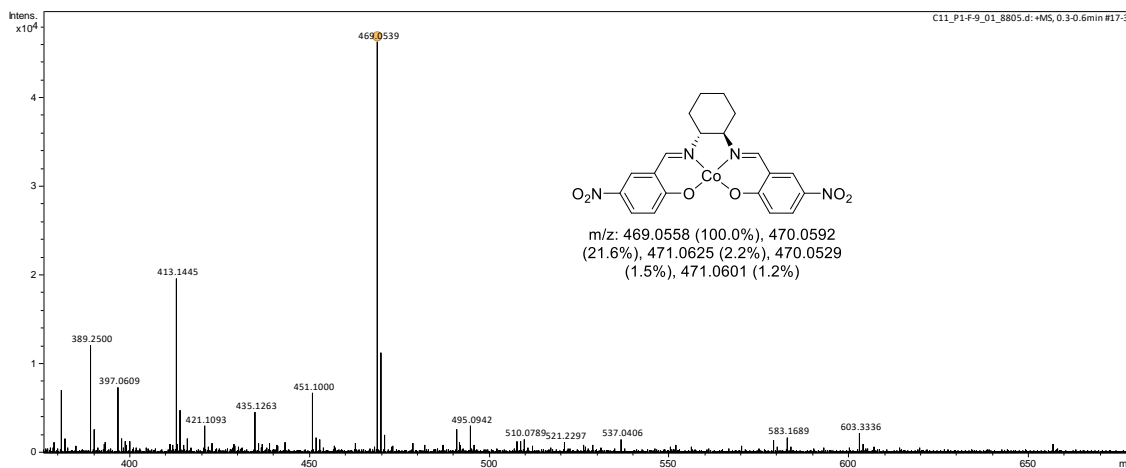
Espectro de massas (ESI) do composto s21



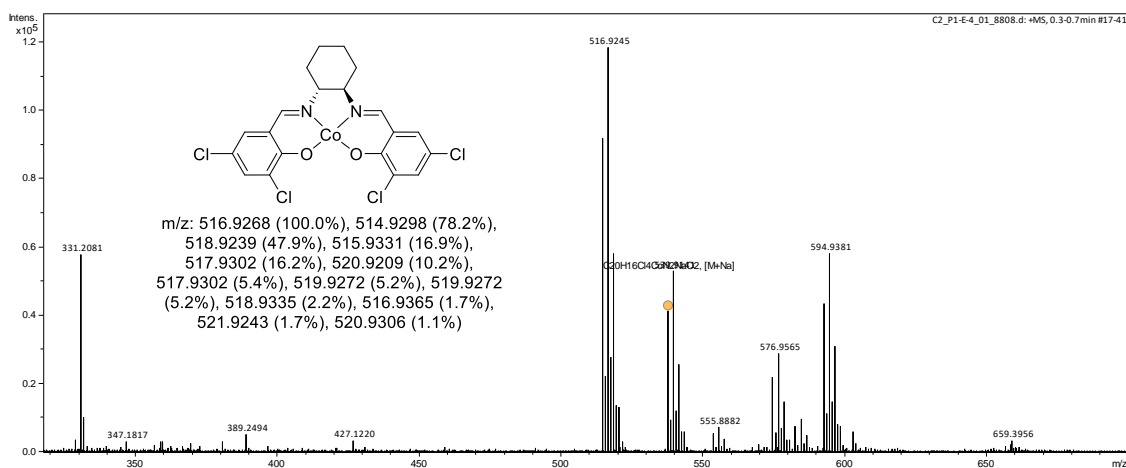
Espectro de massas (ESI) do composto s22



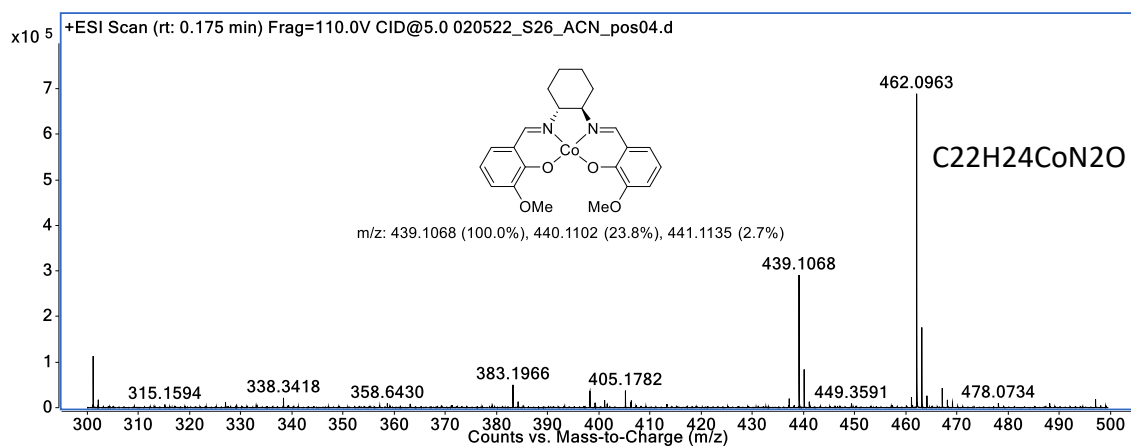
Espectro de massas (ESI) do composto s23



Espectro de massas (ESI) do composto s24

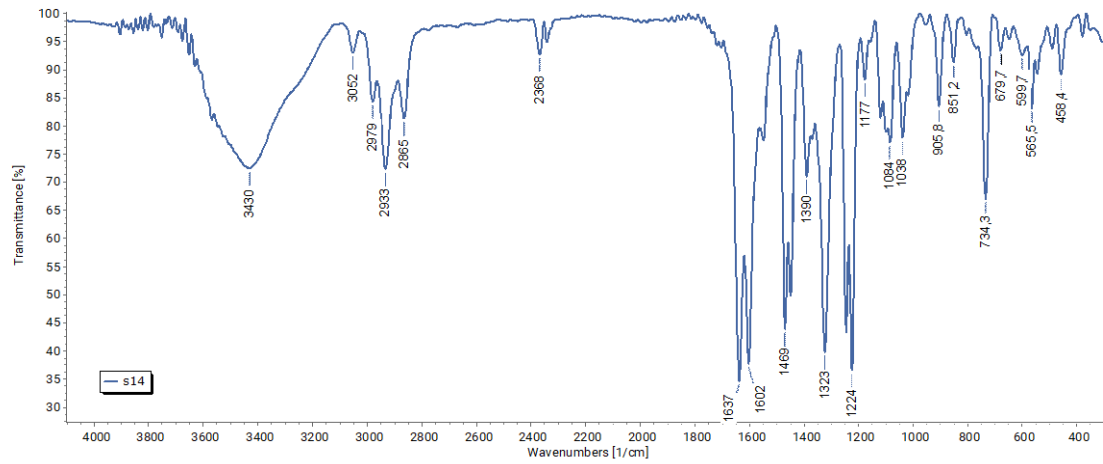


Espectro de massas (ESI) do composto s25

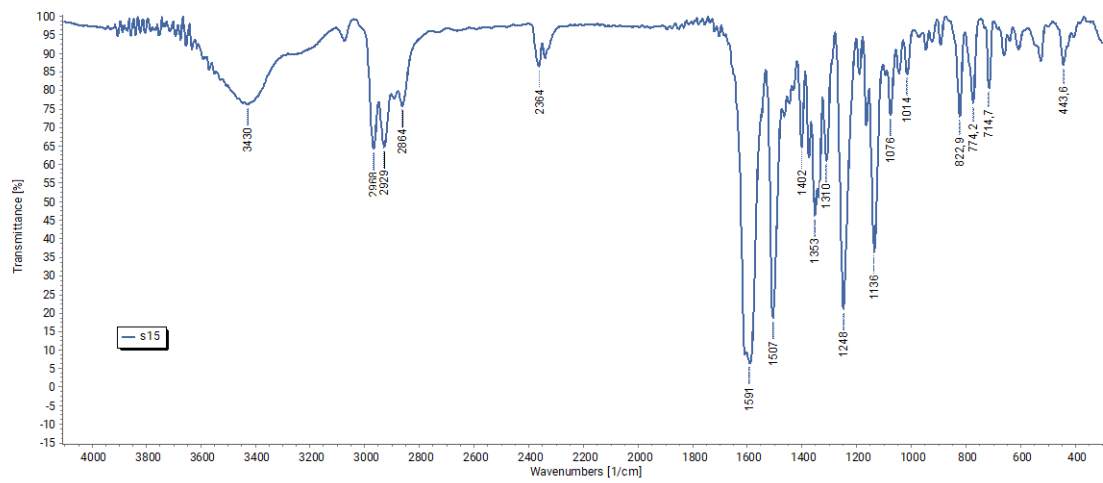


Espectro de massas (ESI) do composto s26

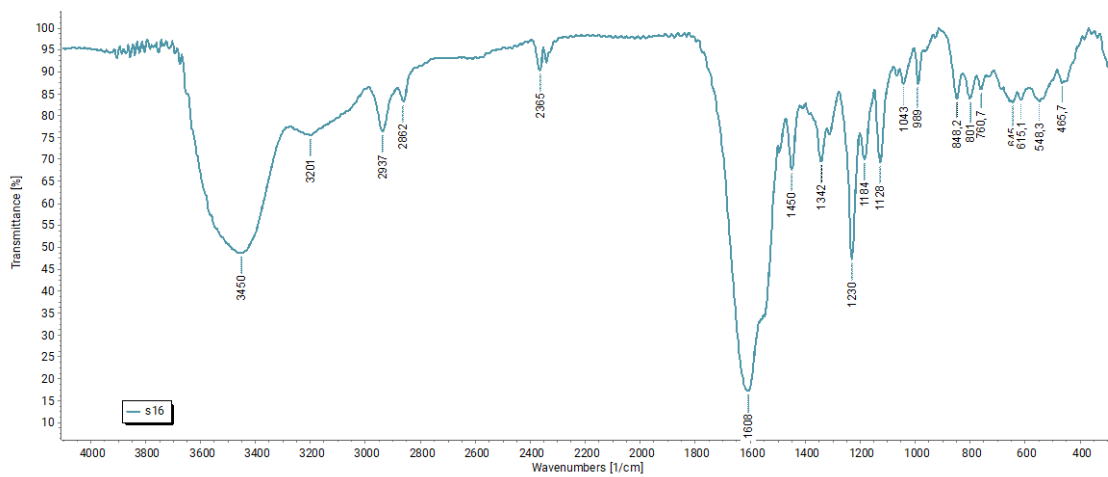
Espectroscopias no Infravermelho



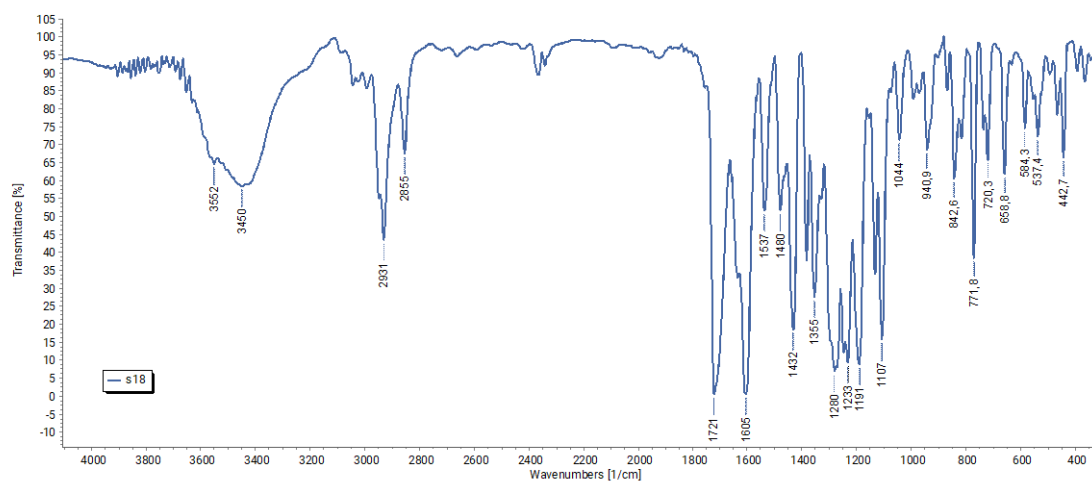
Infravermelho do composto s14



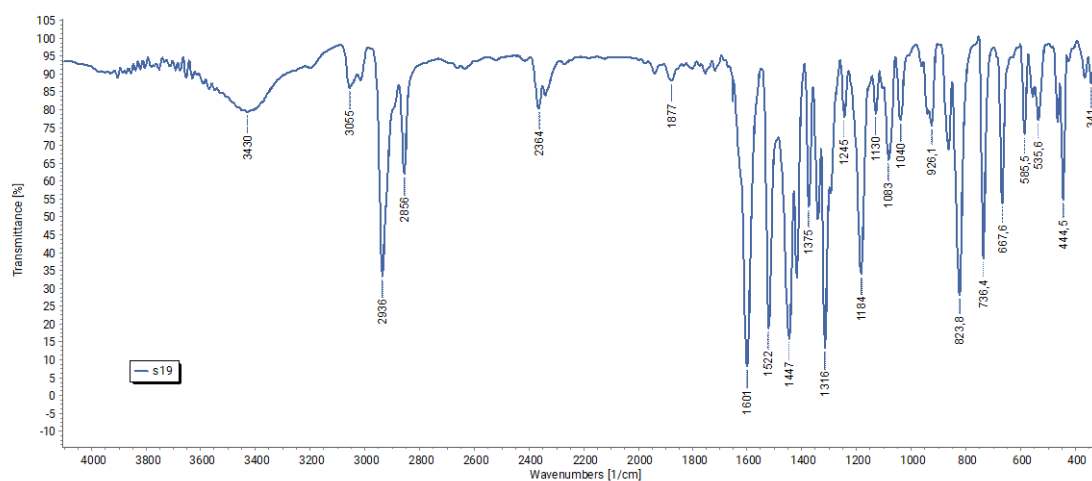
Infravermelho do composto s15



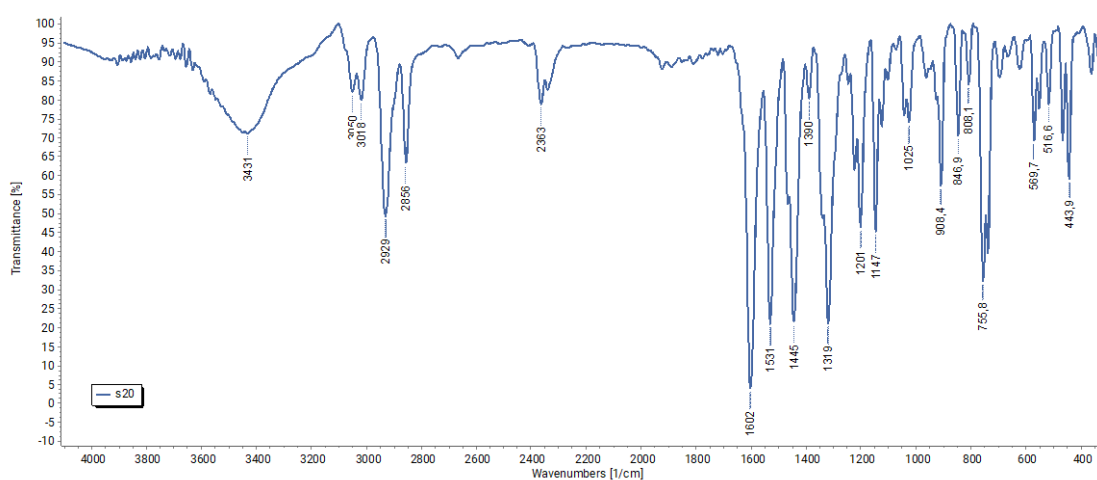
Infravermelho do composto s16



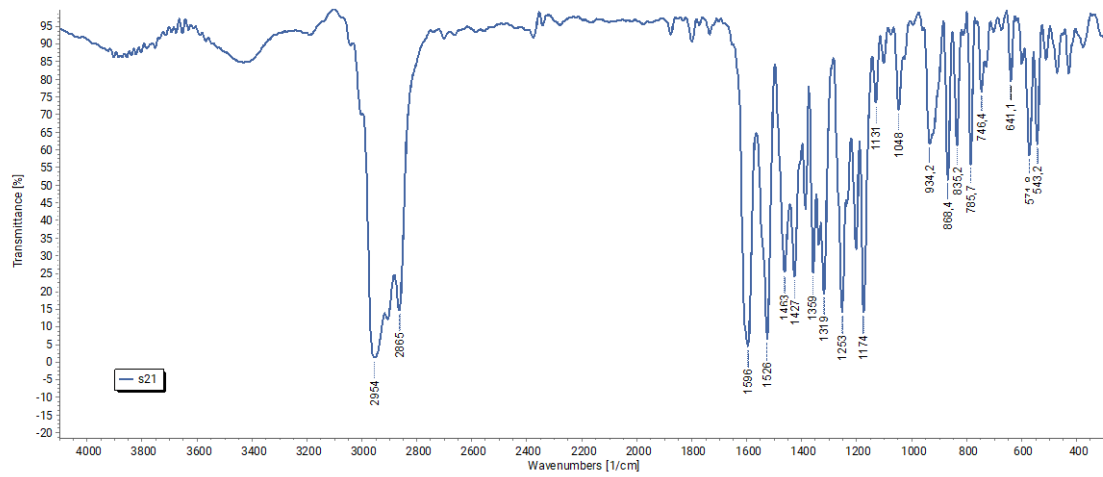
Infravermelho do composto s18



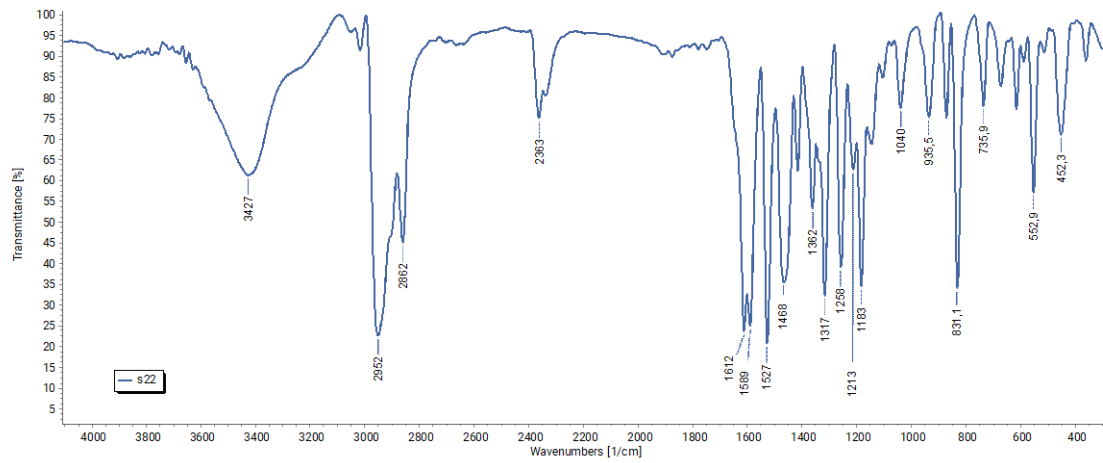
Infravermelho do composto s19



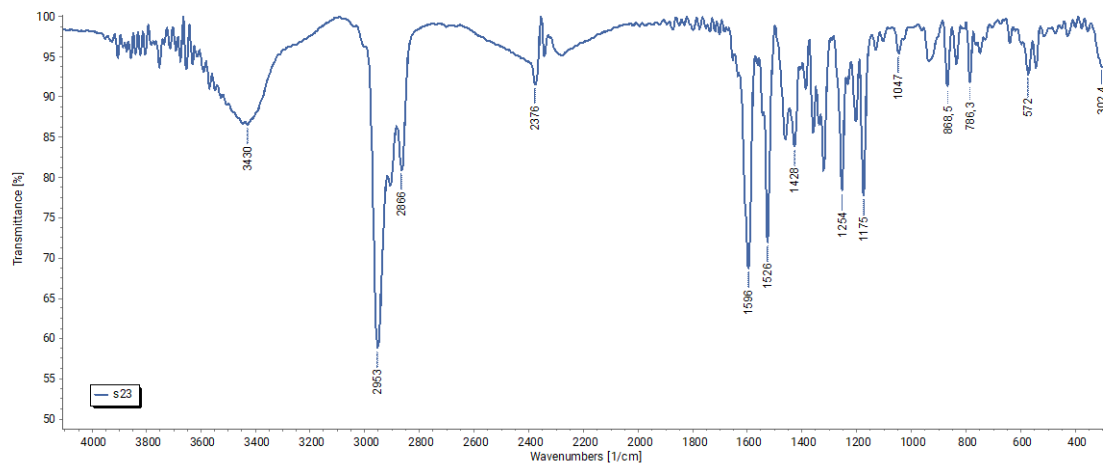
Infravermelho do composto s20



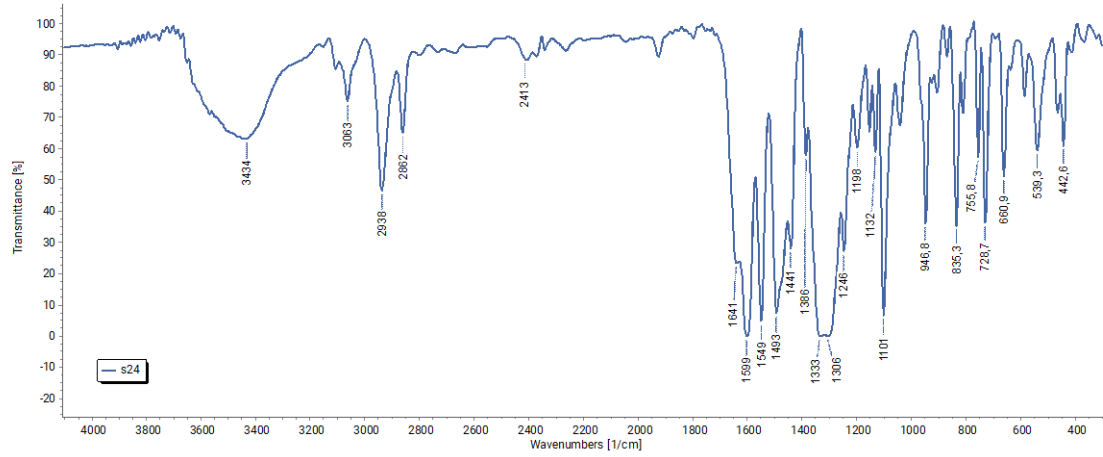
Infravermelho do composto s21



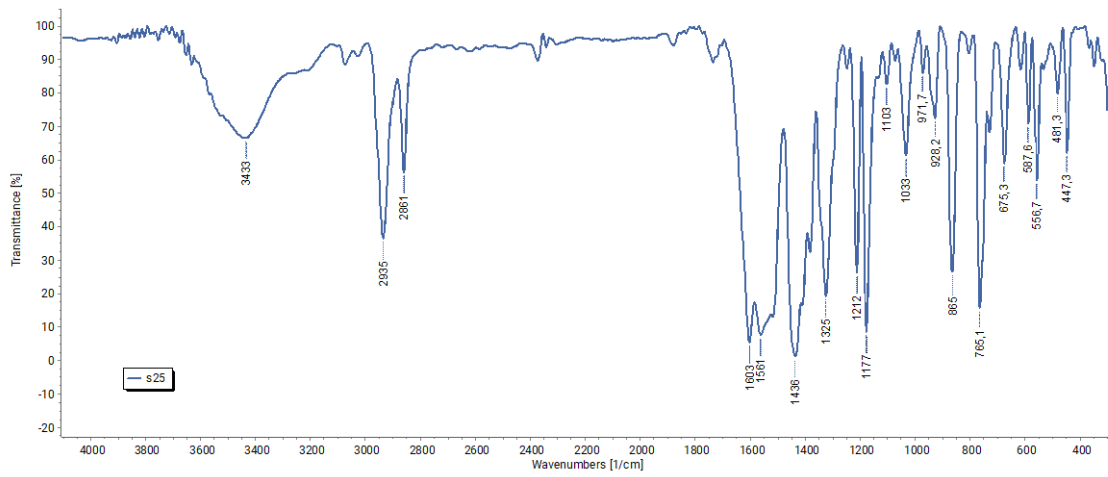
Infravermelho do composto s22



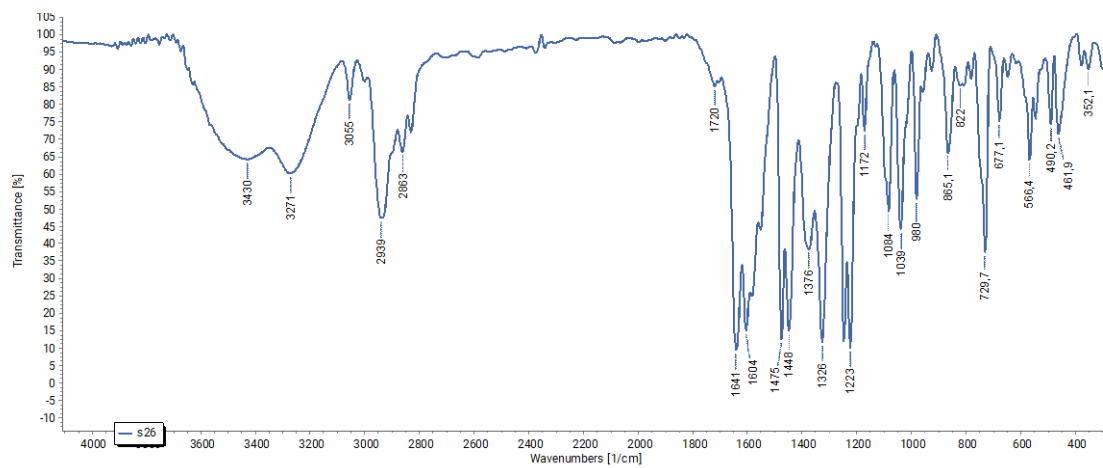
Infravermelho do composto s23



Infravermelho do composto s24



Infravermelho do composto s25



Infravermelho do composto s26

Dados quantitativos dos experimentos de GC-MS

Dados referentes às quantificações via GC-MS para a reação de oxidação sem uso de piridina.

| Cat. | 0,0 py a 5 min | | | Média | | | 0,0 py a 30min | | | Média | | |
|------|----------------|-------|-------|-------|-------|-------|----------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | R (%) | C (%) | S (%) | R (%) | C (%) | S (%) | R (%) | C (%) | S (%) | R (%) | C (%) | S (%) |
| s14 | 3.9 | 28.2 | 13.9 | 2.2 | 22.6 | 8.6 | 26.4 | 64.5 | 40.9 | 18.4 | 57.6 | 31.4 |
| | 0.5 | 17.0 | 3.2 | | | | 16.9 | 54.7 | 30.8 | | | |
| | | | | | | | 12.1 | 53.5 | 22.5 | | | |
| s15 | 28.0 | 64.0 | 43.8 | 20.8 | 48.2 | 42.8 | 55.7 | 97.6 | 57.1 | 51.4 | 91.6 | 56.1 |
| | 13.6 | 32.5 | 41.8 | | | | 47.1 | 85.6 | 55.1 | | | |
| | | | | | | | | | | | | |
| s16 | 1.1 | 11.7 | 9.3 | 0.6 | 14.5 | 5.0 | 23.4 | 33.1 | 70.5 | 12.2 | 35.3 | 34.8 |
| | 0.1 | 17.2 | 0.7 | | | | 10.1 | 41.1 | 24.6 | | | |
| | | | | | | | 3.0 | 31.7 | 9.4 | | | |
| s18 | 0.1 | 3.7 | 2.3 | 0.1 | 5.5 | 2.4 | 7.5 | 34.3 | 21.9 | 4.0 | 32.4 | 11.4 |
| | 0.2 | 7.4 | 2.5 | | | | 0.6 | 24.5 | 2.3 | | | |
| | | | | | | | 3.8 | 38.3 | 9.8 | | | |
| s19 | 1.6 | 15.6 | 10.3 | 0.8 | 11.3 | 5.1 | 31.9 | 77.4 | 41.2 | 22.1 | 73.3 | 29.4 |
| | 0.0 | 6.9 | 0.0 | | | | 23.8 | 77.8 | 30.5 | | | |
| | | | | | | | 10.7 | 64.7 | 16.6 | | | |
| s20 | 9.9 | 24.3 | 40.8 | 13.5 | 40.5 | 35.5 | 41.0 | 83.9 | 48.8 | 32.5 | 84.6 | 38.5 |
| | 17.2 | 56.8 | 30.2 | | | | 24.1 | 85.3 | 28.2 | | | |
| | | | | | | | | | | | | |
| s21 | 0.3 | 2.6 | 10.5 | 0.4 | 9.8 | 6.6 | 25.4 | 47.4 | 53.5 | 15.4 | 39.7 | 35.3 |
| | 0.5 | 16.9 | 2.7 | | | | 5.5 | 32.1 | 17.1 | | | |
| | | | | | | | | | | | | |
| s22 | 14.4 | 44.0 | 32.8 | 8.6 | 38.1 | 20.8 | 55.3 | 88.2 | 62.7 | 41.5 | 87.7 | 47.1 |
| | 2.9 | 32.1 | 8.9 | | | | 42.9 | 90.4 | 47.5 | | | |
| | | | | | | | 26.3 | 84.6 | 31.1 | | | |
| s23 | 0.0 | 1.0 | 0.0 | 0.0 | 1.4 | 0.0 | 9.1 | 40.9 | 22.4 | 8.6 | 25.7 | 34.5 |

| | | | | | | | | | | | | |
|-----|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| | 0.0 | 1.7 | 0.0 | | | | 14.3 | 22.7 | 63.3 | | | |
| | | | | | | | 2.4 | 13.5 | 17.8 | | | |
| s24 | 0.0 | 1.4 | 0.0 | 0.0 | 1.5 | 0.0 | 0.0 | 15.6 | 0.0 | 0.0 | 15.4 | 0.0 |
| | 0.0 | 1.5 | 0.0 | | | | 0.0 | 15.1 | 0.0 | | | |
| s25 | 0.0 | 5.2 | 0.0 | 0.0 | 4.1 | 0.0 | 0.0 | 8.2 | 0.0 | 0.0 | 8.4 | 0.0 |
| | 0.0 | 2.9 | 0.0 | | | | 0.0 | 8.6 | 0.0 | | | |
| s26 | 12.3 | 41.5 | 29.7 | 10.3 | 43.1 | 24.1 | 16.7 | 66.0 | 25.3 | 15.6 | 64.7 | 24.1 |
| | 8.3 | 44.7 | 18.6 | | | | 14.5 | 63.3 | 22.9 | | | |

Dados referentes às quantificações via GC-MS para a reação de oxidação com o uso de piridina.

| Cat. | 0,5 py a 5 min | | | Média | | | 0,5 py a 30min | | | Média | | |
|------|----------------|-------|-------|-------|-------|-------|----------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | R (%) | C (%) | S (%) | R (%) | C (%) | S (%) | R (%) | C (%) | S (%) | R (%) | C (%) | S (%) |
| s14 | 0.4 | 4.4 | 9.1 | 0.9 | 4.0 | 23.1 | 7.4 | 23.1 | 31.9 | 7.1 | 24.2 | 29.6 |
| | 1.4 | 3.7 | 37.0 | | | | 6.9 | 25.3 | 27.2 | | | |
| s15 | 31.3 | 52.4 | 59.7 | 33.6 | 52.5 | 64.0 | 100.0 | 100.0 | 100.0 | 100.0 | 100.0 | 100.0 |
| | 35.9 | 52.5 | 68.3 | | | | 100.0 | 100.0 | 100.0 | | | |
| s16 | 2.8 | 13.8 | 20.4 | 1.5 | 8.5 | 13.2 | 6.5 | 27.7 | 23.6 | 5.6 | 26.1 | 21.2 |
| | 0.2 | 3.3 | 6.0 | | | | 4.6 | 24.4 | 18.8 | | | |
| s18 | 32.9 | 41.4 | 79.6 | 37.2 | 41.5 | 89.8 | 91.0 | 91.0 | 100 | 100.0 | 91.2 | 109.6 |
| | 41.5 | 41.5 | 100.0 | | | | 91.4 | 91.4 | 100 | | | |
| s19 | 13.8 | 49.4 | 27.9 | 13.6 | 48.4 | 28.2 | 88.8 | 94.6 | 93.9 | 87.9 | 93.1 | 94.4 |
| | 13.5 | 47.3 | 28.5 | | | | 86.9 | 91.6 | 94.8 | | | |
| s20 | 47.4 | 52.4 | 90.4 | 46.9 | 51.6 | 90.9 | 100.0 | 100.0 | 100.0 | 100.0 | 100.0 | 100.0 |
| | 46.4 | 50.8 | 91.4 | | | | 100.0 | 100.0 | 100.0 | | | |
| s21 | 0.0 | 13.1 | 0.0 | 0.0 | 12.9 | 0.0 | 2.4 | 28.2 | 8.7 | 2.4 | 27.8 | 8.7 |
| | 0.0 | 12.7 | 0.0 | | | | 2.4 | 27.4 | 8.8 | | | |
| s22 | 37.0 | 48.3 | 76.6 | 40.0 | 47.4 | 84.6 | 100.0 | 100.0 | 100.0 | 100.0 | 100.0 | 100.0 |
| | 43.0 | 46.5 | 92.5 | | | | 100.0 | 100.0 | 100.0 | | | |

| | | | | | | | | | | | | |
|------------|------|------|------|-----|------|------|------|------|------|------|------|------|
| s23 | 0.4 | 5.5 | 7.2 | 0.4 | 5.0 | 7.5 | 13.7 | 27.8 | 49.4 | 10.1 | 21.4 | 46.6 |
| | 0.4 | 4.5 | 7.9 | | | | 6.5 | 15.0 | 43.7 | | | |
| s24 | 0.0 | 1.5 | 0.0 | 0.0 | 1.5 | 0.0 | 0.0 | 15.9 | 0.0 | 0.0 | 15.6 | 0.0 |
| | 0.0 | 1.4 | 0.0 | | | | 0.0 | 15.3 | 0.0 | | | |
| s25 | 0.0 | 35.9 | 0.0 | 0.0 | 36.6 | 0.0 | 0.0 | 52.8 | 0.0 | 0.0 | 52.9 | 0.0 |
| | 0.0 | 37.4 | 0.0 | | | | 0.0 | 52.9 | 0.0 | | | |
| s26 | 0.0 | 2.9 | 0.0 | 8.6 | 29.8 | 15.1 | 0.0 | 12.5 | 0.0 | 12.0 | 48.9 | 14.1 |
| | 17.2 | 56.8 | 30.2 | | | | 24.1 | 85.3 | 28.2 | | | |

Curvas de calibração

