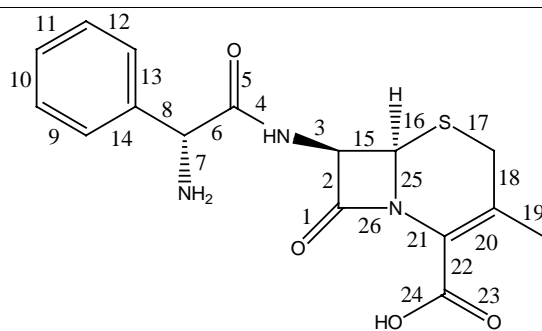


Table S1. Bond Contributions to HSA

No.	Structure	Bond	Contribution
1		1	-0.203
		2	0.052
		3	-0.052
		4	-0.039
		5	-0.201
		6	0.081
		7	0.066
		8	-0.074
		9	0.034
		10	0.100
		11	0.109
		12	0.078
		13	0.039
		14	0.054
		15	0.105
		16	0.036
		17	-0.010
		18	-0.004
		19	0.049
		20	-0.049
		21	-0.009
		22	-0.203
		23	-0.150
		24	0.019
		25	0.087
		26	0.068
		27	0.065
		28	-0.197
		29	-0.021
		30	0.045
		31	0.061
2		1	-0.201
		2	0.057
		3	-0.051
		4	-0.038
		5	-0.201
		6	0.012
		7	-0.171
		8	0.045
		9	0.107
		10	0.066
		11	-0.039
		12	0.066
		13	0.107
		14	0.116

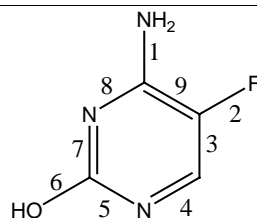
15	0.116
16	0.039
17	-0.003
18	-0.001
19	0.145
20	0.145
21	0.051
22	-0.005
23	0.037
24	-0.198
25	-0.023
26	0.001
27	0.019

3

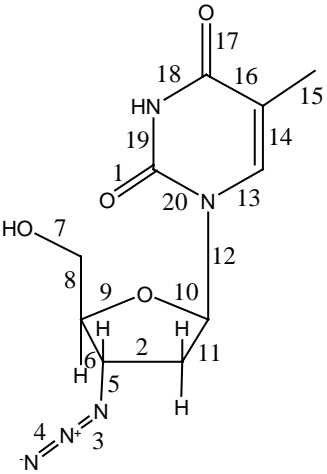


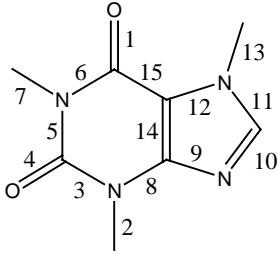
1	-0.203
2	0.052
3	-0.052
4	-0.039
5	-0.201
6	0.012
7	-0.171
8	0.045
9	0.105
10	0.104
11	0.104
12	0.105
13	0.116
14	0.116
15	0.036
16	-0.010
17	-0.004
18	0.044
19	0.107
20	0.081
21	0.067
22	0.064
23	-0.197
24	-0.021
25	0.044
26	0.061

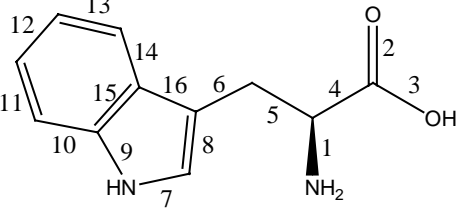
4

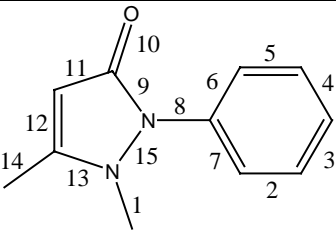
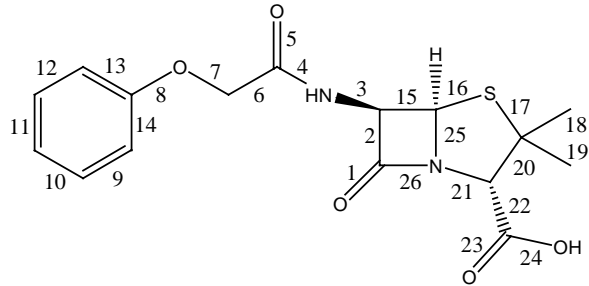


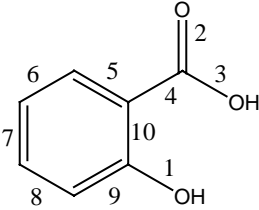
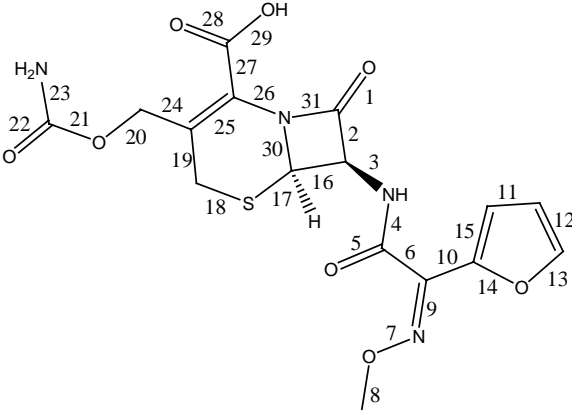
1	-0.065
2	0.091
3	0.055
4	-0.050
5	-0.070
6	-0.227
7	-0.086
8	-0.054
9	0.077

5		
	1	-0.201
	2	0.074
	3	-0.044
	4	-0.067
	5	0.027
	6	0.045
	7	-0.158
	8	0.045
	9	-0.050
	10	-0.064
	11	0.070
	12	0.051
	13	0.052
	14	0.053
	15	0.108
	16	0.075
	17	-0.201
	18	-0.037
	19	-0.038
	20	0.070

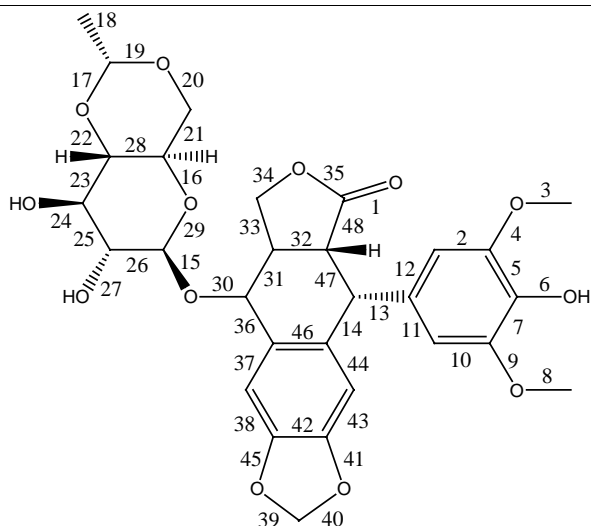
6		
	1	-0.202
	2	0.012
	3	0.017
	4	-0.227
	5	0.022
	6	0.046
	7	0.015
	8	0.074
	9	-0.044
	10	-0.093
	11	0.025
	12	0.044
	13	0.010
	14	0.098
	15	0.062

7		
	1	-0.140
	2	-0.196
	3	-0.019
	4	0.035
	5	0.021
	6	0.052
	7	-0.021
	8	0.049
	9	-0.016
	10	0.073
	11	0.105
	12	0.103
	13	0.104
	14	0.113

		15	0.087
		16	0.104
8	See annexes		
9		1	-0.069
		2	0.106
		3	0.104
		4	0.104
		5	0.106
		6	0.079
		7	0.079
		8	-0.021
		9	-0.019
		10	-0.204
		11	0.085
		12	0.108
		13	-0.012
		14	0.117
		15	-0.062
10		1	-0.201
		2	0.057
		3	-0.050
		4	-0.041
		5	-0.204
		6	0.001
		7	-0.049
		8	-0.008
		9	0.106
		10	0.104
		11	0.104
		12	0.106
		13	0.076
		14	0.076
		15	0.039
		16	-0.003
		17	-0.001
		18	0.145
		19	0.145
		20	0.051
		21	-0.005
		22	0.037
		23	-0.198
		24	-0.023
		25	0.001
		26	0.019

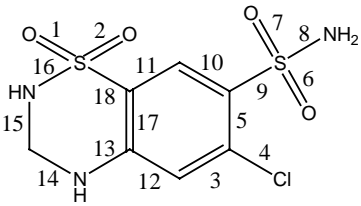
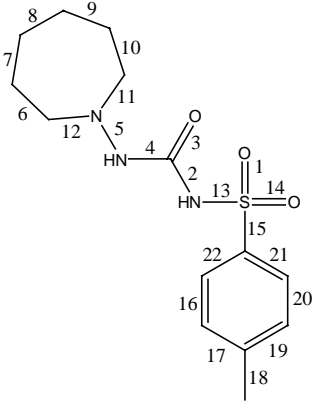
11		1	-0.038
		2	-0.197
		3	-0.021
		4	0.094
		5	0.120
		6	0.105
		7	0.104
		8	0.105
		9	0.068
		10	0.087
12		1	-0.203
		2	0.052
		3	-0.052
		4	-0.039
		5	-0.201
		6	0.081
		7	0.066
		8	-0.074
		9	0.034
		10	0.100
		11	0.109
		12	0.078
		13	0.039
		14	0.054
		15	0.105
		16	0.036
		17	-0.010
		18	-0.004
		19	0.049
		20	-0.049
		21	-0.009
22	-0.203		
23	-0.150		
24	0.019		
25	0.087		
26	0.068		
27	0.065		
28	-0.197		
29	-0.021		
30	0.045		
31	0.061		

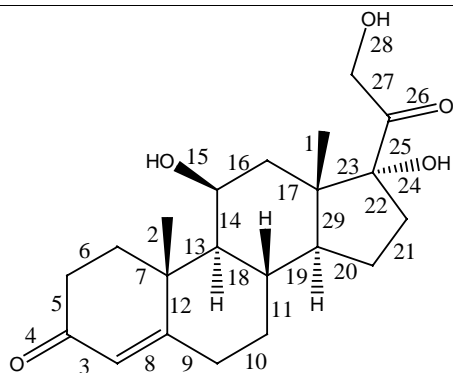
13



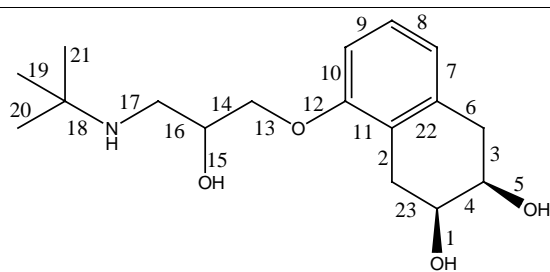
1	-0.203
2	0.079
3	-0.027
4	-0.004
5	0.051
6	-0.033
7	0.051
8	-0.027
9	-0.004
10	0.079
11	0.113
12	0.113
13	0.064
14	0.062
15	-0.063
16	-0.051
17	-0.069
18	0.139
19	-0.070
20	-0.040
21	0.052
22	-0.047
23	0.050
24	-0.174
25	0.042
26	0.038
27	-0.173
28	0.055
29	-0.063
30	-0.061
31	0.067
32	0.083
33	0.081
34	0.005
35	-0.002
36	0.075
37	0.112
38	0.078
39	0.001
40	0.001
41	-0.004
42	0.056
43	0.077
44	0.111
45	-0.004
46	0.117
47	0.032
48	0.062

14		1	-0.180
		2	-0.038
		3	-0.061
		4	0.144
		5	0.144
		6	0.038
		7	0.040
		8	0.005
		9	-0.009
		10	0.107
		11	0.113
		12	0.009
		13	-0.206
		14	-0.153
		15	0.054
		16	0.113
		17	0.107
		18	0.075
		19	0.075
15		1	-0.133
		2	-0.041
		3	-0.202
		4	-0.045
		5	-0.036
		6	0.081
		7	0.188
		8	0.042
		9	-0.133
		10	0.045
		11	0.105
		12	0.108
		13	0.220
		14	0.108
		15	0.105
		16	0.113
		17	0.113
16		1	-0.187
		2	-0.038
		3	-0.061
		4	0.144
		5	0.144
		6	0.031
		7	0.071
		8	0.106
		9	0.073
		10	0.068
		11	-0.137
		12	-0.137

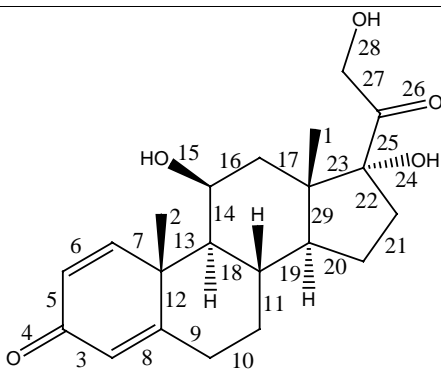
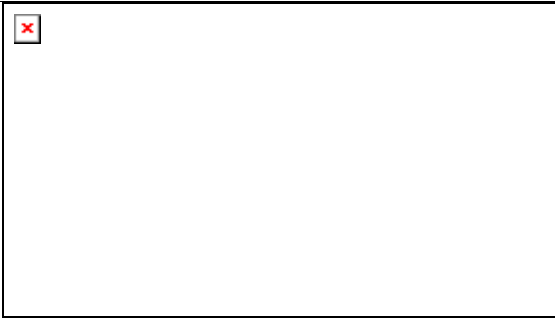
		13	0.039
		14	-0.014
		15	0.073
		16	0.106
		17	0.115
		18	0.115
17		1	-0.136
		2	-0.136
		3	0.107
		4	0.216
		5	0.117
		6	-0.140
		7	-0.140
		8	0.134
		9	0.040
		10	0.112
		11	0.113
		12	0.073
		13	-0.019
		14	-0.011
		15	-0.009
		16	0.062
		17	0.085
		18	0.040
18		1	-0.133
		2	-0.040
		3	-0.201
		4	-0.037
		5	-0.029
		6	0.084
		7	0.110
		8	0.110
		9	0.110
		10	0.084
		11	-0.018
		12	-0.018
		13	0.042
		14	-0.133
		15	0.045
		16	0.105
		17	0.109
		18	0.124
		19	0.109
		20	0.105
		21	0.113
		22	0.113

19

1	0.125
2	0.144
3	0.059
4	-0.203
5	0.041
6	0.066
7	0.078
8	0.066
9	0.045
10	0.063
11	0.093
12	0.066
13	0.070
14	0.052
15	-0.183
16	0.056
17	0.062
18	0.080
19	0.067
20	0.078
21	0.103
22	0.066
23	0.037
24	-0.182
25	0.067
26	-0.196
27	0.004
28	-0.213
29	0.038

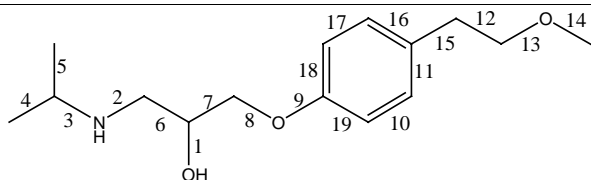
20

1	-0.178
2	0.075
3	0.026
4	0.032
5	-0.178
6	0.072
7	0.110
8	0.104
9	0.104
10	0.075
11	0.087
12	-0.009
13	0.004
14	0.040
15	-0.180
16	0.038
17	-0.039
18	-0.052
19	0.150

		20	0.150
		21	0.150
		22	0.121
		23	0.026
21		1	0.125
		2	0.143
		3	0.059
		4	-0.203
		5	0.058
		6	0.094
		7	0.087
		8	0.064
		9	0.043
		10	0.063
		11	0.093
		12	0.063
		13	0.066
		14	0.049
		15	-0.183
		16	0.056
		17	0.062
		18	0.077
		19	0.067
		20	0.078
		21	0.103
		22	0.066
		23	0.037
		24	-0.182
		25	0.067
		26	-0.196
		27	0.004
		28	-0.213
		29	0.038
22		1	-0.018
		2	0.009
		3	0.077
		4	0.074
		5	0.002
		6	-0.202
		7	0.043
		8	-0.158
		9	0.028
		10	0.073
		11	0.104
		12	0.104
		13	0.104
		14	0.104
		15	0.114

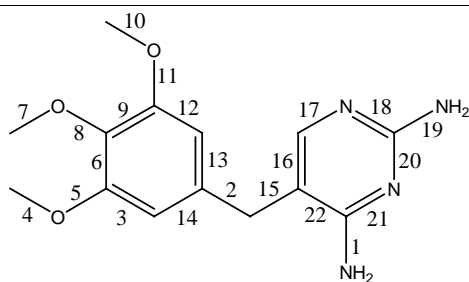
	16	0.114
	17	-0.012
	18	0.074
	19	0.077
	20	0.050
	21	-0.039
	22	-0.039
	23	0.068
	24	0.050
	25	0.009

23

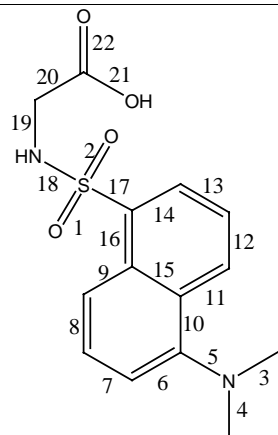
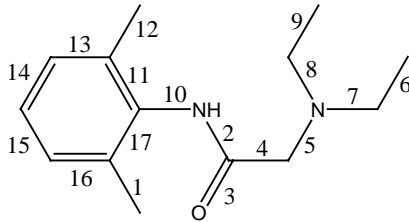


	1	-0.180
	2	-0.038
	3	-0.061
	4	0.144
	5	0.144
	6	0.038
	7	0.040
	8	0.005
	9	-0.009
	10	0.106
	11	0.112
	12	0.037
	13	-0.042
	14	-0.073
	15	0.071
	16	0.112
	17	0.106
	18	0.075
	19	0.075

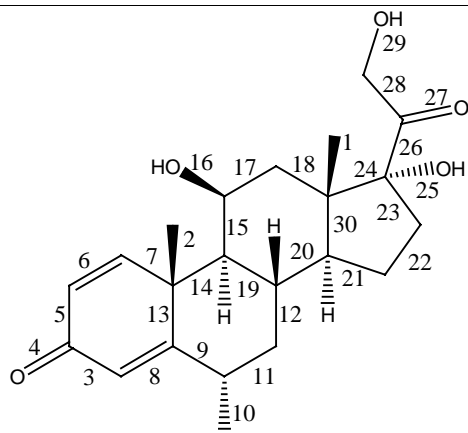
24



	1	-0.035
	2	0.050
	3	0.079
	4	-0.027
	5	-0.005
	6	0.060
	7	-0.027
	8	-0.001
	9	0.060
	10	-0.027
	11	-0.005
	12	0.079
	13	0.113
	14	0.113
	15	0.056
	16	0.091
	17	-0.076
	18	-0.086
	19	-0.067

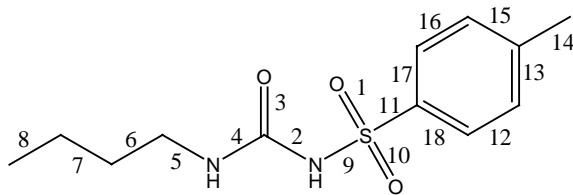
		20	-0.084
		21	-0.047
		22	0.125
25		1	-0.137
		2	-0.137
		3	0.030
		4	0.030
		5	0.058
		6	0.075
		7	0.103
		8	0.103
		9	0.106
		10	0.082
		11	0.108
		12	0.103
		13	0.102
		14	0.110
		15	0.112
		16	0.113
		17	0.035
		18	0.064
		19	-0.054
		20	-0.008
		21	-0.023
		22	-0.200
26		1	0.126
		2	-0.042
		3	-0.205
		4	0.003
		5	-0.032
		6	0.161
		7	0.019
		8	0.019
		9	0.161
		10	-0.043
		11	0.085
		12	0.126
		13	0.111
		14	0.104
		15	0.104
		16	0.111
		17	0.085

27

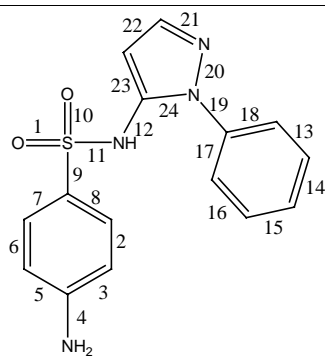


1	0.125
2	0.141
3	0.059
4	-0.203
5	0.058
6	0.093
7	0.085
8	0.064
9	0.048
10	0.144
11	0.066
12	0.092
13	0.060
14	0.064
15	0.049
16	-0.183
17	0.056
18	0.062
19	0.076
20	0.066
21	0.078
22	0.103
23	0.066
24	0.037
25	-0.182
26	0.067
27	-0.196
28	0.004
29	-0.213
30	0.038

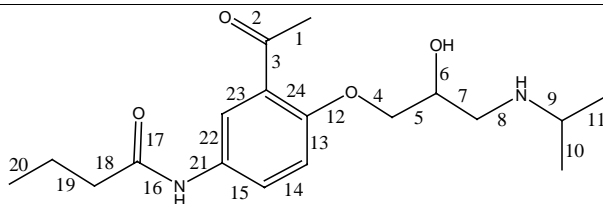
28



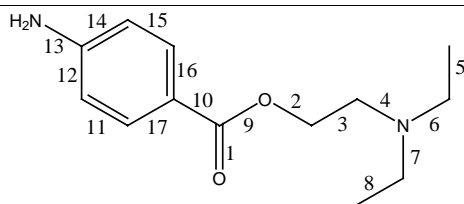
1	-0.133
2	-0.041
3	-0.202
4	-0.045
5	-0.036
6	0.080
7	0.111
8	0.188
9	0.042
10	-0.133
11	0.045
12	0.105
13	0.109
14	0.124
15	0.109
16	0.105
17	0.113
18	0.113

29

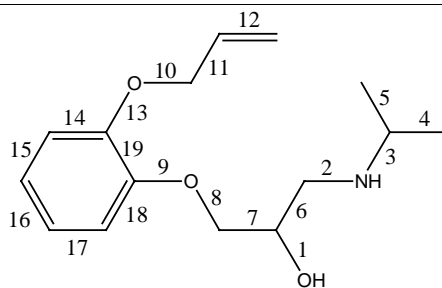
1	-0.136
2	0.106
3	0.066
4	-0.082
5	0.066
6	0.106
7	0.113
8	0.113
9	0.040
10	-0.136
11	0.064
12	0.027
13	0.106
14	0.104
15	0.104
16	0.106
17	0.080
18	0.080
19	-0.036
20	-0.065
21	-0.078
22	0.080
23	0.120
24	0.003

30

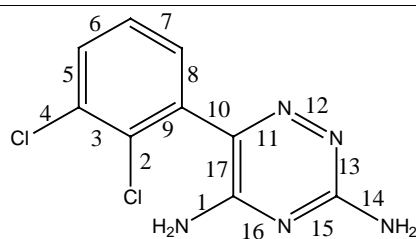
1	0.097
2	-0.202
3	0.101
4	0.004
5	0.040
6	-0.180
7	0.038
8	-0.038
9	-0.061
10	0.144
11	0.144
12	-0.008
13	0.076
14	0.107
15	0.074
16	-0.042
17	-0.205
18	0.038
19	0.068
20	0.189
21	-0.046
22	0.075
23	0.119
24	0.092

31

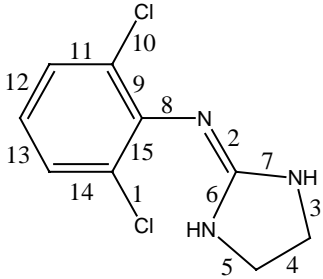
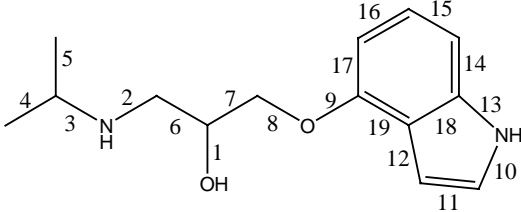
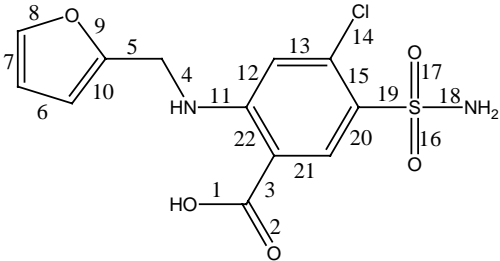
1	-0.202
2	0.004
3	0.055
4	0.018
5	0.161
6	0.017
7	0.017
8	0.161
9	-0.002
10	0.098
11	0.107
12	0.066
13	-0.082
14	0.066
15	0.107
16	0.116
17	0.116

32

1	-0.180
2	-0.038
3	-0.061
4	0.144
5	0.144
6	0.038
7	0.040
8	0.004
9	-0.006
10	-0.053
11	0.040
12	0.175
13	-0.005
14	0.079
15	0.106
16	0.104
17	0.106
18	0.079
19	0.057

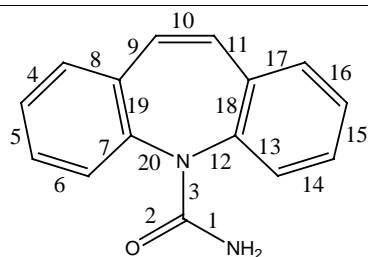
33

1	-0.035
2	0.214
3	0.108
4	0.216
5	0.106
6	0.103
7	0.103
8	0.109
9	0.112
10	0.115
11	-0.058
12	-0.155

		13	-0.087
		14	-0.066
		15	-0.082
		16	-0.046
		17	0.115
34		1	0.221
		2	-0.062
		3	-0.001
		4	0.053
		5	-0.001
		6	-0.010
		7	-0.010
		8	-0.061
		9	0.088
		10	0.221
		11	0.110
		12	0.104
		13	0.104
		14	0.110
		15	0.088
35		1	-0.180
		2	-0.038
		3	-0.061
		4	0.144
		5	0.144
		6	0.038
		7	0.040
		8	0.004
		9	-0.009
		10	-0.021
		11	0.037
		12	0.094
		13	-0.015
		14	0.074
		15	0.105
		16	0.105
		17	0.076
		18	0.091
		19	0.090
36		1	-0.021
		2	-0.197
		3	0.092
		4	-0.058
		5	0.021
		6	0.109
		7	0.078
		8	0.040
		9	0.054

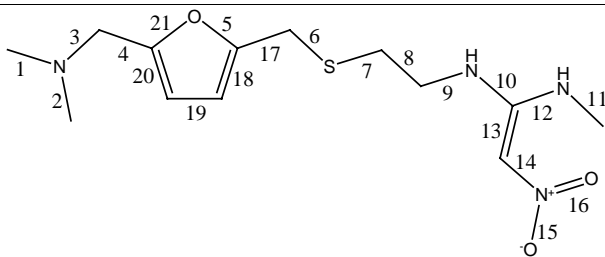
10	0.105
11	-0.016
12	0.074
13	0.107
14	0.216
15	0.117
16	-0.140
17	-0.140
18	0.134
19	0.040
20	0.113
21	0.118
22	0.092

37



1	-0.148
2	-0.202
3	0.060
4	0.104
5	0.103
6	0.104
7	0.075
8	0.112
9	0.087
10	0.055
11	0.087
12	0.058
13	0.075
14	0.104
15	0.103
16	0.104
17	0.112
18	0.084
19	0.084
20	0.058

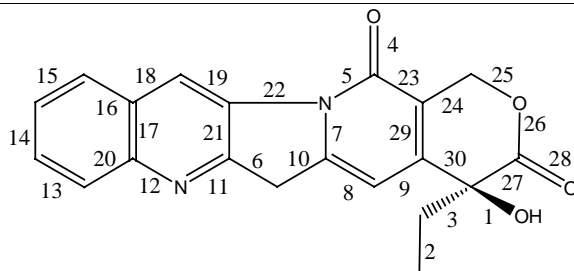
38



1	-0.019
2	-0.019
3	-0.036
4	0.025
5	0.051
6	0.011
7	0.055
8	0.074
9	-0.004
10	-0.005
11	-0.032
12	-0.004
13	0.019
14	0.054
15	0.051

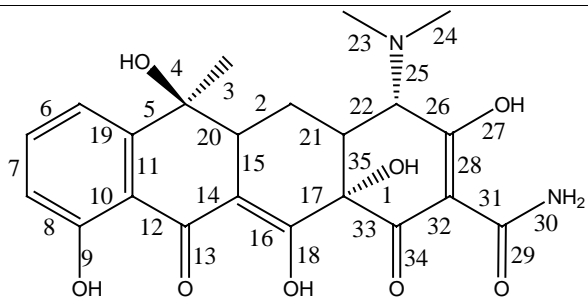
	16	-0.091
	17	0.053
	18	0.102
	19	0.109
	20	0.103
	21	0.052

39



	1	-0.163
	2	0.189
	3	0.097
	4	-0.204
	5	0.037
	6	-0.025
	7	0.057
	8	0.096
	9	0.107
	10	0.099
	11	-0.060
	12	-0.087
	13	0.105
	14	0.103
	15	0.104
	16	0.113
	17	0.088
	18	0.113
	19	0.113
	20	0.077
	21	0.114
	22	-0.071
	23	0.092
	24	0.038
	25	-0.052
	26	-0.003
	27	0.088
	28	-0.200
	29	0.121
	30	0.105

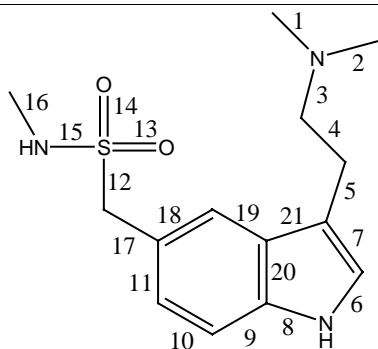
40



	1	-0.161
	2	0.072
	3	0.149
	4	-0.175
	5	0.086
	6	0.102
	7	0.105
	8	0.066
	9	-0.039
	10	0.079
	11	0.116
	12	0.098

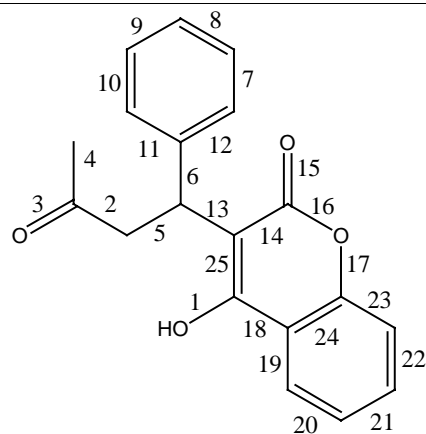
13	-0.199
14	0.078
15	0.062
16	0.071
17	0.079
18	-0.028
19	0.106
20	0.055
21	0.101
22	0.067
23	-0.018
24	-0.018
25	0.006
26	0.047
27	-0.027
28	0.080
29	-0.202
30	-0.149
31	0.077
32	0.090
33	0.093
34	-0.196
35	0.097

41



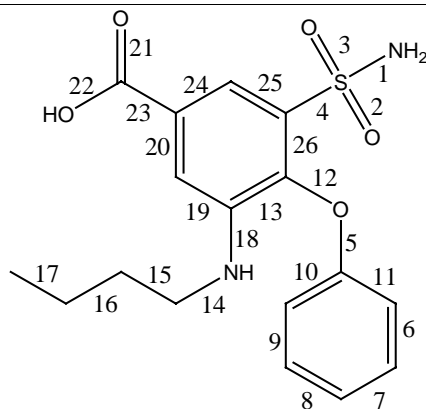
1	-0.020
2	-0.020
3	0.016
4	0.040
5	0.050
6	-0.021
7	0.049
8	-0.017
9	0.073
10	0.105
11	0.111
12	-0.024
13	-0.132
14	-0.132
15	0.073
16	-0.030
17	0.055
18	0.111
19	0.113
20	0.086
21	0.104

42

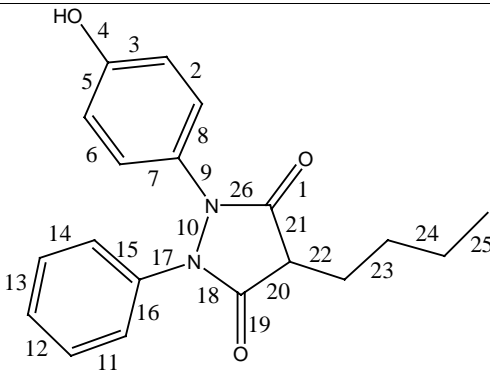
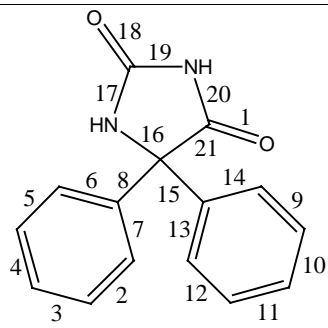


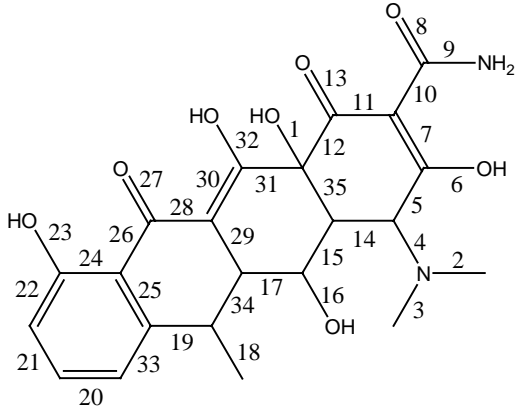
1	-0.037
2	0.045
3	-0.201
4	0.098
5	0.016
6	0.066
7	0.104
8	0.104
9	0.104
10	0.104
11	0.113
12	0.113
13	0.076
14	0.099
15	-0.203
16	0.030
17	0.026
18	0.083
19	0.116
20	0.104
21	0.104
22	0.106
23	0.076
24	0.090
25	0.089

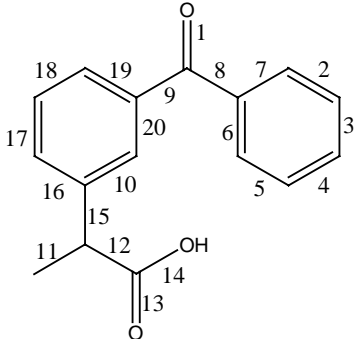
43



1	0.135
2	-0.139
3	-0.139
4	0.046
5	-0.008
6	0.106
7	0.104
8	0.104
9	0.106
10	0.076
11	0.076
12	-0.006
13	0.053
14	-0.005
15	0.080
16	0.111
17	0.188
18	-0.015
19	0.077
20	0.117
21	-0.197
22	-0.021
23	0.090

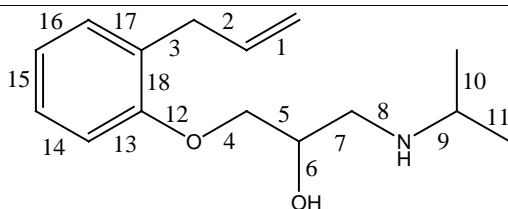
		24	0.116
		25	0.118
		26	0.095
44		1	-0.200
		2	0.107
		3	0.066
		4	-0.039
		5	0.066
		6	0.107
		7	0.079
		8	0.079
		9	0.001
		10	-0.030
		11	0.105
		12	0.104
		13	0.104
		14	0.105
		15	0.079
		16	0.079
		17	0.001
		18	0.009
		19	-0.200
		20	0.047
		21	0.047
		22	0.063
		23	0.112
		24	0.110
		25	0.188
		26	0.009
45		1	-0.203
		2	0.103
		3	0.103
		4	0.103
		5	0.103
		6	0.105
		7	0.105
		8	0.096
		9	0.103
		10	0.103
		11	0.103
		12	0.103
		13	0.105
		14	0.105
		15	0.096
		16	-0.037
		17	-0.045
		18	-0.203
		19	-0.043

		20	-0.039
		21	0.081
46		1	-0.160
		2	-0.018
		3	-0.018
		4	0.007
		5	0.047
		6	-0.026
		7	0.080
		8	-0.202
		9	-0.149
		10	0.077
		11	0.090
		12	0.093
		13	-0.195
		14	0.072
		15	0.067
		16	-0.178
		17	0.039
		18	0.147
		19	0.075
		20	0.103
		21	0.105
		22	0.066
		23	-0.039
		24	0.081
		25	0.121
		26	0.100
		27	-0.199
		28	0.080
		29	0.068
		30	0.071
		31	0.079
		32	-0.028
		33	0.109
		34	0.042
		35	0.102

47		1	-0.198
		2	0.105
		3	0.104
		4	0.104
		5	0.105
		6	0.114
		7	0.114
		8	0.100
		9	0.099
		10	0.113
		11	0.133

	12	0.029
	13	-0.197
	14	-0.021
	15	0.067
	16	0.112
	17	0.104
	18	0.104
	19	0.113
	20	0.114

48

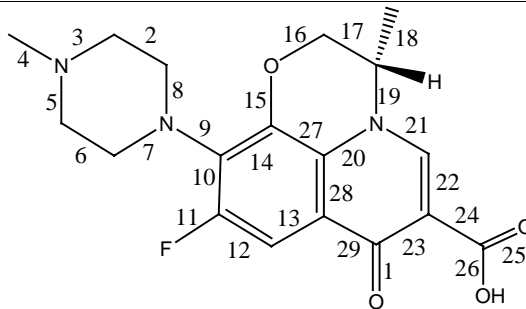


	1	0.174
	2	0.057
	3	0.052
	4	0.004
	5	0.040
	6	-0.180
	7	0.038
	8	-0.038
	9	-0.061
	10	0.144
	11	0.144
	12	-0.008
	13	0.077
	14	0.105
	15	0.103
	16	0.104
	17	0.115
	18	0.090

49

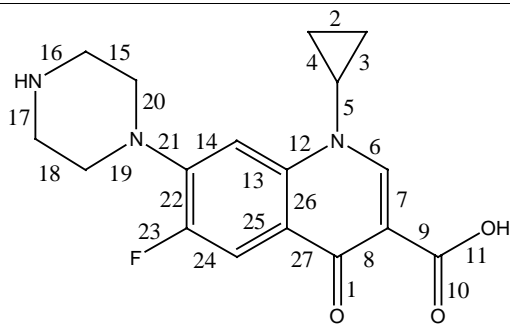
See annexes

50

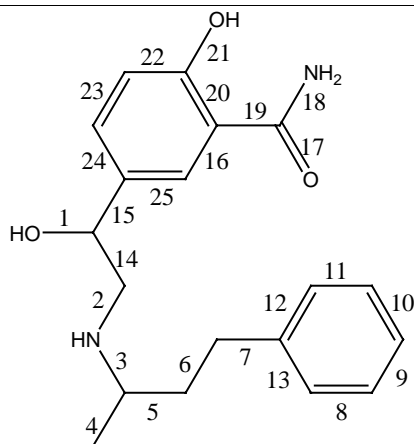


	1	-0.199
	2	0.056
	3	0.016
	4	-0.019
	5	0.016
	6	0.056
	7	0.062
	8	0.062
	9	0.060
	10	0.091
	11	0.107
	12	0.113
	13	0.115
	14	0.056
	15	-0.009
	16	0.002
	17	0.036
	18	0.140
	19	0.019
	20	0.030

	21	0.036
	22	0.095
	23	0.104
	24	0.097
	25	-0.196
	26	-0.021
	27	0.052
	28	0.088
	29	0.096
51		
	1	-0.199
	2	0.124
	3	0.079
	4	0.079
	5	0.018
	6	0.035
	7	0.095
	8	0.104
	9	0.097
	10	-0.196
	11	-0.021
	12	0.027
	13	0.074
	14	0.077
	15	0.052
	16	-0.041
	17	-0.041
	18	0.052
	19	0.063
	20	0.063
	21	0.058
	22	0.088
	23	0.108
	24	0.113
	25	0.116
	26	0.085
	27	0.097

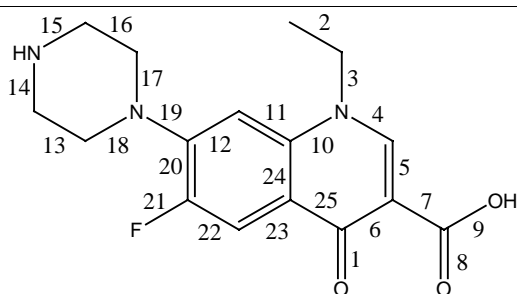


52



1	-0.187
2	-0.038
3	-0.058
4	0.147
5	0.071
6	0.067
7	0.070
8	0.105
9	0.104
10	0.104
11	0.105
12	0.111
13	0.111
14	0.031
15	0.071
16	0.120
17	-0.202
18	-0.149
19	0.093
20	0.086
21	-0.038
22	0.067
23	0.106
24	0.114
25	0.115

53



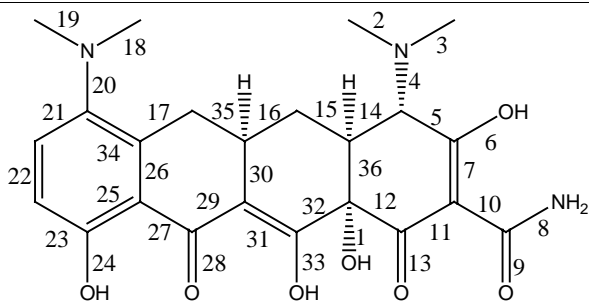
1	-0.199
2	0.105
3	-0.012
4	0.039
5	0.095
6	0.104
7	0.097
8	-0.196
9	-0.021
10	0.033
11	0.075
12	0.077
13	0.052
14	-0.041
15	-0.041
16	0.052
17	0.063
18	0.063
19	0.058
20	0.088
21	0.108
22	0.113
23	0.116

		24	0.087
		25	0.097
54		1	-0.200
		2	0.105
		3	0.104
		4	0.104
		5	0.105
		6	0.079
		7	0.079
		8	0.001
		9	-0.030
		10	0.105
		11	0.104
		12	0.104
		13	0.105
		14	0.079
		15	0.079
		16	0.001
		17	0.009
		18	-0.200
		19	0.047
		20	0.047
		21	0.063
		22	0.112
		23	0.110
		24	0.188
		25	0.009

55		1	-0.161
		2	-0.018
		3	-0.018
		4	0.006
		5	0.047
		6	-0.027
		7	0.080
		8	-0.202
		9	-0.149
		10	0.077
		11	0.090
		12	0.093
		13	-0.196
		14	0.068
		15	0.102
		16	0.072
		17	0.069
		18	0.104
		19	0.105
		20	0.066
		21	-0.039

22	0.082
23	0.123
24	0.101
25	-0.199
26	0.081
27	0.064
28	0.073
29	0.079
30	-0.027
31	0.109
32	0.029
33	0.097

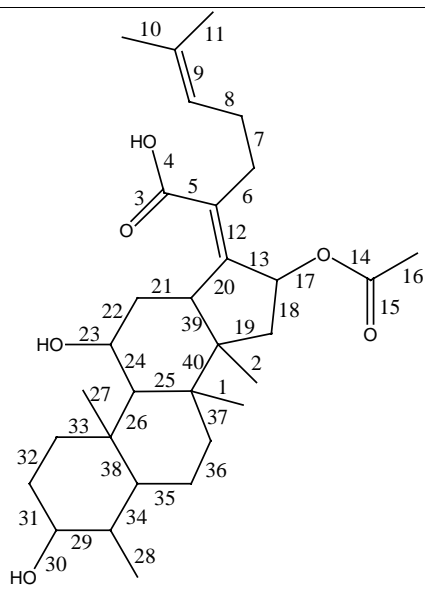
56



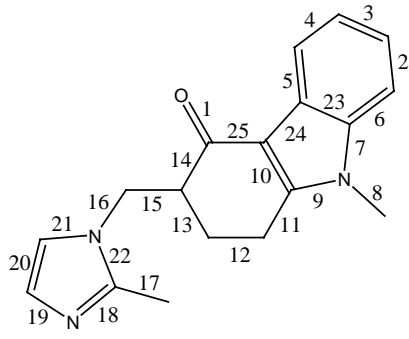
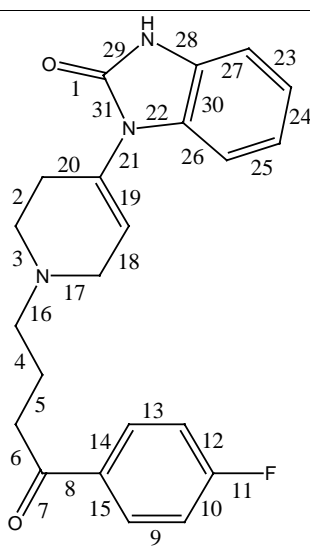
1	-0.161
2	-0.018
3	-0.018
4	0.006
5	0.047
6	-0.027
7	0.080
8	-0.202
9	-0.149
10	0.077
11	0.090
12	0.093
13	-0.196
14	0.068
15	0.102
16	0.072
17	0.070
18	0.030
19	0.030
20	0.058
21	0.075
22	0.105
23	0.066
24	-0.039
25	0.081
26	0.123
27	0.101
28	-0.199
29	0.081
30	0.064
31	0.073
32	0.079
33	-0.027
34	0.084
35	0.028
36	0.097

	11	-0.005
	12	0.080
	13	0.111
	14	0.188
	15	-0.018
	16	0.073
	17	0.106
	18	0.116
	19	0.116

60

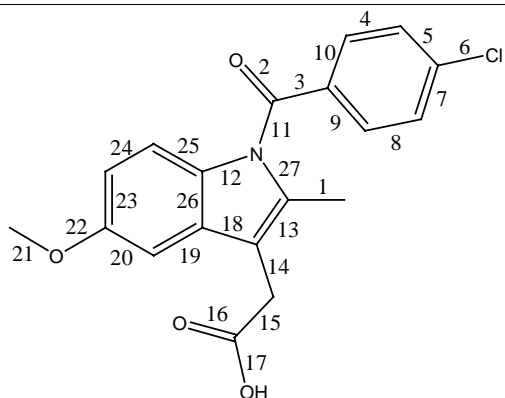


1	0.088
2	0.098
3	-0.197
4	-0.021
5	0.071
6	0.056
7	0.020
8	0.079
9	0.105
10	0.103
11	0.103
12	0.090
13	0.053
14	-0.006
15	-0.208
16	0.090
17	-0.022
18	0.055
19	0.035
20	0.047
21	0.057
22	0.058
23	-0.184
24	0.027
25	-0.015
26	0.029
27	0.132
28	0.174
29	0.057
30	-0.181
31	0.064
32	0.104
33	0.066
34	0.075
35	0.082
36	0.097
37	0.023
38	0.046
39	-0.002

		40	-0.064
61	See annexes		
62		1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25	-0.199 0.104 0.103 0.103 0.106 0.071 0.023 0.004 0.046 0.101 0.054 0.066 0.078 0.061 -0.002 -0.008 0.100 -0.076 -0.076 0.052 0.045 0.050 0.076 0.113 0.095
63		1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21	-0.203 0.039 0.018 0.084 0.067 0.045 -0.200 0.100 0.106 0.113 0.107 0.113 0.106 0.115 0.115 0.018 -0.037 0.043 0.100 0.043 0.066

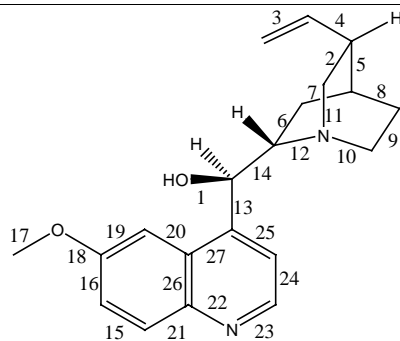
	22	0.059
	23	0.105
	24	0.104
	25	0.104
	26	0.076
	27	0.075
	28	-0.045
	29	-0.041
	30	0.051
	31	0.064

64



	1	0.108
	2	-0.204
	3	0.094
	4	0.105
	5	0.108
	6	0.220
	7	0.108
	8	0.105
	9	0.114
	10	0.114
	11	0.032
	12	0.021
	13	0.098
	14	0.052
	15	0.009
	16	-0.200
	17	-0.023
	18	0.113
	19	0.109
	20	0.075
	21	-0.027
	22	-0.008
	23	0.075
	24	0.106
	25	0.070
	26	0.075
	27	0.042

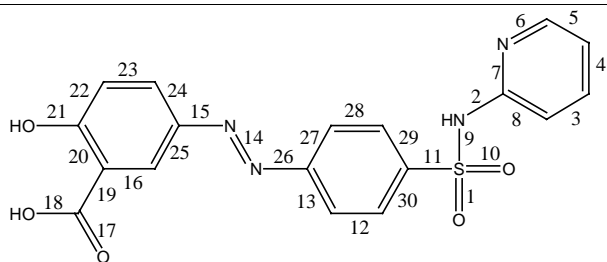
65



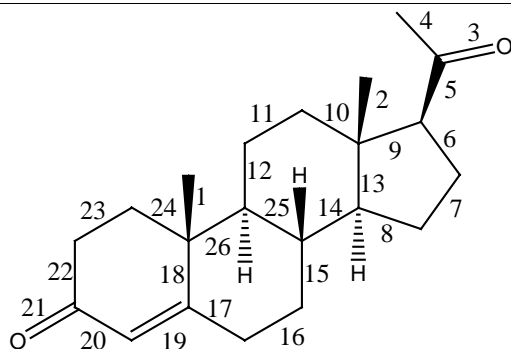
	1	-0.185
	2	0.046
	3	0.175
	4	0.086
	5	0.067
	6	0.079
	7	0.102
	8	0.101
	9	0.082
	10	0.015
	11	0.016

	12	0.012
	13	0.034
	14	0.072
	15	0.107
	16	0.075
	17	-0.027
	18	-0.008
	19	0.075
	20	0.114
	21	0.076
	22	-0.087
	23	-0.079
	24	0.076
	25	0.114
	26	0.088
	27	0.124

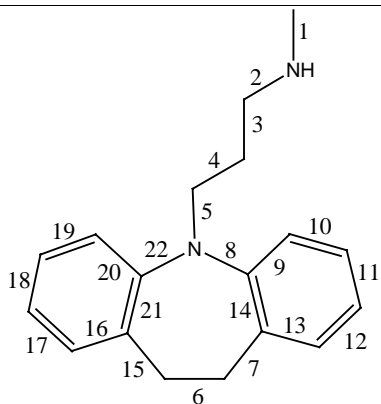
66



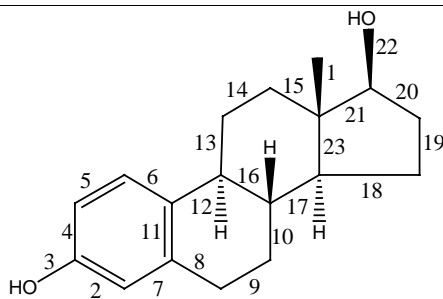
1	-0.136
2	0.023
3	0.106
4	0.105
5	0.076
6	-0.078
7	-0.051
8	0.115
9	0.065
10	-0.136
11	0.040
12	0.106
13	0.075
14	0.114
15	0.031
16	0.122
17	-0.197
18	-0.021
19	0.094
20	0.087
21	-0.038
22	0.068
23	0.107
24	0.075
25	0.076
26	0.031
27	0.075
28	0.106
29	0.113
30	0.113

67

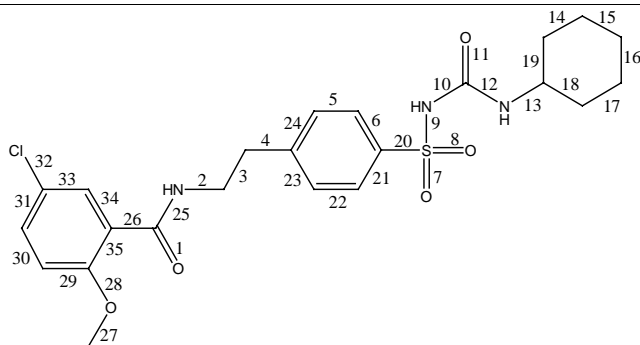
1	0.143
2	0.145
3	-0.200
4	0.099
5	0.049
6	0.066
7	0.105
8	0.083
9	0.052
10	0.078
11	0.101
12	0.089
13	0.060
14	0.070
15	0.093
16	0.063
17	0.045
18	0.065
19	0.066
20	0.059
21	-0.203
22	0.041
23	0.066
24	0.078
25	0.076
26	0.065

68

1	-0.069
2	-0.040
3	0.080
4	0.082
5	0.060
6	0.021
7	0.071
8	0.053
9	0.074
10	0.104
11	0.103
12	0.104
13	0.112
14	0.084
15	0.071
16	0.112
17	0.104
18	0.103
19	0.104
20	0.074
21	0.084
22	0.053

69

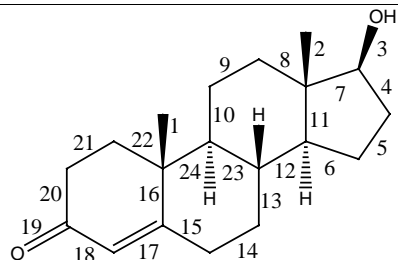
1	0.150
2	0.066
3	-0.040
4	0.065
5	0.105
6	0.109
7	0.111
8	0.068
9	0.064
10	0.098
11	0.116
12	0.076
13	0.069
14	0.104
15	0.083
16	0.061
17	0.075
18	0.085
19	0.106
20	0.058
21	0.051
22	-0.185
23	0.067

70

1	-0.203
2	-0.036
3	0.036
4	0.071
5	0.105
6	0.113
7	-0.133
8	-0.133
9	0.042
10	-0.041
11	-0.202
12	-0.044
13	-0.051
14	0.111
15	0.109
16	0.109
17	0.111
18	0.073
19	0.073
20	0.045
21	0.113
22	0.105
23	0.111
24	0.111
25	-0.042

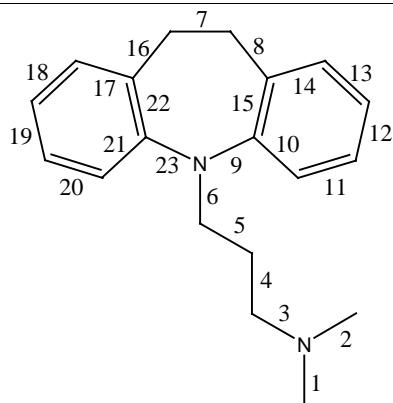
	26	0.099
	27	-0.028
	28	-0.007
	29	0.076
	30	0.106
	31	0.108
	32	0.219
	33	0.108
	34	0.119
	35	0.094

71



	1	0.143
	2	0.150
	3	-0.185
	4	0.058
	5	0.106
	6	0.084
	7	0.051
	8	0.083
	9	0.102
	10	0.089
	11	0.066
	12	0.071
	13	0.094
	14	0.063
	15	0.045
	16	0.065
	17	0.066
	18	0.059
	19	-0.203
	20	0.041
	21	0.066
	22	0.078
	23	0.076
	24	0.065

72

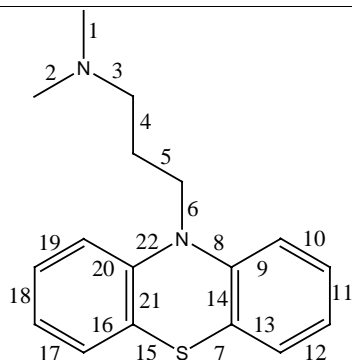


	1	-0.020
	2	-0.020
	3	0.016
	4	0.084
	5	0.082
	6	0.060
	7	0.021
	8	0.071
	9	0.053
	10	0.074
	11	0.104
	12	0.103
	13	0.104
	14	0.112

15	0.084
16	0.071
17	0.112
18	0.104
19	0.103
20	0.104
21	0.074
22	0.084
23	0.053

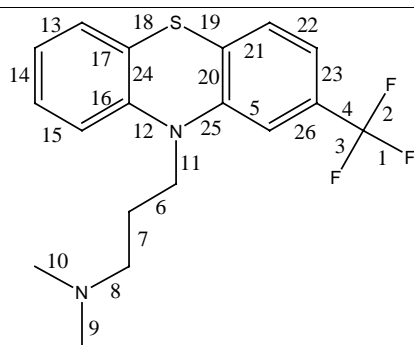
73 See annexes

74



1	-0.020
2	-0.020
3	0.016
4	0.084
5	0.082
6	0.060
7	0.044
8	0.051
9	0.074
10	0.104
11	0.103
12	0.104
13	0.104
14	0.075
15	0.044
16	0.104
17	0.104
18	0.103
19	0.104
20	0.074
21	0.075
22	0.051

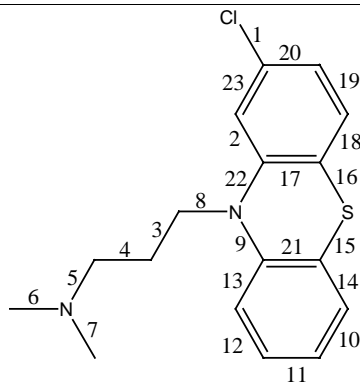
75



1	0.125
2	0.125
3	0.125
4	0.104
5	0.073
6	0.082
7	0.084
8	0.016
9	-0.020
10	-0.020
11	0.060
12	0.051
13	0.104
14	0.103
15	0.104
16	0.074

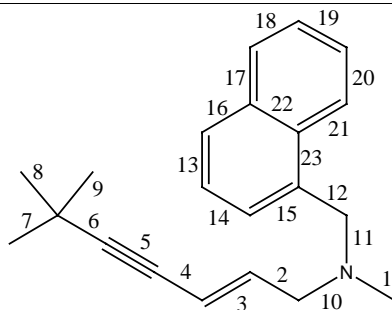
	17	0.104
	18	0.044
	19	0.044
	20	0.075
	21	0.103
	22	0.103
	23	0.104
	24	0.075
	25	0.051
	26	0.105

76



	1	0.220
	2	0.074
	3	0.082
	4	0.084
	5	0.016
	6	-0.020
	7	-0.020
	8	0.060
	9	0.051
	10	0.104
	11	0.103
	12	0.104
	13	0.074
	14	0.104
	15	0.044
	16	0.044
	17	0.075
	18	0.103
	19	0.105
	20	0.108
	21	0.075
	22	0.051
	23	0.108

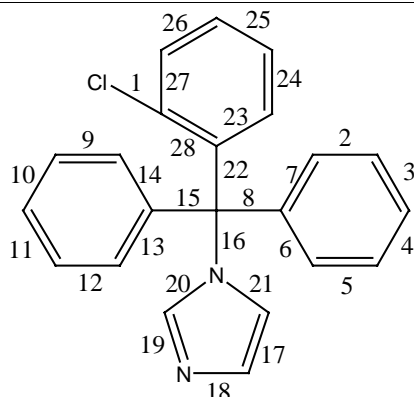
77



	1	-0.018
	2	0.043
	3	0.096
	4	0.078
	5	0.101
	6	0.070
	7	0.143
	8	0.143
	9	0.143
	10	-0.037
	11	-0.036
	12	0.036
	13	0.103
	14	0.103
	15	0.111

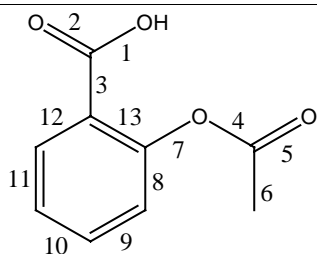
	16	0.108
	17	0.108
	18	0.104
	19	0.103
	20	0.103
	21	0.108
	22	0.114
	23	0.117

78

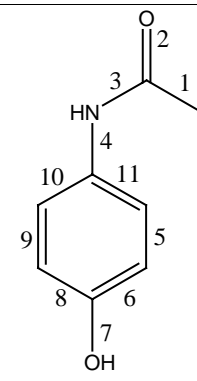
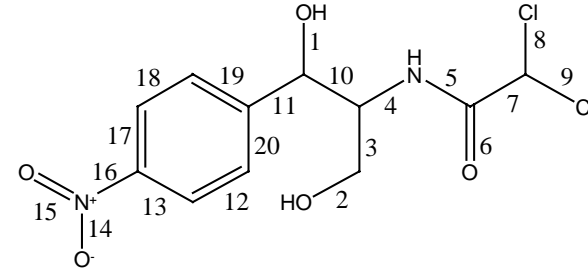
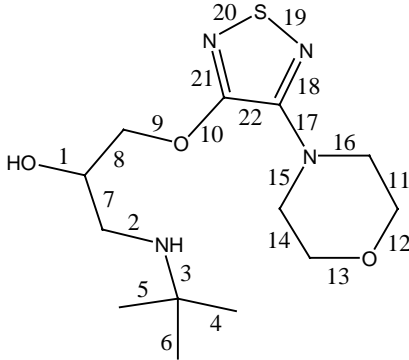


	1	0.215
	2	0.103
	3	0.103
	4	0.103
	5	0.103
	6	0.100
	7	0.100
	8	0.053
	9	0.103
	10	0.103
	11	0.103
	12	0.103
	13	0.100
	14	0.100
	15	0.053
	16	-0.013
	17	0.051
	18	-0.077
	19	-0.095
	20	0.013
	21	0.031
	22	0.050
	23	0.098
	24	0.102
	25	0.103
	26	0.104
	27	0.105
	28	0.100

79

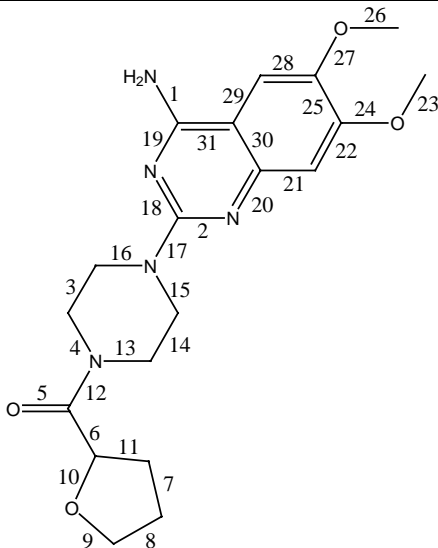


	1	-0.021
	2	-0.197
	3	0.094
	4	-0.005
	5	-0.207
	6	0.091
	7	-0.005
	8	0.077
	9	0.105
	10	0.103
	11	0.105
	12	0.120

80		13	0.096
		1	0.090
		2	-0.207
		3	-0.045
		4	-0.046
		5	0.108
		6	0.066
		7	-0.039
		8	0.066
		9	0.108
		10	0.075
	11	0.075	
81		1	-0.183
		2	-0.158
		3	0.044
		4	-0.045
		5	-0.039
		6	-0.201
		7	0.066
		8	0.157
		9	0.157
		10	0.036
		11	0.074
		12	0.107
		13	0.088
		14	0.052
		15	-0.089
		16	0.113
		17	0.088
		18	0.107
		19	0.114
		20	0.114
82		1	-0.180
		2	-0.039
		3	-0.052
		4	0.150
		5	0.150
		6	0.150
		7	0.038
		8	0.040
		9	0.005
		10	0.031
		11	0.054
		12	-0.043
		13	-0.043
		14	0.054
		15	0.062
		16	0.062

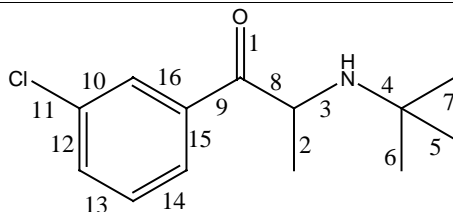
	17	0.096
	18	-0.041
	19	-0.072
	20	-0.071
	21	-0.043
	22	0.136

83

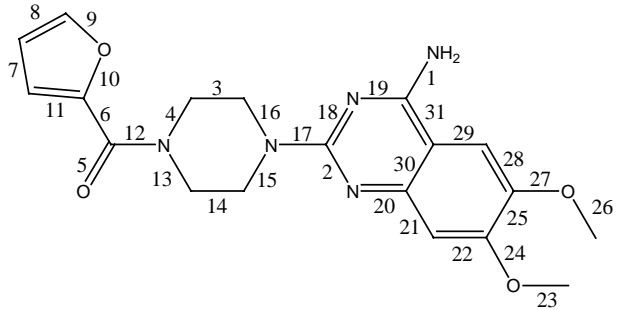
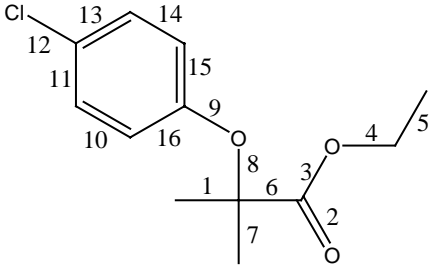


1	-0.036
2	-0.078
3	0.056
4	0.015
5	-0.199
6	0.056
7	0.115
8	0.083
9	-0.040
10	-0.057
11	0.075
12	0.022
13	0.015
14	0.056
15	0.066
16	0.066
17	0.072
18	-0.077
19	-0.049
20	-0.085
21	0.079
22	0.081
23	-0.027
24	-0.004
25	0.056
26	-0.027
27	-0.005
28	0.079
29	0.118
30	0.092
31	0.123

84



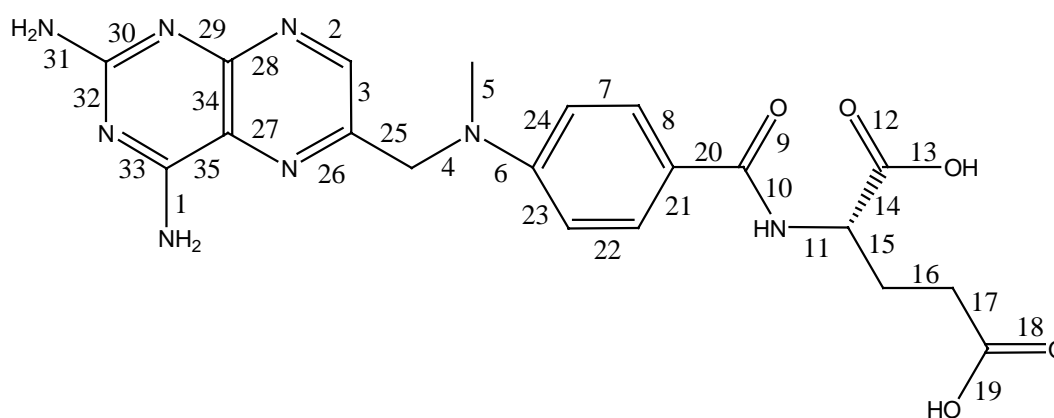
1	-0.197
2	0.142
3	-0.063
4	-0.052
5	0.150
6	0.150
7	0.150
8	0.051
9	0.102
10	0.109
11	0.220

		12	0.108
		13	0.104
		14	0.104
		15	0.114
		16	0.115
85		1	-0.036
		2	-0.078
		3	0.056
		4	0.015
		5	-0.199
		6	0.091
		7	0.109
		8	0.078
		9	0.040
		10	0.056
		11	0.108
		12	0.022
		13	0.015
		14	0.056
		15	0.066
		16	0.066
		17	0.072
		18	-0.077
		19	-0.049
		20	-0.085
		21	0.079
		22	0.081
		23	-0.027
		24	-0.004
		25	0.056
		26	-0.027
		27	-0.005
		28	0.079
		29	0.118
		30	0.092
		31	0.123
86		1	0.149
		2	-0.202
		3	-0.004
		4	0.003
		5	0.159
		6	0.072
		7	0.149
		8	-0.017
		9	-0.012
		10	0.107
		11	0.109
		12	0.220

		13	0.109
		14	0.107
		15	0.074
		16	0.074
87	See annexes		
88	See annexes		

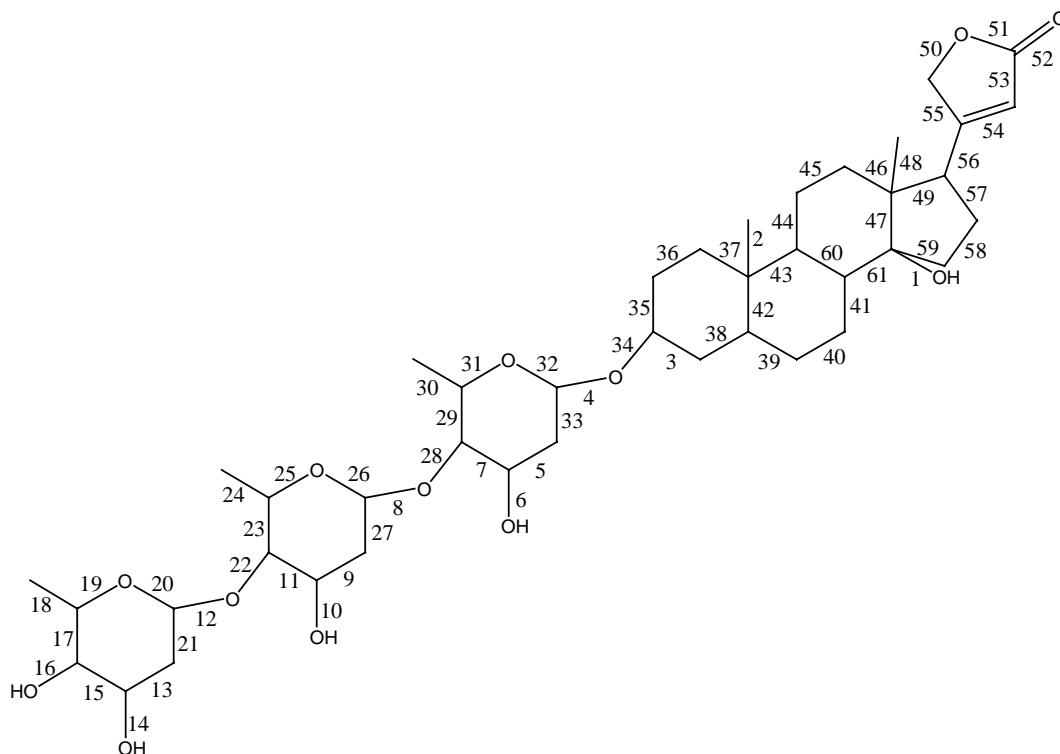
ANNEXES

Compound 8



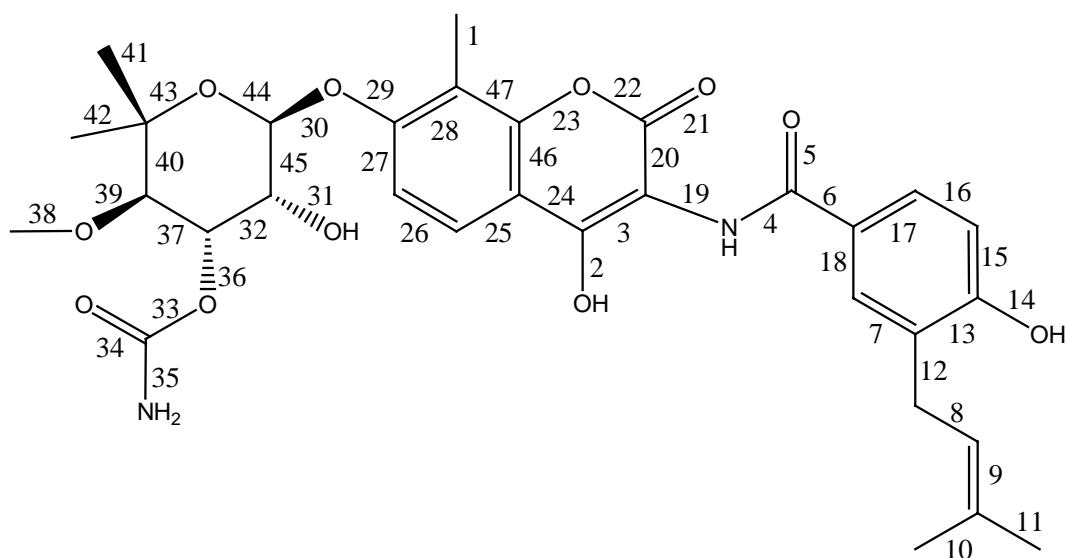
Bond	Contribution	Bond	Contribution	Bond	Contribution
1	-0.034	13	-0.020	25	0.027
2	-0.076	14	0.044	26	-0.058
3	0.077	15	0.074	27	-0.077
4	0.015	16	0.071	28	-0.045
5	0.032	17	0.030	29	-0.042
6	0.061	18	-0.200	30	-0.083
7	0.106	19	-0.023	31	-0.067
8	0.116	20	0.097	32	-0.084
9	-0.202	21	0.116	33	-0.046
10	-0.040	22	0.106	34	0.105
11	-0.051	23	0.076	35	0.095
12	-0.196	24	0.076		

Compound 49



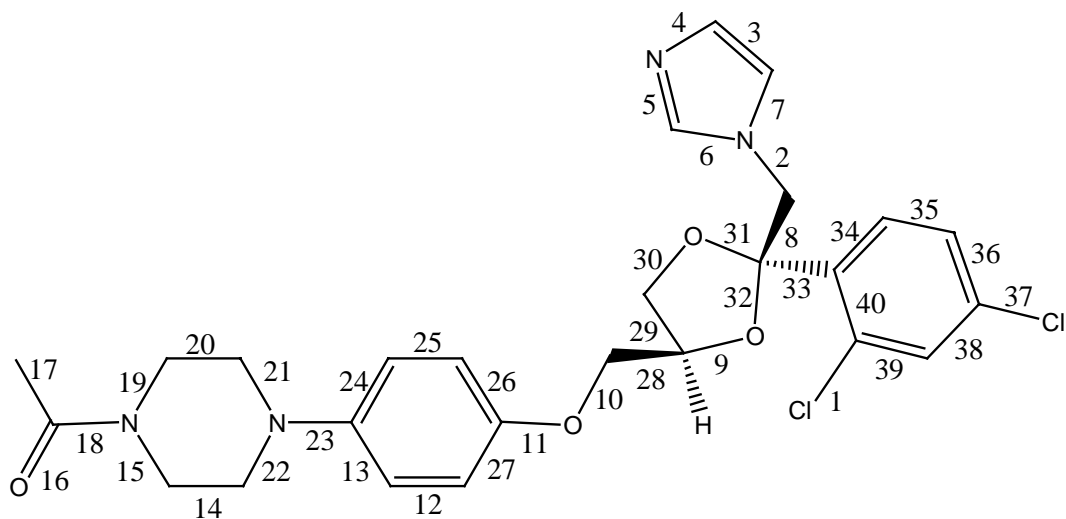
Bond	Contribution	Bond	Contribution	Bond	Contribution
1	-0.179	22	-0.047	43	0.052
2	0.138	23	0.051	44	0.080
3	0.072	24	0.151	45	0.099
4	-0.067	25	-0.054	46	0.056
5	0.073	26	-0.067	47	0.015
6	-0.178	27	0.068	48	0.122
7	0.045	28	-0.047	49	0.025
8	-0.067	29	0.051	50	-0.048
9	0.073	30	0.151	51	-0.002
10	-0.178	31	-0.054	52	-0.205
11	0.045	32	-0.067	53	0.060
12	-0.067	33	0.068	54	0.076
13	0.074	34	-0.056	55	0.018
14	-0.178	35	0.072	56	0.052
15	0.036	36	0.105	57	0.058
16	-0.174	37	0.072	58	0.101
17	0.043	38	0.088	59	0.059
18	0.152	39	0.085	60	0.062
19	-0.054	40	0.105	61	0.046
20	-0.067	41	0.087		
21	0.068	42	0.056		

Compound 61



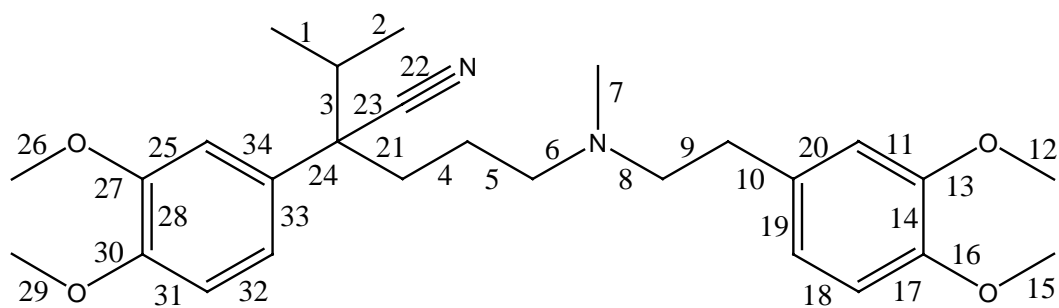
Bond	Contribution	Bond	Contribution	Bond	Contribution
1	0.129	17	0.115	33	-0.009
2	-0.035	18	0.116	34	-0.203
3	0.056	19	-0.035	35	-0.150
4	-0.039	20	0.066	36	-0.004
5	-0.202	21	-0.201	37	0.050
6	0.096	22	0.032	38	-0.072
7	0.115	23	0.026	39	-0.055
8	0.058	24	0.086	40	0.068
9	0.105	25	0.115	41	0.157
10	0.103	26	0.105	42	0.157
11	0.103	27	0.075	43	-0.047
12	0.052	28	0.089	44	-0.067
13	0.081	29	-0.007	45	0.035
14	-0.038	30	-0.021	46	0.089
15	0.068	31	-0.174	47	0.088
16	0.106	32	0.048		

Compound 73



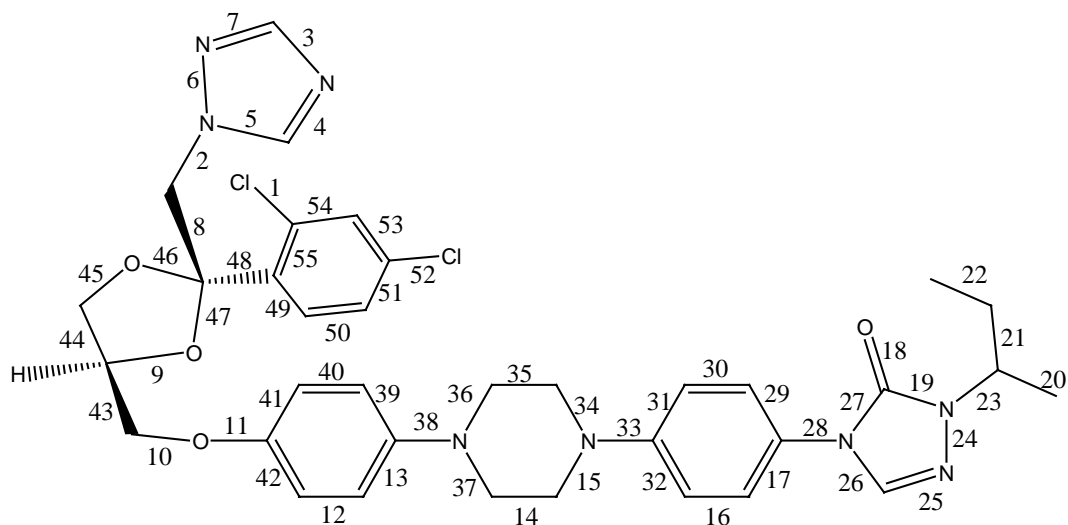
Bond	Contribution	Bond	Contribution	Bond	Contribution
1	0.215	15	0.015	29	0.050
2	-0.006	16	-0.205	30	-0.038
3	0.053	17	0.095	31	-0.041
4	-0.077	18	0.016	32	-0.040
5	-0.093	19	0.015	33	0.108
6	0.028	20	0.056	34	0.108
7	0.046	21	0.063	35	0.103
8	0.027	22	0.063	36	0.107
9	-0.052	23	0.057	37	0.219
10	0.004	24	0.075	38	0.108
11	-0.009	25	0.107	39	0.105
12	0.107	26	0.075	40	0.111
13	0.075	27	0.075		
14	0.056	28	0.048		

Compound 87



Bond	Contribution	Bond	Contribution	Bond	Contribution
1	0.162	13	-0.005	25	0.078
2	0.162	14	0.056	26	-0.027
3	0.073	15	-0.027	27	-0.005
4	0.107	16	-0.004	28	0.056
5	0.083	17	0.079	29	-0.027
6	0.016	18	0.106	30	-0.004
7	-0.019	19	0.111	31	0.079
8	0.017	20	0.113	32	0.104
9	0.040	21	0.090	33	0.100
10	0.070	22	-0.056	34	0.102
11	0.080	23	0.082		
12	-0.027	24	0.088		

Compound 88



Bond	Contribution	Bond	Contribution	Bond	Contribution
1	0.215	20	0.144	39	0.075
2	-0.087	21	0.069	40	0.107
3	-0.091	22	0.190	41	0.075
4	-0.097	23	-0.036	42	0.075
5	-0.096	24	-0.052	43	0.049
6	-0.066	25	-0.093	44	0.050
7	-0.054	26	0.031	45	-0.038
8	0.031	27	0.029	46	-0.040
9	-0.052	28	0.042	47	-0.039
10	0.004	29	0.076	48	0.109
11	-0.009	30	0.106	49	0.108
12	0.107	31	0.075	50	0.103
13	0.075	32	0.075	51	0.107
14	0.054	33	0.057	52	0.219
15	0.063	34	0.063	53	0.108
16	0.106	35	0.054	54	0.105
17	0.076	36	0.063	55	0.111
18	-0.224	37	0.063		
19	-0.041	38	0.057		