

Species dictionary

species list from RMG-java generated mechanism for bio-oil gasification

Index #	Species Name
1	['Hyad(1)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {4,D} {1,S} {7,S}', '3 O 0 {1,S} {8,S}', '4 O 0 {2,D}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}']
2	['', '']
3	['Aa(2)', '1 C 0 {2,S} {5,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {4,D}', '3 O 0 {2,S} {8,S}', '4 O 0 {2,D}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {3,S}']
4	['Hypp(3)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 0 {5,D} {1,S} {2,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,D}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}']
5	['Lvgs(4)', '1 C 0 {2,S} {6,S} {7,S} {12,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {10,S} {13,S}', '3 C 0 {2,S} {4,S} {11,S} {14,S}', '4 C 0 {3,S} {5,S} {9,S} {15,S}', '5 C 0 {4,S} {7,S} {8,S} {16,S}', '6 C 0 {1,S} {8,S} {17,S} {18,S}', '7 O 0 {1,S} {5,S}', '8 O 0 {5,S} {6,S}', '9 O 0 {4,S} {19,S}', '10 O 0 {2,S} {20,S}', '11 O 0 {3,S} {21,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {2,S}', '14 H 0 {3,S}', '15 H 0 {4,S}', '16 H 0 {5,S}', '17 H 0 {6,S}', '18 H 0 {6,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {10,S}', '21 H 0 {11,S}']
6	['Ppa(5)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 0 {5,D} {1,S} {4,S}', '4 O 0 {3,S} {11,S}', '5 O 0 {3,D}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}']
7	['Hf2o(6)', '1 C 0 {2,S} {5,S} {7,S} {8,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {9,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {10,S}', '4 C 0 {6,D} {3,S} {5,S}', '5 O 0 {1,S} {4,S}', '6 O 0 {4,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {1,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {3,S}']
8	['lseg1(7)', '1 C 0 {6,S} {13,S} {14,S} {15,S}', '2 C 0 {11,S} {16,S} {17,S} {18,S}', '3 C 0 {7,B} {9,B} {8,S}', '4 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '5 C 0 {4,B} {10,B} {12,S}', '6 C 0 {1,S} {8,D} {19,S}', '7 C 0 {3,B} {4,B} {20,S}', '8 C 0 {6,D} {3,S} {21,S}', '9 C 0 {3,B} {10,B} {22,S}', '10 C 0 {5,B} {9,B} {23,S}', '11 O 0 {2,S} {4,S}', '12 O 0 {5,S} {24,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {1,S}', '15 H 0 {1,S}', '16 H 0 {2,S}', '17 H 0 {2,S}', '18 H 0 {2,S}', '19 H 0 {6,S}', '20 H 0 {7,S}', '21 H 0 {8,S}', '22 H 0 {9,S}', '23 H 0 {10,S}', '24 H 0 {12,S}']
9	['Phl(8)', '1 C 0 {2,B} {3,B} {7,S}', '2 C 0 {1,B} {4,B} {8,S}', '3 C 0 {1,B} {6,B} {9,S}', '4 C 0 {2,B} {5,B} {10,S}', '5 C 0 {4,B} {6,B} {11,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {12,S}', '7 O 0 {1,S} {13,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {3,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}']
10	['Svgl(9)', '1 C 0 {9,S} {12,S} {13,S} {14,S}', '2 C 0 {10,S} {15,S} {16,S} {17,S}', '3 C 0 {5,B} {6,B} {9,S}', '4 C 0 {5,B} {7,B} {10,S}', '5 C 0 {3,B} {4,B} {11,S}', '6 C 0 {3,B} {8,B} {18,S}', '7 C 0 {4,B} {8,B} {19,S}', '8 C 0 {6,B} {7,B} {20,S}', '9 O 0 {1,S} {3,S}', '10 O 0 {2,S} {4,S}', '11 O 0 {5,S} {21,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {1,S}', '15 H 0 {2,S}', '16 H 0 {2,S}', '17 H 0 {2,S}', '18 H 0 {6,S}', '19 H 0 {7,S}', '20 H 0 {8,S}', '21 H 0 {11,S}']
11	['H2O(10)', '1 O 0 {2,S} {3,S}', '2 H 0 {1,S}', '3 H 0 {1,S}']
12	['CH2OOH(78)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 O 0 {1,S} {3,S}', '3 O 0 {2,S} {6,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {3,S}']
13	['CO2(14)', '1 C 0 {2,D} {3,D}', '2 O 0 {1,D}', '3 O 0 {1,D}']
14	['O(25)', '1 O 2T']
15	['Hj(20)', '1 H 1']
16	['O2(27)', '1 O 1 {2,S}', '2 O 1 {1,S}']
17	['CH3Oj(16)', '1 O 1 {2,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {4,S} {5,S}', '3 H 0 {2,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}']
18	['H2O2(29)', '1 O 0 {2,S} {3,S}', '2 O 0 {1,S} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}']
19	['CH2(S)(32)', '1 C 2S {2,S} {3,S}', '2 H 0 {1,S}', '3 H 0 {1,S}']
20	['OH(26)', '1 O 1 {2,S}', '2 H 0 {1,S}']

Index #	Species Name
21	[CH3OOH(34)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 O 0 {1,S} {3,S}', '3 O 0 {2,S} {7,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {3,S}']
22	[HCjO(22)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 H 0 {1,S}']
23	[HOCO(30)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 O 0 {1,S} {4,S}', '4 H 0 {3,S}']
24	[SPC(45)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {7,S} {8,S}', '3 O 1 {2,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {2,S}']
25	[HO2(28)', '1 O 0 {2,S} {3,S}', '2 O 1 {1,S}', '3 H 0 {1,S}']
26	[CH2O(24)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {4,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}']
27	[CH4(18)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {5,S}', '2 H 0 {1,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}']
28	[CH3OH(17)', '1 O 0 {2,S} {3,S}', '2 C 0 {1,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}']
29	[CH3j(19)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 H 0 {1,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}']
30	[CH2(31)', '1 C 2T {2,S} {3,S}', '2 H 0 {1,S}', '3 H 0 {1,S}']
31	[H2(21)', '1 H 0 {2,S}', '2 H 0 {1,S}']
32	[C2H6(36)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,S} {6,S} {7,S} {8,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {2,S}']
33	[C2H5(37)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 C 0 {1,S} {5,S} {6,S} {7,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 H 0 {2,S}']
34	[CH2OH(33)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 O 0 {1,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}']
35	[CH3OO(35)', '1 O 1 {2,S}', '2 O 0 {1,S} {3,S}', '3 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '4 H 0 {3,S}', '5 H 0 {3,S}', '6 H 0 {3,S}']
36	[CO(15)', '1 C 2T {2,D}', '2 O 0 {1,D}']
37	[CH2CO(56)', '1 C 0 {2,D} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,D} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}']
38	[SPC(128)', '1 C 0 {2,S} {7,S} {6,S} {12,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {10,S} {13,S}', '3 C 0 {2,S} {4,S} {11,S} {14,S}', '4 C 0 {3,S} {5,S} {9,S} {15,S}', '5 C 0 {4,S} {7,S} {8,S} {16,S}', '6 C 1 {1,S} {17,S} {18,S}', '7 O 0 {1,S} {5,S}', '8 O 1 {5,S}', '9 O 0 {4,S} {19,S}', '10 O 0 {2,S} {20,S}', '11 O 0 {3,S} {21,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {2,S}', '14 H 0 {3,S}', '15 H 0 {4,S}', '16 H 0 {5,S}', '17 H 0 {6,S}', '18 H 0 {6,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {10,S}', '21 H 0 {11,S}']
39	[CH2CHO(55)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {6,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {2,S}']
40	[SPC(947)', '1 C 0 {2,S} {6,S} {7,S} {12,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {10,S} {13,S}', '3 C 0 {2,S} {4,S} {11,S} {14,S}', '4 C 1 {3,S} {9,S} {15,S}', '5 C 0 {8,D} {7,S} {16,S}', '6 C 1 {1,S} {17,S} {18,S}', '7 O 0 {1,S} {5,S}', '8 O 0 {5,D}', '9 O 0 {4,S} {19,S}', '10 O 0 {2,S} {20,S}', '11 O 0 {3,S} {21,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {2,S}', '14 H 0 {3,S}', '15 H 0 {4,S}', '16 H 0 {5,S}', '17 H 0 {6,S}', '18 H 0 {6,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {10,S}', '21 H 0 {11,S}']
41	[CH3CO(54)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}']
42	[SPC(1354)', '1 C 0 {2,S} {6,S} {7,S} {12,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {10,S} {13,S}', '3 C 0 {2,S} {4,S} {11,S} {14,S}', '4 C 0 {3,S} {6,S} {9,S} {15,S}', '5 C 0 {8,D} {7,S} {16,S}', '6 C 0 {1,S} {4,S} {17,S} {18,S}', '7 O 0 {1,S} {5,S}', '8 O 0 {5,D}', '9 O 0 {4,S} {19,S}', '10 O 0 {2,S} {20,S}', '11 O 0 {3,S} {21,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {2,S}', '14 H 0 {3,S}', '15 H 0 {4,S}', '16 H 0 {5,S}', '17 H 0 {6,S}', '18 H 0 {6,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {10,S}', '21 H 0 {11,S}']
43	[cC2H3O(52)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {5,S} {6,S}', '3 O 0 {1,S} {2,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}']
44	[SPC(50)', '1 C 0 {2,D} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {6,S}', '3 O 0 {2,S} {7,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 H 0 {3,S}']

Index #	Species Name
45	['SPC(67)', '1 C 0 {2,D} {4,S} {5,S}', '2 C 1 {1,D} {3,S}', '3 C 0 {2,S} {6,S} {7,S} {8,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 H 0 {3,S}', '8 H 0 {3,S}']
46	['CH3CHO(48)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}']
47	['SPC(47)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {6,S} {7,S}', '3 O 0 {2,S} {8,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}']
48	['C2H4(38)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {4,S}', '2 C 0 {1,D} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}']
49	['C2O(58)', '1 C 2T {2,D}', '2 C 0 {1,D} {3,D}', '3 O 0 {2,D}']
50	['SPC(46)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {3,S} {7,S}', '3 O 0 {2,S} {8,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}']
51	['C2(43)', '1 C 1 {2,T}', '2 C 1 {1,T}']
52	['C2H3(39)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 C 0 {1,D} {4,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}']
53	['SPC(95)', '1 C 0 {3,D} {4,S} {6,S}', '2 C 0 {3,S} {7,S} {8,S} {9,S}', '3 C 0 {1,D} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {10,S}', '5 O 1 {3,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {4,S}']
54	['C2H2(40)', '1 C 0 {2,T} {3,S}', '2 C 0 {1,T} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}']
55	['SPC(69)', '1 C 0 {2,D} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,D} {3,D}', '3 C 0 {2,D} {6,S} {7,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 H 0 {3,S}']
56	['SPC(2282)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {4,S} {7,S}', '3 O 0 {1,S} {8,S}', '4 O 0 {2,S} {9,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {11,S} {12,S} {14,S} {4,S}', '10 C 0 {11,S} {15,S} {16,S} {17,S}', '11 C 0 {13,D} {9,S} {10,S}', '12 O 0 {9,S} {18,S}', '13 O 0 {11,D}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {10,S}', '18 H 0 {12,S}']
57	['SPC(2411)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {10,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {8,D} {9,S} {11,S}', '7 C 0 {8,S} {12,S} {13,S} {14,S}', '8 C 0 {6,D} {7,S} {10,S}', '9 O 0 {6,S} {15,S}', '10 O 0 {8,S} {2,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {9,S}']
58	['SPC(2595)', '1 C 0 {3,D} {4,S} {6,S}', '2 C 1 {3,S} {8,S} {9,S}', '3 C 0 {1,D} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {10,S}', '5 O 0 {3,S} {7,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {4,S}']
59	['SPC(2596)', '1 C 0 {3,D} {4,S} {6,S}', '2 C 0 {3,S} {7,S} {8,S} {9,S}', '3 C 0 {1,D} {2,S} {5,S}', '4 O 1 {1,S}', '5 O 0 {3,S} {10,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {5,S}']
60	['SPC(3630)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {4,S} {7,S}', '3 O 0 {1,S} {8,S}', '4 O 0 {2,S} {9,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {11,S} {12,S} {14,S} {4,S}', '10 C 0 {11,D} {16,S} {17,S}', '11 C 0 {10,D} {9,S} {13,S}', '12 O 0 {9,S} {18,S}', '13 O 0 {11,S} {15,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {13,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {10,S}', '18 H 0 {12,S}']
61	['SPC(96)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 1 {3,S} {8,S} {9,S}', '3 C 0 {5,D} {1,S} {2,S}', '4 O 0 {1,S} {10,S}', '5 O 0 {3,D}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {4,S}']
62	['SPC(3984)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {9,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {8,D} {9,S} {11,S}', '7 C 0 {8,S} {12,S} {13,S} {14,S}', '8 C 0 {6,D} {7,S} {10,S}', '9 O 0 {6,S} {2,S}', '10 O 0 {8,S} {15,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {10,S}']
63	['H3CCCH(70)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,T}', '3 C 0 {2,T} {7,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {3,S}']
64	['SPC(2410)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {10,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {8,D} {9,S} {11,S}', '7 C 0 {8,S} {12,S} {13,S} {14,S}', '8 C 0 {6,D} {7,S} {10,S}', '9 O 0 {6,S} {15,S}', '10 O 0 {8,S} {1,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {9,S}']

Index #	Species Name
65	['C3H2(72)', '1 C 1 {2,D} {4,S}', '2 C 0 {1,D} {3,D}', '3 C 1 {2,D} {5,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {3,S}']
66	['SPC(3983)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {9,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {8,D} {9,S} {11,S}', '7 C 0 {8,S} {12,S} {13,S} {14,S}', '8 C 0 {6,D} {7,S} {10,S}', '9 O 0 {6,S} {1,S}', '10 O 0 {8,S} {15,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {10,S}']
67	['SPC(598)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {12,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {13,S} {14,S} {15,S} {5,S}', '13 O 0 {12,S} {16,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {12,S}', '16 H 0 {13,S}']
68	['SPC(2286)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {12,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {14,S} {15,S} {17,S} {5,S}', '13 C 0 {14,S} {18,S} {19,S} {20,S}', '14 C 0 {16,D} {12,S} {13,S}', '15 O 0 {12,S} {21,S}', '16 O 0 {14,D}', '17 H 0 {12,S}', '18 H 0 {13,S}', '19 H 0 {13,S}', '20 H 0 {13,S}', '21 H 0 {15,S}']
69	['SPC(4066)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {14,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {15,D} {14,S} {17,S}', '13 C 0 {14,S} {18,S} {19,S} {20,S}', '14 C 0 {12,S} {13,S} {16,S} {5,S}', '15 O 0 {12,D}', '16 O 0 {14,S} {21,S}', '17 H 0 {12,S}', '18 H 0 {13,S}', '19 H 0 {13,S}', '20 H 0 {13,S}', '21 H 0 {16,S}']
70	['SPC(4914)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {10,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {8,S} {9,S} {11,S} {12,S}', '7 C 0 {8,D} {13,S} {14,S}', '8 C 0 {7,D} {6,S} {10,S}', '9 O 0 {6,S} {15,S}', '10 O 0 {8,S} {2,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {9,S}']
71	['SPC(1039)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {8,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {9,S} {10,S}', '7 C 0 {6,D} {8,S} {11,S}', '8 O 0 {7,S} {2,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 H 0 {7,S}']
72	['SPC(3634)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {12,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {14,S} {15,S} {17,S} {5,S}', '13 C 0 {14,D} {19,S} {20,S}', '14 C 0 {13,D} {12,S} {16,S}', '15 O 0 {12,S} {21,S}', '16 O 0 {14,S} {18,S}', '17 H 0 {12,S}', '18 H 0 {16,S}', '19 H 0 {13,S}', '20 H 0 {13,S}', '21 H 0 {15,S}']
73	['H2CC(41)', '1 C 2 {2,D}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {4,S}', '3 H 0 {2,S}', '4 H 0 {2,S}']
74	['SPC(4913)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {10,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {8,S} {9,S} {11,S} {12,S}', '7 C 0 {8,D} {13,S} {14,S}', '8 C 0 {6,S} {7,D} {10,S}', '9 O 0 {6,S} {15,S}', '10 O 0 {8,S} {1,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {9,S}']
75	['OCHCHO(59)', '1 O 0 {2,D}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {5,S}', '3 C 0 {2,S} {4,D} {6,S}', '4 O 0 {3,D}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {3,S}']
76	['SPC(6480)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {8,S}', '2 H 0 {1,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 C 0 {6,D} {7,S} {9,S}', '5 C 0 {6,S} {10,S} {11,S} {12,S}', '6 C 0 {4,D} {5,S} {8,S}', '7 O 0 {4,S} {13,S}', '8 O 0 {6,S} {1,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {7,S}']
77	['SPC(1516)', '1 C 0 {2,S} {6,S} {7,S} {11,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {9,S} {12,S}', '3 C 0 {2,S} {4,D} {10,S}', '4 C 0 {3,D} {6,S} {13,S}', '5 C 0 {8,D} {7,S} {14,S}', '6 C 0 {1,S} {4,S} {15,S} {16,S}', '7 O 0 {1,S} {5,S}', '8 O 0 {5,D}', '9 O 0 {2,S} {17,S}', '10 O 0 {3,S} {18,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {2,S}', '13 H 0 {4,S}', '14 H 0 {5,S}', '15 H 0 {6,S}', '16 H 0 {6,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {10,S}']

Index #	Species Name
78	['SPC(11999)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {8,S} {13,S}', '2 H 0 {1,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 C 0 {6,D} {7,S} {9,S}', '5 C 0 {6,S} {10,S} {11,S} {12,S}', '6 C 0 {4,D} {5,S} {8,S}', '7 O 1 {4,S}', '8 O 0 {6,S} {1,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {1,S}']
79	['SPC(202)', '1 C 0 {5,S} {12,S} {13,S} {14,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 0 {1,S} {7,D} {15,S}', '6 C 0 {2,B} {3,B} {16,S}', '7 C 0 {5,D} {2,S} {17,S}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {18,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {19,S}', '10 O 1 {3,S}', '11 O 0 {4,S} {20,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {1,S}', '15 H 0 {5,S}', '16 H 0 {6,S}', '17 H 0 {7,S}', '18 H 0 {8,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {11,S}']
80	['SPC(2599)', '1 C 0 {3,D} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,S} {6,S} {7,S} {8,S}', '3 C 1 {1,D} {2,S}', '4 O 0 {1,S} {9,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}']
81	['SPC(1386)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {7,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 C 0 {8,D} {9,S} {2,S}', '8 O 0 {7,D}', '9 H 0 {7,S}']
82	['SPC(68)', '1 C 1 {2,D} {4,S}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {5,S}', '3 C 0 {2,S} {6,S} {7,S} {8,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 H 0 {3,S}', '8 H 0 {3,S}']
83	['SPC(13966)', '1 C 0 {5,S} {12,S} {13,S} {14,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 0 {1,S} {7,D} {15,S}', '6 C 1 {2,B} {3,B}', '7 C 0 {5,D} {2,S} {17,S}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {18,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {19,S}', '10 O 0 {3,S} {16,S}', '11 O 0 {4,S} {20,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {1,S}', '15 H 0 {5,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {7,S}', '18 H 0 {8,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {11,S}']
84	['SPC(14189)', '1 C 0 {3,D} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,S} {6,S} {7,S} {8,S}', '3 C 0 {1,D} {2,S} {9,S}', '4 O 1 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {3,S}']
85	['H2CCCCH(71)', '1 C 0 {2,D} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,D} {3,D}', '3 C 1 {2,D} {6,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {3,S}']
86	['SPC(13967)', '1 C 0 {5,S} {12,S} {13,S} {14,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 0 {1,S} {7,D} {15,S}', '6 C 0 {2,B} {3,B} {16,S}', '7 C 1 {2,S} {5,D}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {18,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {19,S}', '10 O 0 {3,S} {17,S}', '11 O 0 {4,S} {20,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {1,S}', '15 H 0 {5,S}', '16 H 0 {6,S}', '17 H 0 {10,S}', '18 H 0 {8,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {11,S}']
87	['SPC(14190)', '1 C 0 {3,D} {4,S} {5,S}', '2 C 1 {3,S} {7,S} {8,S}', '3 C 0 {1,D} {2,S} {9,S}', '4 O 0 {1,S} {6,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {4,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {3,S}']
88	['SPC(15635)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {4,S} {7,S}', '3 O 0 {1,S} {8,S}', '4 O 0 {2,S} {11,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {12,D} {11,S} {13,S}', '10 C 0 {11,S} {14,S} {15,S} {16,S}', '11 C 0 {9,S} {10,S} {17,S} {4,S}', '12 O 0 {9,D}', '13 H 0 {9,S}', '14 H 0 {10,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {11,S}']
89	['SPC(16742)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {6,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {12,S}', '6 C 0 {1,S} {4,T}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {14,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {15,S}', '9 O 0 {2,S} {13,S}', '10 O 0 {3,S} {16,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {8,S}', '16 H 0 {10,S}']
90	['SPC(15447)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {9,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {8,D} {9,S} {10,S}', '7 C 0 {8,S} {11,S} {12,S} {13,S}', '8 C 0 {6,D} {7,S} {14,S}', '9 O 0 {6,S} {2,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 H 0 {7,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}']
91	['SPC(15639)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {14,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {15,D} {14,S} {16,S}', '13 C 0 {14,S} {17,S} {18,S} {19,S}', '14 C 0 {12,S} {13,S} {20,S} {5,S}', '15 O 0 {12,D}', '16 H 0 {12,S}', '17 H 0 {13,S}', '18 H 0 {13,S}', '19 H 0 {13,S}', '20 H 0 {14,S}']

Index #	Species Name
92	['SPC(66)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {6,S}', '3 C 0 {2,D} {7,S} {8,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 H 0 {3,S}', '8 H 0 {3,S}']
93	['SPC(12257)', '1 C 0 {2,S} {5,S} {8,S} {11,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {6,S} {9,S}', '3 C 0 {2,S} {4,D} {7,S}', '4 C 0 {3,D} {5,S} {10,S}', '5 C 0 {1,S} {4,S} {12,S} {13,S}', '6 O 0 {2,S} {14,S}', '7 O 0 {3,S} {15,S}', '8 H 0 {1,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {5,S}', '14 H 0 {6,S}', '15 H 0 {7,S}']
94	['C2H(42)', '1 C 1 {2,T}', '2 C 0 {1,T} {3,S}', '3 H 0 {2,S}']
95	['SPC(15446)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {9,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {8,D} {9,S} {10,S}', '7 C 0 {8,S} {11,S} {12,S} {13,S}', '8 C 0 {6,D} {7,S} {14,S}', '9 O 0 {6,S} {1,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 H 0 {7,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}']
96	['SPC(21200)', '1 C 0 {2,D} {5,S} {7,S}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {8,S}', '3 C 0 {2,S} {4,D} {6,S}', '4 C 0 {3,D} {5,S} {9,S}', '5 C 0 {1,S} {4,S} {10,S} {11,S}', '6 O 0 {3,S} {12,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}']
97	['C3H6(65)', '1 C 0 {2,D} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {6,S}', '3 C 0 {2,S} {7,S} {8,S} {9,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 H 0 {3,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 H 0 {3,S}']
98	['SPC(75)', '1 C 0 {2,D} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {7,S}', '3 C 0 {2,S} {4,D} {8,S}', '4 O 0 {3,D}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}']
99	['C2H5CO(74)', '1 C 0 {2,S} {5,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {8,S} {9,S}', '3 C 1 {2,S} {4,D}', '4 O 0 {3,D}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}']
100	['SPC(16081)', '1 C 1 {2,D} {5,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {5,S} {6,D} {7,S}', '4 C 0 {5,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '5 C 0 {3,S} {4,S} {11,S} {1,S}', '6 O 0 {3,D}', '7 H 0 {3,S}', '8 H 0 {4,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {5,S}']
101	['SPC(17093)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {12,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {14,S} {15,S} {16,S} {5,S}', '13 C 0 {14,D} {18,S} {19,S}', '14 C 0 {13,D} {12,S} {20,S}', '15 O 0 {12,S} {17,S}', '16 H 0 {12,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 H 0 {13,S}', '19 H 0 {13,S}', '20 H 0 {14,S}']
102	['SPC(22239)', '1 C 0 {2,S} {5,D} {7,S}', '2 C 1 {1,S} {3,S} {8,S}', '3 C 0 {2,S} {4,D} {6,S}', '4 C 0 {3,D} {5,S} {9,S}', '5 C 0 {1,D} {4,S} {10,S}', '6 O 0 {3,S} {11,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {6,S}']
103	['SPC(22240)', '1 C 0 {2,D} {5,S} {7,S}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {8,S}', '3 C 0 {6,D} {2,S} {4,S}', '4 C 1 {3,S} {5,S} {9,S}', '5 C 0 {1,S} {4,S} {10,S} {11,S}', '6 O 0 {3,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {5,S}']
104	['HCCO(57)', '1 C 1 {2,D} {4,S}', '2 C 0 {1,D} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}']
105	['SPC(577)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {12,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {13,S} {14,S} {15,S} {5,S}', '13 C 0 {12,S} {16,S} {17,S} {18,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {12,S}', '16 H 0 {13,S}', '17 H 0 {13,S}', '18 H 0 {13,S}']
106	['HCCOH(53)', '1 C 0 {2,T} {4,S}', '2 C 0 {1,T} {3,S}', '3 O 0 {2,S} {5,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {3,S}']
107	['SPC(29102)', '1 C 1 {2,D} {7,S}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {8,S}', '3 C 0 {2,S} {4,S} {6,D}', '4 C 0 {3,S} {9,S} {5,D}', '5 C 0 {10,S} {11,S} {4,D}', '6 O 0 {3,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {5,S}']

Index #	Species Name
108	['SPC(27511)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {8,S} {11,S}', '3 C 0 {6,D} {2,S} {4,S}', '4 C 0 {3,S} {5,D} {9,S}', '5 C 0 {1,S} {4,D} {10,S}', '6 O 0 {3,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {2,S}']
109	['SPC(29134)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {6,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {9,S} {2,S}', '7 C 0 {6,D} {8,D}', '8 O 0 {7,D}', '9 H 0 {6,S}']
110	['SPC(31475)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {11,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,S} {10,D} {12,S}', '7 C 0 {6,S} {8,S} {13,S} {16,S}', '8 C 0 {7,S} {9,D} {11,S}', '9 C 0 {8,D} {10,S} {14,S}', '10 C 0 {6,D} {9,S} {15,S}', '11 O 0 {8,S} {1,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {7,S}']
111	['SPC(33970)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {8,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {9,S} {10,S}', '7 C 0 {6,D} {8,S} {11,S}', '8 O 0 {7,S} {2,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 C 0 {12,D} {14,S} {7,S}', '12 C 0 {11,D} {13,D}', '13 O 0 {12,D}', '14 H 0 {11,S}']
112	['SPC(33391)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {8,S} {11,S}', '3 C 0 {2,S} {4,D} {6,S}', '4 C 0 {3,D} {5,S} {9,S}', '5 C 0 {1,S} {4,S} {6,S} {10,S}', '6 O 0 {3,S} {5,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {2,S}']
113	['SPC(29088)', '1 C 0 {2,D} {5,S} {7,S}', '2 C 1 {1,D} {3,S}', '3 C 0 {6,D} {2,S} {4,S}', '4 C 0 {3,S} {5,S} {9,S} {8,S}', '5 C 0 {1,S} {4,S} {10,S} {11,S}', '6 O 0 {3,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {4,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {5,S}']
114	['SPC(33392)', '1 C 0 {2,S} {5,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {8,S} {11,S}', '3 C 0 {2,S} {4,D} {6,S}', '4 C 0 {3,D} {5,S} {9,S}', '5 C 1 {1,S} {4,S} {10,S}', '6 O 0 {3,S} {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {2,S}']
115	['SPC(33390)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {7,S} {9,S} {1,S}', '4 C 0 {3,S} {5,S} {10,S} {13,S}', '5 C 0 {4,S} {6,S} {8,D}', '6 C 0 {5,S} {7,D} {11,S}', '7 C 0 {3,S} {6,D} {12,S}', '8 O 0 {5,D}', '9 H 0 {3,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {4,S}']
116	['SPC(15793)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {7,D} {1,S} {3,S}', '3 O 1 {2,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {2,D}', '8 O 0 {7,S} {12,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {13,D} {12,S} {14,S}', '11 C 0 {12,S} {15,S} {16,S} {17,S}', '12 C 0 {10,S} {11,S} {18,S} {8,S}', '13 O 0 {10,D}', '14 H 0 {10,S}', '15 H 0 {11,S}', '16 H 0 {11,S}', '17 H 0 {11,S}', '18 H 0 {12,S}']
117	['SPC(33969)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {8,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {9,S} {10,S}', '7 C 0 {6,D} {8,S} {11,S}', '8 O 0 {7,S} {1,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 C 0 {12,D} {14,S} {7,S}', '12 C 0 {11,D} {13,D}', '13 O 0 {12,D}', '14 H 0 {11,S}']
118	['SPC(33396)', '1 C 0 {2,D} {5,S} {7,S}', '2 C 0 {1,D} {8,S} {11,S}', '3 C 1 {4,S} {6,D}', '4 C 0 {3,S} {9,S} {5,D}', '5 C 0 {1,S} {10,S} {4,D}', '6 O 0 {3,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {2,S}']
119	['SPC(27514)', '1 C 0 {2,S} {5,D} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,S} {8,S} {11,S}', '3 C 0 {2,S} {4,D} {6,S}', '4 C 0 {3,D} {5,S} {9,S}', '5 C 1 {1,D} {4,S}', '6 O 0 {3,S} {10,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 H 0 {2,S}']
120	['SPC(32088)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {7,D} {1,S} {3,S}', '3 O 0 {2,S} {13,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {2,D}', '8 O 1 {7,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {11,S} {14,D} {16,S}', '11 C 0 {10,S} {12,S} {17,S} {20,S}', '12 C 0 {15,D} {11,S} {13,S}', '13 C 0 {12,S} {14,S} {18,S} {3,S}', '14 C 0 {10,D} {13,S} {19,S}', '15 O 0 {12,D}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {11,S}', '18 H 0 {13,S}', '19 H 0 {14,S}', '20 H 0 {11,S}']

Index #	Species Name
121	['SPC(15792)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {7,D} {1,S} {3,S}', '3 O 0 {2,S} {12,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {2,D}', '8 O 1 {7,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {13,D} {12,S} {14,S}', '11 C 0 {12,S} {15,S} {16,S} {17,S}', '12 C 0 {10,S} {11,S} {18,S} {3,S}', '13 O 0 {10,D}', '14 H 0 {10,S}', '15 H 0 {11,S}', '16 H 0 {11,S}', '17 H 0 {11,S}', '18 H 0 {12,S}']
122	['SPC(2626)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {5,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,D} {7,S} {1,S}', '6 C 0 {5,D} {8,S} {9,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {6,S}']
123	['SPC(55084)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {8,S}', '2 C 1 {1,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {8,D} {9,S} {11,S}', '8 C 0 {7,D} {10,S} {1,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 C 0 {12,D} {13,S} {7,S}', '12 C 0 {11,D} {14,S} {15,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {12,S}']
124	['SPC(201)', '1 C 1 {6,S} {13,S} {14,S}', '2 C 0 {11,S} {15,S} {16,S} {17,S}', '3 C 0 {7,B} {9,B} {8,S}', '4 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '5 C 0 {4,B} {10,B} {12,S}', '6 C 0 {1,S} {8,D} {18,S}', '7 C 0 {3,B} {4,B} {19,S}', '8 C 0 {6,D} {3,S} {20,S}', '9 C 0 {3,B} {10,B} {21,S}', '10 C 0 {5,B} {9,B} {22,S}', '11 O 0 {2,S} {4,S}', '12 O 0 {5,S} {23,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {1,S}', '15 H 0 {2,S}', '16 H 0 {2,S}', '17 H 0 {2,S}', '18 H 0 {6,S}', '19 H 0 {7,S}', '20 H 0 {8,S}', '21 H 0 {9,S}', '22 H 0 {10,S}', '23 H 0 {12,S}']
125	['SPC(1948)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {7,S}', '2 C 1 {1,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {10,S} {1,S}', '8 H 0 {7,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {7,S}']
126	['SPC(2273)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {6,S}', '2 C 0 {1,D} {4,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 C 0 {7,D} {8,S} {1,S}', '7 C 0 {6,D} {9,S} {10,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {7,S}']
127	['SPC(29714)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {4,S}', '2 C 1 {1,D} {3,S}', '3 O 0 {2,S} {1,S}', '4 H 0 {1,S}']
128	['SPC(6556)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,T}', '3 C 0 {2,T} {5,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {3,S}', '6 C 0 {7,S} {8,S} {9,S} {1,S}', '7 H 0 {6,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {6,S}']
129	['SPC(58432)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {4,S} {7,S}', '3 O 0 {1,S} {8,S}', '4 O 0 {2,S} {16,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {14,D} {21,S} {22,S}', '10 C 0 {19,S} {23,S} {24,S} {25,S}', '11 C 0 {15,B} {17,B} {16,S}', '12 C 0 {13,B} {15,B} {19,S}', '13 C 0 {12,B} {18,B} {20,S}', '14 C 0 {9,D} {16,S} {26,S}', '15 C 0 {11,B} {12,B} {27,S}', '16 C 0 {11,S} {14,S} {28,S} {4,S}', '17 C 0 {11,B} {18,B} {29,S}', '18 C 0 {13,B} {17,B} {30,S}', '19 O 0 {10,S} {12,S}', '20 O 0 {13,S} {31,S}', '21 H 0 {9,S}', '22 H 0 {9,S}', '23 H 0 {10,S}', '24 H 0 {10,S}', '25 H 0 {10,S}', '26 H 0 {14,S}', '27 H 0 {15,S}', '28 H 0 {16,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {18,S}', '31 H 0 {20,S}']
130	['SPC(58436)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {19,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {17,D} {24,S} {25,S}', '13 C 0 {22,S} {26,S} {27,S} {28,S}', '14 C 0 {18,B} {20,B} {19,S}', '15 C 0 {16,B} {18,B} {22,S}', '16 C 0 {15,B} {21,B} {23,S}', '17 C 0 {12,D} {19,S} {29,S}', '18 C 0 {14,B} {15,B} {30,S}', '19 C 0 {14,S} {17,S} {31,S} {5,S}', '20 C 0 {14,B} {21,B} {32,S}', '21 C 0 {16,B} {20,B} {33,S}', '22 O 0 {13,S} {15,S}', '23 O 0 {16,S} {34,S}', '24 H 0 {12,S}', '25 H 0 {12,S}', '26 H 0 {13,S}', '27 H 0 {13,S}', '28 H 0 {13,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {18,S}', '31 H 0 {19,S}', '32 H 0 {20,S}', '33 H 0 {21,S}', '34 H 0 {23,S}']
131	['SPC(59403)', '1 C 1 {2,D} {10,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {8,D} {15,S} {16,S}', '4 C 0 {13,S} {17,S} {18,S} {19,S}', '5 C 0 {9,B} {11,B} {10,S}', '6 C 0 {7,B} {9,B} {13,S}', '7 C 0 {6,B} {12,B} {14,S}', '8 C 0 {3,D} {10,S} {20,S}', '9 C 0 {5,B} {6,B} {21,S}', '10 C 0 {5,S} {8,S} {22,S} {1,S}', '11 C 0 {5,B} {12,B} {23,S}', '12 C 0 {7,B} {11,B} {24,S}', '13 O 0 {4,S} {6,S}', '14 O 0 {7,S} {25,S}', '15 H 0 {3,S}', '16 H 0 {3,S}', '17 H 0 {4,S}', '18 H 0 {4,S}', '19 H 0 {4,S}', '20 H 0 {8,S}', '21 H 0 {9,S}', '22 H 0 {10,S}', '23 H 0 {11,S}', '24 H 0 {12,S}', '25 H 0 {14,S}']

Index #	Species Name
132	['SPC(58782)', '1 C 0 {6,D} {13,S} {14,S}', '2 C 0 {11,S} {15,S} {16,S} {17,S}', '3 C 0 {7,B} {9,B} {8,S}', '4 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '5 C 0 {4,B} {10,B} {12,S}', '6 C 0 {1,D} {8,D}', '7 C 0 {3,B} {4,B} {18,S}', '8 C 0 {6,D} {3,S} {19,S}', '9 C 0 {3,B} {10,B} {20,S}', '10 C 0 {5,B} {9,B} {21,S}', '11 O 0 {2,S} {4,S}', '12 O 0 {5,S} {22,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {1,S}', '15 H 0 {2,S}', '16 H 0 {2,S}', '17 H 0 {2,S}', '18 H 0 {7,S}', '19 H 0 {8,S}', '20 H 0 {9,S}', '21 H 0 {10,S}', '22 H 0 {12,S}']
133	['SPC(21366)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {7,S}', '2 C 1 {1,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {8,T} {1,S}', '8 C 0 {7,T} {9,S}', '9 H 0 {8,S}']
134	['SPC(57964)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {12,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {17,S} {24,S} {25,S} {5,S}', '13 C 0 {22,S} {26,S} {27,S} {28,S}', '14 C 0 {18,B} {20,B} {19,S}', '15 C 0 {16,B} {18,B} {22,S}', '16 C 0 {15,B} {21,B} {23,S}', '17 C 0 {12,S} {19,D} {29,S}', '18 C 0 {14,B} {15,B} {30,S}', '19 C 0 {17,D} {14,S} {31,S}', '20 C 0 {14,B} {21,B} {32,S}', '21 C 0 {16,B} {20,B} {33,S}', '22 O 0 {13,S} {15,S}', '23 O 0 {16,S} {34,S}', '24 H 0 {12,S}', '25 H 0 {12,S}', '26 H 0 {13,S}', '27 H 0 {13,S}', '28 H 0 {13,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {18,S}', '31 H 0 {19,S}', '32 H 0 {20,S}', '33 H 0 {21,S}', '34 H 0 {23,S}']
135	['SPC(65830)', '1 C 1 {6,S} {13,S} {14,S}', '2 C 0 {11,S} {15,S} {16,S} {17,S}', '3 C 0 {7,B} {9,B} {8,S}', '4 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '5 C 0 {4,B} {10,B} {12,S}', '6 C 0 {1,S} {8,D} {23,S}', '7 C 0 {3,B} {4,B} {18,S}', '8 C 0 {6,D} {3,S} {19,S}', '9 C 0 {3,B} {10,B} {20,S}', '10 C 0 {5,B} {9,B} {21,S}', '11 O 0 {2,S} {4,S}', '12 O 0 {5,S} {22,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {1,S}', '15 H 0 {2,S}', '16 H 0 {2,S}', '17 H 0 {2,S}', '18 H 0 {7,S}', '19 H 0 {8,S}', '20 H 0 {9,S}', '21 H 0 {10,S}', '22 H 0 {12,S}', '23 C 1 {24,D} {6,S}', '24 O 0 {23,D}']
136	['SPC(57948)', '1 C 0 {2,S} {8,S} {3,S} {4,S}', '2 C 0 {1,S} {12,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {8,D} {11,S} {9,S}', '8 C 0 {7,D} {1,S} {10,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 C 1 {12,S} {7,S} {13,S}', '12 C 0 {11,S} {2,S} {14,S} {15,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {12,S}']
137	['SPC(66167)', '1 C 0 {5,D} {12,S} {13,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 0 {1,D} {7,D}', '6 C 0 {2,B} {3,B} {14,S}', '7 C 0 {5,D} {2,S} {15,S}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {16,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {17,S}', '10 O 1 {3,S}', '11 O 0 {4,S} {18,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {6,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {11,S}']
138	['SPC(71554)', '1 C 0 {2,S} {8,S} {3,S} {4,S}', '2 C 0 {1,S} {12,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 1 {8,S} {11,S} {9,S}', '8 C 0 {7,S} {1,S} {11,S} {10,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 C 0 {12,S} {7,S} {8,S} {13,S}', '12 C 0 {11,S} {2,S} {14,S} {15,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {12,S}']
139	['SPC(72362)', '1 C 0 {5,D} {12,S} {13,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 0 {1,D} {7,D}', '6 C 1 {2,B} {3,B}', '7 C 0 {5,D} {2,S} {15,S}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {16,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {17,S}', '10 O 0 {3,S} {14,S}', '11 O 0 {4,S} {18,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {10,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {11,S}']
140	['SPC(57947)', '1 C 0 {2,S} {8,S} {3,S} {4,S}', '2 C 0 {1,S} {11,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {8,D} {11,S} {9,S}', '8 C 0 {7,D} {1,S} {10,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 C 0 {7,S} {2,S} {12,S} {13,S}', '12 C 1 {11,S} {14,S} {15,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {12,S}']

Index #	Species Name
141	['SPC(58181)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {7,D} {1,S} {3,S}', '3 O 0 {2,S} {10,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {2,D}', '8 O 1 {7,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {15,S} {22,S} {23,S} {3,S}', '11 C 0 {20,S} {24,S} {25,S} {26,S}', '12 C 0 {16,B} {18,B} {17,S}', '13 C 0 {14,B} {16,B} {20,S}', '14 C 0 {13,B} {19,B} {21,S}', '15 C 0 {10,S} {17,D} {27,S}', '16 C 0 {12,B} {13,B} {28,S}', '17 C 0 {15,D} {12,S} {29,S}', '18 C 0 {12,B} {19,B} {30,S}', '19 C 0 {14,B} {18,B} {31,S}', '20 O 0 {11,S} {13,S}', '21 O 0 {14,S} {32,S}', '22 H 0 {10,S}', '23 H 0 {10,S}', '24 H 0 {11,S}', '25 H 0 {11,S}', '26 H 0 {11,S}', '27 H 0 {15,S}', '28 H 0 {16,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {18,S}', '31 H 0 {19,S}', '32 H 0 {21,S}']
142	['SPC(58008)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {6,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {11,S} {18,S} {19,S} {2,S}', '7 C 0 {16,S} {20,S} {21,S} {22,S}', '8 C 0 {12,B} {14,B} {13,S}', '9 C 0 {10,B} {12,B} {16,S}', '10 C 0 {9,B} {15,B} {17,S}', '11 C 0 {6,S} {13,D} {23,S}', '12 C 0 {8,B} {9,B} {24,S}', '13 C 0 {11,D} {8,S} {25,S}', '14 C 0 {8,B} {15,B} {26,S}', '15 C 0 {10,B} {14,B} {27,S}', '16 O 0 {7,S} {9,S}', '17 O 0 {10,S} {28,S}', '18 H 0 {6,S}', '19 H 0 {6,S}', '20 H 0 {7,S}', '21 H 0 {7,S}', '22 H 0 {7,S}', '23 H 0 {11,S}', '24 H 0 {12,S}', '25 H 0 {13,S}', '26 H 0 {14,S}', '27 H 0 {15,S}', '28 H 0 {17,S}']
143	['SPC(72364)', '1 C 0 {5,T} {13,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 0 {1,T} {7,S}', '6 C 0 {2,B} {3,B} {14,S}', '7 C 1 {2,S} {5,S} {15,S}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {16,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {17,S}', '10 O 0 {3,S} {12,S}', '11 O 0 {4,S} {18,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {6,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {11,S}']
144	['SPC(75149)', '1 C 0 {2,S} {8,S} {3,S} {4,S}', '2 C 0 {1,S} {11,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 1 {8,S} {11,S} {9,S}', '8 C 0 {7,S} {1,S} {12,S} {10,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 C 0 {12,S} {7,S} {2,S} {13,S}', '12 C 0 {11,S} {8,S} {14,S} {15,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {12,S}']
145	['SPC(58182)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {7,D} {1,S} {3,S}', '3 O 1 {2,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {2,D}', '8 O 0 {7,S} {10,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {15,S} {22,S} {23,S} {8,S}', '11 C 0 {20,S} {24,S} {25,S} {26,S}', '12 C 0 {16,B} {18,B} {17,S}', '13 C 0 {14,B} {16,B} {20,S}', '14 C 0 {13,B} {19,B} {21,S}', '15 C 0 {10,S} {17,D} {27,S}', '16 C 0 {12,B} {13,B} {28,S}', '17 C 0 {15,D} {12,S} {29,S}', '18 C 0 {12,B} {19,B} {30,S}', '19 C 0 {14,B} {18,B} {31,S}', '20 O 0 {11,S} {13,S}', '21 O 0 {14,S} {32,S}', '22 H 0 {10,S}', '23 H 0 {10,S}', '24 H 0 {11,S}', '25 H 0 {11,S}', '26 H 0 {11,S}', '27 H 0 {15,S}', '28 H 0 {16,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {18,S}', '31 H 0 {19,S}', '32 H 0 {21,S}']
146	['SPC(58465)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {13,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {11,D} {18,S} {19,S}', '7 C 0 {16,S} {20,S} {21,S}', '8 C 0 {12,B} {14,B} {13,S}', '9 C 0 {10,B} {12,B} {16,S}', '10 C 0 {9,B} {15,B} {17,S}', '11 C 0 {6,D} {13,S} {23,S}', '12 C 0 {8,B} {9,B} {24,S}', '13 C 0 {8,S} {11,S} {25,S} {2,S}', '14 C 0 {8,B} {15,B} {26,S}', '15 C 0 {10,B} {14,B} {27,S}', '16 O 0 {7,S} {9,S}', '17 O 0 {10,S} {28,S}', '18 H 0 {6,S}', '19 H 0 {6,S}', '20 H 0 {7,S}', '21 H 0 {7,S}', '22 H 0 {7,S}', '23 H 0 {11,S}', '24 H 0 {12,S}', '25 H 0 {13,S}', '26 H 0 {14,S}', '27 H 0 {15,S}', '28 H 0 {17,S}']
147	['SPC(81460)', '1 C 1 {2,D} {9,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {7,T} {15,S}', '4 C 0 {8,B} {10,B} {9,S}', '5 C 0 {6,B} {8,B} {12,S}', '6 C 0 {5,B} {11,B} {13,S}', '7 C 0 {3,T} {9,S}', '8 C 0 {4,B} {5,B} {16,S}', '9 C 0 {4,S} {7,S} {17,S} {1,S}', '10 C 0 {4,B} {11,B} {18,S}', '11 C 0 {6,B} {10,B} {19,S}', '12 O 0 {5,S} {14,S}', '13 O 0 {6,S} {20,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {3,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {10,S}', '19 H 0 {11,S}', '20 H 0 {13,S}']

Index #	Species Name
148	['SPC(58591)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {7,D} {1,S} {3,S}', '3 O 0 {2,S} {17,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {2,D}', '8 O 1 {7,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {15,D} {22,S} {23,S}', '11 C 0 {20,S} {24,S} {25,S} {26,S}', '12 C 0 {16,B} {18,B} {17,S}', '13 C 0 {14,B} {16,B} {20,S}', '14 C 0 {13,B} {19,B} {21,S}', '15 C 0 {10,D} {17,S} {27,S}', '16 C 0 {12,B} {13,B} {28,S}', '17 C 0 {12,S} {15,S} {29,S} {3,S}', '18 C 0 {12,B} {19,B} {30,S}', '19 C 0 {14,B} {18,B} {31,S}', '20 O 0 {11,S} {13,S}', '21 O 0 {14,S} {32,S}', '22 H 0 {10,S}', '23 H 0 {10,S}', '24 H 0 {11,S}', '25 H 0 {11,S}', '26 H 0 {11,S}', '27 H 0 {15,S}', '28 H 0 {16,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {18,S}', '31 H 0 {19,S}', '32 H 0 {21,S}']
149	['SPC(81295)', '1 C 0 {5,D} {13,S} {19,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 0 {1,D} {7,D}', '6 C 0 {2,B} {3,B} {14,S}', '7 C 0 {2,S} {5,D} {15,S}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {16,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {17,S}', '10 O 0 {3,S} {12,S}', '11 O 0 {4,S} {18,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {6,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {11,S}', '19 C 0 {23,D} {31,S} {1,S}', '20 C 0 {24,B} {26,B} {25,S}', '21 C 0 {22,B} {24,B} {28,S}', '22 C 0 {21,B} {27,B} {29,S}', '23 C 0 {19,D} {25,D}', '24 C 0 {20,B} {21,B} {32,S}', '25 C 0 {20,S} {23,D} {33,S}', '26 C 0 {20,B} {27,B} {34,S}', '27 C 0 {22,B} {26,B} {35,S}', '28 O 0 {21,S} {30,S}', '29 O 0 {22,S} {36,S}', '30 H 0 {28,S}', '31 H 0 {19,S}', '32 H 0 {24,S}', '33 H 0 {25,S}', '34 H 0 {26,S}', '35 H 0 {27,S}', '36 H 0 {29,S}']
150	['SPC(71555)', '1 H 0 {11,S}', '2 C 0 {6,D} {13,S} {14,S}', '3 C 0 {7,B} {9,B} {8,S}', '4 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '5 C 0 {4,B} {10,B} {12,S}', '6 C 0 {2,D} {8,D}', '7 C 0 {3,B} {4,B} {15,S}', '8 C 0 {6,D} {3,S} {16,S}', '9 C 0 {3,B} {10,B} {17,S}', '10 C 0 {5,B} {9,B} {18,S}', '11 O 0 {4,S} {1,S}', '12 O 0 {5,S} {19,S}', '13 H 0 {2,S}', '14 H 0 {2,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {10,S}', '19 H 0 {12,S}']
151	['SPC(58592)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {7,D} {1,S} {3,S}', '3 O 1 {2,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {2,D}', '8 O 0 {7,S} {17,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {15,D} {22,S} {23,S}', '11 C 0 {20,S} {24,S} {25,S} {26,S}', '12 C 0 {16,B} {18,B} {17,S}', '13 C 0 {14,B} {16,B} {20,S}', '14 C 0 {13,B} {19,B} {21,S}', '15 C 0 {10,D} {17,S} {27,S}', '16 C 0 {12,B} {13,B} {28,S}', '17 C 0 {12,S} {15,S} {29,S} {8,S}', '18 C 0 {12,B} {19,B} {30,S}', '19 C 0 {14,B} {18,B} {31,S}', '20 O 0 {11,S} {13,S}', '21 O 0 {14,S} {32,S}', '22 H 0 {10,S}', '23 H 0 {10,S}', '24 H 0 {11,S}', '25 H 0 {11,S}', '26 H 0 {11,S}', '27 H 0 {15,S}', '28 H 0 {16,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {18,S}', '31 H 0 {19,S}', '32 H 0 {21,S}']
152	['SPC(21482)', '1 C 0 {2,T} {4,S}', '2 C 0 {1,T} {3,S}', '3 H 0 {2,S}', '4 C 0 {5,D} {6,S} {1,S}', '5 C 0 {4,D} {7,S} {8,S}', '6 H 0 {4,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 H 0 {5,S}']
153	['SPC(146)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {8,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {9,S}', '4 C 0 {6,D} {3,S} {5,S}', '5 O 0 {1,S} {4,S}', '6 O 0 {4,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {3,S}']
154	['SPC(59402)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {8,S} {15,S} {16,S} {1,S}', '4 C 0 {13,S} {17,S} {18,S} {19,S}', '5 C 0 {9,B} {11,B} {10,S}', '6 C 0 {7,B} {9,B} {13,S}', '7 C 0 {6,B} {12,B} {14,S}', '8 C 0 {3,S} {10,D} {20,S}', '9 C 0 {5,B} {6,B} {21,S}', '10 C 0 {5,S} {8,D} {22,S}', '11 C 0 {5,B} {12,B} {23,S}', '12 C 0 {7,B} {11,B} {24,S}', '13 O 0 {4,S} {6,S}', '14 O 0 {7,S} {25,S}', '15 H 0 {3,S}', '16 H 0 {3,S}', '17 H 0 {4,S}', '18 H 0 {4,S}', '19 H 0 {4,S}', '20 H 0 {8,S}', '21 H 0 {9,S}', '22 H 0 {10,S}', '23 H 0 {11,S}', '24 H 0 {12,S}', '25 H 0 {14,S}']
155	['SPC(99730)', '1 C 0 {5,D} {2,S} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {8,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {9,S}', '4 C 1 {3,S} {6,D}', '5 O 0 {1,D}', '6 O 0 {4,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {3,S}']

Index #	Species Name
156	['SPC(101296)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {15,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {16,D} {13,S} {18,S}', '13 C 0 {12,S} {14,D} {19,S}', '14 C 0 {13,D} {15,S} {20,S}', '15 C 0 {17,D} {14,S} {5,S}', '16 O 0 {12,D}', '17 O 0 {15,D}', '18 H 0 {12,S}', '19 H 0 {13,S}', '20 H 0 {14,S}']
157	['SPC(101292)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {4,S} {7,S}', '3 O 0 {1,S} {8,S}', '4 O 0 {2,S} {12,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {13,D} {10,S} {15,S}', '10 C 0 {9,S} {11,D} {16,S}', '11 C 0 {10,D} {12,S} {17,S}', '12 C 0 {14,D} {11,S} {4,S}', '13 O 0 {9,D}', '14 O 0 {12,D}', '15 H 0 {9,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {11,S}']
158	['SPC(24105)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {7,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,D} {8,S} {1,S}', '4 C 0 {3,D} {5,S} {9,S}', '5 C 0 {6,D} {4,S} {10,S}', '6 O 0 {5,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}']
159	['SPC(101364)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {9,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {10,D} {7,S} {12,S}', '7 C 0 {6,S} {8,D} {13,S}', '8 C 0 {7,D} {9,S} {14,S}', '9 C 0 {11,D} {8,S} {2,S}', '10 O 0 {6,D}', '11 O 0 {9,D}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}']
160	['SPC(2275)', '1 C 0 {2,D} {4,S} {6,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 1 {4,D} {5,S}', '4 C 0 {3,D} {7,S} {1,S}', '5 H 0 {3,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {4,S}']
161	['SPC(71553)', '1 C 1 {2,D} {13,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {10,S} {5,S} {6,S}', '4 C 0 {3,S} {14,S} {7,S} {8,S}', '5 H 0 {3,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 H 0 {4,S}', '8 H 0 {4,S}', '9 C 0 {10,D} {13,S} {11,S}', '10 C 0 {9,D} {3,S} {12,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 C 0 {14,S} {9,S} {15,S} {1,S}', '14 C 0 {13,S} {4,S} {16,S} {17,S}', '15 H 0 {13,S}', '16 H 0 {14,S}', '17 H 0 {14,S}']
162	['SPC(101363)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {9,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,S} {10,D} {12,S}', '7 C 0 {6,S} {8,D} {13,S}', '8 C 0 {7,D} {9,S} {14,S}', '9 C 0 {8,S} {11,D} {1,S}', '10 O 0 {6,D}', '11 O 0 {9,D}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}']
163	['SPC(91632)', '1 H 0 {11,S}', '2 C 1 {6,S} {13,S} {14,S}', '3 C 0 {7,B} {9,B} {8,S}', '4 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '5 C 0 {4,B} {10,B} {12,S}', '6 C 0 {2,S} {8,D} {20,S}', '7 C 0 {3,B} {4,B} {15,S}', '8 C 0 {6,D} {3,S} {16,S}', '9 C 0 {3,B} {10,B} {17,S}', '10 C 0 {5,B} {9,B} {18,S}', '11 O 0 {4,S} {1,S}', '12 O 0 {5,S} {19,S}', '13 H 0 {2,S}', '14 H 0 {2,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {10,S}', '19 H 0 {12,S}', '20 C 1 {21,D} {6,S}', '21 O 0 {20,D}']
164	['SPC(2257)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {7,S}', '2 C 1 {1,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {8,D} {9,S} {1,S}', '8 C 0 {7,D} {10,S} {11,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 H 0 {8,S}']
165	['SPC(116688)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {8,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {9,S} {11,S}', '7 O 0 {6,D}', '8 C 0 {9,D} {10,S} {2,S}', '9 C 0 {8,D} {12,S} {6,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {9,S}']
166	['SPC(80180)', '1 H 0 {8,S}', '2 C 0 {6,T} {14,S}', '3 C 0 {7,B} {9,B} {8,S}', '4 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '5 C 0 {4,B} {10,B} {12,S}', '6 C 0 {2,T} {8,S}', '7 C 0 {3,B} {4,B} {15,S}', '8 C 0 {3,S} {6,S} {16,S} {1,S}', '9 C 0 {3,B} {10,B} {17,S}', '10 C 0 {5,B} {9,B} {18,S}', '11 O 0 {4,S} {13,S}', '12 O 0 {5,S} {19,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {2,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {10,S}', '19 H 0 {12,S}']
167	['SPC(2653)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {8,S}', '3 C 0 {2,D} {6,S} {7,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 H 0 {3,S}', '8 C 1 {9,D} {2,S}', '9 O 0 {8,D}']

Index #	Species Name
168	['SPC(128881)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {8,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {9,S} {10,S}', '7 C 0 {6,D} {8,S} {13,S}', '8 O 0 {7,S} {2,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 C 0 {12,D} {14,S} {16,S}', '12 O 0 {11,D}', '13 C 0 {14,D} {15,S} {7,S}', '14 C 0 {13,D} {17,S} {11,S}', '15 H 0 {13,S}', '16 H 0 {11,S}', '17 H 0 {14,S}']
169	['SPC(127452)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {4,S} {7,S}', '3 O 0 {1,S} {8,S}', '4 O 0 {2,S} {9,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {10,S} {12,S} {13,S} {4,S}', '10 C 0 {11,D} {9,S} {16,S}', '11 O 0 {10,D}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 C 0 {15,D} {17,S} {19,S}', '15 O 0 {14,D}', '16 C 0 {17,D} {18,S} {10,S}', '17 C 0 {16,D} {20,S} {14,S}', '18 H 0 {16,S}', '19 H 0 {14,S}', '20 H 0 {17,S}']
170	['SPC(15393)', '1 C 0 {5,S} {12,S} {13,S} {14,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 1 {1,S} {7,D}', '6 C 0 {2,B} {3,B} {15,S}', '7 C 0 {2,S} {5,D} {17,S}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {18,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {19,S}', '10 O 0 {3,S} {16,S}', '11 O 0 {4,S} {20,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {1,S}', '15 H 0 {6,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {7,S}', '18 H 0 {8,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {11,S}']
171	['SPC(91185)', '1 C 1 {5,S} {13,S} {19,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 0 {1,S} {7,D} {37,S}', '6 C 0 {2,B} {3,B} {14,S}', '7 C 0 {5,D} {2,S} {15,S}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {16,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {17,S}', '10 O 0 {3,S} {12,S}', '11 O 0 {4,S} {18,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {6,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {11,S}', '19 C 0 {23,D} {31,S} {1,S}', '20 C 0 {24,B} {26,B} {25,S}', '21 C 0 {22,B} {24,B} {28,S}', '22 C 0 {21,B} {27,B} {29,S}', '23 C 0 {19,D} {25,D}', '24 C 0 {20,B} {21,B} {32,S}', '25 C 0 {20,S} {23,D} {33,S}', '26 C 0 {20,B} {27,B} {34,S}', '27 C 0 {22,B} {26,B} {35,S}', '28 O 0 {21,S} {30,S}', '29 O 0 {22,S} {36,S}', '30 H 0 {28,S}', '31 H 0 {19,S}', '32 H 0 {24,S}', '33 H 0 {25,S}', '34 H 0 {26,S}', '35 H 0 {27,S}', '36 H 0 {29,S}', '37 C 1 {38,D} {5,S}', '38 O 0 {37,D}']
172	['SPC(59749)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {4,S} {5,S} {11,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 C 0 {7,D} {8,S} {1,S}', '7 C 0 {6,D} {9,S} {10,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {2,S}']
173	['SPC(128880)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {8,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {9,S} {10,S}', '7 C 0 {6,D} {8,S} {13,S}', '8 O 0 {7,S} {1,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 C 0 {12,D} {14,S} {16,S}', '12 O 0 {11,D}', '13 C 0 {14,D} {15,S} {7,S}', '14 C 0 {13,D} {17,S} {11,S}', '15 H 0 {13,S}', '16 H 0 {11,S}', '17 H 0 {14,S}']
174	['SPC(127456)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {12,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {13,S} {15,S} {16,S} {5,S}', '13 C 0 {14,D} {12,S} {19,S}', '14 O 0 {13,D}', '15 H 0 {12,S}', '16 H 0 {12,S}', '17 C 0 {18,D} {20,S} {22,S}', '18 O 0 {17,D}', '19 C 0 {20,D} {21,S} {13,S}', '20 C 0 {19,D} {23,S} {17,S}', '21 H 0 {19,S}', '22 H 0 {17,S}', '23 H 0 {20,S}']
175	['SPC(16743)', '1 C 0 {5,S} {12,S} {13,S} {14,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 0 {1,S} {7,T}', '6 C 0 {2,B} {3,B} {15,S}', '7 C 0 {2,S} {5,T}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {17,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {18,S}', '10 O 0 {3,S} {16,S}', '11 O 0 {4,S} {19,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {1,S}', '15 H 0 {6,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {8,S}', '18 H 0 {9,S}', '19 H 0 {11,S}']
176	['SPC(151033)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {5,S} {8,S} {1,S}', '4 C 0 {3,S} {6,S} {7,S} {13,S}', '5 H 0 {3,S}', '6 H 0 {4,S}', '7 H 0 {4,S}', '8 C 0 {9,D} {10,S} {3,S}', '9 C 0 {8,D} {11,S} {12,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {4,S}']

Index #	Species Name
177	['SPC(72363)', '1 C 1 {5,S} {12,S} {13,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 0 {1,S} {7,T}', '6 C 0 {2,B} {3,B} {14,S}', '7 C 0 {2,S} {5,T}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {16,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {17,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 O 0 {4,S} {18,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {6,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {11,S}']
178	['SPC(18328)', '1 C 1 {4,B} {5,B}', '2 C 0 {3,B} {4,B} {7,S}', '3 C 0 {2,B} {6,B} {8,S}', '4 C 0 {1,B} {2,B} {9,S}', '5 C 0 {1,B} {6,B} {11,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {12,S}', '7 O 0 {2,S} {10,S}', '8 O 0 {3,S} {13,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {8,S}']
179	['SPC(131703)', '1 C 0 {2,S} {6,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {8,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {9,S} {1,S} {7,S} {11,S}', '7 O 1 {6,S}', '8 C 0 {9,D} {2,S} {10,S}', '9 C 0 {8,D} {6,S} {12,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {9,S}']
180	['SPC(103201)', '1 C 0 {5,D} {2,S} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {8,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {9,S}', '4 C 0 {6,D} {3,S} {10,S}', '5 O 0 {1,D}', '6 O 0 {4,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {3,S}', '10 C 0 {11,S} {12,S} {13,S} {4,S}', '11 H 0 {10,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {10,S}']
181	['SPC(161981)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {7,S}', '2 C 1 {1,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {10,B} {11,B} {1,S}', '8 C 0 {9,B} {10,B} {13,S}', '9 C 0 {8,B} {12,B} {14,S}', '10 C 0 {7,B} {8,B} {15,S}', '11 C 0 {7,B} {12,B} {17,S}', '12 C 0 {9,B} {11,B} {18,S}', '13 O 0 {8,S} {16,S}', '14 O 0 {9,S} {19,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {13,S}', '17 H 0 {11,S}', '18 H 0 {12,S}', '19 H 0 {14,S}']
182	['SPC(161969)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {6,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {9,B} {10,B} {2,S}', '7 C 0 {8,B} {9,B} {12,S}', '8 C 0 {7,B} {11,B} {13,S}', '9 C 0 {6,B} {7,B} {14,S}', '10 C 0 {6,B} {11,B} {16,S}', '11 C 0 {8,B} {10,B} {17,S}', '12 O 0 {7,S} {15,S}', '13 O 0 {8,S} {18,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {12,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {11,S}', '18 H 0 {13,S}']
183	['SPC(57996)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 O 0 {1,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 C 0 {10,S} {17,S} {18,S} {2,S}', '6 C 0 {15,S} {19,S} {20,S} {21,S}', '7 C 0 {11,B} {13,B} {12,S}', '8 C 0 {9,B} {11,B} {15,S}', '9 C 0 {8,B} {14,B} {16,S}', '10 C 0 {5,S} {12,D} {22,S}', '11 C 0 {7,B} {8,B} {23,S}', '12 C 0 {10,D} {7,S} {24,S}', '13 C 0 {7,B} {14,B} {25,S}', '14 C 0 {9,B} {13,B} {26,S}', '15 O 0 {6,S} {8,S}', '16 O 0 {9,S} {27,S}', '17 H 0 {5,S}', '18 H 0 {5,S}', '19 H 0 {6,S}', '20 H 0 {6,S}', '21 H 0 {6,S}', '22 H 0 {10,S}', '23 H 0 {11,S}', '24 H 0 {12,S}', '25 H 0 {13,S}', '26 H 0 {14,S}', '27 H 0 {16,S}']
184	['SPC(4753)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {13,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {14,S} {15,S} {17,S} {18,S}', '13 C 0 {14,S} {19,S} {20,S} {5,S}', '14 C 0 {16,D} {12,S} {13,S}', '15 O 0 {12,S} {21,S}', '16 O 0 {14,D}', '17 H 0 {12,S}', '18 H 0 {12,S}', '19 H 0 {13,S}', '20 H 0 {13,S}', '21 H 0 {15,S}']
185	['SPC(161965)', '1 C 0 {3,D} {2,S} {4,S}', '2 O 1 {1,S}', '3 O 0 {1,D}', '4 C 0 {7,B} {8,B} {1,S}', '5 C 0 {6,B} {7,B} {10,S}', '6 C 0 {5,B} {9,B} {11,S}', '7 C 0 {4,B} {5,B} {12,S}', '8 C 0 {4,B} {9,B} {14,S}', '9 C 0 {6,B} {8,B} {15,S}', '10 O 0 {5,S} {13,S}', '11 O 0 {6,S} {16,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {10,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {9,S}', '16 H 0 {11,S}']
186	['SPC(58457)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 O 0 {1,S} {12,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 C 0 {10,D} {17,S} {18,S}', '6 C 0 {15,S} {19,S} {20,S} {21,S}', '7 C 0 {11,B} {13,B} {12,S}', '8 C 0 {9,B} {11,B} {15,S}', '9 C 0 {8,B} {14,B} {16,S}', '10 C 0 {5,D} {12,S} {22,S}', '11 C 0 {7,B} {8,B} {23,S}', '12 C 0 {7,S} {10,S} {24,S} {2,S}', '13 C 0 {7,B} {14,B} {25,S}', '14 C 0 {9,B} {13,B} {26,S}', '15 O 0 {6,S} {8,S}', '16 O 0 {9,S} {27,S}', '17 H 0 {5,S}', '18 H 0 {5,S}', '19 H 0 {6,S}', '20 H 0 {6,S}', '21 H 0 {6,S}', '22 H 0 {10,S}', '23 H 0 {11,S}', '24 H 0 {12,S}', '25 H 0 {13,S}', '26 H 0 {14,S}', '27 H 0 {16,S}']

Index #	Species Name
187	['SPC(169888)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {8,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {9,S} {10,S}', '7 C 0 {6,D} {8,S} {11,S}', '8 O 0 {7,S} {2,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 C 0 {14,B} {15,B} {7,S}', '12 C 0 {13,B} {14,B} {17,S}', '13 C 0 {12,B} {16,B} {18,S}', '14 C 0 {11,B} {12,B} {19,S}', '15 C 0 {11,B} {16,B} {21,S}', '16 C 0 {13,B} {15,B} {22,S}', '17 O 0 {12,S} {20,S}', '18 O 0 {13,S} {23,S}', '19 H 0 {14,S}', '20 H 0 {17,S}', '21 H 0 {15,S}', '22 H 0 {16,S}', '23 H 0 {18,S}']
188	['SPC(162548)', '1 C 0 {4,B} {5,B} {9,S}', '2 C 0 {3,B} {4,B} {7,S}', '3 C 0 {2,B} {6,B} {8,S}', '4 C 1 {1,B} {2,B}', '5 C 0 {1,B} {6,B} {11,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {12,S}', '7 O 0 {2,S} {10,S}', '8 O 0 {3,S} {13,S}', '9 H 0 {1,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {8,S}']
189	['SPC(168707)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {5,S} {6,S} {15,S}', '3 H 0 {10,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {10,B} {11,B} {1,S}', '8 C 0 {9,B} {10,B} {13,S}', '9 C 0 {8,B} {12,B} {14,S}', '10 C 0 {7,B} {8,B} {3,S}', '11 C 0 {7,B} {12,B} {17,S}', '12 C 0 {9,B} {11,B} {18,S}', '13 O 0 {8,S} {16,S}', '14 O 0 {9,S} {19,S}', '15 H 0 {2,S}', '16 H 0 {13,S}', '17 H 0 {11,S}', '18 H 0 {12,S}', '19 H 0 {14,S}']
190	['SPC(70978)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {7,D} {1,S} {3,S}', '3 O 0 {2,S} {20,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {2,D}', '8 O 1 {7,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {11,S} {17,S} {12,S} {13,S}', '11 C 0 {10,S} {21,S} {14,S} {15,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {10,S}', '14 H 0 {11,S}', '15 H 0 {11,S}', '16 C 0 {17,D} {20,S} {18,S}', '17 C 0 {16,D} {10,S} {19,S}', '18 H 0 {16,S}', '19 H 0 {17,S}', '20 C 0 {21,S} {16,S} {22,S} {3,S}', '21 C 0 {20,S} {11,S} {23,S} {24,S}', '22 H 0 {20,S}', '23 H 0 {21,S}', '24 H 0 {21,S}']
191	['SPC(58251)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {8,S}', '4 O 0 {3,S} {9,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {14,S} {21,S} {22,S} {4,S}', '10 C 0 {19,S} {23,S} {24,S} {25,S}', '11 C 0 {15,B} {17,B} {16,S}', '12 C 0 {13,B} {15,B} {19,S}', '13 C 0 {12,B} {18,B} {20,S}', '14 C 0 {9,S} {16,D} {26,S}', '15 C 0 {11,B} {12,B} {27,S}', '16 C 0 {14,D} {11,S} {28,S}', '17 C 0 {11,B} {18,B} {29,S}', '18 C 0 {13,B} {17,B} {30,S}', '19 O 0 {10,S} {12,S}', '20 O 0 {13,S} {31,S}', '21 H 0 {9,S}', '22 H 0 {9,S}', '23 H 0 {10,S}', '24 H 0 {10,S}', '25 H 0 {10,S}', '26 H 0 {14,S}', '27 H 0 {15,S}', '28 H 0 {16,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {18,S}', '31 H 0 {20,S}']
192	['SPC(184052)', '1 C 0 {4,B} {5,B} {9,S}', '2 C 0 {3,B} {4,B} {7,S}', '3 C 0 {2,B} {6,B} {8,S}', '4 C 0 {1,B} {2,B} {10,S}', '5 C 0 {1,B} {6,B} {11,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {12,S}', '7 O 1 {2,S}', '8 O 0 {3,S} {13,S}', '9 H 0 {1,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {8,S}']
193	['SPC(183425)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {10,S}', '2 C 1 {1,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {10,B} {11,B} {15,S}', '8 C 0 {9,B} {10,B} {13,S}', '9 C 0 {8,B} {12,B} {14,S}', '10 C 0 {7,B} {8,B} {1,S}', '11 C 0 {7,B} {12,B} {17,S}', '12 C 0 {9,B} {11,B} {18,S}', '13 O 0 {8,S} {16,S}', '14 O 0 {9,S} {19,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {13,S}', '17 H 0 {11,S}', '18 H 0 {12,S}', '19 H 0 {14,S}']
194	['SPC(70979)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {7,D} {1,S} {3,S}', '3 O 1 {2,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {2,D}', '8 O 0 {7,S} {20,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {11,S} {17,S} {12,S} {13,S}', '11 C 0 {10,S} {21,S} {14,S} {15,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {10,S}', '14 H 0 {11,S}', '15 H 0 {11,S}', '16 C 0 {17,D} {20,S} {18,S}', '17 C 0 {16,D} {10,S} {19,S}', '18 H 0 {16,S}', '19 H 0 {17,S}', '20 C 0 {21,S} {16,S} {22,S} {8,S}', '21 C 0 {20,S} {11,S} {23,S} {24,S}', '22 H 0 {20,S}', '23 H 0 {21,S}', '24 H 0 {21,S}']

Index #	Species Name
195	['SPC(58645)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {8,S}', '4 O 0 {3,S} {16,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {14,D} {21,S} {22,S}', '10 C 0 {19,S} {23,S} {24,S} {25,S}', '11 C 0 {15,B} {17,B} {16,S}', '12 C 0 {13,B} {15,B} {19,S}', '13 C 0 {12,B} {18,B} {20,S}', '14 C 0 {9,D} {16,S} {26,S}', '15 C 0 {11,B} {12,B} {27,S}', '16 C 0 {11,S} {14,S} {28,S} {4,S}', '17 C 0 {11,B} {18,B} {29,S}', '18 C 0 {13,B} {17,B} {30,S}', '19 O 0 {10,S} {12,S}', '20 O 0 {13,S} {31,S}', '21 H 0 {9,S}', '22 H 0 {9,S}', '23 H 0 {10,S}', '24 H 0 {10,S}', '25 H 0 {10,S}', '26 H 0 {14,S}', '27 H 0 {15,S}', '28 H 0 {16,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {18,S}', '31 H 0 {20,S}']
196	['SPC(161946)', '1 H 0 {2,S}', '2 C 0 {5,B} {6,B} {1,S}', '3 C 0 {4,B} {5,B} {8,S}', '4 C 0 {3,B} {7,B} {9,S}', '5 C 0 {2,B} {3,B} {10,S}', '6 C 0 {2,B} {7,B} {12,S}', '7 C 0 {4,B} {6,B} {13,S}', '8 O 0 {3,S} {11,S}', '9 O 0 {4,S} {14,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {8,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {9,S}']
197	['SPC(255)', '1 C 0 {9,S} {11,S} {12,S} {13,S}', '2 C 0 {4,B} {5,B} {8,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {9,S}', '4 C 0 {2,B} {3,B} {10,S}', '5 C 0 {2,B} {7,B} {14,S}', '6 C 0 {3,B} {7,B} {15,S}', '7 C 0 {5,B} {6,B} {16,S}', '8 O 1 {2,S}', '9 O 0 {1,S} {3,S}', '10 O 0 {4,S} {17,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {5,S}', '15 H 0 {6,S}', '16 H 0 {7,S}', '17 H 0 {10,S}']
198	['SPC(183845)', '1 C 0 {4,B} {5,B} {9,S}', '2 C 0 {3,B} {4,B} {7,S}', '3 C 0 {2,B} {6,B} {8,S}', '4 C 0 {1,B} {2,B} {14,S}', '5 C 0 {1,B} {6,B} {11,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {12,S}', '7 O 0 {2,S} {10,S}', '8 O 0 {3,S} {13,S}', '9 H 0 {1,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 O 0 {15,S} {4,S}', '15 C 0 {14,S} {16,S} {17,S} {18,S}', '16 H 0 {15,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 H 0 {15,S}']
199	['SPC(203368)', '1 C 0 {9,S} {11,S} {12,S} {13,S}', '2 C 0 {4,B} {5,B} {8,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {9,S}', '4 C 0 {2,B} {3,B} {10,S}', '5 C 1 {2,B} {7,B}', '6 C 0 {3,B} {7,B} {15,S}', '7 C 0 {5,B} {6,B} {16,S}', '8 O 0 {2,S} {14,S}', '9 O 0 {1,S} {3,S}', '10 O 0 {4,S} {17,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {6,S}', '16 H 0 {7,S}', '17 H 0 {10,S}']
200	['SPC(14635)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {9,S} {1,S}', '7 C 0 {6,D} {8,S} {10,S}', '8 C 0 {7,S} {11,S} {12,S} {13,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {8,S}', '12 H 0 {8,S}', '13 H 0 {8,S}']
201	['SPC(1400)', '1 C 1 {2,D} {4,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {6,S} {7,S} {8,S}', '4 C 0 {3,S} {5,D} {1,S}', '5 O 0 {4,D}', '6 H 0 {3,S}', '7 H 0 {3,S}', '8 H 0 {3,S}']
202	['SPC(160243)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {13,S}', '2 C 1 {1,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {11,D} {18,S} {19,S}', '8 C 0 {12,B} {14,B} {13,S}', '9 C 0 {10,B} {12,B} {16,S}', '10 C 0 {9,B} {15,B} {17,S}', '11 C 0 {7,D} {13,D}', '12 C 0 {8,B} {9,B} {20,S}', '13 C 0 {11,D} {8,S} {1,S}', '14 C 0 {8,B} {15,B} {22,S}', '15 C 0 {10,B} {14,B} {23,S}', '16 O 0 {9,S} {21,S}', '17 O 0 {10,S} {24,S}', '18 H 0 {7,S}', '19 H 0 {7,S}', '20 H 0 {12,S}', '21 H 0 {16,S}', '22 H 0 {14,S}', '23 H 0 {15,S}', '24 H 0 {17,S}']
203	['SPC(16626)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {5,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 C 0 {2,D} {1,S} {6,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {3,S}']
204	['SPC(16566)', '1 C 0 {2,D} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,D} {3,D}', '3 C 0 {2,D} {6,S} {7,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {10,S} {3,S}', '8 H 0 {7,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {7,S}']
205	['SPC(70793)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 O 0 {1,S} {15,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 C 0 {6,S} {12,S} {7,S} {8,S}', '6 C 0 {5,S} {16,S} {9,S} {10,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 H 0 {5,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 C 0 {12,D} {15,S} {13,S}', '12 C 0 {11,D} {5,S} {14,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 C 0 {16,S} {11,S} {17,S} {2,S}', '16 C 0 {15,S} {6,S} {18,S} {19,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 H 0 {16,S}', '19 H 0 {16,S}']

Index #	Species Name
206	['SPC(2600)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {5,S} {6,S} {8,S} {1,S}', '4 C 0 {5,S} {9,S} {10,S} {11,S}', '5 C 0 {3,S} {4,S} {7,D}', '6 O 0 {3,S} {12,S}', '7 O 0 {5,D}', '8 H 0 {3,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {6,S}']
207	['SPC(71550)', '1 C 0 {2,S} {8,S} {3,S} {4,S}', '2 C 0 {1,S} {12,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {8,D} {11,S} {9,S}', '8 C 0 {7,D} {1,S} {10,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 C 0 {12,S} {7,S} {13,S} {14,S}', '12 C 1 {11,S} {2,S} {15,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {11,S}', '15 H 0 {12,S}']
208	['SPC(212401)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {11,S}', '3 C 0 {2,D} {6,S} {7,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {10,S} {3,S}', '8 H 0 {7,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 C 1 {12,D} {2,S}', '12 O 0 {11,D}']
209	['SPC(33389)', '1 C 1 {2,D} {6,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {7,D} {9,S}', '4 C 0 {3,S} {5,S} {10,S} {13,S}', '5 C 0 {4,S} {6,S} {8,D}', '6 C 0 {5,S} {7,S} {11,S} {1,S}', '7 C 0 {3,D} {6,S} {12,S}', '8 O 0 {5,D}', '9 H 0 {3,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {4,S}']
210	['SPC(27609)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {11,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {10,S} {12,S}', '7 C 0 {6,D} {8,S} {13,S}', '8 C 0 {7,S} {9,D} {11,S}', '9 C 0 {8,D} {10,S} {14,S}', '10 C 0 {6,S} {9,S} {15,S} {16,S}', '11 O 0 {8,S} {2,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {10,S}']
211	['SPC(59795)', '1 C 0 {6,D} {2,S} {3,S}', '2 C 0 {1,S} {4,S} {5,S} {11,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 C 0 {7,S} {8,S} {1,D}', '7 C 1 {6,S} {9,S} {10,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 C 0 {12,D} {13,S} {2,S}', '12 C 0 {11,D} {14,S} {15,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {12,S}']
212	['SPC(71551)', '1 C 0 {2,S} {8,S} {3,S} {4,S}', '2 C 0 {1,S} {12,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 1 {8,D} {11,S}', '8 C 0 {7,D} {1,S} {10,S}', '9 H 0 {12,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 C 0 {12,S} {7,S} {13,S} {14,S}', '12 C 0 {11,S} {2,S} {15,S} {9,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {11,S}', '15 H 0 {12,S}']
213	['SPC(31476)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {11,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,S} {10,D} {12,S}', '7 C 0 {6,S} {8,S} {13,S} {16,S}', '8 C 0 {7,S} {9,D} {11,S}', '9 C 0 {8,D} {10,S} {14,S}', '10 C 0 {6,D} {9,S} {15,S}', '11 O 0 {8,S} {2,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {7,S}']
214	['SPC(237932)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {5,S} {8,S} {1,S}', '4 C 0 {3,S} {6,S} {7,S} {13,S}', '5 H 0 {3,S}', '6 H 0 {4,S}', '7 H 0 {4,S}', '8 C 0 {9,D} {10,S} {3,S}', '9 C 0 {8,D} {11,S} {12,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 C 0 {14,D} {15,S} {4,S}', '14 C 0 {13,D} {16,S} {17,S}', '15 H 0 {13,S}', '16 H 0 {14,S}', '17 H 0 {14,S}']
215	['SPC(29096)', '1 C 1 {2,D} {6,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,D} {7,S} {9,S}', '4 C 0 {3,D} {5,S} {10,S}', '5 C 0 {4,S} {6,S} {8,D}', '6 C 0 {5,S} {7,S} {11,S} {1,S}', '7 C 0 {3,S} {6,S} {12,S} {13,S}', '8 O 0 {5,D}', '9 H 0 {3,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {7,S}']
216	['SPC(220183)', '1 C 1 {2,D} {14,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {10,S} {5,S} {6,S}', '4 C 0 {3,S} {14,S} {7,S} {8,S}', '5 H 0 {3,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 H 0 {4,S}', '8 H 0 {4,S}', '9 C 0 {10,D} {13,S} {11,S}', '10 C 0 {9,D} {3,S} {12,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 C 0 {14,S} {9,S} {15,S} {16,S}', '14 C 0 {13,S} {4,S} {17,S} {1,S}', '15 H 0 {13,S}', '16 H 0 {13,S}', '17 H 0 {14,S}']
217	['SPC(32185)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {12,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {13,S} {16,S} {18,S} {5,S}', '13 C 0 {12,S} {14,S} {19,S} {22,S}', '14 C 0 {17,D} {13,S} {15,S}', '15 C 0 {14,S} {16,D} {20,S}', '16 C 0 {12,S} {15,D} {21,S}', '17 O 0 {14,D}', '18 H 0 {12,S}', '19 H 0 {13,S}', '20 H 0 {15,S}', '21 H 0 {16,S}', '22 H 0 {13,S}']

Index #	Species Name
218	['SPC(131695)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {10,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {8,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 1 {7,D} {9,S}', '7 O 0 {6,D}', '8 C 0 {9,D} {2,S} {11,S}', '9 C 0 {8,D} {12,S} {6,S}', '10 H 0 {1,S}', '11 H 0 {8,S}', '12 H 0 {9,S}']
219	['SPC(27608)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {11,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {10,S} {12,S}', '7 C 0 {6,D} {8,S} {13,S}', '8 C 0 {7,S} {9,D} {11,S}', '9 C 0 {8,D} {10,S} {14,S}', '10 C 0 {6,S} {9,S} {15,S} {16,S}', '11 O 0 {8,S} {1,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {10,S}']
220	['SPC(2618)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {6,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '6 C 0 {5,S} {7,D} {1,S}', '7 O 0 {6,D}', '8 H 0 {5,S}', '9 H 0 {5,S}', '10 H 0 {5,S}']
221	['SPC(259062)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {17,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {13,S} {15,S} {16,S} {21,S}', '13 C 0 {14,D} {12,S} {19,S}', '14 O 0 {13,D}', '15 H 0 {12,S}', '16 H 0 {12,S}', '17 C 0 {18,D} {20,S} {5,S}', '18 O 0 {17,D}', '19 C 0 {20,D} {13,S} {22,S}', '20 C 0 {19,D} {23,S} {17,S}', '21 H 0 {12,S}', '22 H 0 {19,S}', '23 H 0 {20,S}']
222	['SPC(71280)', '1 C 0 {2,S} {8,S} {3,S} {4,S}', '2 C 0 {1,S} {12,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {8,D} {11,S} {9,S}', '8 C 0 {7,D} {1,S} {10,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 C 0 {12,D} {7,S} {13,S}', '12 C 0 {11,D} {2,S} {14,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {12,S}']
223	['SPC(70761)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {22,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {13,S} {19,S} {14,S} {15,S}', '13 C 0 {12,S} {23,S} {16,S} {17,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {12,S}', '16 H 0 {13,S}', '17 H 0 {13,S}', '18 C 0 {19,D} {22,S} {20,S}', '19 C 0 {18,D} {12,S} {21,S}', '20 H 0 {18,S}', '21 H 0 {19,S}', '22 C 0 {23,S} {18,S} {24,S} {5,S}', '23 C 0 {22,S} {13,S} {25,S} {26,S}', '24 H 0 {22,S}', '25 H 0 {23,S}', '26 H 0 {23,S}']
224	['SPC(56039)', '1 C 0 {7,D} {2,S} {3,S}', '2 C 1 {1,S} {4,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 C 0 {10,D} {7,S} {8,S}', '7 C 0 {6,S} {9,S} {1,D}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {11,S} {12,S} {6,D}', '11 C 1 {10,S} {13,S} {14,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {11,S}']
225	['SPC(95143)', '1 C 0 {2,T} {4,S}', '2 C 0 {1,T} {3,S}', '3 H 0 {2,S}', '4 C 1 {5,D} {1,S}', '5 C 0 {4,D} {6,S} {7,S}', '6 H 0 {5,S}', '7 H 0 {5,S}']
226	['SPC(6518)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {5,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,D} {8,S} {1,S}', '6 C 0 {5,D} {7,D}', '7 C 1 {6,D} {9,S}', '8 H 0 {5,S}', '9 H 0 {7,S}']
227	['SPC(16620)', '1 C 0 {2,D} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,D} {3,D}', '3 C 0 {2,D} {6,S} {9,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 C 0 {8,D} {10,S} {11,S}', '8 C 0 {7,D} {9,D}', '9 C 0 {8,D} {12,S} {3,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {7,S}', '12 H 0 {9,S}']
228	['SPC(285877)', '1 C 0 {2,S} {7,D} {3,S}', '2 C 0 {1,S} {6,S} {4,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 C 0 {7,S} {2,S} {8,S} {10,S}', '7 C 0 {6,S} {1,D} {9,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {11,D} {12,S} {6,S}', '11 C 0 {10,D} {13,S} {14,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {11,S}']
229	['SPC(288452)', '1 C 1 {2,D} {4,S}', '2 C 0 {1,D} {4,S} {3,S}', '3 H 0 {2,S}', '4 C 0 {5,D} {1,S} {2,S}', '5 C 0 {4,D} {6,S} {7,S}', '6 H 0 {5,S}', '7 H 0 {5,S}']
230	['SPC(55485)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {5,S}', '2 C 0 {1,D} {4,S} {10,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,D} {7,S} {1,S}', '6 C 0 {5,D} {8,S} {9,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 C 0 {11,D} {12,S} {2,S}', '11 C 0 {10,D} {13,S} {14,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {11,S}']

Index #	Species Name
231	['SPC(291668)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {13,S}', '3 C 0 {2,D} {6,S} {9,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 C 0 {8,D} {10,S} {11,S}', '8 C 0 {7,D} {9,D}', '9 C 0 {8,D} {12,S} {3,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {7,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 C 1 {14,D} {2,S}', '14 O 0 {13,D}']
232	['SPC(285968)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {10,S}', '2 C 1 {1,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {8,T} {10,S}', '8 C 0 {7,T} {9,S}', '9 H 0 {8,S}', '10 C 0 {11,D} {7,S} {1,S}', '11 C 0 {10,D} {12,S} {13,S}', '12 H 0 {11,S}', '13 H 0 {11,S}']
233	['SPC(287954)', '1 C 0 {2,T} {4,S}', '2 C 0 {1,T} {3,S}', '3 H 0 {2,S}', '4 C 0 {5,T} {1,S}', '5 C 0 {4,T} {6,S}', '6 H 0 {5,S}']
234	['SPC(275270)', '1 C 0 {2,S} {7,D} {3,S}', '2 C 0 {1,S} {11,S} {4,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 C 1 {7,S} {10,S} {8,S}', '7 C 0 {6,S} {1,D} {9,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {11,D} {6,S} {12,S}', '11 C 0 {10,D} {2,S} {13,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {11,S}']
235	['SPC(32142)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {8,S}', '4 O 0 {3,S} {12,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {10,S} {13,D} {15,S}', '10 C 0 {9,S} {11,S} {16,S} {19,S}', '11 C 0 {14,D} {10,S} {12,S}', '12 C 0 {11,S} {13,S} {17,S} {4,S}', '13 C 0 {9,D} {12,S} {18,S}', '14 O 0 {11,D}', '15 H 0 {9,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {12,S}', '18 H 0 {13,S}', '19 H 0 {10,S}']
236	['SPC(160261)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {11,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {9,D} {16,S} {17,S}', '6 C 0 {10,B} {12,B} {11,S}', '7 C 0 {8,B} {10,B} {14,S}', '8 C 0 {7,B} {13,B} {15,S}', '9 C 0 {5,D} {11,D}', '10 C 0 {6,B} {7,B} {18,S}', '11 C 0 {6,S} {9,D} {1,S}', '12 C 0 {6,B} {13,B} {20,S}', '13 C 0 {8,B} {12,B} {21,S}', '14 O 0 {7,S} {19,S}', '15 O 0 {8,S} {22,S}', '16 H 0 {5,S}', '17 H 0 {5,S}', '18 H 0 {10,S}', '19 H 0 {14,S}', '20 H 0 {12,S}', '21 H 0 {13,S}', '22 H 0 {15,S}']
237	['SPC(61968)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {6,S} {8,S} {1,S}', '4 C 0 {3,S} {5,T}', '5 C 0 {4,T} {7,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 C 0 {9,S} {10,S} {11,S} {3,S}', '9 H 0 {8,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 H 0 {8,S}']
238	['SPC(21370)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {5,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,T} {1,S}', '6 C 0 {5,T} {7,S}', '7 H 0 {6,S}']
239	['SPC(312276)', '1 C 0 {2,D} {4,D}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {7,S}', '3 H 0 {2,S}', '4 C 0 {5,D} {1,D}', '5 C 1 {4,D} {6,S}', '6 H 0 {5,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {10,S} {2,S}', '8 H 0 {7,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {7,S}']
240	['SPC(317333)', '1 C 0 {2,S} {7,S} {11,S} {3,S}', '2 C 0 {1,S} {11,S} {4,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 C 0 {7,D} {10,S} {8,S}', '7 C 0 {6,D} {1,S} {9,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 1 {11,S} {6,S} {12,S}', '11 C 0 {10,S} {2,S} {1,S} {13,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {11,S}']
241	['SPC(313702)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {8,S}', '4 O 0 {3,S} {9,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {10,S} {15,S} {11,S} {4,S}', '10 C 0 {9,S} {19,S} {12,S} {13,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {10,S}', '14 C 0 {15,D} {18,S} {16,S}', '15 C 0 {14,D} {9,S} {17,S}', '16 H 0 {14,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 C 0 {19,D} {14,S} {20,S}', '19 C 0 {18,D} {10,S} {21,S}', '20 H 0 {18,S}', '21 H 0 {19,S}']
242	['SPC(18193)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {6,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 1 {6,D} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {12,S}', '6 C 0 {1,S} {4,D} {17,S}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {14,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {15,S}', '9 O 0 {2,S} {13,S}', '10 O 0 {3,S} {16,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {8,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {6,S}']

Index #	Species Name
243	['SPC(315549)', '1 C 0 {2,S} {7,S} {3,S} {14,S}', '2 C 0 {1,S} {11,S} {4,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 C 0 {7,D} {10,S} {8,S}', '7 C 0 {6,D} {1,S} {9,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {11,D} {6,S} {12,S}', '11 C 0 {10,D} {2,S} {13,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 C 0 {15,S} {20,S} {16,S} {1,S}', '15 C 0 {14,S} {24,S} {17,S} {18,S}', '16 H 0 {14,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 H 0 {15,S}', '19 C 0 {20,D} {23,S} {21,S}', '20 C 0 {19,D} {14,S} {22,S}', '21 H 0 {19,S}', '22 H 0 {20,S}', '23 C 0 {24,D} {19,S} {25,S}', '24 C 0 {23,D} {15,S} {26,S}', '25 H 0 {23,S}', '26 H 0 {24,S}']
244	['SPC(317331)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {9,S} {5,S} {1,S}', '4 C 0 {3,S} {13,S} {6,S} {7,S}', '5 H 0 {3,S}', '6 H 0 {4,S}', '7 H 0 {4,S}', '8 C 0 {9,D} {12,S} {10,S}', '9 C 0 {8,D} {3,S} {11,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 C 0 {13,D} {8,S} {14,S}', '13 C 0 {12,D} {4,S} {15,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {13,S}']
245	['SPC(314842)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {8,S}', '4 O 0 {3,S} {14,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {10,S} {15,D} {11,S}', '10 C 0 {9,S} {19,S} {12,S} {13,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {10,S}', '14 C 0 {15,S} {18,S} {16,S} {4,S}', '15 C 0 {14,S} {9,D} {17,S}', '16 H 0 {14,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 C 0 {19,D} {14,S} {20,S}', '19 C 0 {18,D} {10,S} {21,S}', '20 H 0 {18,S}', '21 H 0 {19,S}']
246	['SPC(161943)', '1 C 1 {2,D} {9,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {7,D} {14,S} {15,S}', '4 C 0 {8,B} {10,B} {9,S}', '5 C 0 {6,B} {8,B} {12,S}', '6 C 0 {5,B} {11,B} {13,S}', '7 C 0 {3,D} {9,D}', '8 C 0 {4,B} {5,B} {16,S}', '9 C 0 {4,S} {7,D} {1,S}', '10 C 0 {4,B} {11,B} {18,S}', '11 C 0 {6,B} {10,B} {19,S}', '12 O 0 {5,S} {17,S}', '13 O 0 {6,S} {20,S}', '14 H 0 {3,S}', '15 H 0 {3,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {12,S}', '18 H 0 {10,S}', '19 H 0 {11,S}', '20 H 0 {13,S}']
247	['SPC(275272)', '1 C 0 {2,S} {8,S} {3,S} {4,S}', '2 C 0 {1,S} {11,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {8,D} {10,S} {9,S}', '8 C 1 {7,D} {1,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {11,D} {7,S} {12,S}', '11 C 0 {10,D} {2,S} {13,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {11,S}']
248	['SPC(183429)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {8,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {8,B} {9,B} {13,S}', '6 C 0 {7,B} {8,B} {11,S}', '7 C 0 {6,B} {10,B} {12,S}', '8 C 0 {5,B} {6,B} {1,S}', '9 C 0 {5,B} {10,B} {15,S}', '10 C 0 {7,B} {9,B} {16,S}', '11 O 0 {6,S} {14,S}', '12 O 0 {7,S} {17,S}', '13 H 0 {5,S}', '14 H 0 {11,S}', '15 H 0 {9,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {12,S}']
249	['SPC(10609)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {5,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 1 {6,D} {1,S}', '6 C 0 {5,D} {7,S} {8,S}', '7 H 0 {6,S}', '8 H 0 {6,S}']
250	['SPC(315550)', '1 C 0 {2,S} {7,S} {3,S} {19,S}', '2 C 0 {1,S} {11,S} {4,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 C 0 {7,D} {10,S} {8,S}', '7 C 0 {6,D} {1,S} {9,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {11,D} {6,S} {12,S}', '11 C 0 {10,D} {2,S} {13,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 C 0 {15,S} {20,D} {16,S}', '15 C 0 {14,S} {24,S} {17,S} {18,S}', '16 H 0 {14,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 H 0 {15,S}', '19 C 0 {20,S} {23,S} {21,S}', '20 C 0 {19,S} {14,D} {22,S}', '21 H 0 {19,S}', '22 H 0 {20,S}', '23 C 0 {24,D} {19,S} {25,S}', '24 C 0 {23,D} {15,S} {26,S}', '25 H 0 {23,S}', '26 H 0 {24,S}']
251	['SPC(313396)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {6,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,S} {12,S} {8,S} {2,S}', '7 C 0 {6,S} {16,S} {9,S} {10,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 C 0 {12,D} {15,S} {13,S}', '12 C 0 {11,D} {6,S} {14,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 C 0 {16,D} {11,S} {17,S}', '16 C 0 {15,D} {7,S} {18,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 H 0 {16,S}']
252	['CHCHOH(51)', '1 C 1 {2,D} {4,S}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {5,S}', '3 O 0 {2,S} {6,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {3,S}']
253	['SPC(285985)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {8,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,T} {8,S}', '6 C 0 {5,T} {7,S}', '7 H 0 {6,S}', '8 C 0 {9,D} {5,S} {1,S}', '9 C 0 {8,D} {10,S} {11,S}', '10 H 0 {9,S}', '11 H 0 {9,S}']

Index #	Species Name
254	['SPC(315804)', '1 C 0 {2,S} {7,D} {3,S}', '2 C 0 {1,S} {11,S} {4,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 C 0 {7,S} {10,S} {8,S} {19,S}', '7 C 0 {6,S} {1,D} {9,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {11,D} {6,S} {12,S}', '11 C 0 {10,D} {2,S} {13,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 C 0 {15,S} {20,D} {16,S}', '15 C 0 {14,S} {24,S} {17,S} {18,S}', '16 H 0 {14,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 H 0 {15,S}', '19 C 0 {20,S} {23,S} {21,S} {6,S}', '20 C 0 {19,S} {14,D} {22,S}', '21 H 0 {19,S}', '22 H 0 {20,S}', '23 C 0 {24,D} {19,S} {25,S}', '24 C 0 {23,D} {15,S} {26,S}', '25 H 0 {23,S}', '26 H 0 {24,S}']
255	['SPC(314725)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {11,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,S} {12,D} {8,S}', '7 C 0 {6,S} {16,S} {9,S} {10,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 C 0 {12,S} {15,S} {13,S} {2,S}', '12 C 0 {11,S} {6,D} {14,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 C 0 {16,D} {11,S} {17,S}', '16 C 0 {15,D} {7,S} {18,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 H 0 {16,S}']
256	['SPC(315294)', '1 C 0 {2,B} {6,B} {3,S}', '2 C 0 {1,B} {10,B} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,B} {9,B} {7,S}', '6 C 0 {5,B} {1,B} {8,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 C 0 {10,B} {5,B} {11,S}', '10 C 0 {9,B} {2,B} {12,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 H 0 {10,S}']
257	['SPC(317332)', '1 C 1 {2,D} {8,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {9,D} {5,S}', '4 C 0 {3,S} {13,S} {6,S} {7,S}', '5 H 0 {3,S}', '6 H 0 {4,S}', '7 H 0 {4,S}', '8 C 0 {9,S} {12,S} {10,S} {1,S}', '9 C 0 {8,S} {3,D} {11,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 C 0 {13,D} {8,S} {14,S}', '13 C 0 {12,D} {4,S} {15,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {13,S}']
258	['SPC(183409)', '1 C 0 {3,D} {2,S} {7,S}', '2 O 1 {1,S}', '3 O 0 {1,D}', '4 C 0 {7,B} {8,B} {12,S}', '5 C 0 {6,B} {7,B} {10,S}', '6 C 0 {5,B} {9,B} {11,S}', '7 C 0 {4,B} {5,B} {1,S}', '8 C 0 {4,B} {9,B} {14,S}', '9 C 0 {6,B} {8,B} {15,S}', '10 O 0 {5,S} {13,S}', '11 O 0 {6,S} {16,S}', '12 H 0 {4,S}', '13 H 0 {10,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {9,S}', '16 H 0 {11,S}']
259	['SPC(32395)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {8,S}', '4 O 0 {3,S} {9,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {10,S} {13,S} {15,S} {4,S}', '10 C 0 {9,S} {11,S} {16,S} {19,S}', '11 C 0 {14,D} {10,S} {12,S}', '12 C 0 {11,S} {13,D} {17,S}', '13 C 0 {9,S} {12,D} {18,S}', '14 O 0 {11,D}', '15 H 0 {9,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {12,S}', '18 H 0 {13,S}', '19 H 0 {10,S}']
260	['OjCHO(23)', '1 O 1 {2,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {4,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {2,S}']
261	['SPC(26661)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {8,S}', '4 O 0 {3,S} {13,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {10,D} {13,S} {15,S}', '10 C 0 {9,D} {11,S} {16,S}', '11 C 0 {10,S} {12,D} {14,S}', '12 C 0 {11,D} {13,S} {17,S}', '13 C 0 {9,S} {12,S} {18,S} {4,S}', '14 O 0 {11,S} {19,S}', '15 H 0 {9,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {12,S}', '18 H 0 {13,S}', '19 H 0 {14,S}']
262	['SPC(18192)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {6,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,D} {11,S} {17,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {12,S}', '6 C 1 {1,S} {4,D}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {14,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {15,S}', '9 O 0 {2,S} {13,S}', '10 O 0 {3,S} {16,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {8,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {4,S}']
263	['SPC(26823)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {8,S}', '4 O 0 {3,S} {10,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {10,S} {13,D} {15,S}', '10 C 0 {9,S} {11,S} {16,S} {4,S}', '11 C 0 {10,S} {12,D} {14,S}', '12 C 0 {11,D} {13,S} {17,S}', '13 C 0 {9,D} {12,S} {18,S}', '14 O 0 {11,S} {19,S}', '15 H 0 {9,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {12,S}', '18 H 0 {13,S}', '19 H 0 {14,S}']
264	['SPC(251)', '1 C 0 {2,B} {3,B} {7,S}', '2 C 1 {1,B} {4,B}', '3 C 0 {1,B} {6,B} {8,S}', '4 C 0 {2,B} {5,B} {9,S}', '5 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {11,S}', '7 O 0 {1,S} {12,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}']

Index #	Species Name
265	['SPC(18186)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {6,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {12,S}', '6 C 0 {1,S} {4,T}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {13,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 1 {2,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
266	['Mofml(12)', '1 C 0 {4,S} {5,S} {6,S} {7,S}', '2 C 1 {3,D} {4,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 O 0 {1,S} {2,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}']
267	['SPC(26967)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {8,S}', '4 O 0 {3,S} {11,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {10,D} {13,S} {15,S}', '10 C 0 {9,D} {11,S} {16,S}', '11 C 0 {10,S} {12,S} {14,S} {4,S}', '12 C 0 {11,S} {13,D} {17,S}', '13 C 0 {9,S} {12,D} {18,S}', '14 O 0 {11,S} {19,S}', '15 H 0 {9,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 H 0 {12,S}', '18 H 0 {13,S}', '19 H 0 {14,S}']
268	['SPC(18183)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {6,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {11,S}', '5 C 1 {1,B} {2,B}', '6 C 0 {1,S} {4,T}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {13,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {12,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
269	['SPC(148733)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {12,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {13,S} {14,S} {17,S} {5,S}', '13 C 0 {12,S} {15,S} {16,S} {22,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {13,S}', '16 H 0 {13,S}', '17 C 0 {18,D} {19,S} {12,S}', '18 C 0 {17,D} {20,S} {21,S}', '19 H 0 {17,S}', '20 H 0 {18,S}', '21 H 0 {18,S}', '22 H 0 {13,S}']
270	['SPC(32207)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 O 0 {1,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 C 0 {6,S} {9,S} {11,S} {2,S}', '6 C 0 {5,S} {7,S} {12,S} {15,S}', '7 C 0 {10,D} {6,S} {8,S}', '8 C 0 {7,S} {9,D} {13,S}', '9 C 0 {5,S} {8,D} {14,S}', '10 O 0 {7,D}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {6,S}']
271	['SPC(18187)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {6,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {12,S}', '6 C 0 {1,S} {4,T}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {14,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {15,S}', '9 O 0 {2,S} {13,S}', '10 O 1 {3,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {8,S}']
272	['SPC(254)', '1 C 0 {2,B} {3,B} {7,S}', '2 C 0 {1,B} {4,B} {8,S}', '3 C 0 {1,B} {6,B} {9,S}', '4 C 0 {2,B} {5,B} {10,S}', '5 C 0 {4,B} {6,B} {11,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {12,S}', '7 O 1 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {3,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}']
273	['SPC(149020)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {8,S}', '4 O 0 {3,S} {9,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {10,S} {11,S} {14,S} {4,S}', '10 C 0 {9,S} {12,S} {13,S} {19,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {10,S}', '14 C 0 {15,D} {16,S} {9,S}', '15 C 0 {14,D} {17,S} {18,S}', '16 H 0 {14,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 H 0 {15,S}', '19 H 0 {10,S}']
274	['SPC(18182)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {6,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 1 {6,T}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {11,S}', '6 C 0 {1,S} {4,T}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {13,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {12,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
275	['SPC(18185)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {6,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {12,S}', '6 C 0 {1,S} {4,T}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {14,S}', '8 C 1 {3,B} {7,B}', '9 O 0 {2,S} {13,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {10,S}']
276	['SPC(149711)', '1 C 1 {2,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {7,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {8,S}', '4 O 0 {3,S} {15,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {14,D} {10,S} {11,S}', '10 C 0 {9,S} {12,S} {13,S} {19,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {10,S}', '14 C 0 {15,S} {16,S} {9,D}', '15 C 0 {14,S} {17,S} {18,S} {4,S}', '16 H 0 {14,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 H 0 {15,S}', '19 H 0 {10,S}']

Index #	Species Name
277	['SPC(18184)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {6,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {12,S}', '6 C 0 {1,S} {4,T}', '7 C 1 {1,B} {8,B}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {13,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
278	['SPC(252)', '1 C 0 {2,B} {3,B} {7,S}', '2 C 0 {1,B} {4,B} {8,S}', '3 C 0 {1,B} {6,B} {9,S}', '4 C 1 {2,B} {5,B}', '5 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {11,S}', '7 O 0 {1,S} {12,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {3,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}']
279	['SPC(13382)', '1 H 0 {11,S}', '2 C 0 {6,S} {13,S} {14,S} {15,S}', '3 C 0 {7,B} {9,B} {8,S}', '4 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '5 C 0 {4,B} {10,B} {12,S}', '6 C 0 {2,S} {8,D} {16,S}', '7 C 0 {3,B} {4,B} {17,S}', '8 C 0 {6,D} {3,S} {18,S}', '9 C 0 {3,B} {10,B} {19,S}', '10 C 0 {5,B} {9,B} {20,S}', '11 O 0 {4,S} {1,S}', '12 O 0 {5,S} {21,S}', '13 H 0 {2,S}', '14 H 0 {2,S}', '15 H 0 {2,S}', '16 H 0 {6,S}', '17 H 0 {7,S}', '18 H 0 {8,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {10,S}', '21 H 0 {12,S}']
280	['SPC(434665)', '1 C 0 {5,B} {6,S} {7,B}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,D} {5,S} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {4,S}', '6 C 1 {1,S} {4,D}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {13,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {12,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
281	['SPC(253)', '1 C 0 {2,B} {3,B} {7,S}', '2 C 0 {1,B} {4,B} {8,S}', '3 C 0 {1,B} {6,B} {9,S}', '4 C 0 {2,B} {5,B} {10,S}', '5 C 1 {4,B} {6,B}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {11,S}', '7 O 0 {1,S} {12,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {3,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}']
282	['SPC(148764)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 O 0 {1,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 C 0 {6,S} {7,S} {10,S} {2,S}', '6 C 0 {5,S} {8,S} {9,S} {15,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 C 0 {11,D} {12,S} {5,S}', '11 C 0 {10,D} {13,S} {14,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {11,S}', '15 H 0 {6,S}']
283	['SPC(27522)', '1 C 1 {2,D} {4,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {7,D} {9,S}', '4 C 0 {3,S} {5,S} {10,S} {1,S}', '5 C 0 {4,S} {6,D} {8,S}', '6 C 0 {5,D} {7,S} {11,S}', '7 C 0 {3,D} {6,S} {12,S}', '8 O 0 {5,S} {13,S}', '9 H 0 {3,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {8,S}']
284	['SPC(463486)', '1 C 0 {5,B} {6,S} {7,B}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,D} {7,S} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {12,S}', '6 C 1 {1,S} {4,D}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {4,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {13,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
285	['SPC(422307)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {6,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,B} {7,B} {11,S}', '6 C 0 {5,B} {8,B} {1,S}', '7 C 0 {5,B} {10,B} {12,S}', '8 C 0 {6,B} {9,B} {13,S}', '9 C 0 {8,B} {10,B} {14,S}', '10 C 0 {7,B} {9,B} {15,S}', '11 O 0 {5,S} {16,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {11,S}']
286	['SPC(149523)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 O 0 {1,S} {11,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 C 0 {10,D} {6,S} {7,S}', '6 C 0 {5,S} {8,S} {9,S} {15,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 C 0 {11,S} {12,S} {5,D}', '11 C 0 {10,S} {13,S} {14,S} {2,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {11,S}', '15 H 0 {6,S}']
287	['SPC(27521)', '1 C 1 {2,D} {7,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,D} {7,S} {9,S}', '4 C 0 {3,D} {5,S} {10,S}', '5 C 0 {4,S} {6,D} {8,S}', '6 C 0 {5,D} {7,S} {11,S}', '7 C 0 {3,S} {6,S} {12,S} {1,S}', '8 O 0 {5,S} {13,S}', '9 H 0 {3,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {8,S}']
288	['SPC(434664)', '1 C 0 {5,B} {6,S} {7,B}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 1 {6,D} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {6,S}', '6 C 0 {1,S} {5,S} {4,D}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {13,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {12,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']

Index #	Species Name
289	['SPC(463524)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {8,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,B} {7,B} {11,S}', '6 C 0 {5,B} {8,B} {12,S}', '7 C 0 {5,B} {10,B} {13,S}', '8 C 0 {6,B} {9,B} {1,S}', '9 C 0 {8,B} {10,B} {14,S}', '10 C 0 {7,B} {9,B} {15,S}', '11 O 0 {5,S} {16,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {11,S}']
290	['SPC(2244)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {8,S} {1,S}', '7 C 0 {6,D} {9,S} {10,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {7,S}']
291	['SPC(26290)', '1 H 0 {3,S}', '2 C 0 {3,S} {6,D} {8,S}', '3 C 0 {2,S} {4,S} {9,S} {1,S}', '4 C 0 {3,S} {5,D} {7,S}', '5 C 0 {4,D} {6,S} {10,S}', '6 C 0 {2,D} {5,S} {11,S}', '7 O 0 {4,S} {12,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {3,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}']
292	['SPC(490472)', '1 C 1 {5,B} {7,B}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {6,S}', '6 C 0 {4,T} {5,S}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {13,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {12,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
293	['SPC(422287)', '1 C 0 {3,D} {2,S} {5,S}', '2 O 1 {1,S}', '3 O 0 {1,D}', '4 C 0 {5,B} {6,B} {10,S}', '5 C 0 {4,B} {7,B} {1,S}', '6 C 0 {4,B} {9,B} {11,S}', '7 C 0 {5,B} {8,B} {12,S}', '8 C 0 {7,B} {9,B} {13,S}', '9 C 0 {6,B} {8,B} {14,S}', '10 O 0 {4,S} {15,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}']
294	['SPC(26978)', '1 C 0 {2,D} {5,S} {7,S}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {8,S}', '3 C 0 {6,D} {2,S} {4,S}', '4 C 0 {3,S} {5,D} {9,S}', '5 C 0 {1,S} {4,D} {10,S}', '6 O 0 {3,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}']
295	['SPC(31962)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {9,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,S} {10,D} {12,S}', '7 C 0 {6,S} {8,S} {13,S} {16,S}', '8 C 0 {11,D} {7,S} {9,S}', '9 C 0 {8,S} {10,S} {14,S} {2,S}', '10 C 0 {6,D} {9,S} {15,S}', '11 O 0 {8,D}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {7,S}']
296	['SPC(501221)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {13,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {6,S}', '6 C 0 {4,T} {5,S}', '7 C 1 {1,B} {8,B}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {12,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {4,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
297	['SPC(463504)', '1 C 0 {3,D} {2,S} {7,S}', '2 O 1 {1,S}', '3 O 0 {1,D}', '4 C 0 {5,B} {6,B} {10,S}', '5 C 0 {4,B} {7,B} {11,S}', '6 C 0 {4,B} {9,B} {12,S}', '7 C 0 {5,B} {8,B} {1,S}', '8 C 0 {7,B} {9,B} {13,S}', '9 C 0 {6,B} {8,B} {14,S}', '10 O 0 {4,S} {15,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}']
298	['SPC(504103)', '1 C 0 {2,S} {5,D} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {8,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {6,S}', '4 C 1 {3,S} {5,S} {9,S}', '5 C 0 {1,D} {4,S} {10,S}', '6 O 0 {3,S} {11,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 C 0 {16,S} {23,S} {24,S} {6,S}', '12 C 0 {21,S} {25,S} {26,S} {27,S}', '13 C 0 {17,B} {19,B} {18,S}', '14 C 0 {15,B} {17,B} {21,S}', '15 C 0 {14,B} {20,B} {22,S}', '16 C 0 {11,S} {18,D} {28,S}', '17 C 0 {13,B} {14,B} {29,S}', '18 C 0 {16,D} {13,S} {30,S}', '19 C 0 {13,B} {20,B} {31,S}', '20 C 0 {15,B} {19,B} {32,S}', '21 O 0 {12,S} {14,S}', '22 O 0 {15,S} {33,S}', '23 H 0 {11,S}', '24 H 0 {11,S}', '25 H 0 {12,S}', '26 H 0 {12,S}', '27 H 0 {12,S}', '28 H 0 {16,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {18,S}', '31 H 0 {19,S}', '32 H 0 {20,S}', '33 H 0 {22,S}']
299	['SPC(517054)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {13,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {6,S}', '6 C 0 {4,T} {5,S}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {14,S}', '8 C 1 {3,B} {7,B}', '9 O 0 {2,S} {12,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {4,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {10,S}']
300	['SPC(468428)', '1 C 0 {3,D} {2,S} {8,S}', '2 O 1 {1,S}', '3 O 0 {1,D}', '4 C 0 {5,B} {6,B} {10,S}', '5 C 0 {4,B} {7,B} {11,S}', '6 C 0 {4,B} {9,B} {12,S}', '7 C 0 {5,B} {8,B} {13,S}', '8 C 0 {7,B} {9,B} {1,S}', '9 C 0 {6,B} {8,B} {14,S}', '10 O 0 {4,S} {15,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}']

Index #	Species Name
301	['SPC(504107)', '1 C 0 {2,S} {5,D} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {8,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {6,S}', '4 C 1 {3,S} {5,S} {9,S}', '5 C 0 {1,D} {4,S} {10,S}', '6 O 0 {3,S} {18,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 C 0 {16,D} {23,S} {24,S}', '12 C 0 {21,S} {25,S} {26,S} {27,S}', '13 C 0 {17,B} {19,B} {18,S}', '14 C 0 {15,B} {17,B} {21,S}', '15 C 0 {14,B} {20,B} {22,S}', '16 C 0 {11,D} {18,S} {28,S}', '17 C 0 {13,B} {14,B} {29,S}', '18 C 0 {13,S} {16,S} {30,S} {6,S}', '19 C 0 {13,B} {20,B} {31,S}', '20 C 0 {15,B} {19,B} {32,S}', '21 O 0 {12,S} {14,S}', '22 O 0 {15,S} {33,S}', '23 H 0 {11,S}', '24 H 0 {11,S}', '25 H 0 {12,S}', '26 H 0 {12,S}', '27 H 0 {12,S}', '28 H 0 {16,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {18,S}', '31 H 0 {19,S}', '32 H 0 {20,S}', '33 H 0 {22,S}']
302	['SPC(161944)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {7,S} {14,S} {15,S} {1,S}', '4 C 0 {8,B} {10,B} {9,S}', '5 C 0 {6,B} {8,B} {12,S}', '6 C 0 {5,B} {11,B} {13,S}', '7 C 0 {3,S} {9,T}', '8 C 0 {4,B} {5,B} {16,S}', '9 C 0 {4,S} {7,T}', '10 C 0 {4,B} {11,B} {18,S}', '11 C 0 {6,B} {10,B} {19,S}', '12 O 0 {5,S} {17,S}', '13 O 0 {6,S} {20,S}', '14 H 0 {3,S}', '15 H 0 {3,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {12,S}', '18 H 0 {10,S}', '19 H 0 {11,S}', '20 H 0 {13,S}']
303	['SPC(529513)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {13,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {6,S}', '6 C 0 {4,T} {5,S}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {14,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {15,S}', '9 O 0 {2,S} {12,S}', '10 O 1 {3,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {4,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {8,S}']
304	['SPC(504671)', '1 C 0 {2,S} {5,D} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {8,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {6,S}', '4 C 1 {3,S} {5,S} {9,S}', '5 C 0 {1,D} {4,S} {10,S}', '6 O 0 {3,S} {11,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 C 0 {12,S} {17,S} {13,S} {6,S}', '12 C 0 {11,S} {21,S} {14,S} {15,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 H 0 {12,S}', '16 C 0 {17,D} {20,S} {18,S}', '17 C 0 {16,D} {11,S} {19,S}', '18 H 0 {16,S}', '19 H 0 {17,S}', '20 C 0 {21,D} {16,S} {22,S}', '21 C 0 {20,D} {12,S} {23,S}', '22 H 0 {20,S}', '23 H 0 {21,S}']
305	['SPC(87498)', '1 C 0 {2,S} {6,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {13,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {11,S} {1,S} {18,S} {19,S}', '7 C 0 {16,S} {20,S} {21,S} {22,S}', '8 C 0 {12,B} {14,B} {13,S}', '9 C 0 {10,B} {12,B} {16,S}', '10 C 0 {9,B} {15,B} {17,S}', '11 C 1 {6,S} {13,S} {23,S}', '12 C 0 {8,B} {9,B} {24,S}', '13 C 0 {11,S} {2,S} {8,S} {25,S}', '14 C 0 {8,B} {15,B} {26,S}', '15 C 0 {10,B} {14,B} {27,S}', '16 O 0 {7,S} {9,S}', '17 O 0 {10,S} {28,S}', '18 H 0 {6,S}', '19 H 0 {6,S}', '20 H 0 {7,S}', '21 H 0 {7,S}', '22 H 0 {7,S}', '23 H 0 {11,S}', '24 H 0 {12,S}', '25 H 0 {13,S}', '26 H 0 {14,S}', '27 H 0 {15,S}', '28 H 0 {17,S}']
306	['SPC(161740)', '1 C 0 {5,D} {12,S} {13,S}', '2 C 0 {6,B} {8,B} {7,S}', '3 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '4 C 0 {3,B} {9,B} {11,S}', '5 C 0 {1,D} {7,D}', '6 C 0 {2,B} {3,B} {14,S}', '7 C 0 {5,D} {2,S} {25,S}', '8 C 0 {2,B} {9,B} {16,S}', '9 C 0 {4,B} {8,B} {17,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 O 0 {4,S} {18,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {1,S}', '14 H 0 {6,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {11,S}', '19 C 0 {23,D} {30,S} {31,S}', '20 C 0 {24,B} {26,B} {25,S}', '21 C 0 {22,B} {24,B} {28,S}', '22 C 0 {21,B} {27,B} {29,S}', '23 C 0 {19,D} {25,D}', '24 C 0 {20,B} {21,B} {32,S}', '25 C 0 {23,D} {20,S} {7,S}', '26 C 0 {20,B} {27,B} {34,S}', '27 C 0 {22,B} {26,B} {35,S}', '28 O 0 {21,S} {33,S}', '29 O 0 {22,S} {36,S}', '30 H 0 {19,S}', '31 H 0 {19,S}', '32 H 0 {24,S}', '33 H 0 {28,S}', '34 H 0 {26,S}', '35 H 0 {27,S}', '36 H 0 {29,S}']
307	['SPC(285907)', '1 C 0 {3,D} {2,S} {7,S}', '2 O 1 {1,S}', '3 O 0 {1,D}', '4 C 0 {5,T} {7,S}', '5 C 0 {4,T} {6,S}', '6 H 0 {5,S}', '7 C 0 {8,D} {4,S} {1,S}', '8 C 0 {7,D} {9,S} {10,S}', '9 H 0 {8,S}', '10 H 0 {8,S}']
308	['SPC(162383)', '1 C 0 {4,B} {5,B} {14,S}', '2 C 0 {3,B} {4,B} {7,S}', '3 C 0 {2,B} {6,B} {8,S}', '4 C 0 {1,B} {2,B} {9,S}', '5 C 0 {1,B} {6,B} {11,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {12,S}', '7 O 0 {2,S} {10,S}', '8 O 0 {3,S} {13,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 C 0 {15,D} {16,S} {1,S}', '15 C 0 {14,D} {17,S} {18,S}', '16 H 0 {14,S}', '17 H 0 {15,S}', '18 H 0 {15,S}']

Index #	Species Name
309	['SPC(501222)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {12,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {6,S}', '6 C 0 {4,T} {5,S}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {13,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 1 {2,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {4,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
310	['SPC(27530)', '1 H 0 {5,S}', '2 C 0 {3,D} {6,S} {8,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {9,S}', '4 C 0 {7,D} {3,S} {5,S}', '5 C 0 {4,S} {6,S} {10,S} {1,S}', '6 C 0 {2,S} {5,S} {11,S} {12,S}', '7 O 0 {4,D}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {3,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {6,S}']
311	['SPC(468042)', '1 C 0 {5,B} {6,S} {7,B}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {5,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {4,S}', '6 C 0 {1,S} {4,T}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {12,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {13,S}', '9 O 0 {2,S} {11,S}', '10 O 0 {3,S} {14,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {10,S}']
312	['SPC(16624)', '1 C 1 {2,D} {3,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,S} {6,S} {7,S} {1,S}', '4 C 0 {3,S} {5,T}', '5 C 0 {4,T} {8,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 H 0 {3,S}', '8 H 0 {5,S}']
313	['SPC(501220)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 1 {6,T}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {6,S}', '6 C 0 {4,T} {5,S}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {13,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {12,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
314	['SPC(204)', '1 C 0 {8,S} {10,S} {11,S} {12,S}', '2 C 1 {5,B} {6,B}', '3 C 0 {4,B} {5,B} {8,S}', '4 C 0 {3,B} {7,B} {9,S}', '5 C 0 {2,B} {3,B} {13,S}', '6 C 0 {2,B} {7,B} {14,S}', '7 C 0 {4,B} {6,B} {15,S}', '8 O 0 {1,S} {3,S}', '9 O 0 {4,S} {16,S}', '10 H 0 {1,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {5,S}', '14 H 0 {6,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {9,S}']
315	['SPC(16625)', '1 C 1 {2,D} {5,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,D} {6,S} {7,S}', '4 C 0 {3,D} {5,D}', '5 C 0 {4,D} {8,S} {1,S}', '6 H 0 {3,S}', '7 H 0 {3,S}', '8 H 0 {5,S}']
316	['SPC(566867)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,D} {9,S} {12,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {6,S}', '6 C 1 {4,D} {5,S}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {13,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {4,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {4,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
317	['SPC(575896)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {4,S} {7,S} {10,S}', '3 O 0 {1,S} {8,S}', '4 O 1 {2,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {16,S} {18,S} {19,S} {20,S}', '10 C 0 {13,B} {14,B} {2,S}', '11 C 0 {12,B} {13,B} {16,S}', '12 C 0 {11,B} {15,B} {17,S}', '13 C 0 {10,B} {11,B} {21,S}', '14 C 0 {10,B} {15,B} {22,S}', '15 C 0 {12,B} {14,B} {23,S}', '16 O 0 {9,S} {11,S}', '17 O 0 {12,S} {24,S}', '18 H 0 {9,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {9,S}', '21 H 0 {13,S}', '22 H 0 {14,S}', '23 H 0 {15,S}', '24 H 0 {17,S}']
318	['SPC(575914)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {7,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {13,S} {15,S} {16,S} {17,S}', '7 C 0 {10,B} {11,B} {2,S}', '8 C 0 {9,B} {10,B} {13,S}', '9 C 0 {8,B} {12,B} {14,S}', '10 C 0 {7,B} {8,B} {18,S}', '11 C 0 {7,B} {12,B} {19,S}', '12 C 0 {9,B} {11,B} {20,S}', '13 O 0 {6,S} {8,S}', '14 O 0 {9,S} {21,S}', '15 H 0 {6,S}', '16 H 0 {6,S}', '17 H 0 {6,S}', '18 H 0 {10,S}', '19 H 0 {11,S}', '20 H 0 {12,S}', '21 H 0 {14,S}']
319	['SPC(422288)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 O 0 {1,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 C 0 {6,B} {7,B} {11,S}', '6 C 0 {5,B} {8,B} {2,S}', '7 C 0 {5,B} {10,B} {12,S}', '8 C 0 {6,B} {9,B} {13,S}', '9 C 0 {8,B} {10,B} {14,S}', '10 C 0 {7,B} {9,B} {15,S}', '11 O 0 {5,S} {16,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {11,S}']
320	['SPC(576682)', '1 C 0 {8,S} {10,S} {11,S} {12,S}', '2 C 0 {5,B} {6,B} {17,S}', '3 C 0 {4,B} {5,B} {8,S}', '4 C 0 {3,B} {7,B} {9,S}', '5 C 0 {2,B} {3,B} {13,S}', '6 C 0 {2,B} {7,B} {14,S}', '7 C 0 {4,B} {6,B} {15,S}', '8 O 0 {1,S} {3,S}', '9 O 0 {4,S} {16,S}', '10 H 0 {1,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {5,S}', '14 H 0 {6,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {9,S}', '17 C 0 {18,D} {19,S} {2,S}', '18 O 0 {17,D}', '19 H 0 {17,S}']

Index #	Species Name
321	['SPC(160421)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {6,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,D} {11,S} {23,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {12,S}', '6 C 1 {1,S} {4,D}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {14,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {15,S}', '9 O 0 {2,S} {13,S}', '10 O 0 {3,S} {16,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {8,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 C 0 {21,D} {28,S} {29,S}', '18 C 0 {22,B} {24,B} {23,S}', '19 C 0 {20,B} {22,B} {26,S}', '20 C 0 {19,B} {25,B} {27,S}', '21 C 0 {17,D} {23,D}', '22 C 0 {18,B} {19,B} {30,S}', '23 C 0 {18,S} {21,D} {4,S}', '24 C 0 {18,B} {25,B} {32,S}', '25 C 0 {20,B} {24,B} {33,S}', '26 O 0 {19,S} {31,S}', '27 O 0 {20,S} {34,S}', '28 H 0 {17,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {22,S}', '31 H 0 {26,S}', '32 H 0 {24,S}', '33 H 0 {25,S}', '34 H 0 {27,S}']
322	['SPC(5978)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 C 0 {2,D} {7,S} {8,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {3,S}', '8 C 0 {9,S} {10,S} {11,S} {3,S}', '9 H 0 {8,S}', '10 H 0 {8,S}', '11 H 0 {8,S}']
323	['SPC(287019)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {8,S}', '2 C 1 {1,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 0 {8,D} {10,D}', '8 C 0 {7,D} {9,S} {1,S}', '9 H 0 {8,S}', '10 C 0 {11,D} {7,D}', '11 C 0 {10,D} {12,S} {13,S}', '12 H 0 {11,S}', '13 H 0 {11,S}']
324	['SPC(468408)', '1 C 0 {5,B} {6,S} {7,B}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 1 {6,D} {5,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {4,S}', '6 C 0 {1,S} {4,D} {13,S}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {11,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {12,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {7,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {6,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
325	['SPC(361009)', '1 C 0 {2,T} {7,S}', '2 C 0 {1,T} {3,S}', '3 H 0 {2,S}', '4 C 0 {7,B} {8,B} {12,S}', '5 C 0 {6,B} {7,B} {10,S}', '6 C 0 {5,B} {9,B} {11,S}', '7 C 0 {4,B} {5,B} {1,S}', '8 C 0 {4,B} {9,B} {14,S}', '9 C 0 {6,B} {8,B} {15,S}', '10 O 0 {5,S} {13,S}', '11 O 0 {6,S} {16,S}', '12 H 0 {4,S}', '13 H 0 {10,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {9,S}', '16 H 0 {11,S}']
326	['SPC(588100)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {8,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {9,S} {10,S}', '7 C 0 {6,D} {8,S} {12,S}', '8 O 0 {7,S} {2,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 C 0 {18,S} {20,S} {21,S} {22,S}', '12 C 0 {15,B} {16,B} {7,S}', '13 C 0 {14,B} {15,B} {18,S}', '14 C 0 {13,B} {17,B} {19,S}', '15 C 0 {12,B} {13,B} {23,S}', '16 C 0 {12,B} {17,B} {24,S}', '17 C 0 {14,B} {16,B} {25,S}', '18 O 0 {11,S} {13,S}', '19 O 0 {14,S} {26,S}', '20 H 0 {11,S}', '21 H 0 {11,S}', '22 H 0 {11,S}', '23 H 0 {15,S}', '24 H 0 {16,S}', '25 H 0 {17,S}', '26 H 0 {19,S}']
327	['SPC(160422)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {6,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 1 {6,D} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {12,S}', '6 C 0 {1,S} {4,D} {23,S}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {14,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {15,S}', '9 O 0 {2,S} {13,S}', '10 O 0 {3,S} {16,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 H 0 {7,S}', '15 H 0 {8,S}', '16 H 0 {10,S}', '17 C 0 {21,D} {28,S} {29,S}', '18 C 0 {22,B} {24,B} {23,S}', '19 C 0 {20,B} {22,B} {26,S}', '20 C 0 {19,B} {25,B} {27,S}', '21 C 0 {17,D} {23,D}', '22 C 0 {18,B} {19,B} {30,S}', '23 C 0 {18,S} {21,D} {6,S}', '24 C 0 {18,B} {25,B} {32,S}', '25 C 0 {20,B} {24,B} {33,S}', '26 O 0 {19,S} {31,S}', '27 O 0 {20,S} {34,S}', '28 H 0 {17,S}', '29 H 0 {17,S}', '30 H 0 {22,S}', '31 H 0 {26,S}', '32 H 0 {24,S}', '33 H 0 {25,S}', '34 H 0 {27,S}']
328	['SPC(46760)', '1 C 0 {2,D} {5,S} {7,S}', '2 C 0 {1,D} {8,S} {10,S}', '3 C 1 {4,S} {6,D}', '4 C 0 {3,S} {9,S} {5,D}', '5 C 1 {1,S} {4,D}', '6 O 0 {3,D}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {2,S}']
329	['SPC(566866)', '1 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 1 {6,D} {12,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {6,S}', '6 C 0 {5,S} {9,S} {4,D}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {13,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {6,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {4,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
330	['SPC(468448)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {9,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,B} {7,B} {11,S}', '6 C 0 {5,B} {8,B} {12,S}', '7 C 0 {5,B} {10,B} {13,S}', '8 C 0 {6,B} {9,B} {14,S}', '9 C 0 {8,B} {10,B} {1,S}', '10 C 0 {7,B} {9,B} {15,S}', '11 O 0 {5,S} {16,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}', '16 H 0 {11,S}']

Index #	Species Name
331	['SPC(423264)', '1 C 1 {2,D} {4,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,B} {5,B} {9,S}', '4 C 0 {3,B} {6,B} {1,S}', '5 C 0 {3,B} {8,B} {10,S}', '6 C 0 {4,B} {7,B} {11,S}', '7 C 0 {6,B} {8,B} {12,S}', '8 C 0 {5,B} {7,B} {13,S}', '9 O 0 {3,S} {14,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {9,S}']
332	['SPC(588099)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {8,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,D} {9,S} {10,S}', '7 C 0 {6,D} {8,S} {12,S}', '8 O 0 {7,S} {1,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 H 0 {6,S}', '11 C 0 {18,S} {20,S} {21,S} {22,S}', '12 C 0 {15,B} {16,B} {7,S}', '13 C 0 {14,B} {15,B} {18,S}', '14 C 0 {13,B} {17,B} {19,S}', '15 C 0 {12,B} {13,B} {23,S}', '16 C 0 {12,B} {17,B} {24,S}', '17 C 0 {14,B} {16,B} {25,S}', '18 O 0 {11,S} {13,S}', '19 O 0 {14,S} {26,S}', '20 H 0 {11,S}', '21 H 0 {11,S}', '22 H 0 {11,S}', '23 H 0 {15,S}', '24 H 0 {16,S}', '25 H 0 {17,S}', '26 H 0 {19,S}']
333	['SPC(291619)', '1 C 0 {2,D} {5,S} {3,S}', '2 C 0 {1,D} {5,S} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {1,S} {2,S} {6,S} {8,S}', '6 C 0 {5,S} {7,T}', '7 C 0 {6,T} {9,S}', '8 H 0 {5,S}', '9 H 0 {7,S}']
334	['SPC(6557)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {6,S}', '2 C 0 {1,S} {3,T}', '3 C 0 {2,T} {5,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {3,S}', '6 C 0 {7,S} {8,S} {9,S} {1,S}', '7 C 0 {6,S} {10,S} {11,S} {12,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {6,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {7,S}', '12 H 0 {7,S}']
335	['SPC(59760)', '1 C 0 {6,D} {2,S} {3,S}', '2 C 0 {1,S} {4,S} {5,S} {11,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 C 0 {7,S} {8,S} {1,D}', '7 C 1 {6,S} {9,S} {10,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 C 0 {12,S} {13,S} {14,S} {2,S}', '12 H 0 {11,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 H 0 {11,S}']
336	['SPC(463485)', '1 C 0 {5,B} {6,S} {7,B}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 1 {6,D} {11,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {12,S}', '6 C 0 {1,S} {7,S} {4,D}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {6,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {14,S}', '9 O 0 {2,S} {13,S}', '10 O 0 {3,S} {15,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 H 0 {5,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 H 0 {8,S}', '15 H 0 {10,S}']
337	['SPC(464532)', '1 C 1 {2,D} {6,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,B} {5,B} {9,S}', '4 C 0 {3,B} {6,B} {10,S}', '5 C 0 {3,B} {8,B} {11,S}', '6 C 0 {4,B} {7,B} {1,S}', '7 C 0 {6,B} {8,B} {12,S}', '8 C 0 {5,B} {7,B} {13,S}', '9 O 0 {3,S} {14,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {9,S}']
338	['SPC(586554)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {12,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {13,S} {15,S} {16,S} {5,S}', '13 C 0 {14,D} {12,S} {18,S}', '14 O 0 {13,D}', '15 H 0 {12,S}', '16 H 0 {12,S}', '17 C 0 {24,S} {26,S} {27,S} {28,S}', '18 C 0 {21,B} {22,B} {13,S}', '19 C 0 {20,B} {21,B} {24,S}', '20 C 0 {19,B} {23,B} {25,S}', '21 C 0 {18,B} {19,B} {29,S}', '22 C 0 {18,B} {23,B} {30,S}', '23 C 0 {20,B} {22,B} {31,S}', '24 O 0 {17,S} {19,S}', '25 O 0 {20,S} {32,S}', '26 H 0 {17,S}', '27 H 0 {17,S}', '28 H 0 {17,S}', '29 H 0 {21,S}', '30 H 0 {22,S}', '31 H 0 {23,S}', '32 H 0 {25,S}']
339	['SPC(479037)', '1 C 0 {5,B} {6,S} {7,B}', '2 C 0 {3,B} {5,B} {9,S}', '3 C 0 {2,B} {8,B} {10,S}', '4 C 0 {6,T} {7,S}', '5 C 0 {1,B} {2,B} {11,S}', '6 C 0 {1,S} {4,T}', '7 C 0 {1,B} {8,B} {4,S}', '8 C 0 {3,B} {7,B} {13,S}', '9 O 0 {2,S} {12,S}', '10 O 0 {3,S} {14,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {10,S}']
340	['SPC(287037)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {6,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,D} {8,D}', '6 C 0 {5,D} {7,S} {1,S}', '7 H 0 {6,S}', '8 C 0 {9,D} {5,D}', '9 C 0 {8,D} {10,S} {11,S}', '10 H 0 {9,S}', '11 H 0 {9,S}']
341	['SPC(95168)', '1 C 1 {2,D} {4,S}', '2 C 0 {1,D} {3,S} {9,S}', '3 H 0 {2,S}', '4 C 0 {5,D} {6,S} {1,S}', '5 C 0 {4,D} {7,S} {8,S}', '6 H 0 {4,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 H 0 {5,S}', '9 C 0 {10,S} {11,S} {12,S} {2,S}', '10 H 0 {9,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 H 0 {9,S}']

Index #	Species Name
342	['SPC(464596)', '1 H 0 {11,S}', '2 C 0 {6,S} {13,S} {14,S} {15,S}', '3 C 0 {7,B} {9,B} {8,S}', '4 C 0 {5,B} {7,B} {11,S}', '5 C 0 {4,B} {10,B} {12,S}', '6 C 0 {2,S} {8,S} {16,S} {22,S}', '7 C 0 {3,B} {4,B} {17,S}', '8 C 1 {3,S} {6,S} {18,S}', '9 C 0 {3,B} {10,B} {19,S}', '10 C 0 {5,B} {9,B} {20,S}', '11 O 0 {4,S} {1,S}', '12 O 0 {5,S} {21,S}', '13 H 0 {2,S}', '14 H 0 {2,S}', '15 H 0 {2,S}', '16 H 0 {6,S}', '17 H 0 {7,S}', '18 H 0 {8,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {10,S}', '21 H 0 {12,S}', '22 H 0 {6,S}']
343	['C6H5J(250)', '1 C 1 {2,B} {3,B}', '2 C 0 {1,B} {4,B} {7,S}', '3 C 0 {1,B} {6,B} {8,S}', '4 C 0 {2,B} {5,B} {9,S}', '5 C 0 {4,B} {6,B} {10,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {11,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {6,S}']
344	['SPC(469454)', '1 C 1 {2,D} {7,S}', '2 O 0 {1,D}', '3 C 0 {4,B} {5,B} {9,S}', '4 C 0 {3,B} {6,B} {10,S}', '5 C 0 {3,B} {8,B} {11,S}', '6 C 0 {4,B} {7,B} {12,S}', '7 C 0 {6,B} {8,B} {1,S}', '8 C 0 {5,B} {7,B} {13,S}', '9 O 0 {3,S} {14,S}', '10 H 0 {4,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {9,S}']
345	['SPC(575913)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {7,S}', '2 C 1 {1,S} {3,D}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {13,S} {15,S} {16,S} {17,S}', '7 C 0 {10,B} {11,B} {1,S}', '8 C 0 {9,B} {10,B} {13,S}', '9 C 0 {8,B} {12,B} {14,S}', '10 C 0 {7,B} {8,B} {18,S}', '11 C 0 {7,B} {12,B} {19,S}', '12 C 0 {9,B} {11,B} {20,S}', '13 O 0 {6,S} {8,S}', '14 O 0 {9,S} {21,S}', '15 H 0 {6,S}', '16 H 0 {6,S}', '17 H 0 {6,S}', '18 H 0 {10,S}', '19 H 0 {11,S}', '20 H 0 {12,S}', '21 H 0 {14,S}']
346	['SPC(576696)', '1 C 0 {8,S} {10,S} {11,S} {12,S}', '2 C 0 {5,B} {6,B} {18,S}', '3 C 0 {4,B} {5,B} {8,S}', '4 C 0 {3,B} {7,B} {9,S}', '5 C 0 {2,B} {3,B} {13,S}', '6 C 0 {2,B} {7,B} {14,S}', '7 C 0 {4,B} {6,B} {15,S}', '8 O 0 {1,S} {3,S}', '9 O 0 {4,S} {16,S}', '10 H 0 {1,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {5,S}', '14 H 0 {6,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {9,S}', '17 C 0 {18,S} {20,S} {21,S} {22,S}', '18 C 0 {19,D} {17,S} {2,S}', '19 O 0 {18,D}', '20 H 0 {17,S}', '21 H 0 {17,S}', '22 H 0 {17,S}']
347	['SPC(586550)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {4,S} {7,S}', '3 O 0 {1,S} {8,S}', '4 O 0 {2,S} {9,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {10,S} {12,S} {13,S} {4,S}', '10 C 0 {11,D} {9,S} {15,S}', '11 O 0 {10,D}', '12 H 0 {9,S}', '13 H 0 {9,S}', '14 C 0 {21,S} {23,S} {24,S} {25,S}', '15 C 0 {18,B} {19,B} {10,S}', '16 C 0 {17,B} {18,B} {21,S}', '17 C 0 {16,B} {20,B} {22,S}', '18 C 0 {15,B} {16,B} {26,S}', '19 C 0 {15,B} {20,B} {27,S}', '20 C 0 {17,B} {19,B} {28,S}', '21 O 0 {14,S} {16,S}', '22 O 0 {17,S} {29,S}', '23 H 0 {14,S}', '24 H 0 {14,S}', '25 H 0 {14,S}', '26 H 0 {18,S}', '27 H 0 {19,S}', '28 H 0 {20,S}', '29 H 0 {22,S}']
348	['SPC(184053)', '1 C 0 {4,B} {5,B} {9,S}', '2 C 0 {3,B} {4,B} {7,S}', '3 C 0 {2,B} {6,B} {8,S}', '4 C 0 {1,B} {2,B} {14,S}', '5 C 0 {1,B} {6,B} {11,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {12,S}', '7 O 0 {2,S} {10,S}', '8 O 0 {3,S} {13,S}', '9 H 0 {1,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 O 1 {4,S}']
349	['SPC(6514)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {4,S} {7,S}', '2 C 1 {1,S} {5,S} {6,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {2,S}', '6 H 0 {2,S}', '7 C 1 {8,S} {10,S} {1,S}', '8 C 0 {7,S} {9,T}', '9 C 0 {8,T} {11,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {9,S}']
350	['SPC(2241)', '1 C 0 {3,D} {2,S} {4,S}', '2 O 1 {1,S}', '3 O 0 {1,D}', '4 C 0 {5,D} {6,S} {1,S}', '5 C 0 {4,D} {7,S} {8,S}', '6 H 0 {4,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 H 0 {5,S}']
351	['SPC(655283)', '1 C 0 {2,D} {3,S} {5,S}', '2 C 1 {1,D} {4,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {2,S}', '5 C 0 {6,B} {7,B} {1,S}', '6 C 0 {5,B} {8,B} {11,S}', '7 C 0 {5,B} {10,B} {12,S}', '8 C 0 {6,B} {9,B} {13,S}', '9 C 0 {8,B} {10,B} {14,S}', '10 C 0 {7,B} {9,B} {15,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 H 0 {10,S}']
352	['SPC(655263)', '1 C 0 {3,D} {2,S} {4,S}', '2 O 1 {1,S}', '3 O 0 {1,D}', '4 C 0 {5,B} {6,B} {1,S}', '5 C 0 {4,B} {7,B} {10,S}', '6 C 0 {4,B} {9,B} {11,S}', '7 C 0 {5,B} {8,B} {12,S}', '8 C 0 {7,B} {9,B} {13,S}', '9 C 0 {6,B} {8,B} {14,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 H 0 {6,S}', '12 H 0 {7,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 H 0 {9,S}']

Index #	Species Name
353	['SPC(660506)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {5,S}', '2 H 0 {1,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 C 0 {11,S} {13,S} {14,S} {15,S}', '5 C 0 {8,B} {9,B} {1,S}', '6 C 0 {7,B} {8,B} {11,S}', '7 C 0 {6,B} {10,B} {12,S}', '8 C 0 {5,B} {6,B} {16,S}', '9 C 0 {5,B} {10,B} {17,S}', '10 C 0 {7,B} {9,B} {18,S}', '11 O 0 {4,S} {6,S}', '12 O 0 {7,S} {19,S}', '13 H 0 {4,S}', '14 H 0 {4,S}', '15 H 0 {4,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {10,S}', '19 H 0 {12,S}']
354	['SPC(681188)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {5,S} {6,S}', '2 C 1 {1,S} {4,S} {7,S}', '3 O 0 {1,S} {8,S}', '4 O 0 {2,S} {9,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {2,S}', '8 H 0 {3,S}', '9 C 0 {10,S} {11,S} {13,S} {4,S}', '10 H 0 {9,S}', '11 H 0 {9,S}', '12 C 0 {19,S} {21,S} {22,S} {23,S}', '13 C 0 {16,B} {17,B} {9,S}', '14 C 0 {15,B} {16,B} {19,S}', '15 C 0 {14,B} {18,B} {20,S}', '16 C 0 {13,B} {14,B} {24,S}', '17 C 0 {13,B} {18,B} {25,S}', '18 C 0 {15,B} {17,B} {26,S}', '19 O 0 {12,S} {14,S}', '20 O 0 {15,S} {27,S}', '21 H 0 {12,S}', '22 H 0 {12,S}', '23 H 0 {12,S}', '24 H 0 {16,S}', '25 H 0 {17,S}', '26 H 0 {18,S}', '27 H 0 {20,S}']
355	['SPC(666627)', '1 C 1 {4,B} {5,B}', '2 C 0 {3,B} {4,B} {7,S}', '3 C 0 {2,B} {6,B} {8,S}', '4 C 0 {1,B} {2,B} {14,S}', '5 C 0 {1,B} {6,B} {11,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {12,S}', '7 O 0 {2,S} {10,S}', '8 O 0 {3,S} {13,S}', '9 H 0 {14,S}', '10 H 0 {7,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 O 0 {4,S} {9,S}']
356	['SPC(682399)', '1 C 0 {2,S} {3,S} {5,S} {20,S}', '2 H 0 {1,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 C 0 {11,S} {13,S} {14,S} {15,S}', '5 C 0 {8,B} {9,B} {1,S}', '6 C 0 {7,B} {8,B} {11,S}', '7 C 0 {6,B} {10,B} {12,S}', '8 C 0 {5,B} {6,B} {16,S}', '9 C 0 {5,B} {10,B} {17,S}', '10 C 0 {7,B} {9,B} {18,S}', '11 O 0 {4,S} {6,S}', '12 O 0 {7,S} {19,S}', '13 H 0 {4,S}', '14 H 0 {4,S}', '15 H 0 {4,S}', '16 H 0 {8,S}', '17 H 0 {9,S}', '18 H 0 {10,S}', '19 H 0 {12,S}', '20 C 0 {21,S} {22,S} {24,S} {1,S}', '21 H 0 {20,S}', '22 H 0 {20,S}', '23 C 0 {30,S} {32,S} {33,S} {34,S}', '24 C 0 {27,B} {28,B} {20,S}', '25 C 0 {26,B} {27,B} {30,S}', '26 C 0 {25,B} {29,B} {31,S}', '27 C 0 {24,B} {25,B} {35,S}', '28 C 0 {24,B} {29,B} {36,S}', '29 C 0 {26,B} {28,B} {37,S}', '30 O 0 {23,S} {25,S}', '31 O 0 {26,S} {38,S}', '32 H 0 {23,S}', '33 H 0 {23,S}', '34 H 0 {23,S}', '35 H 0 {27,S}', '36 H 0 {28,S}', '37 H 0 {29,S}', '38 H 0 {31,S}']
357	['SPC(681929)', '1 C 0 {2,S} {5,D} {7,S}', '2 C 0 {1,S} {3,D} {8,S}', '3 C 0 {2,D} {4,S} {6,S}', '4 C 1 {3,S} {5,S} {9,S}', '5 C 0 {1,D} {4,S} {10,S}', '6 O 0 {3,S} {11,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {4,S}', '10 H 0 {5,S}', '11 C 0 {12,S} {13,S} {15,S} {6,S}', '12 H 0 {11,S}', '13 H 0 {11,S}', '14 C 0 {21,S} {23,S} {24,S} {25,S}', '15 C 0 {18,B} {19,B} {11,S}', '16 C 0 {17,B} {18,B} {21,S}', '17 C 0 {16,B} {20,B} {22,S}', '18 C 0 {15,B} {16,B} {26,S}', '19 C 0 {15,B} {20,B} {27,S}', '20 C 0 {17,B} {19,B} {28,S}', '21 O 0 {14,S} {16,S}', '22 O 0 {17,S} {29,S}', '23 H 0 {14,S}', '24 H 0 {14,S}', '25 H 0 {14,S}', '26 H 0 {18,S}', '27 H 0 {19,S}', '28 H 0 {20,S}', '29 H 0 {22,S}']
358	['SPC(681192)', '1 C 0 {3,S} {4,S} {6,S} {7,S}', '2 C 0 {3,S} {8,S} {9,S} {10,S}', '3 C 1 {1,S} {2,S} {5,S}', '4 O 0 {1,S} {11,S}', '5 O 0 {3,S} {12,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 H 0 {1,S}', '8 H 0 {2,S}', '9 H 0 {2,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {4,S}', '12 C 0 {13,S} {14,S} {16,S} {5,S}', '13 H 0 {12,S}', '14 H 0 {12,S}', '15 C 0 {22,S} {24,S} {25,S} {26,S}', '16 C 0 {19,B} {20,B} {12,S}', '17 C 0 {18,B} {19,B} {22,S}', '18 C 0 {17,B} {21,B} {23,S}', '19 C 0 {16,B} {17,B} {27,S}', '20 C 0 {16,B} {21,B} {28,S}', '21 C 0 {18,B} {20,B} {29,S}', '22 O 0 {15,S} {17,S}', '23 O 0 {18,S} {30,S}', '24 H 0 {15,S}', '25 H 0 {15,S}', '26 H 0 {15,S}', '27 H 0 {19,S}', '28 H 0 {20,S}', '29 H 0 {21,S}', '30 H 0 {23,S}']
359	['SPC(666628)', '1 C 0 {4,B} {5,B} {9,S}', '2 C 0 {3,B} {4,B} {7,S}', '3 C 0 {2,B} {6,B} {8,S}', '4 C 0 {1,B} {2,B} {14,S}', '5 C 0 {1,B} {6,B} {11,S}', '6 C 0 {3,B} {5,B} {12,S}', '7 O 1 {2,S}', '8 O 0 {3,S} {13,S}', '9 H 0 {1,S}', '10 H 0 {14,S}', '11 H 0 {5,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {8,S}', '14 O 0 {4,S} {10,S}']

Index #	Species Name
360	['SPC(665369)', '1 H 0 {15,S}', '2 C 0 {5,B} {6,B} {10,S}', '3 C 0 {4,B} {5,B} {8,S}', '4 C 0 {3,B} {7,B} {9,S}', '5 C 0 {2,B} {3,B} {15,S}', '6 C 0 {2,B} {7,B} {12,S}', '7 C 0 {4,B} {6,B} {13,S}', '8 O 0 {3,S} {11,S}', '9 O 0 {4,S} {14,S}', '10 H 0 {2,S}', '11 H 0 {8,S}', '12 H 0 {6,S}', '13 H 0 {7,S}', '14 H 0 {9,S}', '15 O 0 {5,S} {1,S}']
361	['SPC(681204)', '1 C 1 {2,S} {3,S} {4,S}', '2 O 0 {1,S} {5,S}', '3 H 0 {1,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 C 0 {6,S} {7,S} {9,S} {2,S}', '6 H 0 {5,S}', '7 H 0 {5,S}', '8 C 0 {15,S} {17,S} {18,S} {19,S}', '9 C 0 {12,B} {13,B} {5,S}', '10 C 0 {11,B} {12,B} {15,S}', '11 C 0 {10,B} {14,B} {16,S}', '12 C 0 {9,B} {10,B} {20,S}', '13 C 0 {9,B} {14,B} {21,S}', '14 C 0 {11,B} {13,B} {22,S}', '15 O 0 {8,S} {10,S}', '16 O 0 {11,S} {23,S}', '17 H 0 {8,S}', '18 H 0 {8,S}', '19 H 0 {8,S}', '20 H 0 {12,S}', '21 H 0 {13,S}', '22 H 0 {14,S}', '23 H 0 {16,S}']
362	['SPC(681285)', '1 C 0 {2,S} {4,S} {5,S} {6,S}', '2 C 0 {7,D} {1,S} {3,S}', '3 O 0 {2,S} {10,S}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 H 0 {1,S}', '7 C 0 {8,S} {9,S} {2,D}', '8 O 1 {7,S}', '9 H 0 {7,S}', '10 C 0 {11,S} {12,S} {14,S} {3,S}', '11 H 0 {10,S}', '12 H 0 {10,S}', '13 C 0 {20,S} {22,S} {23,S} {24,S}', '14 C 0 {17,B} {18,B} {10,S}', '15 C 0 {16,B} {17,B} {20,S}', '16 C 0 {15,B} {19,B} {21,S}', '17 C 0 {14,B} {15,B} {25,S}', '18 C 0 {14,B} {19,B} {26,S}', '19 C 0 {16,B} {18,B} {27,S}', '20 O 0 {13,S} {15,S}', '21 O 0 {16,S} {28,S}', '22 H 0 {13,S}', '23 H 0 {13,S}', '24 H 0 {13,S}', '25 H 0 {17,S}', '26 H 0 {18,S}', '27 H 0 {19,S}', '28 H 0 {21,S}']
363	['SPC(681207)', '1 C 1 {2,S} {4,S} {5,S}', '2 C 0 {3,D} {1,S} {6,S}', '3 O 0 {2,D}', '4 H 0 {1,S}', '5 H 0 {1,S}', '6 C 0 {7,S} {8,S} {10,S} {2,S}', '7 H 0 {6,S}', '8 H 0 {6,S}', '9 C 0 {16,S} {18,S} {19,S} {20,S}', '10 C 0 {13,B} {14,B} {6,S}', '11 C 0 {12,B} {13,B} {16,S}', '12 C 0 {11,B} {15,B} {17,S}', '13 C 0 {10,B} {11,B} {21,S}', '14 C 0 {10,B} {15,B} {22,S}', '15 C 0 {12,B} {14,B} {23,S}', '16 O 0 {9,S} {11,S}', '17 O 0 {12,S} {24,S}', '18 H 0 {9,S}', '19 H 0 {9,S}', '20 H 0 {9,S}', '21 H 0 {13,S}', '22 H 0 {14,S}', '23 H 0 {15,S}', '24 H 0 {17,S}']
364	['SPC(576686)', '1 C 0 {8,S} {10,S} {11,S} {12,S}', '2 C 0 {5,B} {6,B} {17,S}', '3 C 0 {4,B} {5,B} {8,S}', '4 C 0 {3,B} {7,B} {9,S}', '5 C 0 {2,B} {3,B} {13,S}', '6 C 0 {2,B} {7,B} {14,S}', '7 C 0 {4,B} {6,B} {15,S}', '8 O 0 {1,S} {3,S}', '9 O 0 {4,S} {16,S}', '10 H 0 {1,S}', '11 H 0 {1,S}', '12 H 0 {1,S}', '13 H 0 {5,S}', '14 H 0 {6,S}', '15 H 0 {7,S}', '16 H 0 {9,S}', '17 C 0 {18,S} {19,S} {20,S} {2,S}', '18 H 0 {17,S}', '19 H 0 {17,S}', '20 H 0 {17,S}']