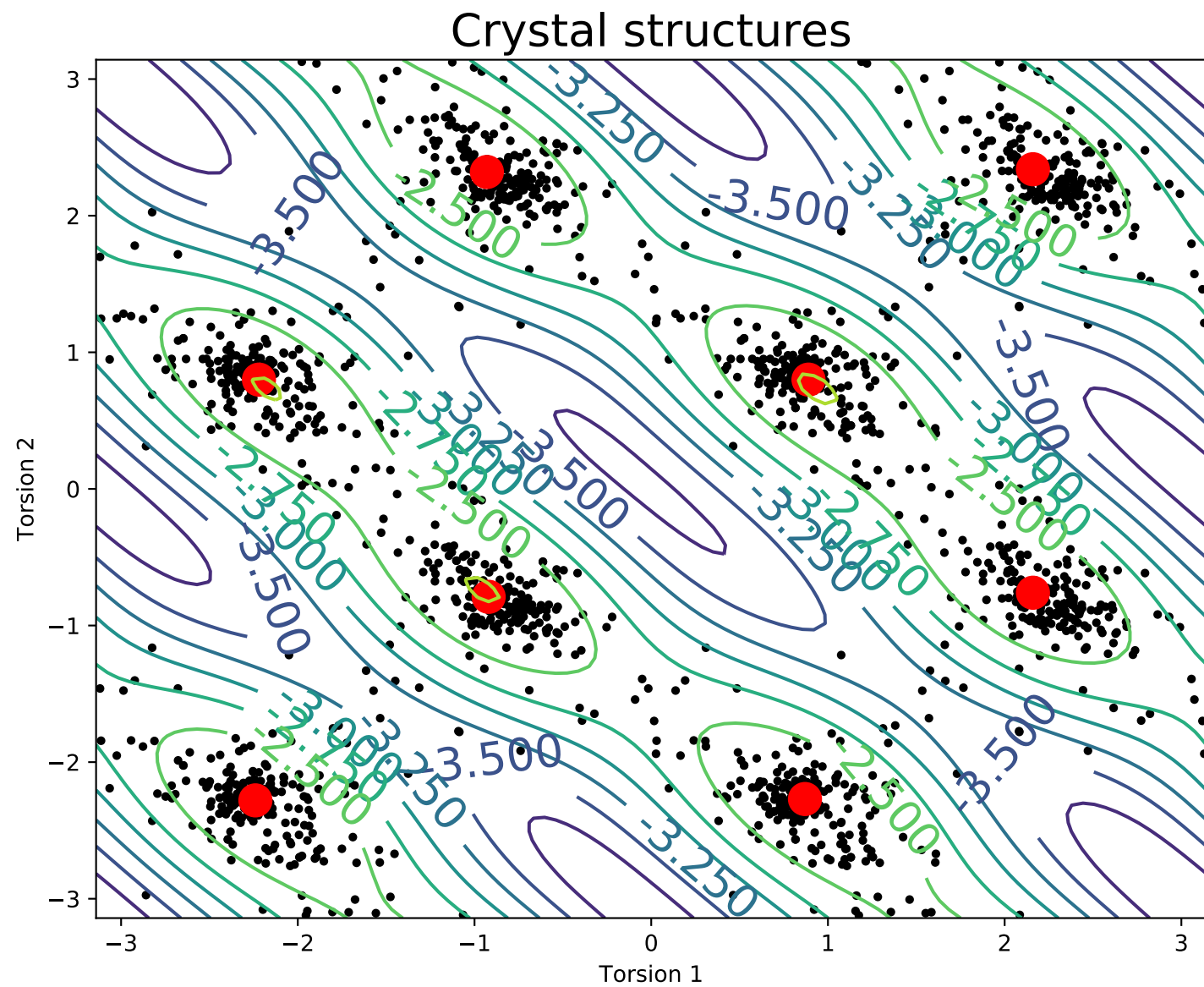
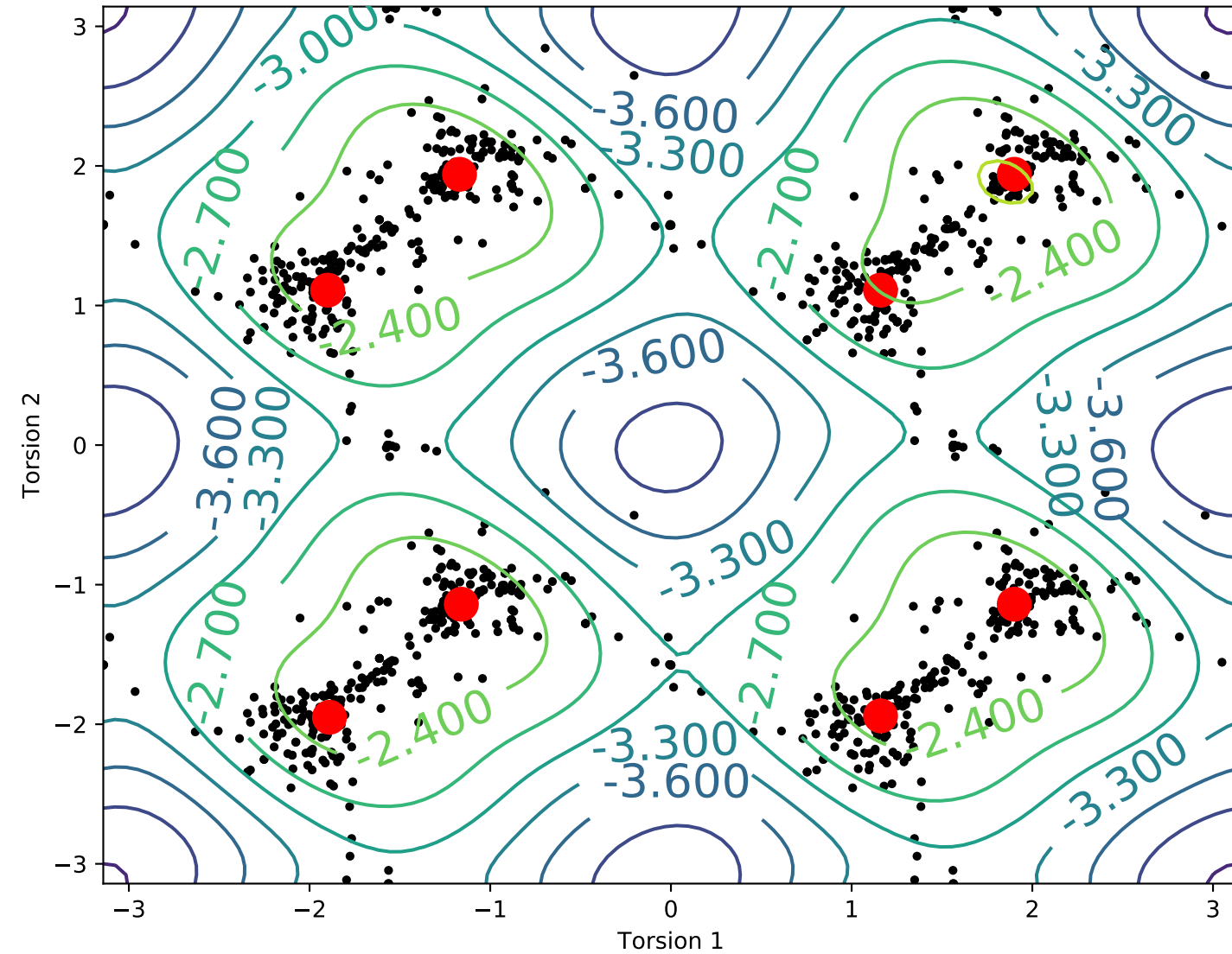


[a][a]!@;-[CX3](=[CX3])!@-[a][a]

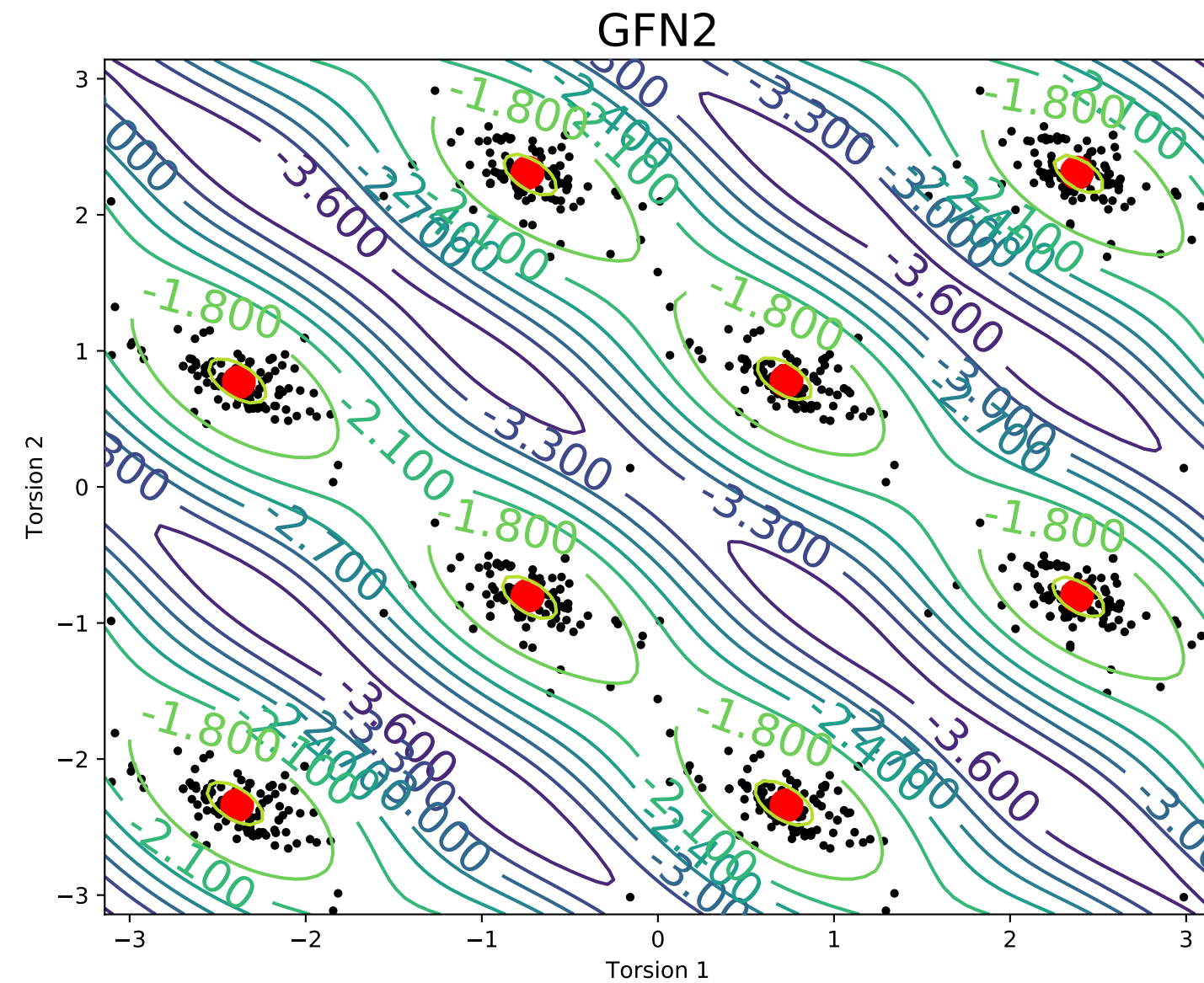
MMFF94



Cluster 1: ω : 0.125 μ : -2.24 ν : -2.28 κ_1 : 1.5 κ_2 : 1.5 κ_3 : -1.32
Cluster 2: ω : 0.125 μ : -2.22 ν : 0.8 κ_1 : 1.5 κ_2 : 1.5 κ_3 : -1.32
Cluster 3: ω : 0.125 μ : -0.92 ν : -0.79 κ_1 : 1.5 κ_2 : 1.49 κ_3 : -1.32
Cluster 4: ω : 0.125 μ : -0.93 ν : 2.32 κ_1 : 1.5 κ_2 : 1.49 κ_3 : -1.31
Cluster 5: ω : 0.125 μ : 0.87 ν : -2.27 κ_1 : 1.5 κ_2 : 1.5 κ_3 : -1.31
Cluster 6: ω : 0.125 μ : 0.89 ν : 0.8 κ_1 : 1.5 κ_2 : 1.5 κ_3 : -1.31
Cluster 7: ω : 0.125 μ : 2.16 ν : -0.76 κ_1 : 1.5 κ_2 : 1.49 κ_3 : -1.31
Cluster 8: ω : 0.125 μ : 2.16 ν : 2.34 κ_1 : 1.5 κ_2 : 1.49 κ_3 : -1.32



Cluster 1: ω : 0.115 μ : -1.89 ν : -1.95 κ_1 : 1.52 κ_2 : 1.52 κ_3 : -1.27
Cluster 2: ω : 0.115 μ : -1.9 ν : 1.11 κ_1 : 1.53 κ_2 : 1.52 κ_3 : -1.27
Cluster 3: ω : 0.135 μ : -1.16 ν : -1.14 κ_1 : 1.51 κ_2 : 1.51 κ_3 : -1.29
Cluster 4: ω : 0.14 μ : -1.17 ν : 1.94 κ_1 : 1.52 κ_2 : 1.51 κ_3 : -1.3
Cluster 5: ω : 0.11 μ : 1.16 ν : -1.94 κ_1 : 1.52 κ_2 : 1.53 κ_3 : -1.26
Cluster 6: ω : 0.1 μ : 1.16 ν : 1.11 κ_1 : 1.53 κ_2 : 1.51 κ_3 : -1.26
Cluster 7: ω : 0.14 μ : 1.9 ν : -1.14 κ_1 : 1.52 κ_2 : 1.51 κ_3 : -1.3
Cluster 8: ω : 0.15 μ : 1.9 ν : 1.94 κ_1 : 1.51 κ_2 : 1.5 κ_3 : -1.3



Cluster 1: ω : 0.125 μ : -2.39 ν : -2.34 κ_1 : 1.88 κ_2 : 1.89 κ_3 : -1.81
Cluster 2: ω : 0.125 μ : -2.38 ν : 0.77 κ_1 : 1.88 κ_2 : 1.89 κ_3 : -1.81
Cluster 3: ω : 0.125 μ : -0.74 ν : -0.8 κ_1 : 1.88 κ_2 : 1.88 κ_3 : -1.81
Cluster 4: ω : 0.125 μ : -0.74 ν : 2.31 κ_1 : 1.88 κ_2 : 1.88 κ_3 : -1.81
Cluster 5: ω : 0.125 μ : 0.73 ν : -2.34 κ_1 : 1.88 κ_2 : 1.89 κ_3 : -1.81
Cluster 6: ω : 0.125 μ : 0.73 ν : 0.78 κ_1 : 1.88 κ_2 : 1.88 κ_3 : -1.81
Cluster 7: ω : 0.125 μ : 2.38 ν : -0.8 κ_1 : 1.88 κ_2 : 1.88 κ_3 : -1.81
Cluster 8: ω : 0.125 μ : 2.38 ν : 2.31 κ_1 : 1.88 κ_2 : 1.88 κ_3 : -1.81