

 $openff\_unconstrained - 2 \textit{d}p \textbf{0} nff\_unconstraine \textbf{d}p \textbf{2} \textbf{2} \textit{f} \textbf{1} \underline{\textbf{1}} \underline{\textbf{1}} \underline{\textbf{1}} \underline{\textbf{1}} \underline{\textbf{1}} \underline{\textbf{2}} \underline{\textbf{1}} - \underline{\textbf{3}} \underline{\textbf{2}} \underline{\textbf{1}} \underline{\textbf{3}} \underline{\textbf{2}} \underline{\textbf{3}} \underline{\textbf$