

**Supporting Table A7** NBO Analysis using WB97XD/631++G(d)

Systems	Donor NBO (i)	AcceptorNBO (j)	E(2) kcal/mol	E(j)-E(i) a.u.	F(i,j) a.u.
Water dimer cluster	LP ( 2) O 1	BD*(1) O 2 - H5	13.62	1.21	0.115
water-methanol cluster	LP ( 2) O 1	BD*(1) O 8 - H9	16.08	1.2	0.124

**Supporting Table A8** NBOAnalysis using WB97XD/631++G(d) for 1CH4@512 cluster

Donor NBO (i)	AcceptorNBO (j)	E(2) kcal/mol	E(j)-E(i) a.u.	F(i,j) a.u.
CR ( 1) O 1	RY*( 1) H 57	0.82	20.26	0.115
LP ( 1) O 1	RY*( 1) H 57	0.77	1.82	0.034
LP ( 1) O 1	RY*( 2) H 58	0.5	2.41	0.031
LP ( 2) O 1	RY*( 3) H 57	1.17	2.84	0.052
LP ( 2) O 1	RY*( 1) H 58	1.04	2.57	0.046
LP ( 2) O 1	RY*( 2) H 58	0.65	2.15	0.034
BD ( 1) O 1 - H 57	RY*( 1) O 3	0.06	1.37	0.008
BD ( 1) O 1 - H 57	RY*( 6) O 3	0.09	2.44	0.014
BD ( 1) O 1 - H 58	RY*( 4) O 3	0.09	2.08	0.012
LP ( 1) O 1	RY*( 1) O 3	0.09	1.2	0.009
CR ( 1) O 1	BD*( 1) O 5 - H 35	0.07	19.78	0.034
LP ( 1) O 1	BD*( 1) O 5 - H 35	4.68	1.34	0.071
LP ( 2) O 1	RY*( 1) O 5	0.24	1.04	0.014
LP ( 2) O 1	RY*( 4) O 5	0.05	1.87	0.009
LP ( 2) O 1	RY*( 5) O 5	0.05	2.07	0.009
LP ( 2) O 1	RY*( 1) H 35	0.19	2.01	0.017
LP ( 2) O 1	RY*( 2) H 35	0.25	2.05	0.02
LP ( 2) O 1	BD*( 1) O 5 - H 35	10.24	1.08	0.094
BD ( 1) O 1 - H 58	BD*( 1) O 13 - H 42	0.06	1.49	0.009
CR ( 1) O 1	BD*( 1) O 13 - H 42	0.06	19.77	0.032
LP ( 1) O 1	RY*( 12) O 13	0.06	3.49	0.013
LP ( 1) O 1	BD*( 1) O 13 - H 42	8.87	1.34	0.097
LP ( 2) O 1	RY*( 1) O 13	0.07	1.19	0.008
LP ( 2) O 1	RY*( 2) O 13	0.09	1.19	0.009
LP ( 2) O 1	RY*( 3) O 13	0.05	1.19	0.007
LP ( 2) O 1	RY*( 1) H 42	0.2	2	0.018
LP ( 2) O 1	RY*( 3) H 42	0.13	2.26	0.015
LP ( 2) O 1	BD*( 1) O 13 - H 42	4.1	1.08	0.059
LP ( 2) O 1	RY*( 1) H 64	0.06	1	0.007
LP ( 2) O 1	RY*( 1) H 65	0.1	0.99	0.009
CR ( 1) O 2	RY*( 1) H 50	1.04	20.25	0.13
LP ( 1) O 2	RY*( 2) H 49	0.72	2.98	0.042
LP ( 1) O 2	RY*( 1) H 50	0.77	1.82	0.034
LP ( 2) O 2	RY*( 1) H 49	1.35	2.84	0.056
LP ( 2) O 2	RY*( 3) H 50	0.97	2.85	0.047
BD ( 1) O 2 - H 50	RY*( 3) O 3	0.07	1.5	0.009
BD ( 1) O 2 - H 50	RY*( 5) O 3	0.13	2.24	0.015

LP ( 1) O 2	RY*( 1) O 3	0.1	1.24	0.01
CR ( 1) O 2	BD*( 1) O 4 - H 28	0.07	19.73	0.035
LP ( 1) O 2	BD*( 1) O 4 - H 28	4	1.3	0.064
LP ( 2) O 2	RY*( 1) O 4	0.34	0.99	0.017
LP ( 2) O 2	RY*( 2) O 4	0.42	1.01	0.018
LP ( 2) O 2	RY*( 1) H 28	0.4	1.57	0.023
LP ( 2) O 2	RY*( 5) H 28	0.09	1.54	0.011
LP ( 2) O 2	BD*( 1) O 4 - H 28	12.22	1.04	0.101
CR ( 1) O 2	BD*( 1) O 12 - H 45	0.07	19.75	0.034
LP ( 1) O 2	RY*( 2) O 12	0.05	1.39	0.008
LP ( 1) O 2	RY*( 11) O 12	0.06	3.3	0.012
LP ( 1) O 2	BD*( 1) O 12 - H 45	9.54	1.32	0.1
LP ( 2) O 2	RY*( 2) O 12	0.12	1.13	0.01
LP ( 2) O 2	RY*( 1) H 45	0.32	1.56	0.02
LP ( 2) O 2	BD*( 1) O 12 - H 45	3.94	1.06	0.058
LP ( 2) O 2	RY*( 1) H 65	0.09	1.04	0.009
BD ( 1) O 3 - H 53	BD*( 1) O 1 - H 57	0.06	1.48	0.008
CR ( 1) O 3	BD*( 1) O 1 - H 57	0.06	19.76	0.032
LP ( 1) O 3	RY*( 1) O 1	0.06	1.14	0.008
LP ( 1) O 3	RY*( 3) O 1	0.19	1.23	0.014
LP ( 1) O 3	RY*( 11) O 1	0.08	3.17	0.014
LP ( 1) O 3	RY*( 1) H 57	0.17	1.77	0.016
LP ( 1) O 3	BD*( 1) O 1 - H 57	13.08	1.23	0.113
LP ( 2) O 3	RY*( 1) H 57	0.17	1.71	0.015
LP ( 2) O 3	BD*( 1) O 1 - H 57	0.16	1.16	0.012
BD ( 1) O 3 - H 53	BD*( 1) O 2 - H 50	0.07	1.44	0.009
CR ( 1) O 3	BD*( 1) O 2 - H 50	0.09	19.72	0.037
LP ( 1) O 3	RY*( 1) O 2	0.09	1.17	0.009
LP ( 1) O 3	RY*( 1) H 50	0.07	1.73	0.01
LP ( 1) O 3	BD*( 1) O 2 - H 50	0.67	1.19	0.025
LP ( 2) O 3	RY*( 1) O 2	0.3	1.1	0.016
LP ( 2) O 3	RY*( 2) O 2	0.38	1.08	0.018
LP ( 2) O 3	RY*( 3) H 49	0.05	1.19	0.007
LP ( 2) O 3	RY*( 1) H 50	0.31	1.66	0.02
LP ( 2) O 3	RY*( 5) H 50	0.08	3.23	0.014
LP ( 2) O 3	BD*( 1) O 2 - H 50	15.96	1.12	0.119
CR ( 1) O 3	RY*( 1) H 53	0.97	20.28	0.125
LP ( 1) O 3	RY*( 1) H 54	0.69	2.99	0.041
LP ( 2) O 3	RY*( 3) H 53	0.66	2.92	0.039
LP ( 2) O 3	RY*( 1) H 54	0.65	2.93	0.039
LP ( 2) O 3	RY*( 2) H 54	0.51	2.79	0.034
BD ( 1) O 3 - H 53	RY*( 5) O 8	0.08	2.59	0.012
BD ( 1) O 3 - H 54	RY*( 2) O 8	0.07	1.51	0.009
LP ( 1) O 3	RY*( 1) O 8	0.07	1.04	0.008
BD ( 1) O 4 - H 27	RY*( 3) O 2	0.06	1.49	0.008
BD ( 1) O 4 - H 28	RY*( 5) O 2	0.1	2.57	0.015
LP ( 1) O 4	RY*( 1) O 2	0.11	1.18	0.01
LP ( 2) O 4	RY*( 2) O 2	0.06	1.03	0.007
CR ( 1) O 4	RY*( 1) H 28	0.97	20.25	0.125
LP ( 1) O 4	RY*( 2) H 27	0.75	2.88	0.042

LP ( 1) O 4	RY*( 1) H 28	0.52	1.75	0.027
LP ( 1) O 4	RY*( 3) H 28	0.55	3.06	0.037
LP ( 2) O 4	RY*( 1) H 27	1.15	2.87	0.052
LP ( 2) O 4	RY*( 2) H 28	0.5	2.73	0.033
CR ( 1) O 4	BD*( 1) O 7 - H 29	0.07	19.76	0.033
LP ( 1) O 4	BD*( 1) O 7 - H 29	0.77	1.27	0.028
LP ( 2) O 4	RY*( 1) O 7	0.37	1.12	0.018
LP ( 2) O 4	RY*( 10) O 7	0.06	3.25	0.013
LP ( 2) O 4	RY*( 1) H 29	0.23	1.88	0.019
LP ( 2) O 4	RY*( 2) H 29	0.09	2.45	0.013
LP ( 2) O 4	BD*( 1) O 7 - H 29	14.04	1.13	0.113
LP ( 1) O 4	RY*( 1) O 14	0.17	1.19	0.013
LP ( 1) O 4	RY*( 2) O 14	0.09	1.18	0.009
LP ( 1) O 4	RY*( 3) O 14	0.05	1.15	0.007
LP ( 1) O 4	RY*( 11) O 14	0.05	2.74	0.011
LP ( 1) O 4	RY*( 3) H 26	0.06	2.68	0.012
LP ( 1) O 4	RY*( 5) H 26	0.08	1.99	0.011
LP ( 1) O 4	BD*( 1) O 14 - H 26	10.44	1.24	0.102
LP ( 2) O 4	RY*( 1) O 14	0.17	1.05	0.012
LP ( 2) O 4	RY*( 1) H 26	0.08	1.95	0.011
LP ( 2) O 4	BD*( 1) O 14 - H 26	0.32	1.11	0.017
BD ( 1) O 4 - H 27	RY*( 1) H 62	0.05	1.55	0.008
LP ( 2) O 4	RY*( 1) H 62	0.08	1.2	0.009
BD ( 1) O 5 - H 35	RY*( 2) O 1	0.07	1.44	0.009
BD ( 1) O 5 - H 35	RY*( 3) O 1	0.08	1.39	0.009
BD ( 1) O 5 - H 35	RY*( 5) O 1	0.11	2.05	0.013
BD ( 1) O 5 - H 36	RY*( 6) O 1	0.05	2.19	0.01
LP ( 1) O 5	RY*( 3) O 1	0.06	1.15	0.008
LP ( 1) O 5	BD*( 1) O 1 - H 58	0.06	1.16	0.008
LP ( 2) O 5	RY*( 1) O 1	0.14	0.93	0.01
CR ( 1) O 5	RY*( 2) H 35	0.57	20.67	0.097
CR ( 1) O 5	RY*( 2) H 36	0.55	20.72	0.095
LP ( 1) O 5	RY*( 2) H 35	0.8	2.18	0.037
LP ( 1) O 5	RY*( 2) H 36	0.7	2.23	0.035
LP ( 2) O 5	RY*( 1) H 35	0.97	2.02	0.04
LP ( 2) O 5	RY*( 1) H 36	0.98	1.95	0.039
BD ( 1) O 5 - H 36	RY*( 3) O 6	0.16	1.55	0.014
BD ( 1) O 5 - H 36	RY*( 5) O 6	0.06	1.95	0.01
LP ( 1) O 5	RY*( 1) O 6	0.08	1.08	0.008
LP ( 1) O 5	BD*( 1) O 6 - H 34	0.06	1.16	0.007
LP ( 2) O 5	RY*( 2) O 6	0.12	1.03	0.01
LP ( 1) O 5	RY*( 2) H 38	0.05	2.39	0.01
LP ( 1) O 5	BD*( 1) O 20 - H 38	0.14	1.24	0.012
LP ( 2) O 5	RY*( 1) O 20	0.09	1.17	0.009
LP ( 2) O 5	RY*( 1) H 38	0.1	1.81	0.012
LP ( 2) O 5	RY*( 2) H 38	0.08	2.26	0.012
LP ( 2) O 5	BD*( 1) O 20 - H 38	11.78	1.11	0.102
BD ( 1) O 5 - H 35	RY*( 1) H 64	0.1	1.37	0.011
LP ( 1) O 5	BD*( 1) C 61 - H 64	0.25	1.16	0.015
BD ( 1) O 6 - H 34	BD*( 1) O 5 - H 36	0.06	1.49	0.009

CR ( 1) O 6	BD*( 1) O 5 - H 36	0.07	19.77	0.034
LP ( 1) O 6	BD*( 1) O 5 - H 36	3	1.33	0.056
LP ( 2) O 6	RY*( 1) O 5	0.12	1.05	0.01
LP ( 2) O 6	RY*( 2) O 5	0.17	1.15	0.013
LP ( 2) O 6	RY*( 4) O 5	0.09	1.88	0.012
LP ( 2) O 6	RY*( 14) O 5	0.07	3.06	0.013
LP ( 2) O 6	RY*( 1) H 36	0.19	1.96	0.017
LP ( 2) O 6	RY*( 2) H 36	0.22	2.11	0.019
LP ( 2) O 6	BD*( 1) O 5 - H 36	12.16	1.09	0.103
BD ( 1) O 6 - H 33	RY*( 3) H 34	0.5	2.35	0.031
CR ( 1) O 6	RY*( 1) H 33	1.06	20.25	0.131
LP ( 1) O 6	RY*( 2) H 34	0.73	2.71	0.04
LP ( 2) O 6	RY*( 3) H 33	0.93	2.86	0.046
LP ( 2) O 6	RY*( 1) H 34	1.23	2.24	0.047
BD ( 1) O 6 - H 33	RY*( 1) O 8	0.05	1.26	0.007
BD ( 1) O 6 - H 34	RY*( 4) O 8	0.07	1.72	0.01
LP ( 1) O 6	RY*( 1) O 8	0.11	1.08	0.01
LP ( 2) O 6	RY*( 1) O 8	0.05	0.84	0.006
CR ( 1) O 6	BD*( 1) O 17 - H 56	0.07	19.77	0.032
LP ( 1) O 6	RY*( 1) O 17	0.1	1.29	0.01
LP ( 1) O 6	RY*( 10) O 17	0.06	3.22	0.012
LP ( 1) O 6	RY*( 1) H 56	0.05	2.26	0.01
LP ( 1) O 6	RY*( 2) H 56	0.06	2.53	0.011
LP ( 1) O 6	BD*( 1) O 17 - H 56	10.72	1.33	0.107
LP ( 2) O 6	RY*( 1) O 17	0.23	1.05	0.014
LP ( 2) O 6	RY*( 1) H 56	0.16	2.02	0.016
LP ( 2) O 6	RY*( 3) H 56	0.08	2.64	0.013
LP ( 2) O 6	BD*( 1) O 17 - H 56	2.39	1.09	0.046
BD ( 1) O 6 - H 33	RY*( 1) H 64	0.07	1.43	0.009
BD ( 1) O 6 - H 34	RY*( 1) H 64	0.05	1.42	0.008
BD ( 1) O 7 - H 29	RY*( 3) O 4	0.1	1.5	0.011
BD ( 1) O 7 - H 29	RY*( 4) O 4	0.06	1.84	0.009
LP ( 1) O 7	RY*( 2) O 4	0.05	1.07	0.007
LP ( 1) O 7	BD*( 1) O 4 - H 27	0.05	1.11	0.007
CR ( 1) O 7	RY*( 1) H 29	0.66	20.45	0.104
CR ( 1) O 7	RY*( 1) H 30	0.98	20.27	0.126
LP ( 1) O 7	RY*( 2) H 29	0.95	2.47	0.043
LP ( 1) O 7	RY*( 2) H 30	0.96	2.6	0.045
LP ( 2) O 7	RY*( 1) H 29	0.87	1.89	0.036
LP ( 2) O 7	RY*( 1) H 30	0.76	1.71	0.032
CR ( 1) O 7	BD*( 1) O 8 - H 31	0.1	19.64	0.04
LP ( 1) O 7	RY*( 1) H 31	0.05	1.7	0.009
LP ( 1) O 7	BD*( 1) O 8 - H 31	0.27	1.08	0.015
LP ( 2) O 7	RY*( 3) O 8	0.34	1.28	0.019
LP ( 2) O 7	RY*( 1) H 31	0.09	1.7	0.011
LP ( 2) O 7	BD*( 1) O 8 - H 31	19.25	1.08	0.129
BD ( 1) O 7 - H 29	RY*( 5) O 18	0.05	1.97	0.009
BD ( 1) O 7 - H 30	RY*( 2) O 18	0.12	1.55	0.012
BD ( 1) O 7 - H 30	RY*( 3) O 18	0.05	1.55	0.008
LP ( 1) O 7	BD*( 1) O 18 - H 52	0.08	1.15	0.009

LP ( 2) O 7	RY*( 1) O 18	0.06	1.04	0.007
BD ( 1) O 7 - H 29	RY*( 1) H 62	0.06	1.52	0.008
LP ( 1) O 7	BD*( 1) C 61 - H 62	0.23	1.11	0.014
LP ( 1) O 8	RY*( 2) O 3	0.06	1.25	0.008
LP ( 1) O 8	BD*( 1) O 3 - H 53	7.68	1.28	0.089
LP ( 2) O 8	RY*( 1) O 3	0.33	0.95	0.016
LP ( 2) O 8	RY*( 2) O 3	0.27	0.96	0.014
LP ( 2) O 8	RY*( 1) H 53	0.27	1.55	0.018
LP ( 2) O 8	RY*( 5) H 53	0.06	2.15	0.011
LP ( 2) O 8	BD*( 1) O 3 - H 53	5.53	0.98	0.066
BD ( 1) O 8 - H 31	BD*( 1) O 6 - H 33	0.1	1.46	0.011
CR ( 1) O 8	BD*( 1) O 6 - H 33	0.08	19.74	0.035
LP ( 1) O 8	BD*( 1) O 6 - H 33	5.51	1.33	0.076
LP ( 2) O 8	RY*( 1) O 6	0.11	0.96	0.009
LP ( 2) O 8	RY*( 2) O 6	0.17	1.04	0.012
LP ( 2) O 8	RY*( 3) O 6	0.06	1.19	0.007
LP ( 2) O 8	RY*( 1) H 33	0.4	1.57	0.023
LP ( 2) O 8	BD*( 1) O 6 - H 33	10.12	1.03	0.091
BD ( 1) O 8 - H 31	RY*( 2) O 7	0.09	1.72	0.011
BD ( 1) O 8 - H 32	RY*( 3) O 7	0.07	1.68	0.01
LP ( 2) O 8	RY*( 1) O 7	0.08	1.04	0.008
CR ( 1) O 8	RY*( 1) H 31	1.17	20.32	0.138
LP ( 1) O 8	RY*( 1) H 31	0.76	1.9	0.034
LP ( 1) O 8	RY*( 2) H 32	0.78	3	0.043
LP ( 2) O 8	RY*( 3) H 31	0.92	2.83	0.046
LP ( 2) O 8	RY*( 1) H 32	1.41	2.82	0.057
CR ( 1) O 9	RY*( 1) H 21	0.69	20.43	0.106
CR ( 1) O 9	RY*( 1) H 22	0.87	20.35	0.119
LP ( 1) O 9	RY*( 2) H 21	0.77	2.22	0.037
LP ( 1) O 9	RY*( 2) H 22	0.8	2.28	0.038
LP ( 1) O 9	RY*( 4) H 22	0.51	1.54	0.025
LP ( 2) O 9	RY*( 1) H 21	0.73	1.86	0.033
LP ( 2) O 9	RY*( 1) H 22	0.55	1.77	0.028
LP ( 2) O 9	RY*( 3) H 22	0.52	3.05	0.036
CR ( 1) O 9	BD*( 1) O 10 - H 40	0.07	19.7	0.034
LP ( 1) O 9	RY*( 2) H 40	0.06	2.27	0.01
LP ( 1) O 9	BD*( 1) O 10 - H 40	0.26	1.16	0.016
LP ( 2) O 9	RY*( 1) O 10	0.08	1.2	0.009
LP ( 2) O 9	RY*( 5) O 10	0.06	1.82	0.01
LP ( 2) O 9	RY*( 13) O 10	0.08	3.37	0.015
LP ( 2) O 9	RY*( 1) H 40	0.14	1.68	0.014
LP ( 2) O 9	BD*( 1) O 10 - H 40	16.21	1.12	0.12
BD ( 1) O 9 - H 21	RY*( 1) O 11	0.07	1.39	0.009
BD ( 1) O 9 - H 21	RY*( 4) O 11	0.09	2.14	0.013
LP ( 2) O 9	RY*( 1) O 11	0.07	1.07	0.008
BD ( 1) O 9 - H 22	RY*( 3) O 19	0.12	1.94	0.014
LP ( 2) O 9	RY*( 1) O 19	0.07	1.13	0.008
LP ( 1) O 9	BD*( 1) C 61 - H 63	0.4	1.08	0.018
LP ( 2) O 9	RY*( 1) C 61	0.07	0.93	0.007
BD ( 1) O 10 - H 40	RY*( 1) O 9	0.09	1.58	0.011

BD ( 1) O 10 - H 40	RY*( 2) O 9	0.07	1.89	0.01
LP ( 2) O 10	RY*( 1) O 9	0.06	1.31	0.008
CR ( 1) O 10	RY*( 1) H 39	0.94	20.28	0.123
CR ( 1) O 10	RY*( 1) H 40	1.02	20.25	0.128
LP ( 1) O 10	RY*( 2) H 39	0.98	2.23	0.042
LP ( 1) O 10	RY*( 2) H 40	0.93	2.23	0.041
LP ( 2) O 10	RY*( 1) H 39	0.56	1.75	0.028
LP ( 2) O 10	RY*( 3) H 39	0.53	3.09	0.036
LP ( 2) O 10	RY*( 1) H 40	0.57	1.71	0.028
LP ( 2) O 10	RY*( 3) H 40	0.5	3.14	0.036
BD ( 1) O 10 - H 39	RY*( 1) O 13	0.06	1.52	0.009
BD ( 1) O 10 - H 39	RY*( 2) O 13	0.07	1.52	0.009
BD ( 1) O 10 - H 39	RY*( 4) O 13	0.08	2.08	0.012
LP ( 2) O 10	RY*( 1) O 13	0.07	1.24	0.008
CR ( 1) O 10	BD*( 1) O 20 - H 37	0.09	19.68	0.038
LP ( 1) O 10	BD*( 1) O 20 - H 37	0.25	1.09	0.015
LP ( 2) O 10	RY*( 1) O 20	0.14	1.21	0.012
LP ( 2) O 10	RY*( 2) O 20	0.05	1.25	0.007
LP ( 2) O 10	RY*( 7) O 20	0.08	1.99	0.011
LP ( 2) O 10	RY*( 10) O 20	0.07	3.05	0.013
LP ( 2) O 10	RY*( 1) H 37	0.11	1.7	0.012
LP ( 2) O 10	BD*( 1) O 20 - H 37	17.2	1.14	0.125
BD ( 1) O 10 - H 39	RY*( 1) C 61	0.06	1.25	0.008
LP ( 1) O 10	RY*( 1) C 61	0.23	0.92	0.013
LP ( 1) O 10	RY*( 1) H 62	0.06	1.11	0.007
LP ( 1) O 10	BD*( 1) C 61 - H 62	0.06	1	0.007
BD ( 1) O 11 - H 23	BD*( 1) O 9 - H 21	0.05	1.48	0.008
BD ( 1) O 11 - H 24	BD*( 1) O 9 - H 21	0.05	1.48	0.008
CR ( 1) O 11	BD*( 1) O 9 - H 21	0.06	19.73	0.03
LP ( 1) O 11	RY*( 2) H 21	0.07	2.27	0.011
LP ( 1) O 11	BD*( 1) O 9 - H 21	0.16	1.21	0.013
LP ( 2) O 11	RY*( 1) O 9	0.07	1.29	0.008
LP ( 2) O 11	RY*( 2) O 9	0.07	1.59	0.009
LP ( 2) O 11	RY*( 11) O 9	0.07	3.32	0.014
LP ( 2) O 11	RY*( 1) H 21	0.13	1.87	0.014
LP ( 2) O 11	RY*( 2) H 21	0.11	2.2	0.014
LP ( 2) O 11	BD*( 1) O 9 - H 21	14.37	1.14	0.114
CR ( 1) O 11	RY*( 2) H 23	0.54	20.7	0.095
CR ( 1) O 11	RY*( 1) H 24	0.57	20.54	0.097
LP ( 1) O 11	RY*( 2) H 23	0.77	2.18	0.037
LP ( 1) O 11	RY*( 2) H 24	0.85	2.41	0.041
LP ( 2) O 11	RY*( 1) H 23	0.86	2.1	0.038
LP ( 2) O 11	RY*( 3) H 23	0.54	2.97	0.036
LP ( 2) O 11	RY*( 1) H 24	0.77	1.95	0.035
LP ( 2) O 11	RY*( 3) H 24	0.58	2.96	0.037
BD ( 1) O 11 - H 23	RY*( 6) O 12	0.06	2.19	0.01
BD ( 1) O 11 - H 24	RY*( 2) O 12	0.07	1.45	0.009
BD ( 1) O 11 - H 24	RY*( 4) O 12	0.11	2.07	0.014
LP ( 1) O 11	RY*( 1) O 12	0.12	0.98	0.01
LP ( 2) O 11	RY*( 1) O 12	0.07	0.91	0.007

BD ( 1) O 11 - H 23	RY*( 1) O 14	0.07	1.33	0.008
BD ( 1) O 11 - H 23	RY*( 3) O 14	0.06	1.29	0.008
BD ( 1) O 11 - H 23	RY*( 4) O 14	0.06	2.62	0.012
LP ( 1) O 11	RY*( 3) O 14	0.08	1.03	0.008
LP ( 1) O 11	BD*( 1) O 14 - H 25	0.06	1.13	0.008
LP ( 2) O 11	RY*( 1) O 14	0.16	0.99	0.011
LP ( 1) O 11	RY*( 3) C 61	0.11	1.13	0.01
LP ( 1) O 11	BD*( 1) C 61 - H 63	0.1	1.13	0.01
LP ( 2) O 11	RY*( 1) H 65	0.05	1.01	0.006
BD ( 1) O 12 - H 45	RY*( 1) O 2	0.07	1.39	0.009
BD ( 1) O 12 - H 45	RY*( 6) O 2	0.06	2.24	0.01
BD ( 1) O 12 - H 46	RY*( 4) O 2	0.08	1.73	0.011
LP ( 1) O 12	RY*( 2) O 2	0.05	1.07	0.007
LP ( 2) O 12	RY*( 1) O 2	0.09	1.08	0.009
BD ( 1) O 12 - H 45	BD*( 1) O 11 - H 24	0.08	1.52	0.01
BD ( 1) O 12 - H 46	BD*( 1) O 11 - H 24	0.05	1.5	0.008
CR ( 1) O 12	BD*( 1) O 11 - H 24	0.07	19.78	0.034
LP ( 1) O 12	RY*( 1) H 24	0.13	2.05	0.015
LP ( 2) O 12	RY*( 1) O 11	0.07	1.19	0.008
LP ( 2) O 12	RY*( 2) O 11	0.16	1.3	0.013
LP ( 2) O 12	RY*( 4) O 11	0.06	1.94	0.009
LP ( 2) O 12	RY*( 14) O 11	0.06	3.38	0.012
LP ( 2) O 12	RY*( 1) H 24	0.19	2.05	0.018
LP ( 2) O 12	RY*( 2) H 24	0.11	2.44	0.015
LP ( 2) O 12	BD*( 1) O 11 - H 24	14.23	1.21	0.117
CR ( 1) O 12	RY*( 1) H 45	0.8	20.21	0.114
LP ( 1) O 12	RY*( 3) H 45	0.74	2.95	0.042
LP ( 1) O 12	RY*( 2) H 46	0.85	2.28	0.039
LP ( 2) O 12	RY*( 1) H 45	0.58	1.65	0.028
LP ( 2) O 12	RY*( 1) H 46	0.98	2.87	0.048
LP ( 1) O 12	RY*( 1) O 13	0.1	1.32	0.01
LP ( 1) O 12	RY*( 2) O 13	0.06	1.32	0.008
LP ( 1) O 12	RY*( 4) O 13	0.06	1.88	0.009
LP ( 1) O 12	RY*( 3) H 41	0.31	1.95	0.022
LP ( 1) O 12	BD*( 1) O 13 - H 41	11.42	1.21	0.105
LP ( 2) O 12	BD*( 1) O 13 - H 41	0.24	1.2	0.015
BD ( 1) O 12 - H 45	RY*( 1) H 65	0.11	1.42	0.011
BD ( 1) O 12 - H 46	RY*( 2) H 65	0.17	1.85	0.016
BD ( 1) O 12 - H 46	BD*( 1) C 61 - H 65	0.06	1.42	0.008
LP ( 2) O 12	RY*( 1) H 65	0.11	1.12	0.01
BD ( 1) O 13 - H 42	RY*( 1) O 1	0.11	1.3	0.011
BD ( 1) O 13 - H 42	RY*( 4) O 1	0.1	2.22	0.013
LP ( 1) O 13	RY*( 2) O 1	0.07	1.19	0.008
BD ( 1) O 13 - H 41	BD*( 1) O 10 - H 39	0.1	1.49	0.011
BD ( 1) O 13 - H 42	BD*( 1) O 10 - H 39	0.11	1.49	0.012
CR ( 1) O 13	BD*( 1) O 10 - H 39	0.08	19.74	0.036
LP ( 1) O 13	RY*( 1) H 39	0.05	1.82	0.009
LP ( 1) O 13	RY*( 2) H 39	0.06	2.35	0.011
LP ( 1) O 13	BD*( 1) O 10 - H 39	0.17	1.24	0.013
LP ( 2) O 13	RY*( 1) O 10	0.07	1.21	0.008

LP ( 2) O 13	RY*( 2) O 10	0.06	1.41	0.009
LP ( 2) O 13	RY*( 13) O 10	0.09	3.37	0.016
LP ( 2) O 13	RY*( 1) H 39	0.19	1.72	0.016
LP ( 2) O 13	RY*( 2) H 39	0.07	2.25	0.012
LP ( 2) O 13	BD*( 1) O 10 - H 39	16.37	1.13	0.122
BD ( 1) O 13 - H 41	RY*( 5) O 12	0.08	2.48	0.012
LP ( 1) O 13	RY*( 3) O 12	0.06	1.15	0.007
LP ( 1) O 13	BD*( 1) O 12 - H 46	0.06	1.15	0.008
LP ( 2) O 13	RY*( 1) O 12	0.06	0.9	0.006
CR ( 1) O 13	RY*( 3) H 41	0.71	20.44	0.108
LP ( 1) O 13	RY*( 3) H 41	0.56	1.94	0.029
LP ( 1) O 13	RY*( 3) H 42	0.54	2.37	0.032
LP ( 2) O 13	RY*( 1) H 41	0.7	2.31	0.036
LP ( 2) O 13	RY*( 2) H 41	0.73	2.82	0.041
LP ( 2) O 13	RY*( 1) H 42	0.71	2.02	0.034
LP ( 2) O 13	RY*( 2) H 42	0.56	2.78	0.036
LP ( 1) O 13	RY*( 1) C 61	0.08	1.04	0.008
LP ( 1) O 13	BD*( 1) C 61 - H 65	0.33	1.12	0.017
LP ( 2) O 13	RY*( 1) C 61	0.11	0.94	0.009
LP ( 2) O 13	RY*( 1) H 62	0.1	1.12	0.01
LP ( 2) O 13	RY*( 1) H 65	0.25	1	0.014
BD ( 1) O 14 - H 26	RY*( 1) O 4	0.08	1.37	0.009
BD ( 1) O 14 - H 26	RY*( 6) O 4	0.08	2.17	0.012
LP ( 2) O 14	RY*( 1) O 4	0.08	1.18	0.008
CR ( 1) O 14	BD*( 1) O 11 - H 23	0.07	19.78	0.034
LP ( 1) O 14	RY*( 1) O 11	0.25	1.09	0.015
LP ( 1) O 14	RY*( 3) O 11	0.07	1.21	0.008
LP ( 1) O 14	RY*( 14) O 11	0.09	3.27	0.016
LP ( 1) O 14	RY*( 1) H 23	0.2	2.1	0.018
LP ( 1) O 14	RY*( 2) H 23	0.22	2.11	0.019
LP ( 1) O 14	BD*( 1) O 11 - H 23	11.77	1.1	0.102
LP ( 2) O 14	BD*( 1) O 11 - H 23	2.86	1.32	0.055
LP ( 1) O 14	RY*( 1) H 25	1.11	2.86	0.05
LP ( 1) O 14	RY*( 2) H 26	0.75	2.6	0.04
LP ( 2) O 14	RY*( 2) H 25	0.71	2.87	0.041
LP ( 2) O 14	RY*( 1) H 26	0.94	2.09	0.04
CR ( 1) O 14	BD*( 1) O 15 - H 47	0.07	19.78	0.034
LP ( 1) O 14	RY*( 1) O 15	0.14	1	0.011
LP ( 1) O 14	RY*( 2) O 15	0.06	1.43	0.008
LP ( 1) O 14	RY*( 1) H 47	0.21	2.02	0.018
LP ( 1) O 14	RY*( 2) H 47	0.08	2.28	0.012
LP ( 1) O 14	BD*( 1) O 15 - H 47	1.93	1.11	0.041
LP ( 2) O 14	RY*( 1) O 15	0.13	1.21	0.011
LP ( 2) O 14	RY*( 13) O 15	0.08	3.37	0.015
LP ( 2) O 14	RY*( 1) H 47	0.06	2.23	0.01
LP ( 2) O 14	RY*( 2) H 47	0.06	2.5	0.011
LP ( 2) O 14	BD*( 1) O 15 - H 47	11.26	1.32	0.109
BD ( 1) O 15 - H 47	RY*( 1) O 14	0.09	1.33	0.01
LP ( 1) O 15	RY*( 2) O 14	0.12	1.03	0.01
LP ( 1) O 15	BD*( 1) O 14 - H 25	0.06	1.1	0.007



LP ( 2) O 15	RY*( 1) O 14	0.12	1.01	0.01
CR ( 1) O 15	RY*( 1) H 47	0.52	20.61	0.092
CR ( 1) O 15	RY*( 1) H 48	0.8	20.36	0.114
LP ( 1) O 15	RY*( 2) H 47	0.95	2.33	0.042
LP ( 1) O 15	RY*( 2) H 48	0.85	2.6	0.042
LP ( 2) O 15	RY*( 1) H 47	0.79	2.04	0.036
LP ( 2) O 15	RY*( 3) H 47	0.61	2.95	0.038
LP ( 2) O 15	RY*( 1) H 48	0.65	1.79	0.031
LP ( 2) O 15	RY*( 3) H 48	0.54	2.98	0.036
BD ( 1) O 15 - H 48	RY*( 2) O 18	0.08	1.51	0.01
BD ( 1) O 15 - H 48	RY*( 3) O 18	0.12	1.51	0.012
LP ( 1) O 15	RY*( 1) O 18	0.09	1.01	0.008
LP ( 1) O 15	BD*( 1) O 18 - H 52	0.06	1.11	0.007
LP ( 2) O 15	RY*( 1) O 18	0.07	0.98	0.007
CR ( 1) O 15	BD*( 1) O 19 - H 43	0.06	19.73	0.032
LP ( 1) O 15	RY*( 2) H 43	0.05	2.36	0.01
LP ( 1) O 15	BD*( 1) O 19 - H 43	0.14	1.18	0.012
LP ( 2) O 15	RY*( 1) O 19	0.15	1.17	0.012
LP ( 2) O 15	RY*( 2) O 19	0.08	1.31	0.009
LP ( 2) O 15	RY*( 14) O 19	0.1	3	0.015
LP ( 2) O 15	RY*( 1) H 43	0.16	1.83	0.016
LP ( 2) O 15	RY*( 2) H 43	0.06	2.33	0.011
LP ( 2) O 15	BD*( 1) O 19 - H 43	14.75	1.15	0.117
LP ( 1) O 15	RY*( 2) C 61	0.07	1.1	0.008
LP ( 2) O 15	RY*( 2) C 61	0.06	1.07	0.007
CR ( 1) O 16	RY*( 1) H 60	1.18	20.31	0.138
LP ( 1) O 16	RY*( 1) H 59	0.63	3	0.039
LP ( 1) O 16	RY*( 1) H 60	0.52	1.81	0.028
LP ( 1) O 16	RY*( 2) H 60	0.51	2.6	0.033
LP ( 2) O 16	RY*( 1) H 59	0.77	2.87	0.042
LP ( 2) O 16	RY*( 3) H 60	0.76	2.92	0.042
BD ( 1) O 16 - H 60	BD*( 1) O 17 - H 55	0.05	1.44	0.008
CR ( 1) O 16	BD*( 1) O 17 - H 55	0.11	19.72	0.041
LP ( 1) O 16	BD*( 1) O 17 - H 55	1.72	1.22	0.041
LP ( 2) O 16	RY*( 1) O 17	0.33	1.06	0.017
LP ( 2) O 16	RY*( 3) O 17	0.05	1.37	0.008
LP ( 2) O 16	RY*( 14) O 17	0.07	2.94	0.013
LP ( 2) O 16	RY*( 1) H 55	0.28	1.68	0.019
LP ( 2) O 16	BD*( 1) O 17 - H 55	16.59	1.1	0.12
BD ( 1) O 16 - H 59	BD*( 1) O 19 - H 44	0.07	1.48	0.009
CR ( 1) O 16	BD*( 1) O 19 - H 44	0.06	19.76	0.032
LP ( 1) O 16	RY*( 1) O 19	0.12	1.28	0.011
LP ( 1) O 16	RY*( 13) O 19	0.06	3.12	0.012
LP ( 1) O 16	RY*( 1) H 44	0.11	1.95	0.013
LP ( 1) O 16	BD*( 1) O 19 - H 44	12.08	1.26	0.11
LP ( 2) O 16	RY*( 1) O 19	0.12	1.15	0.011
LP ( 2) O 16	RY*( 1) H 44	0.18	1.82	0.016
LP ( 2) O 16	BD*( 1) O 19 - H 44	1.11	1.14	0.032
BD ( 1) O 17 - H 56	RY*( 2) O 6	0.08	1.4	0.01
BD ( 1) O 17 - H 56	RY*( 4) O 6	0.1	2.12	0.013

LP ( 1) O 17	RY*( 3) O 6	0.05	1.29	0.007
LP ( 1) O 17	BD*( 1) O 6 - H 34	0.06	1.14	0.007
LP ( 2) O 17	RY*( 1) O 6	0.09	0.98	0.008
BD ( 1) O 17 - H 55	RY*( 3) O 16	0.14	1.45	0.013
LP ( 1) O 17	RY*( 1) O 16	0.07	1.05	0.008
LP ( 1) O 17	BD*( 1) O 16 - H 59	0.08	1.18	0.009
LP ( 2) O 17	RY*( 2) O 16	0.07	1.06	0.008
CR ( 1) O 17	RY*( 1) H 55	1.06	20.28	0.131
CR ( 1) O 17	RY*( 1) H 56	0.5	20.63	0.091
LP ( 1) O 17	RY*( 2) H 55	0.86	2.65	0.043
LP ( 1) O 17	RY*( 2) H 56	0.86	2.39	0.04
LP ( 2) O 17	RY*( 1) H 55	0.75	1.69	0.032
LP ( 2) O 17	RY*( 3) H 55	0.51	2.97	0.035
LP ( 2) O 17	RY*( 1) H 56	1.02	2.04	0.041
LP ( 2) O 17	RY*( 3) H 56	0.53	2.66	0.034
CR ( 1) O 17	BD*( 1) O 18 - H 51	0.05	19.64	0.029
LP ( 1) O 17	RY*( 1) H 51	0.06	1.74	0.009
LP ( 1) O 17	BD*( 1) O 18 - H 51	0.17	1.12	0.012
LP ( 2) O 17	RY*( 1) O 18	0.18	0.97	0.012
LP ( 2) O 17	RY*( 3) O 18	0.17	1.18	0.013
LP ( 2) O 17	RY*( 13) O 18	0.05	2.82	0.011
LP ( 2) O 17	RY*( 1) H 51	0.09	1.67	0.011
LP ( 2) O 17	BD*( 1) O 18 - H 51	16.19	1.05	0.117
BD ( 1) O 18 - H 51	BD*( 1) O 7 - H 30	0.05	1.44	0.008
CR ( 1) O 18	BD*( 1) O 7 - H 30	0.08	19.72	0.036
LP ( 1) O 18	BD*( 1) O 7 - H 30	0.79	1.19	0.027
LP ( 2) O 18	RY*( 1) O 7	0.33	1.12	0.017
LP ( 2) O 18	RY*( 10) O 7	0.07	3.25	0.013
LP ( 2) O 18	RY*( 1) H 30	0.21	1.7	0.017
LP ( 2) O 18	BD*( 1) O 7 - H 30	15.06	1.13	0.117
BD ( 1) O 18 - H 51	BD*( 1) O 15 - H 48	0.08	1.49	0.01
CR ( 1) O 18	BD*( 1) O 15 - H 48	0.08	19.77	0.036
LP ( 1) O 18	RY*( 1) O 15	0.17	1.13	0.012
LP ( 1) O 18	RY*( 2) O 15	0.1	1.55	0.011
LP ( 1) O 18	RY*( 12) O 15	0.07	3.01	0.013
LP ( 1) O 18	RY*( 1) H 48	0.18	1.89	0.017
LP ( 1) O 18	BD*( 1) O 15 - H 48	14.36	1.23	0.119
LP ( 2) O 18	RY*( 1) O 15	0.1	1.07	0.009
LP ( 2) O 18	RY*( 1) H 48	0.16	1.84	0.015
LP ( 2) O 18	BD*( 1) O 15 - H 48	0.18	1.18	0.013
BD ( 1) O 18 - H 51	RY*( 2) O 17	0.09	1.6	0.011
BD ( 1) O 18 - H 51	RY*( 4) O 17	0.07	1.93	0.01
CR ( 1) O 18	RY*( 1) H 51	1.07	20.32	0.132
LP ( 1) O 18	RY*( 2) H 51	0.53	2.51	0.033
LP ( 1) O 18	RY*( 1) H 52	0.78	2.95	0.043
LP ( 2) O 18	RY*( 3) H 51	0.69	2.95	0.041
LP ( 2) O 18	RY*( 1) H 52	0.59	2.9	0.037
LP ( 2) O 18	RY*( 2) H 52	0.55	2.79	0.035
LP ( 1) O 19	RY*( 2) H 22	0.05	2.31	0.01
LP ( 1) O 19	BD*( 1) O 9 - H 22	0.15	1.19	0.012

LP ( 2) O 19	RY*( 1) O 9	0.06	1.26	0.008
LP ( 2) O 19	RY*( 11) O 9	0.09	3.29	0.015
LP ( 2) O 19	RY*( 1) H 22	0.13	1.76	0.013
LP ( 2) O 19	BD*( 1) O 9 - H 22	13.39	1.11	0.109
BD ( 1) O 19 - H 43	RY*( 2) O 15	0.09	1.74	0.011
BD ( 1) O 19 - H 43	RY*( 3) O 15	0.06	1.8	0.01
LP ( 2) O 19	RY*( 1) O 15	0.12	0.97	0.01
CR ( 1) O 19	RY*( 1) H 43	0.85	20.37	0.118
CR ( 1) O 19	RY*( 1) H 44	0.71	20.38	0.108
LP ( 1) O 19	RY*( 2) H 43	0.88	2.36	0.041
LP ( 1) O 19	RY*( 2) H 44	0.8	2.51	0.04
LP ( 2) O 19	RY*( 1) H 43	0.73	1.78	0.032
LP ( 2) O 19	RY*( 3) H 43	0.59	2.95	0.038
LP ( 2) O 19	RY*( 1) H 44	0.85	1.79	0.035
LP ( 1) O 19	RY*( 2) C 61	0.09	1.1	0.009
LP ( 1) O 19	BD*( 1) C 61 - H 63	0.09	1.11	0.009
BD ( 1) O 20 - H 38	RY*( 1) O 5	0.05	1.37	0.008
BD ( 1) O 20 - H 37	RY*( 1) O 10	0.07	1.53	0.009
BD ( 1) O 20 - H 37	RY*( 4) O 10	0.05	2.21	0.009
BD ( 1) O 20 - H 38	RY*( 3) O 10	0.05	1.83	0.009
LP ( 2) O 20	RY*( 1) O 10	0.06	1.21	0.008
BD ( 1) O 20 - H 37	BD*( 1) O 16 - H 60	0.1	1.37	0.01
CR ( 1) O 20	BD*( 1) O 16 - H 60	0.1	19.64	0.041
LP ( 1) O 20	RY*( 1) H 60	0.06	1.72	0.009
LP ( 1) O 20	BD*( 1) O 16 - H 60	0.27	1.1	0.016
LP ( 2) O 20	RY*( 1) O 16	0.07	0.95	0.007
LP ( 2) O 20	RY*( 2) O 16	0.3	1.03	0.016
LP ( 2) O 20	RY*( 11) O 16	0.06	3.35	0.013
LP ( 2) O 20	RY*( 1) H 60	0.1	1.67	0.011
LP ( 2) O 20	BD*( 1) O 16 - H 60	20.15	1.05	0.13
CR ( 1) O 20	RY*( 1) H 37	1.08	20.25	0.132
CR ( 1) O 20	RY*( 1) H 38	0.68	20.41	0.105
LP ( 1) O 20	RY*( 2) H 37	0.8	2.47	0.04
LP ( 1) O 20	RY*( 2) H 38	0.74	2.32	0.037
LP ( 2) O 20	RY*( 1) H 37	0.68	1.66	0.03
LP ( 2) O 20	RY*( 1) H 38	0.71	1.82	0.033
BD ( 1) O 20 - H 37	RY*( 1) H 64	0.1	1.33	0.01
LP ( 1) O 20	RY*( 1) C 61	0.07	0.99	0.008
LP ( 1) O 20	BD*( 1) C 61 - H 64	0.18	1.09	0.013
CR ( 1) C 61	RY*( 2) H 62	0.61	11.13	0.074
CR ( 1) C 61	RY*( 1) H 63	0.8	11.09	0.084
CR ( 1) C 61	RY*( 2) H 64	0.69	11.1	0.078
CR ( 1) C 61	RY*( 2) H 65	0.63	11.12	0.074

**Supporting Table A 9** NBOAnalysis using WB97XD/631++G(d) for 1CH4@512 AND METHANOL

Donor NBO (i)	acceptor NBO (j)	E(2) kcal/mol	E(j)-E(i) a.u.	F(i,j) a.u.	
BD ( 1) O 1 - H 57	RY*( 3) H 58		0.51	2.62	0.033
CR ( 1) O 1	RY*( 1) H 57		1.14	20.28	0.136
LP ( 1) O 1	RY*( 2) H 57		0.65	2.47	0.036
LP ( 1) O 1	RY*( 1) H 58		0.87	2.11	0.038
LP ( 2) O 1	RY*( 3) H 57		1.03	2.84	0.049
LP ( 2) O 1	RY*( 2) H 58		1.32	2.59	0.053
BD ( 1) O 1 - H 57	RY*( 4) O 3		0.09	2.25	0.013
LP ( 2) O 1	RY*( 1) O 3		0.1	0.98	0.009
BD ( 1) O 1 - H 58	BD*( 1) O 5 - H 35		0.05	1.48	0.008
CR ( 1) O 1	BD*( 1) O 5 - H 35		0.07	19.76	0.034
LP ( 1) O 1	RY*( 1) O 5		0.07	1.24	0.008
LP ( 1) O 1	BD*( 1) O 5 - H 35		8.87	1.34	0.097
LP ( 2) O 1	RY*( 1) O 5		0.22	0.96	0.013
LP ( 2) O 1	RY*( 2) O 5		0.07	1.38	0.009
LP ( 2) O 1	RY*( 1) H 35		0.26	1.81	0.02
LP ( 2) O 1	RY*( 2) H 35		0.11	2.16	0.014
LP ( 2) O 1	BD*( 1) O 5 - H 35		5.34	1.05	0.067
CR ( 1) O 1	BD*( 1) O 13 - H 42		0.08	19.75	0.035
LP ( 1) O 1	BD*( 1) O 13 - H 42		5.32	1.33	0.075
LP ( 2) O 1	RY*( 1) O 13		0.28	1.11	0.016
LP ( 2) O 1	RY*( 4) O 13		0.07	1.44	0.009
LP ( 2) O 1	RY*( 1) H 42		0.29	1.81	0.021
LP ( 2) O 1	RY*( 2) H 42		0.11	2.16	0.014
LP ( 2) O 1	BD*( 1) O 13 - H 42		10.47	1.05	0.093
CR ( 1) O 2	RY*( 1) H 50		1.12	20.26	0.135
LP ( 1) O 2	RY*( 1) H 49		0.57	3.01	0.037
LP ( 1) O 2	RY*( 1) H 50		0.59	1.79	0.029
LP ( 1) O 2	RY*( 2) H 50		0.51	2.98	0.035
LP ( 2) O 2	RY*( 1) H 49		0.79	2.85	0.043
LP ( 2) O 2	RY*( 3) H 50		0.85	2.9	0.045
BD ( 1) O 2 - H 49	BD*( 1) O 3 - H 53		0.1	1.48	0.011
CR ( 1) O 2	BD*( 1) O 3 - H 53		0.07	19.76	0.034
LP ( 1) O 2	RY*( 1) O 3		0.1	1.25	0.01
LP ( 1) O 2	RY*( 3) O 3		0.05	1.46	0.008
LP ( 1) O 2	RY*( 10) O 3		0.07	3.06	0.013
LP ( 1) O 2	RY*( 1) H 53		0.09	2.01	0.012
LP ( 1) O 2	BD*( 1) O 3 - H 53		12.06	1.28	0.111
LP ( 2) O 2	RY*( 1) O 3		0.16	1.08	0.012
LP ( 2) O 2	RY*( 1) H 53		0.2	1.84	0.017
LP ( 2) O 2	BD*( 1) O 3 - H 53		1.67	1.11	0.039
CR ( 1) O 2	BD*( 1) O 4 - H 28		0.08	19.71	0.037
LP ( 1) O 2	BD*( 1) O 4 - H 28		2.3	1.23	0.047
LP ( 2) O 2	RY*( 1) O 4		0.31	1.06	0.016
LP ( 2) O 2	RY*( 2) O 4		0.4	1.01	0.018
LP ( 2) O 2	RY*( 3) O 4		0.07	1.18	0.008
LP ( 2) O 2	RY*( 1) H 28		0.32	1.6	0.02

LP ( 2) O 2	RY*( 5) H 28	0.1	1.67	0.012
LP ( 2) O 2	BD*( 1) O 4 - H 28	14.88	1.06	0.112
BD ( 1) O 2 - H 50	RY*( 3) O 12	0.07	1.51	0.009
BD ( 1) O 2 - H 50	RY*( 4) O 12	0.1	1.88	0.012
LP ( 2) O 2	RY*( 1) H 63	0.07	1.23	0.008
BD ( 1) O 3 - H 53	BD*( 1) O 1 - H 57	0.09	1.42	0.01
BD ( 1) O 3 - H 54	BD*( 1) O 1 - H 57	0.07	1.41	0.009
CR ( 1) O 3	BD*( 1) O 1 - H 57	0.08	19.68	0.036
LP ( 1) O 3	RY*( 1) H 57	0.09	1.75	0.011
LP ( 1) O 3	BD*( 1) O 1 - H 57	0.19	1.16	0.013
LP ( 2) O 3	RY*( 3) O 1	0.23	1.09	0.014
LP ( 2) O 3	RY*( 11) O 1	0.09	3.34	0.016
LP ( 2) O 3	RY*( 1) H 57	0.12	1.66	0.012
LP ( 2) O 3	BD*( 1) O 1 - H 57	17.71	1.08	0.123
BD ( 1) O 3 - H 53	RY*( 1) O 2	0.06	1.43	0.008
BD ( 1) O 3 - H 53	RY*( 6) O 2	0.06	1.97	0.01
BD ( 1) O 3 - H 54	RY*( 5) O 2	0.05	2.12	0.009
LP ( 1) O 3	RY*( 2) O 2	0.06	1.02	0.007
LP ( 2) O 3	RY*( 2) O 2	0.09	0.94	0.008
CR ( 1) O 3	RY*( 1) H 53	0.7	20.43	0.107
LP ( 1) O 3	RY*( 2) H 53	0.87	2.57	0.042
LP ( 1) O 3	RY*( 2) H 54	0.82	2.28	0.039
LP ( 2) O 3	RY*( 1) H 53	0.88	1.83	0.036
LP ( 2) O 3	RY*( 3) H 53	0.52	3	0.036
LP ( 2) O 3	RY*( 1) H 54	0.84	2.09	0.038
LP ( 2) O 3	RY*( 3) H 54	0.61	2.81	0.037
BD ( 1) O 3 - H 54	RY*( 2) O 8	0.1	1.5	0.011
BD ( 1) O 3 - H 54	RY*( 4) O 8	0.08	1.98	0.012
LP ( 1) O 3	BD*( 1) O 8 - H 32	0.05	1.17	0.007
LP ( 1) O 3	RY*( 3) C 61	0.06	1.18	0.008
LP ( 1) O 3	BD*( 1) C 61 - H 63	0.05	1.15	0.007
BD ( 1) O 4 - H 28	RY*( 3) O 2	0.08	1.5	0.01
BD ( 1) O 4 - H 28	RY*( 5) O 2	0.07	2.17	0.011
LP ( 1) O 4	RY*( 2) O 2	0.07	1.13	0.008
LP ( 1) O 4	BD*( 1) O 2 - H 50	0.06	1.24	0.007
LP ( 2) O 4	RY*( 1) O 2	0.09	1.09	0.009
CR ( 1) O 4	RY*( 1) H 28	1.04	20.25	0.129
LP ( 1) O 4	RY*( 2) H 27	0.78	2.94	0.043
LP ( 1) O 4	RY*( 1) H 28	0.59	1.78	0.029
LP ( 2) O 4	RY*( 1) H 27	1.29	2.84	0.054
LP ( 2) O 4	RY*( 3) H 28	0.51	2.88	0.034
CR ( 1) O 4	BD*( 1) O 7 - H 29	0.06	19.77	0.032
LP ( 1) O 4	BD*( 1) O 7 - H 29	1.4	1.3	0.038
LP ( 2) O 4	RY*( 1) O 7	0.32	1.1	0.017
LP ( 2) O 4	RY*( 3) O 7	0.09	1.17	0.009
LP ( 2) O 4	RY*( 10) O 7	0.07	3.09	0.013
LP ( 2) O 4	RY*( 1) H 29	0.25	1.9	0.019
LP ( 2) O 4	RY*( 2) H 29	0.1	2.38	0.014
LP ( 2) O 4	BD*( 1) O 7 - H 29	13.3	1.11	0.108
LP ( 1) O 4	RY*( 1) O 14	0.12	1.13	0.01

LP ( 1) O 4	RY*( 2) O 14	0.17	1.27	0.013
LP ( 1) O 4	RY*( 1) H 26	0.1	1.86	0.012
LP ( 1) O 4	RY*( 5) H 26	0.06	2.01	0.01
LP ( 1) O 4	BD*( 1) O 14 - H 26	10.75	1.26	0.104
LP ( 2) O 4	RY*( 2) O 14	0.23	1.08	0.014
LP ( 2) O 4	RY*( 1) H 26	0.18	1.66	0.015
LP ( 2) O 4	BD*( 1) O 14 - H 26	0.75	1.07	0.025
BD ( 1) O 5 - H 35	RY*( 5) O 1	0.07	2.28	0.011
LP ( 1) O 5	BD*( 1) O 1 - H 58	0.06	1.16	0.007
LP ( 2) O 5	RY*( 1) O 1	0.06	1.12	0.008
LP ( 2) O 5	RY*( 2) O 1	0.05	0.93	0.006
CR ( 1) O 5	RY*( 1) H 35	0.56	20.46	0.096
CR ( 1) O 5	RY*( 1) H 36	0.58	20.52	0.097
LP ( 1) O 5	RY*( 2) H 35	0.91	2.31	0.041
LP ( 1) O 5	RY*( 2) H 36	0.8	2.48	0.04
LP ( 2) O 5	RY*( 1) H 35	0.91	1.85	0.037
LP ( 2) O 5	RY*( 3) H 35	0.61	2.9	0.038
LP ( 2) O 5	RY*( 1) H 36	0.91	1.91	0.038
BD ( 1) O 5 - H 36	RY*( 1) O 6	0.07	1.31	0.008
BD ( 1) O 5 - H 36	RY*( 2) O 6	0.06	1.26	0.008
BD ( 1) O 5 - H 36	RY*( 7) O 6	0.1	2.5	0.014
LP ( 1) O 5	BD*( 1) O 6 - H 34	0.05	1.15	0.007
LP ( 2) O 5	RY*( 1) O 6	0.19	0.95	0.012
LP ( 2) O 5	RY*( 2) O 6	0.07	0.9	0.007
LP ( 1) O 5	BD*( 1) O 20 - H 38	0.12	1.21	0.011
LP ( 2) O 5	RY*( 1) O 20	0.1	1.23	0.01
LP ( 2) O 5	RY*( 14) O 20	0.06	3.2	0.013
LP ( 2) O 5	RY*( 1) H 38	0.14	1.73	0.014
LP ( 2) O 5	BD*( 1) O 20 - H 38	12.94	1.1	0.107
BD ( 1) O 5 - H 35	RY*( 1) H 62	0.08	1.5	0.01
LP ( 1) O 5	RY*( 2) C 61	0.07	1.06	0.008
BD ( 1) O 6 - H 34	BD*( 1) O 5 - H 36	0.06	1.49	0.009
CR ( 1) O 6	BD*( 1) O 5 - H 36	0.06	19.77	0.032
LP ( 1) O 6	RY*( 1) O 5	0.07	1.21	0.008
LP ( 1) O 6	RY*( 14) O 5	0.06	3.54	0.014
LP ( 1) O 6	RY*( 1) H 36	0.06	2.13	0.01
LP ( 1) O 6	RY*( 2) H 36	0.05	2.58	0.01
LP ( 1) O 6	BD*( 1) O 5 - H 36	10.71	1.3	0.106
LP ( 2) O 6	RY*( 1) O 5	0.09	1.02	0.008
LP ( 2) O 6	RY*( 2) O 5	0.06	1.44	0.008
LP ( 2) O 6	RY*( 1) H 36	0.25	1.94	0.02
LP ( 2) O 6	RY*( 2) H 36	0.06	2.39	0.011
LP ( 2) O 6	BD*( 1) O 5 - H 36	2.05	1.11	0.043
CR ( 1) O 6	RY*( 1) H 33	1.03	20.21	0.129
LP ( 1) O 6	RY*( 1) H 33	0.56	1.75	0.028
LP ( 1) O 6	RY*( 2) H 33	0.5	2.89	0.034
LP ( 1) O 6	RY*( 2) H 34	0.61	2.85	0.038
LP ( 2) O 6	RY*( 3) H 33	0.96	2.87	0.047
LP ( 2) O 6	RY*( 1) H 34	1.03	2.86	0.049
BD ( 1) O 6 - H 33	RY*( 1) O 8	0.07	1.35	0.009

BD ( 1) O 6 - H 33	RY*( 5) O 8	0.07	2.19	0.011
CR ( 1) O 6	BD*( 1) O 17 - H 56	0.09	19.75	0.037
LP ( 1) O 6	BD*( 1) O 17 - H 56	2.46	1.29	0.05
LP ( 2) O 6	RY*( 1) O 17	0.3	1.05	0.016
LP ( 2) O 6	RY*( 13) O 17	0.08	3.04	0.014
LP ( 2) O 6	RY*( 1) H 56	0.27	1.86	0.02
LP ( 2) O 6	RY*( 2) H 56	0.09	2.42	0.013
LP ( 2) O 6	BD*( 1) O 17 - H 56	13.92	1.09	0.11
BD ( 1) O 6 - H 34	RY*( 1) H 62	0.21	1.55	0.016
BD ( 1) O 6 - H 34	RY*( 2) H 62	0.16	1.85	0.015
BD ( 1) O 6 - H 34	BD*( 1) C 61 - H 62	0.07	1.43	0.009
BD ( 1) O 7 - H 29	RY*( 1) O 4	0.06	1.38	0.008
BD ( 1) O 7 - H 29	RY*( 3) O 4	0.05	1.51	0.008
LP ( 1) O 7	RY*( 2) O 4	0.07	1.04	0.007
LP ( 1) O 7	BD*( 1) O 4 - H 27	0.05	1.11	0.007
CR ( 1) O 7	RY*( 1) H 29	0.64	20.5	0.102
CR ( 1) O 7	RY*( 1) H 30	0.98	20.29	0.126
LP ( 1) O 7	RY*( 2) H 29	0.88	2.42	0.041
LP ( 1) O 7	RY*( 2) H 30	0.93	2.53	0.043
LP ( 2) O 7	RY*( 1) H 29	0.86	1.93	0.037
LP ( 2) O 7	RY*( 1) H 30	0.7	1.73	0.031
CR ( 1) O 7	BD*( 1) O 8 - H 31	0.1	19.65	0.039
LP ( 1) O 7	RY*( 1) H 31	0.06	1.69	0.009
LP ( 1) O 7	BD*( 1) O 8 - H 31	0.21	1.1	0.014
LP ( 2) O 7	RY*( 2) O 8	0.15	1.2	0.012
LP ( 2) O 7	RY*( 7) O 8	0.05	2.14	0.009
LP ( 2) O 7	RY*( 11) O 8	0.08	3.32	0.015
LP ( 2) O 7	RY*( 1) H 31	0.08	1.68	0.011
LP ( 2) O 7	BD*( 1) O 8 - H 31	18.46	1.09	0.127
BD ( 1) O 7 - H 30	RY*( 2) O 18	0.11	1.55	0.012
BD ( 1) O 7 - H 30	RY*( 4) O 18	0.07	2.12	0.011
LP ( 1) O 7	RY*( 1) O 18	0.08	1.05	0.008
LP ( 1) O 7	BD*( 1) O 18 - H 52	0.07	1.14	0.008
BD ( 1) O 7 - H 30	RY*( 1) H 63	0.12	1.56	0.012
LP ( 1) O 7	RY*( 1) C 61	0.08	1.02	0.008
LP ( 1) O 8	RY*( 1) O 3	0.18	1.21	0.013
LP ( 1) O 8	RY*( 12) O 3	0.05	2.97	0.011
LP ( 1) O 8	RY*( 2) H 54	0.08	2.34	0.012
LP ( 1) O 8	BD*( 1) O 3 - H 54	10.8	1.24	0.104
LP ( 2) O 8	RY*( 1) O 3	0.09	1.09	0.009
LP ( 2) O 8	RY*( 1) H 54	0.11	2.11	0.014
LP ( 2) O 8	BD*( 1) O 3 - H 54	0.59	1.12	0.023
BD ( 1) O 8 - H 31	BD*( 1) O 6 - H 33	0.11	1.44	0.011
CR ( 1) O 8	BD*( 1) O 6 - H 33	0.08	19.72	0.036
LP ( 1) O 8	BD*( 1) O 6 - H 33	1.13	1.22	0.033
LP ( 2) O 8	RY*( 1) O 6	0.45	1.02	0.019
LP ( 2) O 8	RY*( 3) O 6	0.16	1.1	0.012
LP ( 2) O 8	RY*( 10) O 6	0.08	3.4	0.015
LP ( 2) O 8	RY*( 1) H 33	0.35	1.6	0.021
LP ( 2) O 8	RY*( 5) H 33	0.14	1.62	0.014

LP ( 2) O 8	BD*( 1) O 6 - H 33	15.64	1.09	0.117
BD ( 1) O 8 - H 31	RY*( 4) O 7	0.08	2.25	0.012
LP ( 1) O 8	BD*( 1) O 7 - H 29	0.05	1.25	0.007
BD ( 1) O 8 - H 31	RY*( 3) H 32	0.52	2.37	0.031
CR ( 1) O 8	RY*( 1) H 31	1.19	20.29	0.139
LP ( 1) O 8	RY*( 1) H 32	0.66	2.94	0.039
LP ( 2) O 8	RY*( 3) H 31	0.7	2.92	0.041
LP ( 2) O 8	RY*( 1) H 32	0.69	2.81	0.04
LP ( 2) O 8	RY*( 2) H 32	0.76	1.97	0.035
LP ( 2) O 8	RY*( 1) H 63	0.09	1.24	0.009
BD ( 1) O 9 - H 22	RY*( 3) H 21	0.64	2.02	0.032
CR ( 1) O 9	RY*( 1) H 22	0.94	20.27	0.123
LP ( 1) O 9	RY*( 2) H 21	0.59	2.62	0.035
LP ( 2) O 9	RY*( 1) H 21	1.28	2.83	0.054
LP ( 2) O 9	RY*( 3) H 22	0.96	2.91	0.048
BD ( 1) O 9 - H 22	RY*( 5) O 10	0.09	1.93	0.012
BD ( 1) O 9 - H 21	RY*( 1) O 11	0.06	1.39	0.008
BD ( 1) O 9 - H 21	RY*( 1) H 24	0.08	1.96	0.011
BD ( 1) O 9 - H 21	BD*( 1) O 11 - H 24	0.21	1.43	0.016
BD ( 1) O 9 - H 22	BD*( 1) O 11 - H 24	0.07	1.44	0.009
CR ( 1) O 9	BD*( 1) O 11 - H 24	0.07	19.72	0.034
LP ( 1) O 9	BD*( 1) O 11 - H 24	9.52	1.29	0.099
LP ( 2) O 9	RY*( 1) O 11	0.3	1	0.016
LP ( 2) O 9	RY*( 1) H 24	0.29	1.57	0.019
LP ( 2) O 9	BD*( 1) O 11 - H 24	5.15	1.04	0.066
BD ( 1) O 9 - H 21	RY*( 3) O 19	0.11	1.47	0.012
BD ( 1) O 9 - H 21	RY*( 1) H 43	0.07	1.93	0.01
BD ( 1) O 9 - H 22	RY*( 3) O 19	0.06	1.48	0.009
BD ( 1) O 9 - H 22	RY*( 1) H 64	0.06	1.5	0.008
BD ( 1) O 9 - H 21	RY*( 4) O 70	0.05	1.85	0.009
BD ( 1) O 9 - H 21	RY*( 1) H 71	0.08	1.96	0.011
BD ( 1) O 9 - H 21	BD*( 1) O 70 - H 71	0.59	1.4	0.026
BD ( 1) O 9 - H 22	RY*( 1) H 71	0.06	1.97	0.009
BD ( 1) O 9 - H 22	BD*( 1) O 70 - H 71	0.12	1.41	0.012
CR ( 1) O 9	BD*( 1) O 70 - H 71	0.29	19.7	0.068
LP ( 1) O 9	BD*( 1) O 70 - H 71	5.08	1.27	0.072
LP ( 2) O 9	RY*( 3) O 70	0.14	1.21	0.012
LP ( 2) O 9	RY*( 4) O 70	0.07	1.46	0.009
LP ( 2) O 9	RY*( 8) O 70	0.06	1.88	0.01
LP ( 2) O 9	RY*( 9) O 70	0.08	2.45	0.012
LP ( 2) O 9	RY*( 1) H 71	0.63	1.58	0.028
LP ( 2) O 9	RY*( 5) H 71	0.2	1.82	0.017
LP ( 2) O 9	BD*( 1) O 70 - H 71	19.32	1.02	0.125
LP ( 1) O 10	BD*( 1) O 9 - H 22	0.23	1.13	0.015
LP ( 2) O 10	RY*( 3) O 9	0.08	1.07	0.008
LP ( 2) O 10	RY*( 1) H 22	0.06	1.59	0.009
LP ( 2) O 10	RY*( 2) H 22	0.07	2.87	0.012
LP ( 2) O 10	BD*( 1) O 9 - H 22	8.79	1.04	0.085
CR ( 1) O 10	RY*( 1) H 39	1.05	20.26	0.13
CR ( 1) O 10	RY*( 1) H 40	1.09	20.26	0.133



LP ( 1) O 10	RY*( 2) H 39	0.66	2.52	0.036
LP ( 1) O 10	RY*( 2) H 40	0.61	2.44	0.034
LP ( 2) O 10	RY*( 1) H 39	0.63	1.65	0.029
LP ( 2) O 10	RY*( 2) H 39	0.51	2.43	0.032
LP ( 2) O 10	RY*( 2) H 40	0.57	2.35	0.033
BD ( 1) O 10 - H 39	RY*( 1) O 13	0.08	1.48	0.01
BD ( 1) O 10 - H 39	RY*( 3) O 13	0.09	1.73	0.011
BD ( 1) O 10 - H 40	RY*( 1) O 20	0.1	1.56	0.011
BD ( 1) O 10 - H 40	RY*( 2) O 20	0.06	1.64	0.009
BD ( 1) O 10 - H 39	RY*( 1) H 65	0.05	1.77	0.009
BD ( 1) O 10 - H 40	RY*( 1) H 65	0.06	1.77	0.009
LP ( 1) O 10	BD*( 1) C 61 - H 65	0.61	1.12	0.023
LP ( 2) O 10	BD*( 1) C 61 - H 65	0.23	1.02	0.014
BD ( 1) O 11 - H 23	RY*( 4) O 9	0.06	2.02	0.01
BD ( 1) O 11 - H 24	RY*( 2) O 9	0.14	1.51	0.013
LP ( 1) O 11	RY*( 1) O 9	0.07	1.06	0.008
LP ( 2) O 11	RY*( 3) O 9	0.07	1.16	0.008
CR ( 1) O 11	RY*( 1) H 23	0.64	20.52	0.103
CR ( 1) O 11	RY*( 1) H 24	1.06	20.22	0.13
LP ( 1) O 11	RY*( 2) H 23	1.07	2.36	0.045
LP ( 1) O 11	RY*( 2) H 24	0.91	2.57	0.043
LP ( 2) O 11	RY*( 1) H 23	0.96	1.96	0.039
LP ( 2) O 11	RY*( 3) H 23	0.52	2.92	0.035
LP ( 2) O 11	RY*( 1) H 24	0.6	1.67	0.029
LP ( 2) O 11	RY*( 3) H 24	0.56	3.05	0.037
CR ( 1) O 11	BD*( 1) O 12 - H 45	0.09	19.64	0.039
LP ( 1) O 11	RY*( 1) H 45	0.06	1.71	0.009
LP ( 1) O 11	BD*( 1) O 12 - H 45	0.23	1.09	0.014
LP ( 2) O 11	RY*( 1) O 12	0.07	0.95	0.008
LP ( 2) O 11	RY*( 2) O 12	0.23	1.2	0.015
LP ( 2) O 11	RY*( 13) O 12	0.1	3.3	0.016
LP ( 2) O 11	RY*( 1) H 45	0.1	1.7	0.012
LP ( 2) O 11	RY*( 5) H 45	0.05	2.14	0.009
LP ( 2) O 11	BD*( 1) O 12 - H 45	18.54	1.09	0.127
BD ( 1) O 11 - H 23	RY*( 3) O 14	0.14	1.47	0.013
BD ( 1) O 11 - H 23	RY*( 4) O 14	0.06	2.26	0.01
LP ( 1) O 11	RY*( 1) O 14	0.06	0.98	0.007
LP ( 1) O 11	BD*( 1) O 14 - H 25	0.07	1.11	0.008
LP ( 2) O 11	RY*( 1) O 14	0.09	0.97	0.008
LP ( 1) O 11	RY*( 2) C 61	0.11	1.03	0.01
BD ( 1) O 12 - H 45	BD*( 1) O 2 - H 50	0.09	1.41	0.01
BD ( 1) O 12 - H 46	RY*( 1) H 50	0.1	1.96	0.012
CR ( 1) O 12	BD*( 1) O 2 - H 50	0.1	19.69	0.04
LP ( 1) O 12	RY*( 1) O 2	0.13	1.16	0.011
LP ( 1) O 12	RY*( 1) H 50	0.08	1.67	0.011
LP ( 1) O 12	BD*( 1) O 2 - H 50	0.31	1.11	0.017
LP ( 2) O 12	RY*( 1) O 2	0.36	1.18	0.019
LP ( 2) O 12	RY*( 2) O 2	0.14	1.03	0.011
LP ( 2) O 12	RY*( 11) O 2	0.09	3.2	0.015
LP ( 2) O 12	RY*( 1) H 50	0.2	1.69	0.016

LP ( 2) O 12	RY*( 5) H 50	0.11	1.88	0.013
LP ( 2) O 12	BD*( 1) O 2 - H 50	17.04	1.14	0.124
BD ( 1) O 12 - H 45	RY*( 2) O 11	0.11	1.73	0.012
BD ( 1) O 12 - H 46	RY*( 3) O 11	0.05	1.5	0.008
CR ( 1) O 12	RY*( 1) H 45	1.15	20.31	0.137
LP ( 1) O 12	RY*( 2) H 45	0.53	2.56	0.033
LP ( 1) O 12	RY*( 1) H 46	1.02	2.9	0.049
LP ( 2) O 12	RY*( 3) H 45	0.57	2.96	0.037
LP ( 2) O 12	RY*( 2) H 46	0.7	2.87	0.04
LP ( 1) O 12	RY*( 1) O 13	0.06	1.26	0.008
LP ( 1) O 12	RY*( 2) O 13	0.16	1.33	0.013
LP ( 1) O 12	RY*( 12) O 13	0.07	3.15	0.013
LP ( 1) O 12	RY*( 1) H 41	0.09	2.26	0.013
LP ( 1) O 12	RY*( 2) H 41	0.13	2.24	0.015
LP ( 1) O 12	BD*( 1) O 13 - H 41	10.9	1.2	0.102
BD ( 1) O 13 - H 42	RY*( 1) O 1	0.07	1.48	0.009
BD ( 1) O 13 - H 42	RY*( 2) O 1	0.07	1.3	0.008
LP ( 1) O 13	RY*( 2) O 1	0.05	1.03	0.007
LP ( 1) O 13	BD*( 1) O 1 - H 58	0.06	1.15	0.008
BD ( 1) O 13 - H 42	BD*( 1) O 10 - H 39	0.12	1.47	0.012
CR ( 1) O 13	BD*( 1) O 10 - H 39	0.08	19.73	0.036
LP ( 1) O 13	RY*( 1) H 39	0.06	1.77	0.009
LP ( 1) O 13	BD*( 1) O 10 - H 39	0.18	1.21	0.013
LP ( 2) O 13	RY*( 1) O 10	0.16	1.13	0.012
LP ( 2) O 13	RY*( 2) O 10	0.09	1.11	0.009
LP ( 2) O 13	RY*( 5) O 10	0.08	1.58	0.01
LP ( 2) O 13	RY*( 10) O 10	0.06	3	0.012
LP ( 2) O 13	RY*( 11) O 10	0.06	2.45	0.011
LP ( 2) O 13	RY*( 1) H 39	0.19	1.69	0.016
LP ( 2) O 13	BD*( 1) O 10 - H 39	16.75	1.13	0.123
BD ( 1) O 13 - H 41	RY*( 2) O 12	0.12	1.48	0.012
BD ( 1) O 13 - H 41	RY*( 5) O 12	0.06	2.66	0.011
LP ( 1) O 13	RY*( 1) O 12	0.07	0.97	0.007
LP ( 2) O 13	RY*( 1) O 12	0.08	0.9	0.008
CR ( 1) O 13	RY*( 1) H 42	0.62	20.46	0.1
LP ( 1) O 13	RY*( 2) H 41	0.77	2.23	0.037
LP ( 1) O 13	RY*( 2) H 42	0.86	2.29	0.04
LP ( 2) O 13	RY*( 1) H 41	0.89	2.17	0.04
LP ( 2) O 13	RY*( 3) H 41	0.57	2.87	0.036
LP ( 2) O 13	RY*( 1) H 42	0.87	1.86	0.036
LP ( 2) O 13	RY*( 3) H 42	0.5	3.01	0.035
LP ( 1) O 13	BD*( 1) C 61 - H 65	0.09	1.14	0.009
BD ( 1) O 14 - H 26	RY*( 3) O 4	0.05	1.54	0.008
CR ( 1) O 14	BD*( 1) O 11 - H 23	0.08	19.77	0.036
LP ( 1) O 14	RY*( 1) O 11	0.26	1.02	0.015
LP ( 1) O 14	RY*( 1) H 23	0.19	1.89	0.017
LP ( 1) O 14	BD*( 1) O 11 - H 23	2.62	1.07	0.047
LP ( 2) O 14	RY*( 1) O 11	0.14	1.28	0.012
LP ( 2) O 14	RY*( 14) O 11	0.09	3.56	0.016
LP ( 2) O 14	RY*( 1) H 23	0.05	2.15	0.01

LP ( 2) O 14	RY*( 2) H 23	0.05	2.54	0.01
LP ( 2) O 14	BD*( 1) O 11 - H 23	11.49	1.33	0.111
CR ( 1) O 14	RY*( 1) H 26	0.76	20.31	0.111
LP ( 1) O 14	RY*( 1) H 25	1.42	2.75	0.056
LP ( 1) O 14	RY*( 3) H 26	0.85	2.84	0.044
LP ( 2) O 14	RY*( 2) H 25	0.87	2.94	0.045
LP ( 2) O 14	RY*( 1) H 26	0.7	1.88	0.033
CR ( 1) O 14	BD*( 1) O 15 - H 47	0.07	19.78	0.033
LP ( 1) O 14	RY*( 1) O 15	0.41	1.06	0.019
LP ( 1) O 14	RY*( 12) O 15	0.06	3.18	0.012
LP ( 1) O 14	RY*( 1) H 47	0.27	1.91	0.02
LP ( 1) O 14	RY*( 2) H 47	0.13	2.32	0.016
LP ( 1) O 14	RY*( 5) H 47	0.06	2.52	0.011
LP ( 1) O 14	BD*( 1) O 15 - H 47	11.28	1.08	0.099
LP ( 2) O 14	BD*( 1) O 15 - H 47	3.55	1.34	0.062
BD ( 1) O 14 - H 25	RY*( 1) H 64	0.1	1.54	0.011
BD ( 1) O 15 - H 47	RY*( 2) O 14	0.12	1.4	0.012
BD ( 1) O 15 - H 47	RY*( 3) O 14	0.06	1.46	0.008
BD ( 1) O 15 - H 47	RY*( 6) O 14	0.07	1.84	0.01
LP ( 1) O 15	BD*( 1) O 14 - H 25	0.05	1.1	0.007
LP ( 2) O 15	RY*( 1) O 14	0.08	0.96	0.008
CR ( 1) O 15	RY*( 1) H 47	0.58	20.54	0.098
CR ( 1) O 15	RY*( 1) H 48	1.05	20.22	0.13
LP ( 1) O 15	RY*( 2) H 47	0.9	2.4	0.041
LP ( 1) O 15	RY*( 2) H 48	0.97	2.6	0.045
LP ( 2) O 15	RY*( 1) H 47	0.82	1.98	0.036
LP ( 2) O 15	RY*( 3) H 47	0.54	3.02	0.036
LP ( 2) O 15	RY*( 1) H 48	0.65	1.67	0.03
LP ( 2) O 15	RY*( 3) H 48	0.58	3.04	0.038
CR ( 1) O 15	BD*( 1) O 18 - H 51	0.09	19.65	0.039
LP ( 1) O 15	RY*( 1) H 51	0.05	1.7	0.009
LP ( 1) O 15	BD*( 1) O 18 - H 51	0.27	1.09	0.015
LP ( 2) O 15	RY*( 1) O 18	0.09	1.02	0.009
LP ( 2) O 15	RY*( 3) O 18	0.14	1.24	0.012
LP ( 2) O 15	RY*( 1) H 51	0.07	1.69	0.01
LP ( 2) O 15	BD*( 1) O 18 - H 51	18.26	1.09	0.126
BD ( 1) O 15 - H 48	RY*( 5) O 19	0.1	2.68	0.015
BD ( 1) O 15 - H 48	BD*( 1) O 19 - H 43	0.09	1.45	0.01
LP ( 1) O 15	BD*( 1) O 19 - H 43	0.07	1.16	0.008
LP ( 2) O 15	RY*( 2) O 19	0.11	1.19	0.01
LP ( 1) O 15	BD*( 1) C 61 - H 64	0.34	1.1	0.017
CR ( 1) O 16	RY*( 1) H 59	1.14	20.29	0.136
LP ( 1) O 16	RY*( 1) H 59	0.66	1.85	0.031
LP ( 1) O 16	RY*( 2) H 60	0.84	2.9	0.044
LP ( 2) O 16	RY*( 3) H 59	0.69	2.88	0.04
LP ( 2) O 16	RY*( 1) H 60	1.35	2.84	0.056
BD ( 1) O 16 - H 59	RY*( 2) O 17	0.11	1.67	0.012
LP ( 1) O 16	BD*( 1) O 17 - H 55	0.05	1.28	0.007
LP ( 2) O 16	RY*( 1) O 17	0.07	1	0.008
CR ( 1) O 16	BD*( 1) O 19 - H 44	0.06	19.75	0.03

LP ( 1) O 16	RY*( 2) O 19	0.15	1.33	0.013
LP ( 1) O 16	RY*( 10) O 19	0.05	3.14	0.011
LP ( 1) O 16	RY*( 1) H 44	0.1	1.92	0.012
LP ( 1) O 16	RY*( 5) H 44	0.06	2.76	0.012
LP ( 1) O 16	BD*( 1) O 19 - H 44	10.73	1.3	0.106
LP ( 2) O 16	RY*( 1) O 19	0.16	1.19	0.013
LP ( 2) O 16	RY*( 2) O 19	0.26	1.1	0.015
LP ( 2) O 16	RY*( 1) H 44	0.35	1.69	0.022
LP ( 2) O 16	BD*( 1) O 19 - H 44	1.94	1.07	0.041
BD ( 1) O 16 - H 60	BD*( 1) O 20 - H 37	0.09	1.48	0.01
CR ( 1) O 16	BD*( 1) O 20 - H 37	0.08	19.76	0.036
LP ( 1) O 16	BD*( 1) O 20 - H 37	2.21	1.31	0.048
LP ( 2) O 16	RY*( 1) O 20	0.07	1.21	0.009
LP ( 2) O 16	RY*( 2) O 20	0.22	1.28	0.015
LP ( 2) O 16	RY*( 14) O 20	0.08	3.18	0.014
LP ( 2) O 16	RY*( 1) H 37	0.35	1.75	0.022
LP ( 2) O 16	RY*( 2) H 37	0.06	2.48	0.011
LP ( 2) O 16	BD*( 1) O 20 - H 37	14.14	1.08	0.11
BD ( 1) O 17 - H 56	RY*( 1) O 6	0.07	1.33	0.008
BD ( 1) O 17 - H 56	RY*( 2) O 6	0.05	1.28	0.007
LP ( 1) O 17	RY*( 3) O 6	0.06	1.14	0.007
LP ( 1) O 17	BD*( 1) O 6 - H 34	0.07	1.15	0.008
LP ( 2) O 17	RY*( 1) O 6	0.08	0.99	0.008
BD ( 1) O 17 - H 55	BD*( 1) O 16 - H 59	0.07	1.41	0.009
BD ( 1) O 17 - H 56	BD*( 1) O 16 - H 59	0.09	1.42	0.01
CR ( 1) O 17	BD*( 1) O 16 - H 59	0.1	19.67	0.04
LP ( 1) O 17	RY*( 1) H 59	0.07	1.75	0.01
LP ( 1) O 17	BD*( 1) O 16 - H 59	0.28	1.15	0.016
LP ( 2) O 17	RY*( 2) O 16	0.21	1.08	0.014
LP ( 2) O 17	RY*( 3) O 16	0.16	1.25	0.013
LP ( 2) O 17	RY*( 11) O 16	0.1	3.04	0.016
LP ( 2) O 17	RY*( 13) O 16	0.06	2.97	0.012
LP ( 2) O 17	RY*( 1) H 59	0.17	1.67	0.015
LP ( 2) O 17	RY*( 5) H 59	0.06	3.39	0.013
LP ( 2) O 17	BD*( 1) O 16 - H 59	19.26	1.08	0.129
CR ( 1) O 17	RY*( 1) H 56	0.67	20.46	0.104
LP ( 1) O 17	RY*( 2) H 55	0.75	2.22	0.036
LP ( 1) O 17	RY*( 2) H 56	0.92	2.51	0.043
LP ( 2) O 17	RY*( 1) H 55	0.83	2.03	0.037
LP ( 2) O 17	RY*( 3) H 55	0.55	2.99	0.037
LP ( 2) O 17	RY*( 1) H 56	0.88	1.87	0.037
BD ( 1) O 17 - H 55	RY*( 3) O 18	0.11	1.54	0.012
BD ( 1) O 17 - H 55	RY*( 5) O 18	0.07	1.88	0.01
LP ( 1) O 17	BD*( 1) O 18 - H 52	0.06	1.16	0.007
BD ( 1) O 17 - H 55	RY*( 1) H 62	0.08	1.51	0.01
LP ( 1) O 17	BD*( 1) C 61 - H 62	0.35	1.14	0.018
LP ( 2) O 17	RY*( 2) H 62	0.05	1.48	0.008
BD ( 1) O 18 - H 51	BD*( 1) O 7 - H 30	0.11	1.45	0.011
CR ( 1) O 18	BD*( 1) O 7 - H 30	0.08	19.73	0.037
LP ( 1) O 18	RY*( 1) H 30	0.06	1.81	0.009

LP ( 1) O 18	BD*( 1) O 7 - H 30	0.92	1.22	0.03
LP ( 2) O 18	RY*( 1) O 7	0.33	1.11	0.017
LP ( 2) O 18	RY*( 10) O 7	0.06	3.1	0.012
LP ( 2) O 18	RY*( 1) H 30	0.27	1.7	0.019
LP ( 2) O 18	BD*( 1) O 7 - H 30	15.77	1.12	0.119
BD ( 1) O 18 - H 51	RY*( 5) O 15	0.07	2.15	0.011
BD ( 1) O 18 - H 51	RY*( 7) O 15	0.06	2.87	0.012
BD ( 1) O 18 - H 52	RY*( 2) O 15	0.06	1.56	0.009
LP ( 2) O 18	RY*( 1) O 15	0.07	1.12	0.008
BD ( 1) O 18 - H 51	BD*( 1) O 17 - H 55	0.05	1.47	0.008
LP ( 1) O 18	RY*( 1) O 17	0.14	1.19	0.012
LP ( 1) O 18	RY*( 12) O 17	0.06	3.18	0.013
LP ( 1) O 18	RY*( 1) H 55	0.06	2.16	0.01
LP ( 1) O 18	RY*( 2) H 55	0.11	2.27	0.014
LP ( 1) O 18	BD*( 1) O 17 - H 55	10.69	1.23	0.103
LP ( 2) O 18	RY*( 1) O 17	0.11	1.09	0.01
LP ( 2) O 18	RY*( 1) H 55	0.08	2.06	0.011
LP ( 2) O 18	BD*( 1) O 17 - H 55	0.42	1.13	0.019
BD ( 1) O 18 - H 51	RY*( 3) H 52	0.52	2.71	0.033
CR ( 1) O 18	RY*( 1) H 51	1.18	20.3	0.138
LP ( 1) O 18	RY*( 2) H 51	0.56	2.37	0.033
LP ( 1) O 18	RY*( 1) H 52	1.05	2.27	0.044
LP ( 2) O 18	RY*( 3) H 51	0.74	2.93	0.042
LP ( 2) O 18	RY*( 2) H 52	1.18	2.28	0.047
BD ( 1) O 18 - H 51	RY*( 1) H 62	0.05	1.54	0.008
LP ( 2) O 18	RY*( 1) H 63	0.05	1.23	0.007
LP ( 1) O 19	RY*( 1) O 9	0.05	0.91	0.006
LP ( 1) O 19	BD*( 1) O 9 - H 21	0.28	0.99	0.015
BD ( 1) O 19 - H 43	RY*( 1) H 48	0.31	1.96	0.022
BD ( 1) O 19 - H 44	RY*( 1) H 48	0.08	1.96	0.011
CR ( 1) O 19	BD*( 1) O 15 - H 48	0.08	19.69	0.035
LP ( 2) O 19	RY*( 1) O 15	0.23	1.22	0.015
LP ( 2) O 19	RY*( 11) O 15	0.06	3.11	0.012
LP ( 2) O 19	RY*( 1) H 48	0.13	1.76	0.014
LP ( 2) O 19	BD*( 1) O 15 - H 48	14.43	1.24	0.119
BD ( 1) O 19 - H 44	RY*( 1) O 16	0.16	1.33	0.013
LP ( 2) O 19	BD*( 1) O 16 - H 59	0.05	1.21	0.007
CR ( 1) O 19	RY*( 1) H 43	1.11	20.17	0.134
CR ( 1) O 19	RY*( 1) H 44	0.77	20.32	0.112
LP ( 1) O 19	RY*( 2) H 43	1.28	2.6	0.052
LP ( 1) O 19	RY*( 1) H 44	0.71	1.65	0.03
LP ( 1) O 19	RY*( 2) H 44	0.97	2.63	0.045
LP ( 2) O 19	RY*( 3) H 43	0.63	3.02	0.039
BD ( 1) O 19 - H 43	RY*( 2) H 64	0.07	1.81	0.01
LP ( 1) O 19	BD*( 1) C 61 - H 64	0.09	0.97	0.008
BD ( 1) O 19 - H 43	RY*( 1) O 70	0.06	1.66	0.009
BD ( 1) O 19 - H 43	RY*( 4) O 70	0.08	1.84	0.011
BD ( 1) O 19 - H 43	RY*( 5) O 70	0.18	2.45	0.019
BD ( 1) O 19 - H 43	BD*( 1) C 66 - O 70	0.1	1.23	0.01
BD ( 1) O 19 - H 43	BD*( 1) O 70 - H 71	0.06	1.4	0.009

LP ( 1) O 19	BD*( 1) O 70 - H 71	0.2	0.97	0.013
BD ( 1) O 20 - H 38	RY*( 2) O 5	0.1	1.75	0.012
BD ( 1) O 20 - H 38	RY*( 4) O 5	0.05	2.13	0.01
LP ( 2) O 20	RY*( 1) O 5	0.08	1	0.008
BD ( 1) O 20 - H 37	BD*( 1) O 10 - H 40	0.06	1.44	0.008
BD ( 1) O 20 - H 38	BD*( 1) O 10 - H 40	0.06	1.44	0.008
CR ( 1) O 20	BD*( 1) O 10 - H 40	0.08	19.7	0.036
LP ( 1) O 20	RY*( 1) H 40	0.06	1.75	0.009
LP ( 1) O 20	BD*( 1) O 10 - H 40	0.2	1.17	0.014
LP ( 2) O 20	RY*( 1) O 10	0.08	1.12	0.008
LP ( 2) O 20	RY*( 2) O 10	0.09	1.09	0.009
LP ( 2) O 20	RY*( 10) O 10	0.09	2.99	0.014
LP ( 2) O 20	RY*( 1) H 40	0.15	1.68	0.014
LP ( 2) O 20	BD*( 1) O 10 - H 40	16.78	1.11	0.122
BD ( 1) O 20 - H 37	RY*( 2) O 16	0.16	1.39	0.013
LP ( 1) O 20	RY*( 1) O 16	0.08	1.04	0.008
LP ( 2) O 20	RY*( 1) O 16	0.15	0.98	0.011
CR ( 1) O 20	RY*( 1) H 37	0.77	20.36	0.112
CR ( 1) O 20	RY*( 1) H 38	0.88	20.33	0.119
LP ( 1) O 20	RY*( 2) H 37	0.9	2.57	0.043
LP ( 1) O 20	RY*( 2) H 38	0.83	2.37	0.04
LP ( 2) O 20	RY*( 1) H 37	0.78	1.78	0.034
LP ( 2) O 20	RY*( 3) H 37	0.58	3	0.037
LP ( 2) O 20	RY*( 1) H 38	0.5	1.74	0.027
LP ( 2) O 20	RY*( 3) H 38	0.65	2.95	0.039
LP ( 1) O 20	RY*( 2) C 61	0.06	1.02	0.007
LP ( 1) O 20	BD*( 1) C 61 - H 65	0.1	1.11	0.01
CR ( 1) C 61	RY*( 2) H 62	0.64	11.12	0.075
CR ( 1) C 61	RY*( 2) H 63	0.62	11.11	0.074
CR ( 1) C 61	RY*( 2) H 64	0.69	11.12	0.078
CR ( 1) C 61	RY*( 1) H 65	0.79	11.11	0.083
BD ( 1) O 70 - H 71	RY*( 2) O 9	0.07	1.49	0.009
BD ( 1) O 70 - H 71	RY*( 5) O 9	0.11	2.25	0.014
LP ( 1) O 70	RY*( 2) O 9	0.1	1.3	0.01
LP ( 1) O 70	BD*( 1) O 9 - H 22	0.07	1.22	0.008
LP ( 2) O 70	RY*( 1) O 9	0.22	0.91	0.013
BD ( 1) C 66 - H 68	RY*( 1) H 43	0.05	1.7	0.008
BD ( 1) O 70 - H 71	RY*( 1) O 19	0.06	1.56	0.009
BD ( 1) O 70 - H 71	RY*( 1) H 43	0.22	1.92	0.018
BD ( 1) O 70 - H 71	BD*( 1) O 19 - H 43	0.81	1.44	0.031
CR ( 1) O 70	BD*( 1) O 19 - H 43	0.06	19.7	0.031
LP ( 1) O 70	BD*( 1) O 19 - H 43	0.75	1.26	0.027
LP ( 2) O 70	RY*( 1) O 19	0.13	1.14	0.011
LP ( 2) O 70	RY*( 2) O 19	0.13	1.05	0.011
LP ( 2) O 70	RY*( 13) O 19	0.07	2.94	0.013
LP ( 2) O 70	BD*( 1) O 19 - H 43	14.56	1.02	0.11
BD ( 1) C 66 - H 67	RY*( 1) O 70	1.25	1.42	0.038
BD ( 1) C 66 - H 68	RY*( 1) O 70	0.66	1.43	0.027
BD ( 1) C 66 - H 69	RY*( 2) O 70	0.91	1.46	0.033
BD ( 1) C 66 - H 69	BD*( 1) O 70 - H 71	2.38	1.16	0.047

BD ( 1) O 70 - H 71	RY*( 1) C 66	1.33	1.73	0.043
BD ( 1) O 70 - H 71	RY*( 3) C 66	0.65	2.92	0.039
BD ( 1) O 70 - H 71	BD*( 1) C 66 - H 69	2.2	1.36	0.049
CR ( 1) C 66	BD*( 1) C 66 - O 70	1.03	10.62	0.093
CR ( 1) O 70	RY*( 1) C 66	1.65	19.98	0.162
CR ( 1) O 70	RY*( 1) H 71	0.79	20.2	0.113
LP ( 1) O 70	RY*( 1) C 66	2.21	1.54	0.052
LP ( 1) O 70	RY*( 2) H 71	0.51	2.52	0.032
LP ( 1) O 70	BD*( 1) C 66 - H 67	3.08	1.17	0.053
LP ( 1) O 70	BD*( 1) C 66 - H 69	2.52	1.18	0.049
LP ( 2) O 70	RY*( 2) C 66	0.85	2.25	0.04
LP ( 2) O 70	RY*( 2) H 71	0.71	2.29	0.037
LP ( 2) O 70	RY*( 3) H 71	0.58	2.83	0.037
LP ( 2) O 70	BD*( 1) C 66 - H 67	4.95	0.93	0.061
LP ( 2) O 70	BD*( 1) C 66 - H 68	8.21	0.93	0.079