

```
; TP6EO2M_OPLS.top
; Created by Anna Akinshina, University of Manchester

[ defaults ]
; nbfunc      comb-rule      gen-pairs      fudgeLJ fudgeQQ
1              3              yes              0.5      0.5

[ atomtypes ]
;name      bond_type      mass      charge      ptype      sigma      epsilon
CA         CA              0.00000    0.0000    A          3.55000e-01  2.92880e-01
OS         OS              0.00000    0.0000    A          2.90000e-01  5.85760e-01
HA         HA              0.00000    0.0000    A          2.42000e-01  1.25520e-01
CT         CT              0.00000    0.0000    A          3.50000e-01  2.76144e-01
HC         HC              0.00000    0.0000    A          2.50000e-01  1.25520e-01
HW          1              1.00800    0.0000    A          0.00000e+00  0.00000e+00
OW          8              15.99940    0.0000    A          3.16557e-01  6.50194e-01

; Explanations
; =====
; CA = opls_147 for core inner C
; CA = opls_145 for core CH (charges are different)
; OS = opls_180
; HA = opls_146
; CT = opls_184 for core outer C
; CT = opls_182 for EO CH2
; CT = opls_181 for EO CH3 (charges are different)
; HC = opls_185 H in CH2 and CH3
; HW = opls_117
; OW = opls_116
; =====

[ moleculetype ]
;name      nrexcl
TP6EO2M      3

[ atoms ]
;  nr  type  resi  res  atom  cgnr      charge      mass
;  1   CA    1    MOL    C     1      0.000000    12.01100 ;
;  2   CA    1    MOL   C1     2      0.000000    12.01100 ;
;  3   CA    1    MOL   C2     3      0.000000    12.01100 ;
;  4   CA    1    MOL   C3     4      0.000000    12.01100 ;
;  5   CA    1    MOL   C4     5      0.000000    12.01100 ;
;  6   CA    1    MOL   C5     6      0.000000    12.01100 ;
;  7   CA    1    MOL   C6     7     -0.115000    12.01100 ;
;  8   CA    1    MOL   C7     8      0.200000    12.01100 ;
;  9   CA    1    MOL   C8     9      0.200000    12.01100 ;
```

10	CA	1	MOL	C9	10	-0.115000	12.01100 ;
11	CA	1	MOL	C10	11	-0.115000	12.01100 ;
12	CA	1	MOL	C11	12	0.200000	12.01100 ;
13	CA	1	MOL	C12	13	0.200000	12.01100 ;
14	CA	1	MOL	C13	14	-0.115000	12.01100 ;
15	CA	1	MOL	C14	15	-0.115000	12.01100 ;
16	CA	1	MOL	C15	16	0.200000	12.01100 ;
17	CA	1	MOL	C16	17	0.200000	12.01100 ;
18	CA	1	MOL	C17	18	-0.115000	12.01100 ;
19	OS	1	MOL	O	19	-0.400000	15.99940 ;
20	OS	1	MOL	O1	20	-0.400000	15.99940 ;
21	HA	1	MOL	H	21	0.115000	1.00800 ;
22	HA	1	MOL	H1	22	0.115000	1.00800 ;
23	HA	1	MOL	H2	23	0.115000	1.00800 ;
24	OS	1	MOL	O2	24	-0.400000	15.99940 ;
25	OS	1	MOL	O3	25	-0.400000	15.99940 ;
26	HA	1	MOL	H3	26	0.115000	1.00800 ;
27	HA	1	MOL	H4	27	0.115000	1.00800 ;
28	OS	1	MOL	O4	28	-0.400000	15.99940 ;
29	OS	1	MOL	O5	29	-0.400000	15.99940 ;
30	HA	1	MOL	H5	30	0.115000	1.00800 ;
31	CT	1	MOL	C18	31	0.140000	12.01100 ;
32	CT	1	MOL	C19	32	0.140000	12.01100 ;
33	OS	1	MOL	O6	33	-0.400000	15.99940 ;
34	CT	1	MOL	C20	34	0.140000	12.01100 ;
35	CT	1	MOL	C21	35	0.140000	12.01100 ;
36	OS	1	MOL	O7	36	-0.400000	15.99940 ;
37	CT	1	MOL	C22	37	0.110000	12.01100 ;
38	HC	1	MOL	H6	38	0.030000	1.00800 ;
39	HC	1	MOL	H7	39	0.030000	1.00800 ;
40	HC	1	MOL	H8	40	0.030000	1.00800 ;
41	HC	1	MOL	H9	41	0.030000	1.00800 ;
42	HC	1	MOL	H10	42	0.030000	1.00800 ;
43	HC	1	MOL	H11	43	0.030000	1.00800 ;
44	HC	1	MOL	H12	44	0.030000	1.00800 ;
45	HC	1	MOL	H13	45	0.030000	1.00800 ;
46	HC	1	MOL	H14	46	0.030000	1.00800 ;
47	HC	1	MOL	H15	47	0.030000	1.00800 ;
48	HC	1	MOL	H16	48	0.030000	1.00800 ;
49	CT	1	MOL	C23	49	0.140000	12.01100 ;
50	CT	1	MOL	C24	50	0.140000	12.01100 ;
51	OS	1	MOL	O8	51	-0.400000	15.99940 ;
52	CT	1	MOL	C25	52	0.140000	12.01100 ;
53	CT	1	MOL	C26	53	0.140000	12.01100 ;
54	OS	1	MOL	O9	54	-0.400000	15.99940 ;
55	CT	1	MOL	C27	55	0.110000	12.01100 ;

56	HC	1	MOL	H17	56	0.030000	1.00800 ;
57	HC	1	MOL	H18	57	0.030000	1.00800 ;
58	HC	1	MOL	H19	58	0.030000	1.00800 ;
59	HC	1	MOL	H20	59	0.030000	1.00800 ;
60	HC	1	MOL	H21	60	0.030000	1.00800 ;
61	HC	1	MOL	H22	61	0.030000	1.00800 ;
62	HC	1	MOL	H23	62	0.030000	1.00800 ;
63	HC	1	MOL	H24	63	0.030000	1.00800 ;
64	HC	1	MOL	H25	64	0.030000	1.00800 ;
65	HC	1	MOL	H26	65	0.030000	1.00800 ;
66	HC	1	MOL	H27	66	0.030000	1.00800 ;
67	CT	1	MOL	C28	67	0.140000	12.01100 ;
68	CT	1	MOL	C29	68	0.140000	12.01100 ;
69	OS	1	MOL	O10	69	-0.400000	15.99940 ;
70	CT	1	MOL	C30	70	0.140000	12.01100 ;
71	CT	1	MOL	C31	71	0.140000	12.01100 ;
72	OS	1	MOL	O11	72	-0.400000	15.99940 ;
73	CT	1	MOL	C32	73	0.110000	12.01100 ;
74	HC	1	MOL	H28	74	0.030000	1.00800 ;
75	HC	1	MOL	H29	75	0.030000	1.00800 ;
76	HC	1	MOL	H30	76	0.030000	1.00800 ;
77	HC	1	MOL	H31	77	0.030000	1.00800 ;
78	HC	1	MOL	H32	78	0.030000	1.00800 ;
79	HC	1	MOL	H33	79	0.030000	1.00800 ;
80	HC	1	MOL	H34	80	0.030000	1.00800 ;
81	HC	1	MOL	H35	81	0.030000	1.00800 ;
82	HC	1	MOL	H36	82	0.030000	1.00800 ;
83	HC	1	MOL	H37	83	0.030000	1.00800 ;
84	HC	1	MOL	H38	84	0.030000	1.00800 ;
85	CT	1	MOL	C33	85	0.140000	12.01100 ;
86	CT	1	MOL	C34	86	0.140000	12.01100 ;
87	OS	1	MOL	O12	87	-0.400000	15.99940 ;
88	CT	1	MOL	C35	88	0.140000	12.01100 ;
89	CT	1	MOL	C36	89	0.140000	12.01100 ;
90	OS	1	MOL	O13	90	-0.400000	15.99940 ;
91	CT	1	MOL	C37	91	0.110000	12.01100 ;
92	HC	1	MOL	H39	92	0.030000	1.00800 ;
93	HC	1	MOL	H40	93	0.030000	1.00800 ;
94	HC	1	MOL	H41	94	0.030000	1.00800 ;
95	HC	1	MOL	H42	95	0.030000	1.00800 ;
96	HC	1	MOL	H43	96	0.030000	1.00800 ;
97	HC	1	MOL	H44	97	0.030000	1.00800 ;
98	HC	1	MOL	H45	98	0.030000	1.00800 ;
99	HC	1	MOL	H46	99	0.030000	1.00800 ;
100	HC	1	MOL	H47	100	0.030000	1.00800 ;
101	HC	1	MOL	H48	101	0.030000	1.00800 ;

102	HC	1	MOL	H49	102	0.030000	1.00800 ;
103	CT	1	MOL	C38	103	0.140000	12.01100 ;
104	CT	1	MOL	C39	104	0.140000	12.01100 ;
105	OS	1	MOL	O14	105	-0.400000	15.99940 ;
106	CT	1	MOL	C40	106	0.140000	12.01100 ;
107	CT	1	MOL	C41	107	0.140000	12.01100 ;
108	OS	1	MOL	O15	108	-0.400000	15.99940 ;
109	CT	1	MOL	C42	109	0.110000	12.01100 ;
110	HC	1	MOL	H50	110	0.030000	1.00800 ;
111	HC	1	MOL	H51	111	0.030000	1.00800 ;
112	HC	1	MOL	H52	112	0.030000	1.00800 ;
113	HC	1	MOL	H53	113	0.030000	1.00800 ;
114	HC	1	MOL	H54	114	0.030000	1.00800 ;
115	HC	1	MOL	H55	115	0.030000	1.00800 ;
116	HC	1	MOL	H56	116	0.030000	1.00800 ;
117	HC	1	MOL	H57	117	0.030000	1.00800 ;
118	HC	1	MOL	H58	118	0.030000	1.00800 ;
119	HC	1	MOL	H59	119	0.030000	1.00800 ;
120	HC	1	MOL	H60	120	0.030000	1.00800 ;
121	CT	1	MOL	C43	121	0.140000	12.01100 ;
122	CT	1	MOL	C44	122	0.140000	12.01100 ;
123	OS	1	MOL	O16	123	-0.400000	15.99940 ;
124	CT	1	MOL	C45	124	0.140000	12.01100 ;
125	CT	1	MOL	C46	125	0.140000	12.01100 ;
126	OS	1	MOL	O17	126	-0.400000	15.99940 ;
127	CT	1	MOL	C47	127	0.110000	12.01100 ;
128	HC	1	MOL	H61	128	0.030000	1.00800 ;
129	HC	1	MOL	H62	129	0.030000	1.00800 ;
130	HC	1	MOL	H63	130	0.030000	1.00800 ;
131	HC	1	MOL	H64	131	0.030000	1.00800 ;
132	HC	1	MOL	H65	132	0.030000	1.00800 ;
133	HC	1	MOL	H66	133	0.030000	1.00800 ;
134	HC	1	MOL	H67	134	0.030000	1.00800 ;
135	HC	1	MOL	H68	135	0.030000	1.00800 ;
136	HC	1	MOL	H69	136	0.030000	1.00800 ;
137	HC	1	MOL	H70	137	0.030000	1.00800 ;
138	HC	1	MOL	H71	138	0.030000	1.00800 ;

[bonds]

	ai	aj	funct	r	k	
	1	2	1	0.14000	392459.2	; C - C1
	1	6	1	0.14000	392459.2	; C - C5
	1	7	1	0.14000	392459.2	; C - C6
	2	3	1	0.14000	392459.2	; C1 - C2
	2	11	1	0.14000	392459.2	; C1 - C10
	3	4	1	0.14000	392459.2	; C2 - C3

3	14	1	0.14000	392459.2	;	C2 - C13
4	5	1	0.14000	392459.2	;	C3 - C4
4	15	1	0.14000	392459.2	;	C3 - C14
5	6	1	0.14000	392459.2	;	C4 - C5
5	18	1	0.14000	392459.2	;	C4 - C17
6	10	1	0.14000	392459.2	;	C5 - C9
7	8	1	0.14000	392459.2	;	C6 - C7
7	22	1	0.10800	307105.6	;	C6 - H1
8	9	1	0.14000	392459.2	;	C7 - C8
8	19	1	0.13640	376560.0	;	C7 - O
9	10	1	0.14000	392459.2	;	C8 - C9
9	20	1	0.13640	376560.0	;	C8 - O1
10	21	1	0.10800	307105.6	;	C9 - H
11	12	1	0.14000	392459.2	;	C10 - C11
11	23	1	0.10800	307105.6	;	C10 - H2
12	13	1	0.14000	392459.2	;	C11 - C12
12	24	1	0.13640	376560.0	;	C11 - O2
13	14	1	0.14000	392459.2	;	C12 - C13
13	25	1	0.13640	376560.0	;	C12 - O3
14	26	1	0.10800	307105.6	;	C13 - H3
15	16	1	0.14000	392459.2	;	C14 - C15
15	27	1	0.10800	307105.6	;	C14 - H4
16	17	1	0.14000	392459.2	;	C15 - C16
16	28	1	0.13640	376560.0	;	C15 - O4
17	18	1	0.14000	392459.2	;	C16 - C17
17	29	1	0.13640	376560.0	;	C16 - O5
18	30	1	0.10800	307105.6	;	C17 - H5
19	67	1	0.14100	267776.0	;	O - C28
20	121	1	0.14100	267776.0	;	O1 - C43
24	31	1	0.14100	267776.0	;	O2 - C18
25	49	1	0.14100	267776.0	;	O3 - C23
28	85	1	0.14100	267776.0	;	O4 - C33
29	103	1	0.14100	267776.0	;	O5 - C38
31	32	1	0.15290	224262.4	;	C18 - C19
31	47	1	0.10900	284512.0	;	C18 - H15
31	48	1	0.10900	284512.0	;	C18 - H16
32	33	1	0.14100	267776.0	;	C19 - O6
32	45	1	0.10900	284512.0	;	C19 - H13
32	46	1	0.10900	284512.0	;	C19 - H14
33	34	1	0.14100	267776.0	;	O6 - C20
34	35	1	0.15290	224262.4	;	C20 - C21
34	43	1	0.10900	284512.0	;	C20 - H11
34	44	1	0.10900	284512.0	;	C20 - H12
35	36	1	0.14100	267776.0	;	C21 - O7
35	41	1	0.10900	284512.0	;	C21 - H9
35	42	1	0.10900	284512.0	;	C21 - H10

36	37	1	0.14100	267776.0	;	O7 - C22
37	38	1	0.10900	284512.0	;	C22 - H6
37	39	1	0.10900	284512.0	;	C22 - H7
37	40	1	0.10900	284512.0	;	C22 - H8
49	50	1	0.15290	224262.4	;	C23 - C24
49	65	1	0.10900	284512.0	;	C23 - H26
49	66	1	0.10900	284512.0	;	C23 - H27
50	51	1	0.14100	267776.0	;	C24 - O8
50	63	1	0.10900	284512.0	;	C24 - H24
50	64	1	0.10900	284512.0	;	C24 - H25
51	52	1	0.14100	267776.0	;	O8 - C25
52	53	1	0.15290	224262.4	;	C25 - C26
52	61	1	0.10900	284512.0	;	C25 - H22
52	62	1	0.10900	284512.0	;	C25 - H23
53	54	1	0.14100	267776.0	;	C26 - O9
53	59	1	0.14100	267776.0	;	C26 - H20
53	60	1	0.10900	284512.0	;	C26 - H21
54	55	1	0.14100	267776.0	;	O9 - C27
55	56	1	0.10900	284512.0	;	C27 - H17
55	57	1	0.10900	284512.0	;	C27 - H18
55	58	1	0.10900	284512.0	;	C27 - H19
67	68	1	0.15290	224262.4	;	C28 - C29
67	83	1	0.10900	284512.0	;	C28 - H37
67	84	1	0.10900	284512.0	;	C28 - H38
68	69	1	0.14100	267776.0	;	C29 - O10
68	81	1	0.10900	284512.0	;	C29 - H35
68	82	1	0.10900	284512.0	;	C29 - H36
69	70	1	0.14100	267776.0	;	O10 - C30
70	71	1	0.15290	224262.4	;	C30 - C31
70	79	1	0.10900	284512.0	;	C30 - H33
70	80	1	0.10900	284512.0	;	C30 - H34
71	72	1	0.14100	267776.0	;	C31 - O11
71	77	1	0.10900	284512.0	;	C31 - H31
71	78	1	0.10900	284512.0	;	C31 - H32
72	73	1	0.14100	267776.0	;	O11 - C32
73	74	1	0.10900	284512.0	;	C32 - H28
73	75	1	0.10900	284512.0	;	C32 - H29
73	76	1	0.10900	284512.0	;	C32 - H30
85	86	1	0.15290	224262.4	;	C33 - C34
85	101	1	0.10900	284512.0	;	C33 - H48
85	102	1	0.10900	284512.0	;	C33 - H49
86	87	1	0.14100	267776.0	;	C34 - O12
86	99	1	0.10900	284512.0	;	C34 - H46
86	100	1	0.10900	284512.0	;	C34 - H47
87	88	1	0.14100	267776.0	;	O12 - C35
88	89	1	0.15290	224262.4	;	C35 - C36

88	97	1	0.10900	284512.0	;	C35 - H44
88	98	1	0.10900	284512.0	;	C35 - H45
89	90	1	0.14100	267776.0	;	C36 - O13
89	95	1	0.10900	284512.0	;	C36 - H42
89	96	1	0.10900	284512.0	;	C36 - H43
90	91	1	0.14100	267776.0	;	O13 - C37
91	92	1	0.10900	284512.0	;	C37 - H39
91	93	1	0.10900	284512.0	;	C37 - H40
91	94	1	0.10900	284512.0	;	C37 - H41
103	104	1	0.15290	224262.4	;	C38 - C39
103	119	1	0.10900	284512.0	;	C38 - H59
103	120	1	0.10900	284512.0	;	C38 - H60
104	105	1	0.14100	267776.0	;	C39 - O14
104	117	1	0.10900	284512.0	;	C39 - H57
104	118	1	0.10900	284512.0	;	C39 - H58
105	106	1	0.14100	267776.0	;	O14 - C40
106	107	1	0.15290	224262.4	;	C40 - C41
106	115	1	0.10900	284512.0	;	C40 - H55
106	116	1	0.10900	284512.0	;	C40 - H56
107	108	1	0.14100	267776.0	;	C41 - O15
107	113	1	0.10900	284512.0	;	C41 - H53
107	114	1	0.10900	284512.0	;	C41 - H54
108	109	1	0.14100	267776.0	;	O15 - C42
109	110	1	0.10900	284512.0	;	C42 - H50
109	111	1	0.10900	284512.0	;	C42 - H51
109	112	1	0.10900	284512.0	;	C42 - H52
121	122	1	0.15290	224262.4	;	C43 - C44
121	137	1	0.10900	284512.0	;	C43 - H70
121	138	1	0.10900	284512.0	;	C43 - H71
122	123	1	0.14100	267776.0	;	C44 - O16
122	135	1	0.10900	284512.0	;	C44 - H68
122	136	1	0.10900	284512.0	;	C44 - H69
123	124	1	0.14100	267776.0	;	O16 - C45
124	125	1	0.15290	224262.4	;	C45 - C46
124	133	1	0.10900	284512.0	;	C45 - H66
124	134	1	0.10900	284512.0	;	C45 - H67
125	126	1	0.14100	267776.0	;	C46 - O17
125	131	1	0.10900	284512.0	;	C46 - H64
125	132	1	0.10900	284512.0	;	C46 - H65
126	127	1	0.14100	267776.0	;	O17 - C47
127	128	1	0.10900	284512.0	;	C47 - H61
127	129	1	0.10900	284512.0	;	C47 - H62
127	130	1	0.10900	284512.0	;	C47 - H63

```
[ pairs ]
; ai aj funct
```

1	4	1 ;	C - C3
1	9	1 ;	C - C8
1	12	1 ;	C - C11
1	14	1 ;	C - C13
1	18	1 ;	C - C17
1	19	1 ;	C - O
1	21	1 ;	C - H
1	23	1 ;	C - H2
2	5	1 ;	C1 - C4
2	8	1 ;	C1 - C7
2	10	1 ;	C1 - C9
2	13	1 ;	C1 - C12
2	15	1 ;	C1 - C14
2	22	1 ;	C1 - H1
2	24	1 ;	C1 - O2
2	26	1 ;	C1 - H3
3	12	1 ;	C2 - C11
3	16	1 ;	C2 - C15
3	18	1 ;	C2 - C17
3	23	1 ;	C2 - H2
3	25	1 ;	C2 - O3
3	27	1 ;	C2 - H4
4	10	1 ;	C3 - C9
4	11	1 ;	C3 - C10
4	13	1 ;	C3 - C12
4	17	1 ;	C3 - C16
4	26	1 ;	C3 - H3
4	28	1 ;	C3 - O4
4	30	1 ;	C3 - H5
5	9	1 ;	C4 - C8
5	14	1 ;	C4 - C13
5	16	1 ;	C4 - C15
5	21	1 ;	C4 - H
5	27	1 ;	C4 - H4
5	29	1 ;	C4 - O5
6	3	1 ;	C5 - C2
6	8	1 ;	C5 - C7
6	11	1 ;	C5 - C10
6	15	1 ;	C5 - C14
6	17	1 ;	C5 - C16
6	20	1 ;	C5 - O1
6	22	1 ;	C5 - H1
6	30	1 ;	C5 - H5
7	3	1 ;	C6 - C2
7	5	1 ;	C6 - C4
7	10	1 ;	C6 - C9

7	11	1 ;	C6 - C10
7	20	1 ;	C6 - O1
7	67	1 ;	C6 - C28
8	21	1 ;	C7 - H
8	68	1 ;	C7 - C29
8	83	1 ;	C7 - H37
8	84	1 ;	C7 - H38
8	121	1 ;	C7 - C43
9	22	1 ;	C8 - H1
9	67	1 ;	C8 - C28
9	122	1 ;	C8 - C44
9	137	1 ;	C8 - H70
9	138	1 ;	C8 - H71
10	18	1 ;	C9 - C17
10	19	1 ;	C9 - O
10	121	1 ;	C9 - C43
11	14	1 ;	C10 - C13
11	25	1 ;	C10 - O3
11	31	1 ;	C10 - C18
12	26	1 ;	C11 - H3
12	32	1 ;	C11 - C19
12	47	1 ;	C11 - H15
12	48	1 ;	C11 - H16
12	49	1 ;	C11 - C23
13	23	1 ;	C12 - H2
13	31	1 ;	C12 - C18
13	50	1 ;	C12 - C24
13	65	1 ;	C12 - H26
13	66	1 ;	C12 - H27
14	15	1 ;	C13 - C14
14	24	1 ;	C13 - O2
14	49	1 ;	C13 - C23
15	18	1 ;	C14 - C17
15	29	1 ;	C14 - O5
15	85	1 ;	C14 - C33
16	30	1 ;	C15 - H5
16	86	1 ;	C15 - C34
16	101	1 ;	C15 - H48
16	102	1 ;	C15 - H49
16	103	1 ;	C15 - C38
17	27	1 ;	C16 - H4
17	85	1 ;	C16 - C33
17	104	1 ;	C16 - C39
17	119	1 ;	C16 - H59
17	120	1 ;	C16 - H60
18	28	1 ;	C17 - O4

18	103	1 ;	C17 - C38
19	20	1 ;	O - O1
19	22	1 ;	O - H1
19	69	1 ;	O - O10
19	81	1 ;	O - H35
19	82	1 ;	O - H36
20	21	1 ;	O1 - H
20	123	1 ;	O1 - O16
20	135	1 ;	O1 - H68
20	136	1 ;	O1 - H69
23	24	1 ;	H2 - O2
24	25	1 ;	O2 - O3
24	33	1 ;	O2 - O6
24	45	1 ;	O2 - H13
24	46	1 ;	O2 - H14
25	26	1 ;	O3 - H3
25	51	1 ;	O3 - O8
25	63	1 ;	O3 - H24
25	64	1 ;	O3 - H25
27	28	1 ;	H4 - O4
28	29	1 ;	O4 - O5
28	87	1 ;	O4 - O12
28	99	1 ;	O4 - H46
28	100	1 ;	O4 - H47
29	30	1 ;	O5 - H5
29	105	1 ;	O5 - O14
29	117	1 ;	O5 - H57
29	118	1 ;	O5 - H58
31	34	1 ;	C18 - C20
32	35	1 ;	C19 - C21
32	43	1 ;	C19 - H11
32	44	1 ;	C19 - H12
33	36	1 ;	O6 - O7
33	41	1 ;	O6 - H9
33	42	1 ;	O6 - H10
33	47	1 ;	O6 - H15
33	48	1 ;	O6 - H16
34	37	1 ;	C20 - C22
34	45	1 ;	C20 - H13
34	46	1 ;	C20 - H14
35	38	1 ;	C21 - H6
35	39	1 ;	C21 - H7
35	40	1 ;	C21 - H8
36	43	1 ;	O7 - H11
36	44	1 ;	O7 - H12
37	41	1 ;	C22 - H9

37	42	1 ;	C22 - H10
41	43	1 ;	H9 - H11
41	44	1 ;	H9 - H12
42	43	1 ;	H10 - H11
42	44	1 ;	H10 - H12
45	47	1 ;	H13 - H15
45	48	1 ;	H13 - H16
46	47	1 ;	H14 - H15
46	48	1 ;	H14 - H16
49	52	1 ;	C23 - C25
50	53	1 ;	C24 - C26
50	61	1 ;	C24 - H22
50	62	1 ;	C24 - H23
51	54	1 ;	O8 - O9
51	59	1 ;	O8 - H20
51	60	1 ;	O8 - H21
51	65	1 ;	O8 - H26
51	66	1 ;	O8 - H27
52	55	1 ;	C25 - C27
52	63	1 ;	C25 - H24
52	64	1 ;	C25 - H25
53	56	1 ;	C26 - H17
53	57	1 ;	C26 - H18
53	58	1 ;	C26 - H19
54	61	1 ;	O9 - H22
54	62	1 ;	O9 - H23
55	59	1 ;	C27 - H20
55	60	1 ;	C27 - H21
59	61	1 ;	H20 - H22
59	62	1 ;	H20 - H23
60	61	1 ;	H21 - H22
60	62	1 ;	H21 - H23
63	65	1 ;	H24 - H26
63	66	1 ;	H24 - H27
64	65	1 ;	H25 - H26
64	66	1 ;	H25 - H27
67	70	1 ;	C28 - C30
68	71	1 ;	C29 - C31
68	79	1 ;	C29 - H33
68	80	1 ;	C29 - H34
69	72	1 ;	O10 - O11
69	77	1 ;	O10 - H31
69	78	1 ;	O10 - H32
69	83	1 ;	O10 - H37
69	84	1 ;	O10 - H38
70	73	1 ;	C30 - C32

70	81	1 ;	C30 - H35
70	82	1 ;	C30 - H36
71	74	1 ;	C31 - H28
71	75	1 ;	C31 - H29
71	76	1 ;	C31 - H30
72	79	1 ;	O11 - H33
72	80	1 ;	O11 - H34
73	77	1 ;	C32 - H31
73	78	1 ;	C32 - H32
77	79	1 ;	H31 - H33
77	80	1 ;	H31 - H34
78	79	1 ;	H32 - H33
78	80	1 ;	H32 - H34
81	83	1 ;	H35 - H37
81	84	1 ;	H35 - H38
82	83	1 ;	H36 - H37
82	84	1 ;	H36 - H38
85	88	1 ;	C33 - C35
86	89	1 ;	C34 - C36
86	97	1 ;	C34 - H44
86	98	1 ;	C34 - H45
87	90	1 ;	O12 - O13
87	95	1 ;	O12 - H42
87	96	1 ;	O12 - H43
87	101	1 ;	O12 - H48
87	102	1 ;	O12 - H49
88	91	1 ;	C35 - C37
88	99	1 ;	C35 - H46
88	100	1 ;	C35 - H47
89	92	1 ;	C36 - H39
89	93	1 ;	C36 - H40
89	94	1 ;	C36 - H41
90	97	1 ;	O13 - H44
90	98	1 ;	O13 - H45
91	95	1 ;	C37 - H42
91	96	1 ;	C37 - H43
95	97	1 ;	H42 - H44
95	98	1 ;	H42 - H45
96	97	1 ;	H43 - H44
96	98	1 ;	H43 - H45
99	101	1 ;	H46 - H48
99	102	1 ;	H46 - H49
100	101	1 ;	H47 - H48
100	102	1 ;	H47 - H49
103	106	1 ;	C38 - C40
104	107	1 ;	C39 - C41

104	115	1 ;	C39 - H55
104	116	1 ;	C39 - H56
105	108	1 ;	O14 - O15
105	113	1 ;	O14 - H53
105	114	1 ;	O14 - H54
105	119	1 ;	O14 - H59
105	120	1 ;	O14 - H60
106	109	1 ;	C40 - C42
106	117	1 ;	C40 - H57
106	118	1 ;	C40 - H58
107	110	1 ;	C41 - H50
107	111	1 ;	C41 - H51
107	112	1 ;	C41 - H52
108	115	1 ;	O15 - H55
108	116	1 ;	O15 - H56
109	113	1 ;	C42 - H53
109	114	1 ;	C42 - H54
113	115	1 ;	H53 - H55
113	116	1 ;	H53 - H56
114	115	1 ;	H54 - H55
114	116	1 ;	H54 - H56
117	119	1 ;	H57 - H59
117	120	1 ;	H57 - H60
118	119	1 ;	H58 - H59
118	120	1 ;	H58 - H60
121	124	1 ;	C43 - C45
122	125	1 ;	C44 - C46
122	133	1 ;	C44 - H66
122	134	1 ;	C44 - H67
123	126	1 ;	O16 - O17
123	131	1 ;	O16 - H64
123	132	1 ;	O16 - H65
123	137	1 ;	O16 - H70
123	138	1 ;	O16 - H71
124	127	1 ;	C45 - C47
124	135	1 ;	C45 - H68
124	136	1 ;	C45 - H69
125	128	1 ;	C46 - H61
125	129	1 ;	C46 - H62
125	130	1 ;	C46 - H63
126	133	1 ;	O17 - H66
126	134	1 ;	O17 - H67
127	131	1 ;	C47 - H64
127	132	1 ;	C47 - H65
131	133	1 ;	H64 - H66
131	134	1 ;	H64 - H67

132	133	1 ;	H65 - H66
132	134	1 ;	H65 - H67
135	137	1 ;	H68 - H70
135	138	1 ;	H68 - H71
136	137	1 ;	H69 - H70
136	138	1 ;	H69 - H71

[angles]

;	ai	aj	ak	funct	theta	cth			
	1	2	3	1	120.000	527.184 ;	C - C1	- C2	CA-CA-CA
	1	2	11	1	120.000	527.184 ;	C - C1	- C10	
	1	6	5	1	120.000	527.184 ;	C - C5	- C4	
	1	6	10	1	120.000	527.184 ;	C - C5	- C9	
	1	7	8	1	120.000	527.184 ;	C - C6	- C7	
	1	7	22	1	120.000	292.880 ;	C - C6	- H1	CA-CA-HA
	2	1	6	1	120.000	527.184 ;	C1 - C	- C5	
	2	1	7	1	120.000	527.184 ;	C1 - C	- C6	
	2	3	4	1	120.000	527.184 ;	C1 - C2	- C3	
	2	3	14	1	120.000	527.184 ;	C1 - C2	- C13	
	2	11	12	1	120.000	527.184 ;	C1 - C10	- C11	
	2	11	23	1	120.000	292.880 ;	C1 - C10	- H2	
	3	2	11	1	120.000	527.184 ;	C2 - C1	- C10	
	3	4	5	1	120.000	527.184 ;	C2 - C3	- C4	
	3	4	15	1	120.000	527.184 ;	C2 - C3	- C14	
	3	14	13	1	120.000	527.184 ;	C2 - C13	- C12	
	3	14	26	1	120.000	292.880 ;	C2 - C13	- H3	
	4	3	14	1	120.000	527.184 ;	C3 - C2	- C13	
	4	5	6	1	120.000	527.184 ;	C3 - C4	- C5	
	4	5	18	1	120.000	527.184 ;	C3 - C4	- C17	
	4	15	16	1	120.000	527.184 ;	C3 - C14	- C15	
	4	15	27	1	120.000	292.880 ;	C3 - C14	- H4	
	5	4	15	1	120.000	527.184 ;	C4 - C3	- C14	
	5	6	10	1	120.000	527.184 ;	C4 - C5	- C9	
	5	18	17	1	120.000	527.184 ;	C4 - C17	- C16	
	5	18	30	1	120.000	292.880 ;	C4 - C17	- H5	
	6	1	7	1	120.000	527.184 ;	C5 - C	- C6	
	6	5	18	1	120.000	527.184 ;	C5 - C4	- C17	
	6	10	9	1	120.000	527.184 ;	C5 - C9	- C8	
	6	10	21	1	120.000	292.880 ;	C5 - C9	- H	
	7	8	9	1	120.000	527.184 ;	C6 - C7	- C8	
	7	8	19	1	120.000	585.760 ;	C6 - C7	- O	CA-CA-OS
	8	7	22	1	120.000	292.880 ;	C7 - C6	- H1	
	8	9	10	1	120.000	527.184 ;	C7 - C8	- C9	
	8	9	20	1	120.000	585.760 ;	C7 - C8	- O1	
	8	19	67	1	111.000	627.600 ;	C7 - O	- C28	CT-OS-CA
	9	8	19	1	120.000	585.760 ;	C8 - C7	- O	

9	10	21	1	120.000	292.880 ;	C8 - C9	- H	
9	20	121	1	111.000	627.600 ;	C8 - O1	- C43	
10	9	20	1	120.000	585.760 ;	C9 - C8	- O1	
11	12	13	1	120.000	527.184 ;	C10 - C11	- C12	
11	12	24	1	120.000	585.760 ;	C10 - C11	- O2	
12	11	23	1	120.000	292.880 ;	C11 - C10	- H2	
12	13	14	1	120.000	527.184 ;	C11 - C12	- C13	
12	13	25	1	120.000	585.760 ;	C11 - C12	- O3	
12	24	31	1	111.000	627.600 ;	C11 - O2	- C18	
13	12	24	1	120.000	585.760 ;	C12 - C11	- O2	
13	14	26	1	120.000	292.880 ;	C12 - C13	- H3	
13	25	49	1	111.000	627.600 ;	C12 - O3	- C23	
14	13	25	1	120.000	585.760 ;	C13 - C12	- O3	
15	16	17	1	120.000	527.184 ;	C14 - C15	- C16	
15	16	28	1	120.000	585.760 ;	C14 - C15	- O4	
16	15	27	1	120.000	292.880 ;	C15 - C14	- H4	
16	17	18	1	120.000	527.184 ;	C15 - C16	- C17	
16	17	29	1	120.000	585.760 ;	C15 - C16	- O5	
16	28	85	1	111.000	627.600 ;	C15 - O4	- C33	
17	16	28	1	120.000	585.760 ;	C16 - C15	- O4	
17	18	30	1	120.000	292.880 ;	C16 - C17	- H5	
17	29	103	1	111.000	627.600 ;	C16 - O5	- C38	
18	17	29	1	120.000	585.760 ;	C17 - C16	- O5	
19	67	68	1	109.500	418.400 ;	O - C28	- C29 OS-CT-CT	
19	67	83	1	109.500	292.880 ;	O - C28	- H37 OS-CT-HC	
19	67	84	1	109.500	292.880 ;	O - C28	- H38	
20	121	122	1	109.500	418.400 ;	O1 - C43	- C44	
20	121	137	1	109.500	292.880 ;	O1 - C43	- H70	
20	121	138	1	109.500	292.880 ;	O1 - C43	- H71	
24	31	32	1	109.500	418.400 ;	O2 - C18	- C19	
24	31	47	1	109.500	292.880 ;	O2 - C18	- H15	
24	31	48	1	109.500	292.880 ;	O2 - C18	- H16	
25	49	50	1	109.500	418.400 ;	O3 - C23	- C24	
25	49	65	1	109.500	292.880 ;	O3 - C23	- H26	
25	49	66	1	109.500	292.880 ;	O3 - C23	- H27	
28	85	86	1	109.500	418.400 ;	O4 - C33	- C34	
28	85	101	1	109.500	292.880 ;	O4 - C33	- H48	
28	85	102	1	109.500	292.880 ;	O4 - C33	- H49	
29	103	104	1	109.500	418.400 ;	O5 - C38	- C39	
29	103	119	1	109.500	292.880 ;	O5 - C38	- H59	
29	103	120	1	109.500	292.880 ;	O5 - C38	- H60	
31	32	33	1	109.500	418.400 ;	C18 - C19	- O6	
31	32	45	1	110.700	313.800 ;	C18 - C19	- H13	CT-CT-HC
31	32	46	1	110.700	313.800 ;	C18 - C19	- H14	
32	31	47	1	110.700	313.800 ;	C19 - C18	- H15	
32	31	48	1	110.700	313.800 ;	C19 - C18	- H16	

32	33	34	1	109.500	502.080 ;	C19 - O6	- C20	CT-OS-CT
33	32	45	1	109.500	292.880 ;	O6 - C19	- H13	
33	32	46	1	109.500	292.880 ;	O6 - C19	- H14	
33	34	35	1	109.500	418.400 ;	O6 - C20	- C21	
33	34	43	1	109.500	292.880 ;	O6 - C20	- H11	
33	34	44	1	109.500	292.880 ;	O6 - C20	- H12	
34	35	36	1	109.500	418.400 ;	C20 - C21	- O7	
34	35	41	1	110.700	313.800 ;	C20 - C21	- H9	
34	35	42	1	110.700	313.800 ;	C20 - C21	- H10	
35	34	43	1	110.700	313.800 ;	C21 - C20	- H11	
35	34	44	1	110.700	313.800 ;	C21 - C20	- H12	
35	36	37	1	109.500	502.080 ;	C21 - O7	- C22	
36	35	41	1	109.500	292.880 ;	O7 - C21	- H9	
36	35	42	1	109.500	292.880 ;	O7 - C21	- H10	
36	37	38	1	109.500	292.880 ;	O7 - C22	- H6	
36	37	39	1	109.500	292.880 ;	O7 - C22	- H7	
36	37	40	1	109.500	292.880 ;	O7 - C22	- H8	
38	37	39	1	107.800	276.144 ;	H6 - C22	- H7	HC-CT-HC
38	37	40	1	107.800	276.144 ;	H6 - C22	- H8	
39	37	40	1	107.800	276.144 ;	H7 - C22	- H8	
41	35	42	1	107.800	276.144 ;	H9 - C21	- H10	
43	34	44	1	107.800	276.144 ;	H11 - C20	- H12	
45	32	46	1	107.800	276.144 ;	H13 - C19	- H14	
47	31	48	1	107.800	276.144 ;	H15 - C18	- H16	
49	50	51	1	109.500	418.400 ;	C23 - C24	- O8	
49	50	63	1	110.700	313.800 ;	C23 - C24	- H24	
49	50	64	1	110.700	313.800 ;	C23 - C24	- H25	
50	49	65	1	110.700	313.800 ;	C24 - C23	- H26	
50	49	66	1	110.700	313.800 ;	C24 - C23	- H27	
50	51	52	1	109.500	502.080 ;	C24 - O8	- C25	
51	50	63	1	109.500	292.880 ;	O8 - C24	- H24	
51	50	64	1	109.500	292.880 ;	O8 - C24	- H25	
51	52	53	1	109.500	418.400 ;	O8 - C25	- C26	
51	52	61	1	109.500	292.880 ;	O8 - C25	- H22	
51	52	62	1	109.500	292.880 ;	O8 - C25	- H23	
52	53	54	1	109.500	418.400 ;	C25 - C26	- O9	
52	53	59	1	110.700	313.800 ;	C25 - C26	- H20	
52	53	60	1	110.700	313.800 ;	C25 - C26	- H21	
53	52	61	1	110.700	313.800 ;	C26 - C25	- H22	
53	52	62	1	110.700	313.800 ;	C26 - C25	- H23	
53	54	55	1	109.500	502.080 ;	C26 - O9	- C27	
54	53	59	1	109.500	292.880 ;	O9 - C26	- H20	
54	53	60	1	109.500	292.880 ;	O9 - C26	- H21	
54	55	56	1	109.500	292.880 ;	O9 - C27	- H17	
54	55	57	1	109.500	292.880 ;	O9 - C27	- H18	
54	55	58	1	109.500	292.880 ;	O9 - C27	- H19	

56	55	57	1	107.800	276.144 ;	H17 - C27	- H18
56	55	58	1	107.800	276.144 ;	H17 - C27	- H19
57	55	58	1	107.800	276.144 ;	H18 - C27	- H19
59	53	60	1	107.800	276.144 ;	H20 - C26	- H21
61	52	62	1	107.800	276.144 ;	H22 - C25	- H23
63	50	64	1	107.800	276.144 ;	H24 - C24	- H25
65	49	66	1	107.800	276.144 ;	H26 - C23	- H27
67	68	69	1	109.500	418.400 ;	C28 - C29	- O10
67	68	81	1	110.700	313.800 ;	C28 - C29	- H35
67	68	82	1	110.700	313.800 ;	C28 - C29	- H36
68	67	83	1	110.700	313.800 ;	C29 - C28	- H37
68	67	84	1	110.700	313.800 ;	C29 - C28	- H38
68	69	70	1	109.500	502.080 ;	C29 - O10	- C30
69	68	81	1	109.500	292.880 ;	O10 - C29	- H35
69	68	82	1	109.500	292.880 ;	O10 - C29	- H36
69	70	71	1	109.500	418.400 ;	O10 - C30	- C31
69	70	79	1	109.500	292.880 ;	O10 - C30	- H33
69	70	80	1	109.500	292.880 ;	O10 - C30	- H34
70	71	72	1	109.500	418.400 ;	C30 - C31	- O11
70	71	77	1	110.700	313.800 ;	C30 - C31	- H31
70	71	78	1	110.700	313.800 ;	C30 - C31	- H32
71	70	79	1	110.700	313.800 ;	C31 - C30	- H33
71	70	80	1	110.700	313.800 ;	C31 - C30	- H34
71	72	73	1	109.500	502.080 ;	C31 - O11	- C32
72	71	77	1	109.500	292.880 ;	O11 - C31	- H31
72	71	78	1	109.500	292.880 ;	O11 - C31	- H32
72	73	74	1	109.500	292.880 ;	O11 - C32	- H28
72	73	75	1	109.500	292.880 ;	O11 - C32	- H29
72	73	76	1	109.500	292.880 ;	O11 - C32	- H30
74	73	75	1	107.800	276.144 ;	H28 - C32	- H29
74	73	76	1	107.800	276.144 ;	H28 - C32	- H30
75	73	76	1	107.800	276.144 ;	H29 - C32	- H30
77	71	78	1	107.800	276.144 ;	H31 - C31	- H32
79	70	80	1	107.800	276.144 ;	H33 - C30	- H34
81	68	82	1	107.800	276.144 ;	H35 - C29	- H36
83	67	84	1	107.800	276.144 ;	H37 - C28	- H38
85	86	87	1	109.500	418.400 ;	C33 - C34	- O12
85	86	99	1	110.700	313.800 ;	C33 - C34	- H46
85	86	100	1	110.700	313.800 ;	C33 - C34	- H47
86	85	101	1	110.700	313.800 ;	C34 - C33	- H48
86	85	102	1	110.700	313.800 ;	C34 - C33	- H49
86	87	88	1	109.500	502.080 ;	C34 - O12	- C35
87	86	99	1	109.500	292.880 ;	O12 - C34	- H46
87	86	100	1	109.500	292.880 ;	O12 - C34	- H47
87	88	89	1	109.500	418.400 ;	O12 - C35	- C36
87	88	97	1	109.500	292.880 ;	O12 - C35	- H44

87	88	98	1	109.500	292.880 ;	O12 - C35	- H45
88	89	90	1	109.500	418.400 ;	C35 - C36	- O13
88	89	95	1	110.700	313.800 ;	C35 - C36	- H42
88	89	96	1	110.700	313.800 ;	C35 - C36	- H43
89	88	97	1	110.700	313.800 ;	C36 - C35	- H44
89	88	98	1	110.700	313.800 ;	C36 - C35	- H45
89	90	91	1	109.500	502.080 ;	C36 - O13	- C37
90	89	95	1	109.500	292.880 ;	O13 - C36	- H42
90	89	96	1	109.500	292.880 ;	O13 - C36	- H43
90	91	92	1	109.500	292.880 ;	O13 - C37	- H39
90	91	93	1	109.500	292.880 ;	O13 - C37	- H40
90	91	94	1	109.500	292.880 ;	O13 - C37	- H41
92	91	93	1	107.800	276.144 ;	H39 - C37	- H40
92	91	94	1	107.800	276.144 ;	H39 - C37	- H41
93	91	94	1	107.800	276.144 ;	H40 - C37	- H41
95	89	96	1	107.800	276.144 ;	H42 - C36	- H43
97	88	98	1	107.800	276.144 ;	H44 - C35	- H45
99	86	100	1	107.800	276.144 ;	H46 - C34	- H47
101	85	102	1	107.800	276.144 ;	H48 - C33	- H49
103	104	105	1	109.500	418.400 ;	C38 - C39	- O14
103	104	117	1	110.700	313.800 ;	C38 - C39	- H57
103	104	118	1	110.700	313.800 ;	C38 - C39	- H58
104	103	119	1	110.700	313.800 ;	C39 - C38	- H59
104	103	120	1	110.700	313.800 ;	C39 - C38	- H60
104	105	106	1	109.500	502.080 ;	C39 - O14	- C40
105	104	117	1	109.500	292.880 ;	O14 - C39	- H57
105	104	118	1	109.500	292.880 ;	O14 - C39	- H58
105	106	107	1	109.500	418.400 ;	O14 - C40	- C41
105	106	115	1	109.500	292.880 ;	O14 - C40	- H55
105	106	116	1	109.500	292.880 ;	O14 - C40	- H56
106	107	108	1	109.500	418.400 ;	C40 - C41	- O15
106	107	113	1	110.700	313.800 ;	C40 - C41	- H53
106	107	114	1	110.700	313.800 ;	C40 - C41	- H54
107	106	115	1	110.700	313.800 ;	C41 - C40	- H55
107	106	116	1	110.700	313.800 ;	C41 - C40	- H56
107	108	109	1	109.500	502.080 ;	C41 - O15	- C42
108	107	113	1	109.500	292.880 ;	O15 - C41	- H53
108	107	114	1	109.500	292.880 ;	O15 - C41	- H54
108	109	110	1	109.500	292.880 ;	O15 - C42	- H50
108	109	111	1	109.500	292.880 ;	O15 - C42	- H51
108	109	112	1	109.500	292.880 ;	O15 - C42	- H52
110	109	111	1	107.800	276.144 ;	H50 - C42	- H51
110	109	112	1	107.800	276.144 ;	H50 - C42	- H52
111	109	112	1	107.800	276.144 ;	H51 - C42	- H52
113	107	114	1	107.800	276.144 ;	H53 - C41	- H54
115	106	116	1	107.800	276.144 ;	H55 - C40	- H56

117	104	118	1	107.800	276.144 ;	H57 - C39	- H58
119	103	120	1	107.800	276.144 ;	H59 - C38	- H60
121	122	123	1	109.500	418.400 ;	C43 - C44	- O16
121	122	135	1	110.700	313.800 ;	C43 - C44	- H68
121	122	136	1	110.700	313.800 ;	C43 - C44	- H69
122	121	137	1	110.700	313.800 ;	C44 - C43	- H70
122	121	138	1	110.700	313.800 ;	C44 - C43	- H71
122	123	124	1	109.500	502.080 ;	C44 - O16	- C45
123	122	135	1	109.500	292.880 ;	O16 - C44	- H68
123	122	136	1	109.500	292.880 ;	O16 - C44	- H69
123	124	125	1	109.500	418.400 ;	O16 - C45	- C46
123	124	133	1	109.500	292.880 ;	O16 - C45	- H66
123	124	134	1	109.500	292.880 ;	O16 - C45	- H67
124	125	126	1	109.500	418.400 ;	C45 - C46	- O17
124	125	131	1	110.700	313.800 ;	C45 - C46	- H64
124	125	132	1	110.700	313.800 ;	C45 - C46	- H65
125	124	133	1	110.700	313.800 ;	C46 - C45	- H66
125	124	134	1	110.700	313.800 ;	C46 - C45	- H67
125	126	127	1	109.500	502.080 ;	C46 - O17	- C47
126	125	131	1	109.500	292.880 ;	O17 - C46	- H64
126	125	132	1	109.500	292.880 ;	O17 - C46	- H65
126	127	128	1	109.500	292.880 ;	O17 - C47	- H61
126	127	129	1	109.500	292.880 ;	O17 - C47	- H62
126	127	130	1	109.500	292.880 ;	O17 - C47	- H63
128	127	129	1	107.800	276.144 ;	H61 - C47	- H62
128	127	130	1	107.800	276.144 ;	H61 - C47	- H63
129	127	130	1	107.800	276.144 ;	H62 - C47	- H63
131	125	132	1	107.800	276.144 ;	H64 - C46	- H65
133	124	134	1	107.800	276.144 ;	H66 - C45	- H67
135	122	136	1	107.800	276.144 ;	H68 - C44	- H69
137	121	138	1	107.800	276.144 ;	H70 - C43	- H71

[dihedrals] ; props

; i	j	k	l	func	C0	C1	C2	C3	C4	C5				
1	2	3	4	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C-	C1-	C2-	C3
1	2	3	14	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C-	C1-	C2-	C13
1	2	11	12	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C-	C1-	C10-	C11
1	2	11	23	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C-	C1-	C10-	H2
1	6	5	4	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C-	C5-	C4-	C3
1	6	5	18	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C-	C5-	C4-	C17
1	6	10	9	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C-	C5-	C9-	C8
1	6	10	21	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C-	C5-	C9-	H
1	7	8	9	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C-	C6-	C7-	C8
1	7	8	19	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C-	C6-	C7-	O
2	1	6	5	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C1-	C-	C5-	C4
2	1	6	10	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C1-	C-	C5-	C9

2	1	7	8	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C1-	C-	C6-	C7
2	1	7	22	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C1-	C-	C6-	H1
2	3	4	5	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C1-	C2-	C3-	C4
2	3	4	15	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C1-	C2-	C3-	C14
2	3	14	13	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C1-	C2-	C13-	C12
2	3	14	26	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C1-	C2-	C13-	H3
2	11	12	13	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C1-	C10-	C11-	C12
2	11	12	24	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C1-	C10-	C11-	O2
3	2	11	12	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C2-	C1-	C10-	C11
3	2	11	23	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C2-	C1-	C10-	H2
3	4	5	6	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C2-	C3-	C4-	C5
3	4	5	18	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C2-	C3-	C4-	C17
3	4	15	16	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C2-	C3-	C14-	C15
3	4	15	27	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C2-	C3-	C14-	H4
3	14	13	12	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C2-	C13-	C12-	C11
3	14	13	25	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C2-	C13-	C12-	O3
4	3	2	11	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C3-	C2-	C1-	C10
4	3	14	13	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C3-	C2-	C13-	C12
4	3	14	26	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C3-	C2-	C13-	H3
4	5	6	10	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C3-	C4-	C5-	C9
4	5	18	17	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C3-	C4-	C17-	C16
4	5	18	30	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C3-	C4-	C17-	H5
4	15	16	17	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C3-	C14-	C15-	C16
4	15	16	28	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C3-	C14-	C15-	O4
5	4	3	14	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C4-	C3-	C2-	C13
5	4	15	16	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C4-	C3-	C14-	C15
5	4	15	27	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C4-	C3-	C14-	H4
5	6	10	9	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C4-	C5-	C9-	C8
5	6	10	21	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C4-	C5-	C9-	H
5	18	17	16	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C4-	C17-	C16-	C15
5	18	17	29	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C4-	C17-	C16-	O5
6	1	2	3	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C5-	C-	C1-	C2
6	1	2	11	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C5-	C-	C1-	C10
6	1	7	8	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C5-	C-	C6-	C7
6	1	7	22	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C5-	C-	C6-	H1
6	5	4	15	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C5-	C4-	C3-	C14
6	5	18	17	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C5-	C4-	C17-	C16
6	5	18	30	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C5-	C4-	C17-	H5
6	10	9	8	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C5-	C9-	C8-	C7
6	10	9	20	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C5-	C9-	C8-	O1
7	1	2	3	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C6-	C-	C1-	C2
7	1	2	11	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C6-	C-	C1-	C10
7	1	6	5	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C6-	C-	C5-	C4
7	1	6	10	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C6-	C-	C5-	C9
7	8	9	10	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C6-	C7-	C8-	C9
7	8	9	20	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C6-	C7-	C8-	O1

7	8	19	67	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C6-	C7-	O-	C28
8	9	10	21	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C7-	C8-	C9-	H
8	9	20	121	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C7-	C8-	O1-	C43
8	19	67	68	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C7-	O-	C28-	C29
8	19	67	83	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C7-	O-	C28-	H37
8	19	67	84	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C7-	O-	C28-	H38
9	8	7	22	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C8-	C7-	C6-	H1
9	8	19	67	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C8-	C7-	O-	C28
9	20	121	122	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C8-	O1-	C43-	C44
9	20	121	137	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C8-	O1-	C43-	H70
9	20	121	138	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C8-	O1-	C43-	H71
10	6	5	18	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C9-	C5-	C4-	C17
10	9	8	19	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C9-	C8-	C7-	O
10	9	20	121	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C9-	C8-	O1-	C43
11	2	3	14	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C10-	C1-	C2-	C13
11	12	13	14	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C10-	C11-	C12-	C13
11	12	13	25	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C10-	C11-	C12-	O3
11	12	24	31	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C10-	C11-	O2-	C18
12	13	14	26	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C11-	C12-	C13-	H3
12	13	25	49	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C11-	C12-	O3-	C23
12	24	31	32	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C11-	O2-	C18-	C19
12	24	31	47	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C11-	O2-	C18-	H15
12	24	31	48	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C11-	O2-	C18-	H16
13	12	11	23	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C12-	C11-	C10-	H2
13	12	24	31	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C12-	C11-	O2-	C18
13	25	49	50	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C12-	O3-	C23-	C24
13	25	49	65	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C12-	O3-	C23-	H26
13	25	49	66	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C12-	O3-	C23-	H27
14	3	4	15	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C13-	C2-	C3-	C14
14	13	12	24	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C13-	C12-	C11-	O2
14	13	25	49	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C13-	C12-	O3-	C23
15	4	5	18	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C14-	C3-	C4-	C17
15	16	17	18	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C14-	C15-	C16-	C17
15	16	17	29	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C14-	C15-	C16-	O5
15	16	28	85	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C14-	C15-	O4-	C33
16	17	18	30	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C15-	C16-	C17-	H5
16	17	29	103	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C15-	C16-	O5-	C38
16	28	85	86	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C15-	O4-	C33-	C34
16	28	85	101	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C15-	O4-	C33-	H48
16	28	85	102	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C15-	O4-	C33-	H49
17	16	15	27	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C16-	C15-	C14-	H4
17	16	28	85	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C16-	C15-	O4-	C33
17	29	103	104	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C16-	O5-	C38-	C39
17	29	103	119	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C16-	O5-	C38-	H59
17	29	103	120	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C16-	O5-	C38-	H60
18	17	16	28	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C17-	C16-	C15-	O4

18	17	29	103	3	12.55200	0.00000	-12.55200	0.00000	0.00000	0.00000 ;	C17-	C16-	O5-	C38
19	8	7	22	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O-	C7-	C6-	H1
19	8	9	20	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O-	C7-	C8-	O1
19	67	68	69	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O-	C28-	C29-	O10
19	67	68	81	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O-	C28-	C29-	H35
19	67	68	82	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O-	C28-	C29-	H36
20	9	10	21	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O1-	C8-	C9-	H
20	121	122	123	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O1-	C43-	C44-	O16
20	121	122	135	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O1-	C43-	C44-	H68
20	121	122	136	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O1-	C43-	C44-	H69
23	11	12	24	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	H2-	C10-	C11-	O2
24	12	13	25	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O2-	C11-	C12-	O3
24	31	32	33	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O2-	C18-	C19-	O6
24	31	32	45	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O2-	C18-	C19-	H13
24	31	32	46	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O2-	C18-	C19-	H14
25	13	14	26	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O3-	C12-	C13-	H3
25	49	50	51	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O3-	C23-	C24-	O8
25	49	50	63	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O3-	C23-	C24-	H24
25	49	50	64	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O3-	C23-	C24-	H25
27	15	16	28	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	H4-	C14-	C15-	O4
28	16	17	29	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O4-	C15-	C16-	O5
28	85	86	87	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O4-	C33-	C34-	O12
28	85	86	99	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O4-	C33-	C34-	H46
28	85	86	100	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O4-	C33-	C34-	H47
29	17	18	30	3	30.33400	0.00000	-30.33400	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O5-	C16-	C17-	H5
29	103	104	105	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O5-	C38-	C39-	O14
29	103	104	117	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O5-	C38-	C39-	H57
29	103	104	118	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O5-	C38-	C39-	H58
31	32	33	34	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C18-	C19-	O6-	C20
32	33	34	35	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C19-	O6-	C20-	C21
32	33	34	43	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C19-	O6-	C20-	H11
32	33	34	44	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C19-	O6-	C20-	H12
33	32	31	47	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O6-	C19-	C18-	H15
33	32	31	48	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O6-	C19-	C18-	H16
33	34	35	36	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O6-	C20-	C21-	O7
33	34	35	41	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O6-	C20-	C21-	H9
33	34	35	42	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O6-	C20-	C21-	H10
34	33	32	45	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C20-	O6-	C19-	H13
34	33	32	46	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C20-	O6-	C19-	H14
34	35	36	37	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C20-	C21-	O7-	C22
35	36	37	38	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C21-	O7-	C22-	H6
35	36	37	39	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C21-	O7-	C22-	H7
35	36	37	40	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C21-	O7-	C22-	H8
36	35	34	43	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O7-	C21-	C20-	H11
36	35	34	44	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O7-	C21-	C20-	H12
37	36	35	41	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C22-	O7-	C21-	H9

37	36	35	42	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C22-	O7-	C21-	H10
41	35	34	43	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H9-	C21-	C20-	H11
41	35	34	44	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H9-	C21-	C20-	H12
42	35	34	43	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H10-	C21-	C20-	H11
42	35	34	44	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H10-	C21-	C20-	H12
45	32	31	47	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H13-	C19-	C18-	H15
45	32	31	48	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H13-	C19-	C18-	H16
46	32	31	47	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H14-	C19-	C18-	H15
46	32	31	48	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H14-	C19-	C18-	H16
49	50	51	52	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C23-	C24-	O8-	C25
50	51	52	53	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C24-	O8-	C25-	C26
50	51	52	61	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C24-	O8-	C25-	H22
50	51	52	62	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C24-	O8-	C25-	H23
51	50	49	65	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O8-	C24-	C23-	H26
51	50	49	66	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O8-	C24-	C23-	H27
51	52	53	54	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O8-	C25-	C26-	O9
51	52	53	59	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O8-	C25-	C26-	H20
51	52	53	60	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O8-	C25-	C26-	H21
52	51	50	63	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C25-	O8-	C24-	H24
52	51	50	64	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C25-	O8-	C24-	H25
52	53	54	55	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C25-	C26-	O9-	C27
53	54	55	56	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C26-	O9-	C27-	H17
53	54	55	57	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C26-	O9-	C27-	H18
53	54	55	58	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C26-	O9-	C27-	H19
54	53	52	61	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O9-	C26-	C25-	H22
54	53	52	62	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O9-	C26-	C25-	H23
55	54	53	59	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C27-	O9-	C26-	H20
55	54	53	60	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C27-	O9-	C26-	H21
59	53	52	61	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H20-	C26-	C25-	H22
59	53	52	62	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H20-	C26-	C25-	H23
60	53	52	61	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H21-	C26-	C25-	H22
60	53	52	62	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H21-	C26-	C25-	H23
63	50	49	65	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H24-	C24-	C23-	H26
63	50	49	66	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H24-	C24-	C23-	H27
64	50	49	65	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H25-	C24-	C23-	H26
64	50	49	66	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H25-	C24-	C23-	H27
67	68	69	70	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C28-	C29-	O10-	C30
68	69	70	71	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C29-	O10-	C30-	C31
68	69	70	79	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C29-	O10-	C30-	H33
68	69	70	80	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C29-	O10-	C30-	H34
69	68	67	83	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O10-	C29-	C28-	H37
69	68	67	84	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O10-	C29-	C28-	H38
69	70	71	72	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O10-	C30-	C31-	O11
69	70	71	77	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O10-	C30-	C31-	H31
69	70	71	78	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O10-	C30-	C31-	H32
70	69	68	81	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C30-	O10-	C29-	H35

70	69	68	82	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C30-	O10-	C29-	H36
70	71	72	73	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C30-	C31-	O11-	C32
71	72	73	74	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C31-	O11-	C32-	H28
71	72	73	75	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C31-	O11-	C32-	H29
71	72	73	76	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C31-	O11-	C32-	H30
72	71	70	79	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O11-	C31-	C30-	H33
72	71	70	80	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O11-	C31-	C30-	H34
73	72	71	77	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C32-	O11-	C31-	H31
73	72	71	78	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C32-	O11-	C31-	H32
77	71	70	79	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H31-	C31-	C30-	H33
77	71	70	80	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H31-	C31-	C30-	H34
78	71	70	79	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H32-	C31-	C30-	H33
78	71	70	80	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H32-	C31-	C30-	H34
81	68	67	83	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H35-	C29-	C28-	H37
81	68	67	84	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H35-	C29-	C28-	H38
82	68	67	83	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H36-	C29-	C28-	H37
82	68	67	84	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H36-	C29-	C28-	H38
85	86	87	88	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C33-	C34-	O12-	C35
86	87	88	89	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C34-	O12-	C35-	C36
86	87	88	97	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C34-	O12-	C35-	H44
86	87	88	98	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C34-	O12-	C35-	H45
87	86	85	101	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O12-	C34-	C33-	H48
87	86	85	102	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O12-	C34-	C33-	H49
87	88	89	90	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O12-	C35-	C36-	O13
87	88	89	95	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O12-	C35-	C36-	H42
87	88	89	96	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O12-	C35-	C36-	H43
88	87	86	99	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C35-	O12-	C34-	H46
88	87	86	100	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C35-	O12-	C34-	H47
88	89	90	91	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C35-	C36-	O13-	C37
89	90	91	92	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C36-	O13-	C37-	H39
89	90	91	93	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C36-	O13-	C37-	H40
89	90	91	94	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C36-	O13-	C37-	H41
90	89	88	97	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O13-	C36-	C35-	H44
90	89	88	98	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O13-	C36-	C35-	H45
91	90	89	95	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C37-	O13-	C36-	H42
91	90	89	96	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C37-	O13-	C36-	H43
95	89	88	97	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H42-	C36-	C35-	H44
95	89	88	98	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H42-	C36-	C35-	H45
96	89	88	97	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H43-	C36-	C35-	H44
96	89	88	98	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H43-	C36-	C35-	H45
99	86	85	101	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H46-	C34-	C33-	H48
99	86	85	102	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H46-	C34-	C33-	H49
100	86	85	101	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H47-	C34-	C33-	H48
100	86	85	102	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H47-	C34-	C33-	H49
103	104	105	106	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C38-	C39-	O14-	C40
104	105	106	107	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C39-	O14-	C40-	C41

104	105	106	115	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C39-	O14-	C40-	H55
104	105	106	116	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C39-	O14-	C40-	H56
105	104	103	119	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O14-	C39-	C38-	H59
105	104	103	120	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O14-	C39-	C38-	H60
105	106	107	108	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O14-	C40-	C41-	O15
105	106	107	113	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O14-	C40-	C41-	H53
105	106	107	114	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O14-	C40-	C41-	H54
106	105	104	117	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C40-	O14-	C39-	H57
106	105	104	118	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C40-	O14-	C39-	H58
106	107	108	109	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C40-	C41-	O15-	C42
107	108	109	110	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C41-	O15-	C42-	H50
107	108	109	111	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C41-	O15-	C42-	H51
107	108	109	112	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C41-	O15-	C42-	H52
108	107	106	115	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O15-	C41-	C40-	H55
108	107	106	116	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O15-	C41-	C40-	H56
109	108	107	113	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C42-	O15-	C41-	H53
109	108	107	114	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C42-	O15-	C41-	H54
113	107	106	115	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H53-	C41-	C40-	H55
113	107	106	116	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H53-	C41-	C40-	H56
114	107	106	115	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H54-	C41-	C40-	H55
114	107	106	116	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H54-	C41-	C40-	H56
117	104	103	119	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H57-	C39-	C38-	H59
117	104	103	120	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H57-	C39-	C38-	H60
118	104	103	119	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H58-	C39-	C38-	H59
118	104	103	120	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H58-	C39-	C38-	H60
121	122	123	124	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C43-	C44-	O16-	C45
122	123	124	125	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C44-	O16-	C45-	C46
122	123	124	133	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C44-	O16-	C45-	H66
122	123	124	134	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C44-	O16-	C45-	H67
123	122	121	137	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O16-	C44-	C43-	H70
123	122	121	138	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O16-	C44-	C43-	H71
123	124	125	126	3	-1.15060	1.15060	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000 ;	O16-	C45-	C46-	O17
123	124	125	131	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O16-	C45-	C46-	H64
123	124	125	132	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O16-	C45-	C46-	H65
124	123	122	135	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C45-	O16-	C44-	H68
124	123	122	136	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C45-	O16-	C44-	H69
124	125	126	127	3	1.71544	2.84512	1.04600	-5.60656	0.00000	0.00000 ;	C45-	C46-	O17-	C47
125	126	127	128	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C46-	O17-	C47-	H61
125	126	127	129	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C46-	O17-	C47-	H62
125	126	127	130	3	1.58992	4.76976	0.00000	-6.35968	0.00000	0.00000 ;	C46-	O17-	C47-	H63
126	125	124	133	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O17-	C46-	C45-	H66
126	125	124	134	3	0.97905	2.93716	0.00000	-3.91622	0.00000	0.00000 ;	O17-	C46-	C45-	H67
127	126	125	131	3	1.60387	4.81160	0.00000	-6.41547	0.00000	0.00000 ;	C47-	O17-	C46-	H64
127	126	125	132	3	1.60387	4.81160	0.00000	-6.41547	0.00000	0.00000 ;	C47-	O17-	C46-	H65
131	125	124	133	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H64-	C46-	C45-	H66
131	125	124	134	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H64-	C46-	C45-	H67

132	125	124	133	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H65-	C46-	C45-	H66
132	125	124	134	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H65-	C46-	C45-	H67
135	122	121	137	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H68-	C44-	C43-	H70
135	122	121	138	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H68-	C44-	C43-	H71
136	122	121	137	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H69-	C44-	C43-	H70
136	122	121	138	3	0.62760	1.88280	0.00000	-2.51040	0.00000	0.00000 ;	H69-	C44-	C43-	H71

```
[ dihedrals ] ; impropers
; Z -CA-X -Y improper torsion. CA is any ring carbon (CA,CB,CN,CV,CW,CR,CK,CQ,CS,C*)
;#define improper_Z_CA_X_Y      180.0      4.60240      2
```

i	j	k	l	func	phase	kd	pn				
1	3	2	11	1	180.00	4.60240	2 ;	C-	C2-	C1-	C10
1	5	6	10	1	180.00	4.60240	2 ;	C-	C4-	C5-	C9
1	8	7	22	1	180.00	4.60240	2 ;	C-	C7-	C6-	H1
2	4	3	14	1	180.00	4.60240	2 ;	C1-	C3-	C2-	C13
2	12	11	23	1	180.00	4.60240	2 ;	C1-	C11-	C10-	H2
3	5	4	15	1	180.00	4.60240	2 ;	C2-	C4-	C3-	C14
3	13	14	26	1	180.00	4.60240	2 ;	C2-	C12-	C13-	H3
4	6	5	18	1	180.00	4.60240	2 ;	C3-	C5-	C4-	C17
4	16	15	27	1	180.00	4.60240	2 ;	C3-	C15-	C14-	H4
5	17	18	30	1	180.00	4.60240	2 ;	C4-	C16-	C17-	H5
6	9	10	21	1	180.00	4.60240	2 ;	C5-	C8-	C9-	H
7	1	6	2	1	180.00	4.60240	2 ;	C6-	C-	C5-	C1
7	9	8	19	1	180.00	4.60240	2 ;	C6-	C8-	C7-	O
8	10	9	20	1	180.00	4.60240	2 ;	C7-	C9-	C8-	O1
11	13	12	24	1	180.00	4.60240	2 ;	C10-	C12-	C11-	O2
12	14	13	25	1	180.00	4.60240	2 ;	C11-	C13-	C12-	O3
15	17	16	28	1	180.00	4.60240	2 ;	C14-	C16-	C15-	O4
16	18	17	29	1	180.00	4.60240	2 ;	C15-	C17-	C16-	O5

```
[ moleculetype ]
; molname      nrexcl
SOL            2
```

id	at	type	res	nr	res	name	at	name	cg	nr	charge	mass
1	OW		1		SOL	OW	1		-0.82		15.99940	
2	HW		1		SOL	HW1	1		0.41		1.00800	
3	HW		1		SOL	HW2	1		0.41		1.00800	

```
#ifndef FLEXIBLE
```

```
[ settles ]
; OW  funct  doh    dhh
1      1      0.1    0.16330
```

```
[ exclusions ]
1      2      3
2      1      3
3      1      2
```

```
#else
```

```
[ bonds ]
; i      j      funct  length  force_constant
1      2      1      0.1    345000  0.1    345000
1      3      1      0.1    345000  0.1    345000
```

```
[ angles ]
; i      j      k      funct  angle  force_constant
2      1      3      1      109.47  383    109.47  383
```

```
#endif
```

```
[ system ]
TP6EO2M in water
```

```
[ molecules ]
; Compound      nmols
  TP6EO2M        8
  SOL            4784
```