J-4490-m41

10	311	303	8
11	154	184	15
12	277	258	9
13	181	174	14

-2 8 1

1	515	512	5
2	1113	1147	10
3	103	175	11
4	148	150	9
5	402	419	5
6	123	140	12
7	539	533	6
8	250	288	9
9	17	72	49
10	150	166	14
11	137	120	16
12	107	101	19
13	-30	36	46

-2 9 1

1	72	134	16
2	377	391	5
3	85	93	14
4	1046	1039	9
5	181	135	8
6	321	277	6
7	136	98	12
8	243	215	9
9	183	179	11
10	229	247	10
11	220	195	11
12	-81	23	25
13	88	95	25

-2 10 1

1	56	18	20
2	1175	1187	10
3	75	24	16
4	40	70	28
5	133	129	11
6	43	95	30
7	121	137	15
8	220	202	10
9	51	44	32
10	326	343	8
11	76	51	25
12	220	226	11

-2 11 1

1	382	416	6
2	559	607	6
3	558	583	6
4	626	637	6
5	160	177	11
6	193	248	10
7	60	36	26
8	138	176	15
9	79	67	24
10	506	467	7
11	88	119	24
12	-37	38	42

-2 12 1

1	191	203	9
2	626	608	6
3	217	229	8
4	329	328	7
5	183	230	11
6	122	82	15
7	-75	60	24
8	515	506	7
9	88	69	22
10	108	122	20
11	140	139	17
12	240	262	11

-2 13 1

1	385	408	6
2	437	441	6
3	202	204	9
4	313	303	7
5	142	159	13
6	206	165	10
7	306	310	8
8	117	75	18
9	257	270	10
10	466	453	8
11	-58	16	32

-2 14 1

1	179	138	11
2	41	43	34
3	689	674	7
4	132	137	14
5	151	170	13
6	76	49	24
7	45	35	36
8	225	206	10
9	487	475	8
10	-42	28	39

-2 15 1

1	582	568	7
2	-73	3	24
3	-42	19	35
4	98	76	20
5	383	386	7
6	136	21	15
7	523	499	7
8	95	58	22
9	358	341	9
10	-37	33	42

-2 16 1

1	110	118	18
2	71	61	25
3	554	570	7
4	118	72	17
5	224	175	10
6	168	157	13
7	28	36	45
8	213	175	12
9	337	340	9

-2 17 1

1	533	524	7
2	174	149	13
3	95	65	21
4	174	127	12
5	184	138	12
6	71	36	26
7	161	165	14
8	34	89	44

-2 18 1

1	148	108	15
2	291	259	9
3	323	321	9
4	92	0	21
5	-28	31	45
6	109	120	20
7	-27	30	48

-2 19 1

1	210	217	11
2	-73	36	27
3	41	52	39
4	227	174	11
5	45	57	37
6	112	96	20

-2 20 1

1	-41	43	39
2	391	367	8
3	-51	77	36
4	56	7	33
5	-73	18	27

-2 21 1

1	25	6	49
2	132	118	18

-1 0 1

1	162	183	4
3	1165	1175	11
5	508	539	7
7	653	613	8
9	709	712	9
11	138	110	21
13	109	92	28

-1 1 1

1	2273	2269	20
2	783	787	6
3	735	730	6
4	66	52	15
5	156	147	8
6	476	489	5
7	1263	1223	11
8	50	47	24
9	119	110	14
10	-88	20	20
11	237	253	9
12	114	89	18
13	442	448	8
14	53	21	35

-1 2 1

1	563	548	5
2	293	240	3
3	450	466	4
4	341	377	5
5	256	236	5
6	185	190	7
7	184	169	8
8	489	494	6
9	849	859	8
10	-69	13	24
11	170	185	12
12	-35	41	41
13	166	127	14
14	220	210	12

-1 3 1

1	514	497	4
2	759	749	6
3	625	594	5
4	863	860	7
5	723	664	6
6	383	323	5
7	630	654	6
8	522	511	6
9	236	181	8
10	353	361	7
11	327	291	8
12	320	313	9
13	397	389	8
14	-95	37	24

-1 4 1

1	887	946	7
2	483	476	3
3	324	297	4
4	1256	1173	11
5	133	111	9
6	966	976	8
7	128	111	11
8	994	987	9
9	333	296	7
10	282	278	8
11	129	155	18
12	197	209	12
13	-22	93	51
14	483	480	8

-1 5 1

1	608	639	5
2	1759	1754	15
3	183	218	7
4	212	220	6
5	328	303	5
6	242	286	6
7	81	51	17
8	938	925	9
9	25	3	42
10	589	617	7
11	60	63	30
12	341	343	8
13	-37	15	42
14	-23	41	53

-1 6 1

1	10	27	38
2	443	438	5
3	725	730	6
4	571	602	6
5	485	453	5
6	906	883	8
7	32	43	31
8	865	874	8
9	549	546	7
10	295	286	8
11	204	226	11
12	247	250	10
13	-67	7	30

-1 7 1

1	449	499	5
2	882	911	8
3	61	58	17
4	476	499	5
5	248	272	6
6	734	705	7
7	747	722	7
8	420	413	6
9	119	158	16
10	396	362	7
11	158	193	15
12	158	160	14
13	232	224	11

-1 8 1

1	772	786	7
2	1108	1082	9
3	726	745	7
4	41	8	24
5	666	702	6
6	228	226	7

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m42

7	183	225	10
8	503	534	6
9	501	469	7
10	94	93	20
11	183	153	13
12	137	119	16
13	99	83	22

-1 9 1

1	1202	1199	10
2	183	176	7
3	303	281	5
4	498	443	6
5	115	102	12
6	272	241	7
7	482	471	6
8	75	79	23
9	66	27	26
10	141	114	15
11	76	6	26
12	85	64	24
13	147	157	16

-1 10 1

1	387	356	5
2	110	113	12
3	769	768	7
4	258	240	6
5	550	524	6
6	-50	5	27
7	188	187	10
8	68	3	25
9	264	281	9
10	42	11	37
11	-101	33	20
12	101	93	21

-1 11 1

1	875	919	8
2	202	194	7
3	73	78	18
4	504	477	6
5	66	22	22
6	292	274	7
7	485	480	7
8	129	85	15
9	130	51	15
10	84	16	23
11	88	108	23
12	57	13	33

-1 12 1

1	402	430	6
2	656	639	7
3	508	519	6
4	158	180	11
5	308	308	7
6	290	292	8
7	101	4	18
8	290	230	8
9	491	495	7
10	55	12	32
11	136	190	18
12	-26	33	49

-1 13 1

1	338	361	7
2	504	503	6
3	371	355	7
4	439	402	6
5	164	175	12
6	131	158	15
7	568	570	7
8	352	367	8
9	61	111	31
10	276	273	10
11	222	209	12

-1 14 1

1	296	299	7
2	176	173	11
3	261	265	8
4	376	384	7
5	144	166	14
6	591	555	7
7	69	57	27
8	431	438	8
9	377	365	8
10	-56	77	33
11	96	108	24

-1 15 1

1	44	87	33
2	609	645	7
3	109	32	17
4	360	348	7
5	46	77	33
6	153	147	14
7	132	132	16
8	446	451	8
9	30	53	45
10	393	380	8

-1 16 1

1	115	139	18
2	194	193	11
3	62	65	28
4	256	236	9
5	67	47	27
6	349	384	8
7	129	74	17
8	471	445	8
9	30	95	47

-1 17 1

1	108	90	18
2	427	414	7
3	-66	5	28
4	249	237	10
5	128	109	17
6	235	223	10
7	205	191	12
8	180	147	14

-1 18 1

1	93	89	22
2	263	244	10
3	270	249	9
4	5	19	62
5	241	238	10
6	115	82	19
7	-60	1	31
8	168	155	14

-1 19 1

1	581	561	8
2	171	160	14
3	163	189	14
4	85	60	24
5	40	41	39
6	12	46	58

-1 20 1

1	107	9	20
2	125	76	18
3	320	321	9
4	80	77	25
5	244	235	11

-1 21 1

1	348	352	9
2	-81	17	26
3	-63	65	31

0 0 1

2	759	698	6
4	730	684	6
6	1188	1140	10
8	738	709	7
10	-81	15	21
12	219	199	11
14	353	361	9

0 1 1

1	773	688	6
2	2544	2441	20
3	627	605	5
4	648	604	5
5	334	344	4
6	547	567	4
7	202	148	5
8	564	568	5
9	373	359	5
10	182	169	8
11	56	27	22
12	266	278	7
13	78	90	19
14	287	252	7

0 2 1

0	1714	1880	15
1	1350	1390	11
2	1036	935	8
3	395	370	3
4	45	49	15
5	560	541	5
6	745	713	6
7	232	239	5
8	450	452	4
9	328	295	5
10	217	230	7
11	291	296	6
12	306	298	6
13	51	60	26
14	337	356	7

0 3 1

1	1213	1176	9
2	237	221	2
3	201	225	3
4	394	357	4
5	646	634	5
6	31	73	21
7	934	932	7
8	744	762	6
9	202	202	7
10	94	92	14
11	42	24	27
12	82	65	18
13	438	438	6
14	212	250	9

0 4 1

0	640	724	5
1	748	720	6
2	85	119	6
3	104	169	7
4	222	216	4
5	591	635	5
6	326	364	4
7	355	362	4
8	106	91	10
9	731	694	6
10	179	219	8
11	337	347	6
12	233	248	7
13	34	49	34
14	227	226	9

0 5 1

1	308	292	3
2	989	986	7
3	597	624	5
4	187	248	5
5	995	976	8
6	165	172	6
7	1224	1164	9
8	61	98	17
9	231	196	6
10	37	57	28
11	184	196	9
12	-26	21	36
13	554	562	6
14	74	11	21

0 6 1

0	755	838	6
1	857	858	6
2	970	1004	7
3	330	293	4
4	361	337	4
5	742	689	6
6	433	461	4
7	681	685	6
8	50	34	21
9	590	629	5
10	191	236	8
11	230	202	7
12	120	108	13
13	-51	30	27

0 7 1

1	1050	1104	8
2	353	341	4
3	147	187	6
4	692	631	5
5	409	443	4
6	280	253	4
7	944	927	7
8	554	523	5
9	127	99	11
10	249	268	7
11	49	96	26
12	29	59	35
13	300	288	7

0 8 1

0	940	970	8
1	705	719	5
2	149	150	5
3	724	721	6
4	155	108	6
5	522	568	5
6	693	692	6
7	151	143	8
8	404	384	5
9	368	317	5
10	221	197	7
11	21	66	39
12	184	194	9

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m43

13	-17	18	44

0 9 l

1	995	1056	8
2	782	830	6
3	133	126	7
4	618	649	5
5	261	278	5
6	787	788	6
7	302	327	5
8	364	401	5
9	64	42	20
10	241	237	7
11	-42	49	29
12	217	216	8
13	81	122	20

0 10 l

0	1288	1372	11
1	123	118	7
2	429	438	4
3	30	10	23
4	119	156	8
5	226	219	5
6	485	504	5
7	68	39	17
8	462	480	5
9	134	109	11
10	57	14	22
11	69	21	20
12	138	119	12

0 11 l

1	192	235	5
2	886	888	7
3	312	328	4
4	578	573	5
5	98	86	12
6	413	411	5
7	295	314	6
8	340	289	6
9	-38	7	29
10	218	218	8
11	-65	38	21
12	225	202	8

0 12 l

0	910	911	8
1	160	198	7
2	144	146	7
3	418	427	4
4	127	140	9
5	345	378	5
6	520	540	5
7	73	56	18
8	250	244	7
9	240	268	7
10	56	38	23
11	93	59	16
12	234	228	8

0 13 l

1	312	295	5
2	421	435	5
3	195	188	7
4	197	171	7
5	383	391	5
6	72	74	17
7	338	320	6
8	317	330	6
9	28	18	36
10	208	185	8
11	150	141	11

0 14 l

0	150	130	12
1	547	495	5
2	-57	32	20
3	239	271	6
4	181	185	8
5	178	155	8
6	345	309	5
7	302	312	6
8	77	85	19
9	359	345	6
10	98	33	15
11	166	188	11

0 15 l

1	261	258	6
2	118	129	11
3	257	278	6
4	-48	76	24
5	333	320	6
6	-37	49	31
7	515	515	6
8	160	116	10
9	-31	51	35
10	39	36	31

0 16 l

0	118	66	16
1	301	285	6
2	48	2	24
3	377	338	5
4	57	34	22
5	426	423	6
6	16	40	42
7	140	141	11
8	58	11	23
9	328	320	6

0 17 l

1	347	330	6
2	131	130	11
3	156	168	10
4	109	107	14
5	110	125	14
6	17	54	43
7	489	476	6
8	118	126	14

0 18 l

0	437	430	7
1	162	145	10
2	239	240	7
3	121	128	13
4	82	13	17
5	415	407	6
6	236	223	8
7	-70	23	21
8	55	97	26

0 19 l

1	112	110	14
2	396	387	6
3	30	74	34
4	427	405	6
5	39	5	31
6	152	158	11

0 20 l

0	601	597	8
1	-50	31	26
2	230	232	8
3	-41	14	30
4	17	37	44
5	64	5	23

0 21 l

1	109	62	15
2	267	248	7
3	107	83	15

1 0 l

1	1498	1423	14
3	1112	1040	11
5	948	877	10
7	439	433	7
9	240	284	12
11	245	268	13
13	131	149	25

1 1 l

0	281	266	3
1	1344	1315	11
2	122	91	5
3	53	17	15
4	742	714	6
5	1374	1306	12
6	252	176	6
7	660	680	6
8	168	147	9
9	242	258	8
10	142	182	14
11	94	96	21
12	77	84	25
13	366	374	8
14	-42	4	40

1 2 l

0	871	849	7
1	813	785	7
2	1348	1351	11
3	392	394	4
4	145	141	8
5	436	387	5
6	1065	1059	9
7	502	522	6
8	672	659	7
9	85	93	20
10	41	13	34
11	138	139	16
12	97	107	22
13	282	281	10
14	53	45	35

1 3 l

0	1072	1100	9
1	1437	1501	12
2	1116	1059	9
3	1331	1275	11
4	1006	930	9
5	701	684	6
6	269	284	6
7	272	245	6
8	560	563	6
9	128	138	14
10	304	344	8
11	241	254	10
12	61	57	30
13	343	338	9
14	219	241	13

1 4 l

0	1486	1565	12
1	148	197	5
2	546	540	5
3	394	391	5
4	96	69	12
5	-11	14	39
6	975	942	9
7	412	355	6
8	77	20	19
9	144	99	13
10	209	205	11
11	86	5	23
12	520	499	10
13	218	226	12
14	141	128	18

1 5 l

0	653	635	6
1	708	690	6
2	107	15	10
3	303	302	5
4	544	570	5
5	363	363	5
6	473	472	5
7	297	284	6
8	537	526	6
9	121	113	15
10	378	339	7
11	-59	4	30
12	-17	28	55
13	56	85	35

1 6 l

0	1390	1444	12
1	32	12	25
2	471	467	5
3	304	240	5
4	313	317	5
5	208	156	6
6	684	700	7
7	53	22	23
8	-40	44	32
9	112	102	17
10	124	147	17
11	-41	71	38
12	487	486	8
13	-51	58	36

1 7 l

0	969	986	8
1	470	499	5
2	570	564	5
3	215	234	6
4	472	466	5
5	363	384	5
6	334	277	6
7	186	202	9
8	479	470	6
9	40	111	36
10	287	280	8
11	349	331	8
12	109	121	20
13	237	235	11

1 8 l

0	778	740	7
1	704	724	6
2	34	68	25
3	764	838	7
4	139	127	9
5	462	467	6
6	1150	1162	10
7	265	257	8
8	182	140	11
9	469	444	7

Supplementary material, page 43

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

10	169	156	13
11	372	363	8
12	151	164	16
13	159	100	15

1 9 1

0	308	301	5
1	588	610	6
2	259	252	6
3	-14	25	39
4	639	620	6
5	623	614	6
6	133	125	12
7	620	627	7
8	226	241	9
9	107	108	18
10	-48	9	34
11	192	213	12
12	-70	76	29

1 10 1

0	75	43	15
1	978	965	9
2	239	212	6
3	561	586	6
4	144	167	10
5	930	912	8
6	140	145	13
7	432	438	7
8	152	110	13
9	341	348	8
10	47	91	36
11	411	400	8
12	-102	20	22

1 11 1

0	211	179	7
1	460	441	6
2	514	535	6
3	217	177	7
4	90	95	17
5	549	568	6
6	60	108	27
7	514	526	7
8	169	208	13
9	37	79	39
10	216	220	11
11	165	143	14
12	77	37	26

1 12 1

0	337	298	6
1	346	347	6
2	120	128	13
3	392	394	6
4	168	190	11
5	352	385	7
6	467	434	7
7	423	403	7
8	163	176	13
9	195	191	12
10	-16	39	54
11	167	166	15

1 13 1

0	342	357	6
1	137	170	12
2	68	89	22
3	142	168	13
4	366	318	7
5	230	245	9
6	-74	46	24
7	91	2	21
8	200	216	12
9	141	129	16
10	189	180	13
11	160	147	15

1 14 1

0	366	398	7
1	-50	30	29
2	87	79	19
3	15	23	49
4	85	57	21
5	-28	31	41
6	265	277	9
7	176	169	13
8	-32	62	43
9	62	12	29
10	138	109	17

1 15 1

0	122	89	15
1	-44	3	33
2	193	188	11
3	-21	38	46
4	197	197	11
5	75	11	24
6	78	113	25
7	-29	16	44
8	286	262	9
9	10	40	59
10	210	204	12

1 16 1

0	483	500	7
1	57	48	29
2	72	46	24
3	60	71	29
4	46	23	34
5	-96	47	21
6	462	454	7
7	-57	34	31
8	-62	33	30
9	120	82	18

1 17 1

0	175	156	13
1	244	243	10
2	213	182	11
3	106	8	19
4	423	431	8
5	81	86	25
6	2	67	66
7	41	75	40
8	250	236	11

1 18 1

0	305	265	9
1	241	253	10
2	116	124	18
3	297	279	9
4	65	22	29
5	182	151	13
6	351	355	9
7	63	67	31

1 19 1

0	95	135	23
1	241	217	10
2	48	1	34
3	-27	1	47
4	216	190	12
5	282	263	10
6	53	63	35

1 20 1

0	67	13	29
1	385	350	8
2	-72	59	28
3	299	281	10
4	104	77	21
5	235	223	11

1 21 1

0	63	43	30
1	164	106	14
2	113	81	20
3	126	37	25

2 0 1

0	141	64	6
2	888	842	9
4	1378	1289	14
6	1137	1078	12
8	331	364	9
10	121	27	23
12	547	516	10

2 1 1

0	448	453	4
1	1120	1071	9
2	1155	1102	10
3	658	622	6
4	1447	1358	12
5	1121	1101	10
6	751	700	7
7	117	124	12
8	385	338	6
9	-36	20	36
10	502	505	7
11	113	84	19
12	161	135	15
13	111	106	21

2 2 1

0	884	912	7
1	792	767	7
2	298	309	4
3	1134	1058	10
4	136	102	9
5	276	261	5
6	867	859	8
7	651	661	6
8	25	15	38
9	319	302	7
10	150	162	15
11	229	239	11
12	383	398	8
13	171	120	14

2 3 1

0	162	150	5
1	50	38	16
2	28	31	26
3	101	132	12
4	657	667	6
5	1517	1418	13
6	321	308	6
7	-25	28	36
8	-52	58	27
9	-26	53	42
10	225	187	10
11	422	396	8
12	283	307	10
13	189	161	13

2 4 1

0	664	651	6
1	951	957	8
2	488	445	5
3	588	596	6
4	330	340	5
5	341	346	5
6	309	271	6
7	745	713	7
8	-63	1	24
9	277	278	8
10	141	126	15
11	157	163	15
12	148	193	16
13	361	381	9

2 5 1

0	820	800	7
1	-29	31	27
2	440	436	5
3	570	574	5
4	123	109	9
5	434	468	5
6	64	98	20
7	15	19	43
8	197	222	10
9	90	27	21
10	-70	7	26
11	506	532	7
12	66	65	30
13	178	172	14

2 6 1

0	352	341	5
1	220	253	6
2	352	334	5
3	339	252	5
4	254	231	6
5	250	257	6
6	277	298	6
7	328	357	7
8	254	270	8
9	439	408	7
10	220	218	11
11	231	240	11
12	101	118	22
13	328	347	10

2 7 1

0	170	174	7
1	155	166	8
2	529	545	5
3	157	143	8
4	81	9	15
5	830	846	8
6	171	185	9
7	351	305	7
8	191	201	10
9	114	140	18
10	264	264	10
11	359	380	8
12	104	103	22
13	176	176	15

2 8 1

0	354	361	5
1	560	566	5
2	164	184	8
3	749	831	7
4	466	491	5
5	-11	51	45
6	247	298	8
7	416	424	7

Supplementary material, page 44

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m45

8	101	75	18
9	346	402	8
10	285	308	9
11	239	239	11
12	431	446	8

2 9 1

0	757	755	7
1	174	158	7
2	750	738	7
3	59	37	20
4	798	802	7
5	660	646	7
6	416	449	6
7	150	157	13
8	467	422	7
9	-41	59	37
10	628	681	8
11	80	110	27
12	-93	9	24

2 10 1

0	653	703	6
1	111	124	12
2	62	94	20
3	273	324	6
4	592	592	6
5	112	108	15
6	762	769	8
7	134	99	14
8	107	120	19
9	-62	73	29
10	152	151	16
11	73	17	28
12	446	456	8

2 11 1

0	584	589	6
1	88	83	15
2	428	456	6
3	375	343	6
4	791	826	8
5	424	425	6
6	431	399	7
7	237	233	10
8	307	311	8
9	55	130	32
10	398	373	8
11	69	119	30

2 12 1

0	326	276	6
1	360	347	6
2	523	540	6
3	402	420	6
4	314	321	7
5	62	17	26
6	265	273	9
7	146	177	15
8	215	245	11
9	289	257	9
10	117	123	20
11	138	151	17

2 13 1

0	90	71	17
1	205	207	9
2	81	92	20
3	109	80	16
4	342	327	7
5	398	430	7
6	289	292	8
7	127	138	16
8	106	97	19
9	-59	47	31
10	138	74	16
11	170	181	21

2 14 1

0	44	50	31
1	-65	0	24
2	132	142	14
3	350	336	7
4	155	133	13
5	83	39	22
6	99	18	19
7	156	154	14
8	175	174	13
9	151	129	15
10	77	58	26

2 15 1

0	136	97	14
1	255	217	9
2	198	187	10
3	84	26	21
4	-33	3	39
5	340	334	8
6	82	51	23
7	-83	44	24
8	-60	22	31
9	-49	16	36

2 16 1

0	245	229	9
1	278	265	9
2	145	140	14
3	213	214	10
4	107	112	19
5	52	4	32
6	-31	30	43
7	282	284	10
8	-63	13	30
9	199	175	13

2 17 1

0	57	55	30
1	102	62	19
2	147	154	15
3	83	86	23
4	137	109	16
5	462	425	8
6	90	85	24
7	177	136	13
8	52	49	35

2 18 1

0	182	169	12
1	197	195	12
2	-38	9	39
3	288	258	9
4	206	205	12
5	-101	54	22
6	218	201	12
7	200	193	13

2 19 1

0	330	314	8
1	-65	15	28
2	224	213	11
3	-93	7	23
4	203	169	12
5	189	188	13
6	151	81	15

2 20 1

0	156	113	15
1	-64	4	30
2	83	47	25
3	48	19	36
4	269	231	10

2 21 1

0	178	191	14
1	66	65	29

3 0 1

1	1035	998	10
3	778	739	8
5	398	403	7
7	1027	983	11
9	820	850	10
11	187	176	18
13	357	339	12

3 1 1

0	898	898	8
1	182	117	7
2	1115	1106	9
3	352	336	5
4	47	71	22
5	1206	1159	10
6	240	182	7
7	187	211	9
8	231	248	9
9	39	8	37
10	284	277	9
11	709	723	8
12	51	83	36
13	164	181	16

3 2 1

0	957	880	8
1	75	109	15
2	391	367	5
3	1045	961	9
4	1168	1110	10
5	277	262	6
6	342	343	6
7	421	410	6
8	63	115	26
9	613	595	7
10	313	306	9
11	29	28	47
12	234	257	11
13	246	245	11

3 3 1

0	389	383	5
1	1074	1063	9
2	879	846	8
3	433	399	5
4	297	295	5
5	210	167	7
6	717	727	7
7	-63	65	23
8	362	345	7
9	-16	54	51
10	478	500	7
11	237	246	11
12	244	240	11
13	18	12	55

3 4 1

0	228	235	6
1	123	168	10
2	882	884	8
3	303	327	5
4	1013	976	9
5	205	174	7
6	193	166	8
7	-85	115	19
8	247	233	9
9	191	109	11
10	403	404	8
11	82	27	25
12	249	246	11
13	130	115	19

3 5 1

0	174	202	7
1	242	200	6
2	992	1014	9
3	155	85	8
4	590	606	6
5	32	51	30
6	604	563	6
7	115	97	15
8	298	287	8
9	72	60	25
10	463	496	7
11	35	1	43
12	275	258	10
13	-76	36	29

3 6 1

0	611	631	6
1	247	224	6
2	598	600	6
3	355	370	5
4	815	827	7
5	60	43	21
6	419	423	6
7	78	74	21
8	141	131	14
9	40	45	37
10	226	215	11
11	-102	44	21
12	290	299	10

3 7 1

0	261	256	5
1	759	755	7
2	968	1047	8
3	203	134	7
4	449	450	6
5	309	282	6
6	480	455	6
7	137	160	14
8	332	356	8
9	121	102	18
10	518	508	8
11	199	239	13
12	117	104	20

3 8 1

0	127	121	10
1	579	602	6
2	285	287	6
3	814	852	7
4	753	762	7
5	229	229	8
6	282	283	8
7	277	272	8
8	108	168	18
9	268	278	10
10	221	219	11
11	68	42	30
12	214	225	13

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-M46

3 9 1

0	459	466	5
1	107	107	13
2	261	238	6
3	604	652	6
4	165	147	10
5	859	868	8
6	192	227	10
7	126	138	16
8	263	262	9
9	63	92	30
10	262	255	10
11	581	554	8
12	-55	39	36

3 10 1

0	138	113	10
1	691	668	7
2	203	185	8
3	854	881	8
4	298	301	7
5	118	131	16
6	61	13	27
7	373	385	7
8	-74	29	26
9	581	586	8
10	147	56	15
11	93	110	25

3 11 1

0	206	208	8
1	-82	23	17
2	316	315	6
3	337	330	7
4	33	16	37
5	637	643	7
6	195	200	11
7	78	105	25
8	63	54	29
9	87	82	25
10	95	116	24
11	460	476	8

3 12 1

0	204	178	9
1	269	312	7
2	111	113	16
3	552	574	7
4	535	557	7
5	-55	13	29
6	345	342	8
7	215	224	11
8	135	143	17
9	283	266	9
10	43	85	40

3 13 1

0	57	32	26
1	359	365	7
2	476	470	7
3	29	60	41
4	229	245	10
5	171	204	12
6	117	123	18
7	-65	59	28
8	167	144	13
9	97	69	22
10	163	191	16

3 14 1

0	381	393	7
1	49	59	31
2	295	296	8
3	303	323	8
4	340	342	8
5	105	65	19
6	287	254	9
7	-101	2	21
8	73	92	27
9	127	105	18

3 15 1

0	70	102	25
1	131	93	15
2	283	295	9
3	52	40	32
4	222	244	11
5	-66	33	28
6	219	209	11
7	73	31	26
8	161	133	15
9	79	2	26

3 16 1

0	189	169	11
1	-54	31	31
2	46	24	34
3	75	74	25
4	553	530	7
5	-56	27	32
6	151	169	15
7	-38	12	40
8	43	38	38

3 17 1

0	268	264	9
1	185	170	12
2	368	351	8
3	-43	37	37
4	67	60	29
5	161	149	14
6	295	300	10
7	99	37	22

3 18 1

0	34	68	41
1	97	99	21
2	116	112	18
3	146	167	16
4	417	417	8
5	95	102	23
6	146	162	17

3 19 1

0	92	61	22
1	-49	13	35
2	159	187	15
3	265	241	10
4	93	38	23
5	301	299	10

3 20 1

0	55	35	32
1	196	173	12
2	138	80	17
3	245	210	11

4 0 1

0	83	109	20
2	54	30	26
4	983	947	10
6	345	335	9
8	41	66	47
10	709	721	10
12	373	374	12

4 1 1

0	176	162	7
1	80	187	15
2	849	853	7
3	486	464	5
4	235	217	7
5	394	418	6
6	655	649	7
7	-66	6	25
8	737	720	8
9	149	178	15
10	381	393	8
11	232	227	11
12	258	270	11

4 2 1

0	623	614	6
1	758	771	7
2	217	201	6
3	506	513	5
4	658	678	6
5	434	441	6
6	282	250	7
7	675	641	7
8	227	225	10
9	447	426	7
10	351	369	8
11	-93	6	23
12	145	170	17

4 3 1

0	394	423	5
1	320	328	5
2	1028	970	9
3	1126	1051	10
4	116	73	12
5	642	645	6
6	-60	22	24
7	316	325	7
8	307	309	8
9	255	254	10
10	131	165	18
11	298	298	9
12	125	93	19

4 4 1

0	833	814	7
1	823	777	7
2	189	153	7
3	821	798	7
4	-30	27	31
5	55	20	24
6	-60	32	25
7	366	395	7
8	202	211	11
9	495	496	7
10	49	11	36
11	73	42	28
12	44	61	39

4 5 1

0	-70	32	15
1	675	660	6
2	299	251	5
3	602	603	6
4	285	315	6
5	731	709	7
6	79	117	21
7	478	448	7
8	52	14	32
9	83	14	24
10	-69	33	28
11	245	248	11
12	-62	14	32

4 6 1

0	312	296	5
1	701	699	7
2	69	2	18
3	921	927	8
4	184	165	9
5	-60	41	24
6	226	253	9
7	214	216	10
8	12	46	55
9	484	521	7
10	63	43	30
11	-4	39	66
12	-31	45	46

4 7 1

0	327	327	5
1	346	346	6
2	780	784	7
3	673	663	7
4	392	397	6
5	320	337	7
6	-59	24	27
7	202	213	11
8	-56	3	31
9	60	91	32
10	85	57	25
11	351	361	9
12	106	109	22

4 8 1

0	303	325	6
1	284	297	6
2	120	142	12
3	422	423	6
4	638	652	7
5	470	466	6
6	143	172	14
7	198	177	11
8	-26	58	46
9	520	491	8
10	358	330	8
11	38	12	42

4 9 1

0	323	327	6
1	67	147	20
2	876	880	8
3	499	501	6
4	34	17	37
5	62	35	26
6	189	235	11
7	121	120	17
8	337	356	8
9	117	117	19
10	108	115	22
11	233	207	11

4 10 1

0	70	45	20
1	61	73	22
2	152	156	12
3	103	120	17
4	749	761	7
5	-75	4	23
6	143	101	14
7	-12	23	56
8	74	31	27

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-M47

9	143	166	16
10	520	512	8
11	59	0	33

4 11 1

0	314	344	7
1	-58	16	25
2	772	760	8
3	333	318	7
4	32	54	40
5	82	82	22
6	171	143	13
7	-80	25	25
8	397	378	8
9	145	104	16
10	149	142	17

4 12 1

0	365	384	7
1	234	228	9
2	123	113	15
3	185	209	12
4	445	435	7
5	183	194	12
6	163	204	14
7	204	196	12
8	119	106	19
9	244	228	11
10	284	301	10

4 13 1

0	236	209	9
1	315	310	8
2	600	619	7
3	323	302	8
4	235	217	10
5	441	438	7
6	85	61	23
7	280	251	9
8	164	164	14
9	-47	61	38

4 14 1

0	200	201	11
1	310	325	8
2	29	16	43
3	539	558	7
4	263	269	9
5	76	23	25
6	119	112	18
7	168	177	14
8	98	104	23
9	275	261	10

4 15 1

0	66	1	27
1	357	350	7
2	214	204	10
3	266	301	10
4	51	33	33
5	401	402	8
6	120	75	18
7	219	243	12
8	-72	75	29

4 16 1

0	155	152	14
1	275	258	9
2	114	105	19
3	369	360	8
4	-67	25	29
5	172	148	13
6	102	45	21
7	165	159	15

4 17 1

0	-8	56	60
1	53	60	33
2	187	192	13
3	394	388	8
4	80	25	25
5	235	244	11
6	50	72	36

4 18 1

0	177	149	13
1	242	225	10
2	44	11	37
3	84	108	26
4	227	209	11
5	140	179	18

4 19 1

0	110	100	20
1	58	84	33
2	227	209	11
3	166	179	15

4 20 1

0	142	140	16
1	22	10	52

5 0 1

1	862	755	9
3	262	279	9
5	222	193	12
7	521	516	9
9	337	363	12
11	309	305	13

5 1 1

0	409	373	5
1	341	336	5
2	199	189	8
3	787	778	7
4	166	175	10
5	193	191	10
6	141	107	13
7	237	262	10
8	180	176	13
9	553	548	7
10	119	15	19
11	254	295	11
12	80	47	27

5 2 1

0	276	190	6
1	1174	1221	10
2	489	484	6
3	330	298	6
4	78	91	19
5	63	30	24
6	24	60	44
7	379	398	7
8	69	78	28
9	218	207	12
10	297	296	10
11	145	132	17
12	108	136	22

5 3 1

0	526	508	6
1	518	494	6
2	553	540	6
3	738	715	7
4	213	225	8
5	208	240	9
6	94	65	20
7	348	320	8
8	485	477	7
9	84	99	25
10	89	96	25
11	45	34	39
12	-40	19	42

5 4 1

0	401	374	5
1	366	360	6
2	570	572	6
3	225	240	8
4	715	706	7
5	95	53	18
6	611	619	7
7	-59	39	30
8	-45	25	36
9	31	1	44
10	232	193	11
11	-56	19	34

5 5 1

0	627	658	6
1	70	0	18
2	1224	1272	11
3	-72	8	20
4	284	260	7
5	33	142	39
6	194	164	11
7	97	135	22
8	594	586	7
9	80	38	26
10	-61	62	32
11	-27	49	49

5 6 1

0	541	566	6
1	414	447	6
2	267	294	7
3	368	349	6
4	874	835	8
5	117	152	17
6	528	519	7
7	165	164	14
8	98	48	22
9	90	99	24
10	289	298	10
11	79	4	27

5 7 1

0	246	235	7
1	223	226	8
2	716	713	7
3	348	358	7
4	-44	50	32
5	278	284	8
6	215	200	10
7	223	188	10
8	478	460	7
9	155	182	16
10	51	54	36
11	50	34	37

5 8 1

0	311	310	6
1	431	427	6
2	496	494	6
3	373	395	7
4	58	90	28
5	116	69	16
6	83	93	23
7	268	255	9
8	198	217	12
9	124	74	18
10	333	335	9
11	125	123	20

5 9 1

0	86	68	19
1	245	231	8
2	144	155	13
3	434	458	7
4	257	275	9
5	108	109	18
6	62	34	29
7	59	40	30
8	239	239	11
9	423	420	8
10	66	11	31

5 10 1

0	143	135	12
1	543	560	7
2	256	254	8
3	-10	17	55
4	-31	7	40
5	107	98	19
6	63	4	28
7	307	333	9
8	44	98	39
9	168	171	15
10	48	75	39

5 11 1

0	41	63	34
1	66	43	26
2	118	93	16
3	426	424	7
4	159	158	13
5	130	123	16
6	221	223	11
7	188	185	10
8	80	105	26
9	277	303	10

5 12 1

0	146	132	14
1	594	569	7
2	189	231	12
3	189	215	12
4	104	113	19
5	22	47	48
6	149	145	15
7	172	134	13
8	148	151	17
9	243	250	12

5 13 1

0	339	339	8
1	76	83	25
2	243	242	10
3	386	401	8
4	-23	48	48
5	214	208	11
6	188	205	13
7	266	267	10
8	378	383	9

5 14 1

Supplementary material, page 47

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m 48

0	326	321	8
1	369	393	8
2	199	201	12
3	229	233	11
4	366	374	8
5	87	76	23
6	395	400	8
7	82	47	26
8	71	59	30

5 15 1

0	307	290	8
1	122	124	18
2	502	482	7
3	179	192	13
4	-47	67	36
5	53	27	34
6	109	75	20
7	-73	36	29

5 16 1

0	276	260	9
1	113	95	19
2	168	146	13
3	-19	28	51
4	260	249	10
5	51	40	35
6	243	236	11

5 17 1

0	111	81	19
1	109	78	20
2	218	217	11
3	100	74	22
4	64	88	31
5	131	90	17

5 18 1

0	146	135	16
1	224	231	12
2	120	81	18
3	97	105	23

5 19 1

0	8	34	62
1	155	125	16

6 0 1

0	445	427	8
2	185	136	13
4	154	147	17
6	184	162	17
8	664	635	10
10	96	177	33

6 1 1

0	685	666	7
1	157	137	10
2	421	427	6
3	80	22	20
4	29	10	40
5	43	34	34
6	296	289	9
7	125	59	17
8	256	242	10
9	209	195	12
10	287	314	10
11	79	39	28

6 2 1

0	592	589	6
1	18	46	42
2	639	605	7
3	71	79	23
4	296	273	8
5	178	131	11
6	368	370	7
7	397	385	8
8	323	329	9
9	62	38	32
10	160	174	16
11	-102	37	24

6 3 1

0	951	923	9
1	158	202	11
2	606	605	6
3	202	210	10
4	203	181	10
5	292	310	8
6	71	81	27
7	161	169	15
8	256	241	10
9	324	323	9
10	48	28	39
11	153	144	17

6 4 1

0	231	264	8
1	983	991	9
2	266	293	8
3	-63	38	26
4	169	171	12
5	54	43	31
6	239	228	10
7	581	584	7
8	60	15	32
9	201	191	13
10	134	93	18
11	30	8	48

6 5 1

0	158	167	11
1	508	497	6
2	110	141	16
3	822	819	8
4	75	8	23
5	452	461	7
6	124	132	18
7	163	190	15
8	41	21	40
9	380	387	8
10	66	33	32

6 6 1

0	22	76	42
1	888	861	8
2	356	361	7
3	46	7	33
4	152	165	14
5	189	192	12
6	265	240	9
7	538	564	8
8	20	30	52
9	106	87	22
10	-72	17	29

6 7 1

0	619	605	7
1	257	225	8
2	241	222	9
3	434	452	7
4	94	44	20
5	154	171	14
6	96	73	22
7	133	112	17
8	265	266	10
9	388	389	9
10	50	5	37

6 8 1

0	228	227	9
1	233	222	9
2	271	284	8
3	144	139	14
4	74	98	25
5	102	137	21
6	242	232	10
7	303	281	9
8	222	219	12
9	56	76	35
10	87	142	27

6 9 1

0	249	233	9
1	85	44	20
2	84	103	23
3	82	69	23
4	-31	49	41
5	-50	19	33
6	254	247	10
7	81	128	26
8	261	256	11
9	164	156	16

6 10 1

0	333	335	7
1	162	148	12
2	176	179	12
3	113	85	18
4	109	107	19
5	122	72	17
6	149	163	15
7	101	8	21
8	323	329	9
9	56	3	35

6 11 1

0	229	218	10
1	76	57	24
2	242	214	9
3	93	35	21
4	-47	33	36
5	49	12	34
6	187	194	13
7	125	113	18
8	275	291	11

6 12 1

0	177	182	12
1	61	77	29
2	271	299	9
3	181	177	13
4	241	226	10
5	224	217	11
6	270	275	10
7	204	242	13
8	149	124	17

6 13 1

0	378	358	8
1	166	187	14
2	245	257	10
3	314	333	9
4	36	40	41
5	195	194	13
6	-50	61	37
7	-95	34	24

6 14 1

0	188	171	12
1	437	434	8
2	242	235	11
3	-56	0	32
4	86	92	24
5	92	119	23
6	142	125	17

6 15 1

0	92	5	22
1	172	171	14
2	-70	13	28
3	270	272	10
4	-38	36	41
5	310	289	10
6	59	5	34

6 16 1

0	-73	33	28
1	311	295	9
2	11	42	60
3	-41	25	39
4	78	66	27

6 17 1

0	302	289	9
1	31	3	45
2	165	139	14
3	102	48	21

6 18 1

0	188	162	13

7 0 1

1	432	445	9
3	69	52	33
5	72	67	36
7	102	185	30
9	139	177	25

7 1 1

0	243	192	8
1	215	202	9
2	-72	24	24
3	163	161	13
4	60	40	29
5	196	184	12
6	66	98	30
7	146	139	16
8	-46	7	38
9	178	166	14
10	90	67	25

7 2 1

0	298	280	8
1	369	341	7
2	221	217	9
3	108	60	18
4	136	130	16
5	238	238	10
6	-51	34	36
7	392	399	8
8	240	247	11
9	-76	12	29
10	101	83	24

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m49

7 3 1

0	630	605	7
1	368	405	7
2	4	80	60
3	270	263	9
4	94	80	21
5	496	470	7
6	421	428	8
7	113	53	20
8	216	198	12
9	270	265	11
10	68	68	32

7 4 1

0	121	61	16
1	166	184	13
2	517	502	7
3	45	104	35
4	470	481	7
5	47	84	37
6	189	218	14
7	463	458	8
8	362	372	9
9	99	38	24

7 5 1

0	704	725	7
1	121	127	16
2	98	59	20
3	43	46	36
4	131	137	17
5	233	239	11
6	619	619	8
7	-41	4	42
8	384	378	9
9	76	51	28

7 6 1

0	205	185	10
1	56	134	31
2	500	492	7
3	65	101	28
4	322	318	8
5	83	66	25
6	279	280	10
7	105	100	22
8	375	382	9
9	110	79	22

7 7 1

0	424	416	7
1	344	349	8
2	109	71	18
3	204	194	11
4	57	4	31
5	231	206	11
6	346	364	9
7	65	16	31
8	164	156	15
9	198	194	14

7 8 1

0	-19	58	50
1	255	268	9
2	121	86	17
3	109	37	18
4	102	78	20
5	72	54	27
6	76	25	27
7	368	366	9
8	156	167	17

7 9 1

0	115	116	18
1	192	177	12
2	-53	8	32
3	105	120	20
4	38	4	40
5	321	312	9
6	68	96	29
7	112	135	22
8	-7	33	65

7 10 1

0	66	66	28
1	374	348	8
2	-91	69	23
3	125	147	18
4	-37	31	40
5	148	147	16
6	81	17	26
7	270	272	11
8	57	29	35

7 11 1

0	-51	57	34
1	177	169	13
2	113	72	19
3	229	227	11
4	-22	16	49
5	257	273	10
6	19	14	54
7	145	164	17

7 12 1

0	-81	10	25
1	337	335	8
2	164	173	14
3	74	3	27
4	-92	46	23
5	104	116	22
6	-48	19	38

7 13 1

0	340	345	9
1	277	271	10
2	62	3	31
3	195	137	12
4	163	178	15
5	209	190	13
6	196	212	14

7 14 1

0	39	82	41
1	45	11	38
2	409	394	8
3	-60	39	32
4	202	207	13
5	17	36	57

7 15 1

0	409	390	8
1	41	29	39
2	64	28	31
3	55	84	35
4	93	92	25

7 16 1

0	95	0	23
1	162	158	15
2	179	148	14

8 0 1

0	-45	62	46
2	179	181	19
4	360	395	12
6	221	180	17
8	98	77	33

8 1 1

0	494	488	7
1	86	115	22
2	-77	36	25
3	27	23	46
4	-67	5	30
5	-65	87	31
6	367	365	9
7	69	68	30
8	126	111	19

8 2 1

0	180	233	12
1	149	180	14
2	222	211	11
3	-62	39	30
4	408	406	8
5	161	173	16
6	50	61	38
7	71	58	31
8	148	152	17

8 3 1

0	246	229	10
1	282	256	9
2	42	61	38
3	320	328	8
4	217	235	12
5	180	152	14
6	398	421	8
7	196	201	14
8	150	137	17

8 4 1

0	163	151	13
1	143	121	15
2	135	138	16
3	34	60	42
4	281	265	9
5	524	547	8
6	-95	23	24
7	282	296	10
8	23	68	54

8 5 1

0	-19	37	50
1	435	424	7
2	80	43	24
3	393	419	8
4	-87	7	25
5	255	274	11
6	47	108	39
7	217	264	13
8	79	13	29

8 6 1

0	-67	75	28
1	73	94	27
2	143	137	16
3	-38	12	40
4	38	51	41
5	431	434	8
6	67	79	32
7	283	313	11
8	140	136	19

8 7 1

0	372	345	8
1	176	175	13
2	85	44	24
3	211	167	11
4	57	75	34
5	323	339	9
6	213	237	13
7	112	78	21

8 8 1

0	71	86	28
1	91	56	22
2	243	250	10
3	190	222	13
4	270	284	10
5	-51	46	37
6	104	21	22
7	129	128	19

8 9 1

0	541	547	8
1	-75	50	26
2	211	253	12
3	25	3	49
4	14	4	57
5	185	155	14
6	211	209	13

8 10 1

0	110	64	19
1	15	38	55
2	198	222	12
3	49	6	35
4	337	336	9
5	-32	26	46
6	-85	23	26

8 11 1

0	442	454	8
1	100	51	21
2	184	190	13
3	23	46	51
4	82	28	26
5	26	19	50

8 12 1

0	169	150	14
1	127	120	18
2	170	169	14
3	87	79	25
4	220	242	13

8 13 1

0	233	180	11
1	161	133	15
2	21	32	52
3	100	131	23

8 14 1

0	151	132	15
1	59	106	34
2	63	3	31

9 0 1

1	348	381	12

Supplementary material, page 49

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m5D

3	225	225	17
5	401	404	12
7	-128	60	28

9 1 1

0	210	211	12
1	116	123	19
2	163	134	15
3	457	458	8
4	-71	15	30
5	179	160	15
6	-79	35	28
7	-53	76	38

9 2 1

0	119	76	18
1	88	111	23
2	176	157	13
3	-81	31	27
4	265	262	11
5	376	358	9
6	71	56	31
7	131	93	19

9 3 1

0	230	209	10
1	176	157	13
2	182	149	13
3	210	183	12
4	187	207	14
5	-108	21	23
6	175	183	16
7	82	99	29

9 4 1

0	157	170	15
1	119	115	18
2	206	227	12
3	150	112	16
4	274	254	10
5	124	135	20
6	172	171	15

9 5 1

0	-19	72	51
1	-44	57	37
2	62	16	31
3	107	77	21
4	307	314	9
5	77	29	29
6	254	255	12

9 6 1

0	175	178	13
1	-108	39	20
2	200	153	12
3	113	46	19
4	287	293	10
5	189	209	15
6	123	117	20

9 7 1

0	248	240	10
1	138	153	17
2	201	200	13
3	223	230	11
4	-12	60	62
5	11	0	62

9 8 1

0	-100	10	22
1	215	176	11
2	114	65	20
3	90	42	24
4	263	268	11
5	208	212	13

9 9 1

0	194	139	13
1	100	163	23
2	165	163	15
3	263	284	11
4	-48	46	38

9 10 1

0	63	48	32
1	286	266	10
2	70	31	30
3	128	134	20

9 11 1

0	106	111	22
1	-53	100	36
2	144	131	17

9 12 1

0	-55	54	35
1	90	89	25

10 0 1

0	84	28	35
2	381	351	12
4	262	236	16

10 1 1

0	273	296	10
1	65	46	32
2	200	207	13
3	87	138	27
4	252	262	12

10 2 1

0	93	6	23
1	173	155	15
2	166	172	16
3	73	34	30
4	25	78	52

10 3 1

0	-113	11	20
1	121	82	19
2	59	5	33
3	216	223	13
4	180	187	16

10 4 1

0	58	41	32
1	83	121	26
2	-40	8	42
3	79	74	28
4	-63	58	33

10 5 1

0	-10	27	60
1	-58	57	33
2	-65	24	31
3	227	229	12

10 6 1

0	-58	47	33
1	151	170	17
2	64	71	32
3	126	103	20

10 7 1

0	54	21	34
1	123	108	20
2	49	20	38

10 8 1

0	-55	55	35
1	212	196	13

10 9 1

0	129	146	20

11 0 1

1	168	190	23
3	98	187	36

11 1 1

0	62	63	33
1	146	147	17
2	-30	37	49
3	202	189	15
4	116	84	22

11 2 1

0	77	22	28
1	88	113	27
2	168	191	16
3	113	116	23
4	129	90	20

11 3 1

0	-62	119	34
1	-26	24	51
2	60	37	35
3	19	19	57

11 4 1

0	-40	15	42
1	-49	67	39
2	227	174	12
3	-90	69	27

11 5 1

0	108	115	23
1	75	9	29
2	57	26	36
3	-90	4	27

11 6 1

0	-73	31	30
1	-56	27	36
2	211	211	14

11 7 1

0	170	150	16
1	73	54	31

11 8 1

0	63	73	34

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-M51

Table 6. Observed and Calculated Structure Factors for Cp*, Diisopropylaminoborollide Hafnium Chloride · HCl.

The columns contain, in order, k, $10F_{obs}$, $10F_{calc}$ and $10\sigma F_{obs}$. A minus sign preceding F_{obs} indicates that F^2_{obs} is negative.

© 1994 Am. Chem. Soc.

J-4490-M52

-16 k 1

1	-132	5	59
2	-155	57	54
3	-121	13	62
4	112	111	67

-16 k 2

0	-93	21	95
1	349	281	27
2	-146	31	56
3	279	267	33
4	87	22	73

-16 k 3

1	-61	22	87
2	61	92	89
3	-86	44	78
4	134	110	60

-16 k 4

0	181	162	64
1	226	190	39
2	250	190	35
3	202	184	42

-16 k 5

1	-84	57	77
2	-35	2	109

-15 k 1

0	219	256	56
1	251	237	34
2	309	276	29
3	268	246	33
4	256	242	34
5	258	202	34
6	268	182	34
7	280	132	30
8	118	150	64

-15 k 2

1	44	67	97
2	-125	19	59
3	147	142	53
4	-129	23	57
5	278	186	32
6	114	0	61
7	247	209	36
8	-110	21	65

-15 k 3

0	362	365	38
1	191	134	42
2	335	344	28
3	109	94	65
4	296	327	32
5	184	47	42
6	263	284	34
7	149	47	51
8	99	149	70

-15 k 4

1	164	61	46
2	43	78	96
3	99	104	67
4	268	160	32
5	-217	91	41
6	160	203	51
7	184	153	45

-15 k 5

0	114	95	81
1	330	294	28
2	-145	97	53
3	345	313	27
4	-197	118	43
5	337	265	27
6	113	138	64
7	67	191	88

-15 k 6

1	126	52	57
2	186	100	42
3	112	71	62
4	232	164	35
5	-25	88	115
6	-85	211	79

-15 k 7

0	266	164	44
1	319	279	29
2	235	161	35
3	141	223	55
4	175	150	47
5	269	232	33

-15 k 8

1	140	29	51
2	-51	45	92

-14 k 1

1	-93	66	65
2	-106	99	60
3	168	136	41
4	188	202	40
5	138	184	52
6	277	272	31
7	230	177	35
8	229	218	36
9	181	184	44
10	196	212	42

-14 k 2

0	-123	90	74
1	578	546	18
2	205	129	36
3	493	447	19
4	113	193	58
5	314	307	28
6	274	136	28
7	225	229	36
8	-101	114	67
9	72	104	78
10	141	68	51

-14 k 3

1	-133	17	52
2	123	143	54
3	58	29	79
4	210	211	37
5	-84	100	71
6	278	284	30
7	203	167	39
8	338	313	27
9	-29	104	109
10	324	280	28

-14 k 4

0	342	327	36
1	309	316	27
2	337	323	25
3	344	308	24
4	245	241	34
5	338	351	26
6	275	175	29
7	286	283	30
8	193	104	40
9	250	182	33
10	-115	22	63

-14 k 5

1	-38	36	93
2	131	16	50
3	-133	162	54
4	179	10	39
5	237	248	35
6	-83	11	71
7	288	270	31
8	-47	43	93
9	286	316	32

-14 k 6

0	329	344	37
1	112	59	56
2	384	372	24
3	-136	35	51
4	389	357	23
5	-49	23	88
6	275	276	31
7	86	12	72
8	171	223	47
9	-153	44	50

-14 k 7

1	153	62	44
2	75	123	76
3	98	118	63
4	136	130	53
5	235	167	33
6	168	155	48
7	219	190	38
8	184	143	44

-14 k 8

0	343	287	34
1	295	294	29
2	183	180	43
3	334	307	26
4	209	183	38
5	278	254	31
6	146	162	51
7	211	177	39

-14 k 9

1	162	30	46
2	-107	77	64
3	-70	35	78
4	72	188	82
5	-130	37	56

-14 k 10

0	195	104	59
1	285	256	31
2	145	86	52

-13 k 1

0	492	474	27
1	372	407	23
2	480	435	17
3	361	361	22
4	300	317	27
5	328	291	24
6	199	158	35
7	230	242	33
8	221	141	34
9	121	148	54
10	52	10	85
11	-135	63	55
12	-151	107	49

-13 k 2

1	120	64	50
2	-77	27	67
3	243	187	30
4	76	41	64
5	438	399	20
6	122	81	51
7	373	427	24
8	113	60	56
9	438	426	21
10	167	95	43
11	385	366	24
12	101	91	66

-13 k 3

0	663	654	22
1	162	178	41
2	645	611	16
3	188	117	36
4	528	498	18
5	73	14	67
6	444	415	20
7	139	27	45
8	272	292	30
9	128	79	53
10	240	150	32
11	-115	81	59
12	121	75	56

-13 k 4

1	111	84	54
2	130	22	46
3	138	131	46
4	224	123	31
5	100	147	58
6	244	246	31
7	285	254	27
8	269	292	31
9	265	230	30
10	326	344	27
11	219	243	39
12	286	270	30

-13 k 5

0	158	224	60
1	409	391	20
2	234	157	28
3	422	441	19
4	159	188	43
5	309	324	26
6	208	218	35
7	297	261	26
8	138	117	51
9	122	186	57
10	192	147	39
11	-114	58	62

-13 k 6

1	-137	16	45
2	166	121	40
3	93	23	59
4	224	235	33

Supplementary material, page 52
© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

5	96	79	61
6	202	242	36
7	107	63	59
8	294	292	29
9	-140	65	51
10	331	327	27
11	-85	47	73

-13 k 7

0	315	233	34
1	415	423	21
2	203	195	36
3	378	376	22
4	223	175	32
5	372	355	22
6	125	114	53
7	250	220	31
8	-177	54	43
9	151	129	49
10	-48	14	91

-13 k 8

1	149	86	45
2	54	129	84
3	236	183	32
4	141	87	49
5	230	232	35
6	249	167	30
7	298	245	29
8	176	190	44
9	270	250	32

-13 k 9

0	433	419	29
1	172	116	41
2	456	442	20
3	-110	37	59
4	399	383	23
5	70	134	80
6	271	278	32
7	109	97	59
8	146	170	54

-13 k 10

1	-78	17	72
2	77	6	72
3	247	163	33
4	-105	39	64
5	137	198	54
6	84	63	72

-13 k 11

0	144	196	70
1	204	264	41
2	176	189	44
3	203	202	40
4	262	194	31

-12 k 1

1	-146	34	42
2	129	161	47
3	-154	28	41
4	349	343	21
5	181	136	35
6	445	439	18
7	310	328	25
8	408	399	20
9	333	330	23
10	434	405	20
11	280	328	29
12	293	286	29
13	354	284	23
14	107	215	68

-12 k 2

0	-154	98	55
1	775	750	15
2	102	125	54
3	663	644	15
4	-72	111	66
5	496	500	18
6	225	155	29
7	345	347	22
8	151	181	42
9	271	223	26
10	191	175	38
11	154	35	45
12	153	115	46
13	118	61	56
14	189	78	40

-12 k 3

1	-157	5	38
2	96	158	58
3	148	33	41
4	171	213	38
5	-168	70	37
6	361	387	22
7	134	152	46
8	475	443	18
9	148	155	46
10	507	470	18
11	46	146	89
12	459	433	21
13	228	124	33
14	383	387	25

-12 k 4

0	342	340	30
1	559	524	15
2	412	394	18
3	480	466	17
4	272	271	26
5	405	436	19
6	238	216	29
7	326	346	23
8	162	131	39
9	155	191	44
10	-33	40	94
11	225	181	34
12	-138	41	52
13	-114	87	60

-12 k 5

1	92	11	56
2	172	126	34
3	165	93	36
4	191	124	33
5	217	226	31
6	75	111	65
7	297	308	25
8	-66	160	75
9	454	401	19
10	209	116	34
11	452	443	21
12	84	143	74
13	308	300	30

-12 k 6

0	511	496	24
1	119	22	47
2	534	549	17
3	15	46	103
4	465	465	18
5	115	77	48
6	309	308	24
7	67	8	71
8	227	239	32
9	-95	14	63
10	-78	120	73
11	-91	34	66
12	-79	36	73

-12 k 7

1	37	60	88
2	122	126	48
3	87	206	65
4	173	171	36
5	284	239	25
6	207	221	34
7	269	280	28
8	132	165	51
9	344	352	25
10	108	136	62
11	260	316	34
12	217	117	36

-12 k 8

0	458	429	24
1	464	429	18
2	307	344	25
3	417	388	19
4	351	340	23
5	314	285	24
6	315	288	25
7	182	148	39
8	194	166	39
9	-78	71	73
10	-119	139	60
11	90	24	69

-12 k 9

1	-109	65	54
2	97	93	60
3	84	19	65
4	271	265	30
5	105	23	59
6	348	311	24
7	-76	73	75
8	388	368	24
9	-111	31	62
10	416	405	23

-12 k 10

0	162	83	60
1	416	435	22
2	171	159	42
3	462	454	20
4	-116	89	58
5	362	334	25
6	-112	7	57
7	278	282	30
8	-98	15	66
9	226	212	36

-12 k 11

1	-130	17	53
2	41	39	91
3	135	83	52
4	269	143	28
5	197	143	40
6	76	154	78
7	243	169	33

-12 k 12

0	314	370	41
1	-57	121	85
2	347	311	25
3	133	73	54
4	316	286	27

-11 k 1

0	582	550	25
1	462	417	20
2	721	727	17
3	481	456	20
4	609	620	18
5	303	294	22
6	484	457	16
7	400	398	19
8	290	320	25
9	223	278	31
10	146	92	43
11	242	188	29
12	214	79	31
13	-106	61	58
14	-52	101	88
15	118	1	57

-11 k 2

1	-99	84	61
2	34	89	96
3	215	237	36
4	-155	30	45
5	494	471	16
6	135	27	41
7	426	481	19
8	-171	71	37
9	520	527	17
10	36	116	89
11	537	547	18
12	111	167	57
13	423	407	21
14	163	110	45
15	405	389	24

-11 k 3

0	895	881	22
1	174	164	40
2	777	784	16
3	164	145	43
4	684	665	17
5	65	51	65
6	476	460	16
7	123	73	45
8	363	393	21
9	168	11	36
10	278	207	24
11	90	109	60
12	-72	99	74
13	139	123	50
14	-96	11	63
15	140	119	52

-11 k 4

1	-111	137	57
2	116	34	54
3	235	228	27
4	138	192	43
5	343	358	21
6	286	235	23
7	390	405	19
8	243	274	29
9	407	417	19
10	328	331	23
11	356	373	22
12	336	307	24
13	395	351	22
14	317	250	27
15	262	265	32

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m54

-11 k 5

0	404	398	25
1	613	633	15
2	319	353	22
3	638	650	15
4	351	338	20
5	347	327	21
6	284	292	24
7	305	305	24
8	41	132	85
9	215	216	32
10	-106	94	55
11	-83	16	67
12	148	85	46
13	179	57	39
14	156	17	47

-11 k 6

1	-84	20	57
2	113	77	48
3	-107	19	50
4	336	338	21
5	21	78	96
6	436	419	18
7	-142	6	42
8	465	440	18
9	-137	25	46
10	504	525	18
11	-118	48	55
12	407	406	22
13	-82	50	72
14	340	314	26

-11 k 7

0	263	267	35
1	641	618	15
2	279	279	25
3	579	576	15
4	113	173	50
5	440	448	18
6	-47	91	79
7	331	295	22
8	99	110	57
9	187	185	36
10	146	16	45
11	95	78	61
12	-143	61	50
13	134	23	52

-11 k 8

1	-76	80	62
2	72	58	64
3	246	248	27
4	-138	46	43
5	356	372	22
6	109	134	52
7	315	313	24
8	296	281	25
9	316	335	27
10	245	267	33
11	270	318	32
12	286	290	30

-11 k 9

0	513	499	23
1	179	209	36
2	542	527	16
3	46	80	82
4	522	496	17
5	153	189	43
6	293	303	26
7	216	141	32
8	266	231	30
9	195	128	36
10	-42	108	95
11	197	194	41

-11 k 10

1	114	14	48
2	-149	34	42
3	183	165	37
4	103	87	55
5	244	266	31
6	96	56	62
7	285	296	29
8	186	116	40
9	401	395	24
10	116	186	63

-11 k 11

0	352	340	32
1	310	290	25
2	357	365	24
3	350	319	23
4	303	313	26
5	160	203	45
6	233	263	35
7	224	125	34
8	210	212	38
9	-133	72	53

-11 k 12

1	87	2	62
2	120	102	56
3	105	39	59
4	172	180	43
5	98	48	64
6	224	205	36
7	115	140	60

-11 k 13

0	-177	78	60
1	415	386	21
2	-170	7	45
3	310	337	29
4	117	24	58

-10 k 1

1	-133	22	49
2	112	115	53
3	-29	58	97
4	477	485	19
5	161	195	42
6	403	441	22
7	293	294	27
8	474	470	16
9	373	369	20
10	484	486	17
11	431	403	17
12	383	413	21
13	375	366	22
14	290	301	29
15	335	317	27
16	301	298	28

-10 k 2

0	257	279	41
1	804	842	15
2	364	371	22
3	862	861	15
4	71	167	74
5	632	652	17
6	207	156	33
7	606	612	18
8	193	104	30
9	409	418	18
10	40	106	83
11	59	145	74
12	172	143	37
13	133	51	46
14	-154	108	47
15	-63	85	81
16	120	103	57

-10 k 3

1	92	48	61
2	348	313	22
3	19	19	104
4	457	485	19
5	87	118	63
6	662	671	17
7	104	70	58
8	546	532	15
9	-38	98	87
10	520	539	17
11	100	69	55
12	482	481	18
13	-65	60	72
14	447	478	21
15	-103	72	64
16	389	380	25

-10 k 4

0	560	527	23
1	992	994	15
2	554	553	17
3	742	741	16
4	340	364	24
5	600	605	17
6	145	185	46
7	393	393	18
8	141	161	43
9	259	259	27
10	123	7	46
11	166	122	39
12	106	98	54
13	123	70	48
14	153	124	45
15	85	47	69
16	-123	99	58

-10 k 5

1	125	19	48
2	108	140	55
3	312	292	23
4	238	202	30
5	535	532	18
6	343	341	19
7	543	546	16
8	371	360	20
9	561	565	16
10	306	302	24
11	530	515	16
12	207	255	35
13	392	355	22
14	261	226	31
15	335	326	27

-10 k 6

0	754	822	23
1	-142	17	46
2	970	974	15
3	97	29	59
4	729	754	16
5	128	59	40
6	521	540	15
7	94	70	53
8	417	438	19
9	190	57	32
10	190	165	34
11	-59	63	77
12	-112	57	56
13	88	52	65
14	46	72	92
15	111	24	60

-10 k 7

1	157	33	33
2	205	198	29
3	226	219	28
4	240	258	27
5	340	335	20
6	373	333	19
7	390	384	20
8	205	203	31
9	503	474	17
10	195	177	36
11	523	505	18
12	58	132	84
13	350	399	26
14	186	141	40

-10 k 8

0	511	502	22
1	494	478	16
2	397	436	19
3	535	521	15
4	384	382	18
5	338	372	21
6	330	285	21
7	292	277	24
8	232	193	29
9	192	141	34
10	81	165	69
11	-75	22	71
12	66	122	82
13	-60	62	80
14	-114	66	61

-10 k 9

1	152	3	35
2	166	106	35
3	68	9	64
4	283	331	26
5	-35	29	86
6	283	313	26
7	-34	51	88
8	389	357	21
9	35	96	94
10	504	482	19
11	23	68	107
12	421	377	22
13	169	130	45

-10 k 10

0	-76	22	79
1	462	470	17
2	136	92	42
3	549	562	17
4	154	80	39
5	439	403	19
6	-89	32	58
7	309	272	24
8	141	18	46
9	254	252	31
10	-70	60	77
11	-164	52	46
12	-95	118	69

-10 k 11

1	-74	10	64
2	124	68	46

Supplementary material, page 54

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m55

3	135	143	45
4	271	255	27
5	223	180	32
6	257	221	29
7	253	189	30
8	270	266	30
9	267	269	32
10	363	331	25

-10 k 12

0	483	434	26
1	225	230	33
2	470	467	20
3	216	235	35
4	380	378	22
5	146	183	49
6	277	233	29
7	164	172	45
8	151	170	49
9	173	115	45

-10 k 13

1	92	31	63
2	-131	20	53
3	234	169	32
4	72	79	76
5	287	268	29
6	120	14	58
7	296	242	29

-10 k 14

0	387	335	31
1	140	75	50
2	366	340	25
3	184	166	43

-9 k 1

0	406	432	27
1	829	854	15
2	618	621	15
3	779	798	15
4	643	636	16
5	566	562	17
6	555	569	17
7	500	503	18
8	438	491	19
9	387	401	22
10	313	302	21
11	80	92	58
12	112	10	47
13	110	38	50
14	146	98	43
15	-160	7	43
16	170	190	45
17	103	40	61

-9 k 2

1	92	30	54
2	-31	50	90
3	460	467	18
4	32	183	92
5	608	639	16
6	295	278	24
7	621	606	16
8	160	183	42
9	646	636	16
10	265	253	24
11	565	585	16
12	149	215	42
13	493	472	17
14	75	196	69
15	508	493	19
16	-93	196	69
17	397	357	23

-9 k 3

0	1105	1107	20
1	-91	62	59
2	1257	1269	15
3	137	114	43
4	858	881	15
5	-79	105	63
6	668	660	15
7	-116	83	51
8	607	594	16
9	118	54	42
10	286	226	22
11	168	89	33
12	-92	13	57
13	88	108	58
14	109	48	55
15	144	174	48
16	138	121	51
17	139	119	53

-9 k 4

1	194	172	33
2	221	205	31
3	354	359	22
4	367	347	21
5	687	718	16
6	479	481	18
7	678	687	16
8	362	342	22
9	567	592	15
10	446	454	17
11	577	554	15
12	288	289	24
13	434	433	19
14	236	241	32
15	468	454	20
16	225	170	35
17	297	293	30

-9 k 5

0	552	627	24
1	978	989	15
2	488	490	17
3	1110	1106	15
4	538	570	17
5	546	539	17
6	427	453	20
7	471	483	19
8	464	441	16
9	319	311	21
10	266	274	25
11	112	64	49
12	89	85	57
13	-94	113	60
14	87	37	64
15	134	142	52
16	145	31	49

-9 k 6

1	87	20	58
2	141	45	42
3	77	0	65
4	583	618	17
5	25	5	96
6	601	593	17
7	55	74	70
8	672	671	14
9	87	42	55
10	786	788	14
11	45	26	80
12	571	566	17
13	146	63	44
14	461	442	19
15	-114	51	59
16	460	416	21

-9 k 7

0	395	363	28
1	780	785	15
2	388	357	21
3	895	924	15
4	312	331	26
5	705	686	16
6	275	301	23
7	536	570	16
8	220	235	28
9	436	405	18
10	129	66	44
11	113	115	50
12	67	78	71
13	-92	3	63
14	82	95	70
15	54	20	86

-9 k 8

1	78	69	64
2	161	137	40
3	278	277	22
4	232	214	26
5	439	437	17
6	174	201	35
7	272	286	25
8	296	259	23
9	386	351	19
10	284	353	27
11	395	363	21
12	338	335	25
13	251	303	33
14	293	271	28
15	332	331	29

-9 k 9

0	464	501	23
1	222	250	27
2	700	662	13
3	185	196	32
4	583	581	15
5	165	194	36
6	313	307	22
7	40	57	82
8	373	341	20
9	-133	37	48
10	180	116	37
11	137	84	49
12	88	26	67
13	-30	98	102
14	-37	29	100

-9 k 10

1	115	14	45
2	74	48	61
3	272	261	23
4	-111	53	49
5	404	399	19
6	174	92	36
7	278	283	26
8	-138	64	46
9	477	462	18
10	-94	123	65
11	468	461	21
12	50	64	89
13	323	304	26

-9 k 11

0	443	407	23
1	346	295	20
2	490	497	16
3	384	354	19
4	496	502	17
5	174	214	38
6	234	289	31
7	199	160	36
8	171	256	45
9	66	85	77
10	183	145	41
11	127	36	53
12	176	13	42

-9 k 12

1	132	8	45
2	140	149	45
3	-133	84	48
4	360	342	22
5	-60	117	79
6	346	305	23
7	214	144	35
8	396	341	22
9	203	208	39
10	385	350	24

-9 k 13

0	-41	49	112
1	478	483	19
2	128	29	49
3	526	499	18
4	-55	12	83
5	362	356	24
6	23	93	107
7	246	243	33
8	-113	53	62

-9 k 14

1	120	13	53
2	135	48	48
3	-116	113	58
4	219	211	36
5	125	161	56
6	168	216	47

-8 k 1

1	202	189	29
2	237	217	26
3	229	267	28
4	538	528	15
5	685	707	14
6	470	459	17
7	655	656	15
8	415	446	20
9	643	632	16
10	597	634	17
11	613	619	14
12	467	450	17
13	420	437	18
14	342	329	21
15	485	472	18
16	381	340	23
17	345	338	25
18	-126	202	59

-8 k 2

0	657	648	19
1	1081	1070	14
2	601	612	14
3	1362	1373	15
4	622	623	15
5	733	759	14
6	420	438	19
7	668	667	15

Supplementary material, page 55

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m56

8	419	429	19
9	442	424	19
10	226	167	30
11	-122	77	44
12	40	59	79
13	118	64	46
14	-52	12	74
15	219	136	31
16	156	31	42
17	219	275	39
18	77	7	73

-8 k 3

1	194	234	31
2	319	331	22
3	263	221	24
4	833	839	14
5	143	155	41
6	752	757	14
7	117	164	49
8	827	831	15
9	-76	59	64
10	832	835	15
11	28	22	88
12	701	713	14
13	52	20	74
14	596	579	16
15	-142	70	46
16	547	530	18
17	-150	17	50
18	250	276	35

-8 k 4

0	701	724	19
1	1039	1055	14
2	552	557	15
3	989	994	14
4	569	570	15
5	799	819	14
6	156	197	39
7	699	693	15
8	-73	56	67
9	466	457	19
10	166	60	32
11	223	257	28
12	-93	164	57
13	62	21	68
14	137	145	46
15	158	58	41
16	119	208	56
17	224	159	35

-8 k 5

1	66	58	64
2	205	170	30
3	308	287	21
4	180	196	36
5	688	712	15
6	386	391	20
7	592	604	16
8	278	277	26
9	850	831	15
10	415	392	18
11	751	753	14
12	333	336	22
13	420	445	19
14	294	348	26
15	413	415	21
16	316	326	27
17	207	232	40

-8 k 6

0	857	866	20
1	80	55	60
2	1178	1214	15
3	124	134	47
4	1056	1069	15
5	224	210	29
6	774	785	15
7	155	179	43
8	762	803	16
9	250	267	25
10	349	328	20
11	-149	66	40
12	70	13	63
13	16	149	105
14	156	82	42
15	118	84	55
16	149	174	49
17	-73	46	78

-8 k 7

1	-50	16	76
2	72	102	64
3	356	380	22
4	-141	60	43
5	559	541	16
6	284	292	26
7	505	520	18
8	271	265	23
9	633	618	15
10	215	194	30
11	646	648	15
12	234	234	30
13	485	492	18
14	232	171	31
15	482	454	20
16	170	152	47

-8 k 8

0	730	708	20
1	600	624	16
2	763	777	15
3	598	583	16
4	616	624	16
5	493	478	18
6	411	430	17
7	425	417	17
8	283	305	23
9	276	292	25
10	205	191	31
11	66	64	68
12	-95	40	59
13	-42	47	87
14	126	57	53
15	171	108	45

-8 k 9

1	114	18	49
2	166	165	41
3	165	183	34
4	495	468	16
5	151	172	37
6	482	473	16
7	127	124	42
8	406	392	19
9	130	183	46
10	502	494	17
11	181	167	37
12	435	395	20
13	182	125	41
14	396	400	24
15	-41	137	99

-8 k 10

0	189	111	41
1	661	657	14
2	112	87	46
3	766	777	14
4	-92	10	54
5	475	488	16
6	95	25	54
7	379	358	19
8	73	23	64
9	292	300	24
10	158	7	43
11	-75	28	71
12	44	31	87
13	142	33	50
14	35	67	100

-8 k 11

1	-152	27	37
2	-105	32	51
3	133	110	42
4	354	365	21
5	236	213	29
6	335	285	21
7	333	296	23
8	348	324	22
9	368	301	22
10	511	481	19
11	285	279	28
12	284	312	31
13	158	189	50

-8 k 12

0	535	542	24
1	293	261	23
2	577	558	16
3	336	364	22
4	430	464	20
5	258	256	27
6	321	339	24
7	214	234	34
8	191	220	40
9	170	247	46
10	86	106	71
11	-26	66	106

-8 k 13

1	105	29	53
2	-123	60	50
3	308	276	25
4	-135	47	49
5	414	362	20
6	78	52	69
7	334	318	25
8	-53	5	85
9	398	373	24

-8 k 14

0	313	317	35
1	131	133	50
2	463	425	20
3	144	168	51
4	398	383	22
5	206	138	36
6	197	218	39
7	88	83	69

-8 k 15

1	-69	20	77
2	-163	53	43
3	21	107	111
4	105	159	63

-7 k 1

0	1222	1217	18
1	1492	1513	15
2	1081	1095	13
3	1401	1413	15
4	1046	1048	13
5	952	960	13
6	510	499	15
7	617	625	15
8	227	206	28
9	401	414	19
10	197	132	32
11	-92	86	59
12	-132	6	41
13	-90	32	53
14	-64	55	66
15	139	111	42
16	217	207	33
17	155	186	47
18	187	231	43

-7 k 2

1	237	192	21
2	111	153	41
3	831	841	13
4	199	213	28
5	1021	1033	13
6	376	356	17
7	839	850	14
8	251	219	26
9	981	1008	15
10	598	618	16
11	894	881	15
12	293	327	23
13	583	593	15
14	345	316	20
15	586	544	15
16	361	323	22
17	386	399	23
18	55	117	86

-7 k 3

0	1122	1168	17
1	251	284	21
2	1579	1587	16
3	87	135	52
4	1216	1226	14
5	204	157	27
6	911	936	14
7	160	141	37
8	642	661	15
9	356	346	20
10	191	235	36
11	83	40	62
12	-118	17	43
13	96	99	51
14	155	90	37
15	-80	116	66
16	214	210	34
17	51	53	85
18	331	286	26

-7 k 4

1	-67	33	59
2	281	267	21
3	324	353	19
4	296	256	20
5	518	532	15
6	538	543	16
7	627	625	14
8	577	577	16
9	673	678	15
10	533	530	18
11	745	759	14
12	391	421	19
13	610	599	15
14	247	255	27
15	581	582	16

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m57

16	159	121	42
17	433	422	21
18	178	97	42

-7 k 5

0	378	431	25
1	1054	1061	13
2	704	698	13
3	973	987	13
4	497	529	16
5	549	535	15
6	389	389	19
7	405	393	19
8	562	568	16
9	423	418	20
10	306	342	25
11	-105	21	49
12	114	110	46
13	-46	22	77
14	148	110	40
15	194	180	35
16	-63	38	78
17	316	262	27
18	131	127	55

-7 k 6

1	-31	36	81
2	33	39	83
3	204	145	29
4	564	600	16
5	231	281	29
6	801	804	14
7	91	118	59
8	727	694	15
9	99	88	56
10	975	947	13
11	-42	116	79
12	648	616	14
13	-77	18	64
14	575	556	16
15	202	185	36
16	506	476	19
17	231	119	33

-7 k 7

0	325	350	29
1	1066	1095	14
2	261	269	25
3	1267	1283	15
4	66	38	68
5	803	797	15
6	104	227	56
7	776	791	15
8	-174	33	40
9	613	623	14
10	-27	0	88
11	179	118	34
12	-99	17	53
13	-39	7	85
14	137	186	50
15	-91	37	64
16	110	108	58
17	179	189	45

-7 k 8

1	121	90	46
2	-49	120	78
3	235	271	30
4	644	623	15
5	469	472	18
6	470	475	19
7	530	525	17
8	511	504	15
9	434	397	17
10	566	556	16
11	386	386	20
12	377	406	21
13	346	340	23
14	291	336	29
15	362	345	24
16	374	365	24

-7 k 9

0	982	995	20
1	341	360	22
2	1000	999	15
3	487	464	17
4	726	745	16
5	249	295	30
6	416	406	16
7	218	217	28
8	386	389	18
9	182	191	34
10	119	168	50
11	195	37	33
12	98	53	57
13	83	21	67
14	45	53	90
15	57	39	83

-7 k 10

1	34	23	89
2	62	5	64
3	361	313	18
4	21	10	90
5	590	576	14
6	-148	105	39
7	411	392	18
8	92	105	56
9	607	604	15
10	90	51	58
11	590	591	17
12	25	51	102
13	430	393	21
14	77	43	76

-7 k 11

0	432	419	23
1	424	447	17
2	668	669	14
3	416	391	18
4	663	683	15
5	284	278	23
6	331	366	23
7	205	200	32
8	445	440	18
9	97	58	56
10	130	191	52
11	-68	6	76
12	96	19	63
13	-181	43	42

-7 k 12

1	11	56	104
2	111	114	48
3	136	114	42
4	247	231	27
5	224	185	29
6	320	327	24
7	-26	82	96
8	438	425	20
9	277	259	29
10	471	450	20
11	232	250	36
12	400	373	24

-7 k 13

0	133	36	57
1	566	543	16
2	66	61	68
3	632	586	15
4	-129	91	48
5	438	436	20
6	-128	81	49
7	322	306	25
8	154	109	45
9	273	250	30
10	-143	83	52

-7 k 14

1	177	53	37
2	133	96	47
3	105	126	60
4	338	331	25
5	137	148	49
6	262	238	30
7	114	109	58
8	287	248	30

-7 k 15

0	225	256	47
1	236	243	33
2	243	269	34
3	320	323	27
4	314	312	28
5	112	160	61
6	179	222	45

-6 k 1

1	151	170	29
2	65	134	51
3	570	592	12
4	757	772	12
5	931	936	12
6	739	740	12
7	754	756	13
8	840	872	14
9	989	1029	14
10	839	858	14
11	942	974	15
12	608	609	17
13	545	566	15
14	493	462	16
15	549	533	16
16	218	266	34
17	402	422	21
18	240	198	33
19	217	246	38

-6 k 2

0	187	147	33
1	1731	1779	16
2	896	929	12
3	1914	1940	18
4	876	880	12
5	1282	1315	14
6	393	389	16
7	885	861	13
8	606	655	14
9	599	627	15
10	60	204	75
11	158	58	37
12	71	24	66
13	57	45	68
14	99	101	51
15	216	197	29
16	-131	38	45
17	335	323	24
18	-100	115	64
19	289	240	28

-6 k 3

1	129	179	32
2	248	280	20
3	263	288	20
4	603	615	12
5	101	33	43
6	840	856	13
7	356	363	19
8	935	923	14
9	-81	9	60
10	1185	1180	15
11	60	83	74
12	927	942	15
13	141	148	39
14	766	725	14
15	113	90	48
16	632	632	16
17	-160	16	44
18	318	346	27
19	-39	25	97

-6 k 4

0	462	476	18
1	1213	1251	13
2	648	650	12
3	1200	1211	13
4	562	523	13
5	586	609	13
6	539	554	14
7	567	592	15
8	243	260	27
9	397	368	19
10	72	134	67
11	255	216	27
12	-16	84	93
13	46	3	72
14	-38	108	84
15	161	58	36
16	209	141	33
17	265	239	30
18	114	161	60

-6 k 5

1	-125	19	36
2	125	110	36
3	173	83	28
4	629	622	13
5	484	489	15
6	448	463	16
7	630	598	14
8	433	446	18
9	859	857	15
10	458	448	19
11	794	803	16
12	378	378	18
13	519	528	16
14	350	364	21
15	446	439	19
16	444	443	20
17	221	262	35
18	235	202	34

-6 k 6

0	1406	1380	19
1	342	303	17
2	1255	1270	14
3	505	479	14
4	1070	1064	14
5	160	133	35
6	510	550	16
7	265	225	25
8	610	616	15
9	316	291	23
10	293	320	27

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m58

11	103	19	48
12	123	22	43
13	160	56	36
14	-54	45	74
15	-72	128	69
16	273	200	27
17	36	13	96
18	271	282	31

-6 k 7

1	93	89	52
2	295	282	21
3	423	409	17
4	185	120	32
5	951	922	14
6	120	188	49
7	836	832	15
8	347	298	21
9	900	912	15
10	77	72	60
11	809	820	14
12	271	211	24
13	540	525	16
14	39	124	87
15	513	521	19
16	108	29	59
17	341	355	27

-6 k 8

0	952	982	18
1	848	832	14
2	1127	1146	14
3	665	658	14
4	827	855	14
5	488	502	17
6	554	569	17
7	346	370	22
8	593	609	17
9	62	29	65
10	249	280	26
11	-101	51	53
12	-119	32	47
13	147	147	43
14	-111	16	54
15	202	192	36
16	162	87	45
17	181	160	42

-6 k 9

1	-55	109	74
2	311	340	24
3	154	218	42
4	529	544	17
5	231	276	31
6	783	756	15
7	187	186	31
8	672	672	14
9	264	276	25
10	632	606	15
11	208	254	32
12	572	554	17
13	183	203	40
14	468	441	20
15	125	226	59
16	397	390	24

-6 k 10

0	313	258	32
1	991	994	14
2	133	113	46
3	975	973	15
4	124	43	48
5	667	664	13
6	38	33	78
7	429	447	17
8	117	59	47
9	389	376	19
10	164	87	37
11	70	50	70
12	174	10	38
13	160	22	43
14	177	103	41
15	130	57	54

-6 k 11

1	38	78	76
2	103	49	44
3	52	28	68
4	339	348	19
5	105	110	49
6	302	297	22
7	350	349	21
8	414	376	18
9	367	328	21
10	600	616	17
11	317	304	25
12	431	401	21
13	272	312	31
14	308	339	31

-6 k 12

0	684	653	19
1	350	345	19
2	522	521	15
3	489	520	17
4	449	435	17
5	331	317	21
6	448	417	17
7	249	270	28
8	190	200	38
9	319	299	25
10	131	137	52
11	205	60	36
12	-136	61	53
13	53	82	89

-6 k 13

1	120	56	46
2	-152	13	39
3	235	223	28
4	70	89	68
5	323	321	23
6	170	24	37
7	404	389	21
8	74	11	72
9	465	402	19
10	-112	106	61
11	444	396	22

-6 k 14

0	420	461	28
1	164	182	41
2	579	554	17
3	103	87	57
4	494	462	18
5	91	104	63
6	262	276	32
7	141	82	49
8	278	254	30
9	-114	25	59

-6 k 15

1	-101	32	60
2	-23	120	108
3	286	169	25
4	182	165	42
5	285	239	28
6	253	221	31
7	77	137	79

-6 k 16

0	-124	53	71
1	357	381	25
2	184	155	39

-5 k 1

0	1503	1504	18
1	1482	1508	14
2	1349	1364	13
3	1588	1602	15
4	1254	1263	13
5	1300	1294	14
6	856	871	12
7	1063	1072	13
8	477	494	15
9	805	824	13
10	185	159	33
11	445	433	18
12	-106	92	52
13	125	150	50
14	281	271	21
15	-98	54	53
16	224	249	29
17	323	267	23
18	168	187	43
19	259	234	30

-5 k 2

1	330	314	13
2	386	391	12
3	583	591	11
4	483	489	12
5	847	864	12
6	323	314	16
7	997	989	13
8	334	311	19
9	1135	1135	14
10	765	779	14
11	1002	1008	15
12	433	434	18
13	943	905	15
14	313	365	22
15	656	651	15
16	408	397	19
17	462	467	19
18	121	159	55
19	318	302	26

-5 k 3

0	1948	1990	21
1	114	89	31
2	1595	1574	15
3	508	506	11
4	1706	1687	16
5	403	402	14
6	1378	1386	14
7	-31	34	77
8	864	865	13
9	245	287	27
10	469	473	18
11	112	186	51
12	147	126	41
13	54	60	68
14	128	122	42
15	166	129	36
16	250	244	27
17	-148	11	44
18	326	289	25
19	119	45	56

-5 k 4

1	108	72	33
2	313	309	15
3	254	203	18
4	-55	59	55
5	715	705	12
6	128	76	36
7	995	971	13
8	544	555	15
9	966	974	14
10	321	305	22
11	991	979	15
12	601	583	16
13	711	717	14
14	396	372	18
15	657	657	15
16	110	146	51
17	454	448	19
18	158	210	47
19	305	244	28

-5 k 5

0	1026	1067	16
1	1259	1277	13
2	1494	1499	15
3	1083	1098	13
4	548	559	13
5	855	867	13
6	173	204	31
7	599	640	15
8	394	371	18
9	278	269	24
10	155	122	39
11	338	318	22
12	-97	51	60
13	21	64	92
14	-99	4	53
15	151	146	41
16	108	100	53
17	208	173	36
18	235	206	34
19	273	249	31

-5 k 6

1	394	401	15
2	332	323	18
3	221	207	25
4	639	618	13
5	413	435	17
6	1000	1009	14
7	122	102	43
8	882	913	15
9	304	284	24
10	1000	1017	15
11	228	252	32
12	797	814	14
13	-88	58	56
14	627	618	15
15	232	251	31
16	444	450	20
17	196	160	39
18	327	274	27

-5 k 7

0	511	506	20
1	1365	1399	15
2	133	101	38
3	1388	1393	15
4	127	76	42
5	962	990	14
6	343	311	19
7	751	744	14
8	218	184	30
9	619	619	16
10	133	125	47

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m59

11	121	78	43
12	-82	62	57
13	-71	12	62
14	256	236	26
15	79	131	67
16	122	122	54
17	230	243	36
18	-114	63	60

-5 k 8

1	346	314	18
2	-43	48	75
3	509	484	15
4	521	505	16
5	467	484	18
6	589	593	16
7	835	835	14
8	642	625	16
9	502	489	18
10	846	848	14
11	411	396	19
12	519	507	16
13	477	472	17
14	469	456	18
15	184	242	41
16	416	404	22
17	152	190	50

-5 k 9

0	1128	1133	19
1	317	339	21
2	1097	1094	14
3	548	559	15
4	799	808	15
5	243	235	28
6	750	758	15
7	228	265	33
8	402	401	18
9	280	305	23
10	214	193	29
11	67	84	68
12	147	6	39
13	-45	95	82
14	161	196	45
15	37	69	97
16	165	170	47

-5 k 10

1	32	62	90
2	-94	46	56
3	386	377	20
4	55	155	77
5	567	592	17
6	193	170	30
7	567	550	15
8	150	129	37
9	667	641	14
10	-68	5	66
11	714	692	15
12	-104	46	58
13	527	524	19
14	101	82	61
15	495	491	20

-5 k 11

0	639	648	22
1	520	510	17
2	853	840	15
3	261	255	23
4	772	762	13
5	336	325	20
6	376	357	19
7	288	257	23
8	392	414	20
9	-94	44	56
10	155	206	44
11	-108	67	55
12	59	12	80
13	165	33	42
14	-112	71	59

-5 k 12

1	-63	57	63
2	-70	83	63
3	64	158	66
4	93	57	51
5	266	299	26
6	332	313	21
7	83	160	63
8	485	475	18
9	415	395	20
10	445	410	20
11	352	338	24
12	400	431	24
13	191	171	43

-5 k 13

0	144	143	53
1	671	648	14
2	188	230	33
3	569	558	16
4	213	247	32
5	491	444	17
6	201	84	32
7	297	286	25
8	118	138	54
9	189	176	41
10	145	76	47
11	99	107	65
12	-148	20	51

-5 k 14

1	151	88	39
2	153	142	42
3	123	125	48
4	321	353	26
5	88	119	63
6	365	311	22
7	161	156	43
8	297	337	29
9	82	64	72
10	414	383	23

-5 k 15

0	431	377	28
1	366	377	23
2	369	324	23
3	436	434	21
4	310	317	27
5	223	245	35
6	235	262	34
7	154	187	50
8	-128	124	57

-5 k 16

1	127	67	51
2	134	35	49
3	199	128	38
4	193	117	39

-4 k 1

1	130	137	26
2	147	156	24
3	385	390	12
4	396	376	11
5	814	820	11
6	818	818	11
7	782	768	12
8	980	973	12
9	999	1003	13
10	608	615	14
11	1021	1042	14
12	648	641	15
13	707	709	15
14	508	534	15
15	704	690	14
16	270	223	24
17	494	507	18
18	300	269	26
19	300	296	28
20	105	104	62

-4 k 2

0	351	365	17
1	1397	1430	13
2	1596	1632	15
3	1437	1451	14
4	1292	1247	13
5	1568	1575	15
6	598	582	11
7	1094	1088	13
8	915	918	13
9	633	620	13
10	480	499	16
11	221	182	28
12	73	138	64
13	-65	97	71
14	256	240	23
15	361	344	19
16	130	49	43
17	312	280	22
18	220	159	33
19	324	290	25
20	-119	42	58

-4 k 3

1	576	543	10
2	999	974	11
3	197	189	19
4	1170	1141	12
5	418	393	12
6	1086	1120	12
7	134	135	33
8	1105	1105	13
9	398	413	17
10	1160	1179	14
11	318	328	22
12	1078	1054	15
13	138	154	46
14	872	884	13
15	46	130	78
16	662	645	15
17	135	50	45
18	505	495	19
19	-86	55	69

-4 k 4

0	940	914	14
1	2133	2147	19
2	571	555	10
3	2064	2058	19
4	598	600	11
5	1460	1459	15
6	835	832	12
7	789	782	13
8	-26	34	85
9	429	442	17
10	149	148	38
11	228	178	28
12	186	199	35
13	106	9	53
14	-44	92	74
15	156	156	37
16	62	101	70
17	290	258	26
18	-65	76	77
19	233	256	35

-4 k 5

1	124	183	31
2	327	340	15
3	588	587	11
4	692	682	11
5	502	488	13
6	746	762	12
7	916	905	13
8	697	684	14
9	923	920	14
10	873	882	14
11	813	835	15
12	622	619	16
13	743	742	14
14	469	479	17
15	391	421	19
16	497	487	17
17	379	337	21
18	211	200	36
19	303	268	28

-4 k 6

0	1710	1698	20
1	377	384	14
2	1815	1892	17
3	686	692	12
4	1517	1509	15
5	-141	50	36
6	1049	1057	13
7	303	257	20
8	609	588	15
9	244	253	29
10	234	277	29
11	82	25	60
12	131	166	41
13	-90	15	53
14	55	100	73
15	-85	83	60
16	98	177	62
17	44	119	89
18	293	265	28

-4 k 7

1	215	210	24
2	663	674	13
3	366	345	17
4	237	201	24
5	778	753	13
6	409	425	18
7	842	834	14
8	221	273	31
9	1013	1012	15
10	39	30	85
11	1034	1024	16
12	183	143	31
13	706	711	14
14	163	157	38
15	611	590	15
16	-71	42	72
17	409	386	22
18	55	90	86

-4 k 8

0	883	861	17
1	780	787	13
2	812	847	13
3	512	538	15

Supplementary material, page 59

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m60

4	910	916	13
5	751	750	14
6	698	688	15
7	533	533	16
8	740	722	15
9	25	59	97
10	379	365	21
11	132	168	42
12	-105	57	52
13	126	116	46
14	25	25	97
15	345	298	23
16	165	154	43
17	-73	125	79

-4 k 9

1	170	38	31
2	398	402	17
3	-73	81	62
4	439	441	18
5	294	285	23
6	763	750	15
7	239	198	28
8	798	801	16
9	330	325	21
10	517	524	16
11	286	321	25
12	660	645	15
13	316	275	23
14	495	522	19
15	297	283	28
16	399	397	23
17	104	189	67

-4 k 10

0	122	65	60
1	1120	1131	15
2	146	49	39
3	980	983	14
4	-33	66	87
5	774	748	15
6	238	190	30
7	637	634	14
8	-93	30	52
9	359	374	20
10	98	22	51
11	161	187	39
12	-136	8	45
13	141	50	46
14	-104	119	61
15	50	83	90
16	-99	30	65

-4 k 11

1	176	190	36
2	85	95	62
3	160	31	38
4	452	436	16
5	126	77	41
6	517	523	16
7	372	336	19
8	549	540	16
9	245	227	28
10	602	601	16
11	249	237	29
12	498	491	19
13	310	342	28
14	452	405	21
15	119	176	62

-4 k 12

0	831	839	18
1	566	567	14
2	511	504	15
3	560	559	15
4	383	393	18
5	352	380	20
6	444	433	18
7	256	261	27
8	137	162	46
9	236	253	30
10	-104	94	59
11	51	21	83
12	122	61	55
13	102	6	62
14	207	147	38

-4 k 13

1	-67	103	67
2	-139	20	41
3	180	181	33
4	182	115	33
5	353	335	20
6	131	66	43
7	563	542	17
8	152	86	43
9	509	458	18
10	121	196	57
11	418	399	23
12	-53	89	90

-4 k 14

0	680	638	20
1	158	147	38
2	604	594	15
3	-166	28	37
4	501	482	17
5	149	95	43
6	328	363	25
7	122	76	51
8	249	226	32
9	143	32	48
10	-127	131	57

-4 k 15

1	-98	8	58
2	162	183	44
3	169	156	41
4	169	187	42
5	209	205	36
6	200	269	40
7	226	194	35
8	249	245	34

-4 k 16

0	-124	121	69
1	452	427	20
2	224	224	35
3	403	356	22
4	193	190	40
5	372	391	25

-3 k 1

0	603	588	11
1	1619	1639	14
2	133	140	24
3	1442	1458	13
4	1020	1027	11
5	1654	1628	15
6	973	962	11
7	1072	1066	12
8	444	436	13
9	541	535	13
10	329	326	19
11	401	429	18
12	149	21	38
13	164	27	36
14	203	248	35
15	69	104	60
16	267	261	24
17	227	272	30
18	139	169	47
19	286	274	28
20	199	251	40

-3 k 2

1	732	758	9
2	1046	1026	11
3	1390	1362	13
4	1164	1193	12
5	977	966	11
6	928	915	11
7	1037	1055	12
8	493	519	13
9	1056	1047	13
10	767	794	13
11	857	840	13
12	541	544	16
13	943	941	15
14	357	388	23
15	560	568	15
16	473	475	17
17	448	443	18
18	247	246	32
19	324	380	28
20	274	221	29

-3 k 3

0	2306	2386	24
1	464	434	10
2	2014	2027	18
3	1168	1126	12
4	2065	2051	18
5	125	43	28
6	1682	1663	16
7	408	414	13
8	596	587	13
9	484	460	14
10	196	227	30
11	-110	14	48
12	184	156	34
13	130	158	45
14	287	315	22
15	75	164	61
16	339	312	21
17	-101	29	56
18	343	299	23
19	117	46	55
20	377	346	25

-3 k 4

1	948	973	10
2	975	975	11
3	963	929	11
4	252	246	16
5	1198	1180	13
6	512	527	12
7	1523	1521	15
8	622	641	13
9	1231	1207	14
10	-78	141	61
11	1080	1106	15
12	480	453	18
13	957	960	15
14	346	351	20
15	689	663	14
16	69	111	65
17	546	532	17
18	213	218	36
19	389	391	24

-3 k 5

0	1736	1724	19
1	2272	2304	20
2	1517	1520	15
3	1498	1512	15
4	1330	1289	14
5	1378	1388	14
6	981	967	12
7	751	775	13
8	556	570	14
9	-115	105	48
10	232	250	27
11	301	292	24
12	-76	107	66
13	11	37	98
14	114	23	45
15	212	209	29
16	166	123	36
17	-54	112	79
18	58	176	84
19	192	212	41

-3 k 6

1	139	110	26
2	488	484	12
3	124	171	33
4	549	581	12
5	333	311	17
6	1058	1052	13
7	135	45	39
8	1240	1242	15
9	252	231	26
10	960	960	15
11	397	356	20
12	1074	1071	15
13	165	172	35
14	758	755	14
15	296	312	25
16	449	476	19
17	224	183	32
18	395	391	22
19	-88	50	70

-3 k 7

0	656	649	15
1	1489	1530	15
2	-47	89	63
3	1283	1309	14
4	112	156	43
5	1136	1133	14
6	394	411	18
7	987	995	14
8	109	118	51
9	527	540	16
10	-49	70	81
11	314	326	24
12	86	85	56
13	-184	13	34
14	199	189	32
15	168	193	39
16	49	85	84
17	249	197	31
18	-43	14	95

-3 k 8

1	542	563	13
2	107	72	42
3	295	274	20
4	241	271	25
5	351	324	19
6	654	647	15
7	793	777	14
8	691	668	15
9	368	358	21
10	727	731	16

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m61

11	282	307	22
12	569	585	16
13	529	522	16
14	574	561	17
15	299	255	25
16	415	423	22
17	150	203	50
18	361	273	25

-3 k 9

0	1134	1132	18
1	570	557	14
2	808	804	13
3	536	531	15
4	749	765	15
5	406	420	19
6	1018	1022	15
7	231	308	31
8	515	532	19
9	275	307	29
10	317	318	21
11	-40	24	82
12	151	157	41
13	139	26	41
14	296	254	25
15	-65	16	77
16	219	152	35
17	112	60	62

-3 k 10

1	256	207	24
2	-100	30	52
3	550	565	15
4	153	187	40
5	697	681	15
6	162	7	39
7	790	805	16
8	116	39	46
9	617	603	15
10	-48	111	79
11	601	591	15
12	133	11	45
13	664	631	16
14	-10	18	116
15	496	511	21
16	124	76	57

-3 k 11

0	1033	1025	19
1	490	528	17
2	1100	1091	15
3	223	222	31
4	776	798	15
5	434	432	16
6	554	559	15
7	245	269	26
8	428	403	18
9	147	18	39
10	284	225	24
11	-115	95	52
12	-111	50	55
13	-166	23	44
14	103	24	61
15	-118	114	62

-3 k 12

1	-40	12	75
2	316	284	20
3	195	197	29
4	79	113	58
5	305	343	22
6	460	468	18
7	330	357	22
8	463	523	19
9	490	454	17
10	405	387	21
11	432	400	21
12	458	447	21
13	306	265	29
14	356	362	27

-3 k 13

0	226	94	35
1	701	717	14
2	53	148	74
3	549	552	15
4	226	228	27
5	567	577	16
6	102	111	54
7	360	365	22
8	-135	138	48
9	-117	132	57
10	184	68	39
11	-165	69	47
12	75	27	76
13	-102	65	80

-3 k 14

1	108	92	49
2	186	197	33
3	-49	127	76
4	265	300	28
5	50	98	81
6	365	341	22
7	30	169	101
8	385	405	24
9	37	41	98
10	427	383	22
11	-133	29	56

-3 k 15

0	344	326	32
1	449	419	19
2	326	279	23
3	404	422	21
4	309	285	25
5	340	308	24
6	302	293	27
7	270	217	30
8	120	118	58
9	62	174	86

-3 k 16

1	-43	94	92
2	-44	8	87
3	151	157	46
4	199	113	36
5	113	179	61
6	162	85	59

-2 k 1

1	522	503	7
2	524	509	8
3	1189	1171	11
4	558	549	9
5	929	925	10
6	518	550	10
7	1543	1549	15
8	1067	1046	12
9	1156	1157	13
10	415	417	16
11	1108	1092	14
12	705	724	14
13	1072	1031	15
14	592	575	17
15	621	610	14
16	246	224	25
17	542	519	17
18	248	252	29
19	387	360	22
20	-77	129	77

-2 k 2

0	302	287	13
1	1127	1137	10
2	1781	1776	16
3	647	643	9
4	1645	1654	15
5	1668	1645	15
6	944	912	11
7	1136	1121	12
8	578	573	12
9	501	483	13
10	157	215	35
11	178	154	32
12	91	29	55
13	230	231	29
14	113	22	49
15	467	450	16
16	144	184	42
17	272	265	26
18	168	222	42
19	353	329	24
20	-125	123	57

-2 k 3

1	193	188	16
2	1629	1602	15
3	380	352	11
4	1504	1440	14
5	393	395	12
6	1707	1706	16
7	420	405	13
8	1525	1524	15
9	350	341	17
10	1036	1010	14
11	437	430	17
12	1130	1140	15
13	128	93	45
14	966	956	15
15	140	206	40
16	540	545	16
17	-40	136	85
18	558	559	17
19	11	45	116
20	304	273	29

-2 k 4

0	2494	2476	25
1	2112	2107	19
2	834	829	10
3	1761	1789	16
4	254	301	16
5	1938	1917	18
6	487	491	12
7	1206	1174	13
8	204	162	25
9	496	480	15
10	26	18	86
11	369	380	19
12	26	68	93
13	65	27	68
14	253	234	25
15	336	348	21
16	60	149	69
17	274	233	26
18	71	89	71
19	320	327	27
20	199	219	41

-2 k 5

1	309	304	13
2	642	610	10
3	372	355	12
4	553	557	11
5	578	573	11
6	754	746	12
7	1262	1255	14
8	790	777	13
9	1006	1012	14
10	879	891	14
11	823	840	14
12	770	742	15
13	864	870	15
14	651	651	14
15	409	448	19
16	516	485	16
17	329	318	23
18	355	345	24
19	309	290	26

-2 k 6

0	1856	1886	21
1	615	612	10
2	1797	1780	17
3	793	786	11
4	1616	1593	16
5	385	356	15
6	1430	1430	15
7	330	330	20
8	564	564	15
9	335	320	21
10	337	356	22
11	-89	118	60
12	176	197	37
13	103	102	48
14	169	179	35
15	154	45	38
16	247	187	27
17	132	64	47
18	287	235	28
19	-107	73	63

-2 k 7

1	217	223	21
2	202	234	23
3	488	473	13
4	161	206	31
5	575	574	14
6	42	43	74
7	981	978	14
8	213	227	30
9	937	956	14
10	125	94	47
11	979	977	15
12	261	215	23
13	844	846	14
14	113	161	50
15	597	596	16
16	74	76	69
17	444	435	20
18	-121	84	58

-2 k 8

0	1217	1189	17
1	544	550	13
2	1168	1150	13
3	320	302	19
4	887	893	13
5	719	738	14
6	798	826	14
7	443	407	18
8	578	608	16
9	-76	83	65
10	226	259	33
11	275	273	23

Supplementary material, page 61

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m62

12	58	70	70
13	-142	53	41
14	180	186	36
15	214	257	33
16	191	172	38
17	-75	105	73
18	280	157	29

-2 k 9

1	48	139	71
2	638	654	13
3	190	184	31
4	383	390	19
5	504	492	17
6	772	774	15
7	536	537	17
8	687	695	16
9	443	393	19
10	514	500	16
11	349	333	20
12	579	600	16
13	413	367	19
14	533	522	18
15	287	318	28
16	396	350	23
17	202	210	40

-2 k 10

0	376	388	27
1	1305	1302	15
2	110	139	49
3	1140	1135	15
4	123	100	45
5	1019	1028	15
6	74	11	66
7	775	770	15
8	-149	82	39
9	293	340	24
10	-96	73	53
11	249	220	27
12	-110	29	53
13	-61	21	75
14	50	51	85
15	228	127	33
16	-38	34	95

-2 k 11

1	117	196	49
2	307	275	23
3	220	175	30
4	546	563	17
5	105	139	57
6	658	660	14
7	384	365	19
8	688	691	14
9	239	253	29
10	534	542	17
11	200	241	36
12	578	570	17
13	163	243	47
14	517	492	20
15	-24	101	108

-2 k 12

0	1023	1013	17
1	598	595	14
2	646	662	14
3	469	503	16
4	540	535	15
5	463	475	17
6	514	505	16
7	437	422	18
8	175	169	37
9	237	257	31
10	-50	115	85
11	210	119	34
12	-111	77	58
13	88	38	68
14	137	128	55

-2 k 13

1	202	166	29
2	62	21	66
3	114	157	47
4	-52	52	75
5	355	350	20
6	90	81	58
7	591	597	16
8	111	109	55
9	523	498	18
10	-174	141	43
11	473	439	21
12	128	135	57
13	495	466	21

-2 k 14

0	642	639	20
1	242	185	26
2	532	504	16
3	87	102	59
4	488	485	18
5	61	88	73
6	452	465	20
7	86	114	66
8	234	265	34
9	190	34	38
10	155	124	48
11	132	32	55

-2 k 15

1	191	80	34
2	-76	105	69
3	218	200	31
4	169	139	40
5	217	233	34
6	234	237	34
7	239	258	34
8	191	217	43
9	301	250	29

-2 k 16

0	193	223	54
1	405	403	22
2	270	262	31
3	304	296	27
4	279	237	29
5	351	333	25
6	61	146	84

-1 k 1

0	1633	1649	16
1	3091	3024	31
2	2017	1969	17
3	1938	1922	13
4	612	608	9
5	2289	2215	20
6	588	598	10
7	1120	1106	12
8	588	569	11
9	356	329	15
10	401	405	16
11	392	378	17
12	219	169	28
13	155	99	38
14	-50	66	81
15	318	295	20
16	70	84	60
17	219	229	30
18	84	95	62
19	392	361	22
20	103	204	64

-1 k 2

1	-44	63	32
2	260	243	10
3	1069	1027	10
4	849	873	10
5	1128	1117	11
6	505	510	11
7	1556	1549	15
8	934	943	12
9	1298	1281	14
10	729	748	13
11	910	913	13
12	758	767	14
13	1017	983	15
14	562	569	17
15	569	578	15
16	441	399	17
17	367	411	22
18	297	290	25
19	327	344	27
20	229	186	35

-1 k 3

0	2562	2594	26
1	328	324	9
2	929	914	10
3	149	118	22
4	1669	1639	15
5	113	175	31
6	1779	1790	16
7	414	431	13
8	676	664	12
9	259	269	21
10	536	526	14
11	35	124	83
12	68	126	66
13	-78	16	64
14	443	409	18
15	148	40	35
16	385	365	18
17	57	117	73
18	325	324	25
19	100	39	61
20	437	434	22

-1 k 4

1	787	787	9
2	534	493	9
3	381	358	11
4	759	738	10
5	629	639	10
6	441	415	12
7	1510	1516	15
8	661	690	12
9	1143	1112	14
10	255	259	24
11	1028	1016	14
12	255	305	28
13	1153	1169	15
14	329	329	20
15	720	705	14
16	-106	59	49
17	551	538	17
18	120	161	53
19	458	455	21
20	150	54	49

-1 k 5

0	1300	1287	15
1	1885	1840	17
2	1121	1094	12
3	1131	1139	12
4	1122	1091	12
5	1184	1168	13
6	1394	1376	14
7	628	634	12
8	812	799	13
9	214	245	29
10	334	337	21
11	345	347	21
12	341	342	23
13	156	26	40
14	180	172	32
15	198	214	31
16	179	153	35
17	144	173	45
18	268	157	28
19	291	268	28

-1 k 6

1	358	349	13
2	404	412	12
3	338	313	14
4	-42	90	63
5	534	536	13
6	885	898	13
7	555	533	14
8	1224	1195	14
9	325	289	21
10	1027	1047	15
11	284	300	26
12	1211	1222	16
13	319	327	22
14	784	782	14
15	251	272	28
16	452	449	17
17	184	208	39
18	415	386	22
19	154	150	50

-1 k 7

0	271	235	23
1	1869	1861	17
2	113	159	35
3	1359	1349	14
4	105	55	41
5	1221	1220	14
6	174	177	32
7	801	835	14
8	-190	17	33
9	266	239	25
10	140	64	43
11	270	319	28
12	108	82	46
13	150	37	36
14	40	50	83
15	266	260	26
16	47	56	82
17	235	232	32
18	115	13	56

-1 k 8

1	386	388	15
2	531	515	13
3	154	144	33
4	589	574	14
5	156	134	37
6	884	875	14
7	554	577	16
8	974	974	15
9	442	405	18
10	693	692	16
11	363	385	19
12	741	731	14

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m163

13	501	508	16
14	593	586	16
15	133	217	48
16	371	352	23
17	145	199	50
18	350	306	25

-1 k 9

0	1429	1433	19
1	797	795	13
2	866	870	13
3	628	642	14
4	861	866	14
5	753	778	14
6	910	909	14
7	500	540	18
8	308	323	24
9	139	132	48
10	228	240	27
11	25	65	92
12	161	176	39
13	-114	101	52
14	202	219	35
15	134	146	50
16	211	187	35
17	213	42	36

-1 k 10

1	401	401	17
2	-71	83	64
3	543	541	16
4	-118	14	47
5	673	678	15
6	-108	78	54
7	864	872	16
8	115	42	45
9	702	687	14
10	130	95	43
11	676	650	15
12	145	93	43
13	665	660	16
14	51	115	86
15	469	473	20
16	-106	88	64

-1 k 11

0	1127	1124	20
1	410	435	19
2	1076	1077	15
3	248	258	28
4	900	889	15
5	279	284	27
6	755	760	14
7	211	202	29
8	475	455	17
9	38	67	85
10	289	270	24
11	214	55	31
12	194	176	37
13	80	65	69
14	-110	48	59
15	112	93	60

-1 k 12

1	18	68	92
2	226	216	25
3	223	225	25
4	47	92	75
5	250	239	25
6	468	467	16
7	422	392	18
8	585	568	16
9	362	377	22
10	426	408	20
11	359	373	24
12	478	458	20
13	447	379	21
14	323	326	30

-1 k 13

0	112	66	63
1	752	761	14
2	125	105	43
3	558	543	15
4	112	179	50
5	627	617	15
6	207	210	32
7	451	446	18
8	84	108	65
9	198	217	39
10	131	67	51
11	169	155	45
12	29	19	104
13	-121	17	59

-1 k 14

1	156	25	37
2	165	204	37
3	67	12	66
4	215	231	31
5	-54	34	77
6	376	392	23
7	119	72	53
8	433	453	22
9	-87	46	70
10	378	387	26
11	-160	63	49

-1 k 15

0	309	297	34
1	506	489	18
2	299	278	25
3	378	404	21
4	240	246	31
5	367	352	23
6	214	241	37
7	242	230	33
8	83	131	72
9	40	154	100

-1 k 16

1	127	80	51
2	112	78	57
3	165	173	45
4	119	169	58
5	215	195	36
6	-158	159	48

0 k 0

2	3498	3430	34
4	2239	2149	15
6	1817	1746	16
8	366	380	14
10	622	611	13
12	409	415	18
14	224	181	29
16	188	131	30
18	259	199	26
20	505	498	20

0 k 1

1	735	689	7
2	262	244	7
3	372	366	7
4	1328	1302	12
5	1053	1038	11
6	704	700	10
7	2239	2160	20
8	1258	1211	13
9	1426	1403	15
10	479	474	15
11	1046	1052	14
12	531	583	17
13	1314	1316	16
14	459	498	20
15	689	697	14
16	266	274	24
17	497	476	16
18	217	233	33
19	434	427	20
20	105	138	61

0 k 2

0	802	753	9
1	2481	2456	21
2	1542	1517	14
3	1288	1238	12
4	810	796	9
5	1821	1807	16
6	1005	989	11
7	1311	1264	13
8	563	545	11
9	437	425	14
10	211	175	26
11	354	358	19
12	99	136	52
13	137	171	45
14	232	222	31
15	263	211	23
16	241	215	26
17	185	159	34
18	204	193	33
19	298	266	28
20	272	275	33

0 k 3

1	302	300	10
2	1177	1175	11
3	85	117	36
4	333	297	12
5	121	119	26
6	1469	1479	14
7	99	56	37
8	1628	1597	16
9	193	198	27
10	894	882	13
11	303	332	22
12	1259	1253	15
13	95	173	57
14	926	921	15
15	160	144	35
16	541	532	15
17	182	139	34
18	575	546	17
19	127	63	53
20	315	298	28

0 k 4

0	1477	1446	16
1	1812	1787	16
2	646	630	9
3	1046	1035	11
4	412	406	12
5	1770	1736	16
6	408	395	13
7	1172	1169	13
8	274	266	19
9	520	528	14
10	163	145	34
11	560	573	15
12	183	185	35
13	88	88	59
14	-31	14	82
15	330	358	22
16	132	40	43
17	244	234	29
18	-211	32	34
19	395	367	23
20	154	145	49

0 k 5

1	376	371	11
2	897	889	10
3	326	339	13
4	462	478	12
5	295	327	17
6	710	704	12
7	905	893	12
8	991	984	13
9	717	733	14
10	910	890	14
11	643	654	15
12	879	890	15
13	798	792	15
14	760	754	14
15	383	387	19
16	395	372	19
17	359	326	21
18	395	406	22
19	259	265	32

0 k 6

0	1963	1958	21
1	937	920	11
2	1589	1574	15
3	902	890	11
4	1530	1543	15
5	799	774	12
6	1272	1291	14
7	387	382	17
8	285	342	23
9	34	56	84
10	296	317	24
11	241	213	28
12	306	246	24
13	46	104	77
14	103	104	50
15	97	103	53
16	196	180	32
17	-42	54	87
18	274	268	30
19	213	172	37

0 k 7

1	404	415	13
2	103	152	40
3	650	673	12
4	209	176	24
5	732	709	13
6	190	179	31
7	1197	1201	15
8	84	109	60
9	1228	1234	15
10	78	64	63
11	1131	1149	16
12	179	107	32
13	859	877	14
14	108	86	50
15	532	537	17
16	122	20	48
17	409	382	21
18	-125	16	56

0 k 8

0	1403	1424	18

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m64

1	1015	1018	12
2	1362	1367	14
3	616	616	13
4	1049	1042	13
5	643	666	14
6	848	862	14
7	265	273	26
8	317	344	25
9	-99	32	59
10	111	130	52
11	124	203	44
12	39	113	82
13	-68	32	65
14	261	246	26
15	71	142	70
16	296	267	26
17	67	80	78
18	268	233	31

0 k 9

1	246	233	24
2	657	671	13
3	185	203	31
4	462	490	17
5	203	252	33
6	811	793	15
7	606	610	16
8	774	760	15
9	420	453	22
10	594	607	15
11	469	465	17
12	608	619	16
13	476	488	18
14	495	504	18
15	283	261	28
16	316	338	28
17	163	189	48

0 k 10

0	278	301	33
1	1165	1180	14
2	91	94	55
3	1046	1056	14
4	137	137	44
5	953	957	15
6	248	251	29
7	672	677	16
8	147	120	37
9	379	338	19
10	-73	101	64
11	186	174	36
12	65	32	69
13	-60	3	73
14	81	34	69
15	190	196	41
16	-47	20	93

0 k 11

1	-141	67	42
2	70	149	66
3	-72	114	66
4	331	291	21
5	-46	90	85
6	556	568	15
7	199	252	33
8	637	645	15
9	241	249	28
10	578	573	17
11	263	246	28
12	556	559	18
13	242	149	33
14	527	513	19
15	79	61	75

0 k 12

0	650	657	19
1	729	729	13
2	571	554	14
3	478	476	15
4	403	398	17
5	457	458	16
6	399	409	19
7	398	406	19
8	242	199	29
9	295	254	25
10	101	146	59
11	199	187	37
12	-24	86	110
13	-79	2	75
14	-144	80	54

0 k 13

1	-82	72	55
2	-56	66	69
3	173	115	33
4	91	98	54
5	250	283	27
6	237	176	27
7	525	532	17
8	259	208	27
9	486	491	19
10	89	105	70
11	498	452	20
12	171	176	46
13	455	456	24

0 k 14

0	812	770	18
1	129	98	45
2	573	581	16
3	29	101	90
4	488	498	17
5	9	41	111
6	462	476	20
7	71	35	74
8	265	298	31
9	-113	68	60
10	88	163	76
11	-88	33	74

0 k 15

1	169	105	40
2	-108	46	55
3	275	189	26
4	179	136	39
5	320	309	26
6	168	195	44
7	395	366	23
8	203	188	39
9	282	293	33

0 k 16

0	275	298	40
1	452	433	21
2	257	267	31
3	280	328	31
4	242	251	34
5	254	270	32

1 k 0

1	364	378	4
2	1129	1112	9
3	99	72	14
4	418	431	7
5	347	342	8
6	1862	1798	15
7	267	249	11
8	2033	1967	16
9	129	107	24
10	1297	1286	12
11	-99	47	36
12	1455	1448	13
13	62	146	55
14	1151	1165	12
15	76	6	44
16	579	576	11
17	-57	40	55
18	595	580	11
19	-172	25	31
20	339	266	17

1 k 1

0	897	895	10
1	3681	3673	35
2	1719	1666	15
3	2149	2134	18
4	1220	1174	11
5	2204	2158	19
6	264	298	15
7	944	929	11
8	336	342	14
9	621	635	12
10	154	99	32
11	430	437	17
12	-27	74	90
13	204	179	32
14	-127	45	48
15	266	240	22
16	192	178	30
17	170	142	36
18	122	151	48
19	390	349	21
20	88	121	68

1 k 2

1	80	41	25
2	110	79	19
3	1133	1115	11
4	189	200	18
5	490	502	10
6	766	740	10
7	1061	1026	12
8	1081	1047	12
9	1118	1091	13
10	826	826	13
11	1065	1051	14
12	771	802	15
13	983	999	15
14	684	699	16
15	611	613	14
16	273	305	24
17	491	488	17
18	330	334	24
19	289	289	29
20	157	186	49

1 k 3

0	1528	1527	16
1	1197	1180	11
2	1468	1449	10
3	269	258	14
4	1862	1858	17
5	-105	78	31
6	1994	1954	18
7	105	32	34
8	1005	947	12
9	253	253	22
10	684	669	13
11	-56	78	69
12	159	176	40
13	135	121	44
14	302	263	24
15	80	153	57
16	283	262	23
17	56	68	72
18	293	286	27
19	134	136	51
20	328	340	28

1 k 4

1	551	537	9
2	341	334	12
3	924	916	11
4	84	109	38
5	867	849	11
6	88	81	40
7	1490	1468	15
8	140	184	35
9	1189	1184	14
10	246	237	24
11	985	980	14
12	-115	90	50
13	1091	1075	15
14	233	268	27
15	674	681	14
16	105	170	53
17	524	503	17
18	166	128	42
19	453	447	21
20	47	59	92

1 k 5

0	2452	2428	25
1	1349	1335	13
2	1732	1691	16
3	752	780	11
4	1464	1448	14
5	885	879	12
6	1300	1296	14
7	568	571	13
8	366	376	18
9	569	565	14
10	290	235	22
11	301	317	24
12	338	363	23
13	162	76	40
14	108	131	47
15	123	85	44
16	176	166	36
17	174	138	38
18	180	165	40
19	270	217	30

1 k 6

1	704	687	11
2	406	419	12
3	176	216	25
4	690	729	12
5	309	336	19
6	1049	1051	13
7	826	833	13
8	1148	1161	14
9	473	488	17
10	1026	1018	14
11	473	489	18
12	949	968	15
13	490	493	16
14	709	721	14
15	209	176	29
16	455	455	18
17	132	186	50
18	360	359	25
19	245	224	34

1 k 7

0	-46	79	76

Supplementary material, page 64

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4460-m65

1	2120	2151	19
2	228	199	20
3	1736	1704	17
4	147	127	34
5	1156	1150	14
6	161	80	36
7	780	785	14
8	139	123	42
9	236	298	31
10	-89	4	61
11	206	242	35
12	144	154	39
13	123	22	44
14	61	16	70
15	175	213	38
16	123	0	49
17	174	227	43
18	131	36	53

1 k 8

1	196	178	28
2	459	464	14
3	244	235	23
4	365	403	19
5	415	455	18
6	881	905	14
7	653	707	16
8	1026	1043	15
9	460	492	19
10	760	770	16
11	405	419	18
12	806	814	14
13	361	381	21
14	574	576	16
15	229	243	32
16	360	348	24
17	132	208	55
18	294	315	31

1 k 9

0	1369	1415	19
1	604	621	14
2	1107	1123	14
3	345	331	19
4	903	915	14
5	737	707	14
6	792	780	15
7	480	484	19
8	426	420	20
9	130	71	48
10	241	226	26
11	200	209	32
12	123	118	48
13	151	110	41
14	127	124	49
15	144	210	50
16	218	150	33
17	171	112	45

1 k 10

1	299	223	22
2	154	51	36
3	333	365	22
4	181	161	35
5	520	538	17
6	159	84	42
7	699	671	16
8	221	223	29
9	659	669	15
10	99	95	54
11	641	640	16
12	198	173	34
13	660	629	16
14	122	115	53
15	473	465	20
16	54	30	88

1 k 11

0	1031	1049	19
1	82	78	58
2	861	853	15
3	51	133	77
4	746	738	15
5	151	184	37
6	607	608	15
7	167	141	36
8	369	348	20
9	159	52	38
10	169	210	41
11	-39	25	88
12	76	129	72
13	-157	31	47
14	125	85	57
15	-115	42	62

1 k 12

1	139	157	39
2	103	77	46
3	237	189	24
4	-53	81	69
5	249	291	26
6	242	263	28
7	507	471	16
8	421	408	20
9	373	383	23
10	383	377	22
11	411	380	22
12	362	376	25
13	431	393	22
14	284	247	31

1 k 13

0	362	373	28
1	695	709	14
2	280	296	23
3	563	584	15
4	239	218	26
5	537	514	15
6	239	211	28
7	395	386	20
8	174	81	39
9	122	157	55
10	84	52	70
11	162	154	48
12	66	12	83

1 k 14

1	-49	42	78
2	242	217	27
3	-21	31	95
4	229	243	30
5	66	49	72
6	438	413	20
7	-20	33	110
8	489	496	20
9	40	5	98
10	429	428	23
11	-67	47	84

1 k 15

0	385	299	29
1	494	529	19
2	296	305	26
3	430	424	20
4	242	261	30
5	404	394	21
6	183	153	41
7	163	255	49
8	168	112	45

1 k 16

1	142	65	49
2	64	70	78
3	265	169	29
4	129	136	54
5	206	221	39

2 k 0

0	3662	3733	37
1	449	449	5
2	1960	1986	13
3	793	763	7
4	1557	1536	12
5	472	466	7
6	1874	1827	15
7	540	521	8
8	645	667	8
9	92	87	33
10	562	556	10
11	494	512	11
12	383	378	13
13	147	33	29
14	158	224	31
15	-126	16	30
16	233	239	20
17	114	84	35
18	289	311	19
19	94	53	47
20	437	454	16

2 k 1

1	593	587	8
2	154	134	17
3	383	380	10
4	579	555	9
5	367	374	11
6	547	577	10
7	1477	1434	14
8	293	315	17
9	1228	1246	14
10	708	704	13
11	1034	1068	14
12	288	330	25
13	1389	1410	16
14	362	378	23
15	751	769	14
16	360	350	19
17	485	484	18
18	185	158	36
19	435	427	21
20	-80	97	73

2 k 2

0	2577	2564	26
1	1433	1446	13
2	763	742	9
3	1013	997	10
4	1525	1501	14
5	1534	1527	14
6	1399	1393	14
7	1098	1041	12
8	478	466	12
9	731	729	12
10	312	298	20
11	166	198	35
12	196	177	32
13	188	187	34
14	201	229	34
15	130	172	42
16	167	227	38
17	265	239	25
18	86	169	66
19	170	225	44
20	367	336	24

2 k 3

1	870	885	10
2	151	53	24
3	257	246	15
4	641	638	10
5	327	327	13
6	1133	1135	12
7	747	752	11
8	1646	1617	16
9	460	435	14
10	981	991	13
11	405	385	19
12	1210	1222	15
13	331	320	22
14	946	963	14
15	75	55	60
16	638	632	15
17	172	85	35
18	496	490	19
19	168	125	42
20	278	253	30

2 k 4

0	491	461	15
1	2572	2530	22
2	242	254	19
3	1734	1770	12
4	-78	39	40
5	1778	1777	16
6	367	340	14
7	1384	1366	14
8	582	580	13
9	489	480	15
10	371	389	18
11	392	408	19
12	-135	8	44
13	-101	125	57
14	-65	64	62
15	323	350	22
16	-34	21	83
17	233	230	30
18	62	30	77
19	285	295	29
20	38	43	97

2 k 5

1	317	305	14
2	1284	1228	13
3	359	350	15
4	553	564	11
5	892	878	11
6	1110	1090	13
7	858	853	12
8	1137	1155	14
9	525	548	15
10	762	744	14
11	444	454	18
12	935	935	15
13	532	555	15
14	710	709	14
15	441	459	17
16	392	385	20
17	332	346	25
18	371	377	23
19	173	196	44

2 k 6

0	1953	1927	22
1	1271	1238	13
2	1619	1618	16
3	630	624	12

Supplementary material, page 65

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4460-m66

4	1363	1385	9
5	891	890	13
6	964	959	13
7	357	369	19
8	633	646	14
9	103	60	51
10	295	322	25
11	344	330	22
12	162	112	39
13	128	111	41
14	85	82	56
15	142	121	41
16	123	175	49
17	-48	41	84
18	248	235	32
19	233	169	34

2 k 7

1	154	114	30
2	114	65	38
3	496	487	13
4	230	211	24
5	760	763	14
6	123	41	43
7	1052	1084	14
8	155	25	37
9	1146	1191	15
10	-185	20	36
11	970	1002	15
12	-124	32	43
13	856	834	14
14	83	2	58
15	579	563	16
16	-53	24	80
17	377	395	23
18	-107	48	59

2 k 8

0	1250	1226	18
1	899	893	13
2	1080	1091	13
3	719	698	13
4	969	972	13
5	787	792	14
6	952	990	15
7	449	434	19
8	505	493	18
9	174	205	39
10	326	323	25
11	-28	142	91
12	217	201	29
13	-87	31	58
14	36	155	91
15	151	29	43
16	197	198	37
17	84	60	71

2 k 9

1	280	263	22
2	435	431	17
3	239	195	26
4	463	470	17
5	197	218	36
6	500	525	19
7	623	622	17
8	582	600	18
9	421	428	18
10	582	608	15
11	463	481	18
12	584	586	16
13	450	464	19
14	450	483	20
15	248	261	32
16	375	372	24
17	279	198	31

2 k 10

0	375	409	29
1	902	919	14
2	203	233	32
3	1009	1015	14
4	-26	66	94
5	844	861	15
6	250	174	29
7	650	648	15
8	28	41	90
9	314	341	24
10	80	19	60
11	198	168	33
12	-18	7	104
13	-79	34	70
14	163	107	44
15	90	167	70
16	29	53	106

2 k 11

1	-101	70	53
2	244	250	28
3	79	65	63
4	311	352	21
5	85	17	54
6	582	572	15
7	-99	22	55
8	607	598	16
9	-101	107	56
10	611	597	16
11	175	188	40
12	563	526	17
13	-154	89	48
14	460	440	21
15	114	87	61

2 k 12

0	338	358	28
1	817	832	13
2	442	444	16
3	588	575	14
4	407	403	17
5	438	445	17
6	345	328	20
7	147	244	44
8	216	207	33
9	112	119	55
10	131	103	51
11	26	53	106
12	-84	42	72
13	-124	23	58
14	135	48	56

2 k 13

1	94	79	55
2	-51	70	75
3	280	241	24
4	92	123	56
5	314	325	23
6	181	216	37
7	465	458	19
8	228	242	34
9	467	462	22
10	-114	191	64
11	429	423	24
12	238	206	38

2 k 14

0	738	742	20
1	158	43	39
2	628	644	16
3	199	95	33
4	505	509	18
5	-99	19	57
6	465	446	19
7	-52	12	87
8	204	269	40
9	-165	38	48
10	167	166	50

2 k 15

1	130	51	48
2	-116	57	54
3	168	131	41
4	87	185	68
5	198	258	41
6	241	194	34
7	378	344	24
8	194	153	41

2 k 16

0	257	246	41
1	347	359	25
2	215	223	36
3	266	300	31
4	251	213	31

3 k 0

1	267	246	9
2	405	388	7
3	233	232	11
4	672	680	7
5	144	150	17
6	817	806	8
7	429	396	9
8	1568	1560	13
9	71	85	41
10	1062	1057	11
11	58	136	52
12	1229	1233	12
13	266	309	19
14	931	936	11
15	-18	26	76
16	588	608	11
17	12	16	87
18	534	520	13
19	-68	44	58
20	252	274	24

3 k 1

0	672	676	12
1	2129	2153	19
2	291	301	13
3	1619	1600	15
4	610	616	10
5	1608	1590	15
6	120	62	28
7	984	1002	12
8	314	314	16
9	484	480	14
10	137	128	37
11	367	366	18
12	94	139	56
13	-127	22	47
14	142	63	43
15	230	251	27
16	-102	109	53
17	259	236	26
18	169	128	39
19	379	368	23
20	-91	53	68

3 k 2

1	185	210	22
2	606	607	10
3	593	602	10
4	624	615	10
5	997	980	11
6	1261	1246	13
7	661	648	11
8	1139	1147	13
9	943	936	13
10	827	812	13
11	926	940	14
12	793	800	15
13	709	740	16
14	742	740	13
15	694	681	14
16	383	377	19
17	484	463	17
18	385	349	22
19	193	228	40
20	189	152	41

3 k 3

0	2323	2316	24
1	940	948	11
2	2219	2261	20
3	332	304	13
4	1884	1878	17
5	566	579	11
6	1454	1444	14
7	107	209	41
8	1065	1070	13
9	150	118	34
10	461	449	16
11	86	19	56
12	114	152	49
13	69	155	71
14	260	257	24
15	211	262	30
16	282	286	25
17	127	83	47
18	271	261	29
19	-94	154	67
20	213	259	38

3 k 4

1	-165	61	27
2	18	33	78
3	1082	1095	12
4	301	314	16
5	1364	1332	14
6	166	170	28
7	1630	1635	16
8	245	188	23
9	1228	1246	14
10	-31	177	89
11	914	921	14
12	-99	104	55
13	984	989	15
14	177	106	33
15	736	730	14
16	182	180	34
17	496	526	19
18	-69	85	77
19	341	333	25

3 k 5

0	2127	2070	23
1	1143	1147	13
2	1516	1510	15
3	936	970	12
4	1137	1135	13
5	764	764	12
6	1297	1290	14
7	401	374	17
8	537	528	14
9	440	433	17
10	322	295	22

Supplementary material, page 66

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4460-m.67

11	-133	24	43
12	-109	99	54
13	-110	41	46
14	252	251	25
15	-70	36	65
16	214	185	30
17	75	175	71
18	234	192	32
19	201	165	38

3 k 6

1	298	231	19
2	317	334	20
3	142	131	37
4	974	999	13
5	172	89	30
6	868	877	13
7	639	638	14
8	772	764	13
9	389	389	19
10	852	883	15
11	464	479	19
12	659	672	14
13	535	529	15
14	659	675	15
15	315	281	22
16	491	507	18
17	197	195	39
18	302	306	28

3 k 7

0	222	130	35
1	1343	1342	15
2	108	27	45
3	1306	1318	15
4	94	8	55
5	967	981	13
6	106	99	49
7	847	861	14
8	84	24	60
9	630	617	16
10	86	28	61
11	311	220	20
12	203	137	28
13	54	58	72
14	91	37	56
15	131	158	47
16	-73	19	71
17	245	227	32
18	135	7	52

3 k 8

1	103	72	47
2	299	297	23
3	-95	80	55
4	318	323	22
5	200	182	32
6	666	677	15
7	294	327	25
8	776	814	15
9	324	368	25
10	721	758	14
11	326	367	21
12	730	768	15
13	299	270	24
14	545	571	17
15	235	231	32
16	419	386	22
17	-103	176	67

3 k 9

0	702	726	20
1	693	712	14
2	886	887	14
3	585	600	15
4	865	871	14
5	749	777	15
6	771	773	16
7	528	542	18
8	577	591	18
9	48	151	77
10	335	303	21
11	164	215	39
12	99	92	56
13	103	29	54
14	125	7	49
15	114	161	58
16	-132	104	55

3 k 10

1	162	206	40
2	260	232	26
3	451	497	19
4	129	99	46
5	595	586	16
6	196	235	37
7	580	561	16
8	350	319	21
9	609	611	15
10	147	163	43
11	629	620	16
12	223	197	32
13	554	541	18
14	167	99	43
15	475	451	21

3 k 11

0	997	988	21
1	136	76	46
2	875	914	13
3	140	157	40
4	811	812	13
5	89	102	54
6	563	580	15
7	31	118	95
8	264	305	28
9	131	163	50
10	157	143	43
11	-20	20	107
12	94	46	64
13	-107	21	60
14	-10	113	122

3 k 12

1	182	182	33
2	118	98	45
3	250	278	26
4	226	231	28
5	391	369	18
6	308	288	23
7	430	433	19
8	360	318	23
9	448	423	21
10	374	347	24
11	415	405	23
12	227	270	38
13	328	345	30

3 k 13

0	328	341	31
1	626	657	15
2	255	274	26
3	605	606	15
4	195	241	34
5	534	509	16
6	114	165	53
7	326	361	26
8	140	60	51
9	159	149	49
10	126	27	56
11	56	87	91
12	189	23	42

3 k 14

1	75	11	66
2	155	168	44
3	84	76	64
4	204	214	35
5	106	78	57
6	354	343	24
7	38	39	97
8	382	425	25
9	43	27	101
10	398	387	25

3 k 15

0	190	205	53
1	376	416	23
2	238	247	32
3	359	375	23
4	275	218	28
5	336	343	26
6	163	119	46
7	198	282	42

3 k 16

1	-87	56	70
2	203	47	36

4 k 0

0	2118	2182	19
1	1085	1089	9
2	1671	1689	13
3	8	59	66
4	1306	1324	11
5	652	638	8
6	1384	1372	12
7	100	80	27
8	876	898	9
9	230	225	17
10	598	614	10
11	130	53	31
12	195	199	24
13	218	212	22
14	115	68	32
15	190	181	22
16	259	241	18
17	21	27	80
18	357	333	16
19	-87	72	50
20	348	336	18

4 k 1

1	210	241	20
2	685	654	10
3	1085	1099	11
4	231	207	17
5	1104	1110	12
6	170	102	23
7	1551	1570	15
8	85	93	48
9	1154	1154	14
10	724	749	14
11	924	907	14
12	255	279	27
13	1075	1075	15
14	278	234	21
15	665	689	14
16	295	296	23
17	504	496	18
18	-87	111	65
19	359	329	24
20	193	98	40

4 k 2

0	2553	2567	27
1	1503	1562	14
2	1390	1420	14
3	1779	1781	16
4	837	858	11
5	1120	1136	12
6	862	870	11
7	612	591	12
8	369	366	17
9	640	653	13
10	175	198	33
11	-32	68	86
12	-59	28	71
13	83	22	60
14	286	260	22
15	-93	23	52
16	162	191	38
17	169	224	39
18	138	207	50
19	173	178	42
20	358	323	38

4 k 3

1	295	333	17
2	461	479	13
3	216	172	20
4	1230	1240	13
5	551	541	12
6	1410	1380	14
7	699	716	12
8	1243	1262	14
9	305	306	21
10	1150	1188	14
11	223	170	29
12	933	944	15
13	354	343	23
14	831	840	14
15	179	189	34
16	633	622	15
17	183	151	37
18	380	396	23
19	-38	135	98

4 k 4

0	759	693	16
1	2048	2056	19
2	842	838	12
3	1592	1612	16
4	316	319	17
5	1575	1609	16
6	82	38	49
7	1120	1115	13
8	159	106	34
9	506	495	16
10	73	97	62
11	161	124	37
12	73	26	64
13	222	217	27
14	60	144	70
15	275	267	24
16	-62	34	72
17	248	243	30
18	-115	42	56
19	264	255	31

4 k 5

1	107	41	43
2	731	692	13
3	616	616	13
4	508	535	14

Supplementary material, page 67

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
D. 4489 Quan

J-4467-1168

5	781	781	12
6	738	765	13
7	565	575	14
8	885	914	14
9	567	578	16
10	544	569	16
11	436	470	19
12	860	849	16
13	415	387	17
14	685	671	14
15	364	373	20
16	434	429	19
17	265	301	30
18	363	327	24
19	179	161	46

4 k 6

0	1122	1101	18
1	764	771	13
2	1078	1098	14
3	575	537	14
4	999	1011	14
5	652	673	14
6	562	580	15
7	426	459	18
8	482	487	16
9	64	57	69
10	327	251	21
11	214	208	33
12	156	16	35
13	-94	56	52
14	-141	10	42
15	151	169	42
16	213	184	34
17	84	106	68
18	244	248	34

4 k 7

1	115	141	50
2	151	194	43
3	308	282	23
4	89	13	61
5	544	565	16
6	97	106	55
7	663	684	15
8	123	114	46
9	861	887	15
10	185	103	35
11	820	851	13
12	-65	116	67
13	689	698	14
14	-139	57	43
15	549	556	17
16	123	9	54
17	393	382	23

4 k 8

0	1038	1063	20
1	318	306	24
2	1029	1031	15
3	316	279	24
4	1109	1109	15
5	266	271	30
6	873	907	15
7	324	311	23
8	500	526	18
9	270	275	23
10	256	270	24
11	91	148	56
12	119	133	47
13	97	6	55
14	114	108	51
15	90	6	62
16	155	169	47
17	-141	49	51

4 k 9

1	336	312	24
2	274	194	26
3	488	488	19
4	364	361	23
5	458	470	21
6	428	412	20
7	601	588	16
8	524	516	15
9	481	504	16
10	498	504	16
11	483	479	17
12	441	475	19
13	378	415	21
14	407	387	22
15	261	271	32
16	316	330	29

4 k 10

0	359	344	32
1	990	1012	15
2	347	319	23
3	983	1004	15
4	236	251	33
5	796	809	14
6	325	292	23
7	553	573	15
8	100	107	52
9	297	324	23
10	92	59	57
11	124	157	49
12	-79	44	68
13	-110	6	57
14	153	97	47
15	-119	104	59

4 k 11

1	177	18	32
2	266	318	26
3	114	82	48
4	477	504	17
5	158	138	38
6	627	598	15
7	71	51	67
8	551	566	17
9	-76	105	67
10	554	550	17
11	75	101	72
12	488	471	20
13	-164	63	47
14	387	388	24

4 k 12

0	464	498	25
1	603	592	15
2	500	499	17
3	543	547	16
4	401	423	20
5	407	417	19
6	275	279	26
7	250	288	30
8	249	206	31
9	206	158	38
10	181	88	41
11	35	21	102
12	-108	21	63
13	134	47	55

4 k 13

1	85	84	61
2	-103	28	56
3	226	186	31
4	-57	90	76
5	291	275	25
6	179	170	39
7	356	363	24
8	158	190	47
9	394	383	25
10	188	200	46
11	349	374	29

4 k 14

0	567	553	25
1	129	27	51
2	482	524	19
3	-17	60	110
4	417	449	21
5	67	1	75
6	379	403	24
7	33	20	102
8	312	273	27
9	205	8	41

4 k 15

1	97	16	62
2	-69	24	78
3	164	123	43
4	60	98	83
5	171	226	44
6	41	78	96

5 k 0

1	136	180	20
2	505	504	8
3	266	291	12
4	535	563	8
5	356	390	10
6	1083	1089	10
7	564	549	9
8	1344	1350	12
9	255	280	17
10	1271	1293	12
11	165	118	26
12	1114	1124	12
13	255	270	20
14	737	750	10
15	-125	44	32
16	569	560	11
17	80	13	49
18	385	381	16
19	-71	15	57

5 k 1

0	426	382	17
1	2088	2126	19
2	660	662	11
3	1709	1696	16
4	710	705	11
5	1389	1414	14
6	309	306	17
7	748	762	12
8	413	422	16
9	308	334	22
10	190	191	31
11	221	220	29
12	144	145	42
13	-69	18	67
14	105	149	48
15	-14	136	102
16	79	48	60
17	338	305	23
18	129	132	51
19	333	324	27

5 k 2

1	183	143	23
2	372	375	14
3	582	614	12
4	967	958	12
5	785	807	12
6	786	821	12
7	463	499	15
8	944	968	13
9	1012	985	14
10	612	634	15
11	907	923	14
12	695	696	15
13	535	572	15
14	607	609	15
15	454	458	17
16	425	414	18
17	365	347	22
18	358	299	22
19	195	195	41

5 k 3

0	2079	2024	23
1	226	211	21
2	1845	1830	17
3	196	168	24
4	1789	1791	17
5	232	267	23
6	993	996	13
7	390	381	17
8	766	770	13
9	290	288	23
10	458	460	18
11	104	63	53
12	-71	57	69
13	29	115	85
14	120	36	44
15	140	167	42
16	202	204	33
17	-67	117	74
18	280	248	28
19	211	169	36

5 k 4

1	254	174	20
2	127	55	38
3	578	561	13
4	106	138	45
5	817	817	13
6	-87	26	52
7	945	944	13
8	180	209	35
9	1088	1084	14
10	127	175	47
11	983	986	15
12	-108	135	56
13	840	844	14
14	30	33	87
15	700	679	15
16	-120	78	50
17	499	460	18
18	-138	40	50
19	301	290	29

5 k 5

0	1062	1071	18
1	827	791	13
2	1040	1065	14
3	829	837	13
4	1007	1026	14
5	537	547	15
6	964	977	14
7	452	428	17
8	526	562	16
9	353	351	21
10	176	218	37

Supplementary material, page 68

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

11	228	166	31
12	129	21	40
13	158	25	36
14	154	186	39
15	88	35	60
16	231	209	32
17	108	131	61
18	278	226	30

5 k 6

1	216	117	30
2	93	41	57
3	297	304	26
4	539	502	16
5	337	328	22
6	517	538	17
7	588	584	16
8	600	632	16
9	462	460	18
10	744	755	16
11	469	454	16
12	601	612	15
13	437	447	18
14	570	551	16
15	277	273	27
16	481	481	19
17	227	188	33
18	230	262	36

5 k 7

0	367	340	29
1	1298	1285	16
2	392	370	22
3	1107	1097	15
4	231	194	31
5	684	672	16
6	172	101	38
7	523	515	16
8	182	149	35
9	495	498	18
10	106	160	48
11	62	76	66
12	52	64	75
13	-148	17	40
14	141	105	44
15	146	131	47
16	179	69	40
17	239	245	36

5 k 8

1	190	172	39
2	297	267	28
3	189	136	40
4	557	566	19
5	-107	59	58
6	761	759	16
7	96	199	61
8	719	743	13
9	235	258	27
10	754	764	14
11	264	213	24
12	571	606	16
13	214	207	33
14	530	506	17
15	136	177	51
16	334	366	28

5 k 9

0	769	781	23
1	814	830	16
2	803	793	16
3	750	762	17
4	609	599	18
5	684	684	18
6	534	498	16
7	423	460	18
8	361	414	20
9	105	192	53
10	150	205	41
11	80	82	63
12	-149	14	43
13	53	31	80
14	-55	9	83
15	194	132	38

5 k 10

1	149	96	49
2	197	187	40
3	429	448	19
4	100	118	57
5	597	621	16
6	110	197	56
7	602	601	16
8	171	221	38
9	561	562	15
10	169	154	39
11	491	514	18
12	147	162	47
13	459	424	20
14	136	124	53

5 k 11

0	783	769	19
1	248	254	28
2	774	796	14
3	237	201	29
4	632	644	16
5	79	33	67
6	515	476	18
7	-55	16	80
8	346	345	22
9	108	59	54
10	135	177	51
11	153	19	46
12	-23	28	108
13	-140	40	51

5 k 12

1	-130	85	49
2	81	83	64
3	235	205	30
4	257	207	29
5	271	287	28
6	262	248	31
7	346	301	24
8	240	251	33
9	274	350	30
10	314	296	27
11	372	370	25
12	228	226	37

5 k 13

0	188	263	55
1	466	467	19
2	263	240	29
3	502	480	18
4	177	230	43
5	447	436	21
6	214	168	37
7	316	307	28
8	81	95	79
9	-113	154	63
10	146	31	50

5 k 14

1	-69	35	79
2	42	109	97
3	130	17	52
4	156	148	49
5	-133	45	56
6	308	239	28
7	158	89	49
8	267	319	34

5 k 15

0	184	86	58
1	382	388	25
2	151	147	52
3	359	382	27
4	154	124	50

6 k 0

0	2011	2066	19
1	597	606	9
2	2037	2054	16
3	216	195	15
4	1663	1693	14
5	495	478	10
6	982	975	10
7	109	128	33
8	583	586	10
9	-67	55	50
10	325	336	16
11	57	102	57
12	59	80	57
13	168	143	24
14	135	15	29
15	164	132	25
16	274	274	18
17	134	45	35
18	326	344	19
19	-99	94	49

6 k 1

1	-85	104	45
2	113	132	38
3	736	770	12
4	691	665	12
5	842	849	12
6	240	259	24
7	962	983	13
8	203	222	29
9	1136	1158	14
10	488	439	16
11	1020	1039	15
12	101	136	57
13	775	775	13
14	97	74	50
15	544	566	17
16	270	231	25
17	372	370	23
18	105	117	59
19	255	249	33

6 k 2

0	1196	1248	17
1	1079	1107	13
2	1155	1166	13
3	1405	1402	15
4	812	843	12
5	704	715	13
6	644	678	13
7	463	444	16
8	412	393	18
9	408	438	19
10	344	312	21
11	97	104	55
12	142	117	45
13	145	110	38
14	80	33	57
15	-59	58	71
16	197	199	33
17	164	177	43
18	255	271	31
19	109	137	61

6 k 3

1	91	58	50
2	-148	41	34
3	-117	129	45
4	618	638	14
5	142	149	38
6	656	681	14
7	418	393	17
8	789	811	14
9	326	359	23
10	1027	1045	15
11	355	363	22
12	736	729	13
13	426	406	17
14	641	636	15
15	243	222	27
16	508	516	18
17	198	178	37
18	321	329	27

6 k 4

0	412	357	25
1	1309	1294	15
2	326	324	22
3	1328	1324	15
4	115	16	46
5	1218	1247	15
6	93	108	54
7	999	1018	14
8	189	14	33
9	807	833	15
10	26	86	94
11	248	260	30
12	101	78	49
13	135	57	40
14	152	142	40
15	207	140	31
16	115	63	52
17	243	233	33
18	41	29	95

6 k 5

1	113	153	54
2	225	255	32
3	148	86	42
4	385	403	20
5	236	202	28
6	723	727	15
7	273	280	26
8	859	871	15
9	376	386	21
10	762	771	16
11	399	418	18
12	740	742	14
13	359	355	20
14	610	608	16
15	303	322	25
16	367	393	24
17	271	250	31
18	262	265	32

6 k 6

0	957	1003	21
1	1010	998	15
2	1084	1085	15
3	596	589	17
4	826	843	15
5	458	473	19
6	617	619	16

Supplementary material, page 69

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m70

7	267	229	27
8	568	590	17
9	-140	27	46
10	323	329	21
11	159	35	36
12	-103	25	52
13	169	148	36
14	-118	20	48
15	163	176	42
16	140	117	50
17	163	156	45

6 k 7

1	-149	54	48
2	233	197	33
3	335	323	26
4	224	182	34
5	667	698	17
6	77	201	71
7	765	759	16
8	162	203	43
9	870	862	14
10	90	97	56
11	698	735	15
12	30	130	93
13	578	598	16
14	-75	55	69
15	498	506	20
16	-127	31	56

6 k 8

0	1247	1251	22
1	386	387	24
2	1095	1087	16
3	316	263	28
4	887	872	17
5	267	293	34
6	592	553	18
7	218	219	29
8	352	350	20
9	253	246	26
10	146	143	41
11	52	118	75
12	-93	23	58
13	-87	56	65
14	109	107	57
15	49	24	88
16	195	155	41

6 k 9

1	264	186	31
2	136	160	55
3	274	223	32
4	358	330	21
5	383	384	21
6	392	386	20
7	485	491	18
8	453	452	18
9	446	451	18
10	410	426	20
11	397	429	21
12	347	380	24
13	327	356	26
14	274	309	31
15	285	263	30

6 k 10

0	196	221	51
1	773	763	15
2	68	187	74
3	752	743	15
4	172	205	41
5	592	545	17
6	236	245	32
7	406	420	21
8	162	170	42
9	189	243	38
10	77	79	67
11	155	120	44
12	42	29	93
13	-157	11	47
14	-77	83	75

6 k 11

1	88	11	63
2	185	173	38
3	78	47	68
4	320	321	25
5	178	80	40
6	380	392	24
7	214	56	35
8	407	433	21
9	121	72	53
10	451	455	20
11	45	60	92
12	390	420	25

6 k 12

0	321	323	35
1	437	412	20
2	337	315	25
3	444	446	21
4	255	294	33
5	399	363	23
6	219	211	38
7	267	260	35
8	-151	176	53
9	107	147	63
10	190	116	40
11	121	43	56

6 k 13

1	-72	60	78
2	-72	74	78
3	-128	93	56
4	169	147	47
5	144	151	54
6	52	175	98
7	227	243	42
8	238	194	39
9	327	322	29

6 k 14

0	486	485	31
1	142	121	56
2	426	454	24
3	-73	64	82
4	480	399	21
5	-117	50	64
6	268	297	36

7 k 0

1	42	126	56
2	564	565	10
3	-40	44	57
4	930	952	10
5	76	70	43
6	936	959	10
7	79	107	45
8	992	1014	11
9	243	275	20
10	1000	1010	11
11	338	318	16
12	770	767	10
13	219	261	21
14	604	593	11
15	103	26	40
16	482	480	14
17	59	23	63
18	344	355	18

7 k 1

0	261	289	31
1	1411	1431	15
2	450	437	15
3	1339	1368	15
4	233	235	25
5	898	959	13
6	219	182	27
7	503	518	16
8	257	218	25
9	256	273	28
10	172	157	36
11	235	130	28
12	95	50	51
13	129	21	40
14	98	63	53
15	203	153	32
16	44	5	86
17	322	308	26
18	-154	40	47

7 k 2

1	113	110	47
2	136	150	40
3	368	377	18
4	328	321	21
5	514	519	15
6	502	531	16
7	385	420	20
8	731	761	15
9	449	489	19
10	723	734	15
11	495	515	18
12	684	673	14
13	305	337	23
14	446	461	18
15	380	357	21
16	348	355	24
17	320	321	27
18	235	228	36

7 k 3

0	991	1017	19
1	754	728	14
2	1168	1157	15
3	570	585	15
4	1015	1030	14
5	488	498	16
6	665	687	15
7	313	319	23
8	723	711	15
9	300	272	24
10	442	448	19
11	142	114	38
12	200	171	30
13	-144	85	42
14	93	57	55
15	139	87	43
16	-34	135	98
17	199	177	38
18	210	202	38

7 k 4

1	69	20	68
2	54	25	79
3	381	375	21
4	272	260	26
5	680	712	15
6	112	171	52
7	724	737	15
8	113	149	53
9	914	931	15
10	28	71	98
11	754	776	14
12	-105	8	49
13	664	686	15
14	-89	8	59
15	559	550	17
16	-165	18	44
17	410	383	23

7 k 5

0	1410	1425	22
1	506	465	19
2	1105	1108	15
3	496	463	19
4	1032	1018	15
5	527	568	19
6	857	840	15
7	378	353	20
8	586	587	17
9	227	253	33
10	304	308	22
11	198	183	31
12	-32	12	86
13	130	62	44
14	-129	120	48
15	-113	40	54
16	176	166	42
17	151	67	48

7 k 6

1	165	77	43
2	124	148	56
3	168	183	45
4	619	601	17
5	509	496	19
6	509	542	19
7	626	665	17
8	607	644	18
9	467	498	16
10	667	632	15
11	372	418	21
12	539	528	16
13	365	348	21
14	415	433	21
15	311	268	26
16	409	372	23

7 k 7

0	-30	155	133
1	1341	1337	17
2	161	199	48
3	1205	1175	17
4	106	68	62
5	666	620	17
6	-141	109	50
7	494	461	16
8	-124	42	45
9	314	329	23
10	61	89	70
11	127	81	48
12	26	84	94
13	-78	5	69
14	139	77	48
15	37	57	97
16	144	82	51

7 k 8

1	-135	117	56
2	109	157	65
3	160	119	49
4	401	408	25
5	235	197	30

Supplementary material, page 70

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m71

6	531	570	17
7	227	226	30
8	585	593	16
9	231	176	29
10	618	625	16
11	147	135	42
12	549	553	18
13	127	124	52
14	431	431	22
15	202	104	36

7 k 9

0	589	613	24
1	571	564	17
2	600	574	17
3	497	512	19
4	510	493	19
5	518	472	18
6	373	351	23
7	352	329	22
8	304	279	25
9	261	212	26
10	26	137	101
11	-118	48	54
12	80	43	69
13	144	26	50
14	119	6	59

7 k 10

1	47	14	85
2	81	42	68
3	223	190	34
4	-102	57	61
5	326	316	26
6	184	133	39
7	361	374	24
8	242	186	31
9	446	436	20
10	229	230	34
11	433	407	21
12	158	169	47
13	349	347	28

7 k 11

0	505	493	28
1	80	77	71
2	549	545	19
3	51	24	85
4	504	483	20
5	-143	16	52
6	401	392	24
7	-39	24	101
8	367	301	24
9	147	93	50
10	192	189	41
11	92	57	67

7 k 12

1	-138	66	53
2	69	11	82
3	211	210	41
4	80	90	79
5	250	260	37
6	50	135	97
7	277	270	35
8	134	163	59
9	373	337	26
10	191	172	43

7 k 13

0	155	293	76
1	387	389	26
2	353	320	27
3	367	369	28
4	182	242	49
5	355	328	30
6	-147	119	58
7	305	252	33
8	-164	39	66

7 k 14

1	44	39	106
2	107	91	72
3	188	51	46
4	190	142	48

8 k 0

0	1171	1158	14
1	177	154	24
2	1286	1300	12
3	200	207	23
4	1021	1045	11
5	264	273	18
6	661	677	11
7	89	51	43
8	623	621	11
9	138	117	33
10	274	270	20
11	76	42	44
12	18	56	79
13	131	44	31
14	79	79	47
15	139	84	32
16	238	212	23
17	133	167	39
18	270	237	22

8 k 1

1	143	21	40
2	201	227	33
3	365	388	21
4	228	225	29
5	576	582	16
6	272	221	24
7	627	640	15
8	-106	14	55
9	880	885	15
10	-74	24	67
11	768	803	14
12	91	94	54
13	689	665	14
14	110	102	52
15	561	539	17
16	150	202	47
17	403	372	23
18	113	119	61

8 k 2

0	1193	1214	20
1	327	380	23
2	1014	1010	14
3	659	653	15
4	761	786	14
5	559	576	16
6	494	510	18
7	532	535	17
8	288	292	26
9	451	466	19
10	213	178	33
11	163	193	36
12	49	74	74
13	-108	52	51
14	73	108	65
15	64	15	74
16	227	227	33
17	109	134	61

8 k 3

1	133	39	47
2	155	33	41
3	356	363	23
4	548	534	17
5	508	539	18
6	447	436	19
7	543	541	17
8	591	605	17
9	435	447	21
10	742	780	14
11	342	355	21
12	590	569	15
13	229	246	31
14	496	488	17
15	209	210	36
16	397	423	23
17	118	138	58

8 k 4

0	263	265	43
1	1155	1128	16
2	315	347	27
3	1202	1185	16
4	110	84	56
5	965	950	15
6	-99	19	58
7	699	732	16
8	113	39	53
9	447	482	17
10	-73	65	63
11	-69	107	66
12	134	119	44
13	28	14	93
14	28	62	95
15	203	130	35
16	-86	49	67
17	118	217	61

8 k 5

1	-51	116	91
2	413	407	22
3	224	230	35
4	586	601	18
5	312	215	24
6	774	782	16
7	190	162	37
8	715	712	14
9	253	263	27
10	587	610	15
11	345	322	21
12	499	530	18
13	267	250	27
14	426	435	21
15	245	218	33
16	303	305	28

8 k 6

0	835	805	24
1	749	735	17
2	1004	983	17
3	485	479	21
4	835	800	17
5	418	391	22
6	538	500	19
7	221	224	29
8	404	387	19
9	95	163	56
10	172	169	37
11	68	36	67
12	-51	32	77
13	156	36	43
14	-130	33	52
15	133	100	51
16	68	99	81

8 k 7

1	-102	41	66
2	123	47	58
3	481	448	22
4	-128	25	59
5	599	575	16
6	43	46	83
7	558	577	17
8	-58	106	75
9	613	622	16
10	135	135	45
11	507	545	18
12	190	120	37
13	488	445	19
14	216	110	35
15	409	384	23

8 k 8

0	860	840	20
1	339	315	24
2	812	788	15
3	268	246	30
4	691	663	16
5	264	241	29
6	524	482	18
7	148	141	45
8	325	297	23
9	192	136	35
10	123	195	54
11	-106	54	59
12	169	47	42
13	16	39	113
14	-44	29	95

8 k 9

1	130	57	50
2	83	77	67
3	-33	100	101
4	219	195	35
5	256	212	31
6	231	209	33
7	303	335	28
8	236	248	32
9	386	405	23
10	238	265	35
11	417	397	22
12	276	234	30
13	339	313	26

8 k 10

0	271	279	44
1	539	494	20
2	252	277	33
3	511	454	20
4	274	254	31
5	477	420	20
6	232	186	36
7	410	355	23
8	-169	111	48
9	223	263	38
10	166	17	44
11	166	115	48
12	237	5	33

8 k 11

1	-173	72	45
2	184	127	44
3	-119	52	61
4	258	243	36
5	123	36	62
6	350	360	30

Supplementary material, page 71

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m 7/2

7	-77	40	83
8	410	377	25
9	-169	33	49
10	400	361	24

8 k 12

0	268	208	47
1	498	461	22
2	290	222	34
3	506	448	22
4	247	199	38
5	350	305	30
6	239	208	41
7	152	216	59
8	-58	210	99

8 k 13

1	-108	68	71
2	-130	64	66
3	70	129	92
4	151	147	57
5	258	195	39

9 k 0

1	109	17	38
2	197	195	25
3	114	85	38
4	446	418	13
5	166	165	28
6	520	542	12
7	181	184	27
8	568	564	12
9	337	325	17
10	685	708	11
11	323	314	15
12	581	598	11
13	214	208	23
14	586	589	12
15	79	125	54
16	452	445	15
17	-36	75	81

9 k 1

0	89	102	82
1	988	996	15
2	225	200	32
3	981	974	15
4	163	191	41
5	883	926	15
6	241	257	29
7	625	657	17
8	166	227	40
9	360	364	19
10	192	198	32
11	-50	123	74
12	150	176	40
13	66	47	66
14	177	117	38
15	229	194	34
16	129	94	54
17	249	242	34

9 k 2

1	91	23	61
2	305	264	25
3	173	211	42
4	445	427	19
5	246	242	30
6	593	592	17
7	226	223	32
8	682	707	17
9	389	388	19
10	682	683	14
11	449	461	18
12	611	600	15
13	314	338	25
14	450	418	19
15	319	332	27
16	293	292	29
17	262	248	32

9 k 3

0	748	714	22
1	654	671	17
2	996	963	15
3	583	607	18
4	936	926	16
5	362	332	24
6	676	687	17
7	-160	105	45
8	481	480	16
9	-77	18	61
10	234	219	28
11	44	120	82
12	50	44	76
13	142	137	43
14	118	35	53
15	87	124	68
16	106	162	63

9 k 4

1	241	237	33
2	-98	31	66
3	509	565	21
4	223	283	37
5	643	617	17
6	159	104	43
7	629	636	16
8	95	36	54
9	666	662	15
10	-108	9	50
11	619	620	15
12	-91	27	58
13	497	512	18
14	-71	5	74
15	399	372	23
16	48	17	91

9 k 5

0	802	826	24
1	400	331	23
2	681	681	18
3	397	370	24
4	758	753	17
5	376	333	24
6	634	613	15
7	162	172	39
8	315	330	23
9	106	83	52
10	169	171	38
11	56	59	76
12	-116	13	53
13	149	54	45
14	178	130	42
15	125	20	57

9 k 6

1	-84	48	74
2	221	226	40
3	191	158	43
4	453	443	18
5	298	296	25
6	353	372	22
7	407	331	19
8	445	405	18
9	405	372	19
10	416	405	20
11	313	311	26
12	303	334	28
13	278	282	30
14	314	314	28
15	247	220	35

9 k 7

0	127	75	70
1	766	752	15
2	-39	125	92
3	704	671	16
4	167	98	41
5	594	553	16
6	70	43	70
7	437	414	19
8	74	92	70
9	315	322	26
10	-107	4	58
11	207	167	36
12	112	26	58
13	106	16	60
14	-167	37	46

9 k 8

1	116	7	55
2	80	95	71
3	75	39	72
4	286	253	28
5	96	37	61
6	380	369	23
7	162	56	43
8	417	431	21
9	141	57	48
10	412	437	22
11	108	32	59
12	449	438	22
13	180	85	44

9 k 9

0	379	317	33
1	540	532	19
2	374	269	24
3	499	499	21
4	307	292	29
5	373	350	24
6	349	293	25
7	298	306	30
8	230	251	38
9	159	189	50
10	-94	131	69
11	122	42	58
12	60	45	88

9 k 10

1	-122	39	60
2	146	81	54
3	134	82	55
4	112	178	65
5	325	235	30
6	247	238	38
7	348	325	29
8	245	245	38
9	276	308	34
10	251	198	34

9 k 11

0	589	541	29
1	106	43	72
2	546	499	21
3	-192	11	46
4	471	425	24
5	40	15	108
6	370	335	31
7	189	54	48
8	292	261	34
9	154	73	54

9 k 12

1	123	48	66
2	125	45	64
3	189	223	51
4	209	118	46
5	320	302	34
6	295	122	33

9 k 13

0	107	237	100
1	370	340	32

10 k 0

0	887	864	16
1	257	227	21
2	860	836	12
3	455	434	14
4	828	845	12
5	284	271	18
6	677	689	12
7	234	228	23
8	527	519	11
9	110	121	36
10	207	280	23
11	93	89	43
12	188	132	25
13	114	132	39
14	124	10	38
15	99	118	47
16	112	88	45

10 k 1

1	223	231	34
2	67	28	75
3	373	378	24
4	-66	63	74
5	558	553	17
6	74	12	70
7	644	632	17
8	90	13	56
9	694	692	15
10	-99	21	54
11	691	692	15
12	108	67	52
13	556	556	18
14	125	93	52
15	487	422	19
16	-39	108	99

10 k 2

0	928	915	22
1	643	657	18
2	892	880	16
3	742	739	16
4	781	769	16
5	487	493	20
6	397	425	24
7	446	455	17
8	214	176	29
9	272	304	26
10	-31	36	91
11	126	189	48
12	-155	60	42
13	-90	85	64
14	81	96	70
15	-99	26	65
16	164	181	48

10 k 3

Supplementary material, page 72

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m73

1	-126	33	55
2	244	191	33
3	368	359	24
4	465	465	21
5	342	347	25
6	494	499	17
7	170	200	37
8	585	576	16
9	360	335	20
10	570	596	17
11	280	290	26
12	441	461	20
13	218	217	34
14	328	343	27
15	251	179	32

10 k 4

0	85	170	101
1	855	827	11
2	-108	10	64
3	852	793	17
4	70	40	79
5	710	678	15
6	131	1	44
7	426	377	18
8	122	24	46
9	179	192	37
10	-122	38	49
11	-108	46	56
12	-30	100	97
13	-100	69	62
14	94	59	67
15	96	105	67

10 k 5

1	66	50	71
2	212	229	33
3	-6	151	119
4	367	360	22
5	205	199	35
6	375	386	21
7	171	158	38
8	418	424	20
9	157	184	42
10	423	427	20
11	203	137	36
12	405	401	22
13	146	149	48
14	344	340	27

10 k 6

0	517	465	26
1	366	302	22
2	488	460	20
3	332	352	25
4	396	410	22
5	324	341	24
6	306	298	26
7	334	321	24
8	265	272	30
9	196	216	37
10	200	183	38
11	-176	25	42
12	-13	87	120
13	219	70	35
14	128	35	56

10 k 7

1	-67	31	76
2	196	36	37
3	-82	158	70
4	144	95	48
5	236	290	36
6	172	157	42
7	386	345	21
8	235	171	32
9	378	384	25
10	141	168	52
11	392	401	25
12	178	123	43
13	387	351	25

10 k 8

0	552	570	28
1	-79	16	75
2	628	582	18
3	36	69	99
4	545	511	20
5	53	89	89
6	418	420	24
7	105	120	64
8	367	327	24
9	-62	84	84
10	159	174	48
11	33	79	104
12	-108	11	65

10 k 9

1	-170	14	47
2	-149	37	52
3	112	182	66
4	173	65	46
5	347	292	27
6	-102	105	71
7	371	347	28
8	190	176	46
9	395	337	24
10	180	209	47

10 k 10

0	300	299	45
1	506	450	22
2	247	248	39
3	397	375	27
4	205	164	45
5	355	354	30
6	70	144	90
7	243	237	40
8	150	79	57
9	101	148	70

10 k 11

1	-172	46	53
2	234	134	42
3	-77	23	88
4	261	263	41
5	-181	38	53
6	336	312	33
7	139	48	62

10 k 12

0	263	188	55
1	334	329	36
2	229	187	45
3	347	335	34

11 k 0

1	41	50	74
2	88	129	51
3	367	388	17
4	269	260	22
5	342	347	15
6	466	451	12
7	273	256	18
8	502	525	12
9	268	278	19
10	536	547	12
11	202	203	24
12	480	469	14
13	173	113	30
14	406	391	16
15	-83	73	56

11 k 1

0	84	150	93
1	1000	982	17
2	157	120	47
3	819	822	17
4	102	77	53
5	691	683	15
6	159	119	38
7	423	402	18
8	273	198	23
9	252	241	28
10	150	135	42
11	65	116	75
12	129	91	52
13	-23	23	106
14	147	60	49
15	-105	84	63

11 k 2

1	58	14	85
2	212	244	40
3	115	155	52
4	358	359	21
5	309	303	24
6	425	428	19
7	309	308	24
8	482	483	18
9	317	307	25
10	491	500	18
11	265	248	29
12	356	392	25
13	268	204	31
14	324	321	28
15	298	221	29

11 k 3

0	898	858	20
1	368	343	21
2	854	843	15
3	332	377	24
4	615	585	16
5	215	249	33
6	416	381	19
7	130	101	46
8	198	265	38
9	-64	42	73
10	133	166	49
11	177	17	40
12	172	74	41
13	-121	21	57
14	70	24	78

11 k 4

1	-45	96	85
2	-87	32	62
3	244	261	31
4	-104	76	57
5	343	336	23
6	98	14	57
7	418	422	20
8	-123	18	51
9	470	432	18
10	-141	49	49
11	426	436	22
12	90	53	67
13	377	378	25
14	201	39	39

11 k 5

0	572	517	25
1	293	247	26
2	502	485	19
3	234	206	32
4	463	473	20
5	166	147	41
6	407	424	22
7	-122	105	53
8	268	265	28
9	-116	76	57
10	135	132	53
11	169	102	44
12	-60	6	85
13	162	123	48

11 k 6

1	-141	36	49
2	-94	91	66
3	166	144	44
4	197	126	38
5	-57	246	88
6	174	167	41
7	358	331	24
8	246	210	33
9	387	333	22
10	288	264	30
11	295	276	30
12	230	254	38

11 k 7

0	358	270	33
1	508	499	21
2	240	194	34
3	533	484	20
4	206	160	38
5	503	459	20
6	150	112	49
7	340	335	27
8	50	50	92
9	340	254	27
10	-44	42	99
11	125	132	60

11 k 8

1	76	7	79
2	132	129	57
3	85	15	75
4	302	287	32
5	153	83	52
6	401	328	25
7	-91	28	76
8	365	364	28
9	187	38	44
10	415	368	24

11 k 9

0	284	285	53
1	451	445	26
2	318	252	32
3	429	369	25
4	250	263	42
5	280	248	35
6	336	228	29
7	308	175	30
8	176	100	48
9	160	72	54

11 k 10

1	213	59	43

Supplementary material, page 73

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m74

2	-59	74	98
3	187	125	51
4	93	114	83
5	201	194	51
6	20	159	127

11 k 11

0	402	360	41
1	-59	67	100
2	397	347	30
3	184	38	52

12 k 0

0	669	643	15
1	265	276	20
2	640	606	11
3	334	308	16
4	482	454	13
5	196	155	25
6	454	445	14
7	-126	73	36
8	286	299	19
9	72	14	53
10	156	149	32
11	48	47	68
12	145	33	35
13	-34	87	81
14	171	93	33

12 k 1

1	130	105	48
2	43	7	84
3	160	214	43
4	-165	27	40
5	396	391	20
6	54	68	77
7	514	513	17
8	-158	2	42
9	465	453	19
10	141	6	47
11	424	390	21
12	144	3	50
13	365	352	26
14	-237	57	56

12 k 2

0	683	690	22
1	425	425	21
2	591	567	17
3	310	325	26
4	439	443	20
5	187	222	39
6	283	288	26
7	224	203	32
8	197	226	38
9	136	165	51
10	229	170	33
11	105	93	62
12	72	93	80
13	-96	51	67

12 k 3

1	-79	13	69
2	-134	56	48
3	136	71	47
4	160	171	42
5	95	151	61
6	259	271	30
7	190	166	37
8	315	305	25
9	245	273	33
10	309	320	29
11	182	272	45
12	277	303	33
13	199	220	42

12 k 4

0	-71	59	97
1	599	557	17
2	185	89	37
3	600	531	18
4	145	102	46
5	447	438	21
6	63	24	78
7	393	335	22
8	-197	27	41
9	172	208	45
10	191	24	39
11	143	124	53
12	84	83	76

12 k 5

1	-113	32	59
2	177	107	43
3	-149	28	49
4	207	215	39
5	-91	36	67
6	285	274	29
7	-109	28	62
8	402	376	23
9	93	69	66
10	411	386	23
11	156	109	49

12 k 6

0	353	326	36
1	463	414	22
2	406	316	23
3	432	367	23
4	362	349	27
5	402	318	23
6	317	287	29
7	179	188	48
8	211	220	42
9	193	62	42
10	111	176	67
11	148	26	52

12 k 7

1	-186	57	47
2	115	103	65
3	120	182	65
4	112	168	68
5	284	250	35
6	91	187	77
7	257	264	36
8	138	158	59
9	367	342	27

12 k 8

0	569	482	29
1	-164	20	54
2	542	491	22
3	-185	46	50
4	521	421	23
5	-107	96	74
6	337	259	30
7	78	91	82
8	83	154	83

12 k 9

1	105	47	75
2	145	69	60
3	252	138	40
4	110	84	73
5	254	187	39
6	179	122	52

12 k 10

0	69	124	125
1	413	340	29
2	181	109	55

13 k 0

1	37	6	73
2	-59	127	61
3	50	74	65
4	307	272	18
5	185	171	27
6	398	374	15
7	180	160	28
8	357	372	18
9	62	165	64
10	319	295	19
11	153	139	35
12	273	285	24

13 k 1

0	-92	37	89
1	556	514	18
2	107	13	57
3	420	428	21
4	-52	47	83
5	322	330	26
6	-60	36	79
7	302	314	28
8	106	25	60
9	220	182	36
10	-53	13	87
11	65	102	80
12	-44	42	99

13 k 2

1	-47	56	88
2	-148	56	48
3	130	88	50
4	107	133	59
5	218	165	35
6	283	253	28
7	117	94	56
8	331	329	26
9	192	71	41
10	336	339	27
11	-176	82	44
12	317	306	30

13 k 3

0	295	342	40
1	327	328	26
2	361	364	25
3	315	302	27
4	358	315	24
5	261	267	32
6	249	241	34
7	-120	159	61
8	264	239	32
9	208	120	39
10	191	169	43
11	-174	33	47

13 k 4

1	130	19	54
2	113	41	59
3	132	109	54
4	96	105	66
5	131	165	57
6	130	99	58
7	236	255	36
8	156	107	50
9	379	354	26
10	-104	132	69

13 k 5

0	474	453	33
1	33	97	108
2	474	450	23
3	202	103	41
4	482	415	23
5	90	137	76
6	373	332	27
7	174	144	48
8	233	158	37
9	152	120	52
10	79	74	77

13 k 6

1	177	80	49
2	-173	48	52
3	234	178	38
4	128	104	62
5	235	199	41
6	195	154	45
7	309	264	31
8	204	201	45

13 k 7

0	205	173	64
1	473	406	25
2	-144	158	61
3	416	398	28
4	188	128	50
5	372	310	29
6	161	63	53
7	294	206	33

13 k 8

1	79	15	89
2	111	113	74
3	-83	24	88
4	223	188	45
5	98	25	75

14 k 0

0	419	386	22
1	205	142	27
2	406	387	16
3	177	115	30
4	344	331	19
5	122	82	42
6	332	303	19
7	90	66	54
8	209	185	29
9	-60	57	66
10	79	93	60

14 k 1

1	68	75	79
2	164	42	43
3	254	176	30
4	-142	8	51
5	292	225	28
6	-71	38	80
7	341	311	26
8	81	72	74
9	220	257	40
10	32	73	106

14 k 2

Supplementary material, page 74

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan

J-4490-m-75

0	405	398	36
1	90	113	71
2	366	364	27
3	145	123	52
4	372	313	26
5	-140	117	54
6	299	285	31
7	-46	139	98
8	157	178	51
9	133	148	58
10	114	106	65

14 k 3

1	153	42	51
2	165	41	48
3	188	117	44
4	115	106	63
5	242	177	36
6	252	165	36
7	200	209	44
8	269	167	32
9	281	256	34

14 k 4

0	220	105	55
1	439	392	25
2	104	117	69
3	412	361	25
4	143	107	56
5	367	314	28
6	-76	9	83
7	216	228	44
8	-137	39	57

14 k 5

1	73	9	88
2	101	120	74
3	-161	15	56
4	268	183	35
5	-79	17	83
6	215	255	45
7	99	72	74

14 k 6

0	337	287	44
1	282	261	38
2	353	271	31
3	295	235	34
4	209	213	49
5	220	184	45

14 k 7

1	-142	51	65
2	-123	29	68
3	156	143	58

15 k 0

1	-107	14	49
2	106	89	49
3	151	76	37
4	-90	114	57
5	233	149	26
6	125	162	46
7	41	115	82
8	138	171	43

15 k 1

0	-182	21	61
1	389	336	26
2	-81	15	78
3	318	313	31
4	-118	9	63
5	374	319	27
6	201	34	41
7	326	279	30

15 k 2

1	138	11	57
2	-65	98	90
3	-112	8	66
4	257	181	35
5	-173	44	51
6	236	249	40
7	96	34	72

15 k 3

0	213	240	64
1	278	258	36
2	215	239	45
3	176	237	53
4	308	216	32
5	34	139	112
6	214	189	42

15 k 4

1	-140	43	63
2	-94	55	79
3	109	107	72
4	90	101	80
5	168	206	56

15 k 5

0	301	317	52
1	-59	108	101
2	325	275	33

16 k 0

0	346	270	29
1	190	126	34
2	304	259	23
3	145	143	42
4	275	248	25

16 k 1

1	46	45	104
2	59	29	96
3	123	83	66

16 k 2

0	418	303	36
1	231	98	40

© 1994 Am. Chem. Soc.
J. Am. Chem. Soc. v 116
p. 4489 Quan