

Membrane perturbing properties of toxin mycolactone from *Mycobacterium ulcerans*

Cesar A. López, Cliff Unkefer, Basil Swanson, Jessica M. J. Swanson, S. Gnanakaran

“Supporting material”

Table S1. Parameters for the simulation of Mycolactone

Atomistic

[moleculetype]

;name nrexcl
MYCO 3

[atoms]

; nr	type	resi	res	atom	cgnr	charge	mass
1	os	1	MYCO	0	1	-0.445900	16.00000
2	os	1	MYCO	01	2	-0.448900	16.00000
3	oh	1	MYCO	02	3	-0.596801	16.00000
4	o	1	MYCO	03	4	-0.538001	16.00000
5	oh	1	MYCO	04	5	-0.598801	16.00000
6	o	1	MYCO	05	6	-0.541001	16.00000
7	oh	1	MYCO	06	7	-0.609801	16.00000
8	oh	1	MYCO	07	8	-0.593801	16.00000
9	oh	1	MYCO	08	9	-0.605801	16.00000
10	c3	1	MYCO	C	10	-0.071700	12.01000
11	c3	1	MYCO	C1	11	-0.072700	12.01000
12	c3	1	MYCO	C2	12	0.159100	12.01000
13	c3	1	MYCO	C3	13	0.151100	12.01000
14	c3	1	MYCO	C4	14	-0.039200	12.01000
15	c3	1	MYCO	C5	15	-0.090400	12.01000
16	c3	1	MYCO	C6	16	-0.045200	12.01000
17	c3	1	MYCO	C7	17	-0.048200	12.01000
18	c2	1	MYCO	C8	18	-0.113400	12.01000
19	c3	1	MYCO	C9	19	-0.072400	12.01000
20	c2	1	MYCO	C10	20	-0.173200	12.01000
21	c3	1	MYCO	C11	21	-0.090100	12.01000
22	c3	1	MYCO	C12	22	-0.099100	12.01000
23	c2	1	MYCO	C13	23	-0.101400	12.01000
24	c3	1	MYCO	C14	24	-0.129400	12.01000
25	c3	1	MYCO	C15	25	-0.021500	12.01000
26	c2	1	MYCO	C16	26	-0.186200	12.01000
27	c3	1	MYCO	C17	27	0.147100	12.01000
28	c	1	MYCO	C18	28	0.632101	12.01000
29	c3	1	MYCO	C19	29	-0.071900	12.01000
30	c3	1	MYCO	C20	30	-0.151400	12.01000
31	c3	1	MYCO	C21	31	-0.063900	12.01000
32	c3	1	MYCO	C22	32	-0.075100	12.01000
33	c3	1	MYCO	C23	33	0.138100	12.01000
34	c	1	MYCO	C24	34	0.634299	12.01000
35	c3	1	MYCO	C25	35	-0.095100	12.01000
36	ce	1	MYCO	C26	36	-0.216200	12.01000
37	cf	1	MYCO	C27	37	-0.043000	12.01000
38	cf	1	MYCO	C28	38	-0.095200	12.01000
39	c3	1	MYCO	C29	39	0.113100	12.01000
40	c3	1	MYCO	C30	40	-0.107400	12.01000
41	c3	1	MYCO	C31	41	0.141300	12.01000
42	c3	1	MYCO	C32	42	0.150100	12.01000
43	c3	1	MYCO	C33	43	-0.062900	12.01000
44	ce	1	MYCO	C34	44	-0.102000	12.01000
45	c2	1	MYCO	C35	45	-0.196200	12.01000
46	c3	1	MYCO	C36	46	-0.131100	12.01000
47	ce	1	MYCO	C37	47	-0.073200	12.01000
48	ce	1	MYCO	C38	48	-0.060200	12.01000
49	cf	1	MYCO	C39	49	-0.131000	12.01000
50	ce	1	MYCO	C40	50	-0.124000	12.01000
51	c3	1	MYCO	C41	51	-0.061900	12.01000
52	c3	1	MYCO	C42	52	-0.075900	12.01000
53	cf	1	MYCO	C43	53	-0.123000	12.01000
54	hc	1	MYCO	H	54	0.063700	1.00800
55	hc	1	MYCO	H1	55	0.051700	1.00800
56	h1	1	MYCO	H2	56	0.075700	1.00800
57	h1	1	MYCO	H3	57	0.088700	1.00800
58	hc	1	MYCO	H4	58	0.046700	1.00800
59	hc	1	MYCO	H5	59	0.046700	1.00800
60	hc	1	MYCO	H6	60	0.059200	1.00800
61	hc	1	MYCO	H7	61	0.059200	1.00800
62	hc	1	MYCO	H8	62	0.053200	1.00800
63	hc	1	MYCO	H9	63	0.053200	1.00800

64	hc	1	MYCO	H10	64	0.060200	1.00800
65	hc	1	MYCO	H11	65	0.060200	1.00800
66	hc	1	MYCO	H12	66	0.058700	1.00800
67	hc	1	MYCO	H13	67	0.058700	1.00800
68	ha	1	MYCO	H14	68	0.120000	1.00800
69	hc	1	MYCO	H15	69	0.037700	1.00800
70	hc	1	MYCO	H16	70	0.037700	1.00800
71	hc	1	MYCO	H17	71	0.037700	1.00800
72	hc	1	MYCO	H18	72	0.042367	1.00800
73	hc	1	MYCO	H19	73	0.042367	1.00800
74	hc	1	MYCO	H20	74	0.042367	1.00800
75	hc	1	MYCO	H21	75	0.075200	1.00800
76	hc	1	MYCO	H22	76	0.075200	1.00800
77	hc	1	MYCO	H23	77	0.050700	1.00800
78	ha	1	MYCO	H24	78	0.123000	1.00800
79	h1	1	MYCO	H25	79	0.038700	1.00800
80	hc	1	MYCO	H26	80	0.049033	1.00800
81	hc	1	MYCO	H27	81	0.049033	1.00800
82	hc	1	MYCO	H28	82	0.049033	1.00800
83	hc	1	MYCO	H29	83	0.058700	1.00800
84	hc	1	MYCO	H30	84	0.058700	1.00800
85	hc	1	MYCO	H31	85	0.045700	1.00800
86	hc	1	MYCO	H32	86	0.045700	1.00800
87	hc	1	MYCO	H33	87	0.045700	1.00800
88	hc	1	MYCO	H34	88	0.040700	1.00800
89	hc	1	MYCO	H35	89	0.040700	1.00800
90	hc	1	MYCO	H36	90	0.040700	1.00800
91	h1	1	MYCO	H37	91	0.030700	1.00800
92	ho	1	MYCO	H38	92	0.397000	1.00800
93	hc	1	MYCO	H39	93	0.046367	1.00800
94	hc	1	MYCO	H40	94	0.046367	1.00800
95	hc	1	MYCO	H41	95	0.046367	1.00800
96	ha	1	MYCO	H42	96	0.156000	1.00800
97	ho	1	MYCO	H43	97	0.400000	1.00800
98	ha	1	MYCO	H44	98	0.148000	1.00800
99	h1	1	MYCO	H45	99	0.059700	1.00800
100	hc	1	MYCO	H46	100	0.059200	1.00800
101	hc	1	MYCO	H47	101	0.059200	1.00800
102	h1	1	MYCO	H48	102	0.086700	1.00800
103	h1	1	MYCO	H49	103	0.067700	1.00800
104	hc	1	MYCO	H50	104	0.048700	1.00800
105	hc	1	MYCO	H51	105	0.048700	1.00800
106	hc	1	MYCO	H52	106	0.048700	1.00800
107	ha	1	MYCO	H53	107	0.133000	1.00800
108	ha	1	MYCO	H54	108	0.127000	1.00800
109	hc	1	MYCO	H55	109	0.046700	1.00800
110	hc	1	MYCO	H56	110	0.046700	1.00800
111	hc	1	MYCO	H57	111	0.046700	1.00800
112	ho	1	MYCO	H58	112	0.407000	1.00800
113	ho	1	MYCO	H59	113	0.401000	1.00800
114	ho	1	MYCO	H60	114	0.408000	1.00800
115	ha	1	MYCO	H61	115	0.127000	1.00800
116	ha	1	MYCO	H62	116	0.124000	1.00800
117	hc	1	MYCO	H63	117	0.052367	1.00800
118	hc	1	MYCO	H64	118	0.052367	1.00800
119	hc	1	MYCO	H65	119	0.052367	1.00800
120	hc	1	MYCO	H66	120	0.047700	1.00800
121	hc	1	MYCO	H67	121	0.047700	1.00800
122	hc	1	MYCO	H68	122	0.047700	1.00800
123	ha	1	MYCO	H69	123	0.128000	1.00800

[bonds]

;	ai	aj	funct	r	k	
	1	12	1	1.4390e-01	2.5230e+05	0 - C2
	1	28	1	1.3430e-01	3.4418e+05	0 - C18
	2	13	1	1.4390e-01	2.5230e+05	01 - C3
	2	34	1	1.3430e-01	3.4418e+05	01 - C24
	3	27	1	1.4260e-01	2.6284e+05	02 - C17
	3	92	1	9.7400e-02	3.0928e+05	02 - H38
	4	28	1	1.2140e-01	5.4225e+05	03 - C18
	5	33	1	1.4260e-01	2.6284e+05	04 - C23
	5	97	1	9.7400e-02	3.0928e+05	04 - H43
	6	34	1	1.2140e-01	5.4225e+05	05 - C24

7	39	1	1.4260e-01	2.6284e+05 ;	06 - C29
7	112	1	9.7400e-02	3.0928e+05 ;	06 - H58
8	41	1	1.4260e-01	2.6284e+05 ;	07 - C31
8	113	1	9.7400e-02	3.0928e+05 ;	07 - H59
9	42	1	1.4260e-01	2.6284e+05 ;	08 - C32
9	114	1	9.7400e-02	3.0928e+05 ;	08 - H60
10	13	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C - C3
10	14	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C - C4
10	22	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C - C12
10	55	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C - H1
11	12	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C1 - C2
11	16	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C1 - C6
11	21	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C1 - C11
11	54	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C1 - H
12	17	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C2 - C7
12	56	1	1.0930e-01	2.8108e+05 ;	C2 - H2
13	15	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C3 - C5
13	57	1	1.0930e-01	2.8108e+05 ;	C3 - H3
14	18	1	1.5080e-01	2.7472e+05 ;	C4 - C8
14	58	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C4 - H4
14	59	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C4 - H5
15	19	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C5 - C9
15	60	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C5 - H6
15	61	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C5 - H7
16	23	1	1.5080e-01	2.7472e+05 ;	C6 - C13
16	62	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C6 - H8
16	63	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C6 - H9
17	20	1	1.5080e-01	2.7472e+05 ;	C7 - C10
17	64	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C7 - H10
17	65	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C7 - H11
18	20	1	1.3240e-01	4.9346e+05 ;	C8 - C10
18	29	1	1.5080e-01	2.7472e+05 ;	C8 - C19
19	24	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C9 - C14
19	66	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C9 - H12
19	67	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C9 - H13
20	68	1	1.0870e-01	2.8811e+05 ;	C10 - H14
21	69	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C11 - H15
21	70	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C11 - H16
21	71	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C11 - H17
22	72	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C12 - H18
22	73	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C12 - H19
22	74	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C12 - H20
23	26	1	1.3240e-01	4.9346e+05 ;	C13 - C16
23	31	1	1.5080e-01	2.7472e+05 ;	C13 - C21
24	28	1	1.5080e-01	2.7472e+05 ;	C14 - C18
24	75	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C14 - H21
24	76	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C14 - H22
25	26	1	1.5080e-01	2.7472e+05 ;	C15 - C16
25	27	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C15 - C17
25	32	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C15 - C22
25	77	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C15 - H23
26	78	1	1.0870e-01	2.8811e+05 ;	C16 - H24
27	30	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C17 - C20
27	79	1	1.0930e-01	2.8108e+05 ;	C17 - H25
29	80	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C19 - H26
29	81	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C19 - H27
29	82	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C19 - H28
30	33	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C20 - C23
30	83	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C20 - H29
30	84	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C20 - H30
31	85	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C21 - H31
31	86	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C21 - H32
31	87	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C21 - H33
32	88	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C22 - H34
32	89	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C22 - H35
32	90	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C22 - H36
33	35	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C23 - C25
33	91	1	1.0930e-01	2.8108e+05 ;	C23 - H37
34	36	1	1.4740e-01	3.0443e+05 ;	C24 - C26
35	93	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C25 - H39
35	94	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C25 - H40
35	95	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C25 - H41
36	37	1	1.3380e-01	4.7062e+05 ;	C26 - C27

36	96	1	1.0890e-01	2.8577e+05 ;	C26 - H42
37	38	1	1.4510e-01	3.2677e+05 ;	C27 - C28
37	98	1	1.0890e-01	2.8577e+05 ;	C27 - H44
38	43	1	1.5050e-01	2.7723e+05 ;	C28 - C33
38	44	1	1.3380e-01	4.7062e+05 ;	C28 - C34
39	40	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C29 - C30
39	41	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C29 - C31
39	99	1	1.0930e-01	2.8108e+05 ;	C29 - H45
40	42	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C30 - C32
40	100	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C30 - H46
40	101	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C30 - H47
41	45	1	1.5080e-01	2.7472e+05 ;	C31 - C35
41	102	1	1.0930e-01	2.8108e+05 ;	C31 - H48
42	46	1	1.5350e-01	2.5363e+05 ;	C32 - C36
42	103	1	1.0930e-01	2.8108e+05 ;	C32 - H49
43	104	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C33 - H50
43	105	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C33 - H51
43	106	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C33 - H52
44	47	1	1.4510e-01	3.2677e+05 ;	C34 - C37
44	107	1	1.0890e-01	2.8577e+05 ;	C34 - H53
45	48	1	1.3390e-01	4.6903e+05 ;	C35 - C38
45	108	1	1.0870e-01	2.8811e+05 ;	C35 - H54
46	109	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C36 - H55
46	110	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C36 - H56
46	111	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C36 - H57
47	49	1	1.3380e-01	4.7062e+05 ;	C37 - C39
47	51	1	1.5050e-01	2.7723e+05 ;	C37 - C41
48	50	1	1.4510e-01	3.2677e+05 ;	C38 - C40
48	52	1	1.5050e-01	2.7723e+05 ;	C38 - C42
49	53	1	1.4510e-01	3.2677e+05 ;	C39 - C43
49	115	1	1.0890e-01	2.8577e+05 ;	C39 - H61
50	53	1	1.3380e-01	4.7062e+05 ;	C40 - C43
50	116	1	1.0890e-01	2.8577e+05 ;	C40 - H62
51	120	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C41 - H66
51	121	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C41 - H67
51	122	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C41 - H68
52	117	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C42 - H63
52	118	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C42 - H64
52	119	1	1.0920e-01	2.8225e+05 ;	C42 - H65
53	123	1	1.0890e-01	2.8577e+05 ;	C43 - H69

[pairs]

	ai	aj	funct	
	1	16	1 ;	0 - C6
	1	19	1 ;	0 - C9
	1	20	1 ;	0 - C10
	1	21	1 ;	0 - C11
	1	54	1 ;	0 - H
	1	64	1 ;	0 - H10
	1	65	1 ;	0 - H11
	1	75	1 ;	0 - H21
	1	76	1 ;	0 - H22
	2	14	1 ;	01 - C4
	2	19	1 ;	01 - C9
	2	22	1 ;	01 - C12
	2	37	1 ;	01 - C27
	2	55	1 ;	01 - H1
	2	60	1 ;	01 - H6
	2	61	1 ;	01 - H7
	2	96	1 ;	01 - H42
	3	26	1 ;	02 - C16
	3	32	1 ;	02 - C22
	3	33	1 ;	02 - C23
	3	77	1 ;	02 - H23
	3	83	1 ;	02 - H29
	3	84	1 ;	02 - H30
	4	19	1 ;	03 - C9
	4	75	1 ;	03 - H21
	4	76	1 ;	03 - H22
	5	27	1 ;	04 - C17
	5	83	1 ;	04 - H29
	5	84	1 ;	04 - H30
	5	93	1 ;	04 - H39

5	94	1 ;	04 - H40
5	95	1 ;	04 - H41
6	13	1 ;	05 - C3
6	37	1 ;	05 - C27
6	96	1 ;	05 - H42
7	8	1 ;	06 - 07
7	42	1 ;	06 - C32
7	45	1 ;	06 - C35
7	100	1 ;	06 - H46
7	101	1 ;	06 - H47
7	102	1 ;	06 - H48
8	40	1 ;	07 - C30
8	48	1 ;	07 - C38
8	99	1 ;	07 - H45
8	108	1 ;	07 - H54
9	39	1 ;	08 - C29
9	100	1 ;	08 - H46
9	101	1 ;	08 - H47
9	109	1 ;	08 - H55
9	110	1 ;	08 - H56
9	111	1 ;	08 - H57
10	19	1 ;	C - C9
10	20	1 ;	C - C10
10	29	1 ;	C - C19
10	34	1 ;	C - C24
10	60	1 ;	C - H6
10	61	1 ;	C - H7
11	20	1 ;	C1 - C10
11	26	1 ;	C1 - C16
11	31	1 ;	C1 - C21
11	64	1 ;	C1 - H10
11	65	1 ;	C1 - H11
12	4	1 ;	C2 - 03
12	18	1 ;	C2 - C8
12	23	1 ;	C2 - C13
12	24	1 ;	C2 - C14
12	62	1 ;	C2 - H8
12	63	1 ;	C2 - H9
12	68	1 ;	C2 - H14
12	69	1 ;	C2 - H15
12	70	1 ;	C2 - H16
12	71	1 ;	C2 - H17
13	18	1 ;	C3 - C8
13	24	1 ;	C3 - C14
13	36	1 ;	C3 - C26
13	58	1 ;	C3 - H4
13	59	1 ;	C3 - H5
13	66	1 ;	C3 - H12
13	67	1 ;	C3 - H13
13	72	1 ;	C3 - H18
13	73	1 ;	C3 - H19
13	74	1 ;	C3 - H20
14	15	1 ;	C4 - C5
14	17	1 ;	C4 - C7
14	57	1 ;	C4 - H3
14	68	1 ;	C4 - H14
14	72	1 ;	C4 - H18
14	73	1 ;	C4 - H19
14	74	1 ;	C4 - H20
14	80	1 ;	C4 - H26
14	81	1 ;	C4 - H27
14	82	1 ;	C4 - H28
15	22	1 ;	C5 - C12
15	28	1 ;	C5 - C18
15	34	1 ;	C5 - C24
15	55	1 ;	C5 - H1
15	75	1 ;	C5 - H21
15	76	1 ;	C5 - H22
16	17	1 ;	C6 - C7
16	25	1 ;	C6 - C15
16	56	1 ;	C6 - H2
16	69	1 ;	C6 - H15
16	70	1 ;	C6 - H16

16	71	1 ;	C6 - H17
16	78	1 ;	C6 - H24
16	85	1 ;	C6 - H31
16	86	1 ;	C6 - H32
16	87	1 ;	C6 - H33
17	21	1 ;	C7 - C11
17	29	1 ;	C7 - C19
17	54	1 ;	C7 - H
18	22	1 ;	C8 - C12
18	55	1 ;	C8 - H1
18	64	1 ;	C8 - H10
18	65	1 ;	C8 - H11
19	57	1 ;	C9 - H3
20	56	1 ;	C10 - H2
20	58	1 ;	C10 - H4
20	59	1 ;	C10 - H5
20	80	1 ;	C10 - H26
20	81	1 ;	C10 - H27
20	82	1 ;	C10 - H28
21	23	1 ;	C11 - C13
21	56	1 ;	C11 - H2
21	62	1 ;	C11 - H8
21	63	1 ;	C11 - H9
22	57	1 ;	C12 - H3
22	58	1 ;	C12 - H4
22	59	1 ;	C12 - H5
23	27	1 ;	C13 - C17
23	32	1 ;	C13 - C22
23	54	1 ;	C13 - H
23	77	1 ;	C13 - H23
24	60	1 ;	C14 - H6
24	61	1 ;	C14 - H7
25	31	1 ;	C15 - C21
25	33	1 ;	C15 - C23
25	83	1 ;	C15 - H29
25	84	1 ;	C15 - H30
25	92	1 ;	C15 - H38
26	30	1 ;	C16 - C20
26	62	1 ;	C16 - H8
26	63	1 ;	C16 - H9
26	79	1 ;	C16 - H25
26	85	1 ;	C16 - H31
26	86	1 ;	C16 - H32
26	87	1 ;	C16 - H33
26	88	1 ;	C16 - H34
26	89	1 ;	C16 - H35
26	90	1 ;	C16 - H36
27	35	1 ;	C17 - C25
27	78	1 ;	C17 - H24
27	88	1 ;	C17 - H34
27	89	1 ;	C17 - H35
27	90	1 ;	C17 - H36
27	91	1 ;	C17 - H37
28	11	1 ;	C18 - C1
28	17	1 ;	C18 - C7
28	56	1 ;	C18 - H2
28	66	1 ;	C18 - H12
28	67	1 ;	C18 - H13
29	58	1 ;	C19 - H4
29	59	1 ;	C19 - H5
29	68	1 ;	C19 - H14
30	32	1 ;	C20 - C22
30	77	1 ;	C20 - H23
30	92	1 ;	C20 - H38
30	93	1 ;	C20 - H39
30	94	1 ;	C20 - H40
30	95	1 ;	C20 - H41
30	97	1 ;	C20 - H43
31	62	1 ;	C21 - H8
31	63	1 ;	C21 - H9
31	78	1 ;	C21 - H24
32	78	1 ;	C22 - H24
32	79	1 ;	C22 - H25

33	79	1 ;	C23 - H25
34	38	1 ;	C24 - C28
34	57	1 ;	C24 - H3
34	98	1 ;	C24 - H44
35	83	1 ;	C25 - H29
35	84	1 ;	C25 - H30
35	97	1 ;	C25 - H43
36	43	1 ;	C26 - C33
36	44	1 ;	C26 - C34
37	47	1 ;	C27 - C37
37	104	1 ;	C27 - H50
37	105	1 ;	C27 - H51
37	106	1 ;	C27 - H52
37	107	1 ;	C27 - H53
38	49	1 ;	C28 - C39
38	51	1 ;	C28 - C41
38	96	1 ;	C28 - H42
39	46	1 ;	C29 - C36
39	48	1 ;	C29 - C38
39	103	1 ;	C29 - H49
39	108	1 ;	C29 - H54
39	113	1 ;	C29 - H59
40	45	1 ;	C30 - C35
40	102	1 ;	C30 - H48
40	109	1 ;	C30 - H55
40	110	1 ;	C30 - H56
40	111	1 ;	C30 - H57
40	112	1 ;	C30 - H58
40	114	1 ;	C30 - H60
41	42	1 ;	C31 - C32
41	50	1 ;	C31 - C40
41	52	1 ;	C31 - C42
41	100	1 ;	C31 - H46
41	101	1 ;	C31 - H47
41	112	1 ;	C31 - H58
42	99	1 ;	C32 - H45
43	47	1 ;	C33 - C37
43	98	1 ;	C33 - H44
43	107	1 ;	C33 - H53
44	53	1 ;	C34 - C43
44	98	1 ;	C34 - H44
44	104	1 ;	C34 - H50
44	105	1 ;	C34 - H51
44	106	1 ;	C34 - H52
44	115	1 ;	C34 - H61
44	120	1 ;	C34 - H66
44	121	1 ;	C34 - H67
44	122	1 ;	C34 - H68
45	53	1 ;	C35 - C43
45	99	1 ;	C35 - H45
45	113	1 ;	C35 - H59
45	116	1 ;	C35 - H62
45	117	1 ;	C35 - H63
45	118	1 ;	C35 - H64
45	119	1 ;	C35 - H65
46	100	1 ;	C36 - H46
46	101	1 ;	C36 - H47
46	114	1 ;	C36 - H60
47	50	1 ;	C37 - C40
47	123	1 ;	C37 - H69
48	49	1 ;	C38 - C39
48	102	1 ;	C38 - H48
48	123	1 ;	C38 - H69
49	107	1 ;	C39 - H53
49	116	1 ;	C39 - H62
49	120	1 ;	C39 - H66
49	121	1 ;	C39 - H67
49	122	1 ;	C39 - H68
50	108	1 ;	C40 - H54
50	115	1 ;	C40 - H61
50	117	1 ;	C40 - H63
50	118	1 ;	C40 - H64
50	119	1 ;	C40 - H65

51	53	1 ;	C41 - C43
51	107	1 ;	C41 - H53
51	115	1 ;	C41 - H61
52	53	1 ;	C42 - C43
52	108	1 ;	C42 - H54
52	116	1 ;	C42 - H62
54	56	1 ;	H - H2
54	62	1 ;	H - H8
54	63	1 ;	H - H9
54	69	1 ;	H - H15
54	70	1 ;	H - H16
54	71	1 ;	H - H17
55	57	1 ;	H1 - H3
55	58	1 ;	H1 - H4
55	59	1 ;	H1 - H5
55	72	1 ;	H1 - H18
55	73	1 ;	H1 - H19
55	74	1 ;	H1 - H20
56	64	1 ;	H2 - H10
56	65	1 ;	H2 - H11
57	60	1 ;	H3 - H6
57	61	1 ;	H3 - H7
60	66	1 ;	H6 - H12
60	67	1 ;	H6 - H13
61	66	1 ;	H7 - H12
61	67	1 ;	H7 - H13
64	68	1 ;	H10 - H14
65	68	1 ;	H11 - H14
66	75	1 ;	H12 - H21
66	76	1 ;	H12 - H22
67	75	1 ;	H13 - H21
67	76	1 ;	H13 - H22
77	78	1 ;	H23 - H24
77	79	1 ;	H23 - H25
77	88	1 ;	H23 - H34
77	89	1 ;	H23 - H35
77	90	1 ;	H23 - H36
79	83	1 ;	H25 - H29
79	84	1 ;	H25 - H30
79	92	1 ;	H25 - H38
83	91	1 ;	H29 - H37
84	91	1 ;	H30 - H37
91	93	1 ;	H37 - H39
91	94	1 ;	H37 - H40
91	95	1 ;	H37 - H41
91	97	1 ;	H37 - H43
96	98	1 ;	H42 - H44
99	100	1 ;	H45 - H46
99	101	1 ;	H45 - H47
99	102	1 ;	H45 - H48
99	112	1 ;	H45 - H58
100	103	1 ;	H46 - H49
101	103	1 ;	H47 - H49
102	108	1 ;	H48 - H54
102	113	1 ;	H48 - H59
103	109	1 ;	H49 - H55
103	110	1 ;	H49 - H56
103	111	1 ;	H49 - H57
103	114	1 ;	H49 - H60
115	123	1 ;	H61 - H69
116	123	1 ;	H62 - H69

[angles]

;	ai	aj	ak	funct	theta	cth		
	1	12	11	1	1.0842e+02	5.6718e+02 ;	0 - C2	- C1
	1	12	17	1	1.0842e+02	5.6718e+02 ;	0 - C2	- C7
	1	12	56	1	1.0882e+02	4.2543e+02 ;	0 - C2	- H2
	1	28	4	1	1.2333e+02	6.3538e+02 ;	0 - C18	- 03
	1	28	24	1	1.1196e+02	5.7957e+02 ;	0 - C18	- C14
	2	13	10	1	1.0842e+02	5.6718e+02 ;	01 - C3	- C
	2	13	15	1	1.0842e+02	5.6718e+02 ;	01 - C3	- C5
	2	13	57	1	1.0882e+02	4.2543e+02 ;	01 - C3	- H3
	2	34	6	1	1.2333e+02	6.3538e+02 ;	01 - C24	- 05

2	34	36	1	1.1262e+02	5.8618e+02 ;	01 - C24	- C26
3	27	25	1	1.0943e+02	5.6668e+02 ;	02 - C17	- C15
3	27	30	1	1.0943e+02	5.6668e+02 ;	02 - C17	- C20
3	27	79	1	1.0988e+02	4.2652e+02 ;	02 - C17	- H25
4	28	24	1	1.2311e+02	5.6928e+02 ;	03 - C18	- C14
5	33	30	1	1.0943e+02	5.6668e+02 ;	04 - C23	- C20
5	33	35	1	1.0943e+02	5.6668e+02 ;	04 - C23	- C25
5	33	91	1	1.0988e+02	4.2652e+02 ;	04 - C23	- H37
6	34	36	1	1.2292e+02	5.7965e+02 ;	05 - C24	- C26
7	39	40	1	1.0943e+02	5.6668e+02 ;	06 - C29	- C30
7	39	41	1	1.0943e+02	5.6668e+02 ;	06 - C29	- C31
7	39	99	1	1.0988e+02	4.2652e+02 ;	06 - C29	- H45
8	41	39	1	1.0943e+02	5.6668e+02 ;	07 - C31	- C29
8	41	45	1	1.1021e+02	5.7053e+02 ;	07 - C31	- C35
8	41	102	1	1.0988e+02	4.2652e+02 ;	07 - C31	- H48
9	42	40	1	1.0943e+02	5.6668e+02 ;	08 - C32	- C30
9	42	46	1	1.0943e+02	5.6668e+02 ;	08 - C32	- C36
9	42	103	1	1.0988e+02	4.2652e+02 ;	08 - C32	- H49
10	13	15	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C - C3	- C5
10	13	57	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C - C3	- H3
10	14	18	1	1.1144e+02	5.3162e+02 ;	C - C4	- C8
10	14	58	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C - C4	- H4
10	14	59	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C - C4	- H5
10	22	72	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C - C12	- H18
10	22	73	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C - C12	- H19
10	22	74	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C - C12	- H20
11	12	17	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C1 - C2	- C7
11	12	56	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C1 - C2	- H2
11	16	23	1	1.1144e+02	5.3162e+02 ;	C1 - C6	- C13
11	16	62	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C1 - C6	- H8
11	16	63	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C1 - C6	- H9
11	21	69	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C1 - C11	- H15
11	21	70	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C1 - C11	- H16
11	21	71	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C1 - C11	- H17
12	1	28	1	1.1514e+02	5.3246e+02 ;	C2 - 0	- C18
12	11	16	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C2 - C1	- C6
12	11	21	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C2 - C1	- C11
12	11	54	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C2 - C1	- H
12	17	20	1	1.1144e+02	5.3162e+02 ;	C2 - C7	- C10
12	17	64	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C2 - C7	- H10
12	17	65	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C2 - C7	- H11
13	2	34	1	1.1514e+02	5.3246e+02 ;	C3 - 01	- C24
13	10	14	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C3 - C	- C4
13	10	22	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C3 - C	- C12
13	10	55	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C3 - C	- H1
13	15	19	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C3 - C5	- C9
13	15	60	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C3 - C5	- H6
13	15	61	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C3 - C5	- H7
14	10	22	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C4 - C	- C12
14	10	55	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C4 - C	- H1
14	18	20	1	1.2342e+02	5.3831e+02 ;	C4 - C8	- C10
14	18	29	1	1.1652e+02	5.2467e+02 ;	C4 - C8	- C19
15	13	57	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C5 - C3	- H3
15	19	24	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C5 - C9	- C14
15	19	66	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C5 - C9	- H12
15	19	67	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C5 - C9	- H13
16	11	21	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C6 - C1	- C11
16	11	54	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C6 - C1	- H
16	23	26	1	1.2342e+02	5.3831e+02 ;	C6 - C13	- C16
16	23	31	1	1.1652e+02	5.2467e+02 ;	C6 - C13	- C21
17	12	56	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C7 - C2	- H2
17	20	18	1	1.2342e+02	5.3831e+02 ;	C7 - C10	- C8
17	20	68	1	1.1730e+02	3.8208e+02 ;	C7 - C10	- H14
18	14	58	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C8 - C4	- H4
18	14	59	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C8 - C4	- H5
18	20	68	1	1.2094e+02	4.1873e+02 ;	C8 - C10	- H14
18	29	80	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C8 - C19	- H26
18	29	81	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C8 - C19	- H27
18	29	82	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C8 - C19	- H28
19	15	60	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C9 - C5	- H6
19	15	61	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C9 - C5	- H7
19	24	28	1	1.1053e+02	5.3379e+02 ;	C9 - C14	- C18
19	24	75	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C9 - C14	- H21

19	24	76	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C9 - C14	- H22
20	17	64	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C10 - C7	- H10
20	17	65	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C10 - C7	- H11
20	18	29	1	1.2342e+02	5.3831e+02 ;	C10 - C8	- C19
21	11	54	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C11 - C1	- H
22	10	55	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C12 - C	- H1
23	16	62	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C13 - C6	- H8
23	16	63	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C13 - C6	- H9
23	26	25	1	1.2342e+02	5.3831e+02 ;	C13 - C16	- C15
23	26	78	1	1.2094e+02	4.1873e+02 ;	C13 - C16	- H24
23	31	85	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C13 - C21	- H31
23	31	86	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C13 - C21	- H32
23	31	87	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C13 - C21	- H33
24	19	66	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C14 - C9	- H12
24	19	67	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C14 - C9	- H13
25	26	78	1	1.1730e+02	3.8208e+02 ;	C15 - C16	- H24
25	27	30	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C15 - C17	- C20
25	27	79	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C15 - C17	- H25
25	32	88	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C15 - C22	- H34
25	32	89	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C15 - C22	- H35
25	32	90	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C15 - C22	- H36
26	23	31	1	1.2342e+02	5.3831e+02 ;	C16 - C13	- C21
26	25	27	1	1.1144e+02	5.3162e+02 ;	C16 - C15	- C17
26	25	32	1	1.1144e+02	5.3162e+02 ;	C16 - C15	- C22
26	25	77	1	1.1049e+02	3.9355e+02 ;	C16 - C15	- H23
27	3	92	1	1.0816e+02	3.9405e+02 ;	C17 - 02	- H38
27	25	32	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C17 - C15	- C22
27	25	77	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C17 - C15	- H23
27	30	33	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C17 - C20	- C23
27	30	83	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C17 - C20	- H29
27	30	84	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C17 - C20	- H30
28	24	75	1	1.0968e+02	3.9497e+02 ;	C18 - C14	- H21
28	24	76	1	1.0968e+02	3.9497e+02 ;	C18 - C14	- H22
30	27	79	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C20 - C17	- H25
30	33	35	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C20 - C23	- C25
30	33	91	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C20 - C23	- H37
32	25	77	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C22 - C15	- H23
33	5	97	1	1.0816e+02	3.9405e+02 ;	C23 - 04	- H43
33	30	83	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C23 - C20	- H29
33	30	84	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C23 - C20	- H30
33	35	93	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C23 - C25	- H39
33	35	94	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C23 - C25	- H40
33	35	95	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C23 - C25	- H41
34	36	37	1	1.2641e+02	5.3773e+02 ;	C24 - C26	- C27
34	36	96	1	1.1726e+02	3.8987e+02 ;	C24 - C26	- H42
35	33	91	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C25 - C23	- H37
36	37	38	1	1.2433e+02	5.4743e+02 ;	C26 - C27	- C28
36	37	98	1	1.1798e+02	4.2041e+02 ;	C26 - C27	- H44
37	36	96	1	1.1829e+02	4.1991e+02 ;	C27 - C26	- H42
37	38	43	1	1.1801e+02	5.3154e+02 ;	C27 - C28	- C33
37	38	44	1	1.2433e+02	5.4743e+02 ;	C27 - C28	- C34
38	37	98	1	1.1590e+02	3.9748e+02 ;	C28 - C27	- H44
38	43	104	1	1.1098e+02	3.9330e+02 ;	C28 - C33	- H50
38	43	105	1	1.1098e+02	3.9330e+02 ;	C28 - C33	- H51
38	43	106	1	1.1098e+02	3.9330e+02 ;	C28 - C33	- H52
38	44	47	1	1.2405e+02	5.4802e+02 ;	C28 - C34	- C37
38	44	107	1	1.1829e+02	4.1991e+02 ;	C28 - C34	- H53
39	7	112	1	1.0816e+02	3.9405e+02 ;	C29 - 06	- H58
39	40	42	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C29 - C30	- C32
39	40	100	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C29 - C30	- H46
39	40	101	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C29 - C30	- H47
39	41	45	1	1.1144e+02	5.3162e+02 ;	C29 - C31	- C35
39	41	102	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C29 - C31	- H48
40	39	41	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C30 - C29	- C31
40	39	99	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C30 - C29	- H45
40	42	46	1	1.1063e+02	5.2894e+02 ;	C30 - C32	- C36
40	42	103	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C30 - C32	- H49
41	8	113	1	1.0816e+02	3.9405e+02 ;	C31 - 07	- H59
41	39	99	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C31 - C29	- H45
41	45	48	1	1.2302e+02	5.3714e+02 ;	C31 - C35	- C38
41	45	108	1	1.1730e+02	3.8208e+02 ;	C31 - C35	- H54
42	9	114	1	1.0816e+02	3.9405e+02 ;	C32 - 08	- H60
42	40	100	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C32 - C30	- H46

42	40	101	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C32 - C30	- H47
42	46	109	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C32 - C36	- H55
42	46	110	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C32 - C36	- H56
42	46	111	1	1.1005e+02	3.8802e+02 ;	C32 - C36	- H57
43	38	44	1	1.2203e+02	5.4015e+02 ;	C33 - C28	- C34
44	47	49	1	1.2405e+02	5.4802e+02 ;	C34 - C37	- C39
44	47	51	1	1.1659e+02	5.3480e+02 ;	C34 - C37	- C41
45	41	102	1	1.1046e+02	3.9355e+02 ;	C35 - C31	- H48
45	48	50	1	1.2308e+02	5.5003e+02 ;	C35 - C38	- C40
45	48	52	1	1.2289e+02	5.3806e+02 ;	C35 - C38	- C42
46	42	103	1	1.1007e+02	3.8794e+02 ;	C36 - C32	- H49
47	44	107	1	1.1590e+02	3.9748e+02 ;	C37 - C34	- H53
47	49	53	1	1.2433e+02	5.4743e+02 ;	C37 - C39	- C43
47	49	115	1	1.1798e+02	4.2041e+02 ;	C37 - C39	- H61
47	51	120	1	1.1098e+02	3.9330e+02 ;	C37 - C41	- H66
47	51	121	1	1.1098e+02	3.9330e+02 ;	C37 - C41	- H67
47	51	122	1	1.1098e+02	3.9330e+02 ;	C37 - C41	- H68
48	45	108	1	1.2119e+02	4.1480e+02 ;	C38 - C35	- H54
48	50	53	1	1.2405e+02	5.4802e+02 ;	C38 - C40	- C43
48	50	116	1	1.1590e+02	3.9748e+02 ;	C38 - C40	- H62
48	52	117	1	1.1098e+02	3.9330e+02 ;	C38 - C42	- H63
48	52	118	1	1.1098e+02	3.9330e+02 ;	C38 - C42	- H64
48	52	119	1	1.1098e+02	3.9330e+02 ;	C38 - C42	- H65
49	47	51	1	1.2218e+02	5.3982e+02 ;	C39 - C37	- C41
49	53	50	1	1.2433e+02	5.4743e+02 ;	C39 - C43	- C40
49	53	123	1	1.1590e+02	3.9748e+02 ;	C39 - C43	- H69
50	48	52	1	1.1659e+02	5.3480e+02 ;	C40 - C38	- C42
50	53	123	1	1.1798e+02	4.2041e+02 ;	C40 - C43	- H69
53	49	115	1	1.1590e+02	3.9748e+02 ;	C43 - C39	- H61
53	50	116	1	1.1829e+02	4.1991e+02 ;	C43 - C40	- H62
58	14	59	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H4 - C4	- H5
60	15	61	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H6 - C5	- H7
62	16	63	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H8 - C6	- H9
64	17	65	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H10 - C7	- H11
66	19	67	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H12 - C9	- H13
69	21	70	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H15 - C11	- H16
69	21	71	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H15 - C11	- H17
70	21	71	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H16 - C11	- H17
72	22	73	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H18 - C12	- H19
72	22	74	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H18 - C12	- H20
73	22	74	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H19 - C12	- H20
75	24	76	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H21 - C14	- H22
80	29	81	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H26 - C19	- H27
80	29	82	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H26 - C19	- H28
81	29	82	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H27 - C19	- H28
83	30	84	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H29 - C20	- H30
85	31	86	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H31 - C21	- H32
85	31	87	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H31 - C21	- H33
86	31	87	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H32 - C21	- H33
88	32	89	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H34 - C22	- H35
88	32	90	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H34 - C22	- H36
89	32	90	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H35 - C22	- H36
93	35	94	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H39 - C25	- H40
93	35	95	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H39 - C25	- H41
94	35	95	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H40 - C25	- H41
100	40	101	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H46 - C30	- H47
104	43	105	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H50 - C33	- H51
104	43	106	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H50 - C33	- H52
105	43	106	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H51 - C33	- H52
109	46	110	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H55 - C36	- H56
109	46	111	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H55 - C36	- H57
110	46	111	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H56 - C36	- H57
117	52	118	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H63 - C42	- H64
117	52	119	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H63 - C42	- H65
118	52	119	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H64 - C42	- H65
120	51	121	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H66 - C41	- H67
120	51	122	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H66 - C41	- H68
121	51	122	1	1.0835e+02	3.2995e+02 ;	H67 - C41	- H68

[dihedrals] ; props

; for gromacs 4.5 or higher, using funct 9

i	j	k	l	func	phase	kd	pn					
1	12	11	16	9	0.00	0.65084	3	;	0-	C2-	C1-	C6

1	12	11	21	9	0.00	0.65084	3 ;	0-	C2-	C1-	C11
1	12	11	54	9	0.00	0.00000	0 ;	0-	C2-	C1-	H
1	12	11	54	9	0.00	1.04600	1 ;	0-	C2-	C1-	H
1	12	17	20	9	0.00	0.65084	3 ;	0-	C2-	C7-	C10
1	12	17	64	9	0.00	0.00000	0 ;	0-	C2-	C7-	H10
1	12	17	64	9	0.00	1.04600	1 ;	0-	C2-	C7-	H10
1	12	17	65	9	0.00	0.00000	0 ;	0-	C2-	C7-	H11
1	12	17	65	9	0.00	1.04600	1 ;	0-	C2-	C7-	H11
1	28	24	19	9	180.00	0.00000	2 ;	0-	C18-	C14-	C9
1	28	24	75	9	180.00	0.00000	2 ;	0-	C18-	C14-	H21
1	28	24	76	9	180.00	0.00000	2 ;	0-	C18-	C14-	H22
2	13	10	14	9	0.00	0.65084	3 ;	01-	C3-	C-	C4
2	13	10	22	9	0.00	0.65084	3 ;	01-	C3-	C-	C12
2	13	10	55	9	0.00	0.00000	0 ;	01-	C3-	C-	H1
2	13	10	55	9	0.00	1.04600	1 ;	01-	C3-	C-	H1
2	13	15	19	9	0.00	0.65084	3 ;	01-	C3-	C5-	C9
2	13	15	60	9	0.00	0.00000	0 ;	01-	C3-	C5-	H6
2	13	15	60	9	0.00	1.04600	1 ;	01-	C3-	C5-	H6
2	13	15	61	9	0.00	0.00000	0 ;	01-	C3-	C5-	H7
2	13	15	61	9	0.00	1.04600	1 ;	01-	C3-	C5-	H7
2	34	36	37	9	180.00	9.10020	2 ;	01-	C24-	C26-	C27
2	34	36	96	9	180.00	9.10020	2 ;	01-	C24-	C26-	H42
3	27	25	26	9	0.00	0.65084	3 ;	02-	C17-	C15-	C16
3	27	25	32	9	0.00	0.65084	3 ;	02-	C17-	C15-	C22
3	27	25	77	9	0.00	0.00000	0 ;	02-	C17-	C15-	H23
3	27	25	77	9	0.00	1.04600	1 ;	02-	C17-	C15-	H23
3	27	30	33	9	0.00	0.65084	3 ;	02-	C17-	C20-	C23
3	27	30	83	9	0.00	0.00000	0 ;	02-	C17-	C20-	H29
3	27	30	83	9	0.00	1.04600	1 ;	02-	C17-	C20-	H29
3	27	30	84	9	0.00	0.00000	0 ;	02-	C17-	C20-	H30
3	27	30	84	9	0.00	1.04600	1 ;	02-	C17-	C20-	H30
4	28	24	19	9	180.00	0.00000	2 ;	03-	C18-	C14-	C9
4	28	24	75	9	0.00	3.34720	1 ;	03-	C18-	C14-	H21
4	28	24	75	9	180.00	0.33472	3 ;	03-	C18-	C14-	H21
4	28	24	76	9	0.00	3.34720	1 ;	03-	C18-	C14-	H22
4	28	24	76	9	180.00	0.33472	3 ;	03-	C18-	C14-	H22
5	33	30	27	9	0.00	0.65084	3 ;	04-	C23-	C20-	C17
5	33	30	83	9	0.00	0.00000	0 ;	04-	C23-	C20-	H29
5	33	30	83	9	0.00	1.04600	1 ;	04-	C23-	C20-	H29
5	33	30	84	9	0.00	0.00000	0 ;	04-	C23-	C20-	H30
5	33	30	84	9	0.00	1.04600	1 ;	04-	C23-	C20-	H30
5	33	35	93	9	0.00	0.00000	0 ;	04-	C23-	C25-	H39
5	33	35	93	9	0.00	1.04600	1 ;	04-	C23-	C25-	H39
5	33	35	94	9	0.00	0.00000	0 ;	04-	C23-	C25-	H40
5	33	35	94	9	0.00	1.04600	1 ;	04-	C23-	C25-	H40
5	33	35	95	9	0.00	0.00000	0 ;	04-	C23-	C25-	H41
5	33	35	95	9	0.00	1.04600	1 ;	04-	C23-	C25-	H41
6	34	2	13	9	180.00	5.85760	1 ;	05-	C24-	01-	C3
6	34	2	13	9	180.00	11.29680	2 ;	05-	C24-	01-	C3
6	34	36	37	9	180.00	9.10020	2 ;	05-	C24-	C26-	C27
6	34	36	96	9	180.00	9.10020	2 ;	05-	C24-	C26-	H42
7	39	40	42	9	0.00	0.65084	3 ;	06-	C29-	C30-	C32
7	39	40	100	9	0.00	0.00000	0 ;	06-	C29-	C30-	H46
7	39	40	100	9	0.00	1.04600	1 ;	06-	C29-	C30-	H46
7	39	40	101	9	0.00	0.00000	0 ;	06-	C29-	C30-	H47
7	39	40	101	9	0.00	1.04600	1 ;	06-	C29-	C30-	H47
7	39	41	8	9	0.00	0.60250	3 ;	06-	C29-	C31-	07
7	39	41	8	9	0.00	4.91620	2 ;	06-	C29-	C31-	07
7	39	41	45	9	0.00	0.65084	3 ;	06-	C29-	C31-	C35
7	39	41	102	9	0.00	0.00000	0 ;	06-	C29-	C31-	H48
7	39	41	102	9	0.00	1.04600	1 ;	06-	C29-	C31-	H48
8	41	39	40	9	0.00	0.65084	3 ;	07-	C31-	C29-	C30
8	41	39	99	9	0.00	0.00000	0 ;	07-	C31-	C29-	H45
8	41	39	99	9	0.00	1.04600	1 ;	07-	C31-	C29-	H45
8	41	45	48	9	0.00	0.00000	0 ;	07-	C31-	C35-	C38
8	41	45	108	9	0.00	0.00000	0 ;	07-	C31-	C35-	H54
9	42	40	39	9	0.00	0.65084	3 ;	08-	C32-	C30-	C29
9	42	40	100	9	0.00	0.00000	0 ;	08-	C32-	C30-	H46
9	42	40	100	9	0.00	1.04600	1 ;	08-	C32-	C30-	H46
9	42	40	101	9	0.00	0.00000	0 ;	08-	C32-	C30-	H47
9	42	40	101	9	0.00	1.04600	1 ;	08-	C32-	C30-	H47
9	42	46	109	9	0.00	0.00000	0 ;	08-	C32-	C36-	H55
9	42	46	109	9	0.00	1.04600	1 ;	08-	C32-	C36-	H55

9	42	46	110	9	0.00	0.00000	0 ;	08-	C32-	C36-	H56
9	42	46	110	9	0.00	1.04600	1 ;	08-	C32-	C36-	H56
9	42	46	111	9	0.00	0.00000	0 ;	08-	C32-	C36-	H57
9	42	46	111	9	0.00	1.04600	1 ;	08-	C32-	C36-	H57
10	13	2	34	9	0.00	1.60247	3 ;	C-	C3-	01-	C24
10	13	2	34	9	180.00	3.34720	1 ;	C-	C3-	01-	C24
10	13	15	19	9	0.00	0.75312	3 ;	C-	C3-	C5-	C9
10	13	15	19	9	180.00	0.83680	1 ;	C-	C3-	C5-	C9
10	13	15	19	9	180.00	1.04600	2 ;	C-	C3-	C5-	C9
10	13	15	60	9	0.00	0.66944	3 ;	C-	C3-	C5-	H6
10	13	15	61	9	0.00	0.66944	3 ;	C-	C3-	C5-	H7
10	14	18	20	9	0.00	0.00000	0 ;	C-	C4-	C8-	C10
10	14	18	29	9	0.00	0.00000	0 ;	C-	C4-	C8-	C19
11	12	17	20	9	0.00	0.65084	3 ;	C1-	C2-	C7-	C10
11	12	17	64	9	0.00	0.66944	3 ;	C1-	C2-	C7-	H10
11	12	17	65	9	0.00	0.66944	3 ;	C1-	C2-	C7-	H11
11	16	23	26	9	0.00	0.00000	0 ;	C1-	C6-	C13-	C16
11	16	23	31	9	0.00	0.00000	0 ;	C1-	C6-	C13-	C21
12	1	28	4	9	180.00	5.85760	1 ;	C2-	0-	C18-	03
12	1	28	4	9	180.00	11.29680	2 ;	C2-	0-	C18-	03
12	1	28	24	9	180.00	11.29680	2 ;	C2-	0-	C18-	C14
12	11	16	23	9	0.00	0.65084	3 ;	C2-	C1-	C6-	C13
12	11	16	62	9	0.00	0.66944	3 ;	C2-	C1-	C6-	H8
12	11	16	63	9	0.00	0.66944	3 ;	C2-	C1-	C6-	H9
12	11	21	69	9	0.00	0.66944	3 ;	C2-	C1-	C11-	H15
12	11	21	70	9	0.00	0.66944	3 ;	C2-	C1-	C11-	H16
12	11	21	71	9	0.00	0.66944	3 ;	C2-	C1-	C11-	H17
12	17	20	18	9	0.00	0.00000	0 ;	C2-	C7-	C10-	C8
12	17	20	68	9	0.00	0.00000	0 ;	C2-	C7-	C10-	H14
13	2	34	36	9	180.00	11.29680	2 ;	C3-	01-	C24-	C26
13	10	14	18	9	0.00	0.65084	3 ;	C3-	C-	C4-	C8
13	10	14	58	9	0.00	0.66944	3 ;	C3-	C-	C4-	H4
13	10	14	59	9	0.00	0.66944	3 ;	C3-	C-	C4-	H5
13	10	22	72	9	0.00	0.66944	3 ;	C3-	C-	C12-	H18
13	10	22	73	9	0.00	0.66944	3 ;	C3-	C-	C12-	H19
13	10	22	74	9	0.00	0.66944	3 ;	C3-	C-	C12-	H20
13	15	19	24	9	0.00	0.75312	3 ;	C3-	C5-	C9-	C14
13	15	19	24	9	180.00	0.83680	1 ;	C3-	C5-	C9-	C14
13	15	19	24	9	180.00	1.04600	2 ;	C3-	C5-	C9-	C14
13	15	19	66	9	0.00	0.66944	3 ;	C3-	C5-	C9-	H12
13	15	19	67	9	0.00	0.66944	3 ;	C3-	C5-	C9-	H13
14	10	13	15	9	0.00	0.75312	3 ;	C4-	C-	C3-	C5
14	10	13	15	9	180.00	0.83680	1 ;	C4-	C-	C3-	C5
14	10	13	15	9	180.00	1.04600	2 ;	C4-	C-	C3-	C5
14	10	13	57	9	0.00	0.65084	3 ;	C4-	C-	C3-	H3
14	10	22	72	9	0.00	0.66944	3 ;	C4-	C-	C12-	H18
14	10	22	73	9	0.00	0.66944	3 ;	C4-	C-	C12-	H19
14	10	22	74	9	0.00	0.66944	3 ;	C4-	C-	C12-	H20
14	18	20	17	9	180.00	7.94960	1 ;	C4-	C8-	C10-	C7
14	18	20	17	9	180.00	27.82360	2 ;	C4-	C8-	C10-	C7
14	18	20	68	9	180.00	27.82360	2 ;	C4-	C8-	C10-	H14
14	18	29	80	9	0.00	0.00000	0 ;	C4-	C8-	C19-	H26
14	18	29	81	9	0.00	0.00000	0 ;	C4-	C8-	C19-	H27
14	18	29	82	9	0.00	0.00000	0 ;	C4-	C8-	C19-	H28
15	13	2	34	9	0.00	1.60247	3 ;	C5-	C3-	01-	C24
15	13	2	34	9	180.00	3.34720	1 ;	C5-	C3-	01-	C24
15	13	10	22	9	0.00	0.75312	3 ;	C5-	C3-	C-	C12
15	13	10	22	9	180.00	0.83680	1 ;	C5-	C3-	C-	C12
15	13	10	22	9	180.00	1.04600	2 ;	C5-	C3-	C-	C12
15	13	10	55	9	0.00	0.66944	3 ;	C5-	C3-	C-	H1
15	19	24	28	9	0.00	0.65084	3 ;	C5-	C9-	C14-	C18
15	19	24	75	9	0.00	0.66944	3 ;	C5-	C9-	C14-	H21
15	19	24	76	9	0.00	0.66944	3 ;	C5-	C9-	C14-	H22
16	11	12	17	9	0.00	0.75312	3 ;	C6-	C1-	C2-	C7
16	11	12	17	9	180.00	0.83680	1 ;	C6-	C1-	C2-	C7
16	11	12	17	9	180.00	1.04600	2 ;	C6-	C1-	C2-	C7
16	11	12	56	9	0.00	0.65084	3 ;	C6-	C1-	C2-	H2
16	11	21	69	9	0.00	0.66944	3 ;	C6-	C1-	C11-	H15
16	11	21	70	9	0.00	0.66944	3 ;	C6-	C1-	C11-	H16
16	11	21	71	9	0.00	0.66944	3 ;	C6-	C1-	C11-	H17
16	23	26	25	9	180.00	7.94960	1 ;	C6-	C13-	C16-	C15
16	23	26	25	9	180.00	27.82360	2 ;	C6-	C13-	C16-	C15
16	23	26	78	9	180.00	27.82360	2 ;	C6-	C13-	C16-	H24

16	23	31	85	9	0.00	0.00000	0 ;	C6-	C13-	C21-	H31
16	23	31	86	9	0.00	0.00000	0 ;	C6-	C13-	C21-	H32
16	23	31	87	9	0.00	0.00000	0 ;	C6-	C13-	C21-	H33
17	12	11	21	9	0.00	0.75312	3 ;	C7-	C2-	C1-	C11
17	12	11	21	9	180.00	0.83680	1 ;	C7-	C2-	C1-	C11
17	12	11	21	9	180.00	1.04600	2 ;	C7-	C2-	C1-	C11
17	12	11	54	9	0.00	0.66944	3 ;	C7-	C2-	C1-	H
17	20	18	29	9	180.00	7.94960	1 ;	C7-	C10-	C8-	C19
17	20	18	29	9	180.00	27.82360	2 ;	C7-	C10-	C8-	C19
18	14	10	22	9	0.00	0.65084	3 ;	C8-	C4-	C-	C12
18	14	10	55	9	0.00	0.65084	3 ;	C8-	C4-	C-	H1
18	20	17	64	9	0.00	4.81160	1 ;	C8-	C10-	C7-	H10
18	20	17	64	9	180.00	1.58992	3 ;	C8-	C10-	C7-	H10
18	20	17	65	9	0.00	4.81160	1 ;	C8-	C10-	C7-	H11
18	20	17	65	9	180.00	1.58992	3 ;	C8-	C10-	C7-	H11
19	15	13	57	9	0.00	0.65084	3 ;	C9-	C5-	C3-	H3
20	17	12	56	9	0.00	0.65084	3 ;	C10-	C7-	C2-	H2
20	18	14	58	9	0.00	4.81160	1 ;	C10-	C8-	C4-	H4
20	18	14	58	9	180.00	1.58992	3 ;	C10-	C8-	C4-	H4
20	18	14	59	9	0.00	4.81160	1 ;	C10-	C8-	C4-	H5
20	18	14	59	9	180.00	1.58992	3 ;	C10-	C8-	C4-	H5
20	18	29	80	9	0.00	4.81160	1 ;	C10-	C8-	C19-	H26
20	18	29	80	9	180.00	1.58992	3 ;	C10-	C8-	C19-	H26
20	18	29	81	9	0.00	4.81160	1 ;	C10-	C8-	C19-	H27
20	18	29	81	9	180.00	1.58992	3 ;	C10-	C8-	C19-	H27
20	18	29	82	9	0.00	4.81160	1 ;	C10-	C8-	C19-	H28
20	18	29	82	9	180.00	1.58992	3 ;	C10-	C8-	C19-	H28
21	11	12	56	9	0.00	0.65084	3 ;	C11-	C1-	C2-	H2
21	11	16	23	9	0.00	0.65084	3 ;	C11-	C1-	C6-	C13
21	11	16	62	9	0.00	0.66944	3 ;	C11-	C1-	C6-	H8
21	11	16	63	9	0.00	0.66944	3 ;	C11-	C1-	C6-	H9
22	10	13	57	9	0.00	0.65084	3 ;	C12-	C-	C3-	H3
22	10	14	58	9	0.00	0.66944	3 ;	C12-	C-	C4-	H4
22	10	14	59	9	0.00	0.66944	3 ;	C12-	C-	C4-	H5
23	16	11	54	9	0.00	0.65084	3 ;	C13-	C6-	C1-	H
23	26	25	27	9	0.00	0.00000	0 ;	C13-	C16-	C15-	C17
23	26	25	32	9	0.00	0.00000	0 ;	C13-	C16-	C15-	C22
23	26	25	77	9	0.00	4.81160	1 ;	C13-	C16-	C15-	H23
23	26	25	77	9	180.00	1.58992	3 ;	C13-	C16-	C15-	H23
24	19	15	60	9	0.00	0.66944	3 ;	C14-	C9-	C5-	H6
24	19	15	61	9	0.00	0.66944	3 ;	C14-	C9-	C5-	H7
25	26	23	31	9	180.00	7.94960	1 ;	C15-	C16-	C13-	C21
25	26	23	31	9	180.00	27.82360	2 ;	C15-	C16-	C13-	C21
25	27	3	92	9	0.00	0.66944	3 ;	C15-	C17-	02-	H38
25	27	3	92	9	0.00	1.04600	1 ;	C15-	C17-	02-	H38
25	27	30	33	9	0.00	0.75312	3 ;	C15-	C17-	C20-	C23
25	27	30	33	9	180.00	0.83680	1 ;	C15-	C17-	C20-	C23
25	27	30	33	9	180.00	1.04600	2 ;	C15-	C17-	C20-	C23
25	27	30	83	9	0.00	0.66944	3 ;	C15-	C17-	C20-	H29
25	27	30	84	9	0.00	0.66944	3 ;	C15-	C17-	C20-	H30
26	23	16	62	9	0.00	4.81160	1 ;	C16-	C13-	C6-	H8
26	23	16	62	9	180.00	1.58992	3 ;	C16-	C13-	C6-	H8
26	23	16	63	9	0.00	4.81160	1 ;	C16-	C13-	C6-	H9
26	23	16	63	9	180.00	1.58992	3 ;	C16-	C13-	C6-	H9
26	23	31	85	9	0.00	4.81160	1 ;	C16-	C13-	C21-	H31
26	23	31	85	9	180.00	1.58992	3 ;	C16-	C13-	C21-	H31
26	23	31	86	9	0.00	4.81160	1 ;	C16-	C13-	C21-	H32
26	23	31	86	9	180.00	1.58992	3 ;	C16-	C13-	C21-	H32
26	23	31	87	9	0.00	4.81160	1 ;	C16-	C13-	C21-	H33
26	23	31	87	9	180.00	1.58992	3 ;	C16-	C13-	C21-	H33
26	25	27	30	9	0.00	0.65084	3 ;	C16-	C15-	C17-	C20
26	25	27	79	9	0.00	0.65084	3 ;	C16-	C15-	C17-	H25
26	25	32	88	9	0.00	0.65084	3 ;	C16-	C15-	C22-	H34
26	25	32	89	9	0.00	0.65084	3 ;	C16-	C15-	C22-	H35
26	25	32	90	9	0.00	0.65084	3 ;	C16-	C15-	C22-	H36
27	25	26	78	9	0.00	0.00000	0 ;	C17-	C15-	C16-	H24
27	25	32	88	9	0.00	0.66944	3 ;	C17-	C15-	C22-	H34
27	25	32	89	9	0.00	0.66944	3 ;	C17-	C15-	C22-	H35
27	25	32	90	9	0.00	0.66944	3 ;	C17-	C15-	C22-	H36
27	30	33	35	9	0.00	0.75312	3 ;	C17-	C20-	C23-	C25
27	30	33	35	9	180.00	0.83680	1 ;	C17-	C20-	C23-	C25
27	30	33	35	9	180.00	1.04600	2 ;	C17-	C20-	C23-	C25
27	30	33	91	9	0.00	0.65084	3 ;	C17-	C20-	C23-	H37

28	1	12	11	9	0.00	1.60247	3 ;	C18-	0-	C2-	C1
28	1	12	11	9	180.00	3.34720	1 ;	C18-	0-	C2-	C1
28	1	12	17	9	0.00	1.60247	3 ;	C18-	0-	C2-	C7
28	1	12	17	9	180.00	3.34720	1 ;	C18-	0-	C2-	C7
28	1	12	56	9	0.00	1.60387	3 ;	C18-	0-	C2-	H2
28	24	19	66	9	0.00	0.65084	3 ;	C18-	C14-	C9-	H12
28	24	19	67	9	0.00	0.65084	3 ;	C18-	C14-	C9-	H13
29	18	14	58	9	0.00	0.00000	0 ;	C19-	C8-	C4-	H4
29	18	14	59	9	0.00	0.00000	0 ;	C19-	C8-	C4-	H5
29	18	20	68	9	180.00	27.82360	2 ;	C19-	C8-	C10-	H14
30	27	3	92	9	0.00	0.66944	3 ;	C20-	C17-	02-	H38
30	27	3	92	9	0.00	1.04600	1 ;	C20-	C17-	02-	H38
30	27	25	32	9	0.00	0.75312	3 ;	C20-	C17-	C15-	C22
30	27	25	32	9	180.00	0.83680	1 ;	C20-	C17-	C15-	C22
30	27	25	32	9	180.00	1.04600	2 ;	C20-	C17-	C15-	C22
30	27	25	77	9	0.00	0.66944	3 ;	C20-	C17-	C15-	H23
30	33	5	97	9	0.00	0.66944	3 ;	C20-	C23-	04-	H43
30	33	5	97	9	0.00	1.04600	1 ;	C20-	C23-	04-	H43
30	33	35	93	9	0.00	0.66944	3 ;	C20-	C23-	C25-	H39
30	33	35	94	9	0.00	0.66944	3 ;	C20-	C23-	C25-	H40
30	33	35	95	9	0.00	0.66944	3 ;	C20-	C23-	C25-	H41
31	23	16	62	9	0.00	0.00000	0 ;	C21-	C13-	C6-	H8
31	23	16	63	9	0.00	0.00000	0 ;	C21-	C13-	C6-	H9
31	23	26	78	9	180.00	27.82360	2 ;	C21-	C13-	C16-	H24
32	25	26	78	9	0.00	0.00000	0 ;	C22-	C15-	C16-	H24
32	25	27	79	9	0.00	0.65084	3 ;	C22-	C15-	C17-	H25
33	30	27	79	9	0.00	0.65084	3 ;	C23-	C20-	C17-	H25
34	2	13	57	9	0.00	1.60387	3 ;	C24-	01-	C3-	H3
34	36	37	38	9	180.00	27.82360	2 ;	C24-	C26-	C27-	H44
34	36	37	98	9	180.00	27.82360	2 ;	C24-	C26-	C27-	H44
35	33	5	97	9	0.00	0.66944	3 ;	C25-	C23-	04-	H43
35	33	5	97	9	0.00	1.04600	1 ;	C25-	C23-	04-	H43
35	33	30	83	9	0.00	0.66944	3 ;	C25-	C23-	C20-	H29
35	33	30	84	9	0.00	0.66944	3 ;	C25-	C23-	C20-	H30
36	37	38	43	9	180.00	4.18400	2 ;	C26-	C27-	C28-	C33
36	37	38	44	9	180.00	4.18400	2 ;	C26-	C27-	C28-	C34
37	38	43	104	9	0.00	0.00000	0 ;	C27-	C28-	C33-	H50
37	38	43	105	9	0.00	0.00000	0 ;	C27-	C28-	C33-	H51
37	38	43	106	9	0.00	0.00000	0 ;	C27-	C28-	C33-	H52
37	38	44	47	9	180.00	27.82360	2 ;	C27-	C28-	C34-	C37
37	38	44	107	9	180.00	27.82360	2 ;	C27-	C28-	C34-	H53
38	37	36	96	9	180.00	27.82360	2 ;	C28-	C27-	C26-	H42
38	44	47	49	9	180.00	4.18400	2 ;	C28-	C34-	C37-	C39
38	44	47	51	9	180.00	4.18400	2 ;	C28-	C34-	C37-	C41
39	40	42	46	9	0.00	0.75312	3 ;	C29-	C30-	C32-	C36
39	40	42	46	9	180.00	0.83680	1 ;	C29-	C30-	C32-	C36
39	40	42	46	9	180.00	1.04600	2 ;	C29-	C30-	C32-	C36
39	40	42	103	9	0.00	0.65084	3 ;	C29-	C30-	C32-	H49
39	41	8	113	9	0.00	0.66944	3 ;	C29-	C31-	07-	H59
39	41	8	113	9	0.00	1.04600	1 ;	C29-	C31-	07-	H59
39	41	45	48	9	0.00	0.00000	0 ;	C29-	C31-	C35-	C38
39	41	45	108	9	0.00	0.00000	0 ;	C29-	C31-	C35-	H54
40	39	7	112	9	0.00	0.66944	3 ;	C30-	C29-	06-	H58
40	39	7	112	9	0.00	1.04600	1 ;	C30-	C29-	06-	H58
40	39	41	45	9	0.00	0.65084	3 ;	C30-	C29-	C31-	C35
40	39	41	102	9	0.00	0.65084	3 ;	C30-	C29-	C31-	H48
40	42	9	114	9	0.00	0.66944	3 ;	C30-	C32-	08-	H60
40	42	9	114	9	0.00	1.04600	1 ;	C30-	C32-	08-	H60
40	42	46	109	9	0.00	0.66944	3 ;	C30-	C32-	C36-	H55
40	42	46	110	9	0.00	0.66944	3 ;	C30-	C32-	C36-	H56
40	42	46	111	9	0.00	0.66944	3 ;	C30-	C32-	C36-	H57
41	39	7	112	9	0.00	0.66944	3 ;	C31-	C29-	06-	H58
41	39	7	112	9	0.00	1.04600	1 ;	C31-	C29-	06-	H58
41	39	40	42	9	0.00	0.75312	3 ;	C31-	C29-	C30-	C32
41	39	40	42	9	180.00	0.83680	1 ;	C31-	C29-	C30-	C32
41	39	40	42	9	180.00	1.04600	2 ;	C31-	C29-	C30-	C32
41	39	40	100	9	0.00	0.66944	3 ;	C31-	C29-	C30-	H46
41	39	40	101	9	0.00	0.66944	3 ;	C31-	C29-	C30-	H47
41	45	48	50	9	180.00	27.82360	2 ;	C31-	C35-	C38-	C40
41	45	48	52	9	180.00	27.82360	2 ;	C31-	C35-	C38-	C42
42	40	39	99	9	0.00	0.65084	3 ;	C32-	C30-	C29-	H45
43	38	37	98	9	180.00	4.18400	2 ;	C33-	C28-	C27-	H44
43	38	44	47	9	180.00	27.82360	2 ;	C33-	C28-	C34-	C37

43	38	44	107	9	180.00	27.82360	2 ;	C33-	C28-	C34-	H53
44	38	37	98	9	180.00	4.18400	2 ;	C34-	C28-	C27-	H44
44	38	43	104	9	0.00	0.00000	0 ;	C34-	C28-	C33-	H50
44	38	43	105	9	0.00	0.00000	0 ;	C34-	C28-	C33-	H51
44	38	43	106	9	0.00	0.00000	0 ;	C34-	C28-	C33-	H52
44	47	49	53	9	180.00	27.82360	2 ;	C34-	C37-	C39-	C43
44	47	49	115	9	180.00	27.82360	2 ;	C34-	C37-	C39-	H61
44	47	51	120	9	0.00	0.00000	0 ;	C34-	C37-	C41-	H66
44	47	51	121	9	0.00	0.00000	0 ;	C34-	C37-	C41-	H67
44	47	51	122	9	0.00	0.00000	0 ;	C34-	C37-	C41-	H68
45	41	8	113	9	0.00	0.69733	3 ;	C35-	C31-	07-	H59
45	41	39	99	9	0.00	0.65084	3 ;	C35-	C31-	C29-	H45
45	48	50	53	9	180.00	4.18400	2 ;	C35-	C38-	C40-	C43
45	48	50	116	9	180.00	4.18400	2 ;	C35-	C38-	C40-	H62
45	48	52	117	9	0.00	4.81160	1 ;	C35-	C38-	C42-	H63
45	48	52	117	9	180.00	1.58992	3 ;	C35-	C38-	C42-	H63
45	48	52	118	9	0.00	4.81160	1 ;	C35-	C38-	C42-	H64
45	48	52	118	9	180.00	1.58992	3 ;	C35-	C38-	C42-	H64
45	48	52	119	9	0.00	4.81160	1 ;	C35-	C38-	C42-	H65
45	48	52	119	9	180.00	1.58992	3 ;	C35-	C38-	C42-	H65
46	42	9	114	9	0.00	0.66944	3 ;	C36-	C32-	08-	H60
46	42	9	114	9	0.00	1.04600	1 ;	C36-	C32-	08-	H60
46	42	40	100	9	0.00	0.66944	3 ;	C36-	C32-	C30-	H46
46	42	40	101	9	0.00	0.66944	3 ;	C36-	C32-	C30-	H47
47	49	53	50	9	180.00	4.18400	2 ;	C37-	C39-	C43-	C40
47	49	53	123	9	180.00	4.18400	2 ;	C37-	C39-	C43-	H69
48	45	41	102	9	0.00	0.00000	0 ;	C38-	C35-	C31-	H48
48	50	53	49	9	180.00	27.82360	2 ;	C38-	C40-	C43-	C39
48	50	53	123	9	180.00	27.82360	2 ;	C38-	C40-	C43-	H69
49	47	44	107	9	180.00	4.18400	2 ;	C39-	C37-	C34-	H53
49	47	51	120	9	0.00	4.81160	1 ;	C39-	C37-	C41-	H66
49	47	51	120	9	180.00	1.58992	3 ;	C39-	C37-	C41-	H66
49	47	51	121	9	0.00	4.81160	1 ;	C39-	C37-	C41-	H67
49	47	51	121	9	180.00	1.58992	3 ;	C39-	C37-	C41-	H67
49	47	51	122	9	0.00	4.81160	1 ;	C39-	C37-	C41-	H68
49	47	51	122	9	180.00	1.58992	3 ;	C39-	C37-	C41-	H68
49	53	50	116	9	180.00	27.82360	2 ;	C39-	C43-	C40-	H62
50	48	45	108	9	180.00	27.82360	2 ;	C40-	C38-	C35-	H54
50	48	52	117	9	0.00	0.00000	0 ;	C40-	C38-	C42-	H63
50	48	52	118	9	0.00	0.00000	0 ;	C40-	C38-	C42-	H64
50	48	52	119	9	0.00	0.00000	0 ;	C40-	C38-	C42-	H65
50	53	49	115	9	180.00	4.18400	2 ;	C40-	C43-	C39-	H61
51	47	44	107	9	180.00	4.18400	2 ;	C41-	C37-	C34-	H53
51	47	49	53	9	180.00	27.82360	2 ;	C41-	C37-	C39-	C43
51	47	49	115	9	180.00	27.82360	2 ;	C41-	C37-	C39-	H61
52	48	45	108	9	180.00	27.82360	2 ;	C42-	C38-	C35-	H54
52	48	50	53	9	180.00	4.18400	2 ;	C42-	C38-	C40-	C43
52	48	50	116	9	180.00	4.18400	2 ;	C42-	C38-	C40-	H62
54	11	12	56	9	0.00	0.65084	3 ;	H-	C1-	C2-	H2
54	11	16	62	9	0.00	0.62760	3 ;	H-	C1-	C6-	H8
54	11	16	63	9	0.00	0.62760	3 ;	H-	C1-	C6-	H9
54	11	21	69	9	0.00	0.62760	3 ;	H-	C1-	C11-	H15
54	11	21	70	9	0.00	0.62760	3 ;	H-	C1-	C11-	H16
54	11	21	71	9	0.00	0.62760	3 ;	H-	C1-	C11-	H17
55	10	13	57	9	0.00	0.65084	3 ;	H1-	C-	C3-	H3
55	10	14	58	9	0.00	0.62760	3 ;	H1-	C-	C4-	H4
55	10	14	59	9	0.00	0.62760	3 ;	H1-	C-	C4-	H5
55	10	22	72	9	0.00	0.62760	3 ;	H1-	C-	C12-	H18
55	10	22	73	9	0.00	0.62760	3 ;	H1-	C-	C12-	H19
55	10	22	74	9	0.00	0.62760	3 ;	H1-	C-	C12-	H20
56	12	17	64	9	0.00	0.65084	3 ;	H2-	C2-	C7-	H10
56	12	17	65	9	0.00	0.65084	3 ;	H2-	C2-	C7-	H11
57	13	15	60	9	0.00	0.65084	3 ;	H3-	C3-	C5-	H6
57	13	15	61	9	0.00	0.65084	3 ;	H3-	C3-	C5-	H7
60	15	19	66	9	0.00	0.62760	3 ;	H6-	C5-	C9-	H12
60	15	19	67	9	0.00	0.62760	3 ;	H6-	C5-	C9-	H13
61	15	19	66	9	0.00	0.62760	3 ;	H7-	C5-	C9-	H12
61	15	19	67	9	0.00	0.62760	3 ;	H7-	C5-	C9-	H13
64	17	20	68	9	0.00	0.00000	0 ;	H10-	C7-	C10-	H14
65	17	20	68	9	0.00	0.00000	0 ;	H11-	C7-	C10-	H14
66	19	24	75	9	0.00	0.62760	3 ;	H12-	C9-	C14-	H21
66	19	24	76	9	0.00	0.62760	3 ;	H12-	C9-	C14-	H22
67	19	24	75	9	0.00	0.62760	3 ;	H13-	C9-	C14-	H21

67	19	24	76	9	0.00	0.62760	3 ;	H13-	C9-	C14-	H22
77	25	26	78	9	0.00	0.00000	0 ;	H23-	C15-	C16-	H24
77	25	27	79	9	0.00	0.65084	3 ;	H23-	C15-	C17-	H25
77	25	32	88	9	0.00	0.62760	3 ;	H23-	C15-	C22-	H34
77	25	32	89	9	0.00	0.62760	3 ;	H23-	C15-	C22-	H35
77	25	32	90	9	0.00	0.62760	3 ;	H23-	C15-	C22-	H36
79	27	3	92	9	0.00	0.69733	3 ;	H25-	C17-	02-	H38
79	27	30	83	9	0.00	0.65084	3 ;	H25-	C17-	C20-	H29
79	27	30	84	9	0.00	0.65084	3 ;	H25-	C17-	C20-	H30
83	30	33	91	9	0.00	0.65084	3 ;	H29-	C20-	C23-	H37
84	30	33	91	9	0.00	0.65084	3 ;	H30-	C20-	C23-	H37
91	33	5	97	9	0.00	0.69733	3 ;	H37-	C23-	04-	H43
91	33	35	93	9	0.00	0.65084	3 ;	H37-	C23-	C25-	H39
91	33	35	94	9	0.00	0.65084	3 ;	H37-	C23-	C25-	H40
91	33	35	95	9	0.00	0.65084	3 ;	H37-	C23-	C25-	H41
96	36	37	98	9	180.00	27.82360	2 ;	H42-	C26-	C27-	H44
99	39	7	112	9	0.00	0.69733	3 ;	H45-	C29-	06-	H58
99	39	40	100	9	0.00	0.65084	3 ;	H45-	C29-	C30-	H46
99	39	40	101	9	0.00	0.65084	3 ;	H45-	C29-	C30-	H47
99	39	41	102	9	0.00	0.65084	3 ;	H45-	C29-	C31-	H48
100	40	42	103	9	0.00	0.65084	3 ;	H46-	C30-	C32-	H49
101	40	42	103	9	0.00	0.65084	3 ;	H47-	C30-	C32-	H49
102	41	8	113	9	0.00	0.69733	3 ;	H48-	C31-	07-	H59
102	41	45	108	9	0.00	0.00000	0 ;	H48-	C31-	C35-	H54
103	42	9	114	9	0.00	0.69733	3 ;	H49-	C32-	08-	H60
103	42	46	109	9	0.00	0.65084	3 ;	H49-	C32-	C36-	H55
103	42	46	110	9	0.00	0.65084	3 ;	H49-	C32-	C36-	H56
103	42	46	111	9	0.00	0.65084	3 ;	H49-	C32-	C36-	H57
115	49	53	123	9	180.00	4.18400	2 ;	H61-	C39-	C43-	H69
116	50	53	123	9	180.00	27.82360	2 ;	H62-	C40-	C43-	H69

[dihedrals] ; impropers

; treated as propers in GROMACS to use correct AMBER analytical function

i	j	k	l	func	phase	kd	pn				
1	28	4	24	4	180.00	43.93200	2 ;	0-	C18-	03-	C14
18	17	20	68	4	180.00	4.60240	2 ;	C8-	C7-	C10-	H14
20	14	18	29	4	180.00	4.60240	2 ;	C10-	C4-	C8-	C19
23	25	26	78	4	180.00	4.60240	2 ;	C13-	C15-	C16-	H24
26	16	23	31	4	180.00	4.60240	2 ;	C16-	C6-	C13-	C21
34	37	36	96	4	180.00	4.60240	2 ;	C24-	C27-	C26-	H42
36	6	34	2	4	180.00	43.93200	2 ;	C26-	05-	C24-	01
36	38	37	98	4	180.00	4.60240	2 ;	C26-	C28-	C27-	H44
41	48	45	108	4	180.00	4.60240	2 ;	C31-	C38-	C35-	H54
43	44	38	37	4	180.00	4.60240	2 ;	C33-	C34-	C28-	C27
45	52	48	50	4	180.00	4.60240	2 ;	C35-	C42-	C38-	C40
47	38	44	107	4	180.00	4.60240	2 ;	C37-	C28-	C34-	H53
47	53	49	115	4	180.00	4.60240	2 ;	C37-	C43-	C39-	H61
48	53	50	116	4	180.00	4.60240	2 ;	C38-	C43-	C40-	H62
50	49	53	123	4	180.00	4.60240	2 ;	C40-	C39-	C43-	H69
51	44	47	49	4	180.00	4.60240	2 ;	C41-	C34-	C37-	C39

Coarse-grained

[moleculetype]

; Name nrexcl
MYCO 1

[atoms]

nr	type	resnr	residue	atom	cgnr	charge	mass	typeB	chargeB	massB
1	P1	1	MYCO	N1	1	0	72.0000			
2	P1	1	MYCO	N2	2	0	72.0000			
3	C3	1	MYCO	N3	3	0	72.0000			
4	C1	1	MYCO	N4	4	0	72.0000			
5	Na	1	MYCO	N5	5	0	72.0000			
6	C3	1	MYCO	N6	6	0	72.0000			
7	C1	1	MYCO	N7	7	0	72.0000			
8	Na	1	MYCO	N8	8	0	72.0000			
9	C3	1	MYCO	N9	9	0	72.0000			
10	C3	1	MYCO	N10	10	0	72.0000			
11	C3	1	MYCO	N11	11	0	72.0000			
12	P4	1	MYCO	N12	12	0	72.0000			
13	P1	1	MYCO	N13	13	0	72.0000			

```

[ bonds ]
; ai aj funct c0 c1 c2 c3
#ifdef FLEXIBLE
  4 5 1 0.3000 30000
  4 6 1 0.4000 30000
  5 7 1 0.3700 30000
  9 10 1 0.3350 30000
  8 9 1 0.3850 40000
  10 11 1 0.4100 30000
#endif
  1 2 1 0.3400 15000
  2 3 1 0.3400 15000
  6 7 1 0.3400 20000
  7 8 1 0.3100 5000
  11 12 1 0.3300 10000
  12 13 1 0.3300 10000
  3 4 1 0.3200 15000

[ angles ]
; ai aj ak funct c0 c1 c2 c3
  1 2 3 2 110.000 50.000
  2 3 4 2 131.000 200.000
  3 4 5 2 105.000 50.000
  3 4 6 2 110.000 100.000
  4 5 7 2 115.000 300.000
  4 6 7 2 90.000 250.000
  5 7 8 2 90.000 200.000;
  6 7 8 2 82.000 300.000;
  7 8 9 2 125.000 500.000
  8 9 10 2 160.000 300.000
  9 10 11 2 134.000 600.000
  10 11 12 2 120.000 200.000;
  11 12 13 2 120.000 25.000

[ dihedrals ]
  4 5 7 8 2 -106.00 100.00
  5 7 8 9 2 -175.00 20.00

#ifndef FLEXIBLE
[ constraints ]
  4 5 1 0.3000 30000
  4 6 1 0.4000 30000
  5 7 1 0.3700 30000
  9 10 1 0.3350 30000
  8 9 1 0.3850 40000
  10 11 1 0.4100 30000
#endif

[ exclusions ]
1 3
5 8
6 8

```