

	label	adj_list	S	B	E	L	A	V
1	methane	1 C u0 p0 c0 {2,S} {3,S} {4,S} {5,S} 2 H u0 p0 c0 {1,S} 3 H u0 p0 c0 {1,S} 4 H u0 p0 c0 {1,S} 5 H u0 p0 c0 {1,S}	0.00	0.00	0.00	-0.32	0.00	0.25
2	ethane	1 C u0 p0 c0 {2,S} {3,S} {4,S} {5,S} 2 C u0 p0 c0 {1,S} {6,S} {7,S} {8,S} 3 H u0 p0 c0 {1,S} 4 H u0 p0 c0 {1,S} 5 H u0 p0 c0 {1,S} 6 H u0 p0 c0 {2,S} 7 H u0 p0 c0 {2,S} 8 H u0 p0 c0 {2,S}	0.00	0.00	0.00	0.49	0.00	0.39
3	propane	1 C u0 p0 c0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S} 2 C u0 p0 c0 {1,S} {3,S} {7,S} {8,S} 3 C u0 p0 c0 {2,S} {9,S} {10,S} {11,S} 4 H u0 p0 c0 {1,S} 5 H u0 p0 c0 {1,S} 6 H u0 p0 c0 {1,S} 7 H u0 p0 c0 {2,S} 8 H u0 p0 c0 {2,S} 9 H u0 p0 c0 {3,S} 10 H u0 p0 c0 {3,S} 11 H u0 p0 c0 {3,S}	0.00	0.00	0.00	1.05	0.00	0.53
4	n-butane	1 C u0 p0 c0 {2,S} {5,S} {6,S} {7,S} 2 C u0 p0 c0 {1,S} {3,S} {8,S} {9,S} 3 C u0 p0 c0 {2,S} {4,S} {10,S} {11,S} 4 C u0 p0 c0 {3,S} {12,S} {13,S} {14,S} 5 H u0 p0 c0 {1,S} 6 H u0 p0 c0 {1,S} 7 H u0 p0 c0 {1,S} 8 H u0 p0 c0 {2,S} 9 H u0 p0 c0 {2,S} 10 H u0 p0 c0 {3,S} 11 H u0 p0 c0 {3,S} 12 H u0 p0 c0 {4,S} 13 H u0 p0 c0 {4,S} 14 H u0 p0 c0 {4,S}	0.00	0.00	0.00	1.61	0.00	0.67